

Helmar Schubert

## *Kausalität in der Verfahrenstechnik, dargestellt am Beispiel der Bio- und Lebensmittelverfahrenstechnik*

### *1 Einführung*

Verfahrenstechnik (process engineering, chemical engineering) ist Stoffumwandlungstechnik und behandelt technische Prozesse, in denen Stoffe nach Art, Eigenschaft und/oder Zusammensetzung verändert und für den gewünschten Gebrauch gesteuert werden. Einige Beispiele sind die Herstellung von Kraftstoff und Kunststoffen aus fossilen oder nachwachsenden Rohstoffen, von (funktionellen) Lebensmitteln aus pflanzlichen oder tierischen Rohprodukten sowie von pharmazeutischen Wirkstoffen aus den Ausgangsstoffen. Für alle verarbeiteten Stoffe ist Verfahrenstechnik erforderlich. Darüber hinaus wird diese Disziplin in vielen anderen Fachbereichen benötigt, beispielsweise um Stoffänderungen wie bei der Lebensmittelfrischhaltung zu vermeiden, um Energie bereitzustellen oder um Anlagen zu planen und zu bauen.

Aus wissenschaftlicher Sicht ist Verfahrenstechnik die Ingenieurwissenschaft der Stoffumwandlung, die im Hinblick auf die gewünschten Materialeigenschaften auch als Produktgestaltung (product engineering) bezeichnet wird. Wie alle Technikwissenschaften nutzt die Verfahrenstechnik die Naturwissenschaften und verwendet ihre Werkzeuge. In einigen Bereichen wie der Thermodynamik hat sie auch maßgeblich an der Weiterentwicklung naturwissenschaftlicher Grundlagen mitgewirkt. Verfahrenstechnik ist auf interdisziplinäre Zusammenarbeit angewiesen. Neben den Naturwissenschaften, den Materialwissenschaften und allen weiteren Technikwissenschaften sind Kooperationen mit den Wirtschafts-, Sozial- und Rechtswissenschaften nötig, um beispielsweise die Akzeptanz von Produkten sowie die Rahmenbedingungen beim Bau und Betrieb von Anlagen berücksichtigen zu können.

Neben der klassischen Einteilung nach den vorherrschenden physikalischen Vorgängen der Grundoperationen in chemische, mechanische und thermische Verfahrenstechnik wird das Fachgebiet auch in Bereiche eingeteilt, die ein engeres Gebiet oder Stoffgruppen umfassen. Beispiele hierfür sind Bioverfahrenstechnik, Grenzflächenverfahrenstechnik,

Energieverfahrenstechnik, Kernverfahrenstechnik und Lebensmittelverfahrenstechnik. Die Vielfalt verdeutlicht die Schwierigkeit, das Fach Außenstehenden darzustellen.

Die Vielfalt ist auch eine der Ursachen für das Problem, die Kausalität in der Verfahrenstechnik in allgemeiner Form zu behandeln. Grundsätzlich kann man die Hypothese aufstellen, dass sich die Kausalität in der Verfahrenstechnik nicht von derjenigen in den übrigen technischen Wissenschaften unterscheidet. Sehr hilfreich ist diese Hypothese allerdings nicht, denn wer könnte für die gesamte Technik diese Frage mit ausreichender Fachkenntnis behandeln? Zweckmäßiger wird es sein, die Kausalität aus der Sicht unterschiedlicher technischer Fachdisziplinen zu diskutieren und an Hand von Beispielen zu erläutern, aus denen auch die unterschiedlichen Vorgehensweisen deutlich werden.

## *2 Kausalität, erläutert an einem einfachen Beispiel*

Kausalität ist die ursächliche Verknüpfung mehrerer Ereignisse, das heißt es existiert eine Beziehung zwischen Ursache und Wirkung. Ein einfaches Beispiel ist die Zerkleinerung grober, zum Sprödebruch neigender Partikel zwischen zwei Walzen. Beim Einzug in den Walzenspalt wird das betrachtete Partikel mechanisch beansprucht, dadurch verformt und ein Spannungsfeld aufgebaut. Bei Erreichen der Bruchbedingung zerbricht das Partikel in einzelne Bruchstücke, die selbst wieder beansprucht und weiter zerkleinert werden können. Das Überschreiten der Bruchlast ist also die Ursache für die Zerkleinerung, es besteht daher eine kausale Verbindung zwischen der angelegten Last, der Bruchbedingung und der resultierenden Zerkleinerung. Vereinfacht ausgedrückt ist die angelegte Bruchbeanspruchung die Ursache für die Zerkleinerung. Diese Kausalität ist bei einem funktionstüchtigen Walzenstuhl zutreffend, liefert jedoch nur eine qualitative Aussage. Eine quantitative Aussage wäre erst aus der Angabe der Partikelgröße bzw. Partikelgrößenverteilung der Bruchstücke möglich, denn die Eigenschaften des zerkleinerten Materials werden in der Regel maßgeblich durch ihre Partikelgröße bestimmt. So entscheidet die Partikelgröße bei Farbpigmenten über die Farbintensität, bei Kakao über den Geschmack von Schokolade und bei vielen Wirkstoffen über die Bioverfügbarkeit. Eine kausale Verknüpfung zwischen der zerkleinerungswirksamen Belastung eines Partikels und dem Zerkleinerungsergebnis, also der resultierenden Größenverteilung der Bruchstücke, ist zumindest ungewiss und auf Grund der Erfahrung und wegen des im Allgemeinen nicht linearen dynamischen Systems nicht zu erwarten. Selbst wenn es eine derartige Verknüpfung gäbe und eine exakt definierte Bruchbelastung aufgebracht werden könnte, wäre das dazu erforderliche Wissen nach heutigen Erkenntnissen unerreichbar. Eine genaue Vorhersage der Bruchstück-

Größenverteilung ist daher für technisch relevante Partikel zumindest heute unrealistisch. In der Zerkleinerungstechnik werden unter Verwendung von Stoffdaten Modelle zur Abschätzung des Zerkleinerungsergebnisses verwendet (Schönert, 2004). Mittels populationsdynamischer Modellierung kann der zeitliche Fortschritt der Zerkleinerung in einer Mahlanlage abgeschätzt werden.

Das Beispiel zeigt, dass es zwar eine kausale Verbindung zwischen der mechanischen Beanspruchung und dem Bruch einer Feststoffpartikel gibt (qualitative Aussage), das Zerkleinerungsergebnis, also die Größenverteilung der Bruchstücke (quantitative Aussage), jedoch nicht genau vorhergesagt werden kann. Die grundlegende Erkenntnis von Ursache und Wirkung zunächst nur als qualitative Aussage ist jedoch entscheidend für eine spätere sinnvolle Näherungslösung. Die Feststellung einer beliebigen Korrelation zwischen Messgrößen ist für einen brauchbaren Näherungsansatz nicht ausreichend, da die Messwerte auch zufällig korreliert sein können.

Das genannte Beispiel ist typisch für viele Fragestellungen in der Verfahrenstechnik. Man muss zunächst die für ein Problem kausalen Einflussgrößen erfassen und kann dann einen Bezug zum Ergebnis herstellen. Hierzu stehen viele Methoden zur Verfügung. Man kann beispielsweise rein empirische oder probabilistische Modelle einsetzen oder Modelle verwenden, die auf physikochemischen Grundlagen aufbauen und Annahmen und Vereinfachungen enthalten. Eine weitere Möglichkeit besteht in der populationsdynamischen Modellierung. In der Regel sind Experimente nötig, um berechnete Werte an die Wirklichkeit anpassen und damit das Ergebnis beschreiben sowie Vorhersagen treffen zu können. Um die Zahl der Experimente möglichst gering zu halten, haben sich dimensionslose Kennzahlen bewährt, die man aus einer Dimensionsanalyse gewinnen kann. Derartige Ähnlichkeits-Kennzahlen sind sehr nützliche Werkzeuge und haben sich für viele Fragen des Scale-up und Scale-down bewährt. Da wegen der meist komplexen Zusammenhänge fast nie eine vollständige Ähnlichkeit erreichbar ist und bei Modellen Annahmen sowie Vereinfachungen nötig sind, verbleibt eine Unsicherheit. Diese Unsicherheit ist die Folge einer nicht bestehenden oder nicht quantitativ beschreibbaren Kausalität.

Die nach dem jeweiligen Stand der Erkenntnis nicht vermeidbare Unsicherheit ist den Nichtfachleuten selten bewusst. Wenn beispielsweise ein Produkt als steril bezeichnet wird, erwartet der Verbraucher, dass darin alle Mikroorganismen inaktiviert bzw. abgetötet sind. Wie ein späteres Beispiel zeigen wird, ist diese Bedingung nach heutigem Wissensstand nicht erfüllbar. Ein Restrisiko bleibt bestehen, das die Verbraucher zu tragen haben. Es ist Aufgabe der Wissenschaft, diese Problematik offen zu legen und der Öffentlichkeit bewusst zu machen.

### 3 Weitere Beispiele

#### 3.1 Herstellen von Emulsionen durch Tropfenaufbruch

Das genannte Beispiel der Zerkleinerung soll weiter verfolgt werden. Zur Vereinfachung wird die Tropfenzerkleinerung durch eine umgebende Flüssigkeit betrachtet. Da sich nach dem Tropfenaufbruch stets wieder Kugeln bilden, entfällt als weiterer Parameter der bei Feststoffen notwendige Formeinfluss der Bruchstücke. Die Tropfenzerkleinerung ist für viele Verfahren zur Herstellung von Emulsionen notwendig. Emulsionen sind disperse Mehrphasensysteme, die aus mindestens zwei ineinander nahezu unlöslichen Flüssigkeiten bestehen. Bekanntlich ist Milch eine Öl-in-Wasser(O/W)- und Butter eine Wasser-in-Öl(W/O)-Emulsion. Meist ist es das Ziel des Emulgierens, möglichst kleine Tropfen mit geringem Energieeintrag so herzustellen, dass sich die gewünschten Eigenschaften einstellen. Besonders interessant sind Tropfengrößen unterhalb eines Mikrometers, da dann ein Aufrahmen (O/W) oder Absinken (W/O) der Tropfen vermieden wird. Für eine gute Bioverfügbarkeit schwerlöslicher Wirkstoffe sind Tropfen gewünscht, die noch eine Größenordnung kleiner sind. Es handelt sich dann um Nanoemulsionen.

Theoretisch lässt sich unter bestimmten Vereinfachungen zeigen (vgl. Schubert, 2005), dass die maximale Tropfengröße  $d_{\max}$  durch die örtliche Leistungsdichte  $P_v$  (dissipierte Leistung pro Volumen) festgelegt ist und durch die Beziehung

$$d_{\max} \propto P_v^{-n_1} \quad (1)$$

beschrieben werden kann. Bei kontinuierlich betriebenen Emulgieranlagen wurde experimentell

$$d_{\max} \propto t_v^{-n_2} \quad (2)$$

gefunden, wobei  $t_v$  die mittlere Verweilzeit während der Beanspruchung durch  $P_v$  ist. Mit der aus Experimenten ermittelten Näherung  $n_1 \approx n_2 \approx n$ , der mittleren Energiedichte  $E_v = P_v \cdot t_v$  und noch zwei Voraussetzungen erhält man (Karbstein, 1994)

$$d_{\max} \propto E_v^{-r} \quad (3)$$

Im Gegensatz zu  $P_v$  und  $t_v$  ist die Energiedichte wegen  $E_v = P/\dot{V}$  einer einfachen Messung zugänglich, wobei  $P$  die eingetragene Leistung und  $\dot{V}$  der Volumenstrom der Emulsion bedeuten. Die Beziehung (3) hat sich für viele Anwendungen wie für die Auslegung und Regelung von Emulgieranlagen bewährt, auch wenn es sich nur um eine Näherung

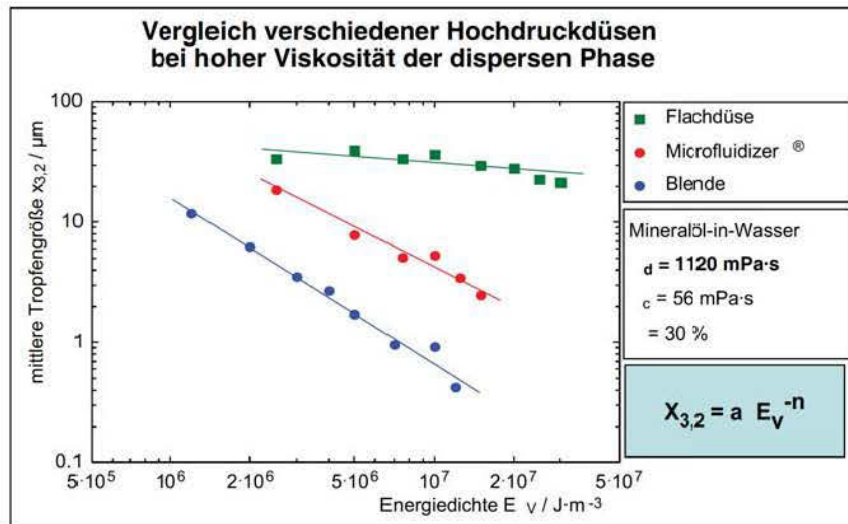


Abbildung 1

Anwendung des Energiedichtekonzepts für das Emulgieren mittels eines Hochdruckhomogenisators (Stang, 1998);  $x_{3,2}$  ist der Sauterdurchmesser der Tropfengrößenverteilung

handelt. Abbildung 1 zeigt als Beispiel die Nützlichkeit des Energiedichtekonzepts für den Vergleich unterschiedlicher Düsen bei Hochdruckhomogenisatoren. Da die Exponenten in (1) und (2) nicht genau übereinstimmen, besteht keine kausale Verknüpfung zwischen  $d_{max}$  und  $E_v$ . Vermutlich ist es daher bisher nicht gelungen, auf Basis der Beziehung (3) eine brauchbare Ähnlichkeitskennzahl zu entwickeln.

Beim Emulgieren müssen die neu gebildeten Tropfen gegen Koaleszenz stabilisiert werden. Durch geeignete grenzflächenaktive Substanzen, den Emulgatoren, kann man die Tropfenkoaleszenz gering halten und mitunter sogar vermeiden (vgl. Schubert, 2005). Durch spezielle Experimente ist es kürzlich gelungen, die Zerkleinerung und die anschließende Koaleszenz getrennt voneinander zu untersuchen (Kempa, Schuchmann & Schubert, 2006). Damit konnte die Brauchbarkeit der Beziehung (3), die nur den Zerkleinerungseinfluss berücksichtigt, bestätigt werden.

Das Beispiel gehört zu den seltenen Fällen in der Verfahrenstechnik, bei denen sich auch ohne kausale Verknüpfung brauchbare Näherungen bewährt haben. Die Beziehung (3), die auch erfolgreich für die Feststoffzerkleinerung, beim Gaseintrag in Flüssigkeiten und für das Schäumen eingesetzt wird, gilt jedoch nur näherungsweise und nur in einem Gültigkeitsbereich, der zuvor für den jeweiligen Anwendungsfall ermittelt werden muss.

### 3.2 Inaktivieren von Mikroorganismen für das Sterilisieren und Pasteurisieren

Viele Produkte wie Lebensmittel, Pharmazeutika, Kosmetika, Implantate sowie Geräte und Apparate in Medizin und Biotechnik müssen sterilisiert oder pasteurisiert werden. Beim Sterilisieren sollten Prionen, alle lebensfähigen Formen von Mikroorganismen und alle unerwünschten Enzyme inaktiviert werden. Beim Pasteurisieren beschränkt man sich auf das Inaktivieren pathogener und der meisten übrigen Mikroorganismen. Im Folgenden werden zur Vereinfachung nur Mikroorganismen betrachtet und als Beispiel ihre Abtötung durch Hitzeeinwirkung gewählt. Die Überlegungen sind jedoch auch auf andere Inaktivierungsmethoden wie den Einsatz ionisierender Strahlen und extrem hoher Drücke übertragbar. Da es in der Praxis nicht gelingt, alle Mikroorganismen vollständig zu inaktivieren, überleben einige Keime, die ein Restrisiko bedeuten. Hinzu kommt, dass durch die Hitzeeinwirkung die Produkte geschädigt werden können, sodass ein Kompromiss zwischen Sterilität und Produktschädigung, also eine Optimierung, im Allgemeinen notwendig ist. Um das Restrisiko bzw. die gewünschte Optimierung berechnen zu können, muss der Anteil der bei bestimmten Inaktivierungsbedingungen noch überlebenden Mikroorganismen vorhergesagt werden. Zur besseren Anschauung wird von einer jeweils konstanten Inaktivierungstemperatur ausgegangen. Die Berücksichtigung einer zeit- und ortsabhängigen Temperaturverteilung im Produkt ist jedoch kein grundsätzliches Problem, der Rechenaufwand kann jedoch erheblich sein.

Nach dem *klassischen, heute üblichen* Ansatz wird die Überlebenskurve mit dem kinetischen Modell einer chemischen Reaktion 1. Ordnung beschrieben, das heißt die Änderung der Zahl  $N$  der Mikroorganismen mit der Zeit  $t$  ist proportional zu  $N$ , also  $dN/dt \propto N$ . Daraus folgt

$$\log S(t) = \log N(t)/N_0 = -k(T) \cdot t \quad (4)$$

Hierin bedeuten  $S$  den Überlebensanteil (survival ratio),  $N_0$  die Zahl der Mikroorganismen zur Zeit  $t = 0$  und  $k(T)$  die Inaktivierungskonstante nach Arrhenius bei einer konstanten Temperatur  $T$ .

Gleichung (4) besitzt viele Vorteile, da es sich um einen selbstähnlichen, im halblogarithmischen Maßstab linearen Ansatz handelt, der sehr einfach zu handhaben und häufig brauchbar ist. So erhält man beispielsweise für die Optimierung der Qualität sterilisierter Lebensmittel eine möglichst hohe Temperatur bei möglichst kurzer Zeit.

Ein schwerwiegender Nachteil des klassischen Ansatzes ist die Tatsache, dass das Modell im Gegensatz zur chemischen Reaktionskinetik nicht auf Ursache und Wirkung beruht. Dem Modell liegt also für die Vorhersage des Überlebensanteils von Mikroorganis-

men keine Kausalität zu Grunde. Das Modell wird nur damit begründet, dass Messwerte häufig zufrieden stellend mit Gleichung (4) beschrieben werden können. Neuere Messungen bestätigen jedoch diesen experimentellen Befund in vielen Fällen nicht (Pardey, 2007).

Es ist erstaunlich, dass trotz der genannten Mängel sterilisierte Produkte weitgehend sicher sind. Dies liegt hauptsächlich daran, dass man extreme, experimentell nicht nachprüfbar Forderungen wie  $S \leq -10^{-12}$  für besonders gefährliche Mikroorganismen stellt und auf Grund von langjährigen Erfahrungen und der fortlaufenden Produktprüfung Sterilisierbedingungen einhält, die eine hohe Sicherheit der Produkte wahrscheinlich machen. Der klassische Ansatz ist jedoch in vielen Fällen nicht brauchbar, um das Restrisiko abschätzen zu können. Erschwerend kommt hinzu, dass zuverlässige Messwerte im Allgemeinen nicht mehr für kleinere Überlebensanteile als  $-10^{-5}$  bis  $-10^{-6}$  möglich sind, also eine Extrapolation der ohnehin unsicheren Gleichung (4) nötig ist.

Auf die Mängel des klassischen Modells wird in der Fachliteratur seit über zehn Jahren hingewiesen. Als neues Modell wurde ein Ansatz vorgeschlagen, dem eine vitalistische Vorstellung zu Grunde liegt (vgl. Peleg & Penchina, 2000). Ausgangspunkt ist die begründbare Beobachtung, dass sich Mikroorganismen unter einem (Hitze-)Stress nicht alle gleich verhalten, sondern durch eine Verteilung individueller Eigenschaften charakterisiert werden können, die zu einer Resistenzverteilung führt. Das klassische Modell unterstellt, dass alle artgleichen Keime einer Population bei gleicher Vorgeschichte dieselbe (Hitze-)Resistenz besitzen. Einfache Messungen widerlegen die Gültigkeit dieser Annahme (Pardey, 2007).

Nach dem *vitalistischen Modell* kann man unter der Voraussetzung einer sehr großen Zahl von Mikroorganismen aus der Resistenzverteilungsdichte

$$R(t) = -dS(t)/dt \quad (5)$$

bei konstantem (Hitze-)Stress, das heißt hier bei konstanter Temperatur, direkt auf den jeweiligen Überlebensanteil  $S(t) = N(t)/N_0$  der Mikroorganismen schließen. Der große Vorteil dieses Modells liegt darin, dass es auf Kausalität beruht: Ein bestimmter, zunächst als konstant angenommener (Hitze-)Stress ist die Ursache für die auf Basis der Resistenzverteilung nach Gleichung (5) berechneten Überlebenskurve. Ein weiterer Vorteil des Modells ist die Beobachtung, dass sich damit alle bisherigen Messungen gut beschreiben lassen und das klassische Modell darin als Sonderfall enthalten ist (Pardey, 2007; Peleg, 2006). Ein Beispiel zeigt Abbildung 2. Nach dem klassischen Modell müssten sich bei der gewählten halblogarithmischen Auftragung Geraden ergeben, mit denen jedoch die Messpunkte nicht sinnvoll beschrieben werden können.

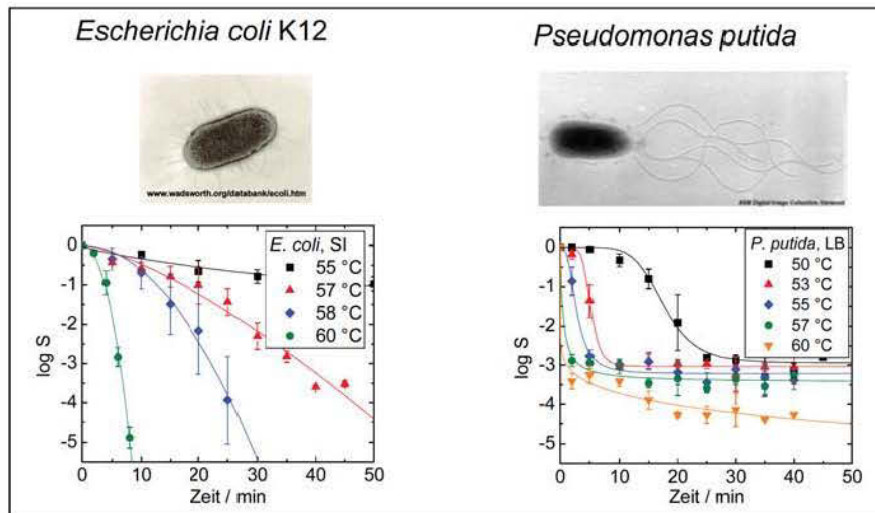


Abbildung 2

Inaktivierungsverhalten unterschiedlicher Mikroorganismen. Für *Escherichia coli* K12 ergeben sich „Schulterkurven“, bei *Pseudomonas putida* erhält man sigmoide Kurvenverläufe (Pardey, 2007)

Nachteile des vitalistischen Modells sind das nicht-lineare, im Allgemeinen auch nicht-selbstähnliche Verhalten und die Notwendigkeit, geeignete Anpassungen zur Beschreibung der Resistenzverteilungen zu entwickeln. Wie man direkt aus Gleichung (5) erkennt, kann es bei komplizierten, mehrdimensionalen Resistenzverteilungen mathematisch sehr aufwendig sein, die Überlebensrate von Mikroorganismen bei nicht konstanten Sterilisierungsbedingungen, zum Beispiel bei nicht konstanter Temperatur, zu beschreiben. Durch Rechenprogramme, die derzeit erarbeitet werden, wird dieser Nachteil zukünftig an Bedeutung verlieren. Ein weiterer Nachteil sind die erforderlichen umfangreichen, neuen Messungen zur Inaktivierungskinetik von Mikroorganismen. Schließlich ist zu erwähnen, dass das neue Modell besonders wegen des Umgangs mit mehrdimensionalen Verteilungen schwer zu vermitteln ist und bisher noch keine, beispielsweise von der FDA (U.S. Food and Drug Administration) anerkannte Methode ist.

Das Beispiel lehrt, dass Modelle ohne kausalen Hintergrund problematisch sind. Man kann damit vielleicht Messwerte anpassen und beschreiben, aber keine zuverlässigen Aussagen außerhalb des Messbereiches treffen. Es sind keine Vorhersagen möglich, die eine Extrapolation der gemessenen Kurve bei gleichzeitiger Angabe einer Genauigkeit der Vorhersage erfordert.



### 3.3 Funktionelle Lebensmittel

Von Funktionellen Lebensmitteln erwartet man einen gesundheitlichen Zusatznutzen, das heißt sie sollen gegen Krankheiten vorbeugen. So sollen beispielsweise

- Probiotika als lebende Mikroorganismen positiv auf die Darmflora wirken,
- Präbiotika als Ballaststoffe die Darmflora unterstützen und
- Sekundäre Pflanzenstoffe gegen Krebs, Herz-Kreislauf-Erkrankungen und Altersblindheit vorbeugen.

Bei den Sekundären Pflanzenstoffen stehen derzeit besonders Sterole im Blickpunkt, die durch Verringerung der Cholesterolaufnahme gegen Herz-Kreislauf-Erkrankungen vorbeugen können (statt Cholesterol war früher der Begriff Cholesterin gebräuchlich).

Es gibt viele Anhaltspunkte für den gesundheitlichen Zusatznutzen einzelner Inhaltsstoffe in Lebensmitteln. Trotz vieler Studien wurde jedoch – vielleicht mit Ausnahme der Sterole – bis heute noch kein kausaler Zusammenhang zwischen einzelnen Stoffen in Funktionellen Lebensmitteln und dem gesundheitlichen Zusatznutzen zweifelsfrei nachgewiesen. Der Nachweis ist wegen des komplexen Systems und der aufwendigen Untersuchungen schwierig. Im Hinblick auf Humanstudien sind Einschränkungen zu beachten; für epidemiologische Studien ist ein hoher Zeitaufwand nötig. Hinzu kommt, dass man mit verfahrenstechnischen Methoden erst kürzlich die in Frage kommenden Sekundären Pflanzenstoffe, die meist schlecht bioverfügbar sind, in eine vom Menschen aufnehmbare Form überführen kann (Ax, 2004; Engel und Schubert, 2006). Erst mit Inhaltsstoffen, die auf reproduzierbare Weise in eine bioverfügbare Form gebracht wurden, sind zielführende Studien möglich.

Auch ohne Nachweis eines gesundheitlichen Nutzens, also ohne ausreichende Kenntnis von Ursache und Wirkung, werden Funktionelle Lebensmittel bzw. Nahrungs-Ergänzungsmittel zunehmend nachgefragt und sind offensichtlich ein gutes Geschäft.

### 3.5 Erwärmung von Lebensmitteln mit Mikrowellen

Mikrowellen sind elektromagnetische Wellen mit einer Frequenz von 300 MHz bis 300 GHz. Ihre Leistung dissipiert in dielektrischen Stoffen wie Lebensmitteln und führt daher zu einer schnellen Erwärmung im Innern, da der bei konventioneller Erhitzung zeitaufwendige Wärmetransport von außen nach innen weitgehend entfällt. Haushaltsübliche Mikrowellenöfen, die inzwischen weit verbreitet sind, arbeiten mit einer Frequenz von 2,45 GHz. Ziel der Mikrowellenerwärmung ist die möglichst gleichförmige Erwärmung des Lebensmittels. Ideal wäre eine örtlich konstante Temperatur während der gesamten Erwärmung. In der Praxis ist man heute weit von diesem Ideal entfernt. Auf Grund von inhomogenen

elektrischen Feldern im Innern der zu erheizenden Lebensmittel und wegen ihrer örtlich unterschiedlichen dielektrischen Eigenschaften stellen sich lokal unterschiedliche Temperaturen ein. Zu hohe örtliche Temperaturen (hot spots) schädigen das Lebensmittel, zu niedrige Temperaturen (cold spots) führen zu nicht ausreichenden Bedingungen für das Inaktivieren von Mikroorganismen. Örtlich unterschiedliche Temperaturen im Lebensmittel verursachen einen meist unerwünschten Stofftransport. Für die Entwicklung mikrowellengeeigneter Lebensmittel bzw. Fertiggerichte, für die mögliche Regelung eines Mikrowellenofens und für die industrielle Anwendung von Mikrowellen zum Pasteurisieren und Sterilisieren ist die Kenntnis der örtlichen und zeitlichen Temperaturverteilung im Innern der Produkte erforderlich (vgl. Schubert & Regier, 2005). Im Folgenden wird unter dem Blickwinkel der Kausalität dargestellt, wie diese Temperaturverteilung während einer Mikrowellen-Behandlung vorhergesagt werden kann. Einzelheiten enthält eine Dissertation (Knörzer, 2006).

Es besteht eine Kausalität zwischen einem äußeren Mikrowellenfeld und der im Innern eines beliebigen Dielektrikums dissipierten, örtlichen und zeitlichen Leistungsdichteverteilung  $P_v$ . Mit Hilfe der Maxwell'schen Gleichungen und von drei Materialgleichungen kann dieser Zusammenhang exakt beschrieben werden, da es sich um ein lineares System handelt. Lediglich bei extrem hohen elektrischen Feldern, die jedoch für die vorliegende Fragestellung nicht relevant sind, müssen bei den Materialgleichungen Nichtlinearitäten berücksichtigt werden, die letztlich Näherungslösungen erfordern. Für die exakte Berechnung der Leistungsdichteverteilung kann auf kommerzielle Rechenprogramme zurückgegriffen werden; bei kompliziert zusammengesetzten Lebensmitteln sind leistungsstarke Rechner erforderlich.

Durch Kopplung von Elektromagnetismus mit bewährten Modellen des Wärme- und Stofftransports kann die örtliche und zeitliche Temperaturverteilung im Lebensmittel mittels Simulation berechnet werden (Knörzer, Regier & Schubert, 2005a). Die Modelle liefern zwar keine exakten Lösungen, sie sind jedoch langjährig erprobt, vielfach geprüft und gehören zu den etablierten Grundoperationen der Verfahrenstechnik. Für die vorliegende Fragestellung sind die Näherungen völlig ausreichend. Als Ergebnis der Simulation erhält man die örtliche und zeitliche Verteilung der Temperatur im Innern eines beliebig geformten und beliebig großen Lebensmittels, das abhängig vom Ort unterschiedlich zusammengesetzt sein darf, im Verlauf der Mikrowellen-Erwärmung. Für die Simulationsrechnungen, die je nach der örtlichen Zusammensetzung des Lebensmittels eine ausreichende Rechnerkapazität erfordern, ist natürlich die Kenntnis der Stoffdaten in Abhängigkeit von der Temperatur nötig.

Zur Validierung der Simulationsrechnungen wurde die Methode der magnetischen Kernspinresonanz (NMR) benutzt, die heute meist als Magnetresonanz (MR) bezeichnet wird. Vereinfacht dargestellt beruht die Methode auf der Auswertung von NMR-Spektren, aus denen über Kernspindichten die Konzentration einzelner Bestandteile, beispielsweise Wasser, ermittelt werden kann. Als ortsauflösende, bildgebende Magnetresonanz (MRI) ist diese Messmethode hauptsächlich aus der Medizin bekannt; MRI-Tomographen liefern zwei- oder dreidimensionale Bilder über den inneren Aufbau des menschlichen Körpers. Mittels MRI kann auch die Temperaturverteilung im Innern von Körpern ortsaufgelöst gemessen werden. Die Messmethode basiert auf der Temperaturabhängigkeit der chemischen Verschiebung (chemical shift) der Wasserprotonenresonanz. Wie stets bei MRI handelt es sich um eine nicht-invasive Messmethode. Um ortsaufgelöst die Verteilung von Zusammensetzung und Temperatur messen zu können, wurde die Probe in einen MRI-Tomographen eingebracht. Zur Inline-Messung der Temperaturverteilung während der Mikrowellenbehandlung wurde eine spezielle Anordnung entwickelt, mit der Mikrowellen in den Messraum des Tomographen eingekoppelt werden können (Knörzer, Regier & Schubert, 2005b). Der Vergleich zwischen Simulationsrechnung und der mittels MRI gemessenen, orts- und zeitaufgelösten Temperaturverteilung im Innern eines zylindrischen, homogenen Modelllebensmittels während der Mikrowelleneinwirkung liefert eine gute Übereinstimmung (Abb. 3). Inline-Temperaturmessungen bei Lebensmitteln (z. B. Hähnchenflügel), deren ortsaufgelöste Zusammensetzung mittels MRI vereinfacht als Knochen, Fett- und Muskelgewebe erfasst und für die Simulation berücksichtigt wurde, zeigen ebenfalls die Brauchbarkeit der Berechnungen (Knörzer, 2006).

Das Beispiel zeigt, dass man heute mit Hilfe leistungsstarker Rechner Vorgänge, die sich kausal beschreiben lassen, zuverlässig ermitteln kann. Im vorliegenden Fall konnte die im Produkt dissipierte Leistungsdichte infolge eines äußeren Mikrowellenfeldes exakt berechnet werden. Noch vor wenigen Jahren mussten hierzu stark vereinfachende Modelle herangezogen werden, die nur ungenaue Ergebnisse liefern konnten. Durch Kopplung der exakten Berechnungen mit bewährten Modellen des Wärme- und Stofftransports wurde die Temperaturverteilung in Lebensmitteln orts- und zeitaufgelöst zuverlässig vorhergesagt, wie Inline-Messungen belegen, die erst seit kurzem vorliegen (Knörzer, 2006). Die größte Unsicherheit resultiert aus der Ungenauigkeit der Stoffdaten, wie Abschätzungen zeigen.

Es sei darauf hingewiesen, dass die hier genannten Methoden auch auf andere Anwendungen in der Verfahrenstechnik übertragen werden können. Die kontrollierte örtliche Erwärmung durch Mikrowellen in der Krebstherapie (Hyperthermie) ist ein wichtiges Anwen-

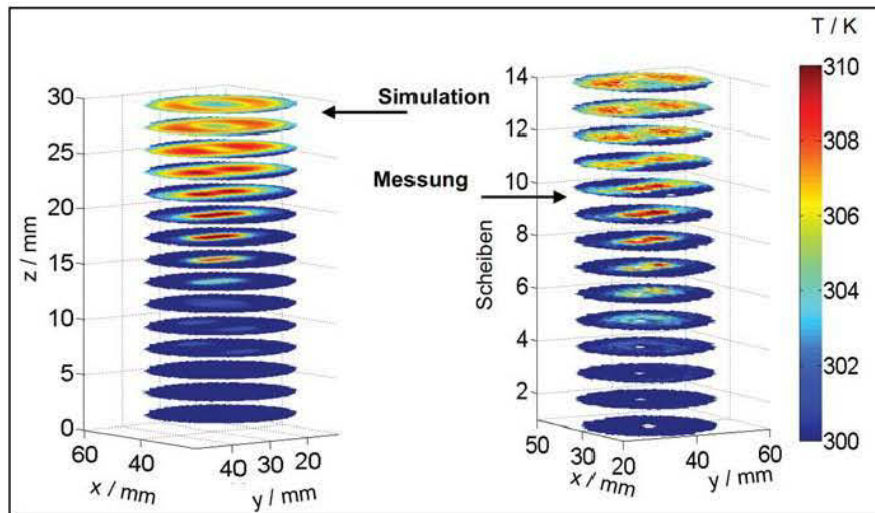


Abbildung 3  
Vergleich zwischen Simulation und mittels MRI gemessener Temperaturverteilung  
am Beispiel eines zylindrischen Modelllebensmittels (Knörzer, 2006)

dungsgebiet, das intensiv bearbeitet wurde (vgl. Nadobny et al., 1996; Kowalski, 2004). In der Hyperthermie sind jedoch noch andere Bedingungen zu beachten, sodass eine einfache wechselseitige Übertragung mit der hier diskutierten Methode problematisch ist.

Fortgeschrittene Rechenmethoden, leistungsstarke Rechner und neue Messmethoden sind hier wie in vielen anderen Fällen der Verfahrenstechnik der Schlüssel zum Erfolg. Grundlage ist jedoch die Kausalität, die erkannt und wenn möglich zur exakten Berechnung genutzt werden sollte. Ist eine exakte Berechnung (noch) nicht möglich, so können Modelle zuverlässige Ergebnisse liefern, sofern sie geprüft wurden, sich bewährt haben und möglichst einen kausalen Hintergrund besitzen.

#### 4 Sicherheit und Risiken, dargestellt am Beispiel von Lebensmitteln

Wie die Beispiele belegen, sollte die Kausalität des grundlegenden Zusammenhangs für zuverlässige Vorhersagen und für die Abschätzung eines Risikos bekannt sein. Kann ein Zusammenhang kausal beschrieben werden, so sind heute durch fortgeschrittene Rechenmethoden und leistungsstarke Rechner exakte Berechnungen möglich und frühere Vereinfachungen zu ersetzen. Die hohe Komplexität in der Verfahrenstechnik erfordert

jedoch auch weiterhin Modelle zur vereinfachten Beschreibung von Prozessen. Durch Rechnereinsatz und Simulation werden die Modelle aufwendiger und genauer sowie durch Validierung mittels moderner Messtechnik und Erfahrung fortlaufend verbessert.

Dennoch verbleibt wegen fehlender oder nicht quantitativ beschreibbarer Kausalität ein Restrisiko, das jedoch wegen verbesserter Verfahren ständig geringer wird und einen wesentlichen Teil des technischen Fortschritts ausmacht. So sind industriell verarbeitete Lebensmittel so sicher wie nie zuvor, auch wenn manche Verbraucher anderer Meinung sind.

Ein Beispiel ist das Pasteurisieren von Milch, die früher wegen pathogener Keime Ursache für viele Krankheiten mit hoher Sterblichkeit war. Pasteurisierte Milch besitzt heute ein extrem geringes gesundheitliches Risiko. Von „naturbelassener“, also nicht pasteurisierter Milch, die in manchen Ländern angeboten wird und keinen strengen Kontrollen unterliegt, geht dagegen ein vergleichsweise hohes Risiko aus, da krankheitserregende Mikroorganismen nicht inaktiviert wurden.

Verbraucher schätzen das Restrisiko vielfach falsch ein und richten sich nach dem vermeintlichen („gefühlten“) Risiko. Tabelle 1 stellt das tatsächliche Risiko dem vermeintlichen Risiko von Lebensmitteln gegenüber. Das tatsächliche Risiko wird als Todesfälle pro Jahr in Deutschland infolge des Verzehrs von Lebensmitteln angegeben. Für das vermeintliche Risiko ist nur ein qualitatives Maß vermerkt, das aus Sicht der öffentlichen Meinung in Deutschland geschätzt wurde. Man erkennt, dass zwischen dem tatsächlichen und dem vermeintlichen Risiko offensichtlich keine Kausalität besteht. „Naturbelassene“, also nicht oder wenig verarbeitete Lebensmittel stehen bei vielen Verbrauchern im hohen Ansehen, auch wenn das Risiko im Vergleich zu industriell verarbeiteten Lebensmitteln infolge pathogener Mikroorganismen und natürlicher Gifte (Tab. 1) groß ist. Die Einschätzung von Restrisiken durch Nichtfachleute wird durch unzureichendes Wissen, unseriöse Berichterstattung und die damit verbundene Verunsicherung beeinflusst. Es ist eine dankenswerte Aufgabe der Wissenschaft und ihrer Akademien, Wissen den Verantwortlichen, den Meinungsmachern und der Öffentlichkeit verständlich zu vermitteln. Dazu gehört die Information, dass es wegen fehlender oder nicht beschreibbarer Kausalität keine Technik ohne ein Restrisiko gibt, das abgeschätzt und offen gelegt werden sollte. Aussagen wie „verarbeitete Lebensmittel sind absolut sicher“, die letztlich vom Gesetzgeber verlangt werden, da unsichere Lebensmittel nicht vermarktet werden dürfen, verringern die Glaubwürdigkeit der Verfasser und sind nicht hilfreich, die Einschätzung von Restrisiken durch Nichtfachleute zu verbessern.

Tote pro Jahr in Deutschland	Ursache	Risiko aus Sicht der öffentlichen Meinung
200.000 bis 400.000	falsche Ernährung (zu fett, zu viel; einseitig)	mittel
mehr als 50.000	Alkohol (Ethanol)	mittel
200-300	Mikroorganismen, z. B. Salmonellen, EHEC, Aspergillus flavus (Aflatoxin), Cl. Botulinum,>Listerien	gering
10-100	Natürliche Gifte (Blausäure, Hämagglutinine, Solanine,...)	sehr gering
?	Acrylamid in Lebensmitteln	sehr hoch
0	BSE	sehr hoch
nicht nachgewiesen	Umweltkontaminanten	hoch
0	Zusatzstoffe	hoch
0 (weltweit)	gentechnisch veränderte Lebensmittel	sehr hoch
0	Bestrahlung (ionisierende Strahlen)	sehr hoch
0	Mikrowellen	mittel bis hoch
0	UHT-Erhitzung	mittel
?	neue Verfahren (Hochdruck, Elektropuls,...)	?

Tabelle 1  
Tatsächliche und vermeintliche Risiken von Lebensmitteln

### Literatur

- [1] Ax, K.: Emulsionen und Liposomen als Trägersysteme für Carotinoide. Diss. Universität Karlsruhe, 2003; Aachen: Shaker Verlag, 2004.
- [2] Engel, R. & H. Schubert: Formulation of phytosterols in emulsions for increased dose response in functional foods. In: Innovative Food Science and Emerging Technologies 6 (2005), S. 233–237.
- [3] Karbstein, H.: Untersuchungen zum Herstellen und Stabilisieren von Öl-in-Wasser-Emulsionen. Diss. Universität Karlsruhe, 1994.
- [4] Kempa, L., Schuchmann, H. P. & H. Schubert: Tropfenzerkleinerung und Tropfenkoaleszenz beim mechanischen Emulgieren mit Hochdruckhomogenisatoren. In: Chemie Ingenieur Technik 78 (2006) 6, S. 765–768.
- [5] Knörzer, K.: Simulation von Mikrowellenprozessen und Validierung mittels bildgebender magnetischer Resonanz. Diss. Universität Karlsruhe, 2006; Aachen: Shaker Verlag, 2006.

- [6] Knörzer, K., M. Regier & H. Schubert: Simulation of microwave heating processes. In: [15], 2005a.
- [7] Knörzer, K., M. Regier & H. Schubert: Measuring temperature distributions during microwave processing. In: [15], 2005b.
- [8] Nadobny, J., Wust, P., Seebass, M., Deuffhard, P. & R. Felix: A volume-surface integral method for solving Maxwell's equations in electrically inhomogeneous media using tetrahedral grids. In: IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques 44 (1996) 4, S. 543–554.
- [9] Pardey, K.: Prinzipien der Inaktivierung von vegetativen Mikroorganismen auf der Basis von Resistenzverteilungen und unter Berücksichtigung ihrer Vorgeschichte. Diss. Universität Karlsruhe, 2007; Aachen: Shaker Verlag, 2007.
- [10] Peleg, M.: Advanced quantitative microbiology for foods and biosystems, Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2006.
- [11] Peleg, M. & C. M. Penchina: Modeling microbial survival during exposure to a lethal agent with varying intensity. In: Critical Reviews in Food Science and Nutrition 40 (2000) 2, S. 159–172.
- [12] Kowalski, M. E.: Model-based optimization of phased arrays for electromagnetic hyperthermia. In: IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques 52 (2004) 8, S. 1964–1977.
- [13] Schönert, K.: Zerkleinern. In: Bohnet, M. (Hg.), Mechanische Verfahrenstechnik, Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
- [14] Schubert, H. (Hg.): Emulgiertechnik, Hamburg: Behr's Verlag, 2005.
- [15] Schubert, H. & M. Regier (Hg.): The microwave processing of foods, Cambridge/England: Woodhead Publishing Ltd., 2005.
- [16] Stang, M.: Zerkleinern und Stabilisieren von Tropfen beim mechanischen Emulgieren. Diss. Universität Karlsruhe, 1998; Düsseldorf: VDI-Verlag, 1998.

