Praktische Mathematik in der Pharmazie

Ernst Glaser
Peter Surmann

Thieme

Ernst Glaser · Peter Surmann

Praktische Mathematik in der Pharmazie

57 Abbildungen, 20 Tabellen

1981
Georg Thieme Verlag Stuttgart · New York

Dr. ERNST GLASER
Dr. PETER SURMANN
Institut für Pharmazeutische Chemie
der Philipps-Universität Marburg
Marbacher Weg 6, 3550 Marburg/Lahn

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Glaser, Ernst:
Praktische Mathematik in der Pharmazie / Ernst Glaser ; Peter Surmann. – Stuttgart ; New York : Thieme, 1981.

NE: Surmann, Peter:

Printed in Germany – Satz: Tutte GmbH, Salzweg-Passau (auf Monophoto 2000) – Druck: Druckhaus Dörr, Inh. Adam Götz, Ludwigsburg

ISBN 3-13-585701-8 5 4 3 2 1 0

Vorwort

Mathematik – im medizinisch-pharmazeutischen Bereich vornehm Biomathematik genannt – ermöglicht die Beschreibung vieler naturwissenschaftlicher Sachverhalte. Dabei braucht man keineswegs Mathematiker zu sein, um selbständig Probleme formulieren und lösen zu können. Es bedarf meist nur einiger Grundlagen. Diese werden hier ausführlich dargestellt und mit einer Vielzahl von Beispielen belegt.
Auch im Bereich der Pharmazie ist praktisches Rechnen das Rüstzeug zur Lösung vieler Fragen. Dies zeigt ein Blick in den Gegenstandskatalog der Pharmazeutenausbildung, die Kommentare der nationalen und internationalen Pharmakopöen oder die Themenkreise der einzelnen Sparten wie Pharmazeutische Chemie, Pharmazeutische Technologie, Pharmakologie, Physikalische Chemie und Physik. Im vorliegenden Buch sind die Probleme so angesprochen, wie sie sich dem Studenten oder Doktoranden wie auch dem Industrie- und Offizinapotheker stellen.

Aufbau und Handhabung
Als wir dieses Buch schrieben, sollte nicht einfach ein weiteres Mathematikbuch entstehen, sondern dem Benutzer eine praxisorientierte Handhabe gegeben werden. Um es als Lehrbuch sinnvoll gebrauchen zu können, folgen nach jedem theoretischen Abschnitt unmittelbar eine Vielzahl von Beispielen. Diese orientieren sich immer an praktischen Fragen und zeigen den Weg vom Formulieren eines Problems bis hin zur Lösung. Im weiteren ist es aber auch als Nachschlagewerk zu benutzen; dazu dient das Register, welches zum einen die mathematische Theorie enthält als auch sich auf die Beispiele bezieht und so dem Leser mit Vorkenntnissen die Möglichkeit des Wiederholens oder Vertiefens seines Wissens gibt.
Zu den vielfältigen Benutzern gehören sicher auch Menschen, die oft nur Begriffe der Mathematik in praktisch verständlichem Ton nachschlagen möchten. Nicht zuletzt diesem Leserkreis dient der lexikographische Anhang. Er erübrigt ein langes Nachlesen und gibt knappe Erklärungen einiger wichtiger Begriffe.
Dies waren nicht die einzigen Ziele, die wir bei diesem Buch verfolgten. Es sollte auch in seinem statistischen Teil vollständig sein.

Dazu gehören die ausführlichen statistischen Tabellen. Weiter dienen die in Tabellenform dargestellten Umrechnungsschemata der physikalischen Größen und ihrer SI-Einheiten der allgemeinen und vollständigen Gebrauchsfähigkeit des Werkes. Beide erwähnten Tabellensammlungen sind im Anhang enthalten.
Eine Besonderheit, die vor allem im Labor und am Arbeitsplatz nützlich ist, stellt die beigefügte Tabelle mit Größengleichungen dar. Sie enthält sämtliche wichtigen Beziehungen der pharmazeutischen Praxis übersichtlich und gebrauchsfertig dargestellt.
Ein Buch, selbst mehrfach überarbeitet, kann nie ganz frei sein von Fehlern und ebensowenig vollständig. Wir bitten daher freundlichst um Hinweise und Ratschläge. Nur so kann ein Buch absolut gebrauchsfreundlich gestaltet werden.
Dem Verlag danken wir für die jederzeit freundliche und verständige Zusammenarbeit.

ERNST GLASER
PETER SURMANN

Inhaltsverzeichnis

1. Algebra

1.1 Zahlen

Schon mehrere tausend Jahre vor Beginn unserer Zeitrechnung waren den alten Völkern und Kulturen Zahlen bekannt. Meist mögen wohl Handel oder Tauschgeschäfte Ursache dafür gewesen sein, daß sich Zahlensysteme entwickelt haben. So wurden vor allem das dyadische (Basis 2), das Fünfer-, das Zehner-, das Zwanziger- oder das Sexagesimalsystem (Basis 60) angewendet. Allen Zahlenvorstellungen fehlte jedoch die Null. Mit der Einführung dieser Zahl durch die Inder ungefähr 3400 v. Chr. nahm auch das von uns heute gebräuchliche Dezimalsystem seinen Anfang.
Die einfachste Art Zahlen in diesem System sind die **natürlichen Zahlen**. Sie entwickelten sich ursprünglich aus dem Zählen etwa zum Vergleich von Mengen oder Anzahlen,

$$1, 2, 3, 4, 5, \ldots$$

und stellen die Zahlenmenge dar, wie sie zu Beginn des Zahlenrechnens bekannt war. Verwendung finden die natürlichen Zahlen oft als Indizes.
Die nächst höhere Stufe ist durch die **ganzen (ganzrationalen) Zahlen** gegeben. Neben den natürlichen Zahlen gehören dazu auch alle negativen Zahlen (ohne Nachkommastellen) sowie die Null; der Zahlenbereich erstreckt sich von minus Unendlich bis plus Unendlich. Beispiele ganzer Zahlen sind

$$-1000, -5, -1, 0, 3, 5000, 1000000, \ldots .$$

Ist im Alltag von Zahlen schlechthin die Rede, so sind fast ausschließlich **reelle Zahlen** gemeint. Dies weist schon darauf hin, daß sie eine ganz bedeutende Rolle spielen. Reelle Zahlen umfassen den gesamten Zahlenbereich, d. h. alle positiven und negativen Zahlen, mit und ohne Nachkommastellen. Sie lassen sich nach folgendem Schema weiter unterteilen.

$$\text{reelle Zahlen}\begin{cases}\text{rationale Zahlen} & \begin{cases}\text{ganze Zahlen}\\ \text{gebrochene Zahlen}\end{cases}\\ \text{irrationale Zahlen} & \begin{cases}\text{algebraische Zahlen}\\ \text{transzendente Zahlen}\end{cases}\end{cases}$$

Zu den gebrochenen (gebrochenrationalen) Zahlen zählen solche, die sich auch als Brüche schreiben lassen. Algebraische Zahlen dagegen können nicht durch einen (endlichen) Bruch wiedergegeben werden; ihre Darstellung als Dezimalzahl ist unendlich und nichtperiodisch. Ein Beispiel einer algebraischen Zahl wäre $\sqrt{2} = 1{,}41421\ldots$. Beispiele für transzendente Zahlen sind Werte des Logarithmus (s. S. 58ff) oder von Winkelfunktionen (s. S. 48ff).

An vielen Arbeitsplätzen ist es heute schon fast selbstverständlich, daß Berechnungen mit Hilfe eines Taschen- oder Tischcomputers durchgeführt werden. Dabei muß man sich im Klaren darüber sein, daß alle Rechner nur mit einer endlichen Anzahl (Nachkomma)Stellen arbeiten. Die Folge davon ist, daß alle größeren Zahlen, periodischen Brüche, z. B. $\frac{1}{3} = 0{,}3\overline{3}\ldots$, oder irrationalen Zahlen nicht als solche behandelt werden können und zu rationalen Zahlen transformiert werden. Dies bedeutet aber Fehler in der Rechnung, die gelegentlich solche Ausmaße annehmen können, daß es nicht mehr möglich ist, mit dem Ergebnis weiterzuarbeiten.

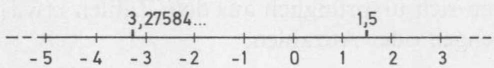

Abb. 1 Reelle Zahlengerade; die markierten Einheiten entsprechen den ganzen Zahlen, die Zahl $-3{,}27584\ldots$ steht für eine irrationale, 1,5 als Beispiel für eine rationale Zahl

Eine Möglichkeit der graphischen Darstellung der besprochenen Zahlentypen ist durch die reelle Zahlengerade gegeben. Dadurch ist auch das Prinzip der **Anordnung** sichtbar. Die Zahlen werden von links nach rechts gesehen immer größer, sie verlaufen von minus Unendlich bis plus Unendlich.

Mit Hilfe der reellen Zahlen lassen sich fast alle Probleme der Mathematik lösen. Es sei nur kurz erwähnt, daß die Mathematik aber ein noch höher stehendes Zahlensystem kennt, die **komplexen Zahlen**. Die allgemeine Schreibweise für diese umfassendste Zahlenmenge ist

$$z = x + \mathrm{i}y,$$

wobei i aus der Definition $\mathrm{i}^2 = -1$ folgt. Die komplexe Zahl z setzt sich aus dem **Realteil** x und dem **Imaginärteil** $\mathrm{i}y$ zusammen. Sie lassen sich als

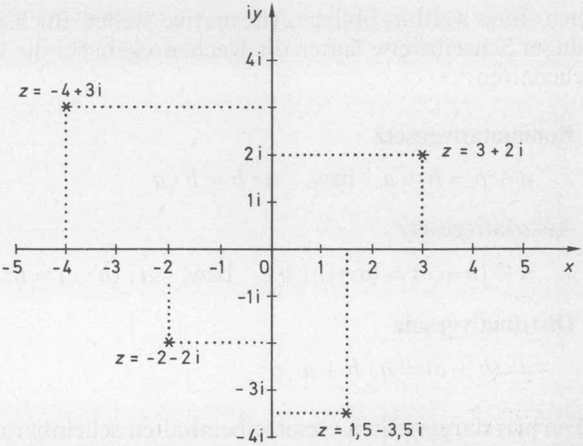

Abb. 2 Allgemeine Darstellung der Zahlenebene mit Beispielen komplexer Zahlen; die Abszissenachse entspricht der reellen Zahlengerade

Punkte der **Zahlenebene** darstellen. Ist der Realteil gleich Null, so ist $z = \mathrm{i}y$. Dieser Typus Zahl wird als **imaginäre Zahl** bezeichnet. Er wird in der Zahlenebene ausschließlich durch die iy-Achse repräsentiert.

Ganze Zahlen werden in der Chemie zur Charakterisierung von Oxidationsstufen benutzt

$$\overset{-3}{\mathrm{N}}\mathrm{H_3}, \quad \overset{-2}{\mathrm{N}}\mathrm{H_2OH}, \quad \overset{0}{\mathrm{N}}\mathrm{_2}, \quad \overset{+1}{\mathrm{N}}\mathrm{_2O}, \quad \overset{+5}{\mathrm{N}}\mathrm{O_3^-}. \quad \bullet$$

Natürliche Zahlen werden als Indizes und als Koeffizienten in chemischen Gleichungen verwandt

$$2\mathrm{S_2O_3^{2-}} + \mathrm{I_2} \rightarrow \mathrm{S_4O_6^{2-}} + 2\mathrm{I^-}. \quad \bullet$$

1.2 Rechnen mit Symbolen

Am Ende eines jeden Rechenganges steht ein Ergebnis, das als Zahlenwert vorliegt. Um die Rechenregeln für die einzelnen Rechenoperationen jedoch allgemein formulieren zu können oder um generell funktionale Zusammenhänge anzugeben, ist es sinnvoll, von den Zahlen wegzugehen und stattdessen Symbole zu schreiben, die am Schluß wieder durch Zahlen ersetzt werden können. Eine weithin übliche Alternative stellen Buchstaben dar. In dieser Schreibweise lauten die Rechenregeln für die vier Grundrechenarten:

Kommutativgesetz

$$a+b=b+a \quad \text{bzw.} \quad a\cdot b=b\cdot a$$

Assoziativgesetz

$$a+(b+c)=(a+b)+c \quad \text{bzw.} \quad a\cdot(b\cdot c)=(a\cdot b)\cdot c$$

Distributivgesetz

$$a\cdot(b+c)=a\cdot b+a\cdot c\,.$$

Die hier dargestellten Gesetze beinhalten scheinbar nur die Addition und die Multiplikation. Bedenkt man jedoch, daß die Buchstaben Symbole für beliebige Zahlen darstellen, so sind ebenfalls die Subtraktion und die Division miterklärt:

$$a+b=b+a;$$

es sei $b=-c$. Dann ergibt sich

$$a+(-c)=(-c)+a$$

$$a-c=-c+a.$$

$$a\cdot b=b\cdot a;$$

hierbei gelte $b=\frac{1}{c}$. Somit resultiert

$$a\cdot\frac{1}{c}=\frac{1}{c}\cdot a.$$

Es sei hingewiesen, daß bei der Division immer darauf geachtet werden muß, daß der Divisor von Null verschieden ist!
Grundsätzlich bedeuten beim Rechnen mit Symbolen gleiche Zeichen auch gleiche Zahlenwerte; für verschiedene Symbole dürfen aber sehr wohl gleiche Zahlen eingesetzt werden.
Auf diese Art und Weise ist es ganz einfach möglich, mathematische Ausdrücke computergerecht zu formulieren. Oder man kann Rechengänge schon vorab soweit vereinfachen, daß am Schluß alle überflüssigen Rechenoperationen wegfallen. Dies ist vor allem bei mehrfacher Ausführung derselben Berechnung von großem Vorteil.

1.3 Gleichungen – Ungleichungen

Unter einer **Gleichung** versteht man die Verknüpfung mindestens zweier mathematischer Ausdrücke (Terme) durch ein Gleichheitszeichen.

$$a = b - c$$

Steht dabei nicht das Gleichheitszeichen „=“, sondern eines der Zeichen < (kleiner), ≦ (kleiner oder gleich), > (größer) oder ≧ (größer oder gleich), so spricht man von einer **Ungleichung**.

$$a < b - c$$

Jede Gleichung oder Ungleichung kann in ihrer Aussage richtig oder falsch sein. So ist zum Beispiel die Aussage $a > b$ für $a = 2$ und $b = 10$ falsch; für $a = 2$ und alle Werte von b, die kleiner als zwei sind, z. B. $b = 1$, wäre diese Ungleichung richtig. Der Umgang mit (Un)Gleichungen erfolgt nach denselben Regeln, wie das Rechnen mit Zahlen. Auch hier ist zu beachten, daß jede Rechenoperation stets auf beiden Seiten der (Un)Gleichung ausgeführt wird. Das heißt, wird eine (Un)Gleichung mit einem Faktor multipliziert, so muß dies links ebenso wie rechts vom (Un)Gleichheitszeichen ausgeführt werden.

$$\frac{a+b}{c} = d \qquad \Big| \cdot c$$

$$\frac{a+b}{c} \cdot c = a + b = d \cdot c$$

Bei der Division von (Un)Gleichungen durch einen Term hat man darauf zu achten, daß man nicht durch Null dividiert, da dies zu undefinierten und damit zu falschen Ergebnissen führt. Beim Rechnen mit Symbolen hat man in jedem einzelnen Fall den entsprechenden Term zu prüfen!

$$(a+b-c) \cdot (a-d) = e \cdot (a-d) \qquad | : (a-d)$$

$$(a-d) \neq 0, \quad \text{d.h.} \quad a \neq d$$

$$\frac{(a+b-c) \cdot (a-d)}{a-d} = \frac{e \cdot (a-d)}{a-d}$$

$$a + b - c = e$$

Einen sehr großen Anwendungsbereich für Gleichungen stellen die Funktionen (s. S. 36ff) dar. Ein einfaches Beispiel findet man in den Größengleichungen. Es soll sich ein Part a zu einem Part b verhalten wie c zu einem gesuchten Wert x. Dies sieht in Formeln folgendermaßen aus:

$$a : b = c : x$$

oder

$$\frac{a}{b} = \frac{c}{x} \quad \Big| \cdot (b \cdot x)$$

$$\frac{a \cdot b \cdot x}{b} = \frac{c \cdot b \cdot x}{x}$$

$$a \cdot x = c \cdot b \quad \Big| : a$$

und

$$x = \frac{c \cdot b}{a}.$$

Bei Berechnungen kommt es oft vor, daß mehrere Terme, z.B. Summen von Brüchen, zusammengefaßt werden müssen. Dies geschieht, indem man die einzelnen Ausdrücke durch sogenanntes Erweitern auf einen gemeinsamen Nenner, den **Hauptnenner** bringt, zusammenfaßt und dann weiterrechnet. An Hand der folgenden Beziehung wird dies erläutert,

$$\frac{a}{b^2} + \frac{c}{b(d-f)} - e.$$

Als Hauptnenner läßt sich am einfachsten das Produkt sämtlicher auftretender Divisoren wählen. Er ergäbe sich also in diesem Falle zu

$$b^2 \cdot b(d-f) = b^3(d-f).$$

Durch Erweitern mit dem Produkt aus allen Divisoren mit Ausnahme des Nenners des betrachteten Ausdrucks werden die einzelnen Terme auf diesen Hauptnenner gebracht und zusammengefaßt.

$$\frac{a}{b^2} \cdot \frac{b(d-f)}{b(d-f)} + \frac{c}{b(d-f)} \cdot \frac{b^2}{b^2} - e \cdot \frac{b^3(d-f)}{b^3(d-f)}$$

$$= \frac{ab(d-f) + b^2 c - b^3 e(d-f)}{b^3(d-f)}$$

$$= \frac{b[a(d-f) + bc - b^2 e(d-f)]}{b^3(d-f)} = \frac{(d-f)(a-b^2 e) + bc}{b^2(d-f)}$$