Zastosowanie analizy fraktalnej w badaniu produktów mleczarskich

Michał Smoczyński

Katedra Mleczarstwa i Zarządzania Jakością,
Wydział Nauki o Żywności,
Uniwersytet Warmińsko – Mazurski w Olsztynie.

michal.smoczynski@uwm.edu.pl

Geometria fraktalna i związane z nią dyscypliny dają nowe, potężne możliwości badania szerokiej gamy zjawisk fizycznych i chemicznych. Ukazują i pomagają definiować zasady tworzenia tego, co zwykle uważa się za nieregularne i chaotyczne, oraz dają matematyczne narzędzie, dzięki któremu działania takie można opisywać a nawet mierzyć. Zjawisko nieregularności występuje niemal we wszystkich dyscyplinach naukowych, również i w nauce o żywności.

Wprowadzenie – Fraktale i geometria fraktalna

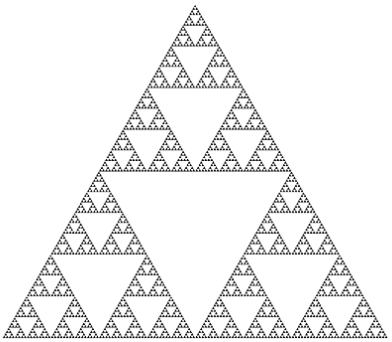
„Chmury nie są sferami, linie brzegowe nie są okręgami, a kora nie jest gładka. Nawet błyskawica nie porusza się po linii prostej. Istnienie tych wzorców wzywa nas do studiowania takich kształtów, które Euklides pozostawia jako „bezkształtne", do badania morfologii amorficznego". Słowa te wypowiedziane przez Benoit B. Mandelbrota oddają najprościej dziedzinę zainteresowania geometrii fraktalnej.

Wiele produktów spożywczych charakteryzuje się nieregularnym kształtem. Badacze żywności, szczególnie wykorzystujący mikroskop świetlny jak i elektronowy, opisywali obserwowane struktury tylko werbalnie, używając nieprecyzyjnych określeń, które często były trudne do klasyfikacji i porównania. Koncepcja fraktalna zaproponowana przez Mandelbrota [5] oferuje nowe, potężne narzędzie do pracy nad szeregiem struktur czy zjawisk, dotychczas uważanych za chaotyczne czy nieuporządkowane. Wymiar fraktalny umożliwia ilościowe porównanie właściwości takich struktur.

Fraktale charakteryzują się następującymi trzema właściwościami: są samopodobne; nie są opisywane wzorem matematycznym, ale zależnościami rekurencyjnymi; ich wymiar nie jest liczbą całkowitą. Obiekt jest nazywany samopodobnym, jeśli można go podzielić na dowolnie małe części, z których każda jest dokładną, zredukowaną kopią wyjściowej struktury. Ważne jest, aby uzyskane małe fragmenty powstawały z całego obiektu poprzez transformację podobieństwa.

Zadanie pn. „Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy" finansowane jest w ramach dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

Klasycznym przykładem obiektu idealnie samopodobnego jest trójkąt Sierpińskiego (Rys. 1). Trójkąt ten powstaje poprzez trzykrotne przekształcenie w swoje podobieństwo w skali 1/2, a następnie umieszczenie powstałych kopii w wierzchołkach początkowego obrazu. Tak powstały obraz podlega identycznym przekształceniom (iteracjom) i proces ten jest powtarzany w nieskończoność. Jeśli następnie powiększymy dowolny mały fragment trójkąta, to zawsze otrzymamy ten sam wyjściowy obraz całości.



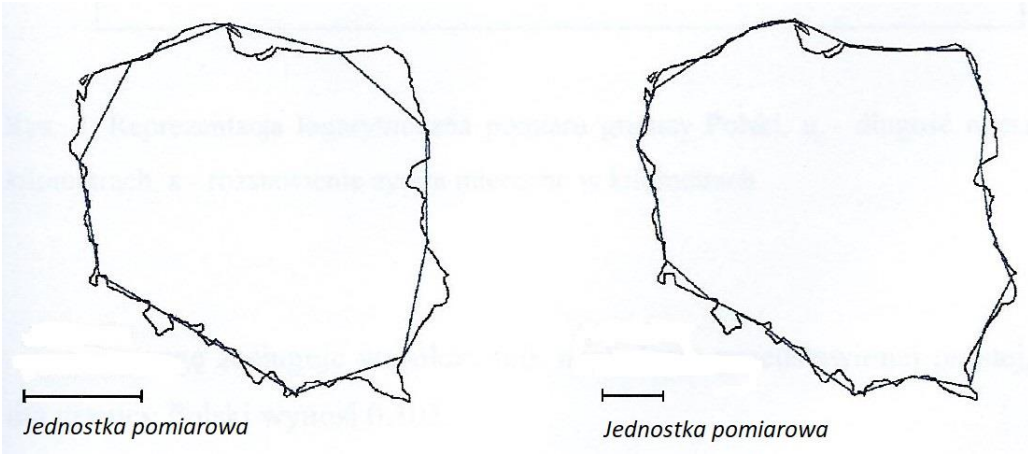
Rys. 1. Trójkąt Sierpińskiego (opracowanie własne)

Nie jest jednak prawdą, że jeśli obiekt jest samopodobny, oznacza że jest fraktalem. Wspólną cechą wszystkich obiektów samopodobnych (fraktali lub nie), jest istnienie relacji między współczynnikiem redukcji (współczynnikiem skali) a liczbą zredukowanych fragmentów uzyskanych z obiektu oryginalnego. Relacja ta jest wyrażona przez poniższą zależność:

$$x = 1/s^D$$

gdzie: s jest współczynnikiem redukcji; x liczbą części, które można uzyskać z obiektu; a D jest wymiarem samopodobieństwa. Współczynniki redukcji dla fraktali (jeśli takie istnieją) są precyzyjnie zdefiniowane i zależą od danej struktury.

Wymiar jest jednym z najważniejszych pojęć w opisach fraktali. Istnieją trzy podstawowe typy wymiarów fraktalnych Mandelbrota [10]: wymiar cyrklowy, wymiar pudełkowy oraz wymiar samopodobieństwa; z których ten ostatni jest najpowszechniej używany. Wyznaczenie wymiaru cyrklowego polega na zastosowaniu różnych jednostek (różnego rozstawienia cyrkla) do pomiaru długości nieregularnej linii. Zmniejszając rozstawienie cyrkla, długość takiej linii o naturze fraktalnej ulega wydłużeniu. Z uzyskanej zależności pomiędzy rozstawieniem cyrkla a uzyskaną długością linii można wyznaczyć wymiar cyrklowy.



Rys. 2. Pomiar długości granicy Polski przy zastosowaniu różnych jednostek pomiarowych (opracowanie własne)

Zadanie pn. „Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy" finansowane jest w ramach dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

Wymiar pudełkowy oznacza się podobnie jak wymiar cyrklowy, tyle że tym razem zlicza się nie kroki cyrkla, lecz oczka siatki (pudełka), które przecinają badaną linię. Przy coraz mniejszej wielkości oczek siatki ich ilość rośnie. Z wykresu logarytmicznego, wyznaczając współczynnik nachylenia prostej, można wyliczyć pudełkowy wymiar fraktalny.

Zastosowanie konkretnej metody obliczania wymiaru fraktalnego jest ograniczone właściwościami badanego obiektu, jak również dostępnymi narzędziami badawczymi. Analiza wymiaru fraktalnego nie zawsze jest jednak prosta. W większości przypadków mamy do czynienia ze złożonymi strukturami, składającymi się z fraktali o różnych wymiarach, a rzeczywistym problemem jest rozłożenie takich „multifraktali" na obiekty elementarne.

Fraktale, wymiar fraktalny i ogólnie geometria fraktalna są używane do charakteryzowania nieuporządkowanych struktur, np. takich jak agregaty koloidalne, jak i w opisie samego procesu agregacji. Takie nieuporządkowane struktury wykazują jednak pewną regularność. Obiekty fraktalne zachowują te same cechy morfologiczne niezależnie od skali. Oznacza to, że każda podjednostka danego agregatu ma takie same cechy morfologiczne, jak cały agregat [4]. W klasycznej geometrii euklidesowej punkt ma wymiar równy 0, linia 1, powierzchnia 2, a przestrzeń 3. W przypadku obiektów fraktalnych, wymiar ten zwany wymiarem fraktalnym, nie jest liczbą całkowitą i teoretycznie może zawierać się w przedziale od 0 do 3. Wskazuje to na kolejną cechę obiektów fraktalnych: częściowe, niecałkowite „wypełnienie" objętości (lub powierzchni czy linii). Fraktale rozpatrywane jako obiekty przestrzenne, często posiadają wymiar w zakresie 1<D<2, co oznacza, że nie „wypełniają" całkowicie nawet przekroju obserwowanej objętości.
W reprezentacji logarytmicznej:

$$\log M = f\ (\log R)$$

zależność pomiędzy masą obiektu fraktalnego a jego wymiarem jest zawsze liniowa, i dlatego można ją wyrazić w prostym równaniu:

$$M \sim R^D$$

gdzie: M to masa obiektu; R jego rozmiar; a D wymiar fraktalny obiektu. Równanie to różni się od zwykłej zależności pomiędzy masą a rozmiarem tylko tym, że współczynnik potęgowy D nie jest ograniczony do liczb całkowitych [2]. Oznacza to, że jeśli agregat ma większy rozmiar, to procentowo zawiera mniej danego materiału. Tym samym jego gęstość maleje, a w jego strukturze pojawiają się coraz większe puste przestrzenie [4].

Jednym z głównych zastosowań jest określenie wymiaru fraktalnego cząstek badanych przy użyciu mikrofotografii, co stwarza możliwość ich ilościowego porównania. Pomimo faktu, że wymiar fraktalny konturu cząstek pyłu może teoretycznie mieścić się w zakresie od 1 do 2, w praktyce spotyka się jedynie obiekty o wymiarach fraktalnych wahających się od 1,05 do 1,36. Wynika to z faktu, że wraz ze wzrostem złożoności konturu obiektu, rośnie liczba miejsc, w których mogą być koncentrowane naprężenia wywołane przez siły zewnętrzne. Prowadzi to z kolei do usunięcia niektórych, bardziej rozwiniętych elementów i wygładzenia konturu cząstek [9].

Zastosowania geometrii fraktalnej w badaniu żywności

W naturze czy w przypadku obiektów naturalnych dość rzadko (o ile w ogóle) można spotkać się ze ścisłym samopodobieństwem. Z reguły mamy do czynienia z obiektami wykazującymi tylko pewne cechy samopodobieństwa i to w ograniczonym zakresie. Przykładem może być kalafior, kwiaty czy główki brokułu. Nie oznacza to, że nie można określić wymiaru fraktalnego, lub że wymiar taki nie jest przydatny. Ten wymiar, zwany „pozornym" lub „naturalnym", charakteryzuje dobrze wszelkie nieregularności kształtu [11].

Zadanie pn. „Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy" finansowane jest w ramach dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

W przypadku produktów suszonych, takich jak kazeiniany, mleko w proszku lub liofilizowana kawa, ich właściwości funkcjonalne (takie jak rozpuszczalność) w dużym stopniu zależą od stopnia rozwinięcia powierzchni, struktury cząstek itp. [1, 8]. Określenie wymiaru fraktalnego mikroskopowych zdjęć takich cząstek, stwarza możliwość ilościowego porównania ich właściwości funkcjonalnych. Jest to prawdopodobnie jedyny sposób by mikrostrukturę opisać liczbami. Przykładem takich badań może być porównanie wymiarów fraktalnych preparatów kazeiny uzyskanych różnymi metodami produkcji [3]. Wyniki wskazały na zróżnicowany stopień rozbudowania powierzchni preparatów w zależności od metody produkcji, co oprócz różnic w składzie chemicznym, może również wpłynąć na ich odmienne właściwości funkcjonalne.

Jednym z istotnych zastosowań geometrii fraktalnej jest opracowanie kilku teoretycznych modeli mechanizmu agregacji cząstek. Najbardziej znane są dwa modele: „diffusion limited particle – cluster model" (ograniczony dyfuzją model cząstka – grono) oraz „cluster – cluster aggregation model" (model agregacji grono – grono) [7, 15]. Model cząstka – grono zakłada, że proces agregacji zaczyna się od pojedynczej, nieruchomej cząstki. Następnie w losowo wybranym miejscu pojawia się kolejna cząstka i podąża do pierwszej cząstki, gdzie łączą się nieodwracalnie. Dalej proces powtarza się dla kolejnych cząstek. Uzyskany produkt jest stosunkowo „upakowany" w przestrzeni, ponieważ uzyskany wymiar fraktalny jest dość wysoki i wynosi 2.5. W przypadku modelu grono – grono, identyczne cząstki poruszają się losowo w określonej przestrzeni, a każde zderzenie dwóch cząstek jest nieodwracalne i powoduje powstanie dimeru. Dimer może łączyć się z kolejnymi cząstkami, dimerami lub większymi agregatami. Produkt takiej agregacji jest bardziej „otwarty" w przestrzeni, a wymiar fraktalny wynosi 1.75.

Smoczyński i Baranowska [12] wykorzystali analizę fraktalną do badania zmian w mikrostrukturze jogurtów podczas ich przechowywania. Do produkcji jogurtów wykorzystano szczepy bakteryjne produkujące egzopolisacharydy. Uzyskane wymiary fraktalne umożliwiły wykrycie różnic w mikrostrukturze badanych jogurtów w trakcie ich przechowywania oraz wskazały na istnienie relacji pomiędzy mikrostrukturą (opisaną wartościami wymiarów fraktalnych) a wielkością synerezy w jogurtach. Torres i in. [14] również zastosowali fraktalną analizę obrazu do charakterystyki niskotłuszczowych jogurtów, wyprodukowanych z wykorzystaniem mikropartykułowanych białek serwatkowych. Dodatek ten wpłynął na mikrostrukturę, zwiększając zakres jej samopodobieństwa, co skutkowało m.in. obniżeniem synerezy.

Analiza fraktalna może być też stosowana do charakterystyki fraktalnej natury struktury materii w stanie krystalicznym. Marangoni [6] analizował fraktalną strukturę kryształów tłuszczu mlekowego. Wykazał on dobrą zależność między właściwościami reologicznymi a analizą mikroskopową mikrostruktury. Staniewski i in. [13] badali możliwość wykorzystania analizy fraktalnej do określenia wpływu presuryzacji bezwodnego tłuszczu mlekowego na proces jego krystalizacji. Wykazano różnice w mikrostrukturze badanych próbek tłuszczu w zależności od zastosowanych warunków presuryzacji.

Przedstawione przykłady wskazują na możliwe różnorodne zastosowanie analizy fraktalnej w badaniu żywności. Metoda ta umożliwia nowe podejście do badania zależności między mikrostrukturą produktów a ich właściwościami funkcjonalnymi. Biorąc pod uwagę znaczenie właściwości powierzchniowych i mikrostruktury składników żywności, uzyskanie nowego narzędzia do opisu tych struktur, a zarazem świadomość, że dotychczas stosowany model był fałszywy, może spowodować lepsze zrozumienie zjawisk zachodzących np. na powierzchni produktów żywnościowych.

Literatura

1. Andersson I.M., Bergenstahl B., Millqvist-Fureby A., Alexander M., Paulsson M., Glantz M. (2021). Particle morphology and rehydration properties of spray-dried microgels and fractal aggregates with varying fractionsof native milk serum proteins. International Dairy Journal, 112, 104862.

Zadanie pn. „Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy" finansowane jest w ramach dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

2. Da-Hong Li, Ganczarczyk J. (1989). Fractal geometry of particle aggregates generated in water and wastewater treatment processes. Environmental Science and Technology, 23, 1385-1389.
3. Dziuba J., Babuchowski A., Smoczyński M., Śmietana Z. (1999). Fractal analysis of caseinate structure. International Dairy Journal, 9, 287-292.
4. Florio B.J., Fawell P.D, Small M. (2019). The use of the perimeter-area method to calculate the fractal dimension of aggregates. Powder Technology, 343, 551-559.
5. Mandelbrot B.B. (1982). The fractal geometry of nature. W.H. Freeman and Co., New York, USA.
6. Marangoni A.G. (2002). The nature of fractality in fat crystal networks. Trends in Food Science & Technology 13, 37–47.
7. Meakin P. (1983). Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion – limited aggregation. Physical Review Letters, 51, 1119-1122.
8. Niamnuy C., Devahastin S., Soponronnarit S. (2014). Some recent advances in microstructural modification and monitoring of foods during drying: A review. Journal of Food Engineering, 123, 148-156.
9. Papanicolaou A.N., Tsakiris A.G., Strom K.B. (2012). The use of fractals to quantify the morphology of cluster microforms. Geomorphology, 139-140, 91-108.
10. Peitgen H.O., Jurgens H., Saupe D. (1995). Granice chaosu - fraktale. PWN, Warszawa, Polska.
11. Pippa N., Dokoumetzidis A., Demetzos C., Macheras P. (2013). On the ubiquitous presence of fractals and fractal concepts in pharmaceutical sciences: A review. International Journal of Pharmaceutics, 456, 340-352.
12. Smoczyński M., Baranowska M. (2014). A fractal approach to microstructural changes during the storage of yoghurts prepared with starter cultures producing exopolysaccharides. Journal of Texture Analysis, 45(2), 121-129.
13. Staniewski B., Smoczyński M., Staniewska K., Baranowska M., Kiełczewska K., Żulewska J. (2014). Assessment of changes in crystallization properties of pressurized milk fat. Journal of Dairy Science, 98, 2129–2137.
14. Torres I.C., Rubio J.M.A., Ipsen R. (2012). Using fractal image analysis to characterize microstructure of low-fat stirred yoghurt manufactured with microparticulated whey protein. Journal of Food Engineering, 109, 721-729.
15. Witten T.A., Sander L.M. (1981). Diffusion – limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. Physical Review Letters, 47, 1400-1403.

Zadanie pn. „Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy" finansowane jest w ramach dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego.