Gnuplot 3.7.1

K úloze: *Stanovení Michaelisovy konstanty trypsinu*

Martin Hassman

14. prosince 2002

1 Úvod

Program `gnuplot` je volně šiřitelný, můžete si jej zdarma kopírovat a používat. Je vhodný pro rozmanité nelineární regrese a tvorbu dvou- a třídimensionálních grafů. Následuje návod k spočtení *Michaelisovy konstanty* pomocí tohoto programu.

2 Zadání dat

Vstupní data je nutno zapsat do textového souboru. K tomu lze použít libovolný textový editor. My použijeme `notepad`, který je dostupný na všech instalacích `windows`.

Buď nalezneme položku `notepad` v systémovém menu nebo program `notepad` spustíme kliknutím na tlačítko `Start`, zadáme `Run...` (`Spustit`), do zobrazeného dialogu napíšeme příkaz `notepad` a potvrdíme `OK`.

Do souboru zapisujeme hodnoty stylem *co řádek, to jedno měření.* Napřed spočtenou koncentraci substrátu a za ní změřenou absorbanci, kterou oddělíme mezerou. Soubor může vypadat třeba takto:

```
0.005 0.301
0.005 0.309
0.01 0.450
0.01 0.481
0.02 0.654
0.02 0.658
0.03 0.711
0.03 0.723
0.04 0.789
0.04 0.785
```

Je nutno upozornit, že se jedná o ukázková data, a není vhodné se zde uvedenými hodnotami příliš inspirovat ve vašem protokolu. Soubor uložíme do adresáře `E:\data\lab` (`notepad` k názvu souboru automaticky přidá příponu `.txt`).

3 Spuštění programu

Program `gnuplot` spustíme standardní cestou. Buď nalezneme položku `gnuplot` v systémovém menu nebo opět zkusíme `Start`→`Run...`→`gnuplot`→`OK`. Objeví se okno, ve kterém se nám program slušně představí, a zobrazí řádku uvozenou `gnuplot>`, do které můžeme zadávat příkazy, kterými se program ovládá. Napřed je nutné se přepnout do adresáře, do kterého jsme uložili náš soubor s daty. To uděláme pomocí příkazu:

```
cd "E:\data\lab"
```

To, že jsme se přepnuli správně se můžeme přesvědčit pomocí příkazu: `pwd` (Print Working Directory), který vypíše aktuální adresář.

Pozn.: Program rozlišuje malá a velká písmena, dejte tedy pozor na to, že `pwd` je něco jiného než `PWD` – říkáme, že program je *case sensitive.*

Nyní si zobrazíme data z připraveného souboru:

```
plot "nazev.txt"
```

kde místo nazev.txt napíšete název vašeho souboru s daty. Objeví se okno s grafem, ve kterém jsou zobrazeny změřené body.

4 Proložení změřených dat

Nyní změřená data proložíme křivkou. Definujeme si funkci `f(x)`, která je zápisem rovnice *Michaelis-Mentenové*:

```
f(x) = Vlim + x / (Km + x)
```

O proběhnutém definování funkce se můžeme přesvědčit příkazem `show functions`. Zadejte příkaz `show variables` a objeví se seznam definovaných proměných. V něm jsou vidět dvě proměnné `Vlim` a `Km`, které jsou zatím nedefinované. Proto jim přiřadíme počáteční hodnoty pro následující nelineární regresi. Počáteční hodnoty odečteme „okometricky“ ze zobrazeného grafu a přiřadíme je proměnným (nezapomeňte, že záleží na velikosti písmen):

```
Vlim = 0.8
Km = 0.01
```

Zobrazíme si nyní graf znovu a přidáme do něj naši definovanou funkci:

```
plot "nazev.txt", f(x)
```

(Pokud nechceme psát příkazy stále znovu, lze použít klávesy $\boxed{\uparrow}$ a $\boxed{\downarrow}$ pro listování historií příkazů.) Nyní kromě změřených bodů vidíme i křivku snažící se dané body proložit. Dle kvality vašich nástřelů to je více nebo méně přesné. Pokud chcete, můžete nástřely upravit (přiřazením nové hodnoty a opětným zavoláním příkazu `plot "nazev.txt", f(x)` uvidíte nový výsledek). Vlastní regresi spustíme příkazem:

```
fit f(x) "nazev.txt" via Vlim, Km
```

Objeví se dlouhý výpis, na jehož konci pod nápisem `'Final set of parameters'` jsou ve třech sloupcích výsledné hodnoty, za nimi jejich chyby a ve třetím sloupci jsou chyby vyjádřené v procentech. Program zároveň vytvořil soubor `fit.log`, do kterého zapsal poznámky k právě proběhlé regresi. Zavoláním `replot` si zobrazíme proložený graf a zkontrolujeme, zda regrese proběhla správně.

5 Úprava grafického výstupu

Pokud chceme graf použít do protokolu, je vhodné jej trochu upravit. Necháme si zobrazit graf od nuly:

```
plot [0:][0:] "nazev.txt", f(x)
```

Pokud bychom chtěli určit i horní souřadnici osy, tak to pro osu x uděláme např. takto:
`plot [0:0.05][0:] "nazev.txt", f(x)`

Vyrobíme popisky k osám:

```
set xlabel "[S] (mol/l)"
set ylabel "absorbance"
```

Pokud nechceme mít u grafu legendu, zadáme `set nokey`. Pro zobrazení našich úprav použijeme opět příkaz `replot`. Graf můžeme vytisknout příkazem `screendump`. Chceme-li výsledný graf vložit do nějakého programu, pravým klikem na graf zvolíme `Copy to Clipboard` a pak můžeme klávesovou kombinací `CTRL+V` vložit obrázek do většiny programů.

Můžeme také uložit výsledný obrázek do souboru, to je ale o něco komplikovanější. Rozhodneme se pro některý výstupní formát (např. gif, png, postscript) – jejich seznam lze získat příkazem `help terminal`. Např. si vybereme gif: `set terminal gif`. Zadáme název souboru `set output "nazev.gif"`. Nyní příkazem `replot` způsobíme, že se graf zapíše do souboru `nazev.gif`. K zobrazování výstupu do okna se lze vrátit příkazy `set terminal windows` a `set output`.

6 Ukončení programu

Program ukončíme příkazem `exit`. Na závěr po sobě ukliďte – smažte soubory, které jste vytvořili, i soubor `fit.log`, který byl automaticky vytvořen programem.

7 Kde získat program gnuplot

Program `gnuplot` můžete stáhnout např. z této adresy:

`http://biomikro.vscht.cz/maldiman/hassmanm/gnuplot`

Na zmíněné adrese jsem pro případné zájemce připravil tento návod v elektronické podobě. Naleznete zde program `gnuplot`, pár poznámek k jeho instalaci a několik návodů v angličtině, ale i v češtině. Můžete také použít originální adresu `DOPLNIT ADRESU`, odkud lze stáhnout `gnuplot` i pro jiné platformy než windows (linux, OS/2, Solaris, Amiga a mnoho dalších).

Program se vám může hodit i v jiných předmětech než v těchto laboratořích. Pokud vás zajímají možnosti programu, spusťte si z podadresáře `demo` soubor `all.dem`.