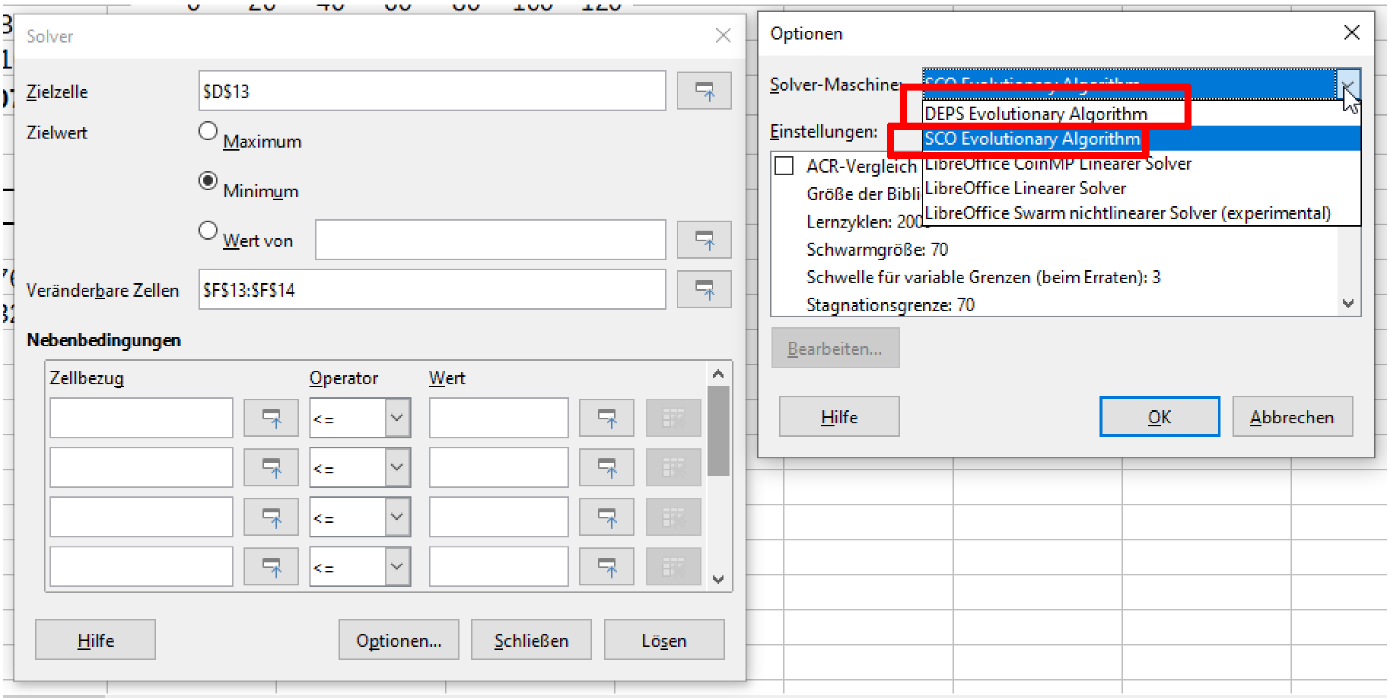
Kurvenanpassung mit LibreOffice CALC mithilfe des Solvers an die MM-Gleichung C3BL

Vergewissern Sie sich zu Beginn, dass ein *Solver für nichtlineare Probleme* installiert ist. Das erkennen Sie daran, dass unter *EXTRAS → SOLVER → OPTIONEN* mehrere Solver-Maschinen zu finden sind. Zumindest einer der beiden rechts eingekästelten Einträge (*siehe Abbildung*)sollte dort zu finden sei. Ist ein solche Solver-Maschine nicht zu finden, kann sie über den Extensions-Manager (auch unter EXTRAS) nachinstallieren werden.



Ausgangssituation und Aufgabenbeschreibung

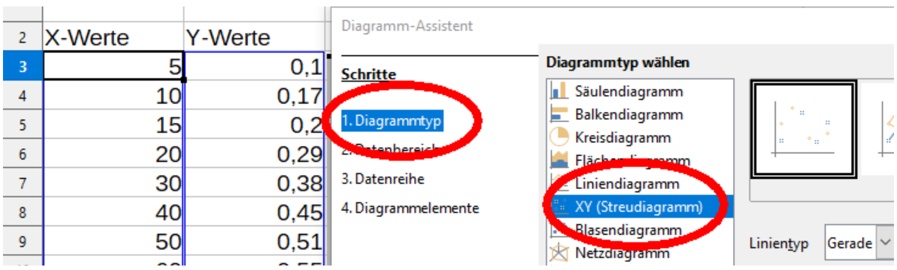
In einem Experiment wurden einige Datenpunkte aufgenommen. Nun sollen die Näherungsfunktion gefunden werden, die den Zusammenhang mathematisch beschreibt. Die Funktion soll folgende Form haben:

$$y=\frac{v_{max}\cdot x}{K_M\cdot x}$$ MICHAELIS-MENTEN-Gleichung (MM-Gleichung)

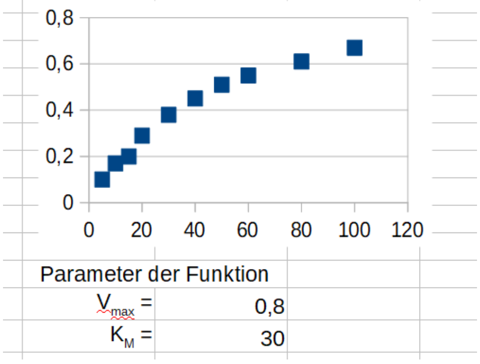
Es müssen die beiden **Parameter** der Funktion, v_{max} (Maximalgeschwindigkeit) und K_M (MICHAELIS-Konstante) herausgefunden werden.

Durchführung

1. Tragen Sie zuerst die X und Y-Werte in die Tabelle ein und lassen Sie sich das xy-Diagramm anzeigen. Markieren Sie hierzu die Zahlenwerte und gehen Sie über ***EINFÜGEN***, und ***DIAGRAMM*** zum Diagrammassistent. Wählen Sie dort unter Diagrammtyp ***XY (Streudiagramm)***.



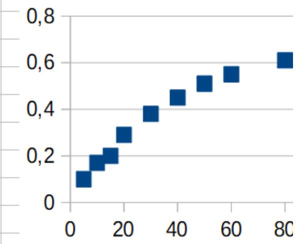
2. Schätzen Sie die Parameter der Funktion (V_{max} und K_M) anhand des Schaubilds **GANZ GROB** ab. Die Werte werden später durch den *Solver* automatisch optimiert. Hinweis für die Michaelis-Menten-Gleichung/Substratsättigungskurve: V_{max} ist der maximale y-Wert dem sich die Kurve annähert, im Diagramm rechts z.B. 0,8. K_M ist der x-Wert, bei dem ½ v_{max} erreicht wird. Wenn v_{max} ca. 0,8 ist, dann ist ½ v_{max} ca. 0,4. Der x-Wert dort beträgt, wenn man das Lot fällt, ca. 30 *(siehe Diagramm)*. Tragen Sie die geschätzten Werte (V_{max} und K_M) in zwei beliebige Zellen ein .



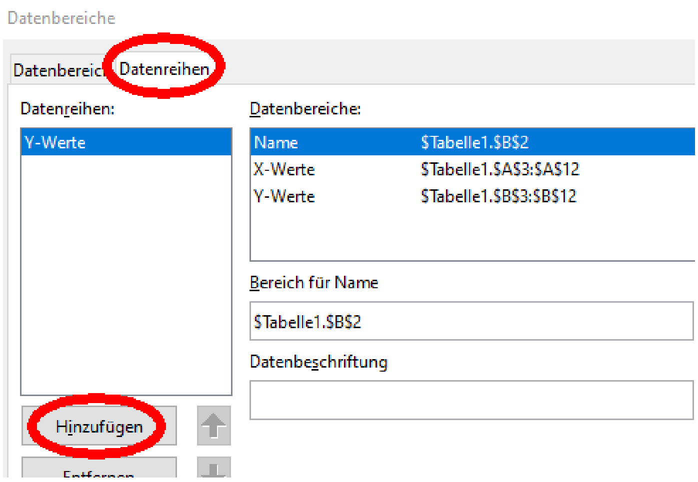
3. Die Spalte neben „Y-Werte" beschriften Sie mit ***„rechnerische Y-Werte mit Parametern"***. Dort lassen Sie sich die y-Werte mit den geschätzten Parametern berechnen. Die Formel entspricht der Modellfunktion, bei uns der MM-Gleichung. Bei uns für die erste Zeile z.B. $y=\frac{v_{max} \cdot x}{K_M \cdot x}=\frac{F13 \cdot A3}{F14+A3}$. Die folgende Abbildung wird in Spalte C die Formeldefinitionen angezeigt. Bei richtiger Programmierung erscheinen bei Ihnen dort Zahlen! Beachten Sie die Ergebnisse mit denb Parametern und dem jeweiligen x-Wert berechnet werden.

C3:C12 | =(F13*A3)/(F14+A3)

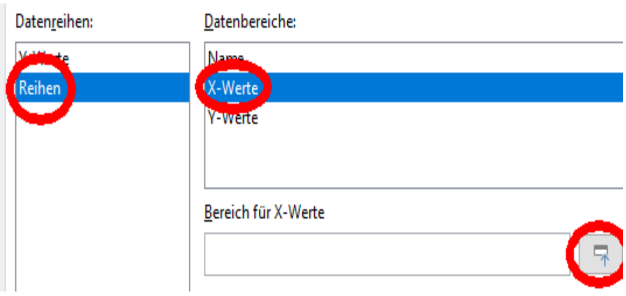
	A	B	C	D	E	F
1						
2	X-Werte	Y-Werte	rechnerische Y-Werte mit Parametern	Abstandsquadrate		
3	5	0,1	=(F13*A3)/(F14+A3)			
4	10	0,17	=(F13*A4)/(F14+A4)			
5	15	0,2	=(F13*A5)/(F14+A5)			
6	20	0,29	=(F13*A6)/(F14+A6)			
7	30	0,38	=(F13*A7)/(F14+A7)			
8	40	0,45	=(F13*A8)/(F14+A8)			
9	50	0,51	=(F13*A9)/(F14+A9)			
10	60	0,55	=(F13*A10)/(F14+A10)			
11	80	0,61	=(F13*A11)/(F14+A11)			
12	100	0,67	=(F13*A12)/(F14+A12)		Parameter der Funktion	
13					Vmax =	0,8
14					KM =	30



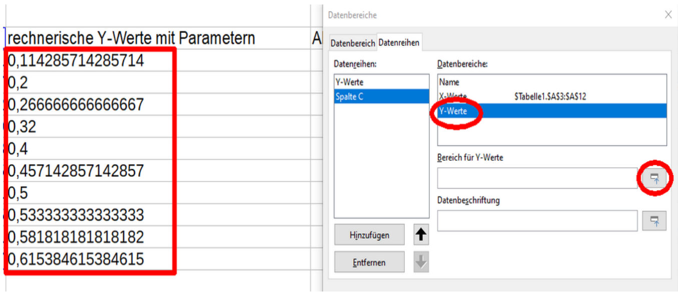
4. Lassen Sie sich in das gleiche Diagramm nun die dazugehörige Schätzkurve anzeigen: Doppelklicken Sie hierzu auf das Diagramm und klicken Sie dann mit der rechten Maustaste auf einen der Datenpunkte. Im erscheinenden Menü wählen Sie ganz unten ***Datenbereiche***. Gehen Sie auf das Registerblatt Datenreihen und klicken Sie aus ***Hinzufügen***.



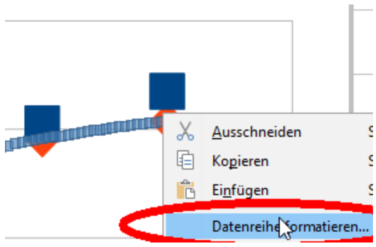
5. Bei ***„Bereich für X-Werte“*** klicken Sie auf das Symbol für die Bereichsauswahl und markieren Sie in der Tabelle die Zellen mit den X-Werten.

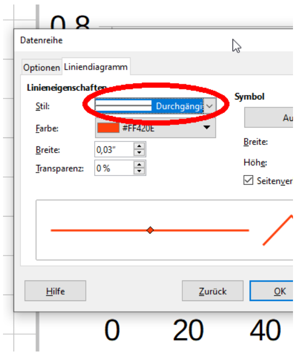


6. Bei *Y-Werte* wählen Sie mit der gleichen Methode die <u>rechnerischen</u> y-Werte <u>mit Parametern</u>. aus.



7. Wenn Sie nun wieder auf das Diagramm Doppelklicken und mit der <u>rechten</u> Maustaste auf einen der neuen Punkte klicken, können Sie unter ***Datenreihe formatieren…***, die Darstellung so ändern, dass diese zweite Reihe als Kurve dargestellt wird. Hierzu bei Stil ***„Durchgängig“*** auswählen.





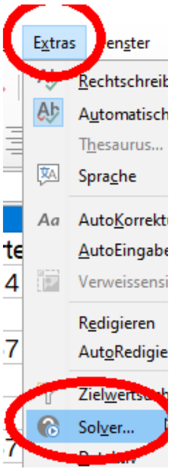
8. Spielen Sie jetzt etwas mit den Zahlenwerten der Parameter, um zu sehen, was für ein Einfluss das auf die Kurve des Diagramms im Vergleich zu den echten Datenpunkten hat.
9. Als Nächstes lassen wir den Abstand (Differenz) zwischen dem tatsächlichen Y-Wert und dem mit den Parametern berechneten Y-Wert berechnen. Damit das Ergebnis u.a. stets ein positives Vorzeichen hat, quadrieren wir das Ergebnis, nehmen es also *hoch 2 (^2)*. Ganz unten summieren wir diese Abstände mit der Summenfunktion (Σ) auf.

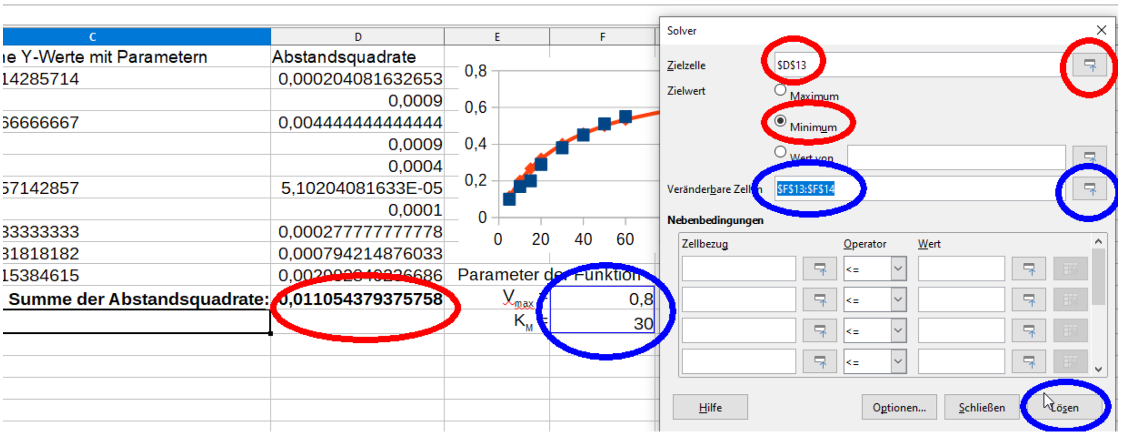
D3:D12 =(B3-C3)^2

	A	B	C	D
2	X-Werte	Y-Werte	rechnerische Y-Werte mit Parametern	Abstandsquadrate
3	5	0,1	=(F13*A3)/(F14+A3)	=(B3-C3)^2
4	10	0,17	=(F13*A4)/(F14+A4)	=(B4-C4)^2
5	15	0,2	=(F13*A5)/(F14+A5)	=(B5-C5)^2
6	20	0,29	=(F13*A6)/(F14+A6)	=(B6-C6)^2
7	30	0,38	=(F13*A7)/(F14+A7)	=(B7-C7)^2
8	40	0,45	=(F13*A8)/(F14+A8)	=(B8-C8)^2
9	50	0,51	=(F13*A9)/(F14+A9)	=(B9-C9)^2
10	60	0,55	=(F13*A10)/(F14+A10)	=(B10-C10)^2
11	80	0,61	=(F13*A11)/(F14+A11)	=(B11-C11)^2
12	100	0,67	=(F13*A12)/(F14+A12)	=(B12-C12)^2
13			**Summe der Abstandsquadrate:**	**=SUMME(D3:D12)**

10. Die Summe der Abstandquadrate ist ein Maß wie gut unsere Näherungsfunktion ist! Spielen Sie erneut etwas mit den Zahlenwerten der Parameter, um zu sehen, was für ein Einfluss das auf diese Kennzahl hat: Je schlechter die Parameter passen, dessto größer wird die Kennzahl. Je kleiner diese Kennzahl ist, desto besser ist die Näherung, da dann die Abweichungen zwischen realen und geschätzten y-Werten gering ist. Im nächsten Schritt, lassen wir LibreOffice automatisch so lange die Parameter verändert, bis dieser Zielwert minimal wird.

11. Hierzu nutzen wir unter *Extras* den *Solver.*





Die Zielzelle deren Inhalt minimiert (***Minimum*** anklicken!) werden soll, ist diejenige mit der Summe der Abstandsquadrate (auswählen!). Zum Minimieren darf LibreOffice den Inhalt der beiden Parameterzellen verändert (beide Auswählen). Unter OPTIONEN wählen Sie eine der beiden Solver-Maschinen (DEPS oder SCO) aus, die ganz oben in diesem Dokument erwähnt sind (rote Kästen im ersten Bild). Wählen Sie unter OPTIONEN dabei „*Von nicht negativen Variablen ausgehen“* aus.

12. Klicken Sie auf ***Lösen*** und schauen Sie wie sich die beiden Paramterzellen verändert/optimiert haben. Klicken Sie noch 1-2 mal auf ***Fortfahren***, um ein evtl.noch ein paar Nachkommastellen nachzujustieren. Prüfen Sie, dass die Kurve gut an die Punkte angepasst wurde. Klicken Sie aus ***Übernehmen***. Nun wurden die beiden Paramter K_M und V_{max} herausgefunden.