

Simulació 2: Escalfament d'un pollastre

Métodes numèrics II

Néstor Ballesteros Brosel

Andreu Espinet Torrecassana

Pol Barluenga Rovira

13/01/2020

Índex

1	Introducció	1
2	Plantejament del problema i adimensionalització	1
3	Mètode Runge-Kutta	3
4	Presentació de Resultats	4
4.1	Estimació de la constant elàstica	4
4.2	Determinació de la freqüència	5
5	Conclusió	6

1 Introducció

L'objectiu d'aquest treball és investigar si seria possible escalfar i cuinar un pollastre sense cap mena d'eines o aparells, utilitzant unes mans humanes. Considerarem un pollastre com un cub format per grups de molècules que interaccionen amb altres grups del seu voltant amb forces d'atracció i repulsió elàstiques. Escalfarem el cos aplicant energia cinètica a les partícules dels laterals i mitjançant el teorema d'equipartició, trobarem la temperatura a diferents punts del pollastre. S'estimarà la constant elàstica i es buscarà per quina freqüència dels cops es pot cuinar el pollastre. Per tal d'efectuar aquesta simulació es duran a terme un seguit d'aproximacions que s'aniran mencionant al llarg del treball.

2 Plantejament del problema i adimensionalització

Per començar, hem de definir les magnituds del nostre cos i les aproximacions que hem dut a terme. Un pollastre té una massa total de 1,5 kg i un volum $V = 0.2^3 m$ aproximadament (hem considerat que és un cos cúbic). Està format per un billó de cèl·lules, on en cada cèl·lula hi han 42 milions de molècules. Tot i que dins una cèl·lula es poden trobar més de 6000 classes de molècules de proteïna¹, considerarem la massa mitjana d'aquestes. Per tant, la massa de les molècules serà $m_{mol} = 3.57 \cdot 10^{-20} kg$. Per raons obvies de temps de compilació, no podem utilitzar mètodes numèrics considerant cada una de les molècules que formen el pollastre així que podem entendre el cos com un conjunt de grups de molècules, en particular, fragmentarem el cub en volums més petits de $1 cm^3$, que seran on romandran les molècules. Així que hem separat el cub en 20^3 grups de molècules, on cada grup té una massa de $m = 1.875 \cdot 10^{-4} kg$.

Aquest treball es basara en el teorema d'equipartició, ja que és una formula general que ens relacionarà la temperatura d'un cos amb la seva energia mitjana. Com que dins de cada grup de molècules hem considerat que totes tenen la mateixa velocitat, és a dir, les forces intermoleculars són inexistents i a més el volum que ocupa cada molècula el considerem negligible comparat amb el volum del grup, podem estimar que microscòpicament aquests grups es comporten com gasos ideals. Així doncs, sabem que la formula del teorema d'equipartició d'un gas ideal ve donada per :

$$T = \frac{\langle v^2 \rangle m}{3k_b} \quad (2.1)$$

on T és la temperatura, $\langle v^2 \rangle$ i m són la velocitat mitjana i la massa de les molècules respectivament i k_b és la constant de Boltzmann ($k_b = 1,3806504 \cdot 10^{-23} J \cdot K^{-1}$). Així doncs, al considerar aquests grups es comporten internament com gasos ideals, les forces d'atracció i repulsió només es tindran en compte entre grups de molècules.

Com que a partir d'ara treballarem amb grups de molècules, ens referirem a ells com a les partícules que formen el cos. Si ens centrem en les forces que rebrà una certa partícula, podem considerar que amb les úniques partícules que interactua són les que apareixen a la figura:

¹<https://www.elmundo.es/ciencia-y-salud/ciencia/2018/01/18/5a5fb7cc268e3e781d8b4622.html>

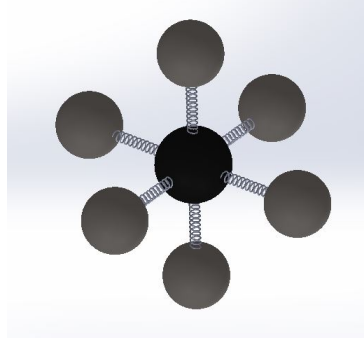


Figura 1: Representació de les partícules feta amb Solid Edge

En aquesta imatge es veu representada una partícula que es troba a l'interior del pollastre, i per tant, interactua amb 6 partícules més. Però aquest raonament no és vàlid per a les partícules que es troben en contacte amb l'exterior del cos. Les partícules que estan a les parets del cub interactuen amb 5 partícules, les de les arestes amb 4 i finalment les dels vèrtex amb 3. Per saber la força que exerceix cada partícula del voltant sobre la que estem estudiant en un temps determinat, hem de trobar el que s'ha allargat la molla: la resta entre la diferència de posicions l_i en aquest temps i l'allargada en repòs de la molla L . Sobre la partícula estudiada també actuarà una força de fregament que dependrà de la velocitat d'aquesta. Així doncs, trobem l'equació diferencial:

$$m \frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial t^2} = \sum_{i=1}^n -k(l_i - L) - \lambda \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} \quad (2.2)$$

on k és la constant de la molla, r i m són la posició i la massa de la partícula estudiada respectivament, $\lambda = 0.1$ és el coeficient de fregament amb l'aire i n és el nombre de partícules amb les que la partícula estudiada té una interacció mútua (que variarà depenent de la partícula estudiada). Com que estem considerant que la temperatura del cos ve donada només per la energia de translació dels seus components, per les partícules situades a l'interior del pollastre; $\lambda = 0$ ja que si no fos així hi haurien pèrdues d'energia en forma de calor que no mesuràriem i que contribuirien a l'augment de la temperatura del cos.

Per treballar millor, hem de adimensionalitzar l'equació diferencial. Per fer-ho, primer adimensionalitzarem la variable independent amb el canvi de variable: $\sqrt{\frac{m}{k}} dt' = dt$:

$$\frac{\partial^2 \vec{r}}{\partial t'^2} = \sum_{i=1}^n -(l_i - L) - \lambda \sqrt{\frac{1}{km}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t'} \quad (2.3)$$

Seguidament adimensionalitzarem la variable dependent amb el canvi de variable: $L d\vec{r}' = d\vec{r}$. Sabem que per un temps fixat és una funció de x, y, z i es pot demostrar trivialment que $\vec{r}' = \vec{r}(x', y', z') = r(\frac{x}{L}, \frac{y}{L}, \frac{z}{L})$. Llavors:

$$\begin{aligned} (l_i - L) &= (\sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + (z - z_i)^2} - L) = \\ &= (\sqrt{(Lx' - Lx'_i)^2 + (Ly' - Ly'_i)^2 + (Lz' - Lz'_i)^2} - L) = \\ &= L\sqrt{(x' - x'_i)^2 + (y' - y'_i)^2 + (z' - z'_i)^2} - L = L \cdot l'_i - L \end{aligned} \quad (2.4)$$

I aplicant aquest resultat i el canvi de variable a l'equació 2.3, trobem l'equació diferencial adimension-

alitzada:

$$\frac{\partial^2 \vec{r}'}{\partial t'^2} = \sum_{i=1}^n -(l'_i - 1) - \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}} \frac{\partial \vec{r}'}{\partial t'} \quad (2.5)$$

Per acabar de plantejar el problema, necessitem saber com obtindran una velocitat les partícules laterals. Utilitzant la definició $F = \frac{dp}{dt}$ podem trobar l'increment de velocitat:

$$\Delta v = \frac{F \Delta t}{M} \quad (2.6)$$

Podem tractar amb les dades recollides de boxejadors professionals; la força mitjana d'un cop recte és de $F = 4.3N$ ². El cop ha de ser molt sec perquè sinó aporta molt moment lineal al pollastre i no es podria tenir en un lloc fixat, llavors $\Delta t = 0.001s$. Un puny té una superfície de $0.01m^2$ i per tant, actuarà sobre 100 partícules. Llavors, la massa total glopejada serà $M = 100 \cdot m = 1.8 \cdot 10^{-2}kg$. Utilitzat l'equació 2.6 es calcula el valor $\Delta v = 2,66m/s$. Ens definim una nova variable $\gamma = \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}}$. Si fem la divisió $\frac{\Delta v'}{\gamma}$ trobem la relació $\Delta v' = \gamma \frac{\Delta v \cdot m}{\lambda} = \gamma \cdot 0.05$. Aquesta ens serà molt útil alhora de determinar la constant elàstica.

3 Mètode Runge-Kutta

Per comoditat, totes les variables utilitzades a partir d'ara seran adimensionals si no s'expressa el contrari. El mètode numèric Runge-Kutta serveix per resoldre equacions de grau 1, així que el primer que s'ha de fer és transformar l'equació diferencial adimensionalitzada com a un sistema de dues equacions diferencials de grau 1:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \sum_{i=1}^6 -(l_i - 1) - \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}} \vec{v} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \quad (3.2)$$

Tant la demostració com l'explicació del mètode que utilitzarem està explicat en els apunts de teoria de Mètodes Numèrics 2, però és adient mencionar que en general el mètode de Runge-Kutta d'ordre 4 ve donat per:

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_i, y_i) & K_3 &= f(t_i + h/2, y_k + (h/2)K_2) \\ K_2 &= f(t_i + h/2, y_k + (h/2)K_1) & K_4 &= f(t_i + h, y_k + hK_3) \end{aligned} \quad (3.3)$$

En el nostre cas, veiem que tenim dues funcions que no depenen explícitament del temps però sí d'altres paràmetres: $f_v(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{v})$ i $f_r(v)$ que corresponen a les equacions 3.1 i 3.2 respectivament. Llavors:

$$\begin{aligned} K_1 r &= f_r(v) & K_1 v &= f_v(r, r_1, \dots, r_n, v) \\ K_2 r &= f_r(v + (h/2)K_1 v) & K_2 v &= f_v(r + (h/2)K_1 r, r_1 + (h/2)K_1 r_1, \dots, r_n + (h/2)K_1 r_n, v + (h/2)K_1 v) \\ K_3 r &= f_r(v + (h/2)K_2 v) & K_3 v &= f_v(r + (h/2)K_2 r, r_1 + (h/2)K_2 r_1, \dots, r_n + (h/2)K_2 r_n, v + (h/2)K_2 v) \\ K_4 r &= f_r(v + hK_3 v) & K_4 v &= f_v(r + hK_3 r, r_1 + hK_3 r_1, \dots, r_n + hK_3 r_n, v + hK_3 v) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Per utilitzar el mètode de Runge-Kutta necessitem projectar les equacions diferencials sobre els eixos cartesianes. Llavors tenim sis equacions diferencials, una per cada component, fent un total de 24 constants

²<http://radunga-dejandohuella.blogspot.com/2013/09/la-potencia-del-punetazo-mas-pesado.html>

K 's de Runge-Kutta. Aquestes sis equacions diferencials són:

$$\begin{aligned}\frac{\partial v_x}{\partial t} &= \sum_{i=1}^6 -(l_i - 1) \cdot \frac{\Delta x_i}{l_i} - \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}} v_x & \frac{\partial r_x}{\partial t} &= v_x \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} &= \sum_{i=1}^6 -(l_i - 1) \cdot \frac{\Delta y_i}{l_i} - \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}} v_y & \frac{\partial r_y}{\partial t} &= v_y \\ \frac{\partial v_z}{\partial t} &= \sum_{i=1}^6 -(l_i - 1) \cdot \frac{\Delta z_i}{l_i} - \frac{\lambda}{L} \sqrt{\frac{1}{km}} v_z & \frac{\partial r_z}{\partial t} &= v_z\end{aligned} \quad , \quad (3.5)$$

Definirem cada partícula una coordenada, és a dir, $x[i][j][k]$ serà la projecció en l'eix x de la partícula anomenada $[i][j][k]$. Hem d'establir les condicions inicials; com que hem normalitzat la posició respecte la longitud en repòs de la molla, podem afirmar que la posició de la partícula $[i][j][k]$ serà $x=i$, $y=j$, $z=k$ per $t=0$. Per simplificar el problema, establirem que les velocitats inicials de totes les partícules són 0. Aquesta darrera afirmació xoca amb el tercer principi de la termodinàmica, ja que si un grup de molècules té una velocitat mitjana nula, voldria dir que la temperatura del cos també és 0. Tot i això, si considerem que l'energia de translació (amb les velocitats inicials) correspon a la temperatura ambient, amb el teorema d'equipartició de l'energia trobarem diferències de temperatura, que és realment el que ens interessa.

Per fer els cops, hem dividit cada cara del cub en 4 quadrats de superfície de $0,01m^2$, que equival a la superfície que ocupa 100 partícules. Els cops s'executaran amb una certa freqüència per diferents parts del pollastre i com que tenim dues mans, els cops aniran de dos en dos. Com ja hem dit, no volem que el centre de masses del cos es desplaci bruscament cada cop que el golpegem. Per evitar que això passi, hem de fixar la posició d'algunes partícules. Creiem adient que les úniques partícules del sistema fixades siguin les dels vèrtex inferiors. També cal mencionar que simularem que el cos està sobre una taula, és a dir, per les partícules que es trobin a la base del cub tindran $\Delta z = 0$.

Per tal de avaluar la temperatura del pollastre, separarem el cub de 20^3 partícules en cubs més petits de $(\frac{20}{5})^2$ partícules i calcularem la temperatura mitjana d'aquestes. Així, tindrem el cub separat per zones i ens serà més fàcil examinar el comportament que si ho féssim comprovant la temperatura associada de cada una de les partícules. Un pollastre es pot considerar cuinat quan la temperatura al seu interior és de 350K. Per tant, el nostre objectiu és que les partícules del zona situada al centre del cub arribi a aquesta temperatura, és a dir, que $dT = T - T_{ambient} = 75 - 21 = 54K$.

4 Presentació de Resultats

4.1 Estimació de la constant elàstica

Trobar el valor de la constant elàstica és fonamental per fer una simulació que s'aproximi a la realitat. Per fer-ho, seguirem el següent procediment:

- 1) Raonar com es comportaria el cub segons el valor la constant.
- 2) Fer una iteració de simulacions variant γ fins que trobem el valor que s'ajusti a la realitat.

El primer que s'ha de fer és avaluar casos extrems: Per una K molt gran (γ petita), la distància entre partícules no variaria, i per tant el cop que li executem al nostre cub tindrà molta repercussió a les partícules del mig. En canvi per un valor de K petit (γ gran), com que les molles es comprimiran molt més, el cop serà absorbit i no tindrà gaire repercussió sobre les partícules del mig. Dit això, la constant ha de ser prou gran per què el cos sigui rígid, però ha de ser prou petita per què la repercussió del cop sigui realista. Fent les simulacions, fetes amb cops de període de 0.5 segons, veiem que la constant ha de tenir un valor de 500 N/m aproximadament. Per comprovar la repercussió del cop, ens fixarem en el centre del cub que, tal com hem dit, per constants elàstiques elevades, la temperatura a l'interior ha de ser més elevada que per a constants elàstiques baixes.

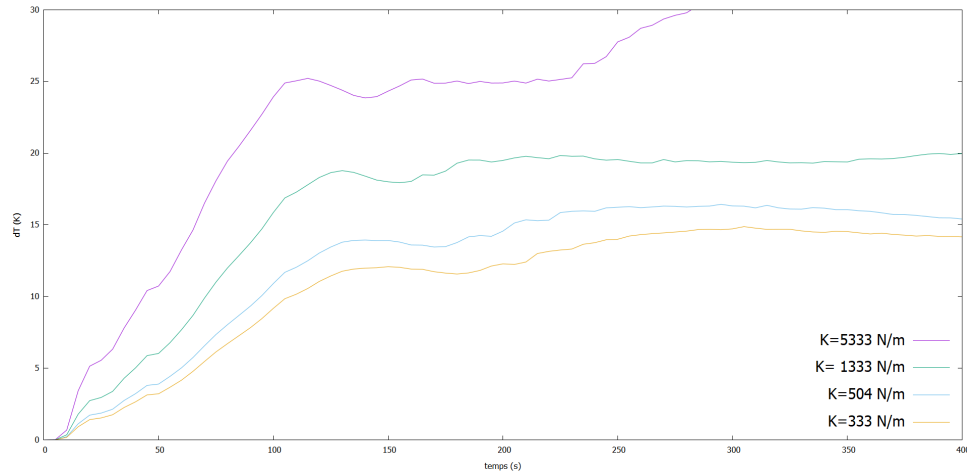


Figura 2: Diferència de temperatura al centre del pollastre en funció del temps per diferents constants elàstiques

La figura 2 compleix les condicions mencionades. Veiem que la temperatura, augmenta ràpidament durant els primers 250 segons i finalment es manté pràcticament constant. A la temperatura a la que arriba el cos és proporcional a la constant elàstica, com esperàvem. Cal destacar que per a $K=5333$ N/m el mallat no és prou petit i per aquesta raó la funció divergeix. Per totes les K a un cert temps més elevat acaben divergint, però un cop ja hem pogut determinar la temperatura constant.

4.2 Determinació de la freqüència

Un cop ja sabem la constant K , podem mirar per quina freqüència s'arriba a més temperatura. En un principi ens podria semblar que per una freqüència més elevada, la temperatura a la que el cos arriba hauria d'augmentar. Però com veiem a la figura 3 no és complex aquesta hipòtesis.

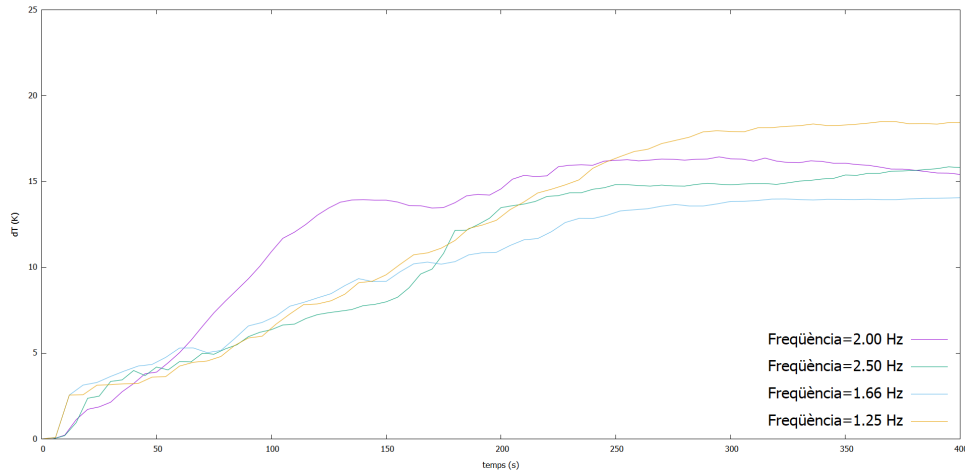


Figura 3: Diferència de temperatura al centre del pollastre en funció del temps per diferents freqüències

Això és degut a que el cop tant pot augmentar la velocitat de les partícules com frenar-les. Per exemple, si $v_x[0][1][2]$ (partícula que es troba en la paret de $x=0$) és negativa, al rebre una velocitat positiva s'haurà frenat. Per tant, l'ideal seria buscar la freqüència de ressonància d'aquestes partícules, però com que és un sistema caòtic la freqüència de ressonància aniria variant per cada partícula i cada temps. Iterant entre freqüències capaces de ser executades per un cos humà s'ha trobat que per 1.25 Hz s'arriba a la temperatura més elevada, $T=39$ K. Tot i que el centre del pollastre no arriba a la temperatura adequada per la seva cocció, els laterals assoleixen temperatures de més de 200 graus ja que són les partícules que estan rebent directament el moment lineal.

5 Conclusió

El principal objectiu d'aquesta simulació era cuinar un pollastre sense eines, a base de cops de puny, un objectiu molt ambiciós i poc probable d'assolir. Tot i això, hem sigut capaços d'establir la constant d'elasticitat del pollastre més realista possible i hem trobat una freqüència de cops de puny per la qual el pollastre pot arribar a assolir una temperatura de 312K. Per a que un pollastre estigui completament cuinat és necessari assolir una temperatura de 350K, per tant ens hem quedat a 38K, podríem dir que ens hem quedat a la meitat del camí per arribar al nostre objectiu. En quan a la nostre simulació, a part de les varies aproximacions, cal comentar que no complim el tercer principi de la termodinàmica, ja que a temperatura ambient les partícules del pollastre està a velocitat 0. El que podríem haver fet per a que es complís aquest principi hauria estat fer que les partícules estiguessin a velocitats aleatòries d'acord amb la temperatura ambient. La limitació més gran del nostre experiment és que el pollastre es quedi quiet quan li donem els cops, dificultant l'estimació de la constant elàstica de la molla i havent de tenir molta cura amb l'execució dels cops. Si no ens hagués molestat que el pollastre deixés de tenir la forma de cub i acabés com una pasta sobre la taula, potser al cap de un cert temps hauríem assolit una temperatura major. Finalment, recomanem no utilitzar aquest mètode per cuinar un pollastre ja que menjar pollastre cuinat només a 315K pot ser perjudicial per la salut.

S'ha adjuntat un gif amb l'animació, utilitzant 6 partícules per costat amb la finalitat que sigui més agradable a la vista i es puguin observar millor els moviments d'aquestes.