

MMHyperfit

Ajuste da equação de Michaelis-Menten a um conjunto de dados, por vários métodos

O MMHyperfit é um pequeno módulo da linguagem Python que implementa o cálculo dos parâmetros V e K_m da equação de Michaelis-Menten a partir de um conjunto de dados de a (concentração de substrato) e v_0 (velocidade inicial).

Os métodos incluídos são:

- As 3 linearizações da equação (**Lineweaver-Burk, Hanes, Eadie-Hofstee**)
- O ajuste direto da equação da hipérbole por **regressão não linear**
- O método não paramétrico das medianas generalizadas, mais conhecido como **método linear direto**

A utilização do módulo não está ainda bem documentada, mas é fornecido um Jupyter notebook, **demo.ipynb**, com um conjunto de dados de exemplo, facilmente adaptável a outros dados.

Instruções:

1. O MMHyperfit está no seguinte site:

<https://github.com/aeferreira/mmhyperfit/>

2. Há duas formas de executar o notebook demo.ipynb:
 - a. **Convencional**, baixando todos os ficheiros e executando o notebook, como na UC *Bioquímica Computacional*. Para isso, o Python, os módulos científicos e o ambiente Jupyter têm de estar instalados.
 - i. No site do MMHyperfit, faça download usando o botão **Clone or Download – Download ZIP**. 
 - ii. Extraia os ficheiros do ZIP para uma pasta e execute o servidor Jupyter nesta pasta. Em *Windows* basta **fazer duplo click** no ficheiro **open_jupyter.bat**.
 - b. Usando o (fantástico) serviço MyBinder (<https://beta.mybinder.org>), que corre um servidor Jupyter on-line por tempo limitado, mas que **não requer** a instalação das várias plataformas nos computadores pessoais

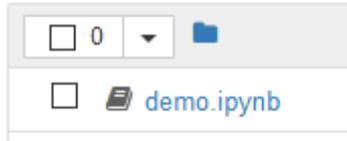
i. No site do MMHyperfit, use o botão *launch binder*



Em alternativa visite diretamente o site

<https://beta.mybinder.org/v2/gh/aeferreira/mmhyperfit/master>

3. Após executar o notebook **demo.ipynb**, **escolhendo-o na lista de ficheiros do Jupyter**:



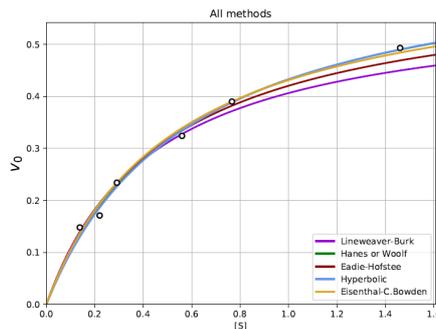
- a. Corra as duas células para experimentar o *notebook* com os **dados de demonstração** incluídos (*Cell – Run All*).
- b. Os resultados são os seguintes
 - i. Uma tabela com os resultados obtidos pelos 5 métodos. Para cada método são apresentados os **parâmetros** da equação de Michaelis-Menten e ainda os **erros padrão** (*standard errors, SE*) para estes parâmetros.

```
s = [ 0.138  0.22  0.291  0.56  0.766  1.46 ]  
v0 = [ 0.148  0.171  0.234  0.324  0.39  0.493]
```

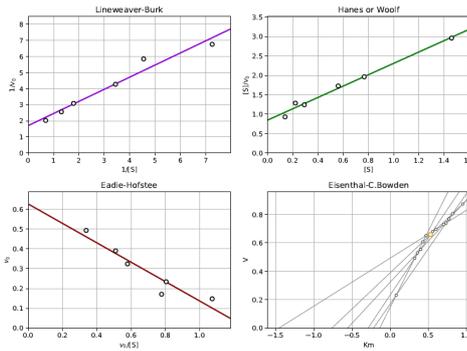
Method	V	SE_V	Km	SE_Km
Lineweaver-Burk	0.585	0.104	0.441	0.091
Hanes or Woolf	0.685	0.038	0.582	0.052
Eadie-Hofstee	0.626	0.060	0.490	0.083
Hyperbolic	0.690	0.037	0.597	0.068
Eisenthal-C.Bowden	0.659	nan	0.529	nan

(Pode ser feito *copy-paste* para usar os valores noutros documentos).

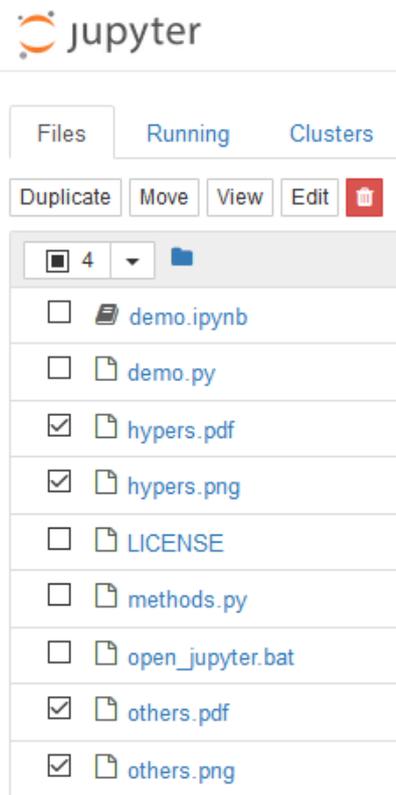
- ii. Um gráfico com os pontos experimentais e as 5 hipérbolas de Michaelis-Menten, obtidas pelos diferentes métodos.



- iii. Os gráficos intermédios das 3 linearizações e o gráfico do método linear direto



Estes gráficos podem ser obtidos em ficheiros de imagem [png](#) ou em [pdf](#). Para isso, na lista de ficheiros do Jupyter eles podem ser selecionados e obtidos com o botão *View*.



- c. Para agora **aplicar os cálculos a novos dados**, basta **substituir** os valores que estão na segunda célula e **voltar a executar esta célula**. Os resultados e os gráficos serão atualizados.

```
demo_data = """
s      v
0.138  0.148
0.220  0.171
0.291  0.234
0.560  0.324
0.766  0.390
1.460  0.493
"""
```

A red arrow points to the second row of data (0.220, 0.171) in the code block.