

## Uporaba Solver-ja v Excel-u za prileganje nelinearnih krivulj

Uporaba Solver-ja v Microsoft Excel-u za prileganje nelinearne krivulje na dane podatke je prikazana na primeru Michaelis-Mentenove reakcijske kinetike; enačba:

$$v = v_{\max} \frac{[S]}{K_m + [S]}$$

Kot podatki so podane eksperimentalno določene hitrosti encimsko katalizirane reakcije ( $v$ ) pri različnih koncentracijah substrata ( $[S]$ ).

V kolikor Solver-ja ne najdete med orodji ga instalirajte oz. aktivirajte preko menija »Add-Ins«.

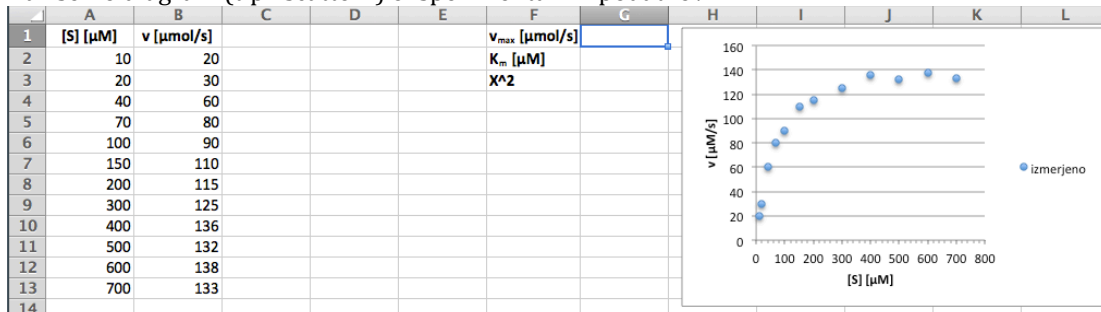
1. V Excel-u ustvarimo tabelo, kjer v stolpca vnesemo podatke  $x$  in  $y$ . V našem primeru gre za eksperimentalne podatke: koncentracijo substrata (v stolpcu A) ter izmerjeno reakcijsko hitrost (v stolpcu B). Pri tem moramo biti pozorni, v kakšnih enotah so te količine, saj od tega zavisijo tudi enote izračunanih parametrov.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	[S] [μM]	v [μmol/s]										
2	10	20										
3	20	30										
4	40	60										
5	70	80										
6	100	90										
7	150	110										
8	200	115										
9	300	125										
10	400	136										
11	500	132										
12	600	138										
13	700	133										
14												

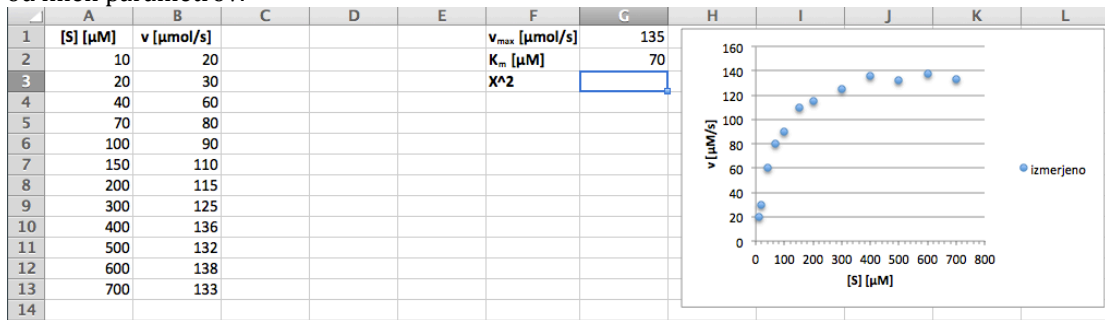
2. Ob strani nekaj stolpcev v desno v prazen stolpec vnesemo imena parametrov, katerih vrednost želimo določiti, v zadnjo celico pa vnesemo »X^2«.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	[S] [μM]	v [μmol/s]				$v_{\max}$ [μmol/s]						
2	10	20				$K_m$ [μM]						
3	20	30				$X^2$						
4	40	60										
5	70	80										
6	100	90										
7	150	110										
8	200	115										
9	300	125										
10	400	136										
11	500	132										
12	600	138										
13	700	133										
14												

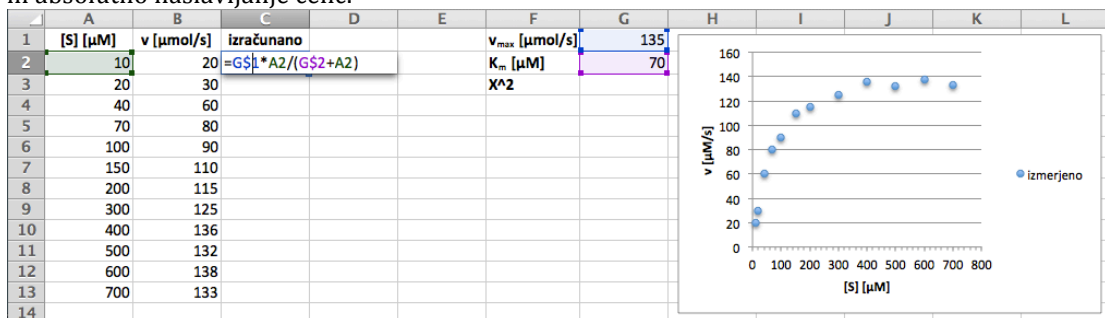
3. Narišemo diagram (tip »scatter«) eksperimentalnih podatkov.



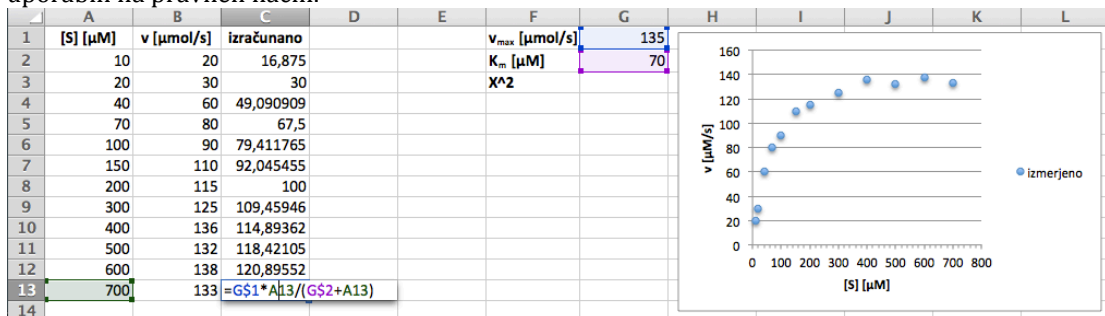
4. S pomočjo diagrama približno ocenimo vrednosti parametrov. Ocenjene vrednosti vpišemo desno od imen parametrov.



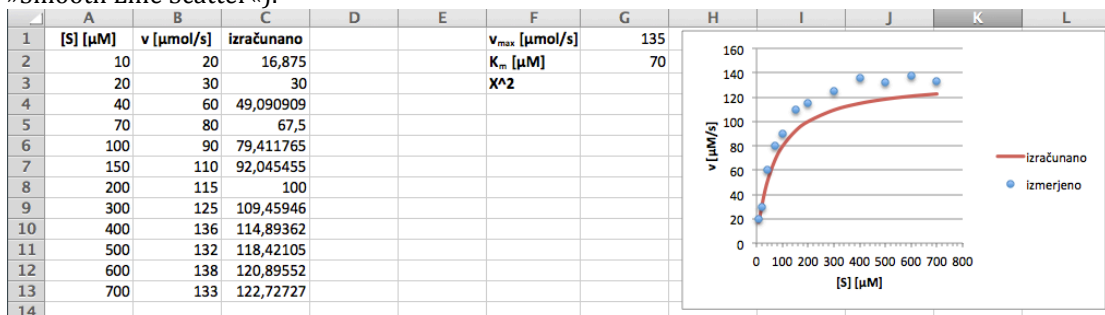
5. Desno od tabele z eksperimentalnimi podatki vnesemo v zgornjo vrstico novega stolpca formulo, ki opisuje zvezo med vrednostmi x in y ter parametri na desni. Pri zapisovanju formule je pomembno, da te vrednosti vstavljamo v obliki naslovov celic ter da pravilno uporabimo relativno in absolutno naslavljanje celic.



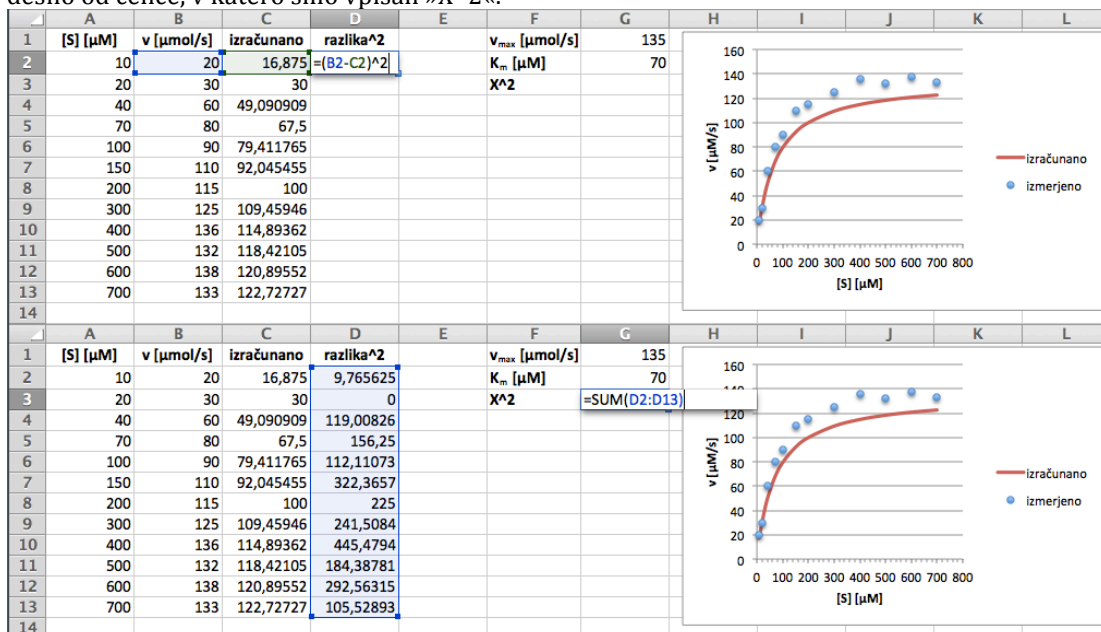
6. Formulo skopiramo v do konca tabele in preverimo, ali smo relativno/absolutno naslavljanje celic uporabili na pravi način.



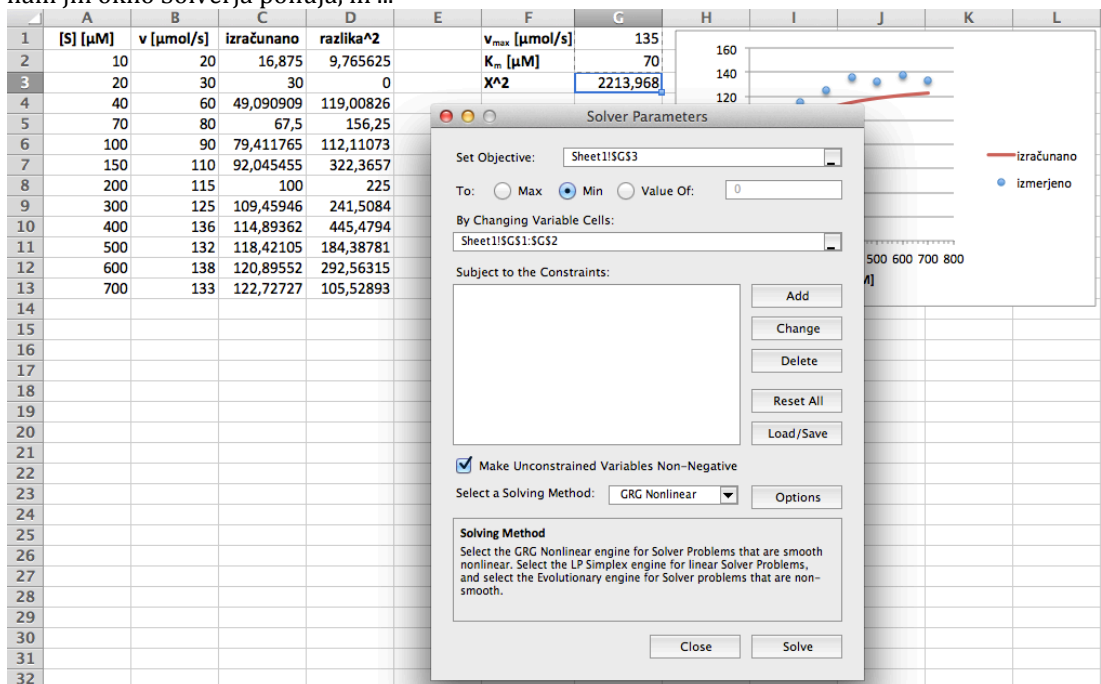
7. Izračunane vrednosti narišemo v isti diagram kot eksperimentalne podatke (uporabimo lahko »Smooth Line Scatter«).



8. V nov stolpec na desni vnesemo formulo, ki nam izračuna kvadrat razlike med izmerjeno in na osnovi ocen parametrov izračunano vrednostjo spremenljivke  $y$ . Vsoto teh kvadratov vnesemo desno od celice, v katero smo vpisali » $X^2$ «.

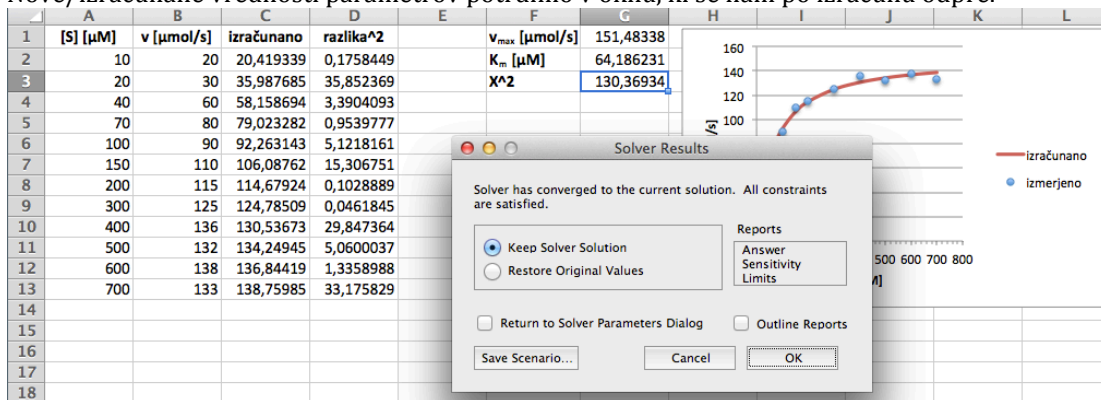


9. Zaženemo Solver. Pod »Set Objective:« označimo celico, ki vsebuje vsoto kvadratov razlik iz prejšnje točke, pod »To:« izberemo »Min«, pod »By Changing Variable Cells:« pa izberemo celice, ki vsebujejo ocenjene vrednosti parametrov (brez » $X^2$ «). Po potrebi prilagodimo možnosti, ki nam jih okno Solverja ponuja, in ...



10. ... kliknimo »Solve«. Solver bo sedaj vrednosti parametrov prilagajal tako, da bo vsota razlik kvadratov med izmerjenimi in na osnovi ocen parametrov izračunanimi vrednostmi spremenljivke  $y$  najmanjša – takrat bo tudi ujemanje med eksperimentalnimi točkami in izračunano krivuljo najboljše.

11. Nove/izračunane vrednosti parametrov potrdim v oknu, ki se nam po izračunu odpre.



12. Oglejmo si še krivuljo, ki opisuje na osnovi prilagojenih/optimalnih vrednosti parametrov izračunane vrednosti spremenljivke  $y$ .

