



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN MATEMATICA

Tesi di Laurea Magistrale in Matematica

di

Roberta Petrucci

**Un modello matematico di
combustione dei gas di scarico
in marmitte catalitiche**
Sintesi

Relatore

Prof. Renato Spigler

Candidata

Roberta Petrucci

ANNO ACCADEMICO 2006-2007

Keywords: Sistemi iperbolici, leggi di conservazione, leggi di bilancio, metodo dei volumi finiti,

Mathematics Subject Classification: 35L65, 35L60, 35L50, 76M10, 76M12, 76N99

Sintesi

Gli ecosistemi urbani rivestono grande importanza nell'ambito delle scienze ambientali, in quanto è proprio in tali aree, dove si concentrano le varie attività lavorative e la stragrande maggioranza della popolazione, che hanno origine i più attuali fenomeni di inquinamento. In particolare, a destare la massima preoccupazione è il traffico automobilistico perché rappresenta una sorgente di contaminazione di tipo mobile e, soprattutto, perché le autovetture sono ormai tra i beni di più larga diffusione.

Nell'ultimo decennio l'introduzione di marmitte catalitiche ha permesso la riduzione dei tre principali inquinanti legati al traffico: il monossido di carbonio (CO), gli ossidi di azoto (NO_x) e gli idrocarburi incombusti (HC). Tuttavia, l'inevitabile progressivo deterioramento dei catalizzatori porta al rilascio di particelle contenenti alcuni platinoidi (Pt, Pd, Rh), elementi impiegati nel dispositivo catalitico per promuovere le reazioni di trasformazione dei gas nocivi in forme meno dannose, che finiscono poi per essere riversati nell'ambiente.

Lo scopo principale di questo lavoro è quello di modellare i processi chimici che si presentano all'interno del tubo di scarico di un'automobile, proponendo, come primo obiettivo, di formulare e descrivere il modello matematico di questi fenomeni. Tale modello è centrato intorno ai tre principi fisici di conservazione della massa, quantità di moto ed energia, e deve tener conto dei vari effetti fisici quali l'attrito dei gas con le pareti interne del condotto, gli effetti d'attrito della struttura del favo nei convertitori, e lo scambio di calore con le pareti. Per semplificare il problema vogliamo studiare un modello della miscela dei gas in un sistema unidimensionale che fornisce pressione, densità, velocità e frazione totale incombusta dei gas di scarico lungo le varie sezioni del tubo. Nel regime considerato non si formano "shock", in quanto il modello include l'attrito con le pareti del tubo.

Come secondo obiettivo ci proponiamo di studiare l'approssimazione numerica della soluzione di alcuni sistemi di leggi di conservazione. Abbiamo considerato il sistema di equazioni di Eulero in un condotto di sezione variabile, introducendo i concetti fondamentali del metodo dei volumi finiti che deriva dalla forma integrale delle leggi di conservazione. Non giungendo a risultati soddisfacenti abbiamo utilizzato "l'upwinding del termine sorgente", come in [14].

Come terzo obiettivo infine ci proponiamo di convalidare le simulazioni numeriche, grazie anche ad esperimenti condotti da Magneti Marelli, usando il concetto matematico di calibrazione mediante un metodo dei minimi quadrati.

Nel dettaglio la tesi è organizzata nel modo seguente. Nel Capitolo 1 viene descritta la struttura del motore, cercando di capire cosa avviene all'interno di un tubo di scarico, considerando motori che usano una combustione interna a quattro tempi per convertire la benzina in fasi di movimento (aspirazione, compressione, combustione, scarico). In seguito vengono descritti vari componenti del sistema di scarico quali silenziatori (per ridurre il rumore del motore) e convertitori catalitici (per ridurre le emissioni che contribuiscono all'inquinamento dell'aria). Successivamente descriveremo i vari tipi di convertitore catalitico (solo riducente, solo ossidante, ossidante e riducente) e il principio di funzionamento di una "sonda lambda" sia al diossido di zirconio che al diossido di titanio. Per concludere descriviamo il silenziatore e le conseguenze che comporta l'inquinamento urbano sull'organismo.

Nel Capitolo 2 formuliamo matematicamente come i gas di scarico attraversano il tubo, pensato come dispositivo unidimensionale. Il modello matematico contiene tutte le caratteristiche di una miscela di gas: densità, velocità, pressione, temperatura, e frazione totale di gas incombusti. Per comprendere meglio il modello, per prima cosa dobbiamo considerare le ben note equazioni della gasdinamica, cioè le equazioni di Eulero in un condotto a sezione variabile. In un secondo momento ci occuperemo dei vari effetti fisici relativi al nostro problema, quali gli effetti d'attrito e gli scambi di calore. Poiché nei convertitori catalitici avvengono delle reazioni chimiche, è necessario aggiungere un'equazione per la combustione.

La formulazione del modello della miscela dei gas nei tubi di scarico si incentra intorno a tre principi fisici *di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia*. L'equazione di conservazione della massa può essere scritta esprimendo che la variazione della massa che si trova all'interno di un volume limitato arbitrario Ω , sia uguale al flusso della massa attraverso il bordo $\partial\Omega$, di Ω ,

$$\int_{\Omega} \partial_t \rho \, d\mathbf{x} = - \int_{+\partial\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS,$$

dove \mathbf{n} è il vettore unitario normale a $\partial\Omega$, orientato verso l'esterno di Ω . Applicando il teorema della divergenza si deduce che

$$\int_{\Omega} \left(\partial_t \rho + \nabla(\rho \mathbf{u}) \right) d\mathbf{x} = 0,$$

e per l'arbitrarietà di Ω ,

$$\partial_t \rho + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0.$$

La quantità di moto (o momento) del sistema risente dell'azione delle forze esterne che agiscono nel fluido e può essere formulata come

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p) = 0.$$

La legge di conservazione del momento è una legge fisica per cui la quantità di moto di un sistema isolato rimane costante nel tempo. Per sistema isolato si intende un sistema che non interagisce in alcun modo con l'ambiente circostante. La condizione di essere isolato si esprime nel fatto che sia nulla la risultante delle forze esterne.

In assenza di forze dissipative, dove il lavoro dipende dal cammino seguito e viene perduto sotto forma di energia non riutilizzabile, la somma dell'energia potenziale e dell'energia cinetica di un dato corpo è costante,

$$\partial_t(\rho e) + \nabla(\rho \mathbf{u} e) + p \nabla(\mathbf{u}) = 0,$$

dove

$$e = \varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2}.$$

Il sistema sopra descritto è composto da *tre* equazioni nelle *quattro* incognite p , ρ , u , e . In quanto tale, in generale non ammette soluzione unica. Nel caso di problemi riguardanti il moto dei gas nei condotti di un motore a combustione interna, si può supporre che valga l'equazione di stato dei gas perfetti,

$$\frac{p}{\rho} = RT$$

Il problema si può semplificare considerando un modello unidimensionale. Considerando tutte le variabili vettoriali aventi la sola componente assiale, poniamo $\mathbf{x} = (x, y, z)$ (tutte le variabili hanno solo componente lungo x) e $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3) = (u, 0, 0)$ essendo u_2 e u_3 sono nulle.

Sia Ω un tronco di cono di altezza h , che per h sufficientemente piccolo si può approssimare con un cilindro, così che il flusso avrà un contributo nullo dalla superficie laterale. Definiamo $\Omega = \{(s, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x < s < x + h, (y, z) \in A(s)\}$, dove $A(s)$ è la sezione nel punto di ascissa x . Il raggio della sezione, $R(s)$, varia con s . Vista la simmetria cilindrica del sistema intorno all'asse x , si può eliminare la dipendenza delle variabili trasversali y e z con un'opportuna integrazione. Pertanto tutte le incognite risulteranno dipendere dalla sola x , oltre che dal tempo. Inoltre, la velocità sarà essa stessa ridotta alla sola componente assiale, ottenendo così

$$\partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0.$$

Un procedimento analogo per le altre leggi di conservazione consente di scrivere le equazioni di Eulero in una dimensione spaziale, in un condotto

avente sezione trasversale variabile come

$$\begin{cases} \partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0 & (\text{per la massa}) \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_x(A\rho u^2 + p) = 0 & (\text{per il momento}) \\ \partial_t(A\rho e) + \partial_x(Au(\rho e + p)) = 0 & (\text{per l'energia}) \end{cases} \quad (1)$$

Questo sistema è costituito da *tre* equazioni nelle *quattro* incognite ρ , u , p , e . Un'ulteriore relazione che collega tutte e quattro queste variabili è data dall'equazione di stato dei gas perfetti, $p = (\gamma - 1)\varepsilon\rho$.

Il modello deve poi tener conto di vari effetti fisici quali l'attrito dovuto alle pareti interne del condotto, quello dovuto alla struttura del favo, nonché lo scambio di calore con le pareti. Quando un gas o un liquido scorre attraverso una conduttura, tra il fluido e la parete si sviluppano delle sollecitazioni di taglio. Per "sollecitazione di taglio" s'intende uno stato di tensione (una forza attrattiva esercitata su un'unità di superficie; il suo opposto concettuale e fisico è una forza repulsiva come la pressione esercitata su un'unità di superficie) in cui un materiale tende a cambiare senza particolari variazioni di volume. Questa sollecitazione di taglio è dovuto all'attrito e la sua grandezza dipende dalle proprietà del fluido che scorre attraverso il tubo, dalla velocità con la quale si sta muovendo, dalla rugosità interna della parete, dalla lunghezza e dal diametro del tubo. Il termine di attrito dovuto agli effetti di rugosità è proporzionale alla densità del flusso ρ e al quadrato della velocità u^2 , al perimetro del condotto w , secondo il coefficiente d'attrito C_f ,

$$-C_f w \rho \frac{u^2}{2}.$$

Nella marmitta catalitica i gas nocivi passano attraverso un blocco di ceramica avente una struttura a nido d'ape. Quando i gas di scarico passano attraverso il convertitore catalitico, metalli come rodio e platino favoriscono le reazioni chimiche che trasformano gli agenti inquinanti, come monossido di carbonio ossidi di azoto e idrocarburi, in composti innocui, come anidride carbonica, azoto e acqua. Il blocco di ceramica comporta anche un fenomeno di resistenza, oltre al fenomeno di combustione, e pressione e velocità della miscela diminuiscono quando entrano nel catalizzatore. Abbiamo aggiunto al modello gli effetti d'attrito della struttura del favo introducendo il termine $C_f \rho u$ nella seconda equazione (1). In generale lo scambio termico può avvenire secondo tre modalità: conduzione, convezione e irraggiamento. Prendiamo in considerazione tre temperature che si influenzano le une con le altre: la temperatura ambiente \bar{T} , la temperatura della parete T_{par} , e la temperatura del gas T . La temperatura ambiente è costante, quella della parete dipende linearmente dalla temperatura ambiente e da quella dei gas di scarico. Sapendo che i gas di scarico sono più caldi, la temperatura del gas può aumentare la temperatura della parete. Lo scambio di calore dalla superficie solida al fluido può essere descritto mediante la legge di raffreddamento di Newton,

che stabilisce che lo scambio di calore tra una superficie solida alla temperatura della parete T_{par} ed un fluido di temperatura T , è $-wh(T - T_{par})$. Il coefficiente di scambio di calore h dipende dalle proprietà e dalla velocità del fluido.

Nella marmitta catalitica avviene poi una reazione chimica, per cui si deve estendere il sistema di equazioni relative ad un flusso comprimibile includendo delle equazioni di reazione chimica. A tale proposito usiamo le equazioni reattive di Eulero e i seguenti presupposti fondamentali. Ci sono soltanto due stati chimici, quello del gas bruciato e quello del gas incombusto. Il gas incombusto è convertito in gas bruciato da una reazione chimica esotermica irreversibile descritta dalla funzione $K(T)$, che rappresenta il tasso di reazione $K(T)$ che dipende dalla temperatura T tramite la legge di Arrhenius

$$K(T) = K_0 \exp(-E^+/T),$$

dove K_0 è un tasso di reazione costante e E^+ è l'energia d'attivazione. Il tasso di reazione è trascurabile per valori bassi della temperatura mentre cresce esponenzialmente se la temperatura è sufficientemente elevata. A volte si assume un modello discreto di temperatura cinetica d'accensione della forma,

$$K(T) = K_0 \text{ se } T > T_0, \quad K(T) = 0 \text{ altrimenti}$$

dove T_0 è la temperatura d'accensione. In un calcolo molto preciso, il modello discreto della temperatura cinetica d'accensione è un' approssimazione ragionevole della legge di Arrhenius.

Supponiamo che i gas bruciati e incombusti siano gas ideali, con lo stesso rapporto dei calori specifici γ e temperatura $T = p/\rho R$, dove R è la costante universale dei gas. Ignorando gli effetti di diffusione e usando tutte queste assunzioni, le equazioni del modello diventano [12]

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0 & \text{(conservazione di massa)} \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) = 0 & \text{(conservazione del momento)} \\ \partial_t(\rho e) + \partial_x(u(\rho e + p)) = 0 & \text{(conservazione dell'energia)} \\ \partial_t(\rho z) + \partial_x(u\rho z) = -\rho z K(T) & \text{(equazione di continuità} \\ & \text{per il gas incombusto)} \end{array} \right.$$

dove $z = z(\mathbf{x}, t)$ è la frazione totale di gas incombusto (gas bruciato: $1 - z(\mathbf{x}, t)$) e q_0 è l'unità di massa liberata dalla reazione. L'energia totale per unità di massa è calcolata dall'equazione di stato $e = \varepsilon + \frac{u^2}{2} + q_0 z$. Le altre variabili sono, come al solito, la densità totale del gas bruciato e di quello incombusto, ρ , la velocità u , la pressione p , e l'energia totale e [12].

Il modello che include i processi chimici in un tubo di scarico consiste allora di *cinque* equazioni nelle *cinque* incognite ρ , u , p , e , z

$$\begin{cases} \partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0 \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_x(A\rho u^2 + p) = -C_f w \rho \frac{u^2}{2} - C\rho u \\ \partial_t(A\rho e) + \partial_x(Au(\rho e + p)) = -wh(T - T_{par}) \\ \partial_t(A\rho z) + \partial_x(Au\rho z) = -\rho z K, \end{cases} \quad (2)$$

a cui si deve aggiungere la relazione termodinamica $p = (\gamma - 1)\varepsilon\rho$, dove $e = \varepsilon + \frac{u^2}{2} + q_0 z$ (si ricordi che $p = R\rho T$, $\varepsilon = C_p T$, e $R = C_p(\gamma - 1)$).

Consideriamo degli schemi numerici per i sistemi delle leggi di conservazione. Cominciamo con l'introdurre i concetti fondamentali del *metodo dei volumi finiti* [16], che deriva dalla forma integrale delle leggi di conservazione. Le equazioni (2) in una dimensione spaziale rappresentano però un sistema di leggi di conservazione non omogenee, cioè con un termine sorgente, anche dette, in letteratura, *leggi di bilancio*. Possiamo scrivere in modo più compatto

1. $\partial_t U + \partial_x F(U) = S(x, U)$ dove $U(x, t) \in I$, $I \subseteq \mathbb{R}^4$, per $x \in (0, L)$, $t \in (0, T)$ e F ed S sono "liscie".
2. $U(x, 0) = U_0(x)$, per $x \in (0, L)$, dove $U_0(x)$ è il dato iniziale.

Gli schemi numerici a cui ci riferiamo sono basati sull'analisi del problema di Cauchy

$$\begin{cases} \partial_t U + \partial_x F(U) = S(x, U) & \text{in } (0, L) \times (0, T) \\ U(x, 0) = U_0(x), & \text{in } (0, L) \end{cases} \quad (3)$$

In una dimensione, il metodo dei volumi finiti è basato sulla suddivisione del dominio spaziale in intervalli di lunghezza finita (volumi finiti) detti anche *celle di griglia* e sullo sfruttare un'approssimazione dell'integrale di U su ciascuno di questi volumi. Il metodo calcola il valor medio di U in questi volumi e aggiorna questo valore ad ogni passo temporale.

Definendo con $F_{i-\frac{1}{2}}^n$ l'approssimazione del flusso medio in $x = x_{i-\frac{1}{2}}$,

$$F_{i-\frac{1}{2}}^n := \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(U(x_{i-\frac{1}{2}}, t)) dt,$$

e con $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ l'approssimazione del flusso medio in $x = x_{i+\frac{1}{2}}$,

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n := \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(U(x_{i+\frac{1}{2}}, t)) dt,$$

e il termine sorgente

$$S_i := \frac{1}{\Delta t_n \Delta x} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{C_i} S(x, U(x, t)) dx dt,$$

il metodo numerico prende la forma

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t_n}{\Delta x} \{F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}\} + \Delta t_n S_i.$$

Se approssimiamo il flusso medio $F_{i\pm\frac{1}{2}}^n$ e il termine sorgente medio S_i sui valori conosciuti di U al tempo t_n , allora possiamo parlare di un metodo completamente discreto. Così il metodo ottenuto dipende dal dato iniziale e su come scegliamo la formula del flusso numerico e del termine sorgente. Per determinare la formula del flusso numerico e del termine sorgente, usiamo schemi di rilassamento con i termini sorgente.

Poiché in presenza di un termine sorgente il metodo dei volumi finiti produce dei risultati insoddisfacenti [14], usiamo l'upwinding del termine sorgente. Presenteremo degli schemi numerici particolari per sistemi di leggi di conservazione con cambiamenti continui di sorgente basati su un codice di approssimazioni cinetiche discrete. Sia dato il sistema

$$\begin{cases} \partial_t U + \partial_x F(U) = S(x, U) & \text{in } (0, L) \times (0, T) \\ U(x, 0) = U_0(x) & \text{su } (0, L) \end{cases} \quad (4)$$

un sistema iperbolico di dimensione quattro dove $F(U)$ è la funzione di flusso. Le (4), (5) possono essere approssimate dal sistema semilineare [14, 22, 3]

$$\begin{cases} \partial_t f_k^\varepsilon + \lambda_k \partial_x f_k^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} [M_k(Pf^\varepsilon) - f_k^\varepsilon] + a_k S(x, Pf^\varepsilon) \\ f_k^\varepsilon(x, 0) = M_k(U_0(x)) \end{cases} \quad (6)$$

$$(7)$$

dove

ε è un numero positivo,

$f_k^\varepsilon = f_k^\varepsilon(x, t) \in \mathbb{R}^4$, e per $x \in (0, L)$, $t \in (0, T)$, per tutti i $k \in \{1, \dots, N\}$,

λ_k sono velocità fissate,

P è una costante reale definita da $Pf = \sum_k f_k$,

a_k è definita da $\sum_k a_k = 1$,

M_k sono funzioni Maxwelliane continue, C^1 a tratti per tutti i $k \in \{1, \dots, N\}$

Inoltre, per collegare i sistemi (4)-(5) e (6)-(7) supponiamo che per tutti gli U definiti su I sia

$$\begin{cases} \sum_k M_k(U) = U \\ \sum_k \lambda_k M_k(U) = F(U) \end{cases} \quad (8)$$

Passiamo poi all'analisi secondo Chapman-Enskog e alla monotonia delle funzioni Maxwelliane per discutere la stabilità delle approssimazioni cinetiche discrete (6, 7). In seguito daremo le definizioni di funzione monotona non decrescente e funzione monotona Maxwelliana. Giungiamo alla costruzione dello schema numerico suddividendo una prima parte lineare che utilizza la discretizzazione dell'upwind anche per il termine sorgente con la condizione CFL (da Courant, Friedrichs e Lewy) $|\lambda| \frac{\Delta t_n}{\Delta x} \leq 1$, e una seconda parte che risolve un sistema di equazioni differenziali della forma

$$G' = \frac{1}{\varepsilon}(M(PG) - G)$$

con dato iniziale $G(t_n)$ al fine di giungere alla formulazione generale del modello.

Nel Capitolo 3 viene descritta come effettuare la calibrazione del modello. Più precisamente si vogliono calibrare alcuni coefficienti quali il coefficiente d'attrito dovuto alla struttura del favo nel catalizzatore, il coefficiente di scambio termico da conduzione, il tasso di reazione e l'energia d'attivazione.

Definiamo $U^{NUM}(x_i, t_j; C, h)$ l'approssimazione numerica di U nel punto x_i e all'istante t_j ; $T^{NUM}(t_j, x_i; C, h)$, $t_j = \frac{j}{50}$ e $j = 1, \dots, \max$; $i = 1, \dots, 6$, i valori numerici delle temperature misurate; $T^{MIS}(t_j, x_i)$, $t_j = \frac{j}{50}$ e $j = 1, \dots, \max$; $i = 1, \dots, 6$, le temperature misurate.

Grazie alle misure delle temperature fornite da Magneti Marelli, possiamo applicare la strategia di minimizzazione quadratica per la funzione costo definita come

$$\Phi(C, h) := \sum_{j \geq 1} \sum_{i=1}^6 |T^{NUM}(t_j, x_i, (C, h)) - T^{MIS}(t_j, x_i)|^2.$$

Le temperature numeriche sono state determinate risolvendo numericamente il sistema

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = S(x, U),$$

che fornisce l'approssimazione numerica della soluzione U dipendente da (C, h) che sono dati. In particolare, le temperature numeriche sono ricavate grazie alla conoscenza dell'energia interna

$$\varepsilon = C_p T$$

e dell'energia totale

$$e = \varepsilon + \frac{u^2}{2} + q_0 \rho z.$$

che sono state calcolate. Per la minimizzazione della funzione costo si è usata la function *fmincon* di Matlab Optimal Toolbox. Dando per buoni i risultati ottenuti in [14], questa function fornisce il risultato $(C, h) = (800, 665.065)$,

che corrisponde al minimo di questa funzione. Vedremo che l'effetto della variazione dei coefficienti può essere confrontato con gli effetti fisici del modello.

Passiamo alla calibrazione del coefficiente d'attrito dovuto alla struttura del favo. Procediamo ponendo a zero il coefficiente h di scambio termico con la parete. Consideriamo quindi il sistema

$$\begin{cases} \partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0 \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_x(A\rho u^2 + p) = -C_f w \rho \frac{u^2}{2} - C\rho u \\ \partial_t(A\rho e) + \partial_x(Au(\rho e + p)) = 0 \end{cases}$$

I risultati di Fig.1 sono stati ottenuti mediante l'implementazione di un programma in Matlab.

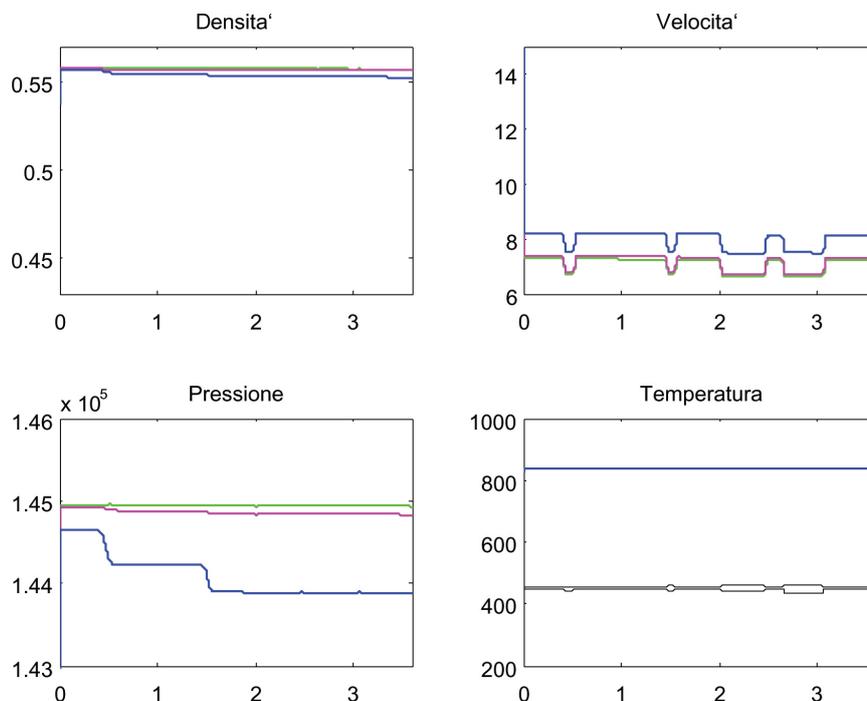


Figura 1: calibrazione di C

In Fig. 1 si mostra il grafico di densità, velocità, pressione e temperatura al tempo $t = 0.15$ secondi. Come ci si aspettava, un aumento del coefficiente d'attrito C dovuto alla struttura del favo [verde ($C=0$), rosa ($C= 100$), blu ($C= 1000$)] produce una caduta della pressione, ai vari livelli del catalizzatore.

Proseguiamo con la calibrazione del coefficiente di scambio termico da conduzione. Poniamo a zero il coefficiente d'attrito C dovuto alla struttura

del favo e facendo variare il coefficiente di scambio termico con la parete, h , si considera il sistema

$$\begin{cases} \partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0 \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_x(A\rho u^2 + p) = -C_f w \rho \frac{u^2}{2} \\ \partial_t(A\rho e) + \partial_x(Au(\rho e + p)) = -wh(T - T_{par}). \end{cases}$$

Mediante un programma in Matlab, si sono ottenuti i risultati di Fig. 2

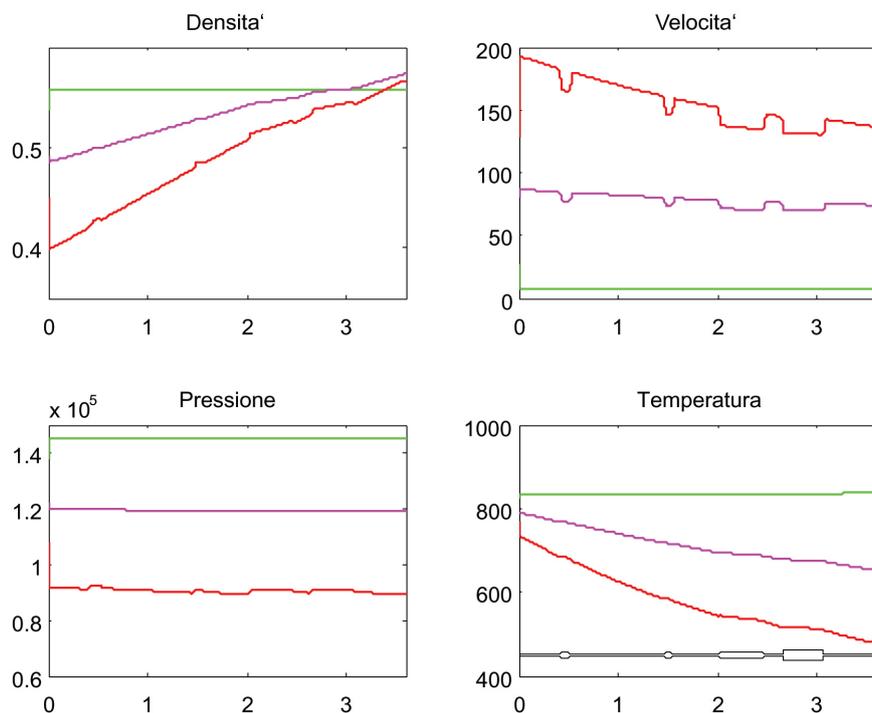


Figura 2: calibrazione di h

Qui è mostrato l'andamento al tempo $t = 0.15$ secondi di densità, velocità, pressione e temperatura, al variare del coefficiente di scambio termico h . Gli effetti più significativi sembrano essere quelli sul grafico della temperatura e della velocità (al tempo $t = 0.15$ s). Infatti si può osservare che all'aumentare del coefficiente di scambio termico da conduzione [verde ($h=0$), rosa ($h=100$), rosso ($h=500$)], la velocità del gas è molto elevata, mentre, la pressione diviene più debole lungo il condotto. Dal punto di vista fisico, la temperatura lungo il condotto diminuisce all'aumentare di h dato che esso diffonde più calore.

Passiamo alla calibrazione del coefficiente relativo alla combustione nel catalizzatore. Consideriamo il sistema senza la struttura a nido d'ape e il trasferimento di calore,

$$\begin{cases} \partial_t(A\rho) + \partial_x(A\rho u) = 0 \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_x(A\rho u^2 + p) = -C_f w \rho \frac{u^2}{2} \\ \partial_t(A\rho e) + \partial_x(Au(\rho e + p)) = 0 \\ \partial_t(A\rho z) + \partial_x(Au\rho z) = -\rho z K(T), \end{cases}$$

oltre alla relazione termodinamica, $p = R\rho T$ dove $e = \epsilon + \frac{u^2}{2} + q_0 z$. L'indice di reazione $K(T)$ dipende dalla temperatura T secondo la legge di Arrhenius, che talvolta può essere rimpiazzata da un meccanismo discreto d'accensione della temperatura cinetica. Mediante un programma in Matlab (vedi Appendice B) e considerando la legge discreta, abbiamo ottenuto i risultati di Fig. 3.

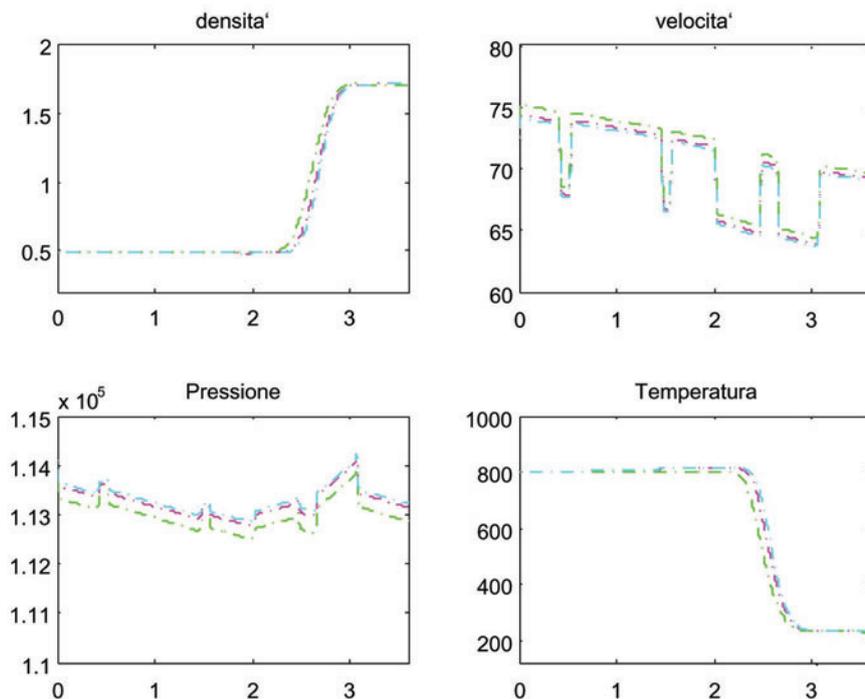


Figura 3: calibrazione di K_0

Qui sono mostrati i grafici a $t=1/100$ secondi di densità, velocità, pressione e temperatura, al variare del coefficiente relativo alla combustione. Si può osservare che l'effetto della combustione sulla temperatura (anche se non è

molto evidente dal grafico): più è grande il valore del coefficiente, più la temperatura interna del catalizzatore è elevata [verde ($K_0 = 0$), rosa ($K_0 = 1$), celeste ($K_0 = 10$)]. Lo stesso vale per la frazione totale di gas incombusto che diminuisce al crescere di K_0 (v. Fig. 4).

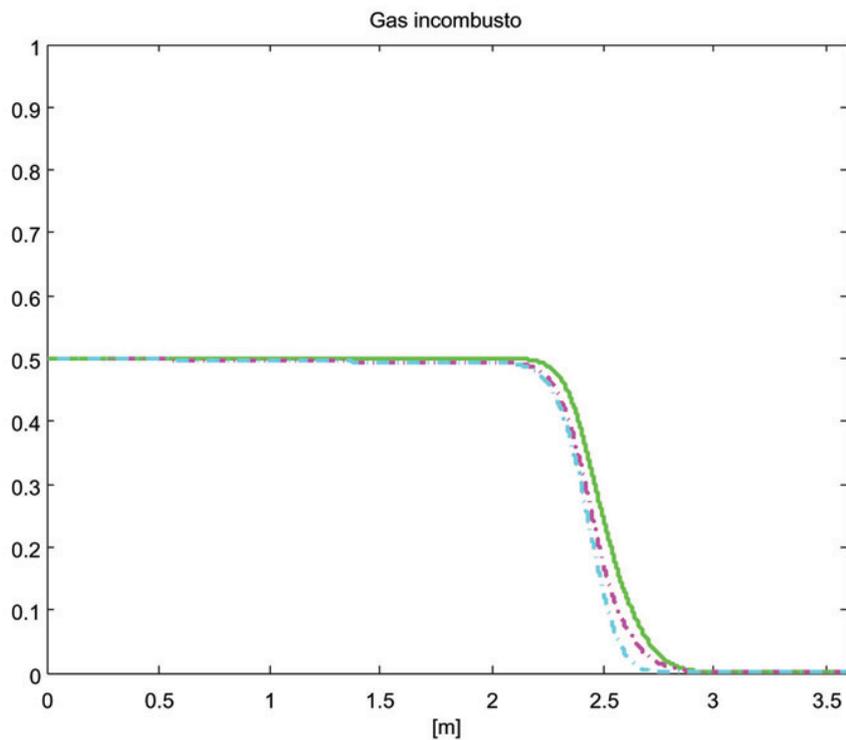


Figura 4: gas incombusto

Se invece della *legge discreta* si considera la *legge di Arrhenius* (Appendice B), fissando l'energia d'attivazione pari a zero e facendo variare K_0 otteniamo i risultati mostrati di Fig. 5. Qui sono tracciati i grafici a $t=1/100$ secondi di densità, velocità, pressione e temperatura, al variare del coefficiente K_0 relativo alla combustione. Ora è più evidente l'effetto della combustione sulla temperatura: maggiore è il valore di K_0 , più elevata è la temperatura interna del catalizzatore [celeste ($K_0 = 0$), rosa ($K_0 = 1$)]. Lo stesso vale per la frazione totale di gas incombusto, che diminuisce al crescere di K_0 (Fig. 6).

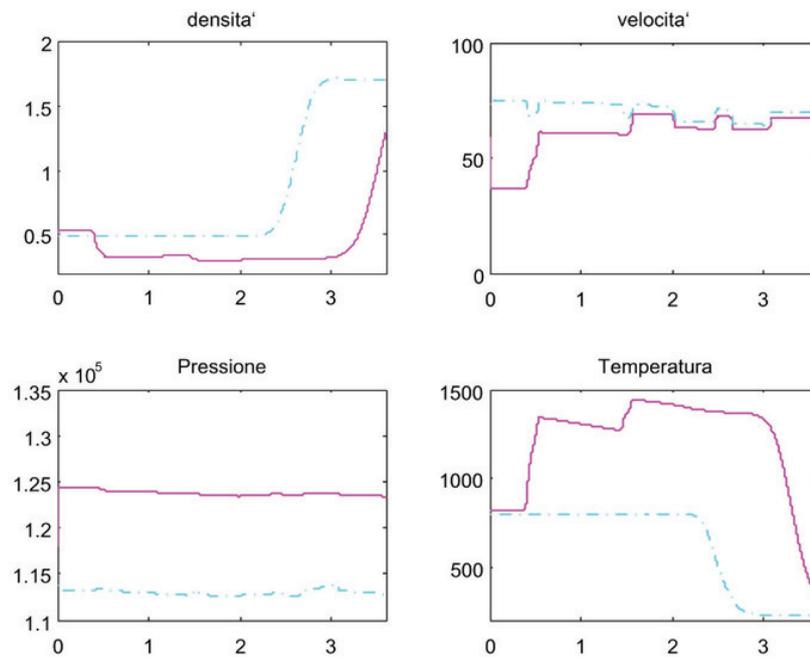


Figura 5: calibrazione di K_0 (Arrhenius)

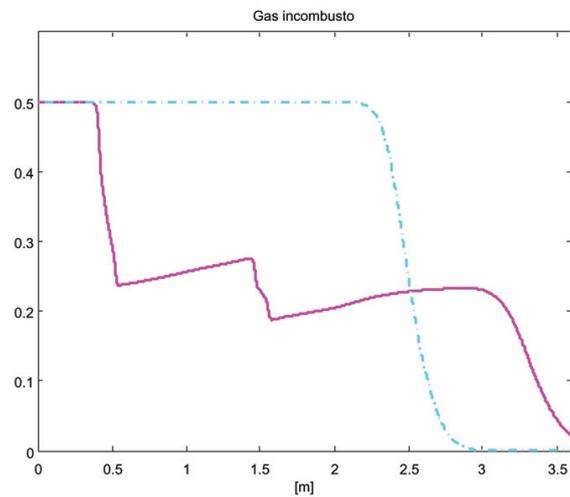


Figura 6: gas incombusto (Arrhenius)

Un altro elemento necessario ad una reazione di combustione è l'energia necessaria per attivare il processo. Anche in condizioni ideali di pressione e

di concentrazione, due sostanze idonee non danno luogo alla reazione se non si raggiunge una temperatura minima necessaria ad attivare le molecole per un tempo sufficiente. In termini chimico-fisici questo concetto si esprime introducendo l'*energia d'attivazione*, cioè l'energia necessaria che deve essere fornita dal sistema affinché avvenga la combustione. Vogliamo analizzare la sensibilità dall'incognita costante E^+ , con $K_0 = 1$ fissato ottenendo i risultati di Fig. 7.

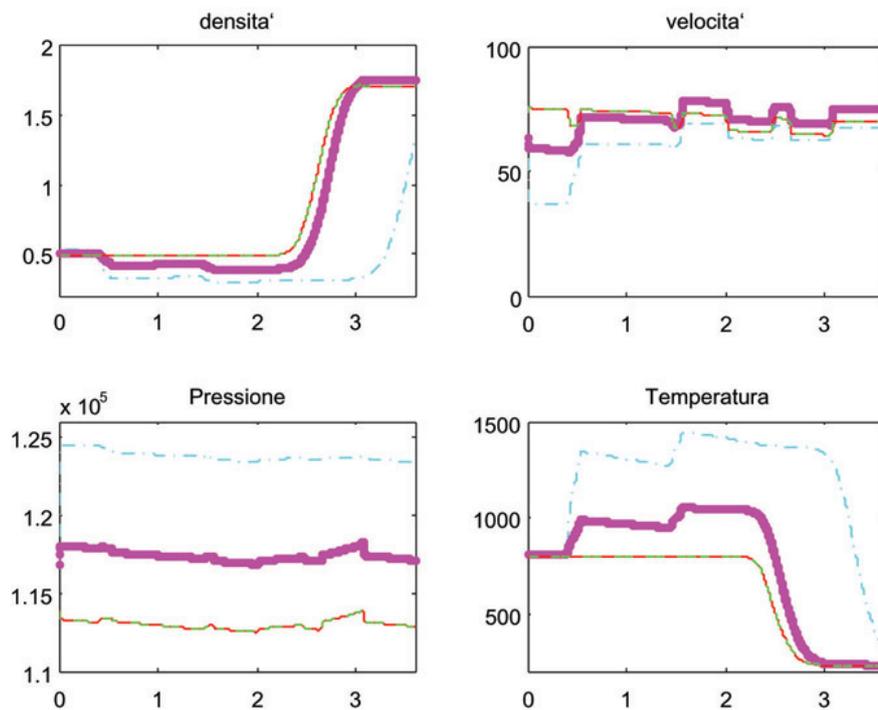


Figura 7: calibrazione di E^+

In tale figura si mostrano i grafici al tempo $t=1/100$ secondi di densità, velocità, pressione e temperatura, al variare dell'energia d'attivazione. L'effetto della combustione sulla temperatura del gas è evidente: più è grande il valore di E^+ [celeste ($E^+ = 1$), rosa ($E^+ = 1000$), verde ($E^+ = 20000$), rosso ($E^+ = 2000000$)], più la temperatura interna del catalizzatore si stabilizza ad uno stesso valore. Lo stesso vale per la frazione totale di gas incombusto diminuisce al crescere di E^+ e si stabilizza (Fig. 8).

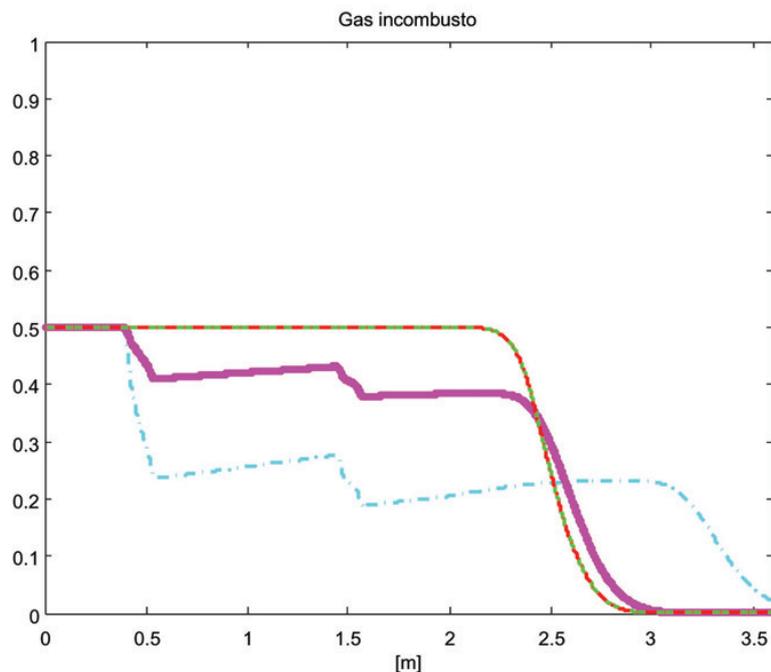


Figura 8: gas incombusto

Il Capitolo 3 si conclude considerando cosa succede al gas incombusto all'uscita del tubo di scarico se si cambia la geometria del condotto, in particolare se si cambia la forma del raccordo fra il condotto e i vari componenti di scarico (il pre-catalizzatore di raggio $r_1=0.04$, il catalizzatore intermedio di raggio $r_2=0.06$, e i due silenziatori di raggi $r_3=0.06$ e $r_4=0.095$). Anziché considerare un profilo di raccordo con andamento parabolico come in [14], vediamo cosa accade se tale profilo è realizzato mediante *due* archi di parabola, oppure mediante un tratto di cubica, con o senza imporre condizioni di monotonia (e continuità C^2).

Apportando le modifiche alla geometria del condotto, possiamo concludere che la struttura migliore (utilizzando la *legge discreta* e facendo variare quindi il coefficiente relativo alla combustione), affinché ci sia una riduzione più efficace di gas incombusto, è quella con un profilo di raccordo *cubico senza* condizioni di monotonia e continuità tra il condotto e i vari componenti di scarico (v. Fig. 9).

In tal caso abbiamo ottenuto i risultati di Figg. 11 e 12.

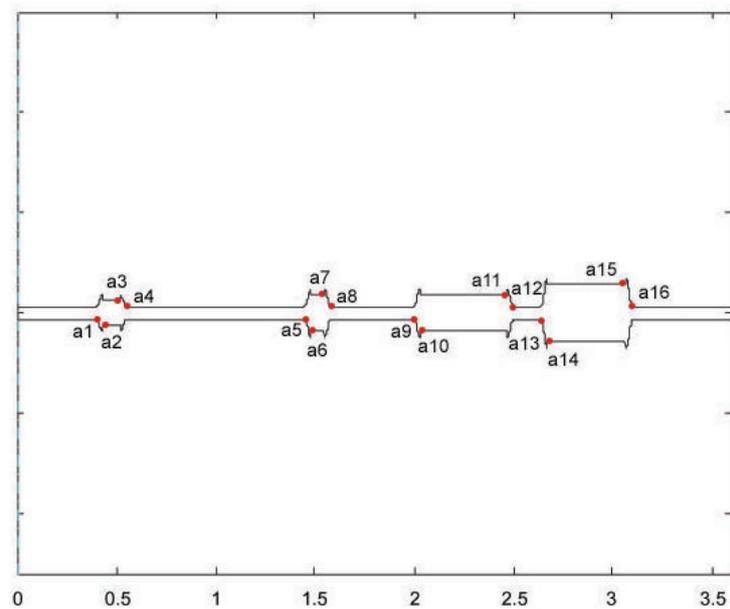


Figura 9: geometria del condotto

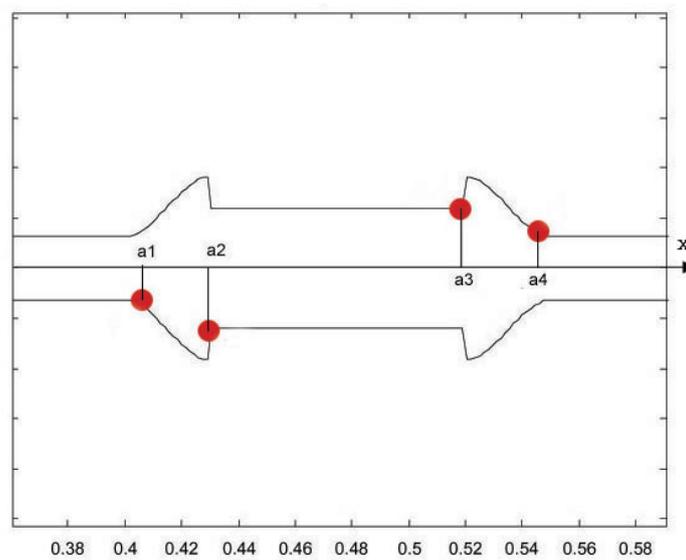


Figura 10:

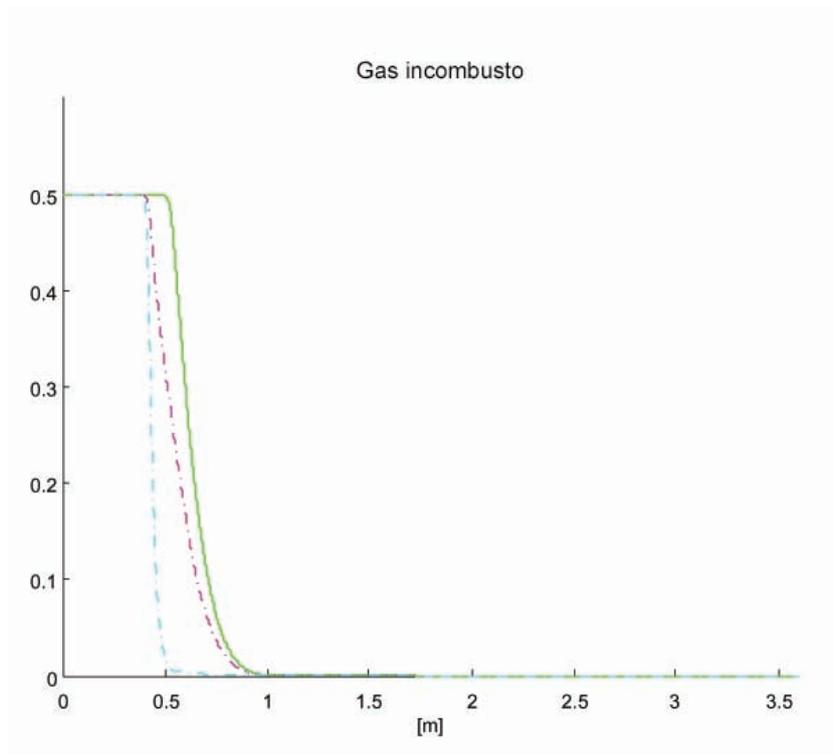


Figura 11: gas incombusto (legge discreta)

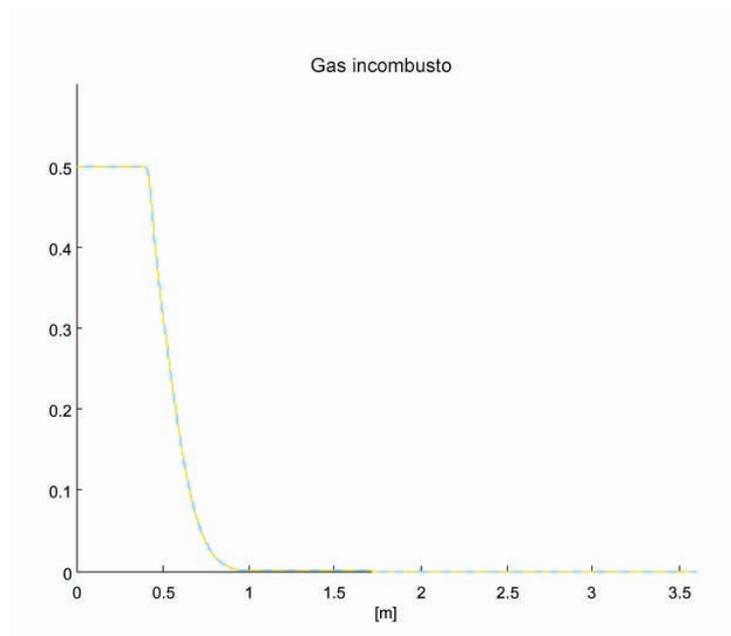


Figura 12: gas incombusto (legge di Arrhenius)

Abbiamo considerato il sistema di leggi di conservazione con sorgente senza la struttura a nido d'ape e il trasferimento di calore. Al crescere di K_0 [verde ($K_0 = 0$), rosa ($K_0 = 1$), celeste ($K_0 = 10$)] si può notare che la frazione totale di gas incombusto diminuisce. Tale struttura geometrica è anche migliore di quella con andamento parabolico utilizzata in [14] (v. Figg. 4 e 6).

Nel Capitolo 4 vengono rappresentati i risultati numerici ottenuti dalla function *fmincon* di Matlab Optimal Toolbox ($(C, h) = (800, 665.065)$). Vediamo cosa succede numericamente utilizzando questi valori nel modello matematico sviluppato nel Capitolo 2. Uno dei nostri obiettivi era quello di ripulire e ottimizzare il codice scritto in Matlab fornito dal Dott. Roberto Natalini dell'Istituto per le Applicazioni di Calcolo "M. Picone" del CNR. Si è pensato di produrre i vari grafici di densità, velocità, pressione, temperatura del gas e frazione di gas incombusto ai vari istanti di tempo all'uscita del condotto con un unico programma. In passato invece, Natalini e i suoi collaboratori avevano messo a punto sei programmi in Matlab distinti e meno complessi, per giungere allo stesso risultato. I risultati ottenuti sono rappresentati nelle Figg. 13 e 14. Qui sono tracciati i grafici di densità, velocità, pressione e temperatura del gas. Notiamo che all'aumentare del tempo [$t = 0$ (*rosa*), $t = 0.2$ (*verde*), $t = 1.0$ (*viola*)] e della distanza dall'uscita dal motore, la densità del gas diminuisce, la velocità aumenta, mentre la temperatura diminuisce nel catalizzatore intermedio e nel precatalizzatore fino a stabilizzarsi nei silenziatori. Possiamo concludere che anche la pressione diminuisce in quanto essa è debole lungo il condotto ed è proporzionale alla densità e alla temperatura ($p = \rho RT$). In Fig. 14 si mostra la variazione della frazione di gas incombusto lungo il dispositivo. Possiamo notare che all'aumentare del tempo ($t = 0$, $t = 0.2$, $t = 1.0$), tale frazione diminuisce avvicinandosi all'uscita del condotto, di fatto comincia a diminuire già nel pre-catalizzatore.

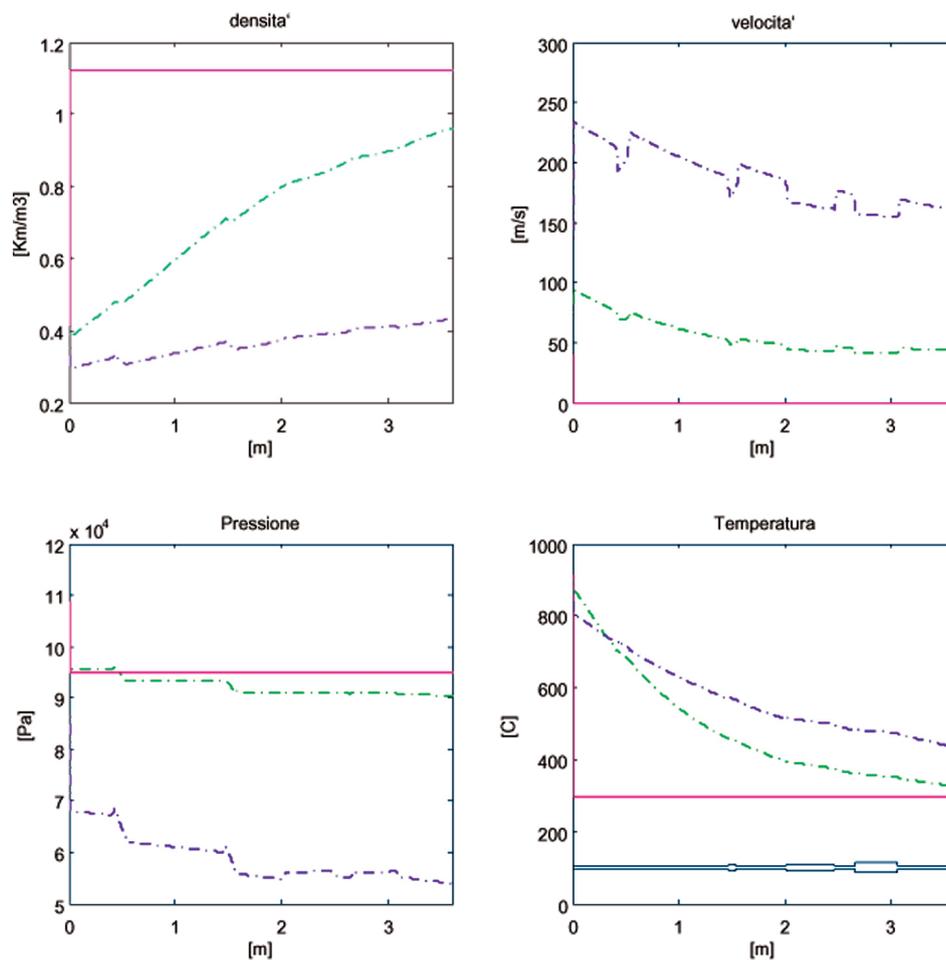


Figura 13:

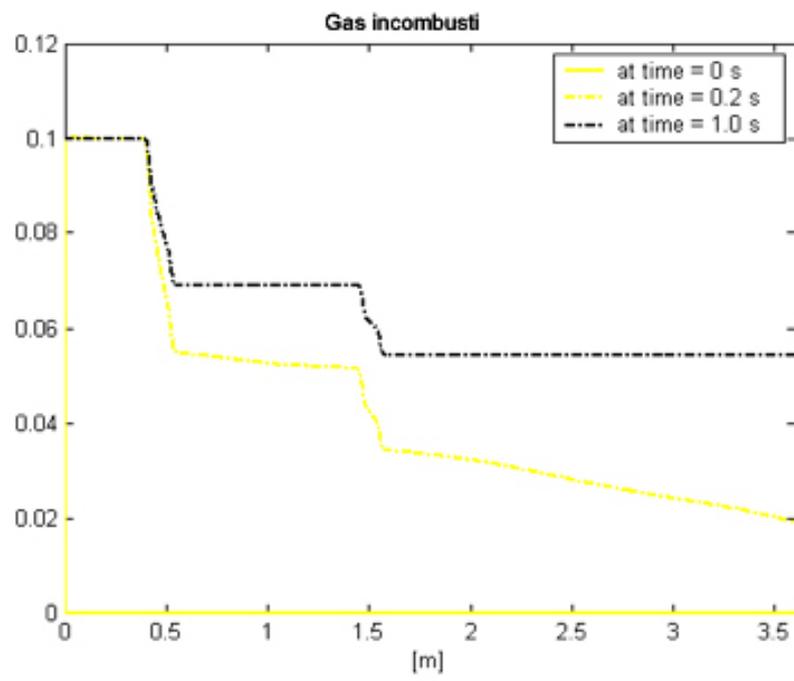


Figura 14: Gas incombusto

Simboli e terminologia

x coordinata assiale del sistema di scarico

t tempo

A area della sezione nel punto di ascissa x , $A = A(x)$

w perimetro del condotto nel punto x , $w = w(x)$

Funzioni dipendenti da (x, t) :

ρ densità del gas

u velocità assiale lungo x del gas

p pressione del gas

T temperatura del gas

ε energia interna

e energia totale

z frazione totale di gas incombusto

Costanti:

R costante universale dei gas

γ esponente adiabatico

C_p calore specifico a pressione costante

Coefficienti:

C_f coefficiente d'attrito

C coefficiente d'attrito dovuto alla struttura del favo nel catalizzatore

h coefficiente di scambio di calore con la parete

K_0 tasso di reazione

E^+ energia di attivazione

Bibliografia

- [1] Amadori D., and Guerra, G., *Global Weak Solutions for Systems of Balance Laws*, Appl. Math. Lett. **12** (1999), 123-127.
- [2] Aregba-Driollet D., and Milišić, V., *Kinetic Approximation of a boundary value problem for conservation laws*, Numer. Math. **97** (2004), 595-633.
- [3] Aregba-Driollet, D., and Natalini, R., *Discrete Kinetic Schemes for Multidimensional Conservation Laws*, SIAM J. Numer. Anal. **37** (2000), 1973-2004.
- [4] Bressan A., and Serre D., *Hyperbolic Systems of balance laws*, Lectures given at the C.I.M.E. Summer School held in Cetraro, Springer, 2003.
- [5] Bressan A., and Serre D., *Hyperbolic Systems of conservation laws. The one-dimensional Cauchy problem*, Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications, Vol. 20, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- [6] Colombo M.C., and Corli, A., *On a class of hyperbolic balance laws*, J. Differential Equations **1**, No. 4 (2004), 725-745.
- [7] Crasta G., and Piccoli B., *Viscosity solutions and uniqueness for systems of inhomogeneous balance laws*, Discrete Contin. Dyn. Syst. **3**(4), (1997), 477-502.
- [8] Dafermos, C. M., *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*, Berlin, Springer-verlag, 2000.
- [9] Dafermos, C. M., and Hsiao, L. , *Hyperbolic systems and balance laws with inhomogeneity and dissipation*, Indiana Univ. Math. J. **31**(4), (1982), 471-491.
- [10] Eymaëd, R., Gallouët, T., and Herbin, R., *Finite Volume Methods*, North-Holland, Amsterdam, 2000.
- [11] Friedman, A., and Littman, W., *Industrial mathematics: a course in solving real-world problems*, SIAM, Philadelphia, 1994.

- [12] Helzel, C., Leveque, R. J., and Warnecke, G., *A Modified Fractional Step Method for the Accurate Approximation of Detonation Waves*, SIAM J. Sci. Comput. **22** (2000), 1489-1510.
- [13] Isaacson E., and Keller H., B., *Analysis of Numerical methods*, Dover, New York, 1994.
- [14] Lacoste, L., *Mathematical modeling of chemical processes in exhaust pipe*, Tesi, 2004-2005 [supervisor: R. Natalini].
- [15] Lax, P. D., *Hyperbolic system of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, Conference Board of the mathematical Science Regional Conference Series in Applied Mathematics **11**, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1973.
- [16] Le Veque, R. J., *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge, 2002.
- [17] Le Veque, R. J., *Numerical Methods for Conservation Laws*, Birkhäuser, Basel Boston Berlin, 1992.
- [18] Lions P. L., *Mathematical Topics in Fluid Mechanics*, Vol. 1 (*Incompressible Models*), Oxford, 1998.
- [19] Lions P. L., *Mathematical Topics in Fluid Mechanics*, Vol. 2 (*Compressible Models*), Oxford, 1998.
- [20] Majda, A., *Compressible Fluid Flow and Systems of Conservation Laws in Several Space Variables*, Springer-Verlag, New York, 1984.
- [21] Mazzoldi, P., Nigro, M., and Voci, C., *Elementi di Fisica, Meccanica-Termodinamica*, Edises, Padova, 2001.
- [22] Natalini, R., *A Discrete Kinetic Approximation of Entropy Solutions to Multidimensional Scalar Conservation Laws*, J. Differential Equations, **148** (1998), 292-317.
- [23] Natalini, R., and Terracina, A., *Convergence of a Relaxation Approximation to a Boundary Value Problem for conservation Laws*, Comm. Partial Differential Equations, **26**(7-8) (2001), 1235-1252.
- [24] Quarteroni, A., and Valli, A., *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, Springer, New York, 1994.
- [25] Quarteroni, A., Sacco, R., and Saleri, F., *Matematica Numerica*, Springer, Milano, 2000.

- [26] Salsa, S., *Equazioni a Derivate Parziali - Metodi, modelli e applicazioni*, Springer, Milano, 2004.