

# Partielle Differentialgleichungen in der Biotechnologie



Die Biotechnologie ist ein noch recht junger Technologiebereich mit zunehmend grossem Einfluss. Seine Entwicklung wird letztlich schnellere Diagnostiken, individueller zugeschnittene Therapien und auch die Entwicklung von Pharmazeutika mit weniger Nebenwirkungen zur Folge haben. Das Wirtschaftspotential ist riesig und der Wettbewerb um Marktanteile wird in erster Linie von modernster Technologie entschieden. Gerade kleineren Firmen und Forschungsgruppen werden dabei wichtige Aufgaben zufallen, denn die grösseren Unternehmen werden in Zukunft auf kleine hochspezialisierte Forschungsteams zurückgreifen.

Das grosse Marktpotential und das ausgeprägte Wettbewerbsdenken auf diesem Sektor hat zur Folge, dass die Schritte von der ersten Idee bis zur Realisierung des ersten Prototyps in immer kürzerer Zeit erledigt werden müssen. Eine wichtige Rolle spielt dabei die mathematische Modellierung, die es ermöglicht, sowohl den Entwicklungsprozess neuer Prototypen zu beschleunigen als auch das Verständnis von Experimenten zu erleichtern. Versucht man einen Prozess zu beschreiben, der mehr als eine unabhängige Variable enthält (z.B. eine zeit- und eine raumabhängige), dann verwendet man partielle Differentialgleichungen. In biochemischen Systemen werden partielle Differentialgleichungen oft dazu benutzt, um Transport-Reaktions-Prozesse z.B. in Mikroreaktoren, ionischen Chromatographie-Säulen, Elektrophorese in Biochips oder ähnliche Prozesse zu beschreiben. Mit anderen Worten: Partielle Differential-

gleichungen sind die Basis für eine grosse Bandbreite von virtuellen Experimenten, die es ermöglichen, ein System zu erforschen, noch bevor es im Labor realisiert worden ist. Abb. 1 zeigt die Konzentrationsverteilung von Phosphaten in einem Blutdialyseprozess unter Benutzung der Hohlfasermembran-Separation. Bei diesem Prozess findet gleichzeitig ein Fluss des Dialysats innerhalb und des Permeats ausserhalb der Fasern statt. Wegen der unterschiedlichen Konzentration diffundiert das kontaminierte Blut durch die Wände der Hohlfasern zum Permeat hin, während die Verunreinigungen mit dem höheren Molekulargewicht wegen ihrer geringeren Löslichkeit und Diffusionsfähigkeit in den Membranen zurückgehalten werden. Versuche zur Herstellung von Pharmazeutika werden im Labor zumeist in Reaktoren im Chargenbetrieb durchgeführt. Dabei ist es entscheidend, Zusammensetzung und Tem-

peratur im Reaktor sorgfältig zu überwachen, weil sie sowohl die Umwandlung als auch die Selektivität im jeweiligen Prozess bestimmen. Aus diesem Grund spielen die hydrodynamischen Bedingungen eine grosse Rolle.

Abb. 2 zeigt den absoluten Wert des Geschwindigkeitsvektors in einem solchen Reaktor zu einer vorgegebenen Zeit. Der Einfluss durch den Antrieb wird als Maximum im Geschwindigkeitsvektor dargestellt. Ausserdem werden verschiedene grössere Wirbel angezeigt, die Bereiche mit geringerer Geschwindigkeit zur Folge haben. Die Ausbreitung der Wirkstoffe und auch die Umwandlung sind hier wegen der schwachen Durchmischung an den Wänden des Reaktors nicht gleichmässig. Durch eine ganze Reihe von virtuellen Experimenten kann die Vermischung jedoch deutlich verbessert werden, bevor der Reaktor dann letztlich hergestellt wird.

Neben den hier beschriebenen Beispielen gibt es in der Biotechnologie für die Simulation natürlich auch zahlreiche andere Anwendungen. Sehr oft schliesst der Modellbildungsprozess miteinander gekoppelte Phänomene ein, so dass die Simulations-Software in der Lage sein muss, sehr schnell ein ganzes System von partiellen Differentialgleichungen zu verarbeiten. Die Modelle, die oben beschrieben wurden, wurden mit der Finite-Elemente-Software «FEMLAB» erzeugt. Mit FEMLAB können Aufgabenstellungen aus ganz unterschiedlichen Anwendungsgebieten wie z. B. Strömungsmechanik, Elektromagnetik, Strukturmechanik oder auch benutzerdefinierte Anwendungen bearbeitet werden, die alle auf partiellen Differentialgleichungen basieren.

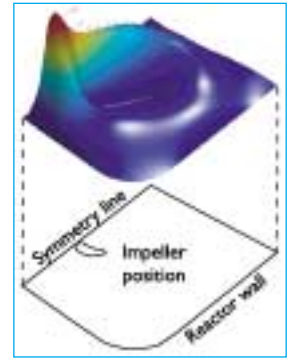


Abb. 2

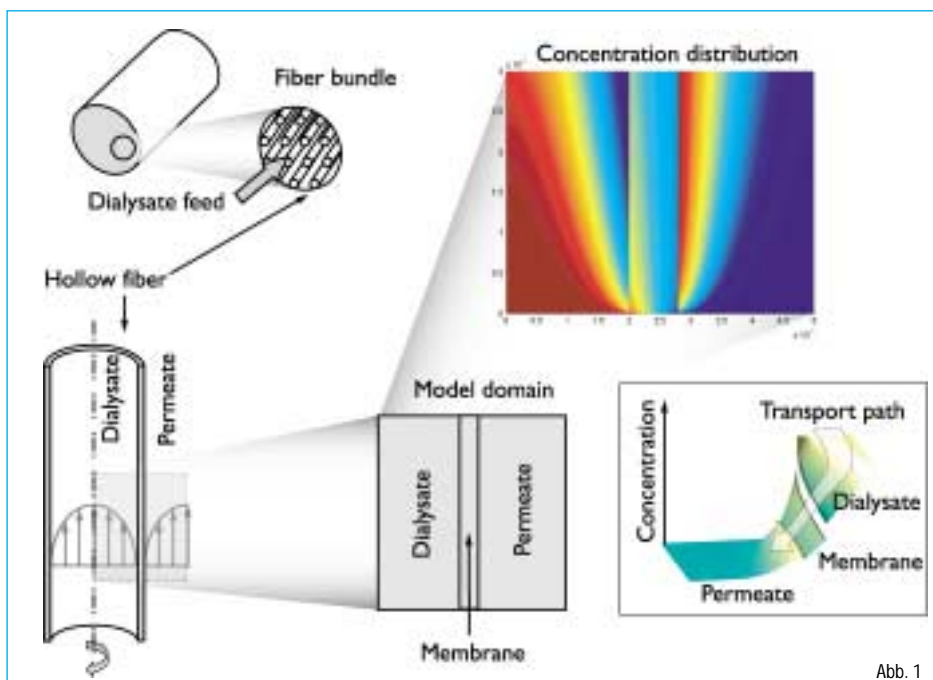


Abb. 1

FEMLAB GmbH  
 Berliner Str. 4, D-37073 Göttingen  
 Tel. (+49) 551 52 11 720, Fax. (+49) 551 52 11 810