

Progetto 13 PDE

# DIFFUSIONE MOLECOLARE DEI VAPORI DI ALCOOL IN UN TUBO

## INTRODUZIONE AL PROBLEMA

In questo problema ci troviamo a dover affrontare il fenomeno fisico della diffusione delle molecole dei vapori di alcool presenti in quantità pari al 2% dell'aria totale all'interno di un tubo di lunghezza di 20cm. Sul fondo del tubo è posta una vaschetta di alcool che evapora nel gas stagnante soprastante. (L'ambiente esterno fornisce calore mantenendo l'alcool a una temperatura costante di 30°C, alla quale la pressione di vapore è pari a 0.1 atm). All'estremità superiore del tubo i vapori si disperdono nell'aria esterna cosicché la concentrazione  $u$  è essenzialmente uguale a zero.

Prima di passare alla descrizione del modello matematico risulta quindi necessario capire cosa si intende per diffusione molecolare.

La diffusione è il fenomeno per cui le molecole di una soluzione tendono naturalmente a passare dalle zone a concentrazione maggiore a quelle a concentrazione minore. Quando si mescolano due sostanze diverse, le molecole di entrambe diffondono fino a raggiungere una concentrazione di equilibrio.

I diversi fenomeni di diffusione seguono le medesime leggi, valide, con buona approssimazione, nella maggior parte dei casi reali. La velocità di diffusione è proporzionale al gradiente di concentrazione, di temperatura o di carica (quando il gradiente è piccolo). La velocità di diffusione dipende da proprietà specifiche del materiale diffondente, attraverso un parametro che, nel caso del calore o dell'elettricità, è detto conduttività, mentre nel caso della materia prende il nome di coefficiente di diffusione.

Poiché, secondo le leggi della termodinamica, ogni sistema tende al raggiungimento della condizione di equilibrio, le molecole che si trovano in una zona a maggiore concentrazione tendono spontaneamente a muoversi verso la zona in cui sono meno concentrate; in altri termini, si dice che si spostano "secondo gradiente di concentrazione". All'interno di un recipiente pieno d'acqua, ad esempio, le particelle di una goccia di inchiostro tendono ad allontanarsi reciprocamente e a disporsi in modo uniforme nel liquido che le contiene (fenomeno della diffusione). Se si considerano due soluzioni aventi diversa concentrazione e separate da una membrana semipermeabile, che cioè permette solo il passaggio delle molecole di solvente e non di soluto, il solvente fluisce verso la soluzione più concentrata, in cui vi sono più particelle di soluto e meno di solvente (fenomeno dell'osmosi).

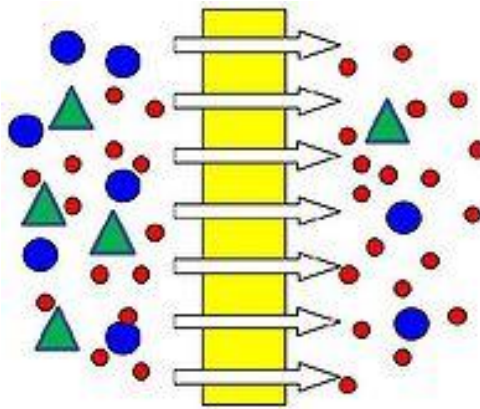


Fig.1 -diffusione-

## DESCRIZIONE DEL MODELLO MATEMATICO

In particolare, il problema in esame è retto dall'equazione della diffusione posto secondo il problema di Cauchy:

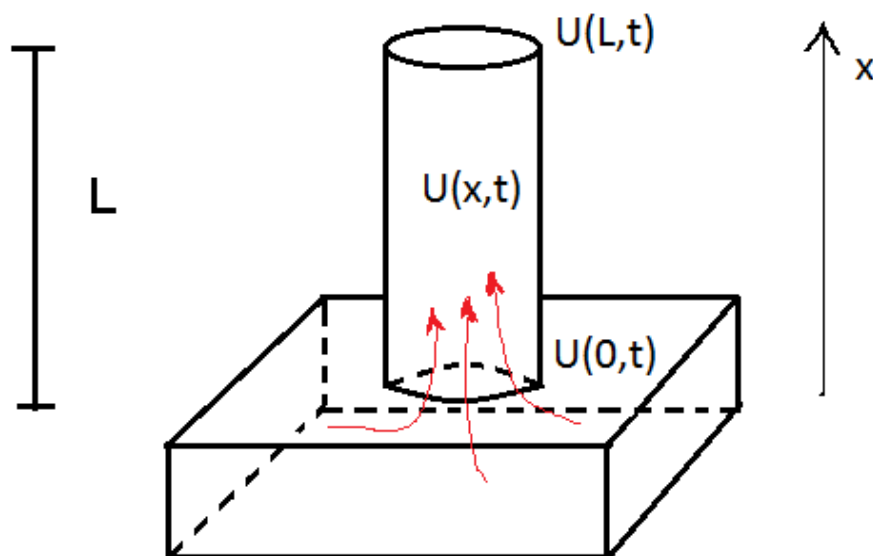


Fig. 2 -modello grafico-

$$\begin{cases} \delta u / \delta t = a^2 \delta^2 u / \delta x^2; & 0 < x < L, t > 0 \\ u(x, 0) = 2.0; & 0 \leq x \leq L \\ u(0, t) = 0, u(20, t) = 10; & t > 0 \end{cases}$$

L'equazione è accompagnata da un dato iniziale e da condizioni al bordo (o di Dirichlet), che rappresentano situazioni in cui la concentrazione al bordo del dominio ha un andamento noto a priori

Dove  $a^2 = 0.119 \text{ cm}^2/\text{sec}$  è il coefficiente di diffusione.

Si richiede di integrare numericamente il problema suddetto utilizzando gli schemi alle differenze finite:

- 1) Metodi di Eulero (esplicito ed implicito) e
- 2) Metodo di Crank-Nicolson,