Mathematische und statistische Methoden für Pharmazeut*innen

Prof. Dr. Noemi Kurt
FB 12, Institut für Mathematik, Goethe-Universität Frankfurt

Sommersemester 2023

Vorlesung 9

Inhalt

- Partielle Ableitungen
- Extremwerte in mehreren Variablen
- Differentialgleichungen: Wichtige Typen und Lösungen

Lernziele

- Funktionen von mehreren Variablen kennen und Ableitungen berechnen können
- Den Zusammenhang zwischen Ableitung und Eigenschaften der Funktion kennen
- Wichtige Differentialgleichungstypen (Reaktionsgleichungen) und Lösungen kennen
- Überprüfen können, ob eine vorgegebene Funktion eine bestimmte Differentialgleichung erfüllt.

Benötigte Vorkenntnisse

- Funktionen, Ableitung, Ableitungsregeln, Extremwerte

Funktionen von mehreren Variablen

Bisher: $f(x)$, mit einer Inputvariablen x

Oft: Mehrere Variablen sind relevant.

Beispiele:

- Dosierung eines Medikamentes abhängig von Körpergewicht, Alter, Geschlecht, weiteren Parametern wie Blutdruck, aktueller Gesundheitszustand...
- Temperaturverteilung abhängig von Zeit und Ort
- Thermodynamik: Enthalpie (Wärmeinhalt) abhängig von Druck, Volumen und innerer Energie

Mathematisch: Schreibweise $f(x, y), f(x, y, z), f(x_1, ..., x_n)$

Beispiele:
$f(x, y) = 4x^2 \sin(y), f(x, y, z) = 2xy + e^{y^2 - z}, H(U, p, V) = U + pV$

Partielle Ableitungen

Die partielle Ableitung einer Funktion von mehreren Variablen nach einer Variablen x wird als normale Ableitung berechnet, wobei man die anderen Variablen "festhält", also wie Konstanten behandelt.

Schreibweise: $\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}, \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z}$

Interpretation: Steigung/Veränderung der Funktion in $x, y, z, \ldots$ Richtung.

(Beispiele an der Tafel).

Zweite Ableitungen: $\frac{\partial^2 f(x,y,z)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 f(x,y,z)}{\partial x \partial y}, \ldots$

Es gelten die üblichen Ableitungsregeln.

Partielle Ableitungen

Totales Differential: Verwendung z.B. in der Thermodynamik als

$$df(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}dx + \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}dy + \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z}dz,$$

wobei dx, dy, dz die "infinitesimalen Veränderungen" der Variablen darstellen sollen.

Mathematisch präzisere Interpretation mit Hilfe von Integralen.

Differentialgleichungen

Differentialgleichungen (DGLn) stellen einen Zusammenhang zwischen Funktionen und ihren Ableitungen her. Sie sind omnipräsent in der mathematischen Beschreibungen von naürlichen Prozessen.

Beispiel: In vielen chemischen Reaktionen ist die Reaktionsgeschwindigkeit proportional zur vorhandenen Stoffmenge (Reaktionen 1. Ordnung). Nimmt also mit Dauer des Versuchs die Konzentration ab, so verringert sich auch die Geschwindigkeit.

- Sei $c(t)$ die Konzentration des Stoffes in Abhängigkeit von der Zeit t
- Reaktionsgeschwindigkeit entspricht der zeitlichen Veränderung der Konzentration, also $-c'(t)$ (Vorzeichen!).
- Reaktionsgeschwindigkeit proportional zur Konzentration bedeutet also: Es gibt eine Zahl k, so dass

$$c'(t) = -k \cdot c(t)$$

Reaktionsgleichung 1. Ordnung

Gesucht ist also eine Funktion $c(t)$, welche die Differentialgleichung

$$c'(t) = -kc(t)$$

erfüllt.

Lösung:

$$c(t) = c_0 \cdot e^{-kt}$$

erfüllt diese DGL für jede Zahl $c_0 \in \mathbb{R}$. Wir müssen hier $c_0 = c(0)$ die Anfangskonzentration wählen.

Zur Erinnerung: Dies entspricht einem exponentiellen Zerfall!

k ist die Reaktionskonstante (Einheit: 1/sec, 1/min...)

Reaktionen 0. Ordnung

Reaktion 0. Ordnung: DGL

$$c'(t) = -k$$

Łösung:

$$c(t) = c_0 - kt$$

mit $c_0 = c(0)$ Anfangskonzentration. Hier ist die Reaktionsgeschwindigkeit unabhängig von der Stoffmenge.

Reaktion 2. Ordnung

Reaktion 2. Ordnung mit gleicher Konzentration: DGL

$$c'(t) = -kc(t)^2$$

Łösung:

$$c(t) = \frac{1}{1/c_0 + kt},$$

mit $c_0 = c(0)$.

Allgemeiner: Zwei Reaktanden mit Konzentration c_A, c_B:

$$c_A'(t) = -kc_A(t)c_B(t), \quad c_B'(t) = -kc_A(t)c_B(t)$$

hier handelt es sich um zwei gekoppelte Differentialgleichungen.

Ein Beispiel für partielle Differentialgleichungen

Partielle Differentialgleichungen enthalten partielle Ableitungen nach verschiedenen Variablen.

Beispiel: Diffusion (erstes Fick'sches Gesetz)

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -DA\frac{\partial c}{\partial x},$$

Dabei ist $\frac{\partial m}{\partial t}$ die Masse, welche pro Zeiteinheit t durch die Fläche A (z.B.) Membran, und $\frac{\partial c}{\partial x}$ der Konzentrationsgradient entgegen der Flußrichtung.Die Zahl D ist die Diffusionskonstante (abhängig von der Substanz).

Beispiel: Diffusion (zweites Fick'sches Gesetz) Aus dem ersten Fick'schen Gesetz und der Massenerhaltung ($\frac{\partial c}{\partial t} = -A\frac{\partial^2 m}{\partial x \partial t}$) folgt

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$