Fraktalne obrazy z reaktora chemicznego

Marek BEREZOWSKI

„I think the next century will be the century of complexity" – Stephen Hawking, 2000. Należałoby dodać, że wiek XXI będzie także wiekiem fraktali. Znaleźć je bowiem można nie tylko w chmurach, górach, drzewach czy płatkach śniegu, ale także w reaktorach chemicznych.

W 1980 roku matematyk polskiego pochodzenia, Benoit Mandelbrot, badał strukturę rozwiązań następującego równania rekurencyjnego:

(1) $$z_{k+1} = z_k^2 + c.$$

Założył, że zmienna z i stała c są liczbami zespolonymi, tzn.

(2) $$z = z_R + iz_I, \quad c = c_R + ic_I.$$

W wyniku iteracji Mandelbrot stwierdził, że ciąg $\{z_0, z_1, \ldots\}$ jest zbieżny tylko dla niektórych wartości c i niektórych wartości początkowych z_0. Gdy ciąg był ograniczony, rysował na płaszczyźnie czarny punkt o współrzędnych $(c_R; c_I)$. Gdy ciąg był rozbieżny, rysował punkt o kolorze odpowiadającym liczbie iteracji, po której kolejny jego wyraz przekroczył pewną założoną wartość graniczną. W ten sposób, zupełnie niespodziewanie, uzyskał fascynujące obrazy. Nazwał je fraktalami (łac.: *podzielny, ułamkowy*). Ich strukturę cechuje wysokie samopodobieństwo. Każdy bowiem fragment, odpowiednio powiększony, przypomina całość. Jednym z tych obrazów jest słynny zbiór Mandelbrota, którego zdjęcia znane są praktycznie na całym świecie.

Patrząc na obrazy fraktalne, odnosi się nieodparte wrażenie, że są one odbiciem otaczającej nas rzeczywistości. Uzyskane z obliczeń komputerowych „choinki", „płatki śniegu" czy „chmury" jako żywo przypominają kształty występujące w przyrodzie. Struktury fizyczne mają także formę fraktalną. Fragment kamienia przypomina bowiem swym kształtem całą górę. A jak to jest w technice, dziedzinie wiedzy opartej na mniej lub bardziej złożonych modelach matematycznych?

W niniejszym artykule chcę pokazać, że – stosując metodę Mandelbrota – obrazy fraktalne uzyskuje się także z modeli opisujących konkretne urządzenia techniczne. W tym przypadku chodzi o chemiczny reaktor rurowy, który jest aparatem o stosunkowo prostej konstrukcji. Składa się z rury, do której doprowadzane są reagujące ze sobą strumienie. Rura może być zewnętrznie chłodzona lub grzana lub też pracować w sposób adiabatyczny. Z reguły wypełniona jest ciałem stałym, którym jest katalizator podtrzymujący reakcję (reaktor heterogeniczny). Jeżeli reaktor pozbawiony jest katalizatora (reaktor homogeniczny), przepływający strumień nie napotyka żadnych oporów i, przy znikomym przewodzeniu ciepła, stan ustalony osiągany jest w aparacie praktycznie po czasie równym czasowi przepływu od wlotu do wylotu rury. Z matematycznego punktu widzenia model takiego urządzenia stanowią równania różniczkowe cząstkowe, w których poszukiwanymi zmiennymi są stężenie α i temperatura Θ. Próbując rozwiązać problem numerycznie, dochodzimy do pewnych równań rekurencyjnych. Jeśli przyjmiemy założenie matematyczne, że zmienne stanu nie są liczbami rzeczywistymi, lecz zespolonymi, uzyskamy problem analogiczny do problemu Mandelbrota, z tym że, w odróżnieniu od (1), jest to problem dwuwymiarowy. Z fizykalnego punktu widzenia zespolony model reaktora chemicznego nie ma, oczywiście, uzasadnienia. Stężenie α i temperatura Θ są bowiem, w praktyce, wielkościami rzeczywistymi. Chodziło jednak o to, by stwierdzić, czy operatory (funkcje) ściśle związane z kinetyką procesu, czyli mechanizmem reakcji chemicznej, mogą wygenerować zbiory fraktalne na zmiennych zespolonych. (Ze względu na chaotyczną wrażliwość modeli reaktorów chemicznych, obrazy fraktalne uzyskuje się także dla rzeczywistych wartości stężenia α i temperatury Θ.)

Do obliczeń zastosowano technikę numeryczną podobną do tej, jaką wprowadził Mandelbrot do tworzenia swojego zbioru. Zmieniając kolejno wartości początkowe zmiennej zespolonej $\Theta(1)_0 = \{\Theta_R(1)_0; \Theta_I(1)_0\}$, uzyskano, w rozwiązaniach, ciągi $\{\Theta(1)_0, \Theta(1)_1, \Theta(1)_2, \ldots\}$. Jeżeli dany ciąg był zbieżny, rysowano na płaszczyźnie czerwony punkt o współrzędnych $[\Theta_R(1)_0; \Theta_I(1)_0]$. Jeżeli ciąg był rozbieżny, rysowano punkt o kolorze odpowiadającym liczbie iteracji, po której moduł liczby zespolonej $\Theta(1)_k$, czyli $\sqrt{\Theta_R^2(1)_k + \Theta_I^2(1)_k}$, przekroczył założoną wartość graniczną. Obliczenia te wykazały, że model generuje bardzo złożone i ciekawe struktury geometryczne. Uzyskano zbiory fraktalne. Wybrane obrazy oraz ich powiększenia prezentują rysunki na tylnej stronie okładki. Widać bardzo wyraźnie, że wyodrębnione fragmenty zawierają praktycznie niezliczoną ilość elementów przypominających zbiór podstawowy. Elementy te z kolei zawierają kolejne fragmenty podobne do całości zbioru lub jego wycinków. Można w ten sposób, teoretycznie w nieskończoność, zagłębiać się w uzyskaną strukturę, nigdy nie napotykając jej granicy.

Na zakończenie trzeba dodać, że gdybyśmy rozpatrywali proces heterogeniczny, czyli reaktor wypełniony katalizatorem i uwzględnili przewodzenie ciepła w ciele stałym i strumieniu, uzyskalibyśmy podobne obrazy fraktalne. Obliczenia byłyby jednak o wiele bardziej złożone i czasochłonne.

W konkluzji nasuwa się pytanie. Czy wobec faktu generowania obrazów fraktalnych przez modele matematyczne zwykłych urządzeń technicznych, nie opisują one lub mogą opisywać czegoś więcej, niż tylko te urządzenia?

Patrz także: http://www.pk.edu.pl/~mberez.