

Cinétiques enzymatiques michaéliennes avec le logiciel R

28 octobre 2006

Résumé

Présentation d'un script R permettant de déterminer les valeurs de K_M et V_{max} de cinétiques enzymatiques selon trois méthodes différentes : Lineaver-Burk, Eisenthal-Cornish-Bowden et ajustement non linéaire à une branche d'hyperbole. Pour chaque jeu de données expérimentales, les résultats sont présentés dans un même graphique avec un très bon rendu.

Le script peut être utilisé tel qu'il est ou être adapté pour analyser "en batch" les résultats de plusieurs expérimentateurs.

Table des matières

1 Récupération des valeurs expérimentales	1
1.1 Saisie au clavier (une méthode)	1
1.2 Saisie au clavier (une autre méthode)	1
1.3 Lecture dans un fichier de données	2
2 Utilisation de la fonction <code>Enzymo()</code>	2
2.1 Chargement du script	2
2.2 Utilisation de la fonction <code>Enzymo()</code>	2

1 Récupération des valeurs expérimentales

Dans ce document, les requêtes à saisir dans la console de R, juste après l'invite ">", sont en bleu et les résultats sont en rouge¹.

Les données expérimentales, concentrations initiales en substrat et vitesses initiales, sont introduites au clavier dans les variables s et v ².

1.1 Saisie au clavier (une méthode)³

```
s <- c(0.0052, 0.0104, 0.0208, 0.0416, 0.0833, 0.167, 0.333)
v <- c(0.866, 1.466, 2.114, 2.666, 3.236, 3.636, 3.636)
nom <- "Leonor"
s
```

```
[1] 0.0052 0.0104 0.0208 0.0416 0.0833 0.1670 0.3330
```

```
v
```

```
[1] 0.866 1.466 2.114 2.666 3.236 3.636 3.636
```

1.2 Saisie au clavier (une autre méthode)⁴

```
s <- scan()
s
```

```
[1] 0.0052 0.0104 0.0208 0.0416 0.0833 0.1670 0.3330
```

```
v <- scan()
v
```

¹Pour une présentation de R, se référer au portail du CRAN [2].

²Attention même sous Windows, R est sensible à la casse ; dans cet exemple, s et v sont des minuscules.

³Remarquer que R utilise le point "." et non la virgule "," comme délimiteur décimal. Le nom de l'expérimentateur est saisi dans la variable `nom` entre guillemets droits (") car il s'agit d'une "chaîne de caractères".

⁴Par défaut, la fonction `scan()` scrute le clavier. Pour arrêter la saisie d'une série de données, appuyer deux fois de suite sur la touche entrée.

```
[1] 0.866 1.466 2.114 2.666 3.236 3.636 3.636
```

```
nom <- "Maud"
```

1.3 Lecture dans un fichier de données

R possède plusieurs fonctions pour lire dans un fichier texte (.txt) local ou en réseau. De nombreux appareils de mesure ainsi que la plupart des logiciels sont capables d'enregistrer dans ce format.

Dans l'exemple suivant, le fichier `Maud_Leo.txt` se trouve dans le répertoire de travail de R mais ce n'est pas une obligation⁵. Ce fichier ne comprend qu'un jeu de données mais il est parfaitement possible d'y regrouper les résultats de plusieurs expérimentateurs⁶.

```
donnees <- read.table("Maud_Leo.txt")
donnees
```

```
      s      v
1 0.0052 0.866
2 0.0104 1.466
3 0.0208 2.114
4 0.0416 2.666
5 0.0833 3.236
6 0.1670 3.636
7 0.3330 3.636
```

```
s <- donnees$s
v <- donnees$v
s
```

```
[1] 0.0052 0.0104 0.0208 0.0416 0.0833 0.1670 0.3330
```

```
v
```

```
[1] 0.866 1.466 2.114 2.666 3.236 3.636 3.636
```

2 Utilisation de la fonction `Enzymo()`

2.1 Chargement du script

La fonction `Enzymo()` est une suite d'instructions R regroupées dans un fichier texte⁷. Elle permet d'estimer les paramètres K_M et V_{max} selon trois méthodes différentes :

- changement de variables et linéarisation (méthode de Lineweaver-Burk, 1934),
- résolution graphique sans changement de variables (Eisenthal-Cornish-Bowden, 1974),
- modélisation d'une branche d'hyperbole du type $y = \frac{ax}{b+x}$ par régression non linéaire (méthode des moindres carrés).

La fonction `source()` permet d'indiquer à R où se trouve le script. Dans l'exemple suivant, ce fichier se nomme `Enzymo` et a été placé dans le répertoire de travail de R.

```
source("Enzymo")
```

2.2 Utilisation de la fonction `Enzymo()`⁸

```
Enzymo(s, v, "Moi moi !")
```

Références

- [1] R DEVELOPMENT CORE TEAM, *R : A Language and Environment for Statistical Computing*, <http://www.R-project.org>, R Foundation for Statistical Computing, 2006.
- [2] COMPREHENSIVE R ARCHIVE NETWORK, <http://cran.r-project.org>.

⁵Il est aussi possible de décrire le chemin d'accès à ce fichier depuis le répertoire de travail. Idem si le fichier est disponible en réseau.

⁶Noter la syntaxe utilisée pour sélectionner une colonne particulière du tableau (`Nom_tableau$Nom_colonne`).

⁷Il est possible d'ouvrir et d'analyser ce fichier avec un éditeur de texte.

⁸Cette fonction appelle trois paramètres qui sont `s`, `v` et `nom`.

Valeurs expérimentales
Moi moi !

s =	0.0052	v =	0.866
	0.0104		1.466
	0.0208		2.114
	0.0416		2.666
	0.0833		3.236
	0.167		3.636
	0.333		3.636

FIG. 1 – Résultats obtenus avec la fonction Enzymo() : rappel des valeurs expérimentales et du nom de l'expérimentateur.

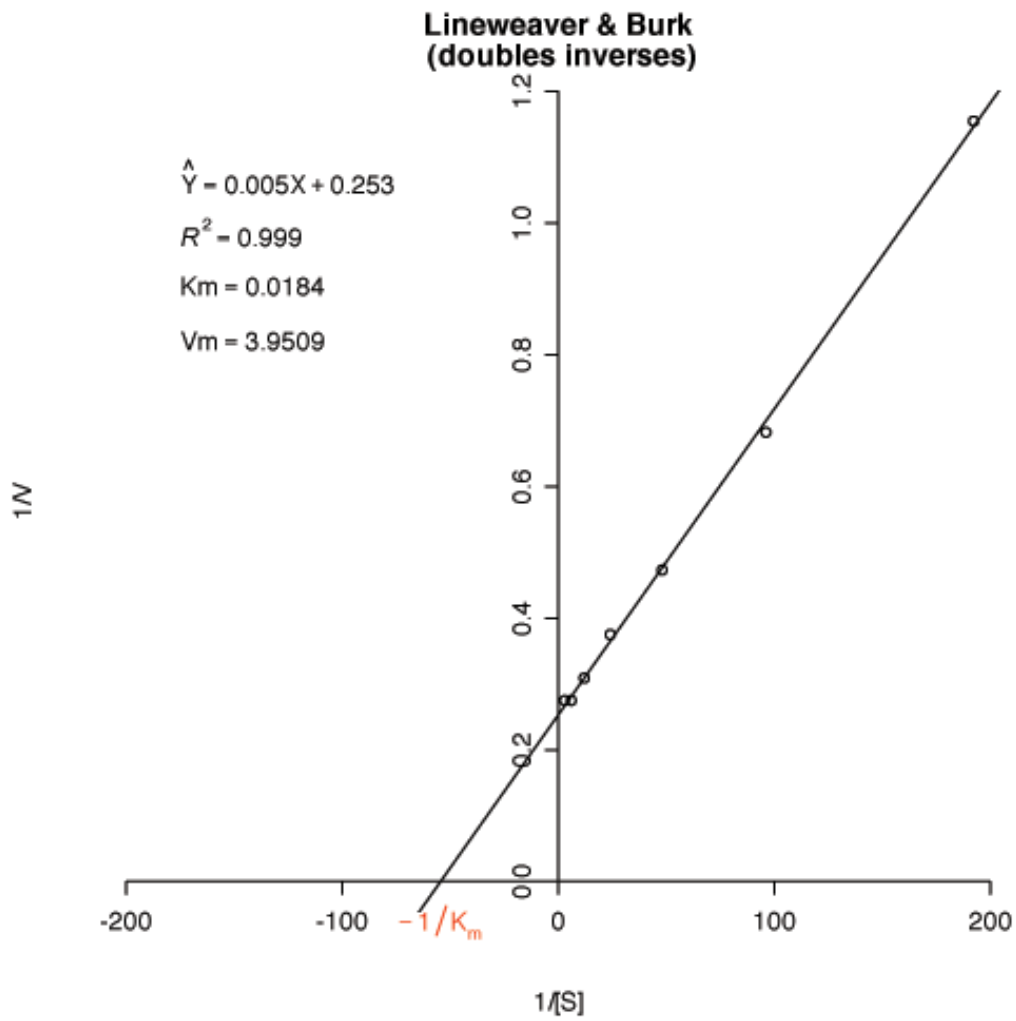


FIG. 2 – Résultats obtenus avec la fonction Enzymo() : méthode de Lineweaver-Burk.

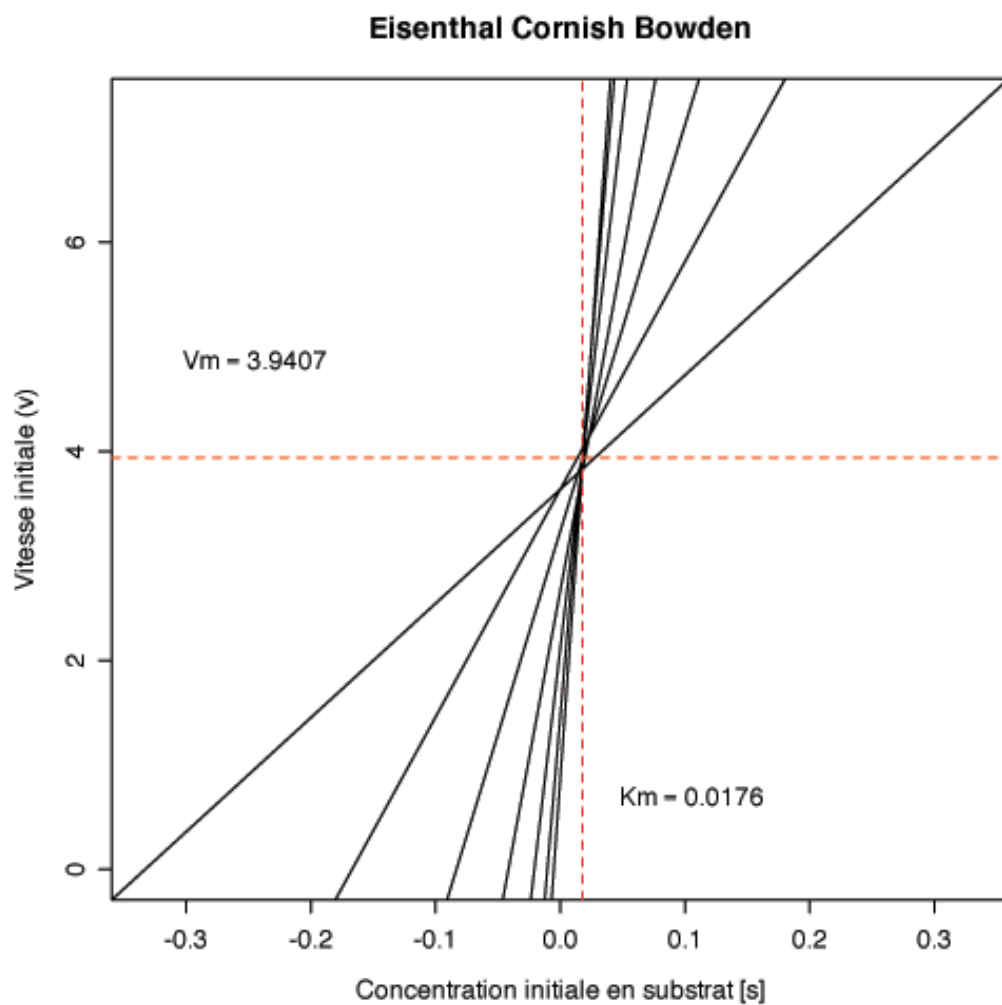


FIG. 3 – Résultats obtenus avec la fonction `Enzymo()` : méthode de Cornish-Bowden.

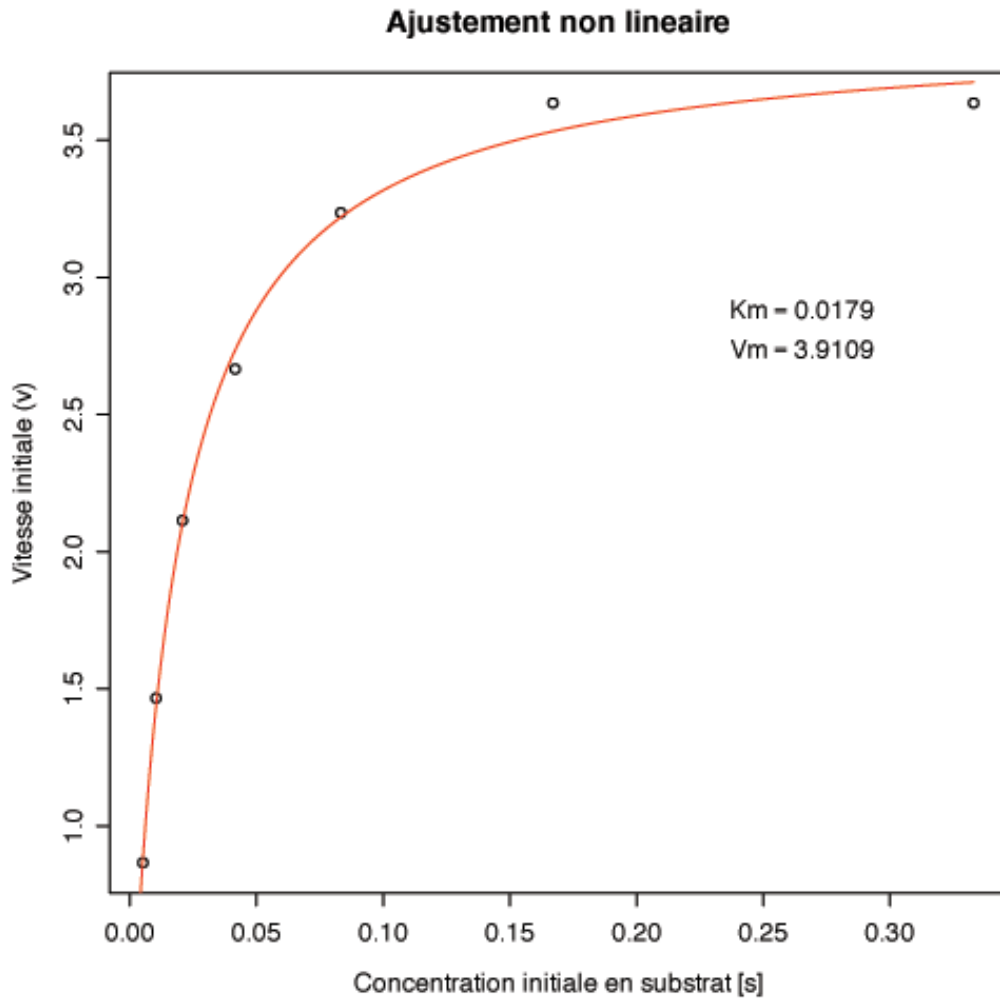


FIG. 4 – Résultats obtenus avec la fonction `Enzymo()` : méthode d'ajustement non linéaire.

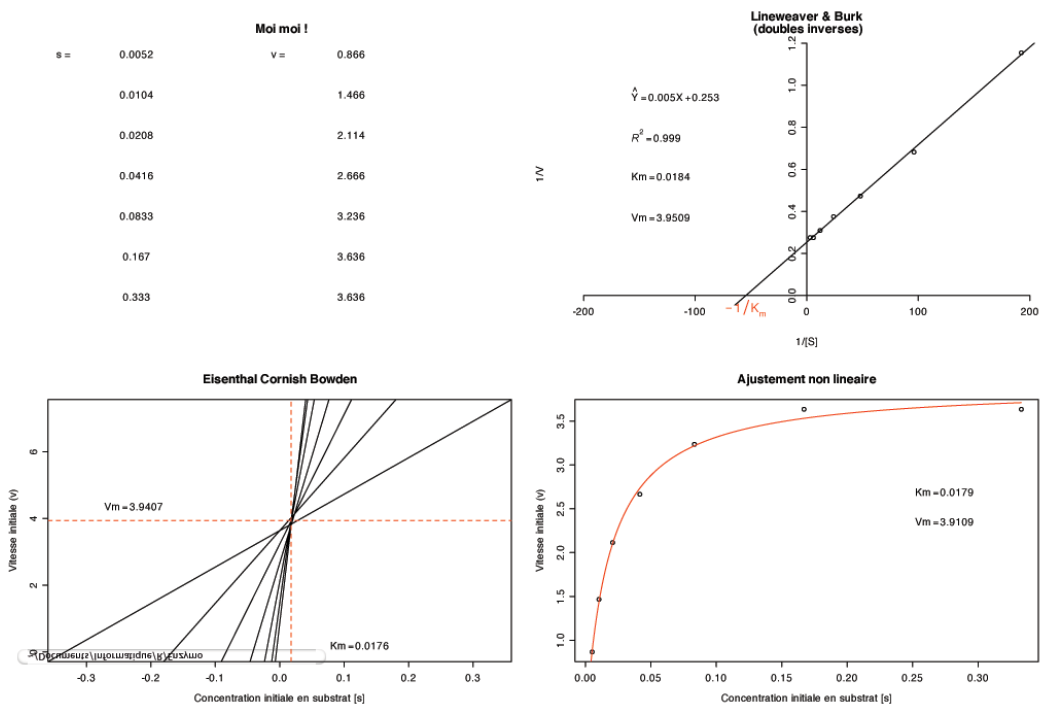


FIG. 5 – Exemple de résultats obtenus avec la fonction `Enzymo()`. Les résultats obtenus avec les différentes méthodes sont présentés sur le même graphique.