

Experimentell validierte Simulation strömungsinduzierter Effekte auf Proteinschäume mittels Lattice-Boltzmann-Methoden

(Teilprojekt 6 im DFG/AiF-Cluster 5)

Koordinierung:	Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI), Bonn
Forschungsstelle I:	Universität Erlangen-Nürnberg Department für Chemie- und Bioingenieurwesen Lehrstuhl für Strömungsmechanik Prof. Dr. Antonio Delgado/Prof. Dr. Cornelia Rauh
Forschungsstelle II:	Universität Erlangen-Nürnberg Department Informatik Lehrstuhl für Systemsimulation Prof. Dr. Ulrich Rude/Dr. Harald Köstler
Industriegruppen:	Milchindustrie-Verband e.V., Berlin Bundesverband der Deutschen Süßwarenindustrie e.V. (BDSI), Bonn Vereinigung zur Förderung der Milchwissenschaftlichen Forschung an der Technischen Universität München e. V., Freising-Weihenstephan
	Projektkoordinator: Dr. Matthias Eisner FrieslandCampina Germany GmbH, Heilbronn
Zuwendungssumme:	€ 586.800,-- (Förderung durch BMWi via AiF/FEI)

Ausgangssituation:

Zahlreiche Produkte im Markt, wie Sekt, Erfrischungsgetränke, Latte Macchiato, Schlagsahne, Desserts, Soufflés, Eiskrem, Luftschokolade und Brot, belegen das wirtschaftliche Potential für Lebensmittel mit hohem Anteil an dispergiertem Gas oder gar mit schaumartiger Struktur. Dabei nimmt der Gasvolumenanteil Werte zwischen einigen wenigen Prozenten (etwa 10 % bei Milchshake) und über 95 % (Popcorn) an. Bei Gourmets und Spitzenköchen gelten schaumartige Produkte als Höhen der kulinarischen Kunst, bei Endverbrauchern häufig als genussvoll und „leicht“. Somit bieten Lebensmittel mit schaumartiger Struktur eine sehr gute Basis für Innovationen in der deutschen Lebensmittelindustrie, insbesondere für Klein- und mittelständische Unternehmen (KMU).

Schaumartige Produkte unter den Lebensmitteln erfordern häufig eine besondere Prozessierung zur Schaffung neuer Oberflächen. Neben einem hohen Bedarf an Energie, Betriebsmitteln und In-

vestitionen führt dies zugleich zum Einsatz von speziellen Verfahren, welche sich auf den Produktdurchsatz und die Prozessstabilität entscheidend auswirken. Zusätzlich zur Entstehung neuer Oberflächen sind technische Lösungen für deren Stabilisierung oder Destabilisierung notwendig. Bei allen Produkten (verzehrfertig, küchenzubereitet oder ausgeschenkt) sollen Maßnahmen zur Oberflächenstabilisierung die bei der Dispersion des Gases entstehende Struktur in aller Regel über solche Zeiträume wahren, welche dem üblichen Konsumverhalten entsprechen. Destabilisierungsmaßnahmen müssen dann vorgesehen werden, wenn sich im Produktionsprozess Dispersionsstrukturen ergeben, welche die Produktqualität oder die Verfahren in unerwünschter oder gar unzulässiger Form beeinträchtigen.

Ein virtuelles, aber experimentell validiertes Design von Lebensmittelprozessen und Produkten mit schaumartigen Strukturen mittels Computersimulation hätte erhebliche wirtschaftliche Vorteile. Die Simulation strömungsinduzierter As-

pekte als Grundlage des virtuellen Modellprodukt- und Prozessdesigns erfordert allerdings die Bündelung physiko-chemischer und rheologischer Mechanismen sowie technologischer und prozesstechnischer Bedingungen.

Ziel des Forschungsvorhabens, Teilprojekt (TP) 6 des DFG/AiF-Clustervorhabens [„Proteinschäume in der Lebensmittelproduktion: Mechanismenaufklärung, Modellierung und Simulation“](#), war es, die Basis zu schaffen für ein virtuelles Design schaumartiger Modelllebensmittel und ihrer Prozessierung mittels experimentell validierter Simulation.

Forschungsergebnis:

Für die Prädiktion und Charakterisierung von Proteinschäumen dienten Numerische Simulationen basierend auf dem LATTICE-BOLTZMANN-Verfahren. Die Simulation der Proteinschäume bediente sich während des gesamten Zeitraums des Softwareframeworks waLBerla und entwickelte diese weiter. Hierbei standen, wie oben bereits erwähnt, Entstehung, Stabilisierung und Transport von Proteinschäumen im Vordergrund. Die Blasenentstehung widmete sich unter anderem der Blasenablösung an porösen gasdurchströmten Membranen. Hierzu erfolgte eine Entwicklung und Implementierung eines Auftrennungsalgorithmus, um das Ablösen von Blasen von einer Membran zu simulieren. Dieser Algorithmus wurde erst mit einer ablösenden Einzelblase validiert, anschließend wurden Teile einer Membran mit verschiedenen Benetzungswinkeln, Porenabständen und Oberflächenspannungen untersucht.

Zur Simulation der Oberflächenstabilisierung wurden die Diffusion von Proteinen und der Einfluss auf die Oberflächenspannung modelliert. Zur Beschreibung des Effekts wurde das WARD-TORDAI-Modell aus der Literatur verwendet, das die Oberflächenbelegung und damit die Änderung der Oberflächenspannung für einfache Geometrien beschreibt. Mit der Verwendung einer allgemeinen Diffusionsgleichung kann diese Limitierung aufgehoben werden. Mit der LATTICE-BOLTZMANN-Methode wurde eine Diffusions-Advektionsgleichung mit speziellen Randbedingungen für die freien Oberflächen gelöst und damit auch noch eine zusätzliche Strömung in der flüssigen Phase ermöglicht. Zur Validierung wurde ein Tropfen verwendet und mit Werten aus der Literatur verglichen und eine gute Übereinstimmung erzielt. Dennoch ist bei der Herstel-

lung der Lebensmittelschäume die Proteinkonzentration so hoch, dass kein wesentlicher Konzentrationsgradient vorhanden ist und damit keine Proteindiffusion stattfindet.

Zur Beschreibung der Blasendynamik und der Blasenwechselwirkung wurde ein mathematisch-physikalisches Modell aus der Literatur verwendet und weiterentwickelt. Das Modell beschreibt den Schäumprozess einer (hoch)viskosen Flüssigkeit mit der Unterstützung dispergierter gasförmiger Stoffe und dem überlagerten Stofftransport von in der Flüssigkeit gelösten, flüchtigen Komponenten, z.B. von Luft oder Aromastoffen. Berücksichtigung findet dabei die Änderung der Blasen von der Kugel- zur Polyederform und die gegenseitige Beeinflussung der Blasen im Zellverbund. Ziel ist die Berechnung des zeitlichen Verlaufs des Schaumvolumens und der Konzentration der gelösten, flüchtigen Komponenten in Abhängigkeit der Prozess- und Stoffgrößen.

Die Rheologie der Schäume hat zudem eine entscheidende Auswirkung auf die Entstehung, die Stabilität und den Transport von Proteinschäumen. Schäume besitzen dabei ein ausgeprägtes nicht-newtonsches Verhalten, inkl. Fließgrenze. In der Literatur werden zur Beschreibung einer blasenhaltigen Flüssigkeit zwei Materialgesetze auf der mikroskopischen und der makroskopischen Ebene vorgestellt. Als makroskopisches Modell wird eine inkompressible Flüssigkeit zweiter Ordnung mit Gasblasen, als makroskopisches Modell entsprechend eine Flüssigkeit zweiter Ordnung für den kompressiblen Fall verwendet. In dieser Arbeit wurden die Materialfunktionen für eine stationäre Scherströmung charakterisiert.

Mithilfe von numerischen Simulationen wurde der Transport von Proteinschäumen auf mikroskopischer und makroskopischer Ebene untersucht. Hierzu zählen die Analyse des Einsetzens einer Strömung beim Anlegen einer Schubspannung sowie der Transport in Kanälen. Um waLBerla für Scherströmungen zu validieren, wurde zuerst eine Einzelblase zwischen zwei Platten geschert. Kapillarzahl und Deformation stimmen sehr gut mit Werten aus der Literatur überein. Danach wurde ein Blasencluster in Abhängigkeit zu seiner geometrischen Ausrichtung numerisch untersucht und anschließend zu einem Schaumvolumen mit etwa 500 Blasen übergegangen, das ebenfalls in einer Scherströmung ausgewertet wurde und dessen logarithmisches Geschwindigkeitsprofil sich in der Literatur in expe-

rimentellen Daten wiederfindet.

Zusätzlich zum Schaumscheren wurde auch der Transport durch einen rechteckigen Kanal mit waLberla untersucht. Hier wurden etwa 1.700 Blasen mit einem Druckgradienten angetrieben und mit experimentellen Daten aus der Literatur, wie das Blockprofil mit einem Flüssigkeitsfilm am Kanalboden, validiert.

Als ein Hauptergebnis liefert das Gesamtcluster ein Prognosetool zur Schaumentstehung, zur Schaumstabilität und zu Schaumtransporteffekten basierend auf einer Datenreduktion. Um die große Menge an Informationen aus dem gesamten Clusterprojekt aus numerischen Simulationen und Experimenten in einem einfachen, auf einem Laptop lauffähigen Programm zusammenzuführen, wurden Künstliche Neuronale Netze (KNN) verwendet. Diese sind lernfähige, nicht-lineare Universalapproximatoren, die Ausgaben durch die Einführung von Eingaben über Verbindungen durch gewichtete Funktionen voraussagen.

Die KNN wurden u.a. mit Daten aus TP 1 trainiert, um einen Zusammenhang zwischen der Proteinkonzentration und der Oberflächenspannung zu bekommen. Die Ergebnisse aus TP 3 zu Schäumbarkeit, Schaumstabilität, Schaumkapazität und Drainage für Lösungen mit Natriumcaseinat, β -Lactoglobulin und mizellarem Casein bilden die Grundlage für KNN, die in der Lage sind, diese Eigenschaften vorherzusagen für bestimmte Proteinkonzentrationen, pH-Werte und Temperaturen. Die minimale Korrelation und der maximale mittlere quadratische Fehler zeigen in den meisten Fällen ein sehr gutes Prognoseverhalten.

Auch der Schaumtransport durch Kanäle konnte mit Hilfe von KNN aus den Simulationsergebnissen mit waLberla vorhergesagt werden. Die Vorhersage verläuft hier über eine Einteilung des Strömungsgebiets in charakteristische Bereiche und einen resultierenden Fingerprint. Vorhergesagt werden konnten mit guten Ergebnissen die Geschwindigkeitskomponenten, der Gasanteil und die Scherrate ausgehend von der Oberflächenspannung und der Viskosität der flüssigen Phase.

Wirtschaftliche Bedeutung:

Die Forschungsergebnisse sind für zahlreiche Sparten der Lebensmittelindustrie, insbesondere für die Milch- und die Süßwarenindustrie, von

Interesse. Der aus rund 100 Unternehmen bestehende deutsche Milchverarbeitungssektor beschäftigt ca. 38.000 Mitarbeiter. Mit 28,4 Mrd. € in 2013 erzielte er knapp 16 % des Gesamtumsatzes der deutschen Lebensmittelindustrie. Die sogenannte Weiße Linie (Joghurt, Desserts, Quark etc.) ist mit 5,7 Mrd. € der umsatzstärkste Bereich. Das darunter angesiedelte Sortiment geschäumter Produkte ist durch wachstumsstarke Marken und eine hohe Anzahl von Produktneuerscheinungen gekennzeichnet. Insbesondere auf Genuss ausgerichtete Premiumprodukte werden vom Verbraucher gut angenommen. Da geschäumte Produkte hinsichtlich der Genussparameter Cremigkeit und Leichtigkeit hoch bewertet werden, ist mit einem steigenden Anteil solcher Systeme auch im „Low fat“-Bereich zu rechnen.

In Deutschland wurden im Jahr 2013 etwa 3,9 Mio. Tonnen Süßwaren im Wert von 12,6 Mrd. € produziert, davon wurden Waren im Wert von ca. 4,2 Mrd. € exportiert (201 Betriebe mit insgesamt ca. 50.000 Beschäftigten). Die Süßwarenbranche ist von vielen kleinen und mittleren Betrieben (KMU) geprägt. Eine bedeutende Rolle spielen hierbei sowohl mengen- als auch wertmäßig die Produktion von Speiseeis (361.956 t), gefüllten Schokoladenerzeugnissen (304.391 t), Pralinen (135.147 t) und Zuckerwaren (536.849 t). In diesen Kategorien finden sich zahlreiche schaumbasierte Produkte, wie Marshmallows, Schaumwaffeln, Schaumküsse, mit Mousse gefüllte Pralinen etc.

Von den Ergebnissen des Clusters werden die Hersteller geschäumter Produkte und ihre Zulieferer (z. B. Hersteller von technofunktionellen Proteinprodukten und Zusatzstoffen) profitieren. Des Weiteren sind die Ergebnisse auch für den Wirtschaftszweig Maschinenbau (Anlagenbau, Membranhersteller) von Interesse.

Als weitere, wichtige Spin-Offs für KMU ist der Bereich der Prozessbeobachtung und -führung anzusehen. So etablieren sich gegenwärtig im Markt neuartige Entwicklungen auf dem Gebiet der Qualitätssicherung schaumartiger Lebensmittel, welche letztendlich in modernen Diagnosesystemen etwa für das Grenzflächenspannungsverhalten oder die Rheologie resultieren.

Publikationen (Auswahl):

1. FEI-Schlussbericht 2014.

2. Bauer, M., et al.: A Python extension for the massively parallel multiphysics simulation framework waLBerla. Intern. J. Par., Emerg. Distr. Syst. DOI:10.1080/17445760.2015.1118478 (2015).
3. Wolf, A., Rauh, C. & Delgado A.: Dynamics and long-time behavior of a small bubble in viscous liquids with applications to food rheology - Impact of pressure and material characteristics on bubble shape. Arch. Appl. Mech. 1-24 DOI:10.1007/s00419-015-1074-8 (2015).
4. [Proteinschäume in der Lebensmittelproduktion: Mechanismenaufklärung, Modellierung und Simulation – Zentrale Ergebnisse des gleichnamigen DFG/AiF-Clusterprojektes. \(Hrsg. FEI\). ISBN 978-3-925032-53-0 \(2014\).](#)
5. Anderl, D., Bauer, M., Rauh, C., Rüde, U. & Delgado, A.: Numerical Simulation of Adsorption and Bubble Interaction in Protein Foams with the Lattice Boltzmann Method. Food Funct. 5 (4), 755-763 (2014).
6. Anderl, D., Bogner, S., Rauh, C., Rüde, U. & Delgado, A.: Free surface LATTICE-BOLTZMANN with enhanced bubble model. Comp. & Math. Appl. 67, 331-339 (2014).
7. Wolf, A., Masood, R., Delgado, A. & Rauh, C.: Bubble Dynamics: Long-time Behavior and Interaction in Viscous Liquids. Proc. Appl. Math. Mech. 14 (1), 861-862. DOI: 10.1002/pamm.201410411 (2014).
8. Gladbach, K., Delgado, A. & Rauh C.: Modeling and Simulation of the Transport of Protein Foams, Proc. Appl. Math. Mech. 14 (1), 859-860. DOI: 10.1002/pamm.201410410 (2014).
9. Anderl, D., Bauer, M., Rauh, C., Rüde, U. & Delgado, A.: Numerical Simulation of Bubbles in Shear Flow, Proc. Appl. Math. Mech. 14 (1), 667-668. DOI: 10.1002/pamm.201410317 (2014).
10. Godenschwager, C., Schornbaum, F., Bauer, M., Köstler, H. & Rüde, U.: A Framework for Hybrid Parallel Flow Simulations with a Trillion Cells in Complex Geometries. Proc. SC13 Intern. Conf. High Perform. Comp., Network., Stor. Anal., 35/1-35/12 (2013)
11. Bogner, S., Donath, S., Feichtinger C. & Rüde, U.: Three-phase flow simulation with the LATTICE-BOLTZMANN-Method. (Poster-abstract) Tagungsband FEI-Jahrestagung 2011, 116-118 (2011).
12. Donath, S., Mecke, K., Rabha, S., Buwa, V. & Rüde, U.: Verification of Surface Tension in the Parallel Free Surface Lattice Boltzmann Method. waLBerla. Comp. Fluids, 45(1), 177-186 (2011).

Weiteres Informationsmaterial:

Universität Erlangen-Nürnberg
 Department für Chemie- und Bioingenieurwesen
 Lehrstuhl für Strömungsmechanik
 Cauerstrasse 4, 91058 Erlangen
 Tel.: +49 9131 8529-500
 Fax: +49 9131 8529-503
 E-Mail: antonio.delgado@Istm.uni-erlangen.de

Universität Erlangen-Nürnberg
 Department Informatik
 Lehrstuhl für Systemsimulation
 Cauerstrasse 5, 91058 Erlangen
 Tel.: +49 9131 85-28924
 Fax: +49 9131 28928
 E-Mail: ulrich.ruede@informatik.uni-erlangen.de

Forschungskreis der Ernährungsindustrie e.V. (FEI)
 Godesberger Allee 142-148, 53175 Bonn
 Tel.: +49 228 3079699-0
 Fax: +49 228 3079699-9
 E-Mail: fei@fei-bonn.de

... ein Projekt der **Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF)**

gefördert durch/via



Das o. g. IGF-Vorhaben der Forschungsvereinigung Forschungskreis der Ernährungsindustrie e. V. (FEI), Godesberger Allee 142-148, 53175 Bonn, wird/wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.