

# Bioinformática Estrutural

Prof. Dr. Márcio Dorn

Instituto de Informática  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Av. Bento Gonçalves 9500  
91501-970 - Porto Alegre, RS - Brasil

2016



# Sobre a disciplina

## Informações principais:

- Curso: Programa de Pós-Graduação em Computação / Bioinformática
- Nome: Bioinformática Estrutural
- Data/Local: Prédio 43425 Sala 106. Sexta-feira às 13:30 - 17:10.
- Aulas teóricas, aulas práticas, exercícios e trabalhos.

## Suporte de software:

- Toda a gerência da disciplina via **Moodle**



## Avaliação:

- Trabalhos, Seminários, Implementações, etc;
- Participação em sala de aula, pontualidade na entrega das tarefas/trabalhos, etc;
- Presença.

# Bioinformática



- Casamento entre a ciência da computação e a biologia molecular;
- "A coleção, organização e a interpretação de dados biológicos" [Orengo et al., 2003];
- "Aplicação de técnicas computacionais para entender e organizar informações biológicas" [Luscomb, 2001];
- ...

- Em outras palavras...:
  - Existem grandes volumes de dados que precisam ser manipulados e estudados → banco de dados, algoritmos, reconhecimento de padrões, metaheurísticas...;;
  - Necessidade de meios computacionais para representar, analisar e interpretar estes dados → aprendizado de máquina, mineração de dados, metaheurísticas, inferência, indução...;
  - Armazenamento, análise, visualização, predição, desing → metaheurísticas, inteligência artificial...



Genética

Biologia

Biologia Molecular

Medicina

**BIOINFORMÁTICA**

Química

Bioquímica

Física

Farmácia

Ciência da Computação

Matemática

# Aspectos Históricos





- A Bioinformática é nova quando comparada com outras áreas;
- O início:
  - A história começa na década de 1940 com a invenção do moderno computador digital;
  - A história começa em 1944 com a descoberta que o DNA era a substância que carregava a informação genética;.
  - A história começa em em 1953 com a descoberta da hélice dupla, mostrou-se que a informação genética também é armazenada de forma digital.
    - Computadores: alfabeto binário (0 ou 1);
    - Dados genéticos: alfabeto quaternário (AGTC);

- Algumas pessoas consideram que a bioinformática passou a ser reconhecida como importante pelo mundo científico por volta de 1995. Ano que o primeiro genoma de uma bactéria foi publicado.
- Por que tão longa demora?

Do lado da biologia molecular o motivo é simples:

- Apesar da estrutura do DNA ter sido desvendada em 1953, a informação nela contida não podia ser “lida”.
- Foi como tivéssemos descoberto o alfabeto utilizado para escrever “o livro da vida”, mas as “palavras” desse livro estavam com letrinhas tão pequenas que não conseguíamos lê-las.
- Foi preciso esperar até fins da década de 1980 para que aparecesse uma “lente de aumento” suficientemente boa que permitisse a leitura dessas letrinhas em grande quantidade → uma máquina automática;
- Em 1995, uma única máquina dessas já conseguia ler milhares de letrinhas por dia.

Do lado da computação foi também preciso um amadurecimento:

- Computadores capazes de armazenar cada vez mais informação, de processá-la de modo cada vez mais rápido;
- Se o seqüenciamento automático do DNA tivesse amadurecido mais rapidamente, digamos com 20 anos de antecedência, não haveria computadores com poder suficiente para dar conta dos dados gerados
  - Na década de 1970 a unidade básica de armazenamento de informação era o kilobyte – 1000 bytes, aproximadamente 1000 letras. Um computador de grande porte daquela época tinha alguns kbytes de memória;
  - Com tal memória um computador desses não seria capaz de processar nem sequer o genoma de um vírus, que pode chegar a 20 kilobases, ou 20 mil letrinhas; que dirá o genoma humano, com seus 3 bilhões de letrinhas.



# Linhas de Pesquisa



## Principais Linhas de Pesquisa:

- Análise de Sequências;
- Anotação Gênica;
- Evolução;
- Análise de Expressão Gênica;
- Análise de Regulação;
- Análise de Expressão Proteica;
- Análise de Mutação em Câncer;
- Comparação Gênica;
- **Bioinformática Estrutural;**
- Modelagem de Sistemas Biológicos;
- ...

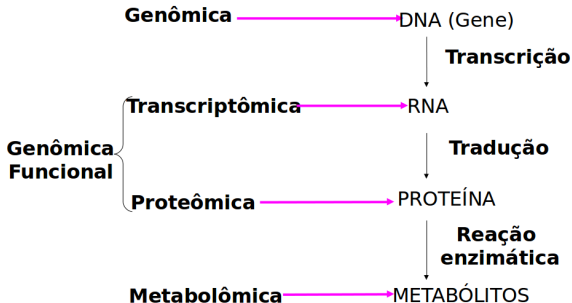
# Bioinformática Estrutural



- A Bioinformática Estrutural é uma sub-área da Bioinformática focada no estudo de estruturas biológicas” [Zhang et al., 2005];
- “A Bioinformática Estrutural está concentrada na análise e na predição da estrutura tridimensional de macromoléculas biológicas” [Clote and Backofen, 2000];
- “É uma sub-disciplina da Bioinformática que tem como foco a representação, recuperação, análise, e apresentação de informações estruturais em um nível atômico e em escalas sub-celulares.” [Altman and Dugan, 2005];
- DNA, RNA, Ligantes e Proteínas.



A nomenclatura ômica...

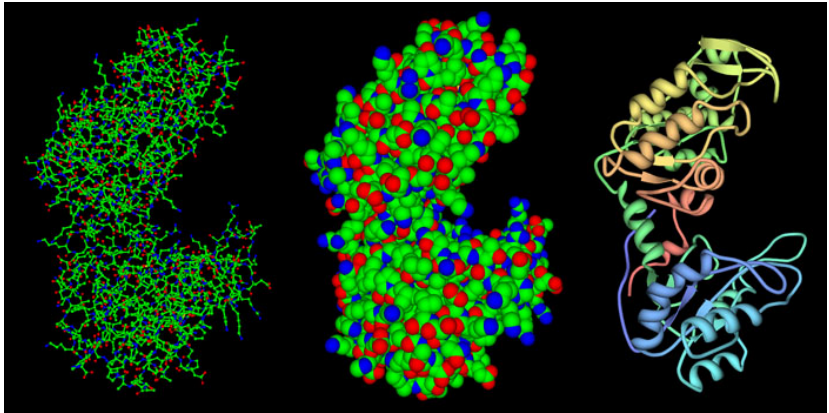


- Basicamente temos quatro objetivos básicos da Bioinformática Estrutural [Altman and Dugan, 2005]:
  - criar uma infra-estrutura para construção de modelos estruturais;
  - desenvolver a habilidade de entender princípios do design de proteínas para funcionalidades específicas;
  - aprender como desenvolver drogas de forma eficiente baseando-se na informação estrutural da molécula alvo;
  - catalizar o desenvolvimento de modelos de simulação que podem dar uma visão sobre a função da macromolécula baseando-se em simulações estruturais.

# Estrutura e Representação



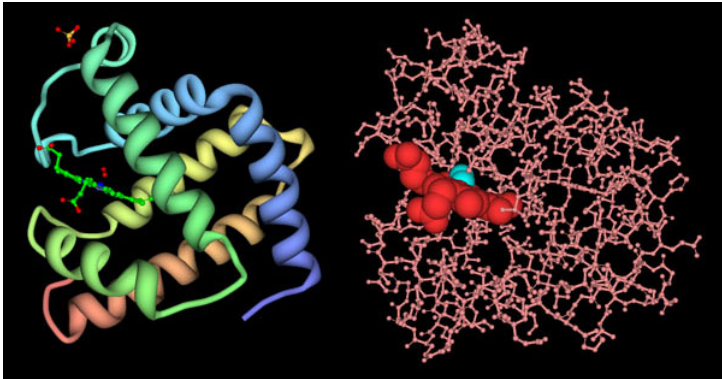
# Estrutura e Representação



- Possibilita a exploração das bases atômicas da função molecular.
- É um repositório de coordenadas atômicas e anotações detalhadas sobre os detalhes experimentais.
- Os principais desafios são:
  - Obter um conjunto de moléculas de interesse.
  - Utilizar/desenvolver modelos, algoritmos e ferramentas que possibilitem obter as propriedades de interesse, etc.

- Os arquivos PDB são arquivos texto, podendo ser abertos em qualquer editor de texto.
- Informação primária: coordenadas (x,y,z), ou seja, a lista de átomos que compõem uma proteína e suas localizações no espaço tridimensional.
- O PDB também traz um resumo sobre a proteína, informações sobre citações, detalhes dos experimentos de resolução seguido de coordenadas.
- Existem outros formatos: mmCIF, XML, etc.

# Coordenadas

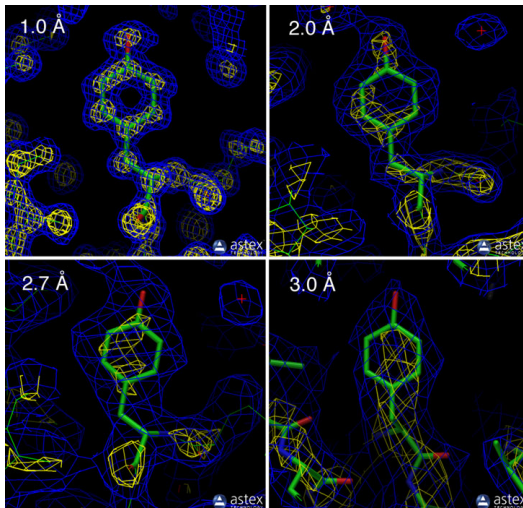


- Um arquivo PDB é sempre dividido em cadeias.
- Cada cadeia polipeptídica recebe um identificador de uma letra.
- No Caso de experimentos de RNM, ele é dividido em múltiplos modelos representando possíveis conformações para a molécula.



- A resolução é uma medida da qualidade do dado coletado do cristal contendo a proteína.
- Se todas as proteínas estiverem alinhadas de forma perfeita no cristal, obtem-se informações bastante precisas sobre a localização dos átomos.
- Se houver, por exemplo, movimentações no interior do cristal, o padrão de difração não será tão confiável.

# Resolução

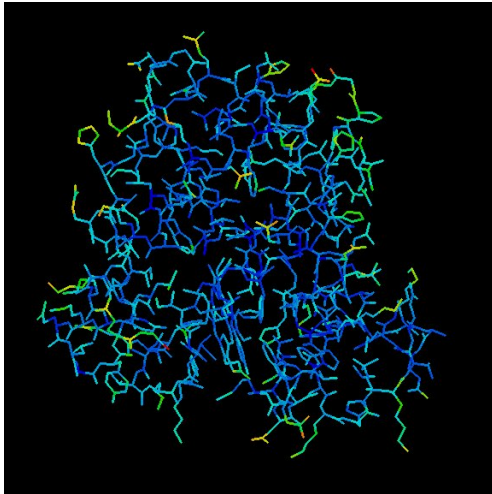


# Fator de Temperatura

- Se fossemos capazes de visualizar a nuvem eletrônica de um átomo rigidamente fixo, ela seria densa nas proximidades do núcleo e cairia com o aumento da distância.
- Quando olhamos para as densidades experimentais, provenientes de experimentos de difração de raios-X, pequenas vibrações nas posições dos átomos distorcem um pouco a nuvem que somos capazes de visualizar.
- Estas distorções são captadas proporcionalmente pelo B-value ou fator de temperatura.
  - B-value  $< 10$ , modelo bastante preciso.
  - B-value  $> 50$ , átomos que não podem ser localizados.



# Fator de Temperatura



- Cristais macromoleculares são compostos de muitas moléculas individuais empacotadas em um arranjo simétrico.
- Em alguns cristais, podem haver diferenças entre estas moléculas.
- Uma cadeia lateral na superfície pode estar em diferentes orientações nos diferentes cristais, um ligante pode se ligar em diferentes orientações em um sítio ativo, um íon pode estar presente em apenas algumas moléculas.
- A ocupância é uma medida de cada conformação presente no cristal.
- De modo geral, a ocupância é 1 para a maioria dos átomos indicando que eles estão na mesma posição em todas as moléculas. Ocupâncias variam de 0 a 1.

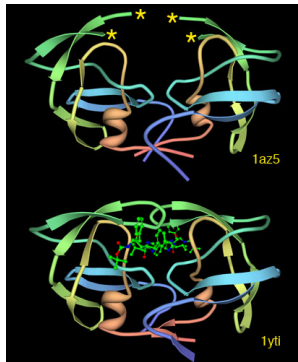
# O PDB não é completo!

- Devido a algumas limitações das técnicas de resolução, algumas partes da proteína podem estar faltando.
  - Loops.
  - Porções N-terminal e C-terminal.
  - Hidrogênios.



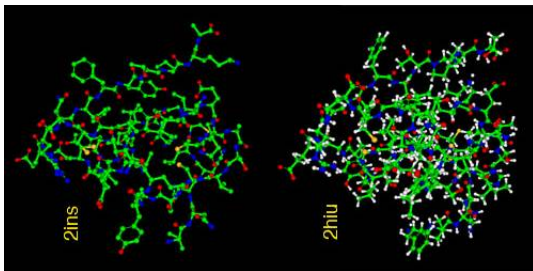
# Loops ausentes

- Como a resolução de estruturas por difração de raios-X é baseada na posição dos átomos nas diversas moléculas presentes no cristal, posições muito móveis podem não apresentar um padrão claro de difração.



# Hidrogênios

- A grande maioria dos experimentos de difração de raios-X não resolve as posições dos hidrogênios. Estas podem ser inferidas por programas posteriormente.
- Já os experimentos de RNM baseam-se em um conjunto de distâncias entre hidrogênios apresentando as coordenadas para tais átomos.





# Coordenadas atômicas

ATOM	32	N	AARG	A	-3	11.281	86.699	94.383	0.50	35.88	N
ATOM	33	N	BARG	A	-3	11.296	86.721	94.521	0.50	35.60	N
ATOM	34	CA	AARG	A	-3	12.353	85.696	94.456	0.50	36.67	C
ATOM	35	CA	BARG	A	-3	12.333	85.862	95.041	0.50	36.42	C
ATOM	36	C	AARG	A	-3	13.559	86.257	95.222	0.50	37.37	C
ATOM	37	C	BARG	A	-3	12.759	86.530	96.365	0.50	36.39	C
ATOM	38	O	AARG	A	-3	13.753	87.471	95.270	0.50	37.74	O
ATOM	39	O	BARG	A	-3	12.924	87.757	96.420	0.50	37.26	O
ATOM	40	CB	AARG	A	-3	12.774	85.306	93.039	0.50	37.25	C
ATOM	41	CB	BARG	A	-3	13.428	85.746	93.980	0.50	36.60	C
ATOM	42	CG	AARG	A	-3	11.754	84.432	92.321	0.50	38.44	C
ATOM	43	CG	BARG	A	-3	12.866	85.172	92.651	0.50	37.31	C
ATOM	44	CD	AARG	A	-3	11.698	84.678	90.815	0.50	38.51	C
ATOM	45	CD	BARG	A	-3	13.374	85.886	91.406	0.50	37.66	C
ATOM	46	NE	AARG	A	-3	12.984	84.447	90.163	0.50	39.94	N
ATOM	47	NE	BARG	A	-3	12.644	85.487	90.195	0.50	38.24	N
ATOM	48	CZ	AARG	A	-3	13.202	84.534	88.850	0.50	40.03	C
ATOM	49	CZ	BARG	A	-3	13.114	85.582	88.947	0.50	39.55	C
ATOM	50	NH1AARG	A	-3	12.218	84.840	88.007	0.50	40.76	N	
ATOM	51	NH1BARG	A	-3	14.338	86.056	88.706	0.50	40.23	N	
ATOM	52	NH2AARG	A	-3	14.421	84.308	88.373	0.50	40.45	N	

## ATOM

### Overview

The ATOM records present the atomic coordinates for standard amino acids and nucleotides. They also present the occupancy and temperature factor for each atom. Non-polymer chemical coordinates use the HETATM record type. The element symbol is always present on each ATOM record; charge is optional.

Changes in ATOM/HETATM records result from the standardization atom and residue nomenclature. This nomenclature is described in the Chemical Component Dictionary (<ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/data/monomers>).

### Record Format

COLUMNS	DATA	TYPE	FIELD	DEFINITION
1 - 6	Record name		"ATOM "	
7 - 11	Integer		serial	Atom serial number.
13 - 16	Atom		name	Atom name.
17	Character		altLoc	Alternate location indicator.
18 - 20	Residue name		resName	Residue name.
22	Character		chainID	Chain identifier.
23 - 26	Integer		resSeq	Residue sequence number.
27	AChar		iCode	Code for insertion of residues.
31 - 38	Real (8.3)		x	Orthogonal coordinates for X in Angstroms.
39 - 46	Real (8.3)		y	Orthogonal coordinates for Y in Angstroms.
47 - 54	Real (8.3)		z	Orthogonal coordinates for Z in Angstroms.
55 - 60	Real (6.2)		occupancy	Occupancy.
61 - 66	Real (6.2)		tempFactor	Temperature factor.
77 - 78	LString(2)		element	Element symbol, right-justified.
79 - 80	LString(2)		charge	Charge on the atom.

# Distância entre dois pontos - Distância Eucladiana

- Dois pontos definem um segmento de reta.
- A distância Eucladiana entre dois pontos  $p$  e  $q$  é o comprimento do segmento de reta que conecta os dois pontos ( $\overline{pq}$ );
- No sistema cartesiano, se  $p = (p_1, p_2, \dots, p_n)$  e  $q = (q_1, q_2, \dots, q_n)$  são dois pontos no  $n$ -espaço Eucladiano, então a distância entre  $p$  e  $q$ , ou  $q$  e  $p$  é dada por:

$$d(p, q) = d(q, p) = \sqrt{(q_1 - p_1)^2 + (q_2 - p_2)^2, \dots, (q_n - p_n)^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (q_i - p_i)^2}$$



# Distância entre dois pontos - Distância Eucladiana

- Em modelo de uma dimensão (1D), a distância entre dois pontos é o valor absoluto da diferença numérica entre os dois pontos. Sendo assim, se  $x$  e  $y$  são dois pontos da reta, então a distância entre os dois pontos é dada por:

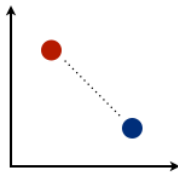
$$\sqrt{(x - y)^2} = |x - y|$$



# Distância Eucladiana: 2D e 3D

- No plano Eucladiano (2D), se  $p = (p_1, p_2)$  e  $q = (q_1, q_2)$  então a distância é dada por:

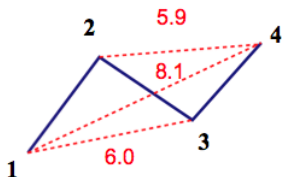
$$d(p, q) = \sqrt{(p_1 - q_1)^2 + (p_2 - q_2)^2}$$



- No espaço tridimensional (3D), a distância é calculada da seguinte forma:

$$d(p, q) = \sqrt{(p_1 - q_1)^2 + (p_2 - q_2)^2 + (p_3 - q_3)^2}$$

## Cálculo de matrizes de distância



	1	2	3	4
1	0	3.8	6.0	8.1
2	3.8	0	3.8	5.9
3	6.0	3.8	0	3.8
4	8.1	5.9	3.8	0

- Vantagens:
  - não ocorre variação com relação a translação e rotação da molécula.
  - podem ser usadas para comparar proteínas.
- Desvantagens:
  - Comparação entre matrizes de distância é um problema difícil.
  - A matriz de distância é  $O(n^2)$  para uma proteína de  $n$  res.



## Comparação de Estruturas

# Por que precisamos comparar estruturas?

- Estudar as mudanças conformacionais de uma mesma proteína com ou sem a presença de ligantes;
  - *mesma sequência de resíduos de aminoácidos.*
- Estudo do efeito de mutações em proteínas;
  - *sequências muito similares de resíduos de aminoácidos.*
- Avaliação da predição da estrutura 3D de proteínas;
  - *quão corretos estão os modelos preditos?*
  - *mesma sequência de resíduos de aminoácidos.*
- Classificação de enovelamentos (*folds*) de proteínas.



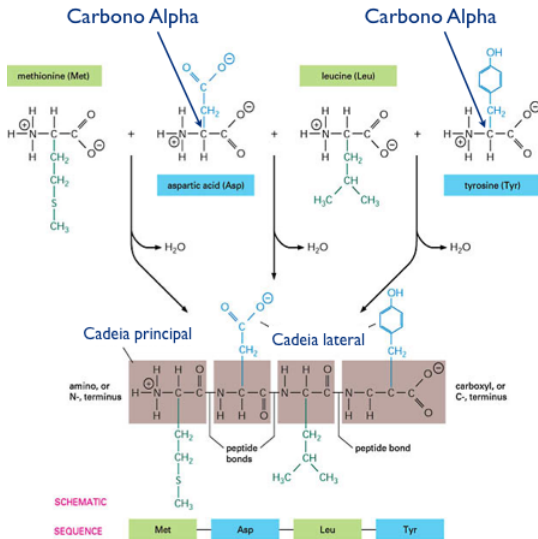


# Sequência versus Estrutura

- A estrutura primária de uma proteína é uma sequência de letras: existe uma solução ótima (programação dinâmica - PD) para o problema da sobreposição de strings, dado um esquema de ranqueamento.
- A estrutura de uma proteína é uma *forma (shape)* tridimensional: o objetivo é encontrar um algoritmo similar a PD que encontre a sobreposição ótima entre duas *formas*.



# Representação de uma cadeia polipeptídica...



- Formas para representar estruturas 3D:
  - Coordenadas cartesianas (x,y,z);
  - Ângulos diédros somente da cadeia principal (*backbone*)
  - Ângulos diédros da cadeia principal + cadeia lateral (*side-chain*);
  - ...

# Escolhendo uma função objetivo

- A sobreposição de estruturas requer a minimização de um erro no contexto de uma função objetivo. **Qual função devemos utilizar?**
  - comparação entre ângulos de torção?
  - cálculo de matrizes de distância?
  - desvio médio quadrático (*root mean square deviation*)?



# Comparação entre ângulos de torção

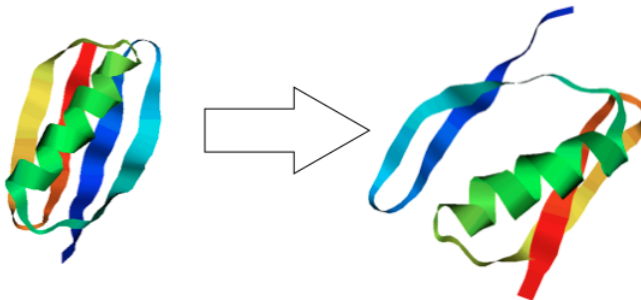
- Não varia com a rotação e translação da molécula;
- $n$  ângulos para uma proteína com  $n$  resíduos.

$$DiffAng = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Phi_i - Phi_j)^2 + (Psi_i - Psi_j)^2}{n}}$$

onde,  $i$  e  $j$  representam, respectivamente o  $i,j$ -ésimo resíduo de aminoácido da estrutura referência e da estrutura modelo.

# Comparação entre ângulos de torção

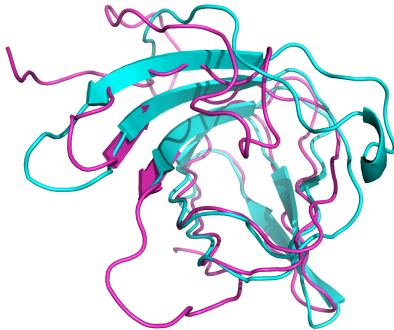
Entretanto...



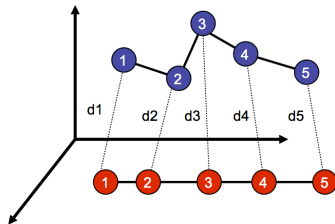
Somando-se 1  
grau a cada ângulo de torção  $\phi$  e  $\psi$ .

# Desvio Médio Quadrático - RMSD

- O parâmetro mais comum que expressa a diferença entre duas estruturas de proteínas é o RMSD (*root mean square deviation*), ou desvio médio quadrático da posição dos átomos entre duas estruturas;
- O RMSD pode ser calculado como uma medida de diferença entre a posição de todos os átomos da molécula ou apenas de um sub-conjunto de átomos;
  - átomos da cadeia principal, apenas  $C_{\alpha}$ , etc.



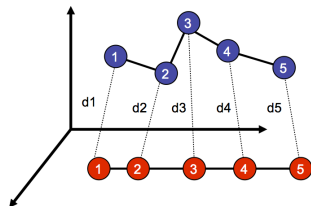
# Desvio Médio Quadrático - RMSD



$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (P_i - P_j)^2}{n}}$$



# Desvio Médio Quadrático - RMSD



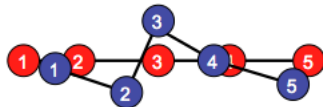
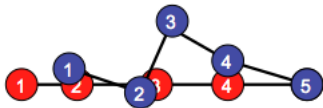
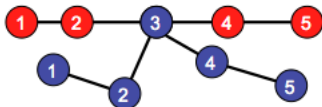
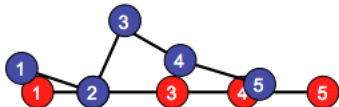
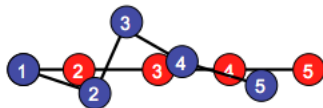
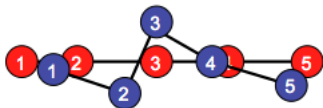
$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^5 (P_{VERMELHOi} - P_{AZULj})^2}{5}} \approx \frac{d_1 + d_2 + d_3 + d_4 + d_5}{5}$$

- As duas estruturas precisam primeiramente ser adequadamente sobrepostas para que se possa calcular um valor de RMSD válido.



- Unidade: Angstroms ( $\text{\AA}$ )
  - Estruturas idênticas:  $\text{RMSD} = 0.0$ ;
  - Estruturas similares:  $\text{RMSD}$  é pequeno ( $1.0 - 3.0\text{\AA}$ );
  - Estruturas distantes:  $\text{RMSD} > 3.0\text{\AA}$ .

# Sobreposição de estruturas: é complicada



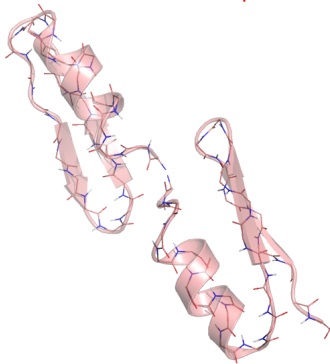
# Utilizando RMSD - encontrar a sobreposição ótima

- Nós conhecemos a correspondência entre as estruturas A e B.
- Queremos computar a transformação  $T$  de um corpo rígido que melhor alinha  $a_1$  com  $b_1$ ,  $a_2$  com  $b_2$ , ...,  $a_n$  com  $b_n$ .
- Podemos definir o erro a ser minimizado como:

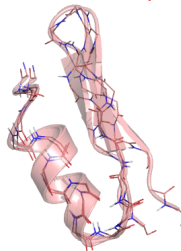
$$\varepsilon = \min \sum_{i=1}^n \|T(a_i) - b_i\|^2$$



Estruturas não sobrepostas



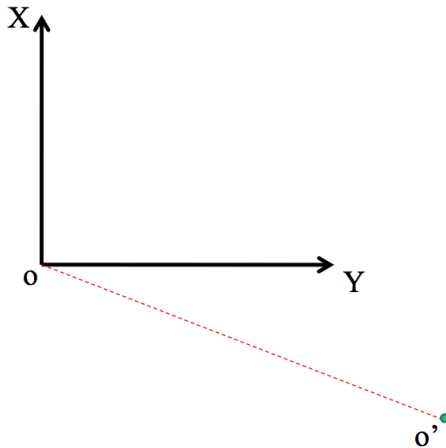
Estruturas sobrepostas



## Translação e rotação de sistemas

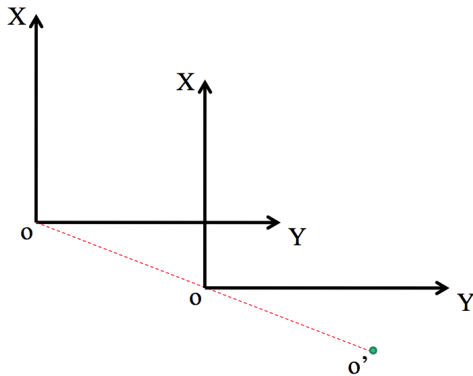
- Em termos visuais, a translação de uma entidade produz um efeito de mudança de posição de uma entidade gráfica, em relação ao seu sistema de coordenadas.
- Em termos matemáticos a translação de uma entidade gráfica é a operação de adição de constantes de translação (positivas e/ou negativas) as coordenadas dos elementos formadores da entidade.

# Operação de translação

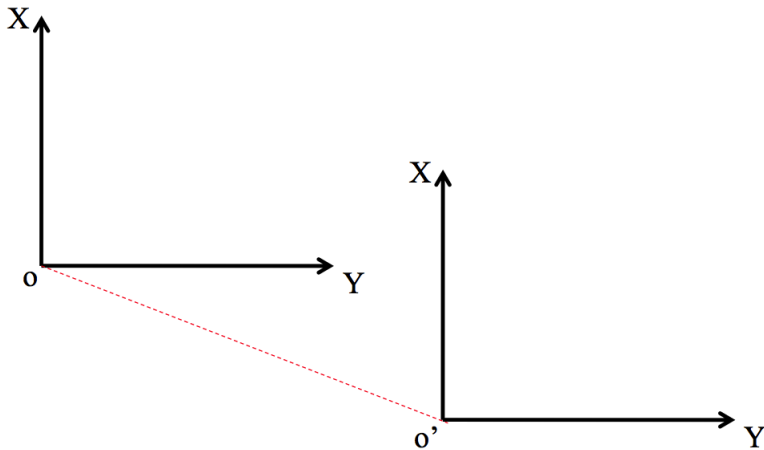




# Operação de translação



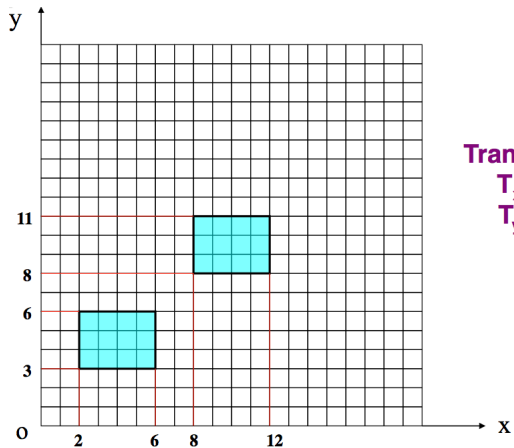
# Operação de translação



- A translação de um ponto  $P_1 (x,y)$ ,  $P_1 (x',y')$ , com constantes de translação  $T_x$  e  $T_y$ .

$$x' = x + T_x$$

$$y' = y + T_y$$



Translação

$$T_x = 6$$

$$T_y = 5$$

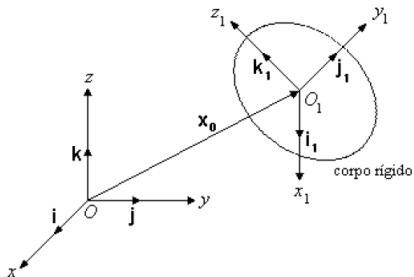
## Sistemas Referenciais:

- Um sistema referencial é utilizado para localizar um corpo no espaço 3D.
- Um referencial associado a um corpo rígido é fixo no mesmo.
- Qualquer ponto do corpo rígido possuirá **coordenadas invariantes** no seu referencial associado.
- Os referenciais são definidos por três vetores unitários ortogonais:  $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ .

Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>



## Posição e Orientação de um corpo rígido.



Fonte: <http://sites.poli.usp.br/p/eduardo.cabral>

- Na coordenada cartesiana tridimensional, os elementos são usualmente  $i$ ,  $j$  e  $k$  - vetores unitários nas direções dos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente.
- No espaço euclidiano, o produto escalar de dois vetores unitários é simplesmente o cosseno do ângulo entre eles. Isto é devido à fórmula do produto escalar, já que os comprimentos de ambos vetores é 1.

$$\hat{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

## Localização de um corpo rígido em relação a um referencial:

- A localização de um corpo rígido B em relação a um referencial qualquer [A] é definida pela localização do seu referencial associado [B] em relação a [A].
- A localização de [B] em relação a [A] é definida especificando:
  - a posição de [B] em relação a [A]
  - a orientação dos eixos de [B] em relação aos eixos de [A].

Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>



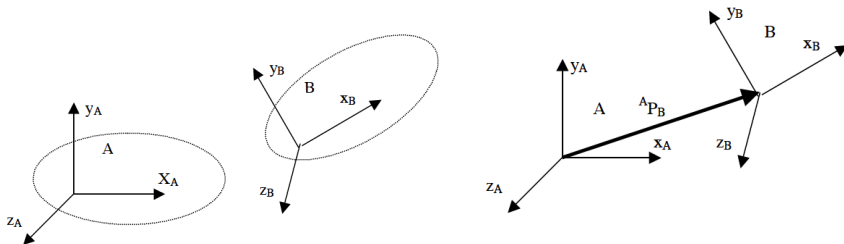
## Representação de um referencial [B] em relação a [A]

- A posição de [B] em relação a [A] é definida pelo vetor de posição  ${}^A P_B$  ligando a origem de [A] à origem de [B], expresso em coordenadas de [A]:

$${}^A P_B = [{}^A P_{Bx} \ {}^A P_{By} \ {}^A P_{Bz}]^T \quad (1)$$

Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>

# Posição e orientação de corpos rígidos no espaço 3D



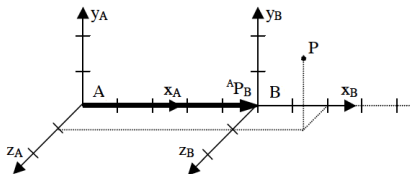
- Representação da localização de corpos rígidos por meio de referências.

- Posição de um referencial [B] em relação a um referencial [A].

Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>

## Exemplo:

- considere dois referenciais [A] e [B] com a mesma orientação, com a origem [B] localizada a 5 unidades ao longo do eixo  $x_A$ . Considere um ponto P, expresso em [B] como  ${}^B P = [2 \ 2 \ 1]^T$ . Determine a posição de [B] em relação a [A] bem como a representação do ponto P em [A].



Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>

## Exemplo:

- **Solução:** A origem de [B] está localizada no ponto (5,0,0) em coordenadas de [A], portanto a posição de [B] em relação a [A] é:

$${}^A P_B = [5 \ 0 \ 0]^T$$

Como os dois referenciais possuem a mesma orientação:

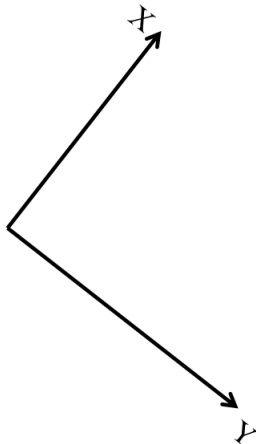
$${}^A P = {}^A P_B + {}^B P = [5 \ 0 \ 0]^T + [2 \ 2 \ 1]^T = [7 \ 2 \ 1]$$

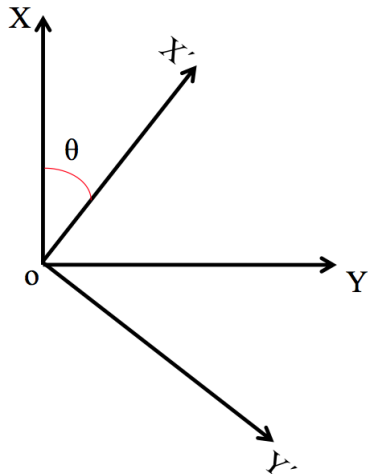
Adaptado de: <http://www.dca.ufrn.br/pablo/FTP/robotica/cap2.pdf>

## Representação da orientação de [B] em relação a [A]:

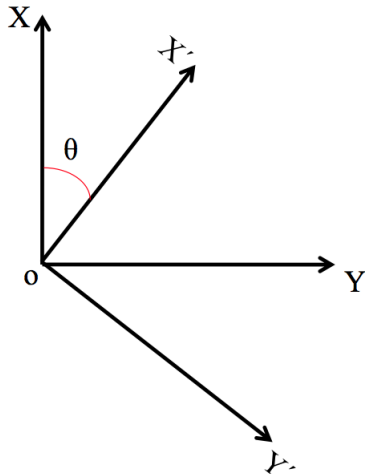
- A orientação de [B] em relação a [A] é definida pela matriz de rotação  ${}^A R_B$  de dimensão 3x3, ortogonal, cujos vetores coluna são os eixos unitários de [B] expressos em coordenadas de [A]:  ${}^A R_B = [{}^A x_B \ {}^A y_B \ {}^A z_B]$

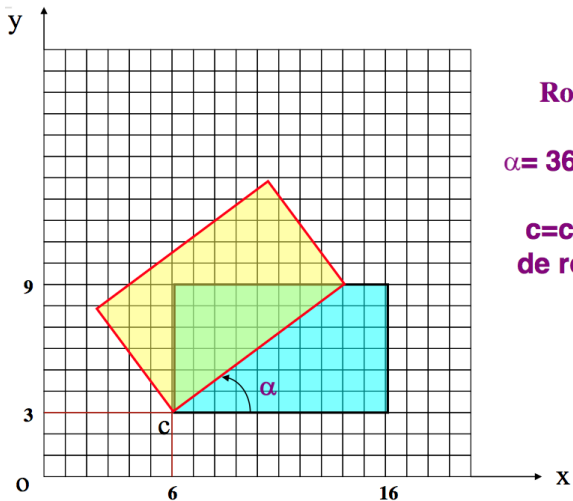
- Em termos visuais, a rotação de uma entidade produz um efeito de mudança de posição desta entidade gráfica, de modo que todos os pontos mantenham a mesma distância do centro de rotação.
- O unico parâmetro de transformação para a rotação é o ângulo (convenção positiva: sentido anti-horário).











**Rotação**

$\alpha = 36^\circ 52' 12''$

**c=centro  
de rotação**

- Rotação de um ponto  $P_1 (x,y)$ , para  $P_1 (x',y')$ , de um ângulo  $\theta$  em torno da origem, temos:

$$x' = x * \cos \theta - y * \sin \theta$$

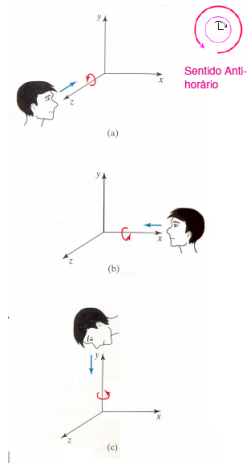
$$y' = y * \cos \theta + x * \sin \theta$$

## Matrizes de Rotação:

- A matriz de rotação representa uma transformação de coordenadas relacionando as coordenadas de um ponto  $P$  em dois sistemas com origens coincidentes em um mesmo ponto.
- A matriz de rotação fornece a orientação do sistema de coordenadas transformando (ou rotacionando) em relação ao sistema fixo.
- As colunas da matriz de rotação são constituídas pelos versores do sistema transformado descritos em relação ao sistema fixo.

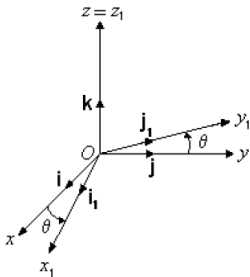


## Matrizes de Rotação



## Rotação em torno do eixo z

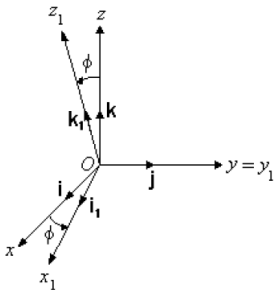
- Rotação em torno do eixo z do sistema de coordenadas  $O-xyz$ , de um ângulo  $\theta$ , resultando num novo sistema de coordenadas  $O_1-x_1y_1z_1$



$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{z,\theta} &= \begin{bmatrix} i_1 \cdot i & j_1 \cdot i & k_1 \cdot i \\ i_1 \cdot j & j_1 \cdot j & k_1 \cdot j \\ i_1 \cdot k & j_1 \cdot k & k_1 \cdot k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

## Rotação em torno do eixo $y$

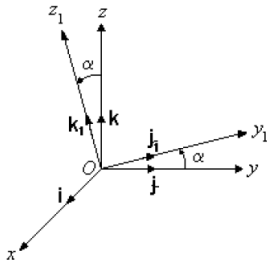
- Rotação em torno do eixo  $y$  do sistema de coordenadas  $O$ - $xyz$ , de um ângulo  $\phi$ , resultando num novo sistema de coordenadas  $O_1$ - $x_1y_1z_1$



$$\begin{aligned} R_{y,\phi} &= \begin{bmatrix} i_1 \cdot i & j_1 \cdot i & k_1 \cdot i \\ i_1 \cdot j & j_1 \cdot j & k_1 \cdot j \\ i_1 \cdot k & j_1 \cdot k & k_1 \cdot k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix} \end{aligned}$$

## Rotação em torno do eixo $x$

- Rotação em torno do eixo  $x$  do sistema de coordenadas  $O$ - $xyz$ , de um ângulo  $\alpha$ , resultando num novo sistema de coordenadas  $O_1$ - $x_1y_1z_1$



$$\begin{aligned} R_{x,\alpha} &= \begin{bmatrix} i_1 \cdot i & j_1 \cdot i & k_1 \cdot i \\ i_1 \cdot j & j_1 \cdot j & k_1 \cdot j \\ i_1 \cdot k & j_1 \cdot k & k_1 \cdot k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \end{aligned}$$



## Exemplo:

- Considere dois referenciais coincidentes, [A] e [B]. Suponha que [B] gira um ângulo  $\theta$  em torno do eixo  ${}^A z_B$ . Considere um ponto P expresso em coordenadas de [B],  ${}^B P$ . Encontre a representação do ponto P em coordenadas de [A],  ${}^A P$ .

$$\begin{bmatrix} {}^A p_x \\ {}^A p_y \\ {}^A p_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} {}^B p_x \\ {}^B p_y \\ {}^B p_z \end{bmatrix}$$

