

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
ESCUELA DE MATEMÁTICA



“GEOMETRÍA DE CUATERNIONES”

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:
MARCELA GUADALUPE GUEVARA TOBAR
KEVIN FRANCISCO SERRANO SANTOS

PARA OPTAR AL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN MATEMÁTICA

CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, DICIEMBRE 2018

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
ESCUELA DE MATEMÁTICA



“GEOMETRÍA DE CUATERNIONES”

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:
MARCELA GUADALUPE GUEVARA TOBAR
KEVIN FRANCISCO SERRANO SANTOS

PARA OPTAR AL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN MATEMÁTICA

ASESOR INTERNO:
MSc. INGRID CAROLINA MARTÍNEZ BARAHONA

ASESOR EXTERNO:
Dr. MANUEL CRUZ LÓPEZ
UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO, MÉXICO

CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, DICIEMBRE 2018

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA
ESCUELA DE MATEMÁTICA



“GEOMETRÍA DE CUATERNIONES”

TRABAJO DE GRADUACIÓN PRESENTADO POR:
MARCELA GUADALUPE GUEVARA TOBAR
KEVIN FRANCISCO SERRANO SANTOS

PARA OPTAR AL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN MATEMÁTICA

TRIBUNAL CALIFICADOR:

Dr. DIMAS NOÉ TEJADA TEJADA
Lic. ERNESTO AMÉRICO HIDALGO

CIUDAD UNIVERSITARIA, SAN SALVADOR, DICIEMBRE 2018

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

MSc. Roger Armando Arias Alvarado
RECTOR

Ing. Nelson Bernabé Granados
VICE-RECTOR ADMINISTRATIVO

Lic. Cristobal Hernán Ríos Benítez
SECRETARIO GENERAL

Lic. Rafael Humberto Peña Marín
FISCAL GENERAL

FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y MATEMÁTICA

Lic. Mauricio Hernán Lovo Córdoba
DECANO

Lic. Carlos Antonio Quintanilla Aparicio
VICE-DECANO

Licda. Damarys Melany Herrera Turcios
SECRETARIA

ESCUELA DE MATEMÁTICA

Dr. José Nerys Funes Torres
DIRECTOR

Licda. Alba Idalia Córdoba Cuéllar
SECRETARIA

«Todo lo puedo en Cristo que me fortalece.»
Filipenses 4,13.

Agradecimientos

En primer lugar, a Dios Todopoderoso, por guiar nuestros pasos y permitirnos llegar hasta aquí. «A Él, la gloria y el poder por los siglos de los siglos».

A nuestras familias, por creer en nosotros en todo momento e impulsarnos cada día a cumplir nuestros sueños. No hubiéramos podido hacerlo sin ustedes.

A la Escuela de Matemática, por enseñarnos cada día la belleza infinita de esta ciencia, más allá de los números y de las limitaciones de las tres dimensiones espaciales en las que nos encontramos inmersos.

A la MSc. Ingrid Barahona, por sus correcciones y orientaciones. Gracias por su apoyo incondicional y por su paciencia.

Al Dr. Manuel Cruz, por compartir sus conocimientos con nosotros, por sus comentarios, por sus orientaciones, y por sugerir este tema tan maravilloso.

Y, finalmente, a la vida, por permitirnos coincidir.

K y M

Índice general

Índice de figuras	xI
Introducción	1
Metodología	3
1. Cuaterniones	5
1.1. Estructura algebraica	6
1.1.1. Álgebra de números complejos	6
1.1.2. Álgebra de cuaterniones	10
1.2. Rotaciones	15
1.2.1. Grupos matriciales	15
1.2.2. Rotaciones bidimensionales	16
1.2.3. Cuaterniones y rotaciones tridimensionales	19
1.2.4. Ángulos de Euler y cuaterniones	26
1.3. Visualización de esferas	28
1.3.1. Visualización de \mathbb{S}^1	29
1.3.2. Visualización de \mathbb{S}^2	31
1.3.3. Visualización geométrica de los cuaterniones sobre \mathbb{S}^3	35

2. Geometría diferencial de curvas	39
2.1. Curvas	40
2.1.1. Curvas parametrizadas	40
2.1.2. Curvas regulares	42
3. Estructura de proteínas	53
3.1. Proteínas	54
3.2. Marcos de referencia cuaterniónicos	59
3.2.1. El marco identidad	59
3.2.2. Marcos de referencia aislados	60
3.2.3. Rotación de marcos de referencia	61
3.3. Estructura secundaria de proteínas	64
3.3.1. Estructura global	64
3.3.2. Estructura local de proteínas	69
3.3.3. Rectitud y ángulos de Ramachandran	79
3.4. Conclusiones	89
Epílogo	91
Bibliografía	93

Índice de figuras

1.1. Representación polar de un número complejo.	7
1.2. Representación vectorial de la suma de dos números complejos.	8
1.3. Representación gráfica del producto complejo en la circunferencia unitaria.	9
1.4. Representación gráfica del producto de cuaterniones unitarios.	14
1.5. Rotación respecto al eje \mathbf{x}	21
1.6. Rotación respecto al eje \mathbf{y}	21
1.7. Rotación respecto al eje \mathbf{z}	22
1.8. Definición de un eje de rotación $\hat{\mathbf{n}}$ cualquiera.	22
1.9. Transformación del eje $\hat{\mathbf{n}}$ en el vector $\hat{\mathbf{z}}$	23
1.10. El eje $\hat{\mathbf{n}}$ regresa a su posición inicial.	23
1.11. Representación gráfica de \mathbb{S}^1 y \mathbb{B}^2	28
1.12. Representación de \mathbb{S}^1 utilizando funciones trigonométricas.	29
1.13. Puntos de \mathbb{S}^1 caracterizados por sus proyecciones.	30
1.14. Visualización de \mathbb{S}^1 en una dimensión inferior.	31
1.15. Representación de un punto en el espacio tridimensional en coordenadas esféricas.	32
1.16. Parametrización de una esfera en coordenadas esféricas.	32
1.17. Proyección de un vector sobre \mathbb{S}^2 hacia \mathbb{B}^2	33
1.18. Visualización bidimensional de \mathbb{S}^2 sobre \mathbb{B}^2	33

1.19. Vista de cada uno de los hemisferios y ecuador de \mathbb{S}^2	34
1.20. Representación de un cuaternión unitario en una bola sólida.	35
1.21. Representación de la \mathbb{S}^3 esfera.	36
1.22. Representación de un cuaternión sobre la recta utilizando funciones trigonométricas y el producto punto.	37
2.1. Traza de la hélice $\alpha(t) = (a\cos(t), a\sen(t), bt)$	40
2.2. Traza de la curva $\alpha(t) = (t^3 - 4t, t^2 - 4)$	41
2.3. Cisoide de Diocles.	41
2.4. Cicloide.	43
2.5. Espiral logarítmica.	44
2.6. Vectores tangentes sobre una espiral.	45
2.7. Plano osculador.	46
2.8. Triedro de Frenet-Serret sobre la curva $\alpha(t) = (t\cos(2\pi t), t\sen(2\pi t), t)$ en $t = 1$	46
2.9. $\alpha(t) = (t, t^2, t^3)$	51
2.10. Proyección sobre el plano tn	51
2.11. Proyección sobre el plano tb	51
2.12. Proyección sobre el plano nb	51
3.1. Estructura de un aminoácido. ¹	54
3.2. Enlace peptídico. ²	55
3.3. Estructura primaria de una proteína. ²	55
3.4. Estructura secundaria de una proteína.	56
3.5. Estructura de una proteína compuesta principalmente por hélices. ³	56
3.6. Hélice alfa. ⁴	57
3.7. Estructura de una proteína compuesta principalmente por planos. ⁵	58
3.8. Hoja beta. ⁶	58

3.9. Marco identidad	59
3.10. Marco identidad con cambio de ejes	60
3.11. Relación de cuaterniones arbitrarios	60
3.12. Eje de rotación	61
3.13. Secuencia de marcos de referencia alrededor del eje $\hat{\mathbf{x}}$	62
3.14. Secuencia de marcos de referencia rotando con respecto al eje $\hat{\mathbf{x}}$ con cambio de perspectiva	62
3.15. Secuencia de marcos de referencia alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$	63
3.16. Secuencia de marcos de referencia rotando con respecto al eje $\hat{\mathbf{n}}$ con cambio de perspectiva	63
3.17. Hélice con triedros de Frenet-Serret	65
3.18. Proyección sobre \mathbb{S}^3 de los marcos cuaterniónicos.	65
3.19. Modelación de una hoja beta	67
3.20. Proyección sobre \mathbb{S}^3 de los marcos cuaterniónicos de una hoja beta.	67
3.21. Cremallera de leucina (estructura global)	68
3.22. Obtención de \vec{x}_p	69
3.23. Vectores auxiliares para definir a \vec{z}_p	70
3.24. Obtención de \vec{z}_p	70
3.25. Obtención de \vec{y}_p	70
3.26. Obtención de \vec{x}_c	71
3.27. Vectores auxiliares para definir \vec{z}_c	71
3.28. Obtención de \vec{z}_c	72
3.29. Obtención de \vec{z}_c	72
3.30. Definición de \vec{V}_a y \vec{V}_b	73
3.31. Obtención de \vec{V}_y	73
3.32. Obtención de \vec{V}_z	74
3.33. Obtención de \vec{V}_z	74
3.34. Movimiento bicicleta	75
3.35. Prototipo de hélice alfa	76
3.36. Cremallera de leucina (estructura local)	77
3.37. Ejemplo de hoja beta.	78
3.38. Modelo de hoja beta con antípodas	78
3.39. Modelo con curvas fragmentarias básicas	79
3.40. Representación del eje helicoidal local	80
3.41. Representación de los ángulos ϕ y ψ	83
3.42. Definición de los ángulos ϕ y ψ , según IUPAC.	84
3.43. Gráfico de Ramachandran para la Glicina	84
3.44. Correlación de la rectitud P	88
3.45. Correlación de la rectitud C	88

Introducción

En el año 1843, sir William Hamilton inventó la noción de un sistema con tres partes imaginarias y una real, el cual se convertiría en el álgebra de los *cuaterniones*. Desde su descubrimiento, los cuaterniones se han abierto camino en distintas áreas. Primero, los cuaterniones unitarios sobre la S^3 esfera se han utilizado para la representación de las rotaciones tridimensionales. En teoría de números, proporcionaron una demostración para el teorema de los cuatro cuadrados enunciado por Lagrange. Los cuaterniones también han sido utilizados en áreas como los gráficos por computadora y en el campo de la robótica.

Nuestro propósito será explorar las propiedades básicas de los cuaterniones, como punto inicial; estudiar su analogía con los números complejos, y finalizar nuestra investigación presentando una aplicación muy importante y recientemente descubierta: la representación de la geometría tridimensional de las proteínas.

En el capítulo 1, estudiaremos la estructura algebraica de los cuaterniones y la relación que poseen con las rotaciones tridimensionales, las cuales podemos caracterizar por un solo cuaternión gracias a la correspondencia que existe entre SO_3 , el grupo de matrices ortogonales, y S^3 . Además, debido a la dificultad para visualizar un cuaternión, se estudiarán métodos de visualización de los cuaterniones unitarios a través de proyecciones hacia \mathbb{R}^3 y \mathbb{R}^2 .

En el capítulo 2, estudiaremos la geometría diferencial de curvas, principalmente el triedro de Frenet-Serret, el cual nos permitirá asociar un sistema de referencia a cada punto de una curva parametrizada diferenciable, y conocer cómo se comporta la curva en el espacio.

Finalmente, en el capítulo 3, definiremos los marcos de referencia cuaterniónicos, y estableceremos su relación con el estudio de la estructura secundaria de proteínas. Veremos que es posible asociar un cuaternión a un triedro por medio de una rotación que va desde el triedro o marco identidad hacia el triedro deseado, a través de la denominada *aplicación cuaterniónica*.

Metodología

A continuación se describen los aspectos más importantes del presente trabajo de investigación:

1. Tipo de investigación:

Este proyecto de investigación tiene las siguientes características:

- Bibliográfico: ya que se ha hecho una recopilación de libros y textos para obtener suficiente información sobre cuaterniones, y así poder presentar un trabajo coherente y con información importante.

2. Forma de trabajo:

Se tuvieron reuniones con los asesores del trabajo para tratar diferentes aspectos de la investigación, cómo estudiar y discutir la teoría, y cómo abordar las presentaciones y desarrollo de la investigación.

3. Exposiciones:

Se realizaron dos exposiciones, la primera para la presentación del perfil del trabajo de investigación, y la segunda la presentación final del trabajo.

Capítulo 1

Cuaterniones

«Es por lógica que probamos, pero es por intuición que descubrimos. Saber criticar es bueno, saber cómo crear es mejor.»

Henri Poincaré

Los cuaterniones surgieron históricamente de los intentos de Sir William Rowan Hamilton, a mediados del siglo XIX, por generalizar los números complejos en una forma que fueran aplicables al espacio tridimensional (3D). Ya que los complejos poseen dos partes, una parte que es un número real ordinario y una parte que es «imaginaria», Hamilton primero conjeturó que necesitaba solamente una componente «imaginaria» adicional. Él luchó por años intentando darle sentido a un sistema algebraico ineficaz conteniendo una parte real y dos imaginarias. En 1843, a la edad de 38 años, Hamilton ideó la noción de un sistema con tres partes imaginarias, que se convirtió en el álgebra de lo que él llamó «cuaterniones».

En este capítulo hablaremos de las propiedades básicas de los cuaterniones, su estructura algebraica, su relación con las rotaciones tridimensionales, cómo son visualizados, y algunos ejemplos de su utilidad (ver (HC, 2006), (ML, 1979) y (DMM, 1998)).

1.1. Estructura algebraica

Iniciaremos estudiando las propiedades algebraicas de los números complejos, principalmente las diferentes representaciones de la suma y el producto complejo, y sus representaciones gráficas. Seguidamente, estudiaremos la estructura algebraica de los cuaterniones y el comportamiento del producto de cuaterniones y el producto escalar.

1.1.1. Álgebra de números complejos

Los números complejos son una extensión de los números reales. Frecuentemente resolvemos ecuaciones lineales en las cuales obtenemos como resultado números reales, pero este no es el caso cuando resolvemos la ecuación $x^2 = -1$, en la cual nuestra solución no se encuentra dentro de este conjunto, y es entonces que extendemos el sistema de números para poder dar solución a esta ecuación.

Definición 1.1.1. *Un número complejo es una expresión de la forma $a + bi$, donde a y b son números reales, e i satisface que $i^2 = -1$.*

Al conjunto de los números complejos lo denotaremos por \mathbb{C} . Con la suma usual y la multiplicación por escalares reales, este conjunto puede ser visto como un espacio vectorial de dimensión 2 sobre los números reales, con base $\{1, i\}$. También podemos dotar a este conjunto con una operación de multiplicación. A continuación, mostramos sus diferentes representaciones:

1. **Coordenadas cartesianas:** $z = x + iy$
2. **Forma polar:** $z = re^{i\theta} = r(\cos(\theta) + i\sin(\theta))$
3. **Matriz de 2x2:** $z = \begin{bmatrix} x & -y \\ y & x \end{bmatrix}$
4. **Matriz de 2x1:** $z = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$

En la forma polar, la representación gráfica de un número complejo $x + iy$ es un vector que parte del origen y llega hasta el par ordenado (x, y) (ver Figura 1.1).

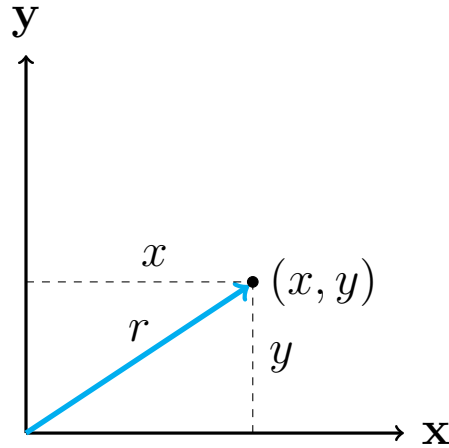


Figura 1.1: Representación polar de un número complejo.

Por el teorema de Pitágoras, la cantidad r mostrada en la figura, que es la longitud del vector que une al origen con el par ordenado (a, b) , es $r = \sqrt{a^2 + b^2}$. A esta longitud se le llama *módulo de un número complejo*.

La suma de números complejos se puede representar de las maneras siguientes:

$$1. \quad z_1 + z_2 = (x_1 + iy_1) + (x_2 + iy_2) = (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2)$$

$$2. \quad z_1 + z_2 = r_1 e^{i\theta_1} + r_2 e^{i\theta_2}$$

$$z_1 + z_2 = \begin{bmatrix} x_1 & -y_1 \\ y_1 & x_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 & -y_2 \\ y_2 & x_2 \end{bmatrix}$$

3.

$$= \begin{bmatrix} x_1 + x_2 & -(y_1 + y_2) \\ y_1 + y_2 & x_1 + x_2 \end{bmatrix}$$

$$4. \quad z_1 + z_2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \end{bmatrix}$$

Observación 1.1.1. De los numerales 3 y 4, podemos ver que para poder sumar dos números complejos es necesario que ambos se encuentren en la misma representación.

Utilizando la notación vectorial, podemos representar gráficamente la suma de dos números complejos como sigue:

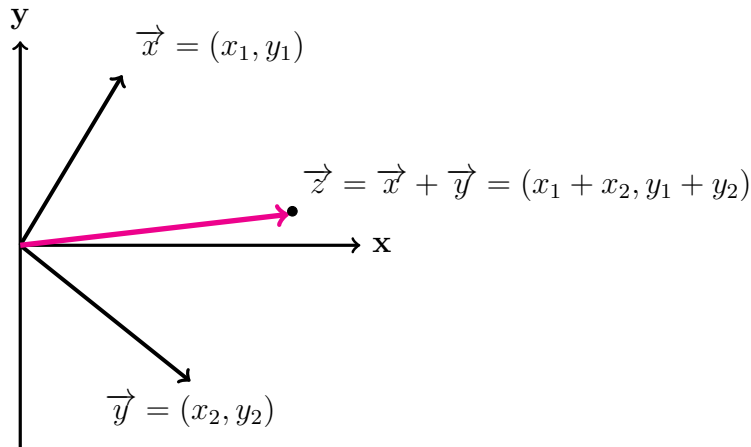


Figura 1.2: Representación vectorial de la suma de dos números complejos.

De igual manera, mostramos a continuación las formas de representación de la multiplicación compleja:

1. $z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + x_2 y_1)$

2. $z_1 z_2 = r_1 e^{i\theta_1} r_2 e^{i\theta_2} = r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}$

3.
$$z_1 z_2 = \begin{bmatrix} x_1 & -y_1 \\ y_1 & x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 & -y_2 \\ y_2 & x_2 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} x_1 x_2 - y_1 y_2 & -(x_1 y_2 + x_2 y_1) \\ x_1 y_2 + x_2 y_1 & x_1 x_2 - y_1 y_2 \end{bmatrix}$$

4.
$$z_1 z_2 = \begin{bmatrix} x_1 & -y_1 \\ y_1 & x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} x_1 x_2 - y_1 y_2 \\ x_1 y_2 + x_2 y_1 \end{bmatrix}$$

Además de las representaciones anteriores, podemos definir la multiplicación compleja como sigue:

1. En forma cartesiana:

$$(x_1, y_1) * (x_2, y_2) = (x_1x_2 - y_1y_2, x_1y_2 + x_2y_1)$$

2. En forma polar:

$$(r_1, \theta_1) * (r_2, \theta_2) = (r_1r_2, \theta_1 + \theta_2)$$

La forma polar está relacionada con una aplicación logarítmica, y se sigue de la igualdad $\log(z) = \log(r) + i\theta + 2n\pi i$, $n \in \mathbb{Z}$, con $\log(z_1 * z_2) = \log(z_1) + \log(z_2)$, que el módulo de un número complejo en términos del producto con su conjugado es $\|z\|^2 = z\bar{z} = x^2 + y^2$. Luego, si restringimos a $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{C}$ a las condiciones de longitud unitaria

$$\begin{aligned} \|\vec{x}\|^2 &= \|(x_1, y_1)\|^2 = (x_1)^2 + (y_1)^2 = 1 \\ \|\vec{y}\|^2 &= \|(x_2, y_2)\|^2 = (x_2)^2 + (y_2)^2 = 1, \end{aligned}$$

podemos enunciar lo siguiente:

Observación 1.1.2. *El producto de dos números complejos sobre la circunferencia unitaria se mantiene sobre la circunferencia unitaria.*

La circunferencia unitaria, denotada por \mathbb{S}^1 , es la circunferencia formada por todos los números complejos con norma igual a 1.

Gráficamente:

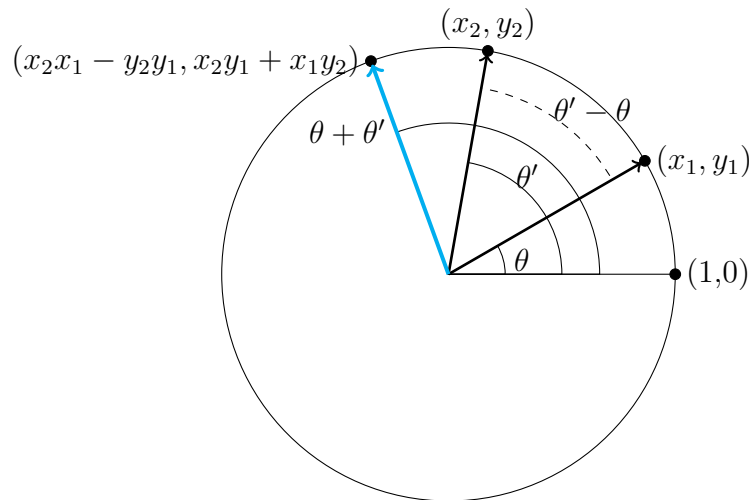


Figura 1.3: Representación gráfica del producto complejo en la circunferencia unitaria.

En efecto, podemos verificar que:

$$\begin{aligned} \|(x_1, y_1)(x_2, y_2)\|^2 &= \|(x_1, y_1)\|^2 \|(x_2, y_2)\|^2 \\ &= 1, \end{aligned}$$

lo que demuestra el enunciado.

1.1.2. Álgebra de cuaterniones

Los cuaterniones son un sistema numérico que extiende a los números complejos de la misma manera en que los complejos extienden a los reales. Una propiedad muy importante de los cuaterniones es que la multiplicación no es conmutativa. Iniciaremos nuestro estudio con la siguiente definición.

Definición 1.1.2. *Un cuaternión es una expresión de la forma $a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$, donde a, b, c, d son números reales, e $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ satisfacen que $\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = \mathbf{ijk} = -1$.*

Por analogía con los números complejos, dado un cuaternión $q = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$, la parte $b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$ es llamada *parte imaginaria* de q , y a es llamada la *parte real* de q . Lo anterior quiere decir que tanto los números reales como los imaginarios son subconjuntos de los cuaterniones.

El conjunto de los cuaterniones, denotado por \mathbb{H} , también puede ser visto como un espacio vectorial de dimensión 4 sobre los números reales, con base $\{1, i, j, k\}$, y un espacio vectorial de dimensión 2 sobre los complejos, con base $\{1, j\}$.

Un cuaternión puede ser escrito también como un vector real de dimensión 4: si tomamos $q = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} \in \mathbb{H}$, entonces $q = (a, b, c, d) \in \mathbb{R}^4$.

Podemos definir las siguientes operaciones sobre \mathbb{H} :

Definición 1.1.3. *Sean $p, q \in \mathbb{H}$.*

1. *Suma de cuaterniones:*

$$\begin{aligned} p + q &= (p_0 + p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k}) + (q_0 + q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}) \\ &= (p_0 + q_0) + (p_1 + q_1)\mathbf{i} + (p_2 + q_2)\mathbf{j} + (p_3 + q_3)\mathbf{k} \\ &= (p_0 + q_0) + (\mathbf{p} + \mathbf{q}), \end{aligned}$$

donde $\mathbf{p} = p_1\mathbf{i} + p_2\mathbf{j} + p_3\mathbf{k}$ y $\mathbf{q} = q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}$.

2. *Producto por escalar:*

Sea $\lambda \in \mathbb{R}$. Luego:

$$\begin{aligned}\lambda \mathbf{q} &= \lambda(q_0, q_1, q_2, q_3) \\ &= (\lambda q_0, \lambda q_1, \lambda q_2, \lambda q_3) \\ &= (\lambda q_0, \lambda \mathbf{q}).\end{aligned}$$

3. *Multiplicación:*

$$\begin{aligned}p * q &= (p_0, p_1, p_2, p_3) * (q_0, q_1, q_2, q_3) \\ &= \begin{bmatrix} p_0 q_0 - p_1 q_1 - p_2 q_2 - p_3 q_3 \\ p_1 q_0 + p_0 q_1 + p_2 q_3 - p_3 q_2 \\ p_2 q_0 + p_0 q_2 + p_3 q_1 - p_1 q_3 \\ p_3 q_0 + p_0 q_3 + p_1 q_2 - p_2 q_1 \end{bmatrix} \\ &= (p_0 q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}, p_0 \mathbf{q} + q_0 \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q})\end{aligned}$$

4. *Producto interior:*

$$\begin{aligned}p \cdot q &= (p_0, p_1, p_2, p_3) \cdot (q_0, q_1, q_2, q_3) \\ &= p_0 q_0 + p_1 q_1 + p_2 q_2 + p_3 q_3 \\ &= p_0 q_0 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}\end{aligned}$$

5. *Conjugación:*

$$\begin{aligned}\bar{q} &= (q_0, -q_1, -q_2, -q_3) \\ &= (q_0, -\mathbf{q})\end{aligned}$$

6. *Módulo:*

$$\|q\| = \sqrt{q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}$$

Observación 1.1.3. *Las operaciones 1 y 2 demuestran que \mathbb{H} es efectivamente un espacio vectorial sobre los reales.*

Los cuaterniones proporcionan una herramienta poderosa y única para caracterizar las relaciones entre los marcos de orientación tridimensionales que los mismos ejes ortonormales y sus representaciones tradicionales no son capaces de caracterizar.

De la definición 1.1.3, tenemos que: $p * q = (p_0q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}, p_0\mathbf{q} + q_0\mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q})$; o más explícitamente:

$$p * q = \begin{bmatrix} [p * q]_0 \\ [p * q]_1 \\ [p * q]_2 \\ [p * q]_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_0q_0 - p_1q_1 - p_2q_2 - p_3q_3 \\ p_1q_0 + p_0q_1 + p_2q_3 - p_3q_2 \\ p_2q_0 + p_0q_2 + p_3q_1 - p_1q_3 \\ p_3q_0 + p_0q_3 + p_1q_2 - p_2q_1 \end{bmatrix}.$$

De la misma forma que con los números complejos, podemos representar a un cuaternión $q = (q_0, q_1, q_2, q_3)$ de forma matricial, como sigue:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_0 & -q_1 & -q_2 & -q_3 \\ q_1 & q_0 & -q_3 & q_2 \\ q_2 & q_3 & q_0 & -q_1 \\ q_3 & -q_2 & q_1 & q_0 \end{bmatrix}.$$

Así, obtenemos dos representaciones más para el producto de cuaterniones:

$$\begin{aligned} \bullet p * q &= \mathbf{P}q = \begin{bmatrix} p_0 & -p_1 & -p_2 & -p_3 \\ p_1 & p_0 & -p_3 & p_2 \\ p_2 & p_3 & p_0 & -p_1 \\ p_3 & -p_2 & p_1 & p_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix} \\ \bullet p * q &= \mathbf{P}\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} p_0 & -p_1 & -p_2 & -p_3 \\ p_1 & p_0 & -p_3 & p_2 \\ p_2 & p_3 & p_0 & -p_1 \\ p_3 & -p_2 & p_1 & p_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_0 & -q_1 & -q_2 & -q_3 \\ q_1 & q_0 & -q_3 & q_2 \\ q_2 & q_3 & q_0 & -q_1 \\ q_3 & -q_2 & q_1 & q_0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Notemos que para $q_2 = q_3 = 0$ obtenemos la multiplicación compleja caracterizada anteriormente, y el hecho de que \mathbf{P} es una matriz ortogonal ya que se verifica que $\mathbf{P}^T\mathbf{P} = I_4$.

Observación 1.1.4. *Existe una representación de los cuaterniones por ángulo medio, la cual viene dada de la siguiente forma:*

$$q = \left(\cos \left(\frac{\theta}{2} \right), \hat{\mathbf{n}} \operatorname{sen} \left(\frac{\theta}{2} \right) \right),$$

donde $\hat{\mathbf{n}} \in \mathbb{R}^3$ y θ caracterizan el eje y ángulo de una rotación, respectivamente, como se verá más adelante.

Ahora, veamos el comportamiento del producto interior de cuaterniones, el cual está determinado por el ángulo relativo ϕ entre las dos direcciones sobre \mathbb{S}^3 , la esfera unitaria en \mathbb{R}^4 .

Sean $p = \left(\cos \left(\frac{\theta}{2} \right), \hat{\mathbf{n}} \operatorname{sen} \left(\frac{\theta}{2} \right) \right)$ y $q = \left(\cos \left(\frac{\theta'}{2} \right), \hat{\mathbf{n}}' \operatorname{sen} \left(\frac{\theta'}{2} \right) \right)$. El producto interior de estos dos cuaterniones, en su representación de ángulo medio, será:

$$\begin{aligned} p \cdot q &= \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta'}{2} \right) + \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{n}}' \operatorname{sen} \left(\frac{\theta}{2} \right) \operatorname{sen} \left(\frac{\theta'}{2} \right) \\ &= \cos(\phi). \end{aligned}$$

Por otro lado, para el módulo del producto tenemos que:

$$\begin{aligned} \|p * q\|^2 &= (p_0 q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2 + (p_0 \mathbf{q} + q_0 \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q}) \cdot (p_0 \mathbf{q} + q_0 \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q}) \\ &= (p_0)^2 (q_0)^2 - 2p_0 q_0 \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2 + (p_0 \mathbf{q} + q_0 \mathbf{p})^2 + \mathbf{p}^2 \mathbf{q}^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})^2 \\ &= (p_0)^2 (q_0)^2 + (q_0)^2 \mathbf{p}^2 + (p_0)^2 \mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2 \mathbf{q}^2 \\ &= ((p_0)^2 + \mathbf{p}^2)((q_0)^2 + \mathbf{q}^2) \\ &= \|p\|^2 \|q\|^2. \end{aligned}$$

Así, $\|p * q\|^2 = \|p\|^2 \|q\|^2$.

Con base en lo anterior, similarmente a lo que sucede con los números complejos, podemos enunciar lo siguiente:

Observación 1.1.5. \mathbb{S}^3 es invariante con respecto a la multiplicación.

Gráficamente:

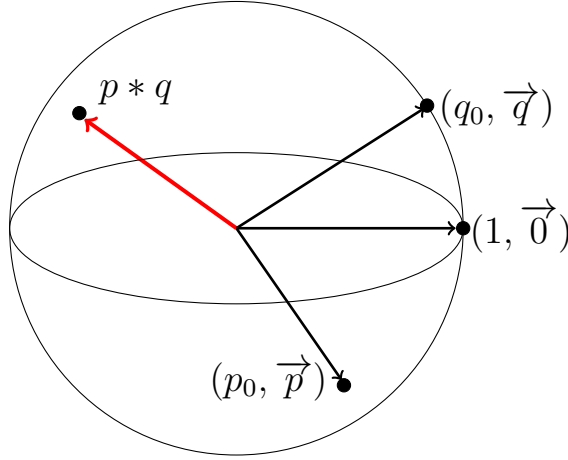


Figura 1.4: Representación gráfica del producto de cuaterniones unitarios.

Otra representación en forma matricial de los cuaterniones viene dada por:

$$\begin{pmatrix} z & w \\ -\bar{w} & \bar{z} \end{pmatrix},$$

donde $z, w \in \mathbb{C}$. Por medio de esta representación es fácil ver que \mathbb{H} es un espacio vectorial real de dimensión 4 con base

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{i} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \mathbf{j} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Con base en esto, si $z = x + iy, w = u + iv \in \mathbb{C}$, entonces un cuaternión q puede ser escrito también como $q = z + wj$, y la multiplicación de dos cuaterniones q_1, q_2 queda completamente determinada por:

$$\begin{aligned} q_1 q_2 &= (z_1 + w_1 j)(z_2 + w_2 j) \\ &= (z_1 z_2 - w_1 \bar{w}_2) + (z_1 w_2 + w_1 \bar{z}_2)j. \end{aligned}$$

Veamos que $(z + wj)(\bar{z} - wj) = \|z\|^2 + \|w\|^2$, con lo que obtenemos una representación explícita para el inverso de un cuaternión q :

$$q^{-1} = (z + wj)^{-1} = \frac{\bar{z} - wj}{\|z\|^2 + \|w\|^2}.$$

1.2. Rotaciones

Una *rotación* es una transformación rígida en el plano que consiste en girar una figura alrededor de un punto o una recta. Para rotar una figura es necesario indicar tres elementos: el ángulo de giro, el sentido y el centro de rotación.

Se ha descubierto que los cuaterniones unitarios proporcionan una notación matemática para representar las orientaciones y rotaciones de objetos en tres dimensiones. Comparados con las matrices de rotación, estos son más eficientes. Además, sabemos que los cuaterniones son una generalización de los números complejos, por lo que es de esperarse que sus comportamientos sean similares. Iniciaremos nuestro estudio de las rotaciones, tanto en dimensión dos como en dimensión tres, poniendo especial énfasis en cómo los números complejos proporcionan una representación para las rotaciones en el plano bidimensional, y los cuaterniones en el plano tridimensional.

1.2.1. Grupos matriciales

Antes de entrar al estudio de las rotaciones, introduzcamos algunas definiciones importantes.

Entre los subgrupos matriciales más importantes tenemos (ML, 1979):

1. **Grupo especial lineal:** $SL_n(\mathbb{R}) = \{A \in GL_n(\mathbb{R}) : \det(A) = 1\}$. Notemos que $SL_n(\mathbb{R}) \subset M_n(\mathbb{R})$ es cerrado.
2. **Grupo ortogonal:** $O_n(\mathbb{R}) = \{A \in GL_n(\mathbb{R}) : AA^T = A^T A = I_n\}$. En las mismas condiciones que $SL_n(\mathbb{R})$, se cumple que $O_n(\mathbb{R})$ es cerrado en $M_n(\mathbb{R})$.
3. **Grupo ortogonal especial:** $SO_n(\mathbb{R}) = \{A \in O_n(\mathbb{R}) : \det(A) = 1\}$.

Una forma de caracterizar O_n es por medio de las isometrías. Una *isometría* es una aplicación o transformación geométrica que preserva las distancias existentes entre longitudes y ángulos. Así, O_n es el conjunto de todas las isometrías en el espacio euclidiano \mathbb{R}^n de dimensión n que fijan al origen. Tenemos el siguiente lema:

Lema 1.2.1. *Cada elemento de O_n que fija un subespacio de dimensión k puede ser escrito como producto de a lo sumo $n - k$ reflexiones¹.*

¹Para ver con más detalle revisar (CS, 2003, pág. 6).

Demostración. Antes de iniciar con la demostración, definiremos una *reflexión* como la transformación $x \rightarrow t - x$; con $t, x \in \mathbb{R}^n$. Ahora, sea α una isometría y sea v un vector que no queda fijo por la acción de α . Entonces, existe $w \in \mathbb{R}^n$ tal que $\alpha(v) = w$. Luego, la reflexión en $v - w$ retorna a w de vuelta a v , mientras fija cualquier vector u fijado por α , y de estas reflexiones tendremos en total $n - k$, una por cada vector no fijado por α . \square

La matriz que determina una reflexión bidimensional es la siguiente:

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \text{sen}(\theta) \\ \text{sen}(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix}.$$

Ya que el determinante de una reflexión es -1 , entonces el determinante de cualquier elemento de O_n es ± 1 , ya que hemos definido que los elementos que cumplen con tener determinante igual a 1 son los de SO_n . El producto de dos reflexiones cualesquiera r, s es una rotación simple que rota al plano generado por r y s un determinado ángulo, y fija el espacio de dimensión $n - 2$ ortogonal al plano. Agrupando las reflexiones en pares, podemos ver que SO_n está generado por todas esas rotaciones simples.

1.2.2. Rotaciones bidimensionales

En este apartado haremos un estudio de cómo funcionan las rotaciones en el plano bidimensional y cómo los números complejos pueden ser de gran ayuda para caracterizarlas, y así poder hacer la analogía de los cuaterniones con las rotaciones en el espacio tridimensional.

Sea v un vector en el plano cartesiano definido por sus componentes x e y , denotado por $v = (x, y)^T$. La operación de rotación del punto señalado por este vector alrededor de un eje de giro puede escribirse siempre como la acción de un operador lineal actuando sobre el vector:

$$Rv = v'.$$

Las rotaciones bidimensionales son efectuadas por la acción por evaluación de $SO_2(\mathbb{R})$ en \mathbb{R}^2 . En efecto, si $v = (x, y)^T$, entonces:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} &= R_2(\theta) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\text{sen}(\theta) \\ \text{sen}(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x\cos(\theta) - y\text{sen}(\theta) \\ x\text{sen}(\theta) + y\cos(\theta) \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

donde $R_2(\theta)$ es una matriz de rotación, y x', y' son los vectores x, y tras aplicar la rotación.

Además de la forma matricial, las rotaciones en dos dimensiones pueden ser representadas usando números complejos unitarios, ya que geoméricamente la multiplicación por un número complejo unitario z es una rotación del plano.

Ahora, sea $z = x + iy$ un número complejo. Su vector rotado z' por un ángulo θ tendrá la forma que se presenta a continuación:

$$\begin{aligned} z' &= e^{i\theta}(x + iy) \\ &= (x\cos(\theta) - y\sen(\theta)) + i(x\sen(\theta) + y\cos(\theta)). \end{aligned}$$

Sean $A = a^2 - b^2$, $B = 2ab$. Tomando $a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ y $b = \sen\left(\frac{\theta}{2}\right)$:

$$\begin{aligned} A &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sen^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= \cos(\theta). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= 2\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\sen\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= \sen(\theta). \end{aligned}$$

Con base en esto, podemos ver que la matriz de rotación queda invariante:

$$\begin{aligned} R_2 &= \begin{bmatrix} a^2 - b^2 & -2ab \\ 2ab & a^2 - b^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sen(\theta) \\ \sen(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Notar que $\det(R_2) = A^2 + B^2 = 1$, con lo que obtenemos la siguiente propiedad:

Propiedad 1.2.1.

$$\det(R_2(a, b)) = (a^2 - b^2)^2 + (2ab)^2 = (a^2 + b^2)^2 = 1$$

La versión compleja de las rotaciones bidimensionales se sigue de la exponencial del ángulo medio:

$$\begin{aligned} e^{i\frac{\theta}{2}} &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &= a + ib, \end{aligned}$$

donde $e^{i\frac{\theta}{2}}e^{i\frac{\theta}{2}} = e^{i\theta}$.

Al principio vimos que las rotaciones cumplen con ser una isometría ya que preservan las distancias de ángulos y longitudes. Otra clase de isometría euclidiana son las *reflexiones*. Éstas se ven ejemplificadas por $x' = x$ y $y' = -y$, que es la reflexión correspondiente a la conjugación compleja $\overline{x + iy} = x - iy$. Considerando esto, obtenemos el siguiente teorema:

Teorema 1.2.1. *Si $u \in \mathbb{C}$ es unitario, entonces la aplicación $z \rightarrow uz$ es una rotación, y $z \rightarrow u\bar{z}$ es una reflexión (CS, 2003, pág. 12).*

Las matrices de ambas transformaciones son

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\operatorname{sen}(\theta) \\ \operatorname{sen}(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} \cos\theta & \operatorname{sen}(\theta) \\ \operatorname{sen}(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix},$$

respectivamente, y cuyos determinantes son 1 y -1 , lo cual demuestran que pertenecen respectivamente a SO_2 y $O_2 - SO_2$. Más aún, cada elemento (a_{ij}) de O_2 es de uno de estos dos tipos. De la primera condición de ortogonalidad obtenemos que $a_{11}^2 + a_{12}^2 = 1$, de donde $a_{11} = \cos(\theta)$ y $a_{12} = \operatorname{sen}(\theta)$, para algún ángulo θ . Las condiciones restantes implican que $a_{21} = \mp\operatorname{sen}(\theta)$ y $a_{22} = \pm\cos(\theta)$. Con esto hemos identificado los grupos ortogonales de dimensión dos:

Teorema 1.2.2. *SO_2 consiste de todas las multiplicaciones $z \rightarrow uz$ por complejos unitarios, mientras que O_2 consiste de estas en conjunto con las aplicaciones $z \rightarrow u\bar{z}$ (CS, 2003, pág. 12).*

Esto provee una identificación topológica de SO_2 como el círculo de ángulos reales θ considerado en módulo 2π . O_2 posee dos componentes, cada una de las cuales es un círculo.

1.2.3. Cuaterniones y rotaciones tridimensionales

Al igual que $SO_2(\mathbb{R})$, los elementos de $SO_3(\mathbb{R})$ cumplen la propiedad

$$R_3 R_3^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

donde $R_3 \in SO_3(\mathbb{R})$.

Una propiedad adicional que tienen estas matrices es la siguiente:

Propiedad 1.2.2. *La matriz $R_3 \in SO_3(\mathbb{R})$ tiene un único vector propio real (Euler), y así las rotaciones tridimensionales pueden ser descritas por una matriz de rotación final $R_3(\theta, \hat{n})$.*

Uno de los teoremas más importantes para las rotaciones tridimensionales se lo debemos a Leonard Euler. Este teorema nos permite caracterizar las rotaciones tridimensionales por un único eje de rotación y un único ángulo de rotación.

Teorema 1.2.3. (Teorema de rotación de Euler.) *Sea $R \in SO_3(\mathbb{R})$. Luego, existe un vector distinto de cero v satisfaciendo que $Rv = v$.²*

Demostración. Observemos que si $A = \frac{1}{2}(R - R^T)$, entonces $RA = AR$. Para ver esto notemos que $R^{-1} = R^T$ y así R conmuta con $R - R^T$, y por tanto con A . Como consecuencia, si v está en el núcleo de A , tenemos que $A(Rv) = R(Av) = 0$, lo cual muestra que Rv está en el núcleo de A .

Si $A \neq 0$, notemos que A toma la forma:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & -a_{31} \\ -a_{12} & 0 & a_{23} \\ a_{31} & -a_{23} & 0 \end{bmatrix}.$$

Si tomamos $v = (a_{23}, a_{31}, a_{12})^T$, entonces $v \neq 0$ y $Av = 0$ es una identidad; es decir que A tiene núcleo no trivial. Su forma garantiza que si es distinta de cero, tiene rango de al menos 2, y ya que A tiene núcleo distinto de cero, su rango debe de ser exactamente 2, y entonces v genera al núcleo. Como $\|Rv\| = \|v\|$, entonces $Rv = \pm v$. \square

²En (CS, 2003, pág. 26) podemos encontrar una prueba gráfica de este teorema.

Recordemos que la norma del producto de cuaterniones es el producto de sus normas. Esto nos permite definir la aplicación $v \mapsto q_1 v q_2$, la cual es una semejanza del espacio euclídeo de dimensión 4 que multiplica las longitudes por $\sqrt{\|q_1\| \|q_2\|}$, y esta es una congruencia si $\|q_1\| \|q_2\| = 1$. Si dejamos fijo $v = 1$, también fijamos el espacio tridimensional perpendicular a $\mathbf{1}$, donde los elementos son vectores de la forma $x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$, es decir, sin parte real. Ya que la condición para esto es $q_1 \cdot q_2 = 1$, obtenemos el siguiente teorema:

Teorema 1.2.4. *La aplicación $q : v \mapsto q^{-1} v q$ es una congruencia del espacio euclídeo tridimensional.*

De hecho, esta congruencia es una *rotación simple*; es decir, fija un vector. Según el teorema de rotación de Euler, el producto de dos rotaciones simples es otra rotación simple.

Veamos un resultado importante que nos muestra una relación entre las rotaciones tridimensionales y los cuaterniones (ML, 1979, pág. 61), la cual nos será de gran utilidad más adelante.

Teorema 1.2.5. *Sea $\mathbb{H}_p = \{q \in \mathbb{H} \mid q_0 = 0\}$ el conjunto de cuaterniones puros. Para cada cuaternión $q \neq 0$, la aplicación*

$$\begin{aligned} \rho_q : \mathbb{H} &\longrightarrow \mathbb{H} \\ q &\longmapsto qpq^{-1} \end{aligned}$$

es una rotación en $SO(\mathbb{H}) = SO_4(\mathbb{R})$, cuya restricción al espacio $\mathbb{H}_p = \{p \in \mathbb{H} \mid q_0 = 0\}$ de cuaterniones puros es una rotación en $SO(\mathbb{H}_p) = SO_3(\mathbb{R})$. Recíprocamente, cada rotación en $SO_3(\mathbb{R})$ es de la forma

$$\rho_q(p) = qpq^{-1},$$

para algún cuaternión $q \neq 0$ y para todo $p \in \mathbb{H}_p$. Más aún, si dos cuaterniones distintos de cero q y q' representan la misma rotación, entonces $q' = \lambda q$ para algún $\lambda \neq 0$ en \mathbb{R} .

A primera vista esta correspondencia entre cuaterniones y rotaciones es « ∞ a 1» ya que todos los múltiplos escalares distintos de cero de un cuaternión dado caracterizan la misma rotación. Reducimos esta multiplicidad restringiendo a los cuaterniones unitarios (como hemos venido estableciendo), y así la hacemos «2 a 1» ya que q y $-q$ caracterizan la misma rotación.

Las siguientes matrices realizan rotaciones de vectores alrededor de los ejes x, y , ó z en el espacio tridimensional.

Rotación respecto al eje x :

$$R_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -\text{sen}(\theta) \\ 0 & \text{sen}(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

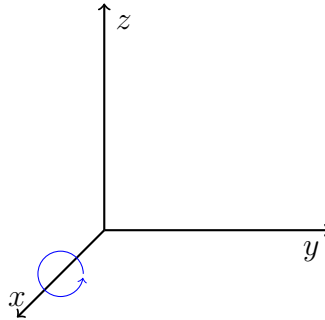


Figura 1.5: Rotación respecto al eje x .

Rotación respecto al eje y :

$$R_y = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & 0 & \text{sen}(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\text{sen}(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

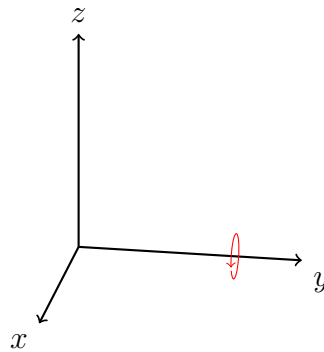


Figura 1.6: Rotación respecto al eje y .

Rotación respecto al eje z :

$$R_z = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\text{sen}(\theta) & 0 \\ \text{sen}(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

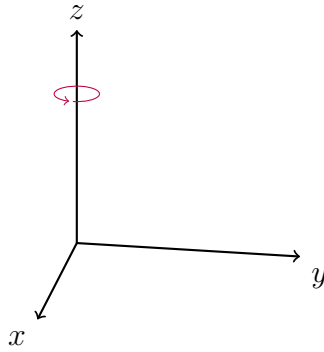


Figura 1.7: Rotación respecto al eje z .

Gracias al teorema de Euler, sabemos que toda rotación tridimensional la podemos representar por una sola matriz de rotación $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$, donde $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector propio de $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$. Podemos construir $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$ como sigue:

1. Sea $\hat{\mathbf{n}} = (\cos(\alpha)\text{sen}(\beta), \text{sen}(\alpha)\text{sen}(\beta), \cos(\beta))$, con $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ y $0 \leq \beta \leq \pi$, que denota el eje fijo sobre el cual se desea rotar, parametrizado en coordenadas esféricas.

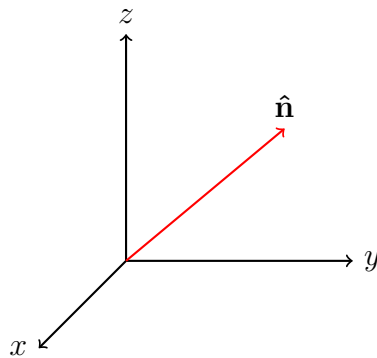


Figura 1.8: Definición de un eje de rotación $\hat{\mathbf{n}}$ cualquiera.

2. Definamos $\hat{\mathbf{z}}$ como el vector columna $(0, 0, 1)^T$, y notemos que $\hat{\mathbf{n}} = R_z(\alpha)R_y(\beta)\hat{\mathbf{z}}$.
3. Para construir la matriz de rotación, transformamos $\hat{\mathbf{n}}$ en $\hat{\mathbf{z}}$, rotamos $\hat{\mathbf{z}}$ usando la matriz elemental $R_z(\theta)$.

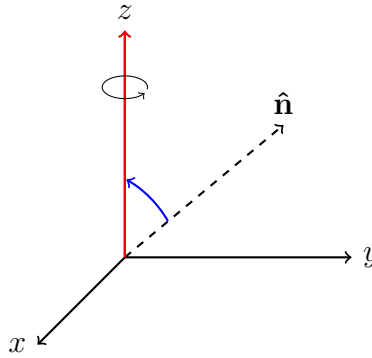


Figura 1.9: Transformación del eje $\hat{\mathbf{n}}$ en el vector $\hat{\mathbf{z}}$.

Luego, regresamos $\hat{\mathbf{z}}$ de vuelta a la dirección $\hat{\mathbf{n}}$ (donde iniciamos).

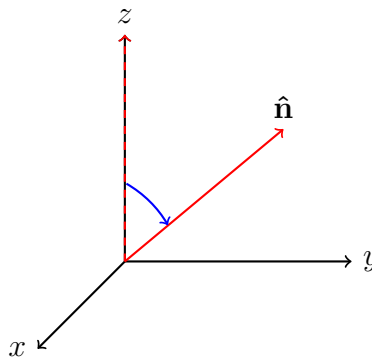


Figura 1.10: El eje $\hat{\mathbf{n}}$ regresa a su posición inicial.

Así, obtenemos la siguiente expresión para la rotación alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$:

$$R(\theta, \hat{\mathbf{n}}) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\theta)R_y^T(\beta)R_z^T(\alpha).$$

4. Reescribiendo las componentes de $\hat{\mathbf{n}}$ como

$$\hat{\mathbf{n}} = (\cos(\alpha)\text{sen}(\beta), \text{sen}(\alpha)\text{sen}(\beta), \cos(\beta)) = (n_1, n_2, n_3),$$

encontramos la matriz de rotación en la dirección $\hat{\mathbf{n}}$:

$$R(\theta, \hat{\mathbf{n}}) = \begin{bmatrix} c + (n_1)^2(1 - c) & n_1n_2(1 - c) - sn_3 & n_1n_3(1 - c) + sn_2 \\ n_2n_1(1 - c) + sn_3 & c + (n_2)^2(1 - c) & n_2n_3(1 - c) - sn_1 \\ n_3n_1(1 - c) - sn_2 & n_3n_2(1 - c) + sn_1 & c + (n_3)^2(1 - c) \end{bmatrix},$$

donde $c = \cos(\theta)$, $s = \text{sen}(\theta)$, $\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 1$ (por construcción), y $R(\theta, \hat{\mathbf{n}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}$, por ser un vector propio.

Observemos que en cada subplano bidimensional debe haber una rotación tridimensional que corresponde a la forma del ángulo medio. Por ejemplo, con $n_1 = n_2 = 0$ debemos tener que $n_3 = 1$, y así:

$$\begin{aligned} R_z &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -n_3 \operatorname{sen}(\theta) & 0 \\ n_3 \operatorname{sen}(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a^2 - b^2 & -2ab & 0 \\ 2ab & a^2 - b^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Haciendo la sustitución $1 - c = (a^2 + b^2) - (a^2 - b^2) = 2b^2$, encontramos la expresión para $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$:

$$\begin{bmatrix} a^2 + b^2(n_1^2 - n_2^2 - n_3^2) & 2b^2 n_1 n_2 - 2ab n_3 & 2b^2 n_3 n_1 + 2ab n_2 \\ 2b^2 n_1 n_2 + 2ab n_3 & a^2 + b^2(n_2^2 - n_1^2 - n_3^2) & 2b^2 n_2 n_3 - 2ab n_1 \\ 2b^2 n_3 n_1 - 2ab n_2 & 2b^2 n_2 n_3 + 2ab n_1 & a^2 + b^2(n_3^2 - n_2^2 - n_1^2) \end{bmatrix},$$

donde se ha utilizado el hecho que $(n_1)^2 + (n_2)^2 + (n_3)^2 = 1$ para obtener que

$$-b^2 + 2b^2(n_1)^2 = -((n_1)^2 + (n_2)^2 + (n_3)^2)b^2 + 2b^2(n_1)^2 = b^2((n_1)^2 - (n_2)^2 - (n_3)^2).$$

Ahora, elegimos la siguiente parametrización para el conjunto de los cuaterniones variables en la \mathbb{S}^3 esfera:

$$\begin{aligned} q_0 &= a = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_1 &= n_1 b = n_1 \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_2 &= n_2 b = n_2 \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ q_3 &= n_3 b = n_3 \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right); \end{aligned}$$

es decir, la parametrización por ángulo medio de los cuaterniones. Así, obtenemos una representación de las rotaciones tridimensionales en términos de cuaterniones unitarios:

$$R(q) = \begin{bmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2q_1q_2 - 2q_0q_3 & 2q_1q_3 + 2q_0q_2 \\ 2q_1q_2 + 2q_0q_3 & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2q_2q_3 - 2q_0q_1 \\ 2q_1q_3 - 2q_0q_2 & 2q_2q_3 + 2q_0q_1 & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{bmatrix}.$$

Esta relación entre los cuaterniones unitarios y las rotaciones tridimensionales la garantizamos por el teorema 1.2.5.

Nuestro siguiente objetivo es hacer el proceso inverso: dada una matriz de rotación R queremos recuperar el vector propio $\hat{\mathbf{n}}$ y el valor θ . Para esto procedemos como sigue:

1. **Calcular los ejes:** $\hat{\mathbf{n}}$ puede ser encontrado haciendo uso del teorema de rotación:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(R - R^T) &= \begin{bmatrix} 0 & -a_3 \operatorname{sen}(\theta) & a_2 \operatorname{sen}(\theta) \\ a_3 \operatorname{sen}(\theta) & 0 & -a_1 \operatorname{sen}(\theta) \\ -a_2 \operatorname{sen}(\theta) & a_1 \operatorname{sen}(\theta) & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Utilizando el teorema 1.2.3, encontramos que $d = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$, y normalizando obtenemos que $\hat{\mathbf{n}} = \left(\frac{a}{d}, \frac{b}{d}, \frac{c}{d}\right)$.

2. **Cálculo del ángulo:** de $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$ tenemos que $\operatorname{Tr}(R) = 1 + 2\cos(\theta)$. Así, el cálculo se completa teniendo que:

$$\begin{aligned} \cos(\theta) &= \frac{1}{2}(\operatorname{Tr}R - 1), \\ \operatorname{sen}(\theta) &= \sqrt{1 - \cos^2(\theta)}. \end{aligned}$$

1.2.4. Ángulos de Euler y cuaterniones

Hay muchas maneras de parametrizar las matrices de rotación estándar de 3×3 . Nos enfocaremos en la versión ángulo-eje $R(\theta, \hat{\mathbf{n}})$ y sus cuaterniones correspondientes $q(\theta, \hat{\mathbf{n}}) = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right)$ donde el vector propio de R puede ser parametrizado como un punto en \mathbb{S}^2 por medio de la siguiente expresión:

$$\hat{\mathbf{n}} = (\cos(\alpha)\sin(\beta), \sin(\alpha)\sin(\beta), \cos(\beta)).$$

Muchos autores tratan las rotaciones como sucesión de rotaciones ángulo-ejes. Las sucesiones triples de rotaciones ángulo-eje se llaman, generalmente, *representación por ángulo de Euler*.

Entre las representaciones por ángulo de Euler, tenemos:

- **XYZ:** es una de las sucesiones de rotaciones más comunes ya que envuelve los tres ejes cartesianos. La matriz de rotación es comúnmente escrita como:

$$R_{xyz}(\alpha, \beta, \gamma) = R(\alpha, \hat{x})R(\beta, \hat{y})R(\gamma, \hat{z}) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix},$$

donde

$$\begin{aligned} a_{11} &= \cos(\beta)\cos(\gamma) \\ a_{12} &= -\cos(\beta)\sin(\gamma) \\ a_{13} &= \sin(\beta) \\ a_{21} &= \sin(\alpha)\sin(\beta)\cos(\gamma) + \cos(\alpha)\sin(\gamma) \\ a_{22} &= \cos(\alpha)\cos(\gamma) - \sin(\alpha)\sin(\beta)\sin(\gamma) \\ a_{23} &= -\sin(\alpha)\cos(\beta) \\ a_{31} &= -\cos(\alpha)\sin(\beta)\cos(\gamma) + \sin(\alpha)\sin(\gamma) \\ a_{32} &= \sin(\alpha)\cos(\gamma) + \cos(\alpha)\sin(\beta)\sin(\gamma) \\ a_{33} &= \cos(\alpha)\cos(\beta). \end{aligned}$$

Los cuaterniones correspondientes vienen dados por:

$$q_0 = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\beta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\gamma}{2}\right)$$

$$q_1 = \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) + \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\beta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\gamma}{2}\right)$$

$$q_2 = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) - \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\gamma}{2}\right)$$

$$q_3 = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\gamma}{2}\right) + \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\beta}{2}\right) \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right).$$

Notemos que para $\beta = \pm\frac{\pi}{2}$ tenemos una función sólo en $\alpha + \gamma$ ó $\alpha - \gamma$, respectivamente:

$$q\left(\alpha, \pm\frac{\pi}{2}, \gamma\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos\left(\frac{\alpha \pm \gamma}{2}\right), \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha \pm \gamma}{2}\right), \pm\cos\left(\frac{\alpha \pm \gamma}{2}\right), \pm\operatorname{sen}\left(\frac{\alpha \pm \gamma}{2}\right) \right).$$

1.3. Visualización de esferas

Ya que los cuaterniones unitarios no son más que puntos sobre una esfera generalizada, mostraremos las propiedades de las esferas iniciando por \mathbb{S}^1 y concluyendo en \mathbb{S}^3 y los cuaterniones. Para esto necesitamos entender las formas en que las esferas pueden ser vistas en una dimensión menor a la que se encuentran.

Una *esfera* puede ser descrita como el conjunto de puntos que se encuentran a una distancia constante respecto a un punto fijo, al que se llama *centro de la esfera*. Nosotros estamos interesados en estudiar las esferas cuando su centro está en el origen del espacio euclidiano. Denotaremos por \mathbb{S}^n a la esfera unitaria inmersa en el espacio euclidiano \mathbb{R}^{n+1} . Cabe destacar que cada una de las esferas \mathbb{S}^n es la frontera de una «bola sólida» definida por $\mathbb{B}^{n+1} = \{x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|x\| \leq 1\}$, con lo que los puntos sobre la esfera poseen una dimensión menor a la del espacio euclidiano en la que viven. Así, para $n = 1$ tenemos lo siguiente:

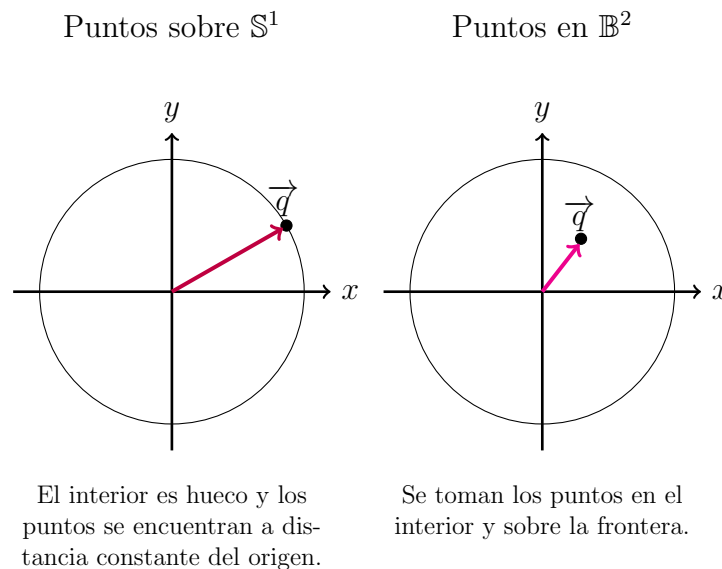


Figura 1.11: Representación gráfica de \mathbb{S}^1 y \mathbb{B}^2 .

Una esfera puede ser parametrizada usando la dimensión en la cual viven sus puntos. Así, por ejemplo, \mathbb{S}^1 es una esfera en el espacio euclidiano bidimensional. A continuación se presentan algunos ejemplos de lo antes mencionado:

Descripción	Ecuación	Espacio base
\mathbb{S}^1	$(q_0)^2 + (q_1)^2 = 1$	\mathbb{R}^2
\mathbb{S}^2	$(q_0)^2 + (q_1)^2 + (q_2)^2 = 1$	\mathbb{R}^3
\mathbb{S}^3	$(q_0)^2 + (q_1)^2 + (q_2)^2 + (q_3)^2 = 1$	\mathbb{R}^4

En cada uno de estos casos podemos usar distintos métodos para ver las propiedades geométricas de la esfera en su dimensión local. La idea básica para visualizar una esfera es que si tenemos un vector unitario podemos describirlo utilizando una dimensión menor a la que se encuentra la esfera sobre la que vive. Esto nos ayudará más adelante a poder visualizar los puntos sobre \mathbb{S}^3 , es decir los cuaterniones unitarios, en la tercera dimensión, y que nos sea más factible estudiar sus propiedades.

1.3.1. Visualización de \mathbb{S}^1

Como ya hemos dicho, podemos describir a \mathbb{S}^1 utilizando los parámetros (q_0, q_1) . Nuestro objetivo es poder visualizar a \mathbb{S}^1 como un segmento de recta, donde cada punto sobre el segmento corresponda al valor de q_0 y el signo de q_1 determine en qué hemisferio de \mathbb{S}^1 se encuentra el vector. Esto lo haremos utilizando dos diferentes métodos.

Método de la función trigonométrica

Sabemos que las funciones *seno* y *coseno* satisfacen la ecuación $(q_0)^2 + (q_1)^2 = 1$, por lo que podemos tomar la parametrización $q_0 = \cos(\theta)$ y $q_1 = \text{sen}(\theta)$, para algún ángulo θ . Así, podemos utilizar los dos valores de $q_1 = \pm\sqrt{1 - \cos^2(\theta)} = \pm\sqrt{1 - q_0^2}$ que dan solución a la ecuación, para cada $-1 \leq q_0 \leq 1$, para representar cada punto sobre \mathbb{S}^1 . Gráficamente, se da lo siguiente:

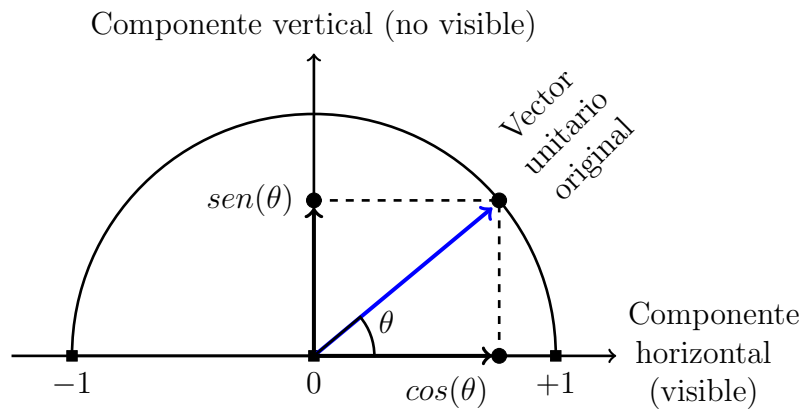


Figura 1.12: Representación de \mathbb{S}^1 utilizando funciones trigonométricas.

Método de la raíz cuadrada

Recordemos que nuestro objetivo es visualizar a \mathbb{S}^1 de tal manera que no dependa de una vista bidimensional. Igual que en el caso anterior, buscamos una parametrización que dependa únicamente de un parámetro. Para esto, tomaremos la siguiente parametrización:

$$\begin{aligned} q_0 &= t \\ q_1 &= \pm\sqrt{1-t^2}, \end{aligned}$$

con $-1 \leq t \leq 1$. Gráficamente, lo que sucede se muestra a continuación:

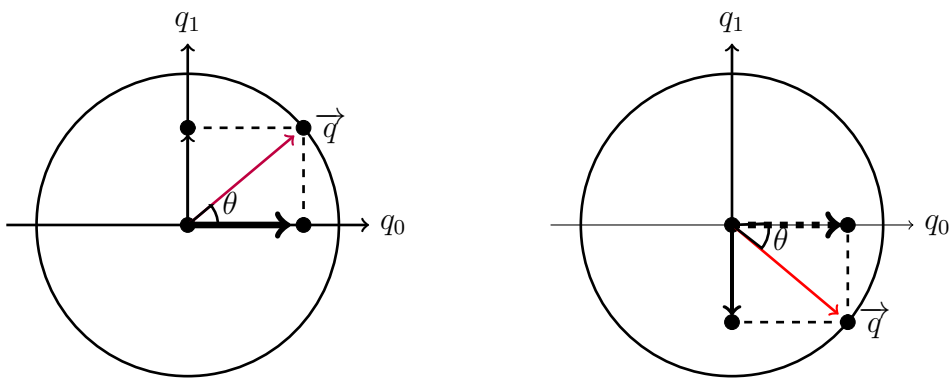
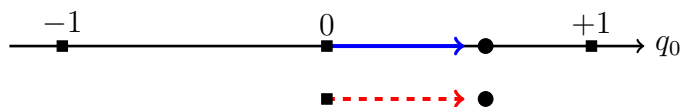


Figura 1.13: Puntos de \mathbb{S}^1 caracterizados por sus proyecciones.

En la figura 1.13 tenemos un punto en el círculo caracterizado por sus proyecciones (q_0, q_1) hacia los dos ejes coordenados. En estas representaciones, notemos que para el mismo q_0 el punto puede estar ya sea en el semicírculo superior (hemisferio norte) o en el inferior (hemisferio sur). Distinguiremos esto dibujando la proyección con una recta punteada o continua. Así, la proyección horizontal y su representación gráfica determinan el vector unitario \vec{q} sin generar confusión entre los puntos sobre el hemisferio norte y los que se encuentran en el hemisferio sur.

(Se deduce la componente vertical invisible)



Clases de líneas
alternativas si está
arriba o abajo

Segmento de línea	Borde	Segmento de línea
q_0		q_0
$q_1 > 0$ Hemisferio norte	$q_1 = 0$ $q_0 = \pm 1$ Ecuador	$q_1 < 0$ Hemisferio sur

Figura 1.14: Visualización de \mathbb{S}^1 en una dimensión inferior.

En la figura 1.14 sólo vemos dos copias de $-1 \leq q_0 \leq 1$ correspondiendo al signo positivo y negativo de la parametrización anteriormente realizada, y el ecuador (que son los puntos $q_0 = \pm 1$). Estos dos puntos, que constituyen la \mathbb{S}^0 esfera satisfaciendo que $x^2 = 1$, efectivamente unen las dos piezas que encierran el área invisible bidimensional.

1.3.2. Visualización de \mathbb{S}^2

Ya sabemos que cada punto sobre \mathbb{S}^2 satisface la ecuación:

$$(q_0)^2 + (q_1)^2 + (q_2)^2 = 1. \tag{1.1}$$

Al igual que hicimos con \mathbb{S}^1 , nuestro objetivo es poder visualizar a \mathbb{S}^2 en una dimensión menor a la que se encuentra (es decir, una visualización bidimensional).

Método de la función trigonométrica

Para poder visualizar a \mathbb{S}^2 por medio de funciones trigonométricas recurriremos las coordenadas esféricas. Este sistema utiliza las coordenadas (ρ, θ, ϕ) para representar los puntos P en el espacio tridimensional, donde ρ representa la longitud o módulo del vector \vec{q} que va desde el origen hasta P , θ representa el ángulo medido desde la parte positiva del eje x hasta la proyección ortogonal de \vec{q} sobre el plano xy (en sentido antihorario), y ϕ representa el ángulo medido desde la parte positiva del eje z hasta el vector \vec{q} en dirección al plano xy . El dominio de los dos ángulos es: $0 \leq \theta \leq 2\pi$ y $0 \leq \phi \leq \pi$. Gráficamente, la representación de cada punto P es la siguiente:

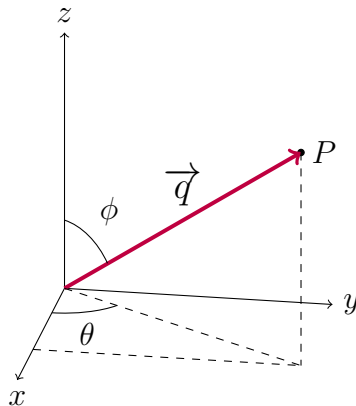


Figura 1.15: Representación de un punto en el espacio tridimensional en coordenadas esféricas.

Ahora, para poder parametrizar una esfera de radio ρ utilizando los parámetros (ρ, θ, ϕ) , sin pérdida de generalidad, ubicamos la esfera centrada en el origen. Su representación en coordenadas esféricas será:

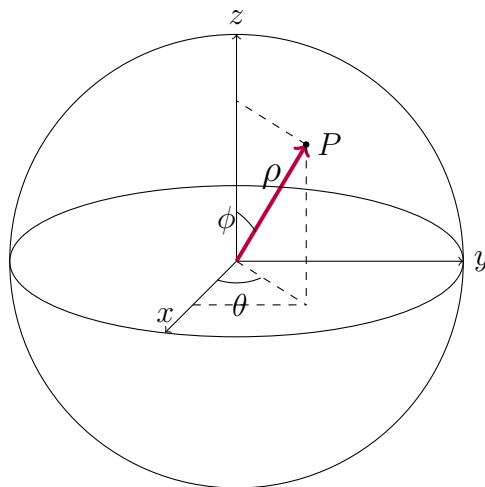


Figura 1.16: Parametrización de una esfera en coordenadas esféricas.

Si utilizamos las identidades trigonométricas en los triángulos rectángulos formados por los ejes y las proyecciones a los ejes, obtenemos que:

$$\begin{aligned}x &= \rho \cos(\theta) \operatorname{sen}(\phi) \\y &= \rho \operatorname{sen}(\theta) \operatorname{sen}(\phi) \\z &= \rho \cos(\phi).\end{aligned}$$

Entonces, ya que queremos parametrizar a \mathbb{S}^2 en coordenadas esféricas, y sabemos que su radio es constante e igual a 1, tendremos lo siguiente:

$$\begin{aligned}q_0 &= \cos(\theta) \operatorname{sen}(\phi) \\q_1 &= \operatorname{sen}(\theta) \operatorname{sen}(\phi) \\q_2 &= \cos(\phi).\end{aligned}$$

Los vectores proyectados sobre un plano están determinados por $\operatorname{sen}(\phi)$, y así el valor de $q_2 = \cos(\phi)$ puede ser conocido, y podemos, por ejemplo, trazar el vector como una línea continua para el hemisferio norte y como una línea punteada para el sur. Veamos que para el hemisferio norte se cumple que $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}$, con lo que $\cos(\phi) \geq 0$. Por otro lado, para el hemisferio sur se cumple que $\frac{\pi}{2} < \phi \leq \pi$, con lo que $\cos(\phi) < 0$. A partir de esto, podemos decir que la ubicación del vector en cada hemisferio se encuentra completamente determinado por el signo que toma $\cos(\phi)$. En las siguientes figuras observaremos primero cómo se da la proyección de un vector sobre \mathbb{S}^2 hacia \mathbb{B}^2 , y luego la visión bidimensional final del vector proyectado.

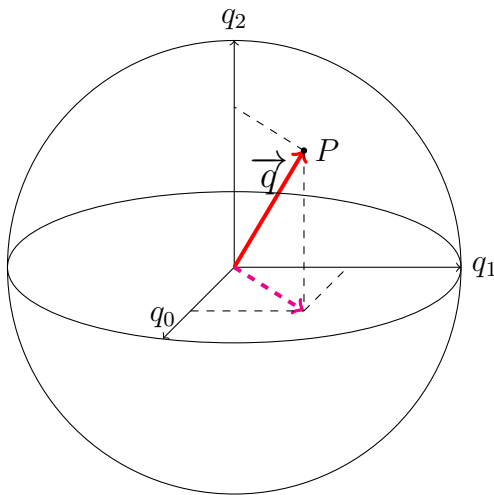


Figura 1.17: Proyección de un vector sobre \mathbb{S}^2 hacia \mathbb{B}^2 .

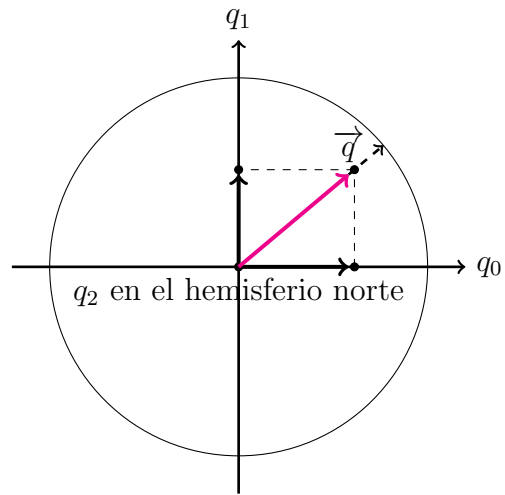


Figura 1.18: Visualización bidimensional de \mathbb{S}^2 sobre \mathbb{B}^2 .

La visualización es similar para el hemisferio sur, con la única diferencia que el vector proyectado es dibujado de manera discontinua.

Método de la raíz cuadrada

Este método es análogo al utilizado con \mathbb{S}^1 , con la diferencia que ahora pasaremos de una visualización en tercera dimensión a una en segunda dimensión. En vista de lo anterior, utilizaremos dos parámetros «libres» y uno que dependa de los otros dos. Así, si nombramos a nuestros dos parámetros como t_1, t_2 , obtenemos:

$$\begin{aligned} q_0 &= t_1 \\ q_1 &= t_2 \\ q_2 &= \pm\sqrt{1 - (t_1)^2 - (t_2)^2}, \end{aligned}$$

donde $t_1^2 + t_2^2 \leq 1$ para que el valor de q_2 se encuentre bien definido.

Ya que la ecuación cuadrática $q_2 = \pm\sqrt{1 - (t_1)^2 - (t_2)^2}$ tiene dos valores, uno positivo y uno negativo, esto nos ayudará a poder identificar en qué hemisferio de \mathbb{S}^2 se encuentra el vector proyectado. Notemos que $q_2 = 0$ es el ecuador, donde $q_0^2 + q_1^2 = 1$. Mediante un movimiento continuo desde el hemisferio norte hacia el hemisferio sur, el vector proyectado se acerca al ecuador desde el hemisferio norte (donde $q_2 > 0$), lo toca en $q_2 = 0$, y luego invierte la dirección en la proyección cuando cruza al hemisferio sur (donde $q_2 < 0$).

En conclusión, el comportamiento de un vector $\vec{q} = (q_0, q_1, q_2) \in \mathbb{S}^2$ puede ser observado por un vector bidimensional $\vec{q}' = (q_0, q_1)$, con $0 \leq \|\vec{q}'\| \leq 1$, tal que la componente faltante q_2 siempre cumple que $\|q_2\| = \sqrt{1 - (q_0)^2 - (q_1)^2}$.

En la siguiente figura podemos observar la visualización bidimensional de cada uno de los hemisferios y del ecuador en una dimensión menor.

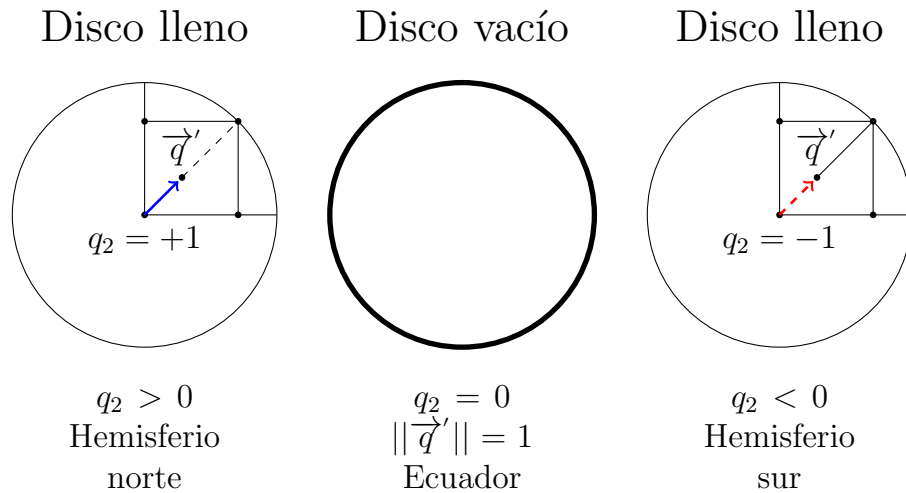


Figura 1.19: Vista de cada uno de los hemisferios y ecuador de \mathbb{S}^2 .

En la figura 1.19 tenemos a \mathbb{S}^2 visualizada en dos discos bidimensionales, los hemisferios norte y sur, junto con el círculo ecuatorial (es decir \mathbb{S}^1) que forma exactamente el borde entre los dos hemisferios en $q_2 = 0$.

1.3.3. Visualización geométrica de los cuaterniones sobre \mathbb{S}^3

Si un cuaternión dado por $q = (q_0, \mathbf{q})$ está sujeto a la restricción $q \cdot q = 1$, el lugar donde vive es la \mathbb{S}^3 esfera. Podemos entender cada punto de \mathbb{S}^3 como un pequeño cubo sólido, una parte casi plana del espacio euclidiano tridimensional, y un hemisferio es construido llenando el interior de una esfera tridimensional (\mathbb{B}^3).

Como ya mencionamos, un cuaternión unitario yace en la \mathbb{S}^3 esfera, y podemos tener 3 componentes independientes con las cuales parametrizarlo. Utilizando el mismo argumento que con las esferas de menor dimensión, podemos determinar el valor de $q_3 = \pm\sqrt{1 - q_0^2 - q_1^2 - q_2^2}$ utilizando la proyección de la esfera. Haciendo esto, q_2 cumple esencialmente la función de indicar en qué hemisferio de \mathbb{S}^3 se encuentra el vector. En la figura 1.20 se muestra una esfera sólida con un vector tridimensional (q_0, q_1, q_2) con longitud menor o igual a la unidad, representando un cuaternión completo.

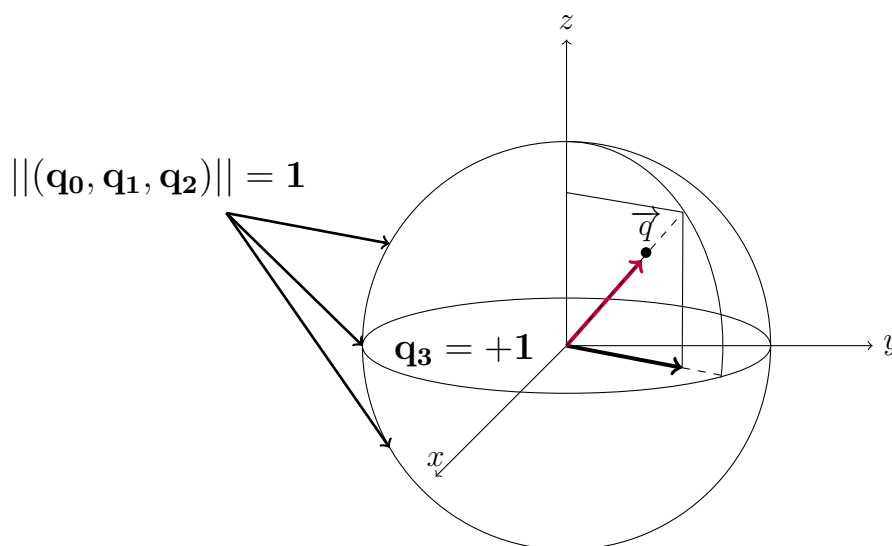


Figura 1.20: Representación de un cuaternión unitario en una bola sólida.

En el centro $((q_0, q_1, q_2) = \vec{0})$ tenemos $q_3 = 1$, y este punto es el cuaternión $q = (0, 0, 0, 1)$; es decir, estamos en el polo norte. Moviéndonos hacia $\|(q_0, q_1, q_2)\| = 1$ pasamos por el ecuador de \mathbb{S}^3 , el cual es representado por una esfera en donde $q_3 = 0$. Siguiendo con un movimiento suave pasamos el ecuador y llegamos al hemisferio sur, donde $q_3 < 0$. Cuando en el hemisferio sur el vector se acerca al origen $((q_0, q_1, q_2) = \vec{0})$ por segunda vez, hemos llegado a $q_3 = -1$, lo cual representa el polo sur.

Es necesario tener en cuenta las siguientes componentes para la visualización de los cuaterniones sobre \mathbb{S}^3 :

- **Hemisferio norte:** el hemisferio norte es una bola sólida de radio 1 con el cuaternión $q = (0, 0, 0, 1)$ apareciendo en el origen.

- **Hemisferio sur:** es la bola sólida de radio 1 con $q_3 < 0$ y el cuaternión $q = (0, 0, 0, -1)$ apareciendo en el origen.
- **Ecuador:** el ecuador es la superficie exterior de ambas esferas sólidas representando, respectivamente, el hemisferio norte y el sur; es decir, \mathbb{S}^2 . El ecuador lo podemos ver como el conjunto de puntos donde $q_3 = 0$ y $\|(q_0, q_1, q_2)\| = 1$.
- **Interior de \mathbb{S}^3 :** nos podemos imaginar el volumen en 4 dimensiones entre dos bolas sólidas que denotan el hemisferio norte y el hemisferio sur. Este es el interior de \mathbb{S}^3 , donde $\|q\| \leq 1$. El borde es, de hecho, \mathbb{S}^3 .

En conclusión, la visualización tridimensional de \mathbb{S}^3 será la siguiente:

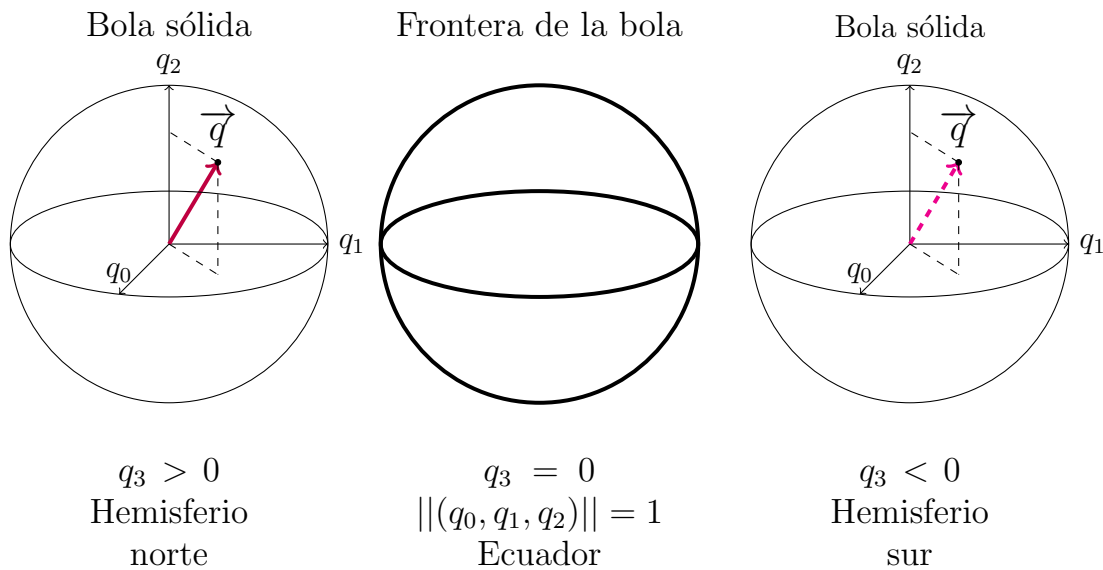


Figura 1.21: La \mathbb{S}^3 esfera de los cuaterniones visualizada como dos bolas sólidas tridimensionales, los hemisferios norte y sur, junto con el ecuador, \mathbb{S}^2 , que forma el borde exactamente entre ambos hemisferios en $q_3 = 0$.

Siguiendo este argumento, en principio podríamos implementarlo arbitrariamente a transformaciones rígidas en cuatro dimensiones y proyectar hacia tres dimensiones usando las matrices ortogonales del espacio euclidiano de 4 dimensiones.

Parámetros de un cuaternión

Al introducir las distintas formas en que se puede representar un cuaternión, vimos que cualquier $q \in \mathbb{S}^3$ puede ser puesto en la notación de ángulo medio de la siguiente manera:

$$q(\theta, \hat{\mathbf{n}}) = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \hat{\mathbf{n}} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \right), \quad (1.2)$$

donde $0 \leq \theta \leq 4\pi$, y donde el vector propio de la matriz de rotación es un punto de \mathbb{S}^2 . Así, podemos representar al vector $\hat{\mathbf{n}}$ en coordenadas esféricas:

$$\hat{\mathbf{n}} = (\cos(\alpha)\operatorname{sen}(\beta), \operatorname{sen}(\alpha)\operatorname{sen}(\beta), \cos(\beta)),$$

con $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ y $0 \leq \beta \leq \pi$.

Utilizando esta notación podemos hacer una nueva visualización tridimensional de cualquier cuaternión unitario sobre \mathbb{S}^3 en tres dimensiones, con la diferencia notable de que en esta ocasión nuestra coordenada dependiente de las demás será q_0 y no q_3 . Si hacemos una imagen tridimensional de la parte del vector $\hat{\mathbf{n}} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$, podemos ver que el elemento escalar del cuaternión para cada θ es:

$$q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \pm \sqrt{\left(1 - \left\| \hat{\mathbf{n}} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \right\|^2\right)}. \quad (1.3)$$

Es decir que q_0 es sólo la «altura» conocida del cuaternión unitario en dirección de la proyección no vista.

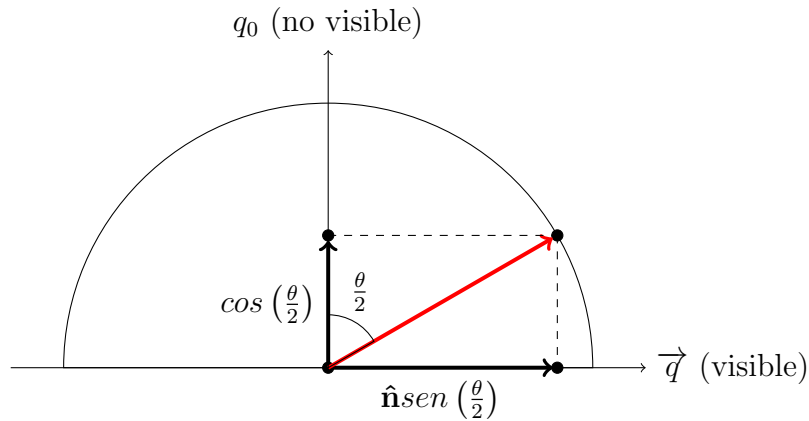


Figura 1.22: Representación de un cuaternión sobre la recta utilizando funciones trigonométricas y el producto punto.

En la figura 1.22 tenemos la ilustración de cómo la parte $q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ de un cuaternión es «conocida» si tenemos una imagen tridimensional de la parte $\mathbf{q} = \hat{\mathbf{n}}\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$ del cuaternión.

Capítulo 2

Geometría diferencial de curvas

«Los atractivos encantos de esta sublime ciencia, la Matemática, se revelan únicamente a aquellos que poseen el valor para profundizar en ella.»

Carl Friedrich Gauss

En este capítulo, nos enfocaremos en el estudio de la geometría diferencial, específicamente en el estudio de las curvas.

Iniciando en la antigüedad, muchas *curvas* específicas se han investigado desde un enfoque sintético. La geometría diferencial toma otro camino: las curvas son representadas de forma parametrizada, y sus propiedades geométricas y varias cantidades asociadas a ellas, como la curvatura y longitud de arco, son expresadas por medio de sus derivadas e integrales utilizando cálculo vectorial. Una de las herramientas más importantes de la geometría de curvas son los triedros de Frenet-Serret: este *marco* móvil nos permite conocer las propiedades locales de una curva. Además, al proveer un sistema coordenado, nos permite también conocerla globalmente.

Nuestra motivación para este estudio es el poder definir sistemas de referencia móviles a lo largo de una curva y con esto conocer con más detalle sus propiedades tanto locales como globales, lo cual será de gran ayuda más adelante en el análisis de la estructura secundaria de las proteínas.

2.1. Curvas

La geometría diferencial de curvas y superficies¹ posee dos aspectos importantes: uno que estudia las propiedades *locales* de curvas y superficies; y otro que estudia sus propiedades *globales*. En esta sección estudiaremos las propiedades básicas de las curvas, desde la descripción de curvas parametrizadas hasta la teoría local de curvas parametrizadas, terminando con la forma canónica local, la cual nos ayudará más adelante en nuestro estudio de los marcos de referencia cuaterniónicos.

2.1.1. Curvas parametrizadas

Una *curva* es, de cierta manera, un subconjunto de \mathbb{R}^3 unidimensional en el que se pueden aplicar los métodos del cálculo diferencial. Una primera definición de *curva* es la siguiente.

Definición 2.1.1. *Una curva parametrizada diferenciable es una aplicación diferenciable $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ de un intervalo abierto $I = (a, b)$ de la recta real \mathbb{R} , hacia \mathbb{R}^3 .*

La palabra «diferenciable» en esta definición significa que α es una correspondencia que lleva cada $t \in I$ hacia un punto $\alpha(t) = (x(t), y(t), z(t)) \in \mathbb{R}^3$ de tal manera que las funciones $x(t), y(t), z(t)$ son diferenciables. La variable t es llamada *parámetro* de la curva.

Ejemplo 2.1.1. *La curva parametrizada diferenciable dada por*

$$\alpha(t) = (\cos t, \sin t, bt), \quad t \in \mathbb{R},$$

tiene como traza en \mathbb{R}^3 una hélice de periodo $2\pi b$ sobre el cilindro $x^2 + y^2 = a^2$.

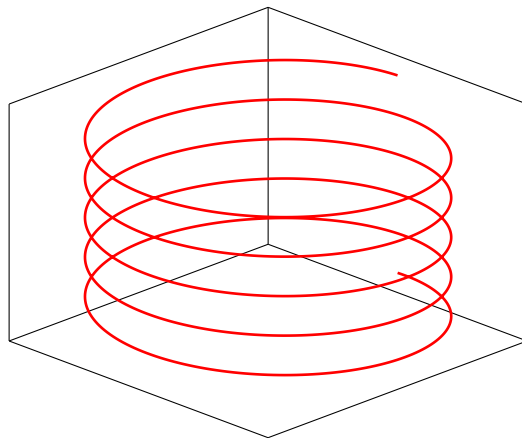


Figura 2.1: Traza de la hélice $\alpha(t) = (\cos t, \sin t, bt)$.

¹Para ver con más profundidad todas las definiciones y teoremas que se abordarán en este capítulo, revisar (DC, 1976).

Ejemplo 2.1.2. La aplicación $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por $\alpha(t) = (t^3 - 4t, t^2 - 4)$, $t \in \mathbb{R}$, es una curva parametrizada diferenciable. Notemos que $\alpha(2) = \alpha(-2) = (0, 0)$; es decir que el mapeo no es inyectivo. A continuación, podemos ver la traza de esta curva:

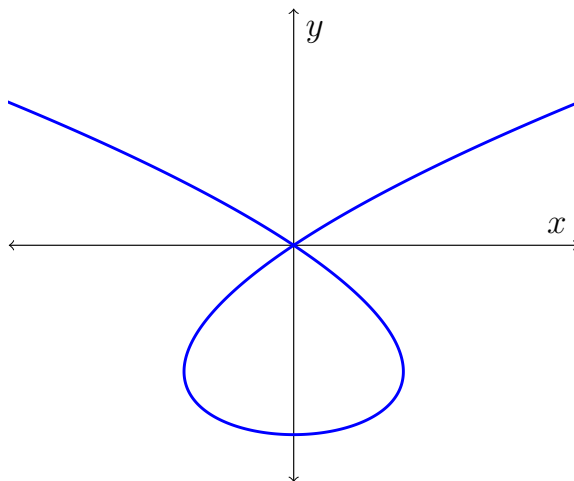


Figura 2.2: Traza de la curva $\alpha(t) = (t^3 - 4t, t^2 - 4)$.

Ejemplo 2.1.3. La curva dada por

$$\alpha(t) = \left(\frac{2at^2}{1+t^2}, \frac{2at^3}{1+t^2} \right)$$

es llamada la cisoide de Diocles, y tiene como traza la siguiente figura:

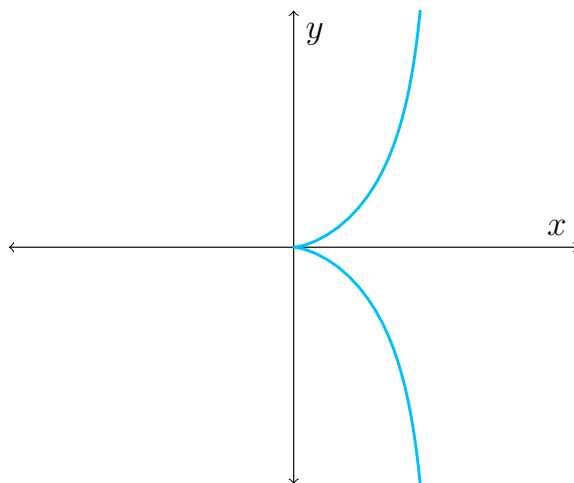


Figura 2.3: Cisoide de Diocles.

Si denotamos por $x'(t)$ a la primera derivada de x en el punto t y usamos una notación similar para las funciones y y z , el vector $(x'(t), y'(t), z'(t)) = \alpha'(t) \in \mathbb{R}^3$ es llamado el *vector tangente* a la curva α en t .

2.1.2. Curvas regulares

Sea $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva parametrizada diferenciable. Para cada $t \in I$ donde $\alpha'(t) \neq 0$, hay una recta bien definida, la cual contiene al punto $\alpha(t)$ y el vector $\alpha'(t)$. Esta recta es llamada la *recta tangente* a α en t . Llamaremos a cualquier punto t donde $\alpha'(t) = 0$ un *punto singular* de α .

Definición 2.1.2. Una curva parametrizada diferenciable $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ se dice que es regular si $\alpha'(t) \neq 0$ para todo $t \in I$.

De ahora en adelante consideraremos sólo curvas parametrizadas diferenciables regulares.

Dado $t \in I$, la *longitud de arco* de una curva parametrizada regular $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$, desde el punto t_0 hasta el punto t , es por definición

$$s(t) = \int_{t_0}^t \|\alpha'(t)\| dt, \quad (2.1)$$

donde

$$\|\alpha'(t)\| = \sqrt{(x'(t))^2 + (y'(t))^2 + (z'(t))^2}$$

es la longitud del vector $\alpha'(t)$. Ya que α es regular, entonces $\alpha'(t) \neq 0 \forall t \in I$, y así la longitud de arco, que denotaremos por s , es una función diferenciable de t , y $\frac{ds}{dt} = \|\alpha'(t)\|$.

Ejemplo 2.1.4. La curva dada por $\alpha(t) = (r(t - \sin(t)), r(1 - \cos(t)))$ es llamada cicloide. Veamos que $\alpha'(t) = (r(1 - \cos(t)), r\sin(t))$, y así los puntos singulares de la cicloide están en $t = 2k\pi$, con $k \in \mathbb{Z}$. Gráficamente:

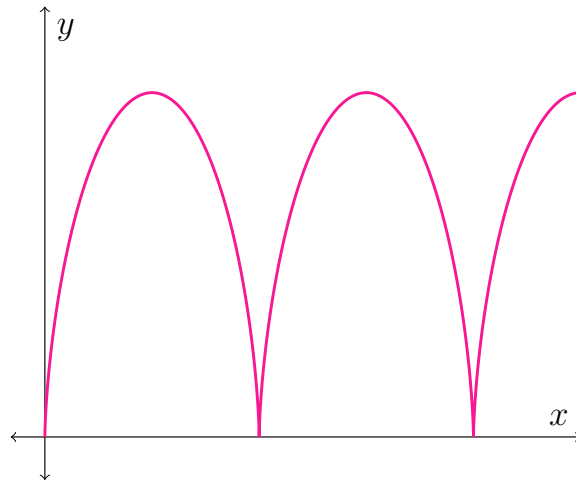


Figura 2.4: Cicloide.

La longitud de arco de la curva desde 0 hasta 2π es:

$$\begin{aligned}
 s &= \int_0^{2\pi} \sqrt{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2} dt \\
 &= \int_0^{2\pi} r\sqrt{2 - 2\cos(t)} dt \\
 &= 2r \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}\left(\frac{t}{2}\right) dt \\
 &= -4r \left[\cos\left(\frac{t}{2}\right) \right]_0^{2\pi} \\
 &= 8r.
 \end{aligned}$$

Ejemplo 2.1.5. La curva $\alpha(t) = (ae^{bt}\cos(t), ae^{bt}\operatorname{sen}(t))$, $t \in \mathbb{R}$, $a > 0$, $b < 0$, es una curva parametrizada, la cual tiene la siguiente traza:

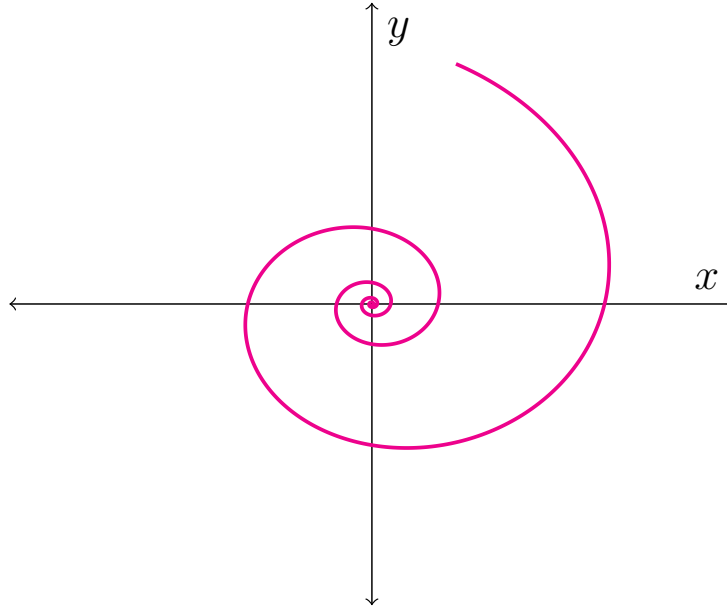


Figura 2.5: Espiral logarítmica.

Ahora, veamos que $\alpha'(t) = (abe^{bt}\cos(t) - ae^{bt}\sen(t), abe^{bt}\sen(t) + ae^{bt}\cos(t))$. Así:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t_0}^t \|\alpha'(t)\| dt &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t_0}^t \sqrt{(abe^{bt}\cos(t) - ae^{bt}\sen(t))^2 + (abe^{bt}\sen(t) + ae^{bt}\cos(t))^2} \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t_0}^t \sqrt{a^2b^2e^{2bt} + a^2e^{2bt}} \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t_0}^t |a| \sqrt{e^{2bt}(b^2 + 1)} \\ &= 0, \text{ ya que } b < 0. \end{aligned}$$

De

esto obtenemos que la longitud de arco de la espiral es finita.

Observación 2.1.1. Puede suceder que el parámetro t ya esté representando la longitud de arco de la curva desde algún punto. En este caso, $\frac{ds}{dt} = 1 = \|\alpha'(t)\|$. Recíprocamente, si $\|\alpha'(t)\| \equiv 1$, entonces

$$s = \int_{t_0}^t dt = t - t_0;$$

es decir que t es la longitud de arco de α medida desde algún punto. Cuando se dé este caso, diremos que la curva se encuentra parametrizada por longitud de arco.

Ahora, sea $\alpha : I = (a, b) \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva parametrizada por longitud de arco s . Ya que el vector tangente $\alpha'(s)$ tiene longitud unitaria, la norma $\|\alpha''(s)\|$ de la segunda derivada mide la tasa de cambio del ángulo que forman las tangentes en un entorno de s , con la tangente en ese punto. Además, $\|\alpha''(s)\|$ mide qué tan rápido la curva se aleja de la recta tangente en s , en un vecindario de s .

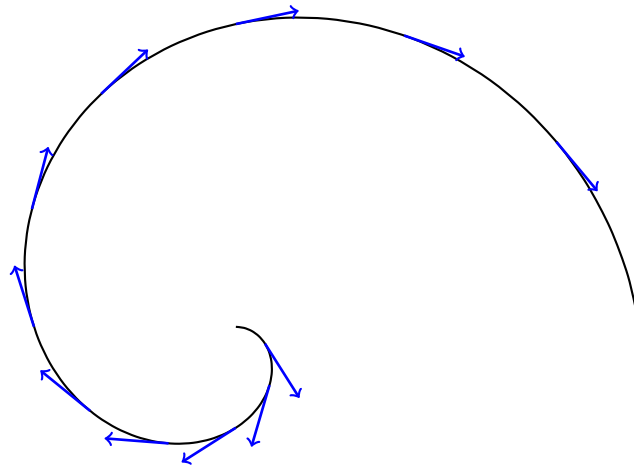


Figura 2.6: Vectores tangentes sobre una espiral.

Con base en lo anterior, obtenemos la siguiente definición:

Definición 2.1.3. Sea $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva parametrizada por longitud de arco $s \in I$. El número $\|\alpha''(s)\| = k(s)$ es llamado la curvatura de α en s .

Observación 2.1.2. Si α es una recta $\alpha(s) = us + v$, donde u y v son vectores constantes, entonces $k \equiv 0$. Recíprocamente, si $k = \|\alpha''(s)\| \equiv 0$, entonces integrando obtenemos que $\alpha(s) = us + v$, y así la curva es una recta. Notar también que la curvatura es invariante bajo cambios de dirección.

En los puntos donde $k(s) \neq 0$, el vector unitario $n(s)$ en la dirección de $\alpha''(s)$ está bien definido por la ecuación $\alpha''(s) = k(s)n(s)$. Más aún, $\alpha''(s)$ es normal a $\alpha'(s)$ ya que diferenciando $\alpha'(s) \cdot \alpha'(s) = 1$ obtenemos que $\alpha''(s) \cdot \alpha'(s) = 0$. Con base en esto, obtenemos la siguiente definición:

Definición 2.1.4. El vector $n(s)$ definido por la ecuación $\alpha''(s) = k(s)n(s)$ es llamado el vector normal a la curva en s .

El plano determinado por los vectores tangente y normal unitarios, $\alpha'(s)$ y $n(s)$, es llamado el *plano osculador* en s .

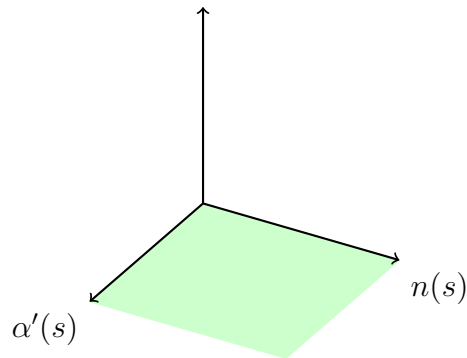


Figura 2.7: Plano osculador.

Definición 2.1.5. Decimos que $s \in I$ es un punto singular de orden 1 si $\alpha''(s) = 0$.

De aquí en adelante trabajaremos con curvas parametrizadas por longitud de arco sin puntos singulares de orden 1. Denotaremos por $t(s) = \alpha'(s)$ al vector tangente de α en s , y así $t'(s) = k(s)n(s)$.

En los puntos donde $t(s), n(s) \neq 0$, podemos definir los siguiente:

Definición 2.1.6. El vector $b(s) = t(s) \times n(s)$ es normal al plano osculador, y es llamado el vector binormal en s .

El sistema formado por los vectores t, n y b es llamado *Triedro de Frenet-Serret*.

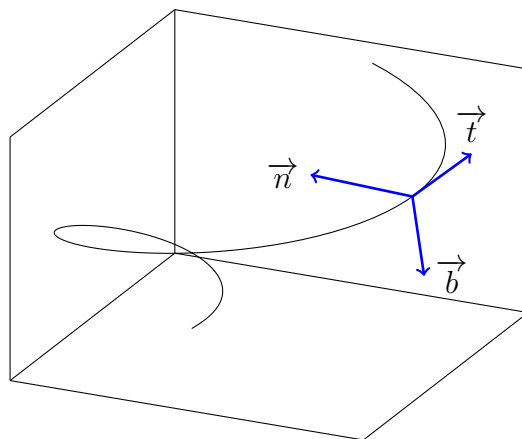


Figura 2.8: Triedro de Frenet-Serret sobre la curva $\alpha(t) = (t\cos(2\pi t), t\sin(2\pi t), t)$ en $t = 1$.

Ya que $b(s)$ es un vector unitario, $\|b'(s)\|$ mide la tasa de cambio de los planos osculadores en un entorno del plano osculador en s ; es decir, $b'(s)$ mide qué tan rápido se aleja la curva del plano osculador en s , en un vecindario de s .

Para calcular $b'(s)$, observemos primero que $b'(s)$ es normal a $b(s)$. En efecto, notemos que:

$$b'(s) = t'(s) \times n(s) + t(s) \times n'(s).$$

Ahora, como $t'(s) = k(s)n(s)$, entonces $t'(s)$ es paralelo a $n(s)$, y $t'(s) \times n(s) = \vec{0}$, con lo que $b'(s) = t(s) \times n'(s)$; es decir que $b'(s)$ es normal a $t(s)$, por lo que $b'(s)$ es paralelo a $n(s)$, y por tanto es normal a $b(s)$.

Definición 2.1.7. Sea $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva parametrizada por longitud de arco s tal que $\alpha''(s) \neq 0$, $s \in I$. El número $\tau(s)$ definido por $b'(s) = \tau(s)n(s)$ es llamado la torsión de α en s .

Observación 2.1.3. Si $\alpha(I)$ está completamente contenida en un plano, entonces este coincide con el plano osculador, y $\tau(s) \equiv 0$. Recíprocamente, si $\tau \equiv 0$ y $k \neq 0$, veamos que $b(s) = b_0 = \text{constante}$ y $(\alpha(s) \cdot b_0)' = \alpha'(s) \cdot b_0 = 0$, de donde obtenemos que $\alpha(s) \cdot b_0$ es una constante, y así $\alpha(s)$ está contenida en un plano normal a b_0 .

Notar que al igual que la curvatura, la torsión se mantiene invariante bajo cambios de orientación.

A partir de todo lo anterior, podemos observar que a cada valor del parámetro s le podemos asociar los tres vectores ortogonales unitarios $t(s), n(s), b(s)$. Este triedro así formado se conoce como *triedro de Frenet – Serret* en s . Con base en las derivadas de estos tres vectores, podemos enunciar el siguiente teorema:

Teorema 2.1.1. (Ecuaciones de Frenet-Serret). Las derivadas de los vectores $t, n,$ y b vienen dadas por las siguientes ecuaciones:

1. $t' = kn$

2. $n' = -kt - \tau b$

3. $b' = \tau n$

Demostración. 1. Se cumple inmediatamente por la definición 2.1.3.

2. Notemos que

$$n'(s) = b'(s) \times t(s) + b(s) \times t'(s),$$

pero por definición 2.1.7 y el numeral anterior, tenemos que

$$n'(s) = \tau n(s) \times t(s) + b(s) \times kn(s),$$

obteniendo así que

$$n'(s) = -kt - \tau b,$$

como queríamos.

3. Se cumple inmediatamente por la definición 2.1.7.

□

El plano determinado por los vectores $t(s)$ y $b(s)$ es llamado *plano rectificante* en s , y el plano determinado por los vectores $n(s)$ y $b(s)$ es llamado *plano normal* en s . El inverso $R = \frac{1}{k(s)}$ de la curvatura, con $k(s) \neq 0$, es llamado el *radio de curvatura* en s .

Ahora, físicamente, podemos pensar en una curva contenida en \mathbb{R}^3 como una recta en el espacio a la que se le ha doblado (curvatura) y retorcido (torsión). A partir de esta afirmación, enunciaremos el siguiente teorema, el cual, a grandes rasgos, demuestra que k y τ describen completamente el comportamiento local de una curva.

Teorema 2.1.2. (Teorema fundamental de la teoría local de curvas). *Dadas las funciones diferenciables $k(s) > 0$ y $\tau(s)$, $s \in I$, existe una curva parametrizada regular $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que s es la longitud de arco, $k(s)$ es la curvatura, y $\tau(s)$ es la torsión de α . Más aún, cualquier otra curva $\bar{\alpha}$ que satisfaga las mismas condiciones difiere de α en un movimiento rígido; es decir, existe una aplicación ortogonal lineal ρ de \mathbb{R}^3 con determinante positivo y un vector c tales que $\bar{\alpha} = \rho \circ \alpha + c$.*

Demostración. La existencia de la curva se debe al *teorema de existencia y unicidad para ecuaciones diferenciales*. Para la unicidad primero recordemos que la longitud de arco, la

curvatura y la torsión son invariantes bajo movimientos rígidos; es decir, si $M : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ es un movimiento rígido y $\alpha(t)$ es una curva parametrizada, entonces

$$\int_a^b \left\| \frac{d\alpha}{dt} \right\| dt = \int_a^b \left\| \frac{d(M \circ \alpha)}{dt} \right\| dt.$$

Ahora, asumamos que dos curvas $\alpha(s)$ y $\bar{\alpha}(s)$ satisfacen que $k(s) = \bar{k}(s)$ y $\tau(s) = \bar{\tau}(s)$, $s \in I$. Sean t_0, n_0, b_0 y $\bar{t}_0, \bar{n}_0, \bar{b}_0$ los triedros de Frenet-Serret en $s = s_0 \in I$ de α y $\bar{\alpha}$, respectivamente. Luego, hay un movimiento rígido que lleva $\bar{\alpha}(s_0)$ hacia $\alpha(s_0)$, y $\bar{t}_0, \bar{n}_0, \bar{b}_0$ hacia t_0, n_0, b_0 . Así, después de aplicar el movimiento rígido sobre $\bar{\alpha}$, tenemos que $\bar{\alpha}(s_0) = \alpha(s_0)$ y que los triedros $t(s), n(s), b(s)$ y $\bar{t}(s), \bar{n}(s), \bar{b}(s)$ satisfacen las ecuaciones de Frenet-Serret:

$$\begin{aligned} \frac{dt}{ds} &= kn & \frac{d\bar{t}}{ds} &= k\bar{n} \\ \frac{dn}{ds} &= -kt - \tau b & \frac{d\bar{n}}{ds} &= -k\bar{t} - \tau\bar{n} \\ \frac{db}{ds} &= \tau n & \frac{d\bar{b}}{ds} &= \tau\bar{n}, \end{aligned}$$

con $t(s_0) = \bar{t}(s_0)$, $n(s_0) = \bar{n}(s_0)$, $b(s_0) = \bar{b}(s_0)$.

Ahora, usando las ecuaciones de Frenet-Serret, obtenemos que:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \frac{d}{ds} (|t - \bar{t}|^2 + |n - \bar{n}|^2 + |b - \bar{b}|^2) \\ &= (t - \bar{t}) \cdot (t' - \bar{t}') + (b - \bar{b}) \cdot (b' - \bar{b}') + (n - \bar{n}) \cdot (n' - \bar{n}') \\ &= k(t - \bar{t}) \cdot (n - \bar{n}) + \tau(b - \bar{b}) \cdot (n - \bar{n}) - k(n - \bar{n}) \cdot (t - \bar{t}) - \tau(n - \bar{n}) \cdot (b - \bar{b}) \\ &= 0, \end{aligned}$$

para todo $s \in I$. Así, la expresión anterior es constante, y ya que es cero para todo $s = s_0$, es idénticamente cero. Se sigue de esto que $t(s) = \bar{t}(s)$, $n(s) = \bar{n}(s)$, $b(s) = \bar{b}(s)$ para todo

2. GEOMETRÍA DIFERENCIAL DE CURVAS

$s \in I$. Como

$$\frac{d\alpha}{ds} = t = \bar{t} = \frac{d\bar{\alpha}}{ds},$$

obtenemos que $\frac{d}{ds}(\alpha - \bar{\alpha}) = 0$. Luego, $\alpha(s) = \bar{\alpha}(s) + c$, donde c es un vector constante, y por lo tanto ambas curvas difieren por un movimiento rígido. \square

Uno de los métodos más efectivos para resolver problemas en geometría consiste en encontrar un sistema coordenado que se adapte al problema. En el estudio de las propiedades locales de las curvas, en un entorno abierto del punto s , tenemos un sistema coordenado natural, llamado *triedro de Frenet-Serret* en s . A continuación, mostraremos cómo se define este sistema coordenado para cualquier curva parametrizada. Sea $\alpha : I \rightarrow \mathbb{R}^3$ una curva parametrizada. Escribiremos las ecuaciones de la curva en un entorno de s_0 utilizando el triedro $t(s_0), n(s_0), b(s_0)$ como una base de \mathbb{R}^3 . Podemos asumir, sin pérdida de generalidad, que $s_0 = 0$, y consideraremos la expansión de Taylor alrededor de cero

$$\alpha(s) = \alpha(0) + s\alpha'(0) + \frac{s^2}{2}\alpha''(0) + \frac{s^3}{6}\alpha'''(0) + R,$$

donde $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{R}{s^3} = 0$. Ya que $\alpha'(0) = t$, $\alpha''(0) = kn$, y

$$\alpha'''(0) = (kn)' = k'n + kn' = k'n - k^2t - k\tau b,$$

obtenemos que

$$\alpha(s) - \alpha(0) = \left(s - \frac{k^2s^3}{3!}\right)t + \left(\frac{s^2k}{2} + \frac{s^3k'}{3!}\right)n - \frac{s^3}{3!}k\tau b + R,$$

donde todos los términos están alrededor de $s = 0$.

Ahora, tomaremos el sistema $Oxyz$ de tal manera que el origen O coincida con $\alpha(0)$ y que $t = (1, 0, 0)$, $n = (0, 1, 0)$, y $b = (0, 0, 1)$. Bajo estas condiciones, tendremos que $\alpha(s) = (x(s), y(s), z(s))$ está dado por:

$$x(s) = s - \frac{k^2s^3}{6} + R_x$$

$$y(s) = \frac{ks^2}{2} + \frac{k's^3}{6} + R_y$$

$$z(s) = -\frac{k\tau s^3}{6} + R_z,$$

donde $R = (R_x, R_y, R_z)$. Esta forma es llamada la *forma canónica local* de α .

En las siguientes figuras podemos observar las proyecciones de la traza de la curva $\alpha(t) = (t, t^2, t^3)$, para s pequeño, en los planos tn , tb , y nb .

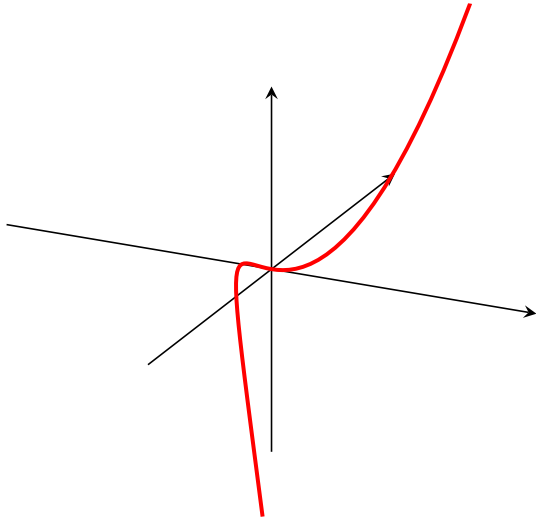


Figura 2.9: $\alpha(t) = (t, t^2, t^3)$.

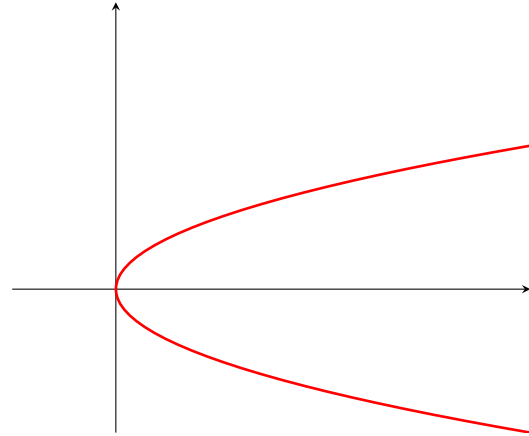


Figura 2.10: Proyección sobre el plano tn .

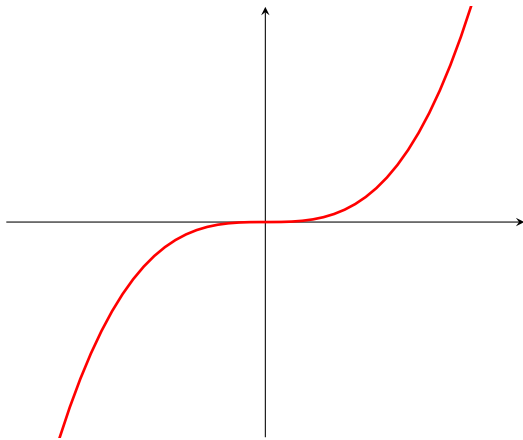


Figura 2.11: Proyección sobre el plano tb .

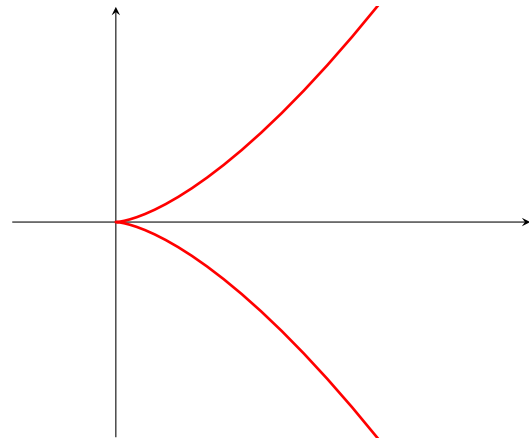


Figura 2.12: Proyección sobre el plano nb .

Capítulo 3

Estructura de proteínas

«*La Matemática es la creación más hermosa y poderosa del espíritu humano.*»

Stefan Banach

En el capítulo 2, observamos que podemos utilizar el triedro de Ferret-Serret como un *marco de referencia*, o *marco de orientación*, el cual se puede definir sobre cada punto de una curva o una superficie donde ésta es diferenciable. De manera similar, podemos definir marcos de referencia utilizando cuaterniones, los cuales poseen la ventaja de que un solo cuaternión describe la transformación completa del marco de referencia identidad tridimensional en un marco arbitrario; por lo tanto, esta representación es mucho más simple que la que se hace con el marco de referencia usual utilizando un triedro compuesto por vectores tridimensionales.

En este capítulo, estudiaremos cómo podemos definir marcos de referencia utilizando cuaterniones, con el fin de ejemplificar una de las aplicaciones que recientemente se les ha encontrado: servir como descriptores geométricos de la estructura secundaria de las proteínas. Como podremos ver, los cuaterniones exponen naturalmente similitudes globales entre todos los residuos de una proteína sin importar cuán cerca o lejos se encuentren. Aunque los cuaterniones son buenos descriptores geométricos, aún no se ha podido dar solución al problema de plegamiento de proteínas, pero es un camino a seguir, ya que desde hace aproximadamente 50 años, la rectitud se ha calculado con base a los ángulos de Ramachandran, con dos parámetros, y con cuaterniones, sólo necesitamos de un ángulo para poder calcular la rectitud. Además, el objetivo de seguir desarrollando este tipo de herramientas es describir geométricamente, desde su estructura global, la geometría de las proteínas, el cual, es uno de los principales objetivos de la bioquímica moderna.

3.1. Proteínas

Las *proteínas* son macromoléculas constituidas por moléculas básicas llamadas *aminoácidos* (AL, 2009). Los aminoácidos tienen una estructura bien definida y compuesta por: un grupo amino NH_2 , un grupo carboxilo $COOH$, un hidrógeno H y una cadena lateral R . Todos estos componentes están unidos por medio de un átomo de carbono C , que se denomina *carbono alfa*, y se le denota por C_α . La cadena lateral varía con cada aminoácido. Existen 20 aminoácidos naturales esenciales, por lo que hay 20 diferentes cadenas laterales posibles.

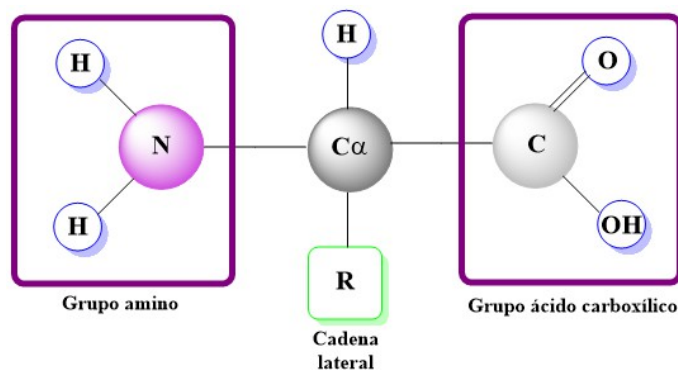


Figura 3.1: Estructura de un aminoácido.¹

Dos aminoácidos se pueden enlazar al unirse el grupo carboxilo de uno de ellos con el grupo amino del otro, liberando una molécula de agua H_2O . Este enlace forma lo que se llama un *enlace peptídico*. La unión de dos aminoácidos por medio de un enlace peptídico genera un *dipéptido*. En general, cuando se unen muchos aminoácidos por medio de enlaces peptídicos, el resultado se denomina *polipéptido*. A la componente remanente de cada aminoácido en el enlace peptídico se le llama *residuo*. Observemos que en este enlace el primer aminoácido mantiene su grupo amino completo y su grupo carboxilo se disminuye, mientras que en el segundo el grupo amino se disminuye y el grupo carboxilo queda intacto.

Gráficamente, podemos ver la formación de un enlace peptídico de la siguiente manera:

¹Ilustración realizada con *ChemOffice Professional v.17*, versión de prueba.

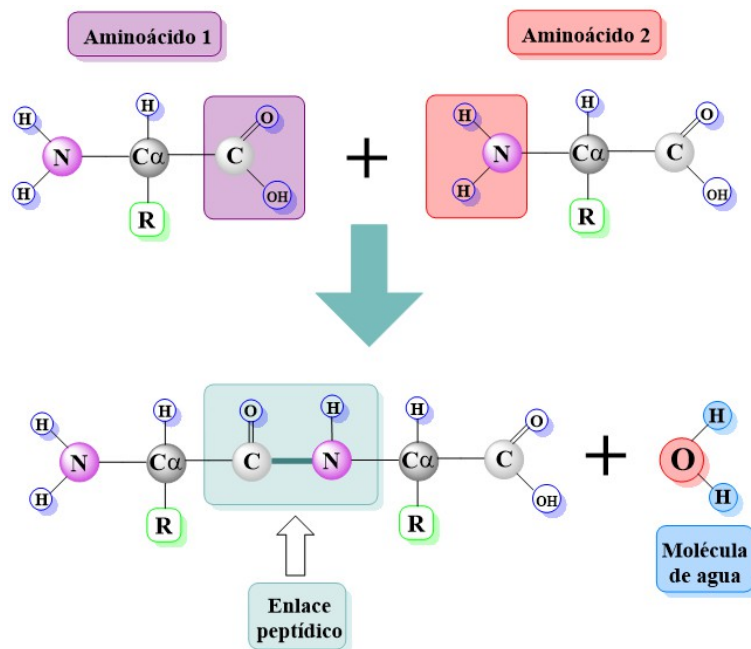


Figura 3.2: Enlace peptídico.²

Como ya hemos mencionado, si consideramos un número finito de aminoácidos que se pueden enlazar, tendremos lo que se llama un *polipéptido*, o bien, una cadena lineal de aminoácidos. Una cadena lineal de aminoácidos se llama la *estructura primaria* de la proteína que determina.

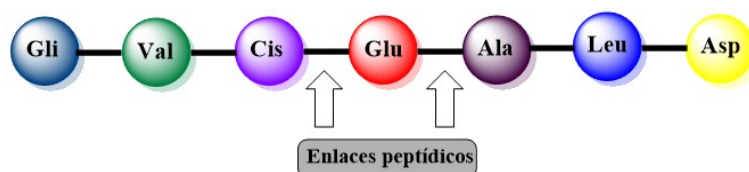


Figura 3.3: Estructura primaria de una proteína.²

En condiciones fisiológicas, una cadena lineal de aminoácidos se «pliega» de manera que determina lo que se denomina la *estructura de la proteína*. Esta estructura está inmersa en el espacio euclidiano tridimensional.

La llamada *estructura secundaria de la proteína* es el plegamiento local de la estructura primaria de una proteína. Esta presenta dos tipos de geometrías que se han podido describir muy bien: una geometría helicoidal y otra plana (FP, 2016, pág. 6).

²Ilustración realizada con *ChemOffice Professional v.17*, versión de prueba.



Figura 3.4: Estructura secundaria de una proteína.

A continuación, estudiaremos algunas propiedades importantes de cada una de estas estructuras.

Hélices alfa

Un tipo de geometría que se conoce bien en la estructura secundaria de una proteína es la helicoidal. Existen proteínas cuya estructura secundaria consiste básicamente de hélices. A continuación, podemos observar la estructura tridimensional de una proteína constituida en su mayor parte por hélices:

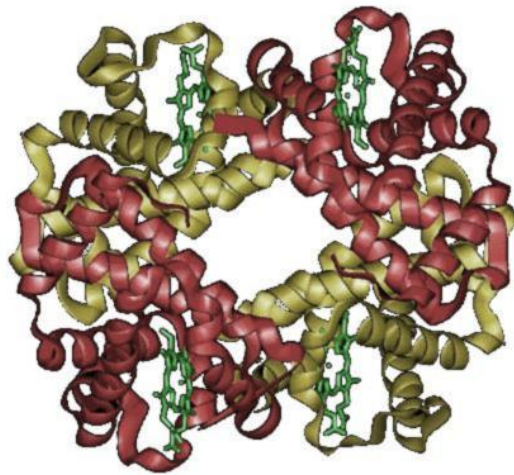


Figura 3.5: Estructura de una proteína compuesta principalmente por hélices.³

³Archivo extraído de (PDB, 2018)

Observación 3.1.1. Se sabe de resultados experimentales que, en la mayoría de los casos, el número mínimo de aminoácidos r que se requieren para que se forme una vuelta completa es $r = 4$; si bien se conocen casos donde ocurre que $r = 3$ ó $r = 5$.

Definición 3.1.1. A una hélice completa en la estructura secundaria de una proteína se le llama hélice alfa.

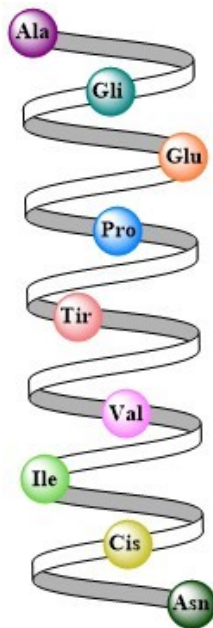


Figura 3.6: Hélice alfa.⁴

Hojas beta

De manera similar al caso de las hélices, existen proteínas cuya estructura secundaria consiste básicamente de planos, como la siguiente:

⁴Ilustración realizada con *ChemOffice Professional v.17*, versión de prueba.

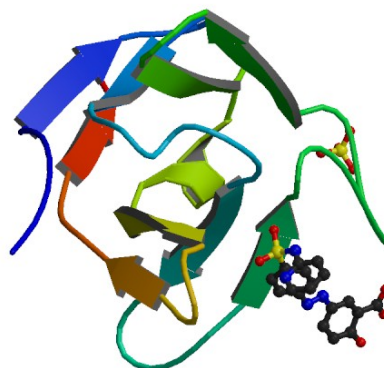


Figura 3.7: Estructura de una proteína compuesta principalmente por planos.⁵

Observación 3.1.2. *Se sabe de resultados experimentales que para que se forme una cadena lateral, en promedio, se requieren $r = 10$ aminoácidos arreglados de forma paralela en el mismo plano.*

Definición 3.1.2. *A una hoja completa en la estructura secundaria de una proteína se le llama hoja beta.*

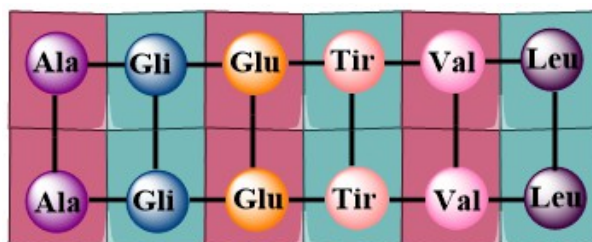


Figura 3.8: Hoja beta.⁶

⁵Archivo extraído de (PDB, 2018)

⁶Ilustración realizada con *ChemOffice Professional v.17*, versión de prueba.

3.2. Marcos de referencia cuaterniónicos

Un marco de referencia basado en cuaterniones nos permite analizar las relaciones entre marcos coordenados en una gran variedad de formas. En esta sección estudiaremos la base de los marcos de referencia: los marcos individuales, la relación entre dos o más marcos de referencia, y secuencias de marcos de referencia que cambian de manera regular⁷.

3.2.1. El marco identidad

El marco de referencia más simple posible es el *marco identidad*. Si etiquetamos los puntos coordenados en \mathbb{S}^3 como (w, x, y, z) , correspondiente a la parametrización por ángulo medio $q = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right)$, el marco identidad tridimensional puede ser representado por cualesquiera de los dos cuaterniones posibles: $q = (1, 0, 0, 0)$ ó $q = (-1, 0, 0, 0)$.

La figura 3.9 representa el hemisferio norte de la parte vectorial de los cuaterniones, y el punto azul en el origen es el cuaternión identidad $q = (1, 0, 0, 0)$. No podemos visualizar a $q = (-1, 0, 0, 0)$ en esta representación ya que sólo podemos dibujar un hemisferio de \mathbb{S}^3 a la vez proyectado en este sistema coordenado.

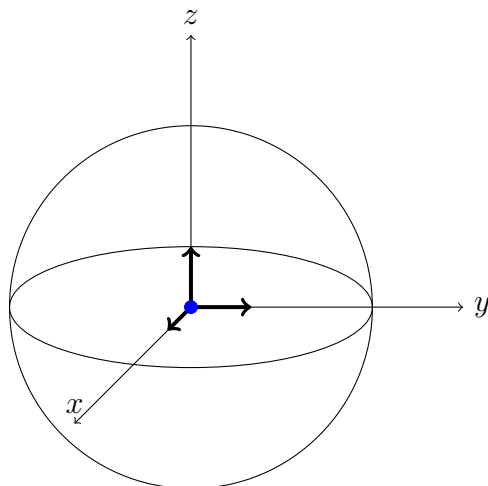


Figura 3.9: El marco de referencia identidad $q = (1, 0, 0, 0)$ es un punto en el origen de nuestra proyección estándar.

Por otro lado, si intercambiamos la proyección estándar (x, y, z) por la proyección (x, y, w) , podemos observar los dos signos alternativos del cuaternión identidad, con el punto azul ubicando a $q = (1, 0, 0, 0)$ y el rojo a $q = (-1, 0, 0, 0)$.

⁷Para un estudio más profundo sobre estos temas, revisar (HC, 2006)

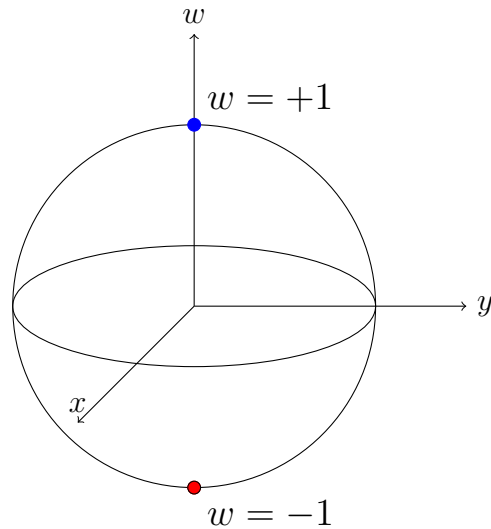


Figura 3.10: Visto desde esta perspectiva, el cuaternión posee longitud unitaria, como podemos inferir del hecho que todos los marcos de cuaterniones deben tener longitud unitaria.

3.2.2. Marcos de referencia aislados

Si queremos estudiar dos marcos de referencia aislados q_1 y q_2 , y su relación, primero debemos recordar que hay que simplificar los cálculos eligiendo adecuadamente nuestro origen de visualización. Podemos lograr esto trasladando q_1 hacia el marco identidad utilizando $q_1^{-1} * q_1 = (1, 0, 0, 0)$, y aplicando la misma transformación a q_2 , para producir un cuaternión p que tenga la misma relación con la identidad que posee q_2 con q_1 . Es decir, $p = q_1^{-1} * q_2$.

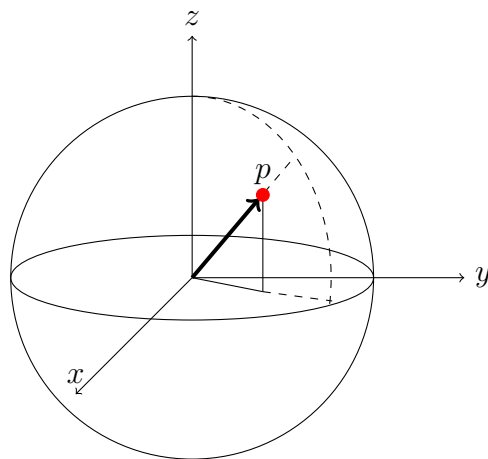


Figura 3.11: La relación entre dos cuaterniones arbitrarios simplificada transformando a q_1 en la identidad, dejando la relación completamente definida por $p = q_1^{-1} * q_2$.

Tal como se muestra en la imagen 3.11, podemos simplemente graficar (p_x, p_y, p_z) en el sistema coordenado usual. La relación con la transformación identidad es inmediata: si denotamos la parte vectorial del cuaternión $p = q_1^{-1} * q_2$ por $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$, entonces q_1 y q_2 están relacionados por una rotación de ángulo fijo en la dirección de $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{\|\mathbf{p}\|}$, y con un ángulo de rotación alrededor de $\hat{\mathbf{p}}$ dado por $\theta = 2\arcsen(\|\mathbf{p}\|)$.

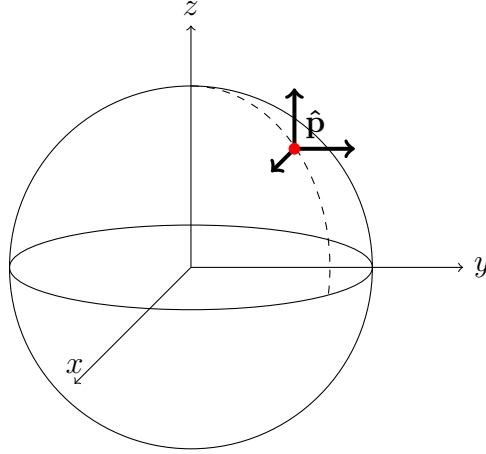


Figura 3.12: El eje de rotación para la transformación queda determinado por el vector unitario $\hat{\mathbf{p}}$.

3.2.3. Rotación de marcos de referencia

El ejemplo más sencillo de rotación de un marco es una sucesión parametrizada de matrices de rotación. Por ejemplo, ésta podría ser una rotación alrededor del eje x por un ángulo oscilando entre 0 (el marco identidad) y θ , utilizando ángulos intermedios $t\theta$, con $0 \leq t \leq 1$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(t\theta) & -\text{sen}(t\theta) \\ 0 & \text{sen}(t\theta) & \cos(t\theta) \end{bmatrix}.$$

La familia de cuaterniones correspondiente es simplemente el segmento de recta dado por $q(t) = (\cos(\frac{t\theta}{2}), \text{sen}(\frac{t\theta}{2}), 0, 0)$.

En el sistema coordenado usual, la visualización de esta familia de marcos es la recta sobre el eje x mostrada en la siguiente figura:

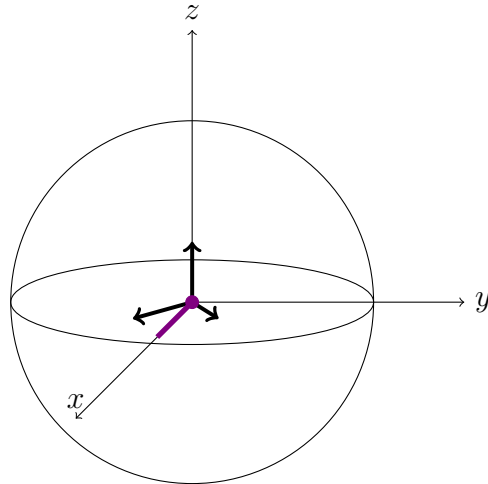


Figura 3.13: Una secuencia de marcos de referencia formados rotando alrededor del eje x , en la proyección usual.

Observando esta curva de tal manera que podamos visualizar la coordenada w explícitamente, obtenemos:

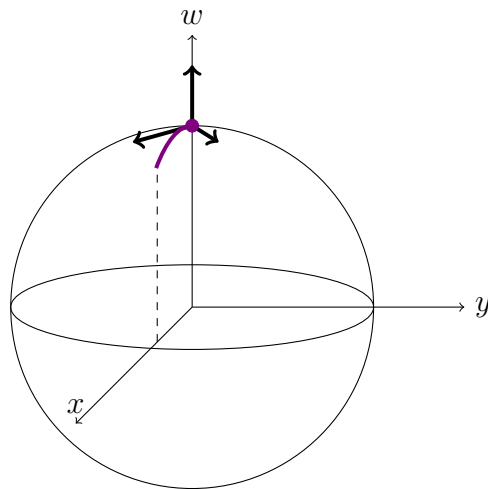


Figura 3.14: Una sucesión de marcos de referencia formados rotando alrededor del eje x , en la proyección wxy .

Para reemplazar la rotación alrededor del eje x por una rotación alrededor de un eje arbitrario \hat{n} , simplemente debemos reorientar la recta en el eje x para que apunte en la dirección de \hat{n} . Al igual que hicimos con una rotación alrededor del eje x , veremos la rotación alrededor del eje \hat{n} desde dos perspectivas:

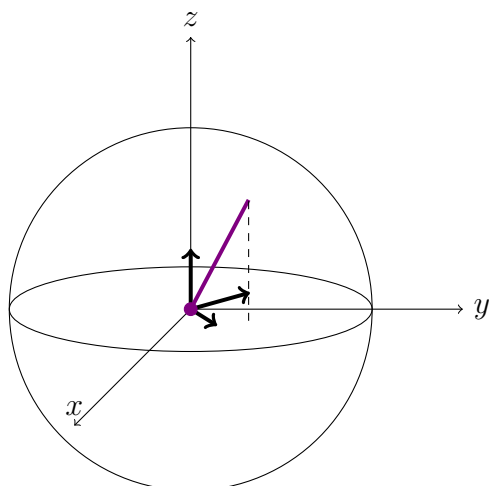


Figura 3.15: Una sucesión de marcos de referencia formados rotando alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$, en la proyección usual.

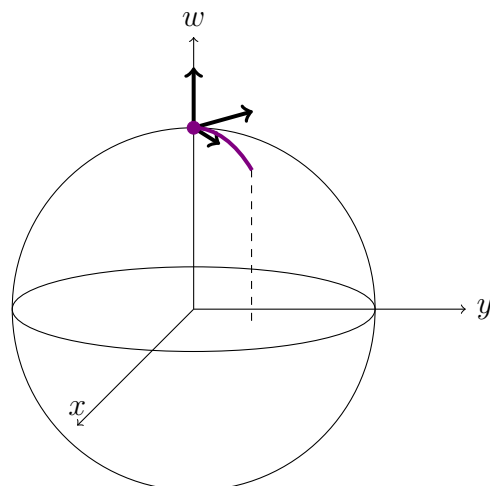


Figura 3.16: Una sucesión de marcos de referencia formados rotando alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$, en la proyección wxy .

En conclusión, es importante notar que para el caso de una rotación alrededor de algún eje arbitrario $\hat{\mathbf{n}}$, debemos considerar únicamente el caso de una rotación alrededor del eje x . Ya que establecimos la relación entre q_1 y q_2 más claramente trasladando q_1 hacia el marco identidad, existe una construcción directa que transforma una rotación alrededor del eje $\hat{\mathbf{n}}$ en una rotación equivalente alrededor del eje x , que podemos identificar como el «origen de referencia» para el estudio de estas rotaciones. La transformación explícita es lograda rotando a $\hat{\mathbf{n}}$ en la dirección de \mathbf{x} utilizando el eje de rotación fijo $\hat{\mathbf{n}}$ y ángulo ϕ derivados de:

$$\hat{\mathbf{m}} = \frac{\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}}{\|\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{x}\|}$$

$$\cos(\phi) = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}.$$

3.3. Estructura secundaria de proteínas

Como ya mencionamos con anterioridad, los cuaterniones se pueden utilizar como descriptores geométricos de la estructura tridimensional de las proteínas. Esta descripción pueden hacerla de manera global, describiendo la estructura en general, o local, describiendo el comportamiento en cada átomo que compone la estructura. En esta sección haremos un estudio de estos dos enfoques, y terminaremos estableciendo una relación entre los cuaterniones y los ángulos de Ramachandran.

3.3.1. Estructura global

En este apartado exploraremos algunos ejemplos específicos de aplicaciones de marcos de referencia para objetos matemáticos idealizados que se comportan de manera similar a datos de proteínas reales. Para ello, utilizaremos dos modelos, cada uno asociado con una estructura secundaria de proteínas: el modelo de la hélice alfa y el modelo de la hoja beta.

Antes de estudiar cada una de las estructuras antes mencionadas, introduciremos la siguiente definición:

Definición 3.3.1. *Una aplicación cuaterniónica es una aplicación f que asocia a un marco de referencia (triedro) un cuaternión unitario; es decir, $f : T \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{S}^3$, donde T es un conjunto de triedros en el espacio euclidiano tridimensional \mathbb{E}^3 .*

El modelo de la hélice alfa

Una aplicación elemental de los marcos de Frenet-Serret es el estudio de curvas helicoidales, las cuales corresponden a las hélices alfa de las proteínas. Recordemos que existe una doble correspondencia entre el grupo SO_3 y los cuaterniones unitarios, por lo que dos giros completos a la hélice significan que al final del recorrido volveremos de nuevo al punto de partida en el espacio cuaterniónico.

La aplicación cuaterniónica en este caso es una curva circular cerrada que tiene una proyección elíptica hacia las coordenadas (x, y, z) , determinada por la dirección del eje de la hélice y su inclinación. La figura 3.17 muestra una hélice matemática, con ecuación $\gamma(t) = (a\cos(t), b\sin(t), kt)$, y una fracción de los triedros de Frenet-Serret sobre la hélice, determinados por las derivadas locales de la curva.

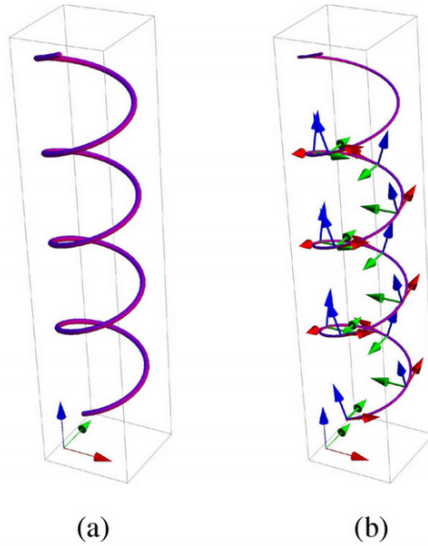


Figura 3.17: (a) Una hélice definida por la ecuación $\gamma(t) = (a\cos(t), b\sin(t), kt)$.
 (b) Un conjunto de triedros sobre la hélice determinados por las ecuaciones de Frenet-Serret. Nótese la relación del marco identidad con el primer marco definido por el triedro de Frenet-Serret sobre la hélice.⁸

En la figura 3.18 se muestran las correspondientes aplicaciones cuaterniónicas xyz y wyz (proyectadas sobre \mathbb{B}^3) de los marcos de orientación de la figura 3.17.

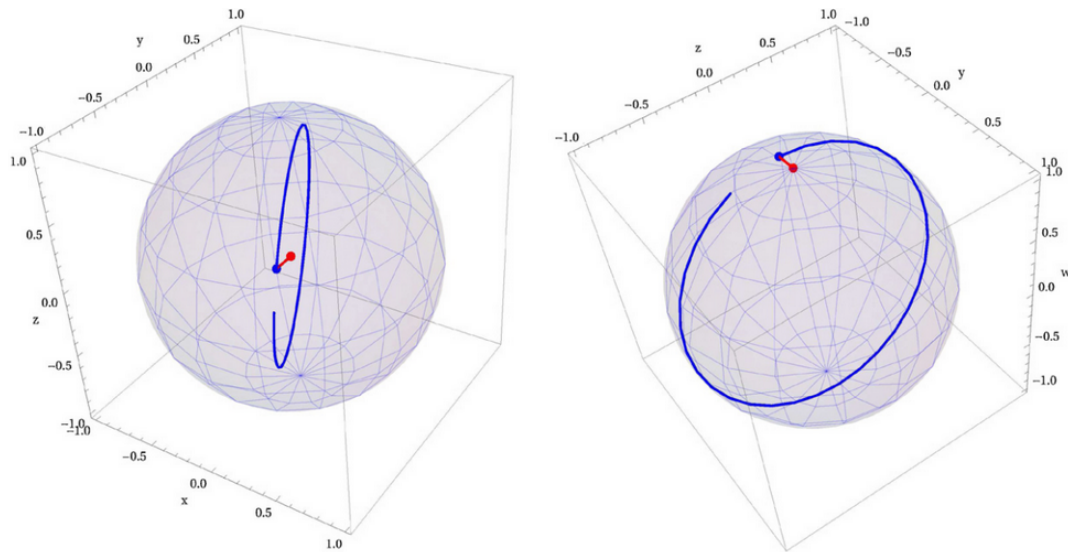


Figura 3.18: Aplicación cuaterniónica para una hélice definida por la ecuación paramétrica $\gamma(t) = (a\cos(t), b\sin(t), kt)$. (a) La proyección xyz de los marcos continuos adjuntos a la hélice. (b) La proyección wyz . En ambos casos, la línea roja parte del marco identidad (el punto rojo) hacia el primer triedro de Frenet-Serret definido sobre la hélice.⁸

⁸Ver (HT, 2012, pág. 261)

3. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

Un esquema rápido sobre cómo visualizar la hélice utilizando cuaterniones puede ayudar a entender el uso de los cuaterniones en una estructura de hélice alfa.

Iniciamos tomando la ecuación de una hélice circular recta tal que cumple con que $a = b = r$, $\gamma(t) = (r\cos(t), r\sen(t), kt)$, y calculamos su primera y segunda derivada:

$$\begin{aligned}\gamma'(t) &= (-r\sen(t), r\cos(t), k) \\ \gamma''(t) &= (-r\cos(t), -r\sen(t), 0).\end{aligned}$$

Utilizamos el vector tangente para determinar la dirección del primer eje del triedro, el cual denotaremos por x' . El eje z' lo obtenemos del producto cruz $\gamma'(t) \times \gamma''(t)$. Finalmente, el eje y' lo obtenemos calculando el producto cruz de los dos ejes anteriores: $y' = z' \times x'$. Normalizando, obtenemos las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}x'(t) &= \left(-\frac{r\sen(t)}{\sqrt{k^2 + r^2}}, \frac{r\cos(t)}{\sqrt{k^2 + r^2}}, \frac{r}{\sqrt{k^2 + r^2}} \right) \\ y'(t) &= (-\cos(t), -\sen(t), 0) \\ z'(t) &= \left(\frac{k\sen(t)}{\sqrt{k^2 + r^2}}, -\frac{k\cos(t)}{\sqrt{k^2 + r^2}}, \frac{r}{\sqrt{k^2 + r^2}} \right).\end{aligned}\tag{3.1}$$

El marco cuaterniónico puede ser calculado como una rotación alrededor del eje z , actuando sobre el marco identidad en $t = 0$, el cual queda determinado por la siguiente expresión:

$$\mathbf{q}_0 = \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{k^2 + r^2} + r}{\sqrt{k^2 + r^2}}}, \frac{r}{2\sqrt{r\sqrt{k^2 + r^2} + r^2 + k^2}}, \frac{-r}{2\sqrt{r\sqrt{k^2 + r^2} + r^2 + k^2}}, \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{k^2 + r^2} + r}{\sqrt{k^2 + r^2}}} \right).$$

Multiplicando a la izquierda por el cuaternión $\mathbf{q}_z = \left(\cos\left(\frac{t}{2}\right), 0, 0, \sen\left(\frac{t}{2}\right) \right)$, rotamos alrededor del eje z . Así, el marco cuaterniónico de la hélice queda determinado por la siguiente expresión:

$$\mathbf{q}_h(t) = \mathbf{q}_z(t) * \mathbf{q}_0.$$

El modelo de la hoja beta

Una aproximación a una hoja beta puede ser construida utilizando la proyección bidimensional de una hélice, como la del modelo de la hélice alfa, tomando $a \geq b$. Calculando los triedros de Frenet-Serret en $t = n\pi + \varepsilon$, para un ε pequeño, se producen los pares alternantes de los marcos de orientación característicos de las hojas beta. En datos reales, las hojas beta también giran sistemáticamente, lo cual puede incluirse en el modelo haciendo una rotación en el plano xy . En las figuras 3.19 y 3.20 se muestra la hoja beta de forma análoga al modelo de la hélice alfa.

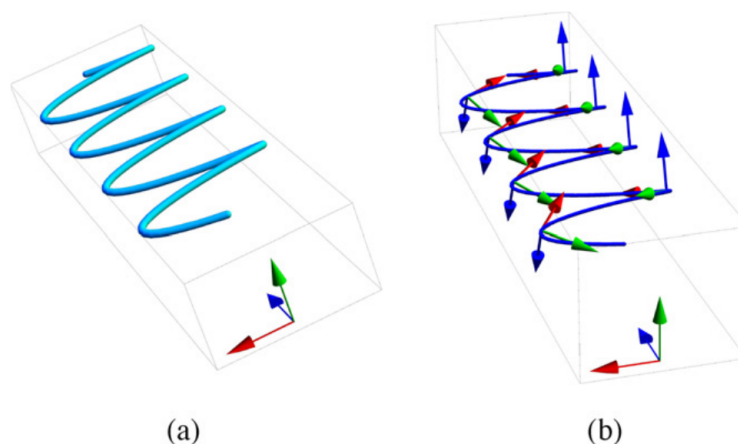


Figura 3.19: (a) Una hoja beta modelada por la ecuación $\gamma(t) = (\cos(t), 0.1\text{sen}(t), 0.5t)$. (b) Un conjunto de triedros de Frenet-Serret aproximadamente en los lugares esperados sobre la ecuación de la curva.⁹

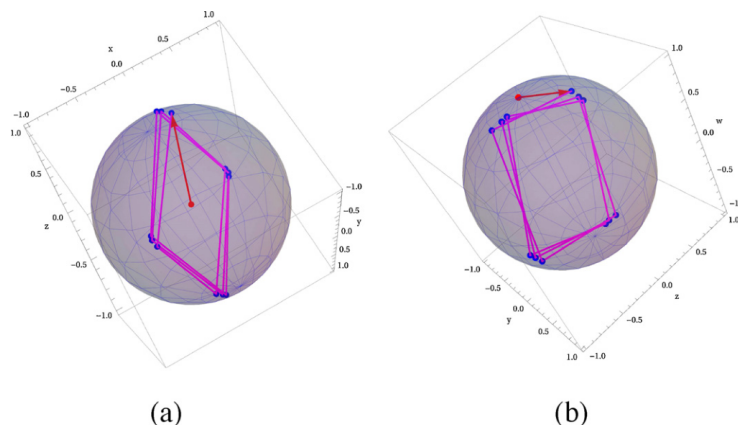


Figura 3.20: Aplicación cuaterniónica para una hoja beta definida por la ecuación paramétrica $\gamma(t) = (\cos(t), 0.1\text{sen}(t), 0.5t)$. (a) La proyección xyz de los marcos continuos adjuntos a la hélice. (b) La proyección wyz . La discontinuidad natural de los marcos de la hoja beta se reflejan en la elección de las líneas que conectan cada punto asociado al marco cuaterniónico, es decir, de un marco a otro.⁹

Para una hoja beta idealizada, observamos agrupamientos en intervalos de aproximadamente 90° en el gráfico de los cuaterniones, correspondiendo aproximadamente a giros de 180° entre residuos adyacentes de una hoja beta. En la práctica, la falta de precisión de los datos tienden a interrumpir el patrón regular del modelo matemático.

Marcos cuaterniónicos de curvas fragmentarias

Examinaremos secuencias de marcos continuos que pueden ser asociados directamente con la estructura helicoidal de proteínas que han sido medidas. La figura 3.21(a) muestra la estructura de una subsecuencia de hélice de una proteína, la *cremallera de leucina* del archivo 1C94 del PDB, cuyo elemento dominante es una sola estructura helicoidal que consiste de aproximadamente 7 circuitos cerrados. La curva idealizada está definida por una aproximación por curvas fragmentarias básicas continuas del camino que describen los C_α que forman la columna de la proteína. Esta curva es continuamente diferenciable y es adecuada para definir el movimiento continuo de los marcos a lo largo de la hélice, tal como el triedro de Frenet-Serret. Esto se muestra en la figura 3.21(b). La figura 3.21(c) es la proyección xyz de la aplicación cuaterniónica de los triedros de Frenet-Serret para 1C94, mostrando la forma cuaterniónica de la secuencia de orientaciones y su relación global con la proteína completa. Al comparar con la hélice matemática pura de las figuras 3.17 y 3.18, se muestra una semejanza cercana.

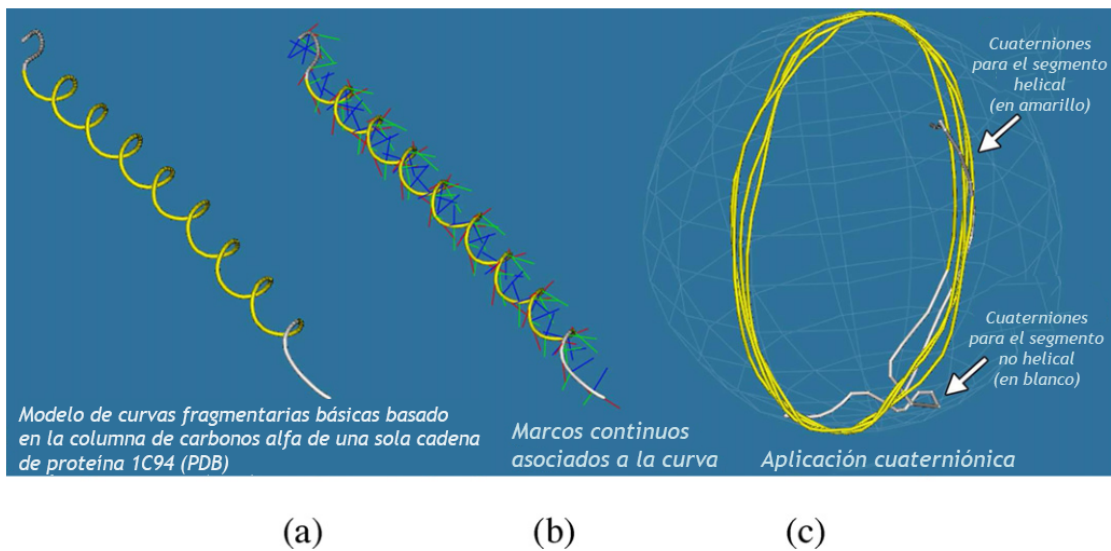


Figura 3.21: (a) Curvas fragmentarias básicas obtenidas de la columna de la proteína, la cual está determinada por los C_α . (b) Los triedros de Frenet-Serret denotan la posición de los C_α que forman la columna de la proteína. Nótese que la curva pasa cerca de los C_α , pero no por ellos. (c) Proyección xyz de la aplicación cuaterniónica de los triedros de Frenet-Serret.¹⁰

⁹Ver (HT, 2012, pág. 262)

¹⁰Ver (HT, 2012, pág. 263)

3.3.2. Estructura local de proteínas

En este apartado examinaremos las descripciones de marcos tridimensionales discretos, determinados por la posición de sus átomos más que por curvas idealizadas. Esto nos permitirá explorar aplicaciones que involucran secuencias de orientaciones de residuos de aminoácidos.

Se pueden elegir muchos marcos que pueden ser asignados a los componentes de una proteína, pero resulta más familiar estudiar los que se definen dentro de un residuo.

Marcos de referencia cuaterniónicos

Muchas discusiones sobre cuaterniones y su uso en modelamiento molecular y estudios sobre proteínas están disponibles. En todas estas discusiones es importante definir claramente el marco de referencia representado por un cuaternión dado. Recordemos que un *marco de referencia* es definido como un conjunto de ejes ortonormales x , y , z . Del conjunto de átomos en un único residuo de aminoácidos, encontramos tres marcos de referencia potenciales: P , C_α , y N . Para cada uno de estos marcos, se definen ejes en términos de la orientación relativa de átomos adyacentes.

El marco P , en el cual el carbono del carboxilo sirve como referencia, define el marco de cuaterniones basado en el plano peptídico. En nuestra definición, el eje x es fijado como el vector unitario que va desde el carbono del carboxilo hacia el carbono α . El eje z se calcula haciendo el producto vectorial del eje x con el vector unitario dirigido desde el carbono del carboxilo hacia el nitrógeno del siguiente residuo. El eje y se define como el producto vectorial entre el eje z y el eje x . Lo anterior quiere decir que:

1. $\vec{x}_p = \frac{C_{\alpha_i} - C_i}{\|C_{\alpha_i} - C_i\|}$. Gráficamente:

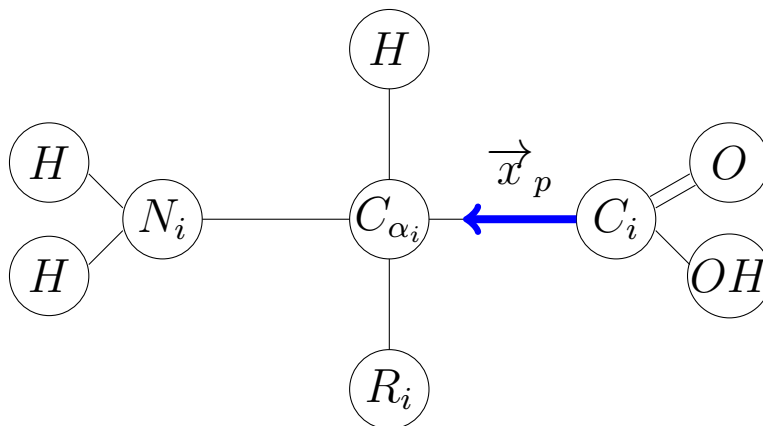


Figura 3.22: Obtención de \vec{x}_p .

3. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

2. $\vec{z}_p = \frac{\vec{x}_p \times (N_{i+1} - C_i)}{\|\vec{x}_p \times (N_{i+1} - C_i)\|}$. Gráficamente:

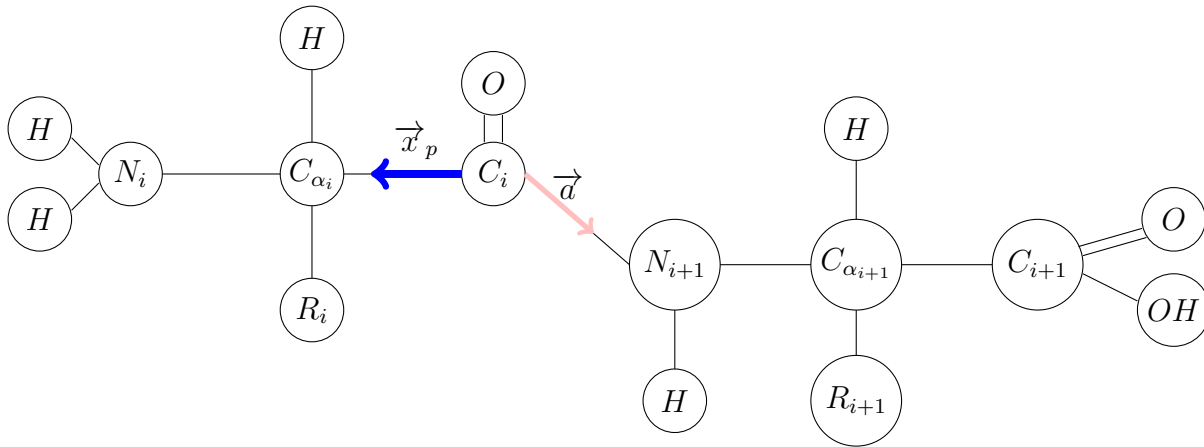


Figura 3.23: Vectores auxiliares para definir a \vec{z}_p .

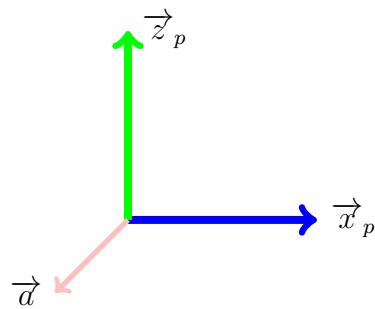


Figura 3.24: Obtención de \vec{z}_p .

3. $\vec{y}_p = \vec{z}_p \times \vec{x}_p$. Gráficamente:

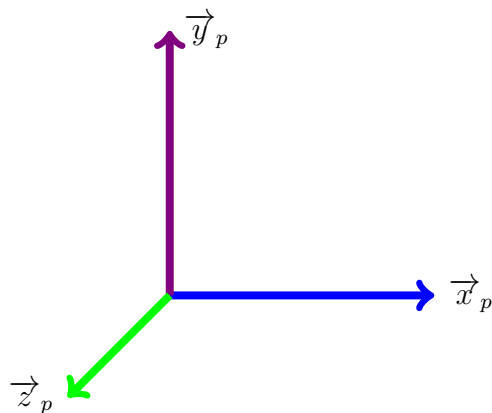


Figura 3.25: Obtención de \vec{y}_p .

Para el marco C_α , el carbono α es tratado como el punto de referencia. El eje x se encuentra dirigido desde el carbono α hacia el carbono del carboxilo. El eje z está definido como el producto vectorial entre el eje x y el vector unitario dirigido desde el carbono α hacia el nitrógeno del mismo residuo. De la misma manera que con el marco P , el eje y es el producto vectorial entre el eje z y el eje x :

$$\vec{x}_c = \frac{C_i - C_{\alpha_i}}{\|C_i - C_{\alpha_i}\|}$$

$$\vec{z}_c = \frac{\vec{x}_c \times (N_i - C_{\alpha_i})}{\|\vec{x}_c \times (N_i - C_{\alpha_i})\|}$$

$$\vec{y}_c = \vec{z}_c \times \vec{x}_c.$$

Gráficamente:

1. \vec{x}_c :

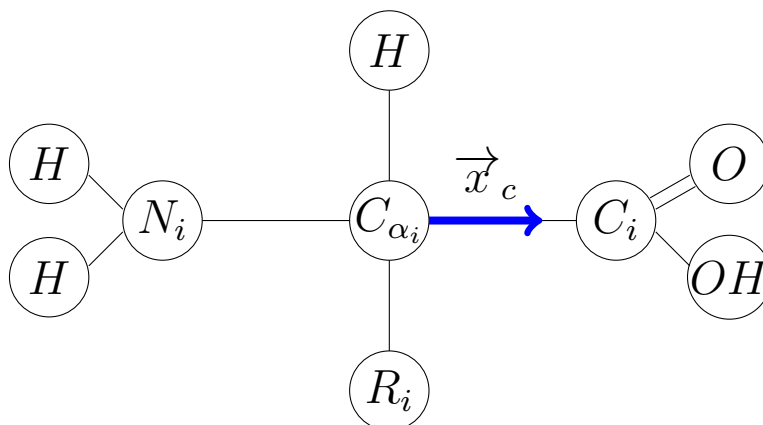


Figura 3.26: Obtención de \vec{x}_c .

2. \vec{z}_c :

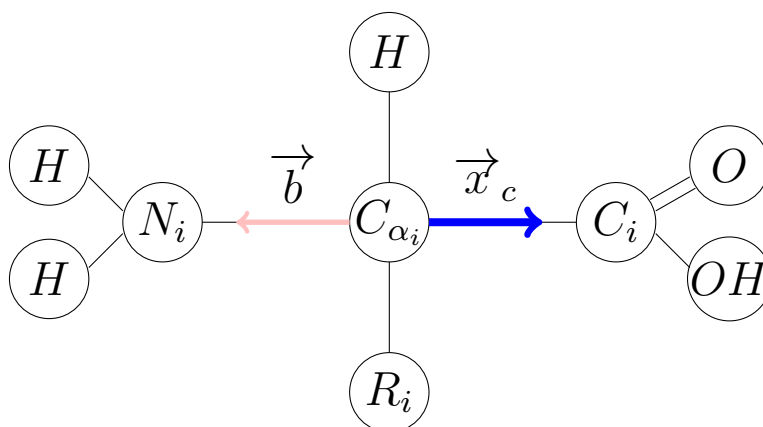


Figura 3.27: Vectores auxiliares para definir \vec{z}_c .

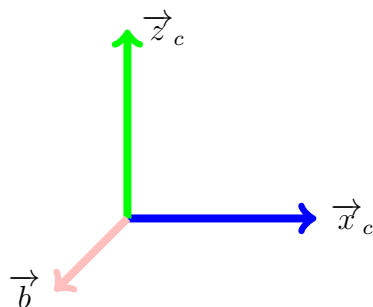


Figura 3.28: Obtención de \vec{z}_c .

3. \vec{y}_c :

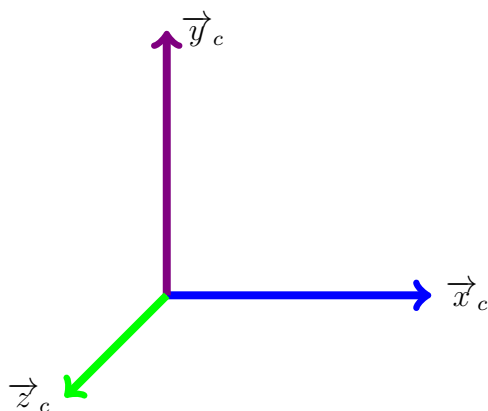


Figura 3.29: Obtención de \vec{z}_c .

Finalmente, el marco N , el cual designa al átomo de nitrógeno como origen. Aunque puede ser definido de diferentes formas dependiendo de la circunstancia, nosotros utilizaremos un marco N representativo descrito como sigue: primero, definimos un vector unitario a lo largo del enlace NH (este marco no es aplicable para aminoácidos que terminan en N o prolina):

$$\vec{V}_a = \frac{H - N_i}{\|H - N_i\|}.$$

Un segundo vector unitario es definido para que se encuentre dirigido desde el átomo de nitrógeno hacia el carbono α :

$$\vec{V}_b = \frac{C_{\alpha_i} - N_i}{\|C_{\alpha_i} - N_i\|}.$$

El eje y se define de tal manera que sea perpendicular a estos dos vectores:

$$\vec{V}_y = \vec{V}_b \times \vec{V}_a.$$

Al hacer una rotación de este vector \vec{V}_y un número específico de grados, generalmente 17° , y luego haciendo el producto vectorial entre este nuevo vector y \vec{V}_a , obtenemos el eje z :

$$\vec{V}_z = R_{\vec{V}_y, -17^\circ} \times \vec{V}_a.$$

Finalmente, el eje x se encuentra definido en términos de \vec{V}_y y \vec{V}_z :

$$\vec{V}_x = \vec{V}_y \times \vec{V}_z.$$

Gráficamente:

1. \vec{V}_a y \vec{V}_b :

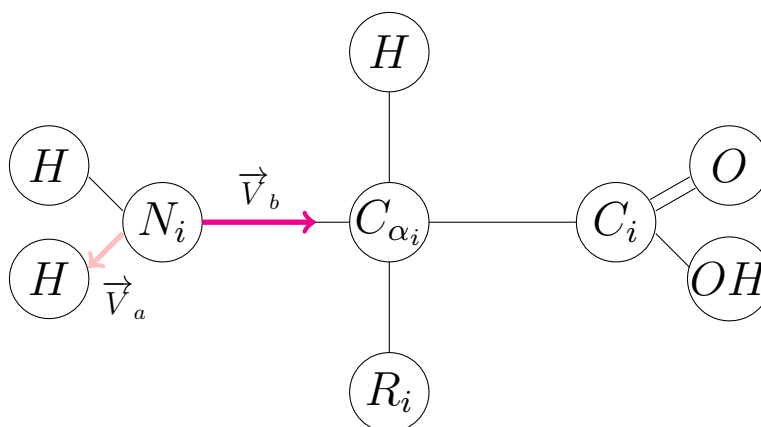


Figura 3.30: Definición de \vec{V}_a y \vec{V}_b .

2. \vec{V}_y :

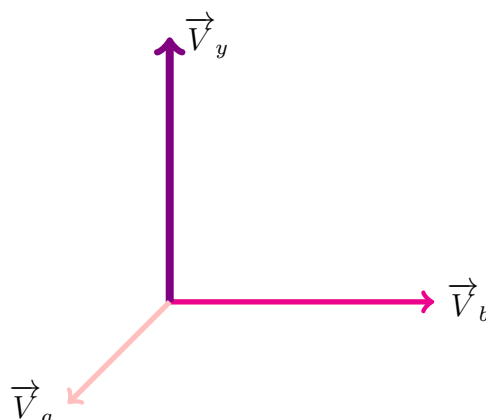
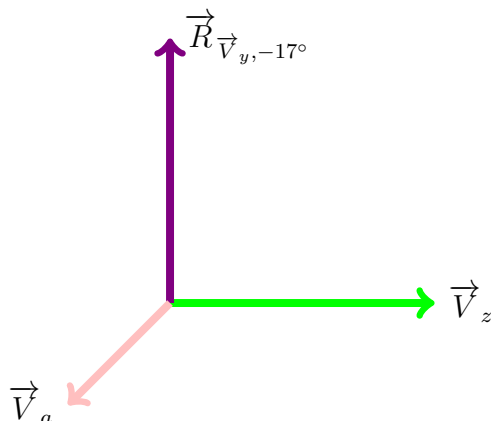
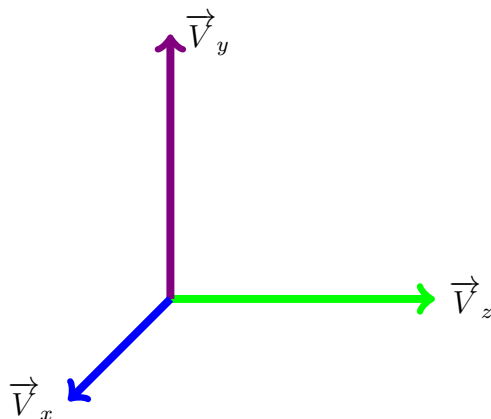


Figura 3.31: Obtención de \vec{V}_y .

3. \vec{V}_z :Figura 3.32: Obtención de \vec{V}_z .4. \vec{V}_x :Figura 3.33: Obtención de \vec{V}_z .

Observación 3.3.1. Hay una potencial deficiencia en el marco C_α : es posible fijar la orientación relativa y absoluta de dos residuos adyacentes mediante sus respectivos marcos C_α , y todavía tener una ambigüedad significativa en la estructura geométrica, debido a lo que se conoce como «movimiento bicicleta» (ver figura 3.34). El enlace entre el átomo C_i y el átomo N_{i+1} posiblemente podría servir como la manivela que une los dos «pedales de la bicicleta», es decir, los marcos C_α , aunque esa acción es bastante limitada por la rigidez del enlace peptídico. Esto es cierto para cualesquiera conjuntos de tres átomos adyacentes en la columna de la proteína que hayan sido usados para definir marcos independientes.

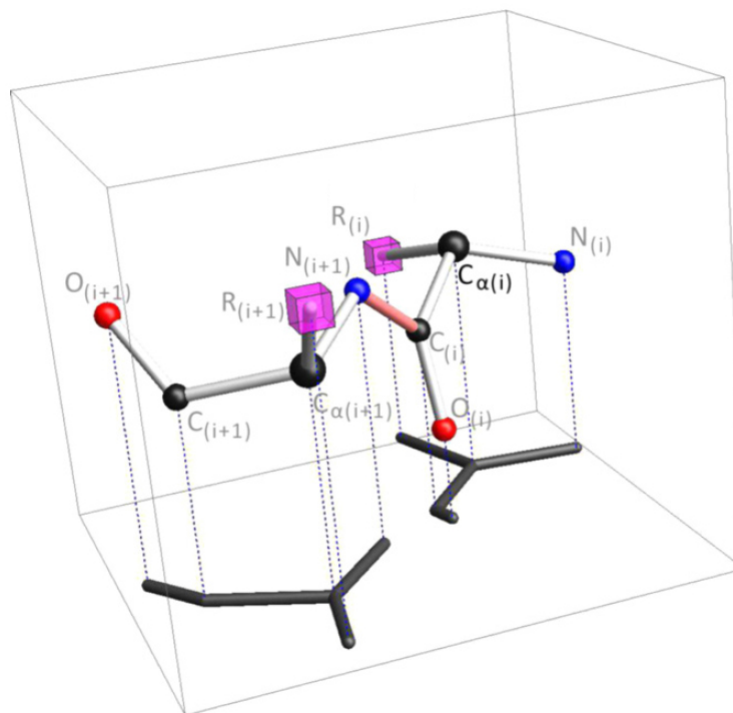


Figura 3.34: La sombra representa la geometría de dos residuos adyacentes. El enlace $C_i - N_{i+1}$ se encuentra en el centro del enlace peptídico y enlaza la ambigüedad de la «bicicleta» de los dos marcos C_α adyacentes. El marco P se incorpora a este enlace peptídico en vez de aislarse en un solo residuo.¹¹

Con el fin de construir la geometría completa de la proteína (incluso cualquier efecto que puedan provocar las distorsiones locales de las características del enlace), necesitaríamos al menos un marco intermedio más, tal como el marco P , que relacione dos residuos adyacentes.

Cuando utilicemos secuencias de marcos discretos, recordemos que debemos resolver la ambigüedad del signo en la elección del marco cuaterniónico asociado entre residuos adyacentes.

El cuaternión unitario asociado con un marco de referencia dado representa la rotación requerida para transformar la orientación del marco de referencia estándar en la orientación de este marco. Así, cada residuo de aminoácidos posee un cuaternión asociado:

$$q_i(\theta, \vec{\mathbf{n}}) = \left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \vec{\mathbf{n}} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \right), \quad (3.2)$$

donde θ y $\vec{\mathbf{n}}$ representan el ángulo y eje de esta rotación, respectivamente. Dado que cualquier rotación puede estar representada por dos cuaterniones distintos, se debe tomar

¹¹Ver (HT, 2012, pág. 264)

3. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

una decisión en cada caso sobre qué cuaternión utilizar en esta representación. Esta elección se hace de manera arbitraria para el primer aminoácido en una cadena. Siguiendo un procedimiento estándar, cada asignación secuencial se hace de tal manera que la «distancia entre cuaterniones» de residuos adyacentes sea la más pequeña entre dos posibles valores. La elección de \vec{n}'_i se hace de tal manera que $\vec{V}_i \cdot \vec{n}'_i > 0$, tal como se muestra en la figura 3.40.

Para una secuencia ordenada de marcos de referencia, tales como los producidos por los residuos de proteínas, la gráfica resultante es una secuencia de puntos sobre \mathbb{S}^3 , los cuales pueden ser conectados por curvas cuaterniónicas continuas a trozos contenidas en \mathbb{S}^3 .

A continuación, presentaremos dos ejemplos, uno por cada geometría de la estructura secundaria de proteínas, para observar lo descrito anteriormente.

Ejemplo de hélice alfa. El archivo *1AIE* del PDB es un prototipo de hélice alfa. Aplicando el marco C_α y el marco P al mismo tiempo, nos resulta la figura 3.35, en la cual se muestran estructuras helicoidales similares, pero no idénticas, como elipses en la proyección *wyz*.

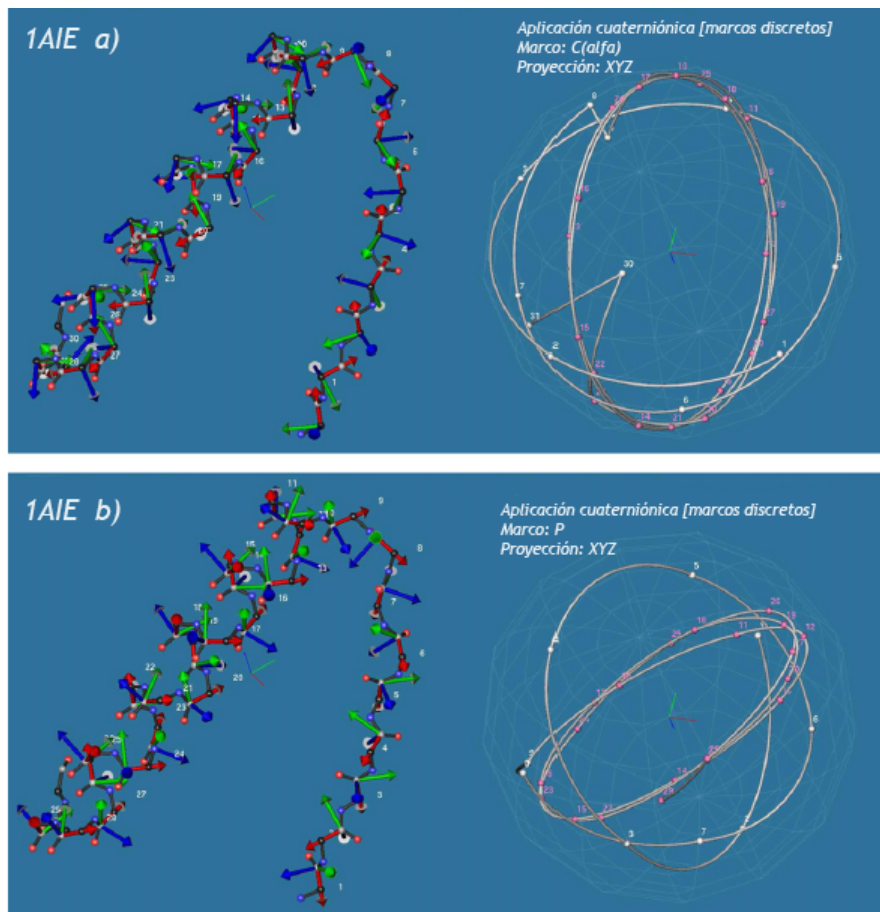


Figura 3.35: Estructura del archivo *1AIE* del PDB (a) con sus marcos C_α y (b) con sus marcos P ; y los correspondientes marcos cuaterniónicos unidos por arcos esféricos.¹²

Una configuración aún mas complicada, la cremallera de leucina, es mostrada en la figura 3.36, junto con las gráficas de los marcos cuaterniónicos asociados a los marcos C_α .

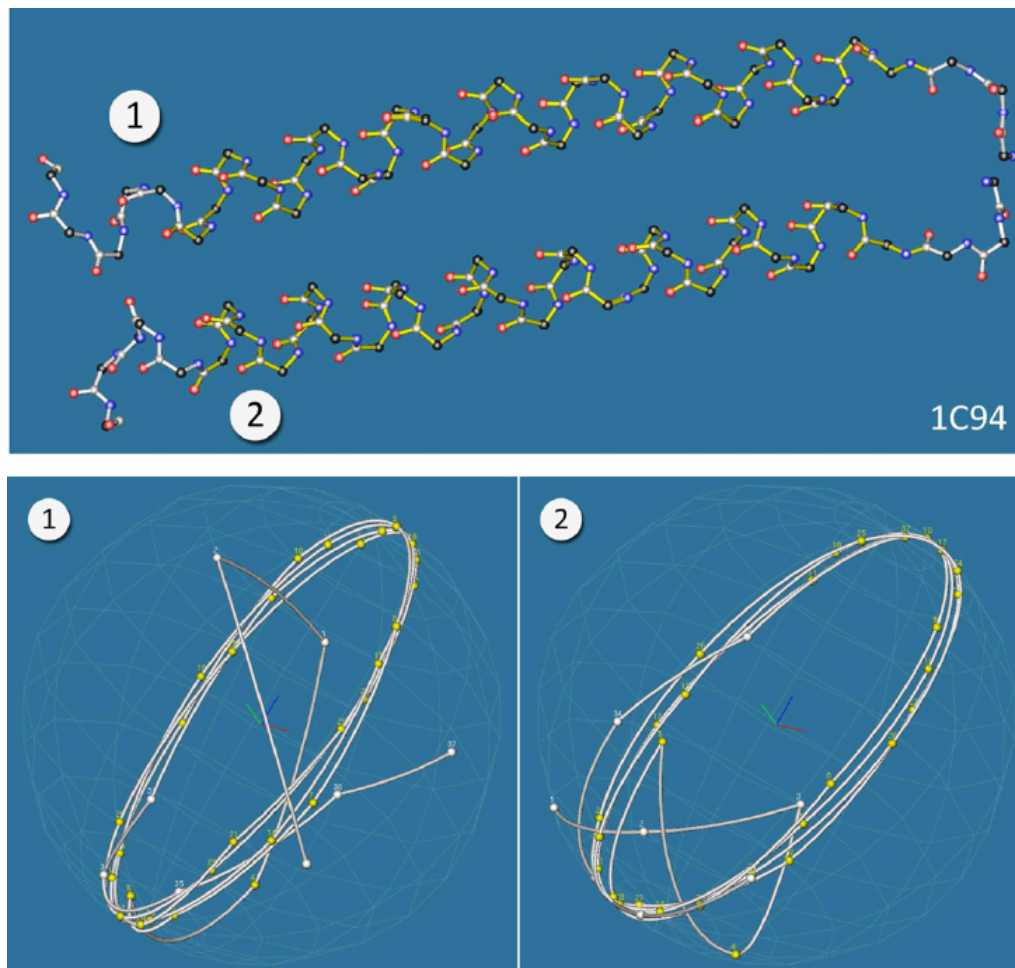


Figura 3.36: (arriba) Geometría de la doble cadena de la cremallera de leucina. Los segmentos que son parte de la hélice en las dos cadenas están en amarillo. (abajo) La aplicación cuaterniónica para los marcos C_α de las dos cadenas.¹³

Cada marco es representado por un solo cuaternión en la gráfica, y la secuencia ordenada de aminoácidos produce una secuencia ordenada de puntos sobre \mathbb{S}^3 . Cualesquiera dos puntos en esta secuencia, sean adyacentes o no, pueden conectarse por curvas cuaterniónicas que corresponden a la rotación más pequeña necesaria para pasar de un marco a otro. La longitud de estas curvas mínimas provee una medida precisa de la similitud de los marcos de orientación. Los marcos sobre residuos de aminoácidos que están cerca en el espacio cuaterniónico, ya sea que estén cercanos o distantes en el orden de la secuencia, poseen orientaciones globales similares.

¹²Ver (HT, 2012, pág. 265)

¹³Ver (HT, 2012, pág. 266)

3. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

Ejemplo de hoja beta. Examinaremos la estructura de las hojas beta, la cual forma agrupaciones extremadamente espaciadas de orientaciones similares en las aplicaciones cuaterniónicas, tal como se muestra en la figura 3.37 para el archivo 2HC5 del PDB.

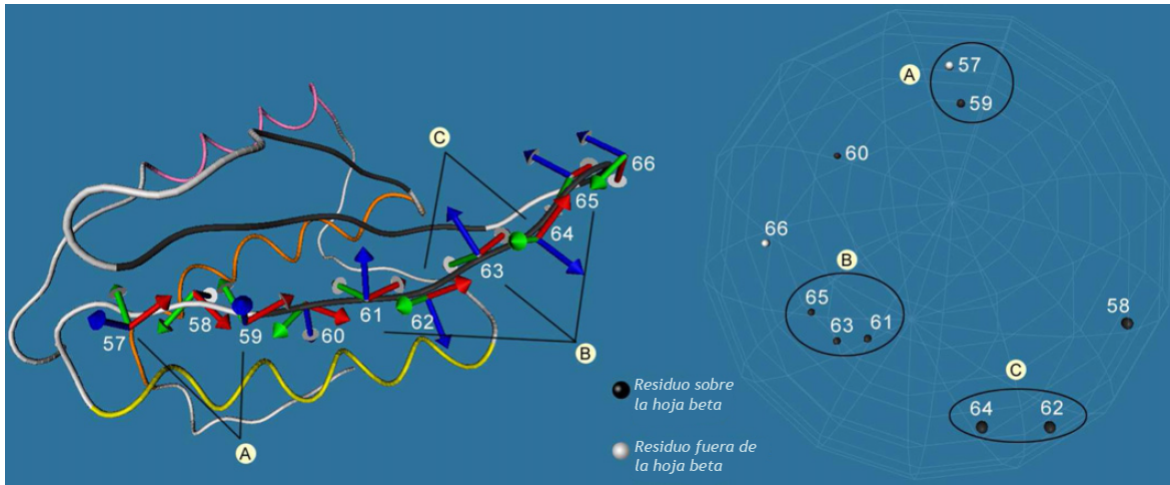


Figura 3.37: Estructura del archivo 2HC5 del PDB y la aplicación cuaterniónica asociada a su hoja beta. El emparejamiento de los marcos adyacentes está dado por el signo de los cuaterniones.¹⁴

En la figura 3.38 mostramos un método alternativo. Graficamos ambos signos para posibles marcos de una hoja beta, y exhibimos claramente el agrupamiento cuádruple esperado.

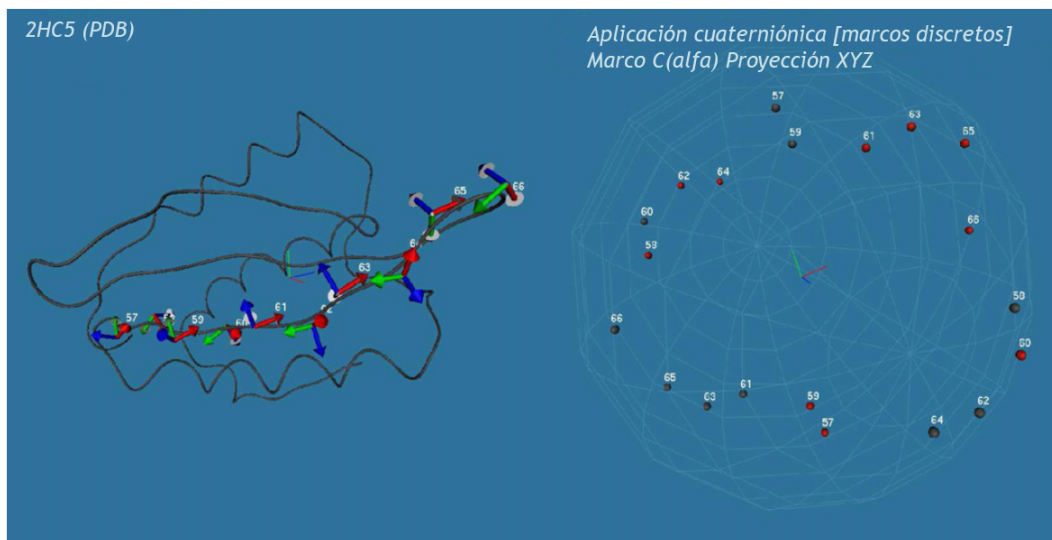


Figura 3.38: Estructura de hoja beta con cada cuaternión graficado dos veces. Puede notarse que la hoja beta no yace exactamente sobre un plano, pero que posee un leve giro, lo que genera la agrupación cuádruple esperada.¹⁵

¹⁴Ver (HT, 2012, pág. 266)

Otro ejemplo se muestra en la figura 3.39, el cual incluye un modelo de curvas fragmentarias básicas para el archivo 1A05 del PDB, basado en la columna de los C_α . Los marcos de orientación para residuos que corresponden a una hoja beta están dibujados sobre el modelo mostrado en la figura 3.39(a). La aplicación cuaterniónica en la figura 3.39(b) muestra los cuaterniones correspondientes a cada marco de orientación. Además, revela qué pares de residuos alternantes tienen orientaciones similares.

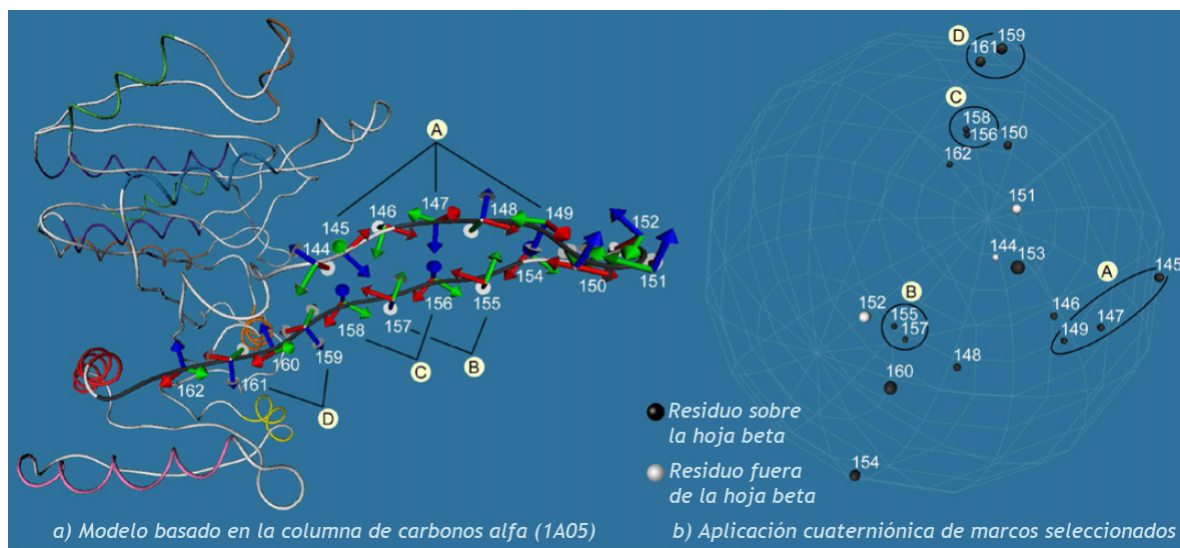


Figura 3.39: (a) Un modelo para el archivo 1A05 del PDB, construido usando curvas fragmentarias básicas, las cuales están basadas en la columna de los átomos C_α de la proteína. La región con los marcos corresponde a la estructura de hoja beta. Los marcos están etiquetados por la secuencia de números del aminoácido al que pertenecen. (b) La aplicación cuaterniónica asociada a los marcos seleccionados. La numeración representa el cuaternión que corresponde a un marco definido por aminoácido.¹⁶

3.3.3. Rectitud y ángulos de Ramachandran

Como parte de este estudio, evaluaremos la rectitud en términos del marco P y el marco C_α . Una definición de marcos adicionales son potencialmente útiles. Por ejemplo, marcos relacionados con la orientación de la cadena lateral pueden ser útiles para seguir cambios de orientación durante el plegamiento de proteínas, durante el enlace de sustrato, o durante un cálculo de dinámicas moleculares.

¹⁵Ver (HT, 2012, pág. 267)

¹⁶Ver (HT, 2012, pág. 267)

Cuaterniones y ejes helicoidales locales

Hay dos ideas fundamentales implícitas en este estudio. Primero, los marcos de referencia basados en cuaterniones pueden ser asignados a cada aminoácido en un péptido sin la necesidad de adecuación por mínimos cuadrados. Segundo, la relación entre dos residuos de aminoácidos cualesquiera en una cadena se puede conceptualizar en términos de traslaciones sobre, y rotaciones con respecto a, un eje helicoidal local, el cual será definido con base en nuestros marcos de referencia cuaterniónicos. Esta relación no requiere que los residuos de aminoácidos sean parte de una «hélice» real, ni que sean adyacentes. Es más general que eso. Para esta discusión, asumiremos que los residuos $i - 1$ e i se encuentran caracterizados de alguna manera por marcos (representados por q_{i-1} y q_i) basados en la geometría molecular alrededor de átomos específicos (C_α , C , ó N) en los residuos (puntos A y B en la figura 3.40). Es la parte rotacional de esta relación que se encuentra definida exactamente por la «diferencia de cuaterniones» q'_i :

$$q'_i = q_i q_{i-1}^{-1} = \left(\cos \left(\frac{\theta'_i}{2} \right), \vec{n}'_i \text{sen} \left(\frac{\theta'_i}{2} \right) \right),$$

donde \vec{n}'_i es el vector unitario en la dirección del eje helicoidal local, y θ'_i es el ángulo requerido para transformar la orientación del marco $i - 1$ en la orientación del marco i por una rotación alrededor de ese eje.

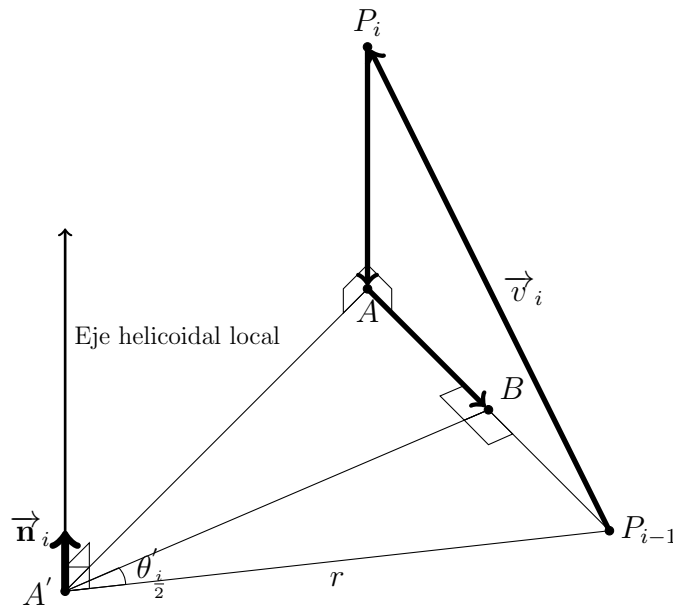


Figura 3.40: Los puntos P_i y P_{i-1} son puntos de referencia de residuos de aminoácidos adyacentes (por ejemplo, dos carbonos alfa o dos carbonos de carboxilos).¹⁷

¹⁷Ver (HDB, 2011, pág. 2174)

Las cantidades necesarias para definir un eje helicoidal local se encuentran mostradas en la figura 3.40, donde P_{i-1} y P_i representan las posiciones de puntos de referencia de dos residuos de aminoácidos adyacentes.

El punto A es el punto de proyección del punto P_i sobre el plano perpendicular al eje helicoidal local y que contiene al punto P_{i-1} :

$$A = P_i - (\vec{V}_i \cdot \vec{n}'_i) \vec{n}_i.$$

El punto B está a medio camino entre P_{i-1} y A . El punto A' , que define la posición del eje helicoidal local en el espacio, puede ser definido como sigue:

$$A' = B - \frac{\|\vec{V}_{AB}\|(\vec{V}_i \times \vec{n}'_i)}{\tan\left(\frac{\theta'_i}{2}\right)\|\vec{V}_i \times \vec{n}'_i\|}.$$

El posicionamiento del punto A' en un punto específico en el espacio permite una visualización simple de la diferencia de cuaterniones como una flecha que inicia en el punto A' y que apunta en dirección de \vec{n}'_i , con longitud $\vec{V}_i \cdot \vec{n}'_i$. La altura por residuo, entonces, es simplemente la longitud de estas flechas, $\vec{V}_i \cdot \vec{n}'_i$. Otros parámetros tales como número de residuos por vuelta, N , y la inclinación de la hélice, se pueden definir en términos del ángulo y eje de la diferencia de cuaterniones:

$$N = \frac{2\pi}{\theta'_i}$$

$$P = N\|\vec{V}_i \cdot \vec{n}'_i\|.$$

Rectitud basada en cuaterniones

Nuestra definición de rectitud involucra el producto punto de dimensión 4 de dos diferencias adyacentes:

$$s(i) = 1 - \frac{\arccos(\|q'_{i+1} \cdot q'_i\|)}{\frac{\pi}{2}}.$$

El producto punto $q'_{i+1} \cdot q'_i$ es precisamente el término escalar de la segunda diferencia, q''_i :

$$q''_i = q'_{i+1}(q'_i)^{-1} = \left(\cos\left(\frac{\theta''_i}{2}\right), \text{sen}\left(\frac{\theta''_i}{2}\right) \vec{n}'' \right),$$

donde

$$\cos\left(\frac{\theta_i''}{2}\right) = q'_{i+1} \cdot q'_i.$$

Así, podemos escribir:

$$s(i) = 1 - \frac{\arccos\left(\left|\cos\left(\frac{\theta_i''}{2}\right)\right|\right)}{\frac{\pi}{2}},$$

donde θ_i'' es el ángulo asociado con la segunda diferencia de cuaterniones en el residuo i . La construcción matemática « $\arccos(|\cos(x)|)$ » es un módulo angular. Esto simplemente nos permite expresar a θ_i'' en cualquier manera que decidamos. Sin embargo, si restringimos la asignación de θ_i'' al intervalo usual, $[-\pi, \pi]$, entonces podemos escribir el valor de la rectitud de una manera aún más simple:

$$s(i) = 1 - \frac{|\theta_i''|}{\pi}.$$

Una interpretación gráfica (aunque en dimensión 4) de la rectitud es presentada a continuación. Si los cuaterniones unitarios q'_{i+1} y q'_i son expresados como vectores sobre una esfera unitaria de dimensión 4, entonces su distancia esférica puede ser expresada como $\left|\frac{\theta_i''}{2}\right|$, cuyo rango se encuentra entre 0 y $\frac{\pi}{2}$. La rectitud es simplemente una medida directa de esta distancia esférica sobre la hipersfera, expresada de tal manera que 1 corresponde a un alineamiento perfecto y 0 corresponde al peor caso posible: una rotación alrededor de un eje opuesto, o una rotación de 180° alrededor del mismo eje.

Entonces, definir la rectitud con base en los cuaterniones, permite hacer una asociación más natural ya que 1 corresponde a «completamente alineado» y 0 a «nada alineado».

Relación con los ángulos de Ramachandran

Cada residuo de un aminoácido posee dos enlaces que se pueden rotar libremente: el enlace $N - C_\alpha$ y el $C_\alpha - C$. Los ángulos que se forman en estas rotaciones definen la conformación de un residuo en una proteína, y son llamados *ángulos de Ramachandran*, ψ y ϕ .

Definición 3.3.2. *Los ángulos de Ramachandran son dos ángulos de torsión en la cadena polipeptídica, los cuales describen la rotación de la columna alrededor de los enlaces $N - C_\alpha$ (llamado ϕ) y $C_\alpha - C$ (llamado ψ).*

Una forma especial para graficar estos ángulos fue introducida por Ramachandran.

Definición 3.3.3. *Un gráfico de Ramachandran es una representación gráfica en la cual el ángulo diédrico (ψ) de rotación alrededor del enlace $C_\alpha-C$ en un polipéptido es graficado versus el ángulo diédrico (ϕ) alrededor del enlace $C_\alpha-N$.*

El gráfico de Ramachandran provee una manera fácil de ver la distribución de los ángulos de torsión en la estructura de una proteína. Además, provee una visión conjunta de regiones en las cuales ciertas rotaciones polipeptídicas no están permitidas debido al *obstáculo estérico* (colisión entre átomos). El gráfico de Ramachandran de una proteína también puede servir como un importante indicador de la calidad de su estructura tridimensional.

Los ángulos de Ramachandran están entre los más importantes parámetros de la estructura local que permite controlar el plegamiento. Particularmente, si pudiéramos predecir dichos ángulos seríamos capaces de anticipar este pliegue. Además, ψ y ϕ proveen la flexibilidad requerida a la columna polipeptídica para adoptar cierta forma.

En las proteínas, los dos ángulos ϕ y ψ describen la rotación de la cadena polipeptídica alrededor de los enlaces a ambos lados del C_α , tal como se muestra en la figura 3.41.

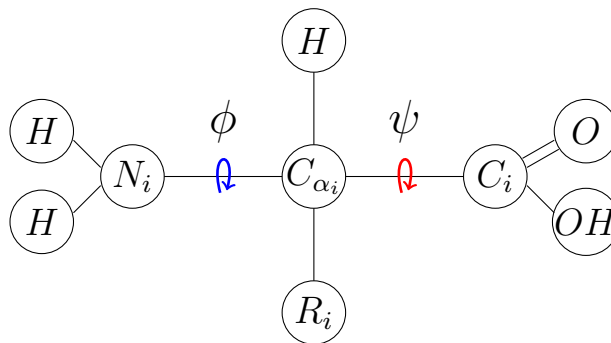


Figura 3.41: Representación de los ángulos ϕ y ψ .

La definición estándar de un ángulo diédrico, según la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés), se muestra en la figura siguiente:

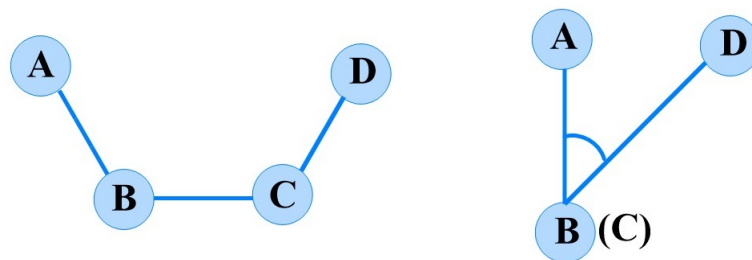


Figura 3.42: A , B , C y D representan la posición de 4 átomos utilizados para definir el ángulo diédrico. La figura de la derecha es la vista a lo largo del enlace $B - C$ con el átomo A colocado en 90° . La rotación alrededor del enlace $B - C$ se encuentra descrito por el ángulo ABD mostrado en la figura. Los ángulos positivos corresponden a una rotación en sentido horario.¹⁸

La restricción de los ángulos de Ramachandran para ciertos valores es claramente visible en un gráfico de Ramachandran, tal como se muestra en la figura 3.43.

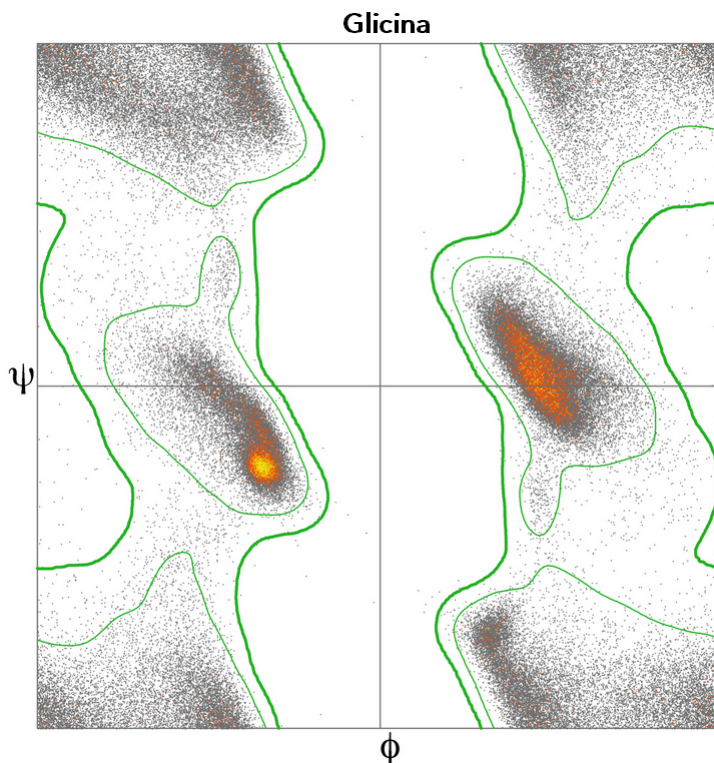


Figura 3.43: Gráfico de Ramachandran para la Glicina. En anaranjado se muestran dos núcleos, y fuera de las líneas verdes se encuentran las zonas no permitidas (colisión de átomos).¹⁹

¹⁸Ilustración realizada con *ChemOffice Professional v.17*, versión de prueba.

El eje horizontal muestra los valores de ψ , mientras que el vertical los de ϕ . Cada punto en el gráfico muestra los ángulos para un aminoácido. El intervalo al que pertenecen ambos ángulos es $[-\pi, \pi]$. Esta es una presentación conveniente y permite distinguir claramente las regiones características de las hojas beta y las hélices alfa. Las regiones del gráfico con mayor densidad de puntos son llamadas *regiones permitidas* o *regiones de baja energía*. Algunos valores de ϕ y ψ son prohibidos, ya que esto involucraría átomos muy cercanos, resultando en colisionamiento estérico. Normalmente estas regiones se encuentran vacías en los gráficos, pero hay ciertas excepciones a esta regla: en algunos casos es posible encontrar ciertos valores para los ángulos, y lo más probable es que resultarán en alguna tensión sobre la cadena polipeptídica.

En casos donde la estructura no haya sido propiamente definida por rayos X, y especialmente por errores en el modelo, podemos encontrar ángulos de torsión en regiones prohibidas del gráfico de Ramachandran; este tipo de desviaciones generalmente indica problemas con la estructura. Con base en esto, los gráficos de Ramachandran son utilizados para evaluar la calidad de los modelos experimentales.

Una relación aproximada entre la rectitud P y los ángulos de Ramachandran se puede demostrar que es:

$$s(i) \approx 1 - \frac{\arccos(|\cos(\frac{\theta}{2})|)}{90^\circ},$$

donde

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right)\cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) - \frac{1}{3}\sin\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right)\sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) \quad (3.3)$$

y

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \psi_{i+1} - \psi_i \\ \Delta\phi &= \phi_{i+1} - \phi_i; \end{aligned}$$

y los ángulos ψ y ϕ son las definiciones estándar de los ángulos de Ramachandran para los residuos indicados.

La derivación de esta relación involucra tres pasos: primero, para el marco P , q_i puede ser descrito en relación con q_{i-1} en términos de una rotación compuesta estándar XZX involucrando a los ángulos de Ramachandran, siempre que se haga la aproximación de que el vector $C_\alpha - C$ de un residuo es colineal con el vector $N - C_\alpha$ del siguiente residuo:

$$q_i \approx q_i q(-\phi, \mathbf{x}) q(\alpha, \mathbf{z}) q(180^\circ - \phi, \mathbf{x}),$$

¹⁹ Archivo extraído de (TA, 2018).

3. ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

donde asignamos, por propósitos de aproximación, a α para que sea 180° menos el ángulo tetraédrico ideal, aproximadamente 70.53° . Más precisamente:

$$\alpha = 2\cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \right).$$

Así, tenemos para \tilde{q}'_i que:

$$\tilde{q}'_i = (q_{i-1}^{-1}q_i) \approx q(-\phi_i, \mathbf{x})q(\alpha, \mathbf{z})q(180^\circ - \phi_i, \mathbf{x}).$$

Segundo, este conjunto de rotaciones compuestas pueden ser expresadas en términos de un sólo cuaternión $q = (q_0, q_1, q_2, q_3)$, donde:

$$q_0 = \cos \left(\frac{\alpha}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_{i+1} + \phi_i}{2} \right)$$

$$q_1 = \cos \left(\frac{\alpha}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_{i+1} + \phi_i}{2} \right)$$

$$q_2 = \text{sen} \left(\frac{\alpha}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_{i+1} - \phi_i}{2} \right)$$

$$q_3 = \text{sen} \left(\frac{\alpha}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_{i+1} - \phi_i}{2} \right).$$

Tercero, notemos que con base en las identidades de cuaterniones $pq \cdot r = p \cdot rq^{-1}$ y $qp \cdot r = p \cdot q^{-1}r$, el producto punto de dos diferencias de cuaterniones absolutas, $\hat{q}'_{i+1} \cdot \hat{q}'_i$, posee el mismo valor que el producto punto de dos diferencias de cuaterniones relativas, $\tilde{q}'_{i+1} \cdot \tilde{q}'_i$. Podemos escribir:

$$\begin{aligned} \hat{q}'_{i+1} \cdot \hat{q}'_i &= \tilde{q}'_{i+1} \cdot \tilde{q}'_i \\ &\approx \cos^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_{i+1} + \phi_{i+1}}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_i + \phi_i}{2} \right) \\ &+ \cos^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_{i+1} + \phi_{i+1}}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_i + \phi_i}{2} \right) \\ &+ \text{sen}^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_{i+1} - \phi_{i+1}}{2} \right) \cos \left(\frac{\psi_i - \phi_i}{2} \right) \\ &+ \text{sen}^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_{i+1} - \phi_{i+1}}{2} \right) \text{sen} \left(\frac{\psi_i - \phi_i}{2} \right), \end{aligned}$$

que con un poco de trabajo se reduce a la ecuación 3.3.

Notamos una interesante conexión entre los marcos P y los gráficos de Ramachandran. La forma de las ecuaciones para $q = (q_0, q_1, q_2, q_3) = \tilde{q}'_i$, junto con la ecuación 3.2, sugieren que la proyección en tres dimensiones de una aplicación de Gauss para cuaterniones, representando el cuaternión q como un vector \mathbf{n} de longitud $\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$, posee todas las características de un gráfico de Ramachandran (aproximado), que envuelve un cilindro con un eje a lo largo del eje x , un radio de $\sqrt{\frac{2}{3}}$, y una longitud de $\sqrt{\frac{4}{3}}$. Rectas de ϕ y ψ constantes se enroscan diagonalmente alrededor del cilindro.

La rectitud basada en el marco C_α es una función aún más simple de los ángulos ϕ y ψ de los residuos $i-1$, i e $i+1$. En este caso, utilizando la misma aproximación de colinealidad, la relación equivalente de rotación es simplemente:

$$\tilde{q}'_i = (q_{i-1}^{-1}q_i) \approx q(180^\circ - \psi_{i-1} - \phi_i, \mathbf{x})q(\alpha, \mathbf{z});$$

y después un análisis similar, obtenemos que:

$$s(i) \approx 1 - \frac{|\theta|}{180^\circ},$$

donde el ángulo θ es simplemente

$$\theta = (\phi_{i+1} + \psi_i - \phi_i - \psi_{i-1})_{[-180^\circ, 180^\circ]}.$$

La designación $[-180^\circ, 180^\circ]$ indica que el ángulo debe ser normalizado para estar dentro del rango de entre -180° y 180° . Esta sorprendentemente simple relación entre las segundas diferencias de cuaterniones y los ángulos de Ramachandran se da ya que ϕ_{i+1} y ψ_i son rotaciones alrededor de un eje aproximadamente común, así como lo son ϕ_i y ψ_{i-1} .

Ahora, al evaluar la correlación entre la rectitud basada en cuaterniones y la basada en los marcos P y C_α , obtenemos las siguientes gráficas:

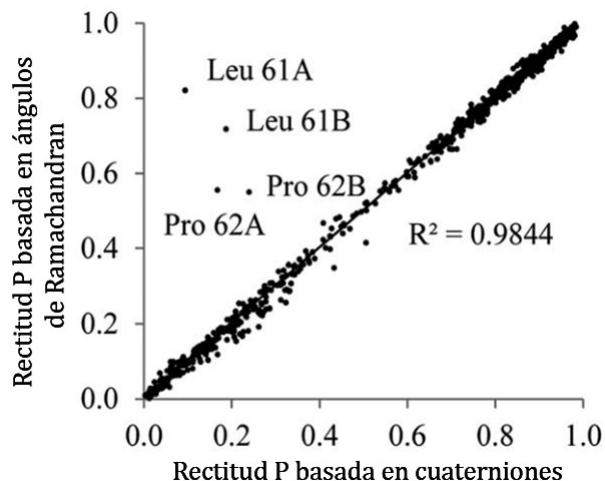


Figura 3.44: Correlación entre la rectitud basada en cuaterniones y la rectitud P para las cadenas A y B del archivo 1DEH del PDB ($R^2 = 0.9844$).²⁰

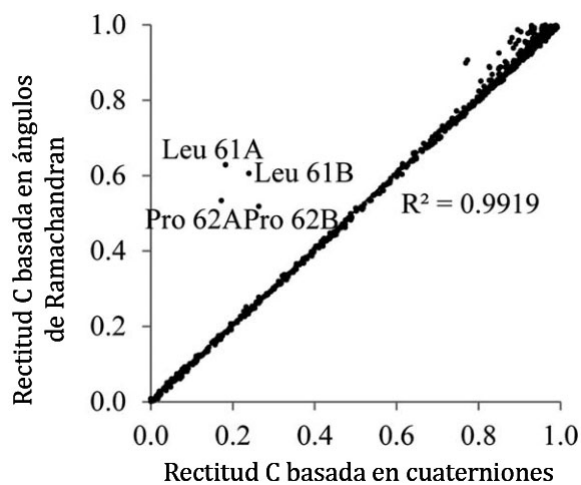


Figura 3.45: Correlación entre la rectitud basada en cuaterniones y la rectitud C_α para las cadenas A y B del archivo 1DEH del PDB ($R^2 = 0.9919$).²¹

Así, podemos concluir que ambas definiciones de rectitud se encuentran estrechamente relacionadas ya que los coeficientes de determinación se encuentran cercanos a 1.

²⁰Ver (HDB, 2011, pág. 2177)

²¹Ver (HDB, 2011, pág. 2177)

3.4. Conclusiones

Algunos aspectos importantes que se estudiaron en el desarrollo de este capítulo fueron los siguientes:

1. Es posible definir una aplicación $f : T \subset \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{S}^3$, donde T es un conjunto de triedros en \mathbb{E}^3 . A esta le llamamos *aplicación cuaterniónica*.
2. Para estudiar de forma global la estructura secundaria de una proteína, podemos utilizar una hélice matemática con ecuación $\gamma(t) = (a \cos(t), b \sin(t), kt)$ para definir su marco cuaterniónico como $\mathbf{q}_h(t) = \mathbf{q}_z(t) * \mathbf{q}_0$, donde

$$\mathbf{q}_0 = \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{k^2 + r^2} + r}{\sqrt{k^2 + r^2}}}, \frac{r}{2\sqrt{r\sqrt{k^2 + r^2} + r^2 + k^2}}, \right. \\ \left. \frac{-r}{2\sqrt{r\sqrt{k^2 + r^2} + r^2 + k^2}}, \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{k^2 + r^2} + r}{\sqrt{k^2 + r^2}}} \right),$$

es el primer triedro sobre la curva, y $\mathbf{q}_z = \left(\cos\left(\frac{t}{2}\right), 0, 0, \sin\left(\frac{t}{2}\right) \right)$.

3. Ya que existe una correspondencia sobreyectiva $\rho : \mathbb{S}^3 \rightarrow SO_3$, podemos asociar a M_i un $q_i \in \mathbb{S}^3$, donde M_i es el marco de referencia asociado al residuo de aminoácidos i , tal que $q_i : M_i \mapsto M_{i+1}$.
4. La correspondencia $\rho : \mathbb{S}^3 \rightarrow SO_3$ es «2 a 1», por lo que se hace la elección del cuaternión que va a describir el marco de referencia de un residuo de aminoácidos tal que se cumpla que $\theta = 2\cos^{-1}(|q_{i-1}^{-1} \cdot q_i|)$ es el menor de los dos posibles.
5. Una relación aproximada entre la rectitud P y los ángulos de Ramachandran es

$$s(i) \sim 1 - \frac{\arccos\left(\left|\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\right|\right)}{90^\circ},$$

donde

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) - \frac{1}{3} \sin\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right);$$

y ϕ, ψ son los ángulos estándar de Ramachandran.

Epílogo

Gracias a la correspondencia que existe entre SO_3 y el grupo de cuaterniones unitarios, podemos relacionar cuaterniones a marcos asociados a la estructura secundaria de proteínas, la cual está constituida por *hojas betas* y *hélices alfa*.

Localmente, a los marcos de referencia en residuos de aminoácidos, principalmente los llamados marcos P , C_α y N , podemos asociarles un cuaternión. Esta asociación nos permite asignar cuaterniones a toda la columna de marcos sobre la cadena de aminoácidos. Es importante tomar el cuaternión que tiene la menor distancia con respecto al cuaternión asignado al residuo anterior. Esto nos permite utilizar las propiedades de los cuaterniones para estudiar las gráficas de Ramachandran.

Globalmente, podemos aproximar una hélice matemática a una hélice alfa, utilizando el triedro de Frenet-Serret. Además, utilizando la proyección bidimensional de una hélice sobre un plano en el que se obtienen curvas senoidales, podemos hacer una aproximación a hojas beta.

Todo el trabajo anteriormente descrito se realiza después de obtener información sobre la estructura de una proteína. Uno de los problemas que ha persistido por más de 50 años es el llamado «Problema de plegamiento de proteínas», el cual ha sido objeto de estudio de la bioquímica, y plantea tres preguntas principales que aún no han sido respondidas:

1. **El código de plegado físico:**²² ¿Cómo se determina la estructura tridimensional original de una proteína por las propiedades fisicoquímicas que están codificadas en su secuencia de aminoácidos?
2. **El mecanismo de plegamiento:**²² Una cadena polipéptida puede tener una cantidad muy grande de posibles combinaciones. ¿Cómo puede una proteína plegarse tan rápido?

De hecho, si consideramos una cadena con 100 residuos, el menor número de combinaciones posibles es 2^{100} , ya que hay al menos dos configuraciones («bien» y «mal»). Se ha encontrado que el número más factible de configuraciones es 3, a las cuales han llamado «alfa», «beta», y «espiral». Utilizando el número de configuraciones anterior, existen 3^{100} posibles combinaciones para una cadena con 100 residuos. Existe otra

clase de arreglo, en la cual se involucran los ángulos de Ramachandran: se consideran 10 posibles configuraciones para el ángulo ϕ , y 10 para el ángulo ψ , teniendo un total de 100 configuraciones. Utilizando el número de configuraciones anterior, hay 100^{100} posibles combinaciones para una cadena con 100 residuos.

Ahora, si tomamos el caso de la titina, constituyente del músculo de los vertebrados, la cual tiene cerca de 27,000 residuos de aminoácidos, ¿alrededor de cuántas posibles combinaciones tendrá?

3. **Predecir la estructura de proteínas utilizando algoritmos:**²² ¿Es posible desarrollar un algoritmo computacional para predecir la estructura de una proteína desde su secuencia de aminoácidos?

Es un reto a futuro poder responder estas preguntas, principalmente porque dar solución al problema del mal plegamiento de proteínas nos permitiría conocer la naturaleza de numerosas enfermedades degenerativas asociadas a este fenómeno, como lo son la diabetes-tipo-II, el Alzheimer o el mal de Parkinson.

²²Ver (PFP, 2012) y (RPM, 2018, pág. 391).

Bibliografía

- [B] Beardon, A. F. (1995). *The Geometry of Discrete Groups (2nd ed.)*. New York, Estados Unidos: Springer.
- [CS] Conway, J. H., and Smith, D. A. (2003). *On Quaternions and Octonions*. Florida, Estados Unidos: CRC Press
15, 18, 19
- [CLGC] Cruz López, M., y García Campos, M. (2017). *Geometría euclidiana bidimensional y su grupo de transformaciones*. Ciudad de México, México: Phapiros IMUNAM.
- [ML] Curtis, M. L. (1979). *Matrix groups*. New York, Estados Unidos: Springer.
5, 15, 20
- [DMM] Dam, E., Koch, M and Lillholm, M. (1998). *Quaternions, interpolation and animation*. Denmark: University of Copenhagen.
5
- [DC] Do Carmo, M. P. (1976). *Differential Geometry of Curves and Surfaces*. New Jersey, Estados Unidos: Prentice-Hall.
40
- [FP] Finkelstein, A. V., and Ptitsyn, O. (2016). *Protein Physics: A Course of Lectures (2nd ed.)*. Londres, Inglaterra: Elsevier Science.
55
- [GS] Guerra, C., and Istrail, S. (2003). *Mathematical Methods for Protein Structure Analysis and Design: Advanced Lectures (2nd ed.)*. Berlín, Alemania: Springer.
- [HC] Hanson, A. J., and Cunningham, S. (2006). *Visualizing Quaternions*. San Francisco, Estados Unidos: Elsevier Science.
5, 59

- [HDB] Hanson, R. M., Kohler, D., and Braun, S. G. (2011). *Quaternion-based definition of protein secondary structure straightness and its relationship to Ramachandran angles*. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 79(7), 2172–2180.
80, 88
- [HT] Hanson, A. J., and Thakur, S. (2012). *Quaternion maps of global protein structure*. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 38, 256-278.
65, 68, 75, 77, 78, 79
- [AL] Lehninger, A. L. (2009). *Principios de Bioquímica (5th ed.)*. Madrid, España: Ediciones Omega, S.A.
54
- [RPM] Mondaini, R. P. (2018). *Trends in Biomathematics: Modeling, Optimization and Computational Problems: Selected works from the BIOMAT Consortium Lectures, Moscow 2017*. Moscow, Russian Federation: Springer International Publishing.
92
- [PDB] Protein Data Bank (2018). RCSB PDB: Homepage. [online] Rcsb.org. Disponible en: <http://www.rcsb.org/> [Visitado el 25 Feb. 2018].
56, 58
- [PFP] Dill, K. A., and Maccallum, J. L. (2012). *The Protein-Folding Problem, 50 Years On*. *Science*, 338(6110), 1042-1046. doi:10.1126/science.1219021
92
- [TA] Torsion Angles and the Ramachandran Plot in Protein Structures. (n.d.). Recuperado de <https://proteinstructures.com/Structure/Structure/Ramachandran-plot.html> el 15 de Agosto de 2018, 85