

**APLICACIÓN DE LA TRANSFORMADA WAVELET
CONTINUA EN EL ESTUDIO DE LAS SECUENCIAS DE
AMINOÁCIDOS EN UNA PROTEÍNA ARTIFICIAL**

DAVID LEANDRO PALOMINO SALCEDO

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA
SANTIAGO DE CALI
2011**

**APLICACIÓN DE LA TRANSFORMADA WAVELET
CONTINUA EN EL ESTUDIO DE LAS SECUENCIAS DE
AMINOÁCIDOS EN UNA PROTEÍNA ARTIFICIAL**

DAVID LEANDRO PALOMINO SALCEDO

dalepasal@gmail.com

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar por
el título de Físico

Director:

ERNESTO COMBARIZA

M. Sc en Física

Profesor Titular

Departamento de Física

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
SANTIAGO DE CALI**

2011

UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA

DAVID LEANDRO PALOMINO, 1984

**APLICACIÓN DE LA TRANSFORMADA WAVELET
CONTINUA EN EL ESTUDIO DE LAS SECUENCIAS DE
AMINOÁCIDOS EN UNA PROTEÍNA ARTIFICIAL**

Tema y palabras claves

- Wavelet Continua
- Análisis Wavelet
- Conjunto de Cantor
- Proteína Artificial
- Bioinformática



UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS
ACTA DE EVALUACION DE TRABAJO DE GRADO
PROGRAMA ACADEMICO DE FISICA.

JURADO CONFORMADO POR:

DR. ERNESTO COMBARIZA
DR. ALBERTO BOHÓRQUEZ

El día 8 de Septiembre de 2011 a las 3:00 P.M. se llevó a cabo la ENTREGA DE LA EVALUACION () SUSTENTACION (X) del INFORME FINAL DEL TRABAJO DE GRADO titulado "**APLICACIÓN DE LA TRANSFORMADA WAVELET CONTINUA EN EL ESTUDIO DE LAS SECUENCIAS DE AMINOÁCIDOS EN UNA PROTEÍNA ARTIFICIAL**". Presentado por el estudiante DAVID LEANDRO PALOMINO SALCEDO código 0940596, bajo la dirección del Profesor ERNESTO COMBARIZA.

RESULTADO DE LA EVALUACION:

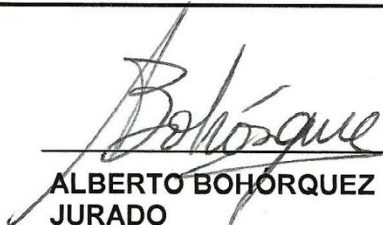
(X) APROBADO.
() REPROBADO.

Se recomienda modificaciones: SI () NO (X).

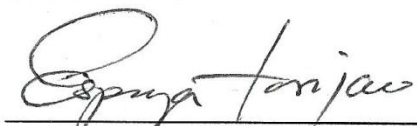
OBSERVACIONES:

(P) 

ERNESTO COMBARIZA
DIRECTOR



ALBERTO BOHÓRQUEZ
JURADO



ESPERANZA TORIJANO
DIRECTORA
PROGRAMA ACADEMICO DE FISICA

*A MI FAMILIA POR SU
CARIÑO Y SUS
ENSEÑANZAS.*

AGRADECIMIENTOS

Quiero aprovechar esta ocasión para agradecer a mis padres Ramiro y Fabiola por haberme dado todo lo que he necesitado a pesar de las limitaciones que tengamos. A mis hermanos Andrea, Carlos y Jennifer porque a pesar que a veces nos disgustemos siempre hemos estado juntos para ayudarnos. A toda mi familia en general porque siempre están atentos de mis logros para celebrarlos y de mis tropiezos para superarlos.

Al profesor Hernesto Combariza director de este trabajo de grado por su ayuda en todos los pasos para terminarlo y por su paciencia con la que no me dejó desfallecer. Al evaluador de este trabajo por tomarse el tiempo para revisarlo y hacer las correcciones necesarias para su aprobación. A los demás profesores del departamento de Física por sus maravillosos conocimientos y dedicación.

Por último a mis compañeros de pregrado y demás amigos Julieth, William, Víctor, Mulato, Ricardo, Faustino, Edison, Lucero, Yenni, Mónica, Nathalia y a quienes con su compañía contribuyeron a mi preparación.

TABLA DE CONTENIDO

Resumen	1
Abstract	2
1. INTRODUCCIÓN	3
1.1. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN	6
1.1.1. OBJETIVO GENERAL	6
1.1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	6
2. MARCO TEÓRICO	7
2.1. ANÁLISIS WAVELET	8
2.1.1. EL CAMINO DE FOURIER A WAVELET	8
2.1.1.1. SERIES DE FOURIER	9
2.1.1.2. LA TRANSFORMADA DE FOURIER	9
2.1.1.3. LA TRANSFORMADA RÁPIDA DE FOURIER	11
2.1.1.4. LA TRANSFORMADA DE FOURIER CON VENTANA	12
2.1.2. PROPIEDADES DE LA VENTANA WAVELET	13
2.1.2.1. WAVELET MADRE	14
2.1.2.2. WAVELET HAAR	14
2.1.2.3. WAVELETS GAUSSIANNAS	15
2.1.2.4. WAVELETS DAUBECHIES	16
2.1.3. TRANSFORMADA WAVELET CONTINUA	17
2.1.4. ANÁLISIS DE MULTIRRESOLUCIÓN	17
2.2. GENERALIDADES DE LAS PROTEÍNAS	18
2.2.1. AMINOÁCIDOS	18
2.2.1.1. AMINOÁCIDOS CON CADENAS LATERALES ALIFÁTICAS	19

2.2.1.2.	AMINOÁCIDOS CON CADENAS LATERALES QUE CONTIENEN HIDROXIOLO O AZUFRE	20
2.2.1.3.	AMINOÁCIDOS AROMÁTICOS	20
2.2.1.4.	AMINOÁCIDOS BÁSICOS	20
2.2.1.5.	AMINOÁCIDOS ÁCIDOS Y SUS AMIDAS	21
2.2.2.	PÉPTIDOS	21
2.2.3.	PROTEÍNAS	23
2.3.	BIOINFORMÁTICA	23
2.3.1.	CONEXÓN BIOLOGÍA – COMPUTACIÓN – FÍSICA	24
2.3.2.	ESCUELAS DE LA BIOINFORMÁTICA	25
2.3.2.1.	ESCUELA FORMAL	25
2.3.2.2.	ESCUELA ESTRUCTURAL	26
2.3.2.3.	ESCUELA INSTRUMENTAL	27
2.3.3.	APLICACIONES DE LAS WAVELET EN LA BIOINFORMÁTICA	28
2.4.	FRACTALES	28
2.4.1.	¿QUÉ ES UN FRACTAL?	29
2.4.1.1.	POLVO DE CANTOR	29
2.4.1.2.	CURVA DE VON KOCH	30
2.4.1.3.	TRIANGULO DE SIERPINSKI	31
2.4.2.	DIMENSIÓN FRACTAL	31
2.4.3.	MULTIFRACTAL	34
3.	PROCEDIMIENTO ANALÍTICO	37
3.1.	FABRICACIÓN DE LA PROTEÍNA ARTIFICIAL	38
3.1.1.	ESCALERA DEL DIABLO	38
3.1.2.	ITERACIONES PARA LA FABRICACIÓN DE LA ESCALERA	39

3.2.	TRANSFORMACIÓN WAVELET DE LA PROTEÍNA ARTIFICIAL	41
3.2.1.	TRANSFORMADA CONTINUA (1RA DERIVADA DE LA GAUSSIANA)	42
3.2.2.	TRANSFORMADA DISCRETA (HAAR)	43
3.3.	CALCULO DE LA DIMENSIÓN MULTIFRACTAL	43
3.3.1.	POSIBLE PROCEDIMIENTO ALTERNO	44
4.	RESULTADOS Y ANÁLISIS	45
4.1.	DE LAS TRANSFORMADAS WAVELET	46
4.2.	DE LA DIMENSIÓN MULTIFRACTAL	59
4.3.	ANÁLISIS FINAL	62
5.	CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS	64
5.1	CONCLUSIONES	65
5.2	PERSPECTIVAS	66
6.	BIBLIOGRAFÍA GENERAL	67
6.1.	BIBLIOGRAFÍA UTILIZADA	68
6.2.	OTRA BIBLIOGRAFÍA REVISADA	69

RESUMEN

A partir de la simulación de una secuencia de aminoácidos utilizando la función escalera del diablo en su cuarta iteración, obtenida de la integración del polvo de cantor, se realizó la transformada wavelet continua en un principio y luego discreta hasta la resolución cinco. Con estos resultados se hizo análisis de multifractalidad, obteniendo que posee factores bioinformáticos.

ABSTRACT

From the simulation of an amino acid sequence by using the devil's staircase in its fourth iteration, obtained from the integration of the Cantor dust, we performed continuous wavelet transform at first and then to discrete wavelet with resolution five. These results did multifractal analysis, concluding that factors has bioinformaticians.

1. INTRODUCCIÓN

La comparación de proteínas representa uno de los más importantes y fructíferos métodos para el análisis de secuencias proteicas [PEVol15]. En este se buscan similitudes o diferencias entre dos o más secuencias de proteínas. Además este estudio comparativo tiene la propiedad de asignar nuevas relaciones entre la estructura y la función de las proteínas.

Las Proteínas son biomoléculas [0] que desempeñan un papel fundamental en los seres vivos. Prácticamente todos los procesos biológicos dependen de la presencia o actividad de estas moléculas. Son muy versátiles y diversas, entre la gran cantidad de funciones que realizan se destacan las siguientes:

- Estructural (colágeno y queratina)
- Reguladora (insulina y hormona del crecimiento),
- Transportadora (hemoglobina),
- Defensiva (anticuerpos),
- Enzimática (sacarasa y pepsina),
- Contráctil (actina y miosina).

El análisis Wavelet se ha venido utilizando desde la década de 1980, que es cuando surgió una teoría matemática coherente de estas, para resolver problemas en los que el análisis de Fourier no resultaba muy eficiente [1]. Una de las principales aplicación de las wavelets ha sido la compresión de archivos digitales (imágenes y audio) [2].

En 1995, las wavelets se convirtieron en el eje central del nuevo estándar de imágenes digitales JPEG-2000 y del método WSQ (del inglés Wavelet Scalar Quantization, cuantización escalar de wavelets) que utiliza el FBI para comprimir su base de datos de huellas dactilares. En 1996 se crea el formato DjVu que utiliza el análisis Wavelet para la compresión de imágenes escaneadas (principalmente libros) y en 2003 se introduce el códec Dirac que al igual que los anteriores utiliza el análisis Wavelet pero esta vez para comprimir y descomprimir video.

En la actualidad se utilizan mucho las Wavelets en campos donde se analizan patrones de señales no periódicas. Las secuencias de aminoácidos de una proteína se podrían representar como una señal que claramente no sería periódica. Es por esto que me interesaría determinar qué características bioinformáticas podría arrojar el análisis Wavelet en una secuencia de aminoácidos. Debido a la gran complejidad de la secuencia de una proteína real he decidido trabajar con una representación a partir del polvo de Cantor.

Con este trabajo deseo hacer un aporte a la investigación sobre cómo la secuencia de aminoácidos determina las funciones de las proteínas que ha sido un tema bastante estudiado desde la mitad del siglo pasado al igual que el de las Wavelets por lo que podríamos decir que son campos modernos y con varios temas por debatir.

En la Facultad de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad del Valle se han realizado cinco trabajos de grado aplicando el análisis Wavelet al procesamiento de señales. En la primera (1999) se utilizó señales provenientes del cerebro (Electroencefalogramas); en la segunda (2001) electrocardiogramas, en la tercera (2005) patrones de voz de sujetos con autismo, en la cuarta (2008) imágenes (señales bidimensionales) y en la quinta (2008) a señales musicales.

También vale la pena mencionar el trabajo que ha desarrollado la Profesora del Departamento de Matemáticas Doris Hinestroza en la fundamentación matemática de las Wavelets.

1.1. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

1.1.1. OBJETIVO GENERAL

Utilizar el análisis Wavelet como herramienta para hallar patrones bioinformáticos en una secuencia de aminoácidos de una proteína artificial.

1.1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Objetivo Específico 1

Desarrollar un procedimiento analítico que permita transformar por medio de una wavelet a una proteína artificial de tipo cantoriano.

Objetivo Específico 2

Aplicar la Transformada Wavelet a una proteína artificial (Polvo de Cantor) para calcular índices bioinformáticas.

Objetivo Específico 3

Utilizar los resultados para tratar de entender la multifractalidad con una forma analíticamente calculable.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. ANÁLISIS WAVELET

El análisis Wavelet está siendo muy utilizado en la actualidad como una evolución del análisis de Fourier que presenta problemas debido al principio de incertidumbre de Heisenberg que no permite conocer sino un dato de las señales al tiempo, frecuencia o tiempo. Problema que no afecta a las wavelets que se trasladan en el eje de tiempo dilatándose y contrayéndose ofreciéndonos la información en un espectro que llamamos análisis de multirresolución. En esta sesión se explicará un poco en qué consiste.

2.1.1. EL CAMINO DE FOURIER A WAVELET

Muchos fenómenos físicos se pueden describir con señales dependientes del tiempo. El análisis de estas señales nos puede ayudar a codificarlas, comprimirlas, limpiarlas, reconstruirlas, describirlas, simplificarlas, modelarlas, distinguirlas o localizarlas.

La transformación de Fourier hasta antes de la década de 1980 fue la técnica más utilizada para analizar señales, en un principio sólo lo lograba con las periódicas pero varios matemáticos lograron hacer algunos algoritmos para trabajar con señales no periódicas, sin embargo realizarlos se iba haciendo cada vez más complejo. Después de esta época aparece la transformada Wavelet que elimina la complejidad del análisis al poderse utilizar fácilmente en señales no periódicas. En esta sección se va a hacer un recorrido histórico partiendo de las series de Fourier hasta llegar al moderno análisis Wavelet, pasando por las diferentes transformadas de Fourier.

2.1.1.1. SERIES DE FOURIER

El primer avance en esta materia lo hizo el matemático francés Jean Baptiste Joseph Fourier en 1807 cuando demostró que cualquier señal periódica puede ser descompuesta en una serie de armónicos con forma sinusoidal [2], la ecuación 1 se conoce como series de Fourier:

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \text{sen}(nt) + b_n \cos(nt)] \quad (1)$$

Para que esta serie trigonométrica sea la representación de la función real debe cumplir con las siguientes condiciones (o de Dirichlet)[3]:

- Que tenga un número finito de discontinuidades en el periodo T, en caso de ser discontinua.
- El valor medio en el periodo T, sea finito.
- Que tenga un número finito de máximos positivos y negativos.

Es un buen primer acercamiento pero poco útil en la realidad donde las ondas rara vez cumplen con todas estas condiciones. Debido a esto para realizar un cálculo se debe hacer aproximaciones, perdiendo información.

2.1.1.2. TRANSFORMADA DE FOURIER

La transformada de Fourier es un operador que transforma el dominio de la función a estudiar, por ejemplo, de tiempo a frecuencias [4]. La ecuación 2 muestra la forma de la transformada continua de Fourier:

$$\hat{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (2)$$

La transformada continua de Fourier tiene también su operador inverso que devuelve el dominio de la función a los valores originales, la transformada inversa continua de Fourier se muestra en la ecuación 3:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (3)$$

En la figura 3 podemos ver un ejemplo de la transformada de Fourier:



Figura 3: Diagrama esquemático de cómo actúa la transformada de Fourier en una señal (Extraído de Mathworks, 1997)

La transformada de Fourier también tiene su versión discreta, conocida como transformada discreta de Fourier que se define en la ecuación 4 con su respectiva inversa (ecuación 5) [2]:

$$\hat{f}[k] = \sum_{n=0}^{N-1} f[n] e^{-\frac{i2\pi kn}{N}} \quad (4)$$

$$f[n] = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{f}[k] e^{\frac{i2\pi kn}{N}} \quad (5)$$

2.1.1.3. TRANSFORMADA RÁPIDA DE FOURIER

Para hallar una transformada discreta de Fourier se hace necesario realizar muchos cálculos numéricos por lo que termina siendo bastante compleja. Una gran ventaja que presenta esta transformada discreta es que se puede definir el método de cálculo para hacerla más rápida y eficiente [1], como el desarrollado en 1946 por Cooley y Tuckey, que se conoce con el nombre de Transformada rápida de Fourier. Dada una sucesión de N valores $\{f_k\}_{k=0}^{N-1}$, se debe calcular la sucesión $\{\hat{f}_n\}_{n=0}^{N-1}$ de N números complejos de acuerdo a la ecuación 6:

$$\hat{f}_n = \sum_{k=0}^{N-1} f_k W_N^{nk}, \text{ para } 0 \leq k \leq N-1 \quad (6)$$

De acuerdo a esto el calculo de la transformada discreta de Fourier requiere N multiplicaciones complejas, osea 4N multiplicaciones reales, y de N-1 sumas complejas osea 4N-2 sumas reales, por cada valor de k. De tal forma que para calcular N valores se necesita N^2 multiplicaciones complejas y $N(N-1)$ sumas complejas en total lo que para valores grandes de N haría bastante largo su calculo. No obstante la transformada rápida de Fourier nos hace posible realizar estos cálculos en tiempo real aprovechándonos de las propiedades de simetría y periodicidad del conjunto $W_N^k = e^{-i2\pi k/N}$, $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$

1. Propiedad de simetría : $W_N^{k+N/2} = -W_N^k, W_N^2 = W_{N/2}$
2. Propiedad de periodicidad : $W_N^{k+N} = W_N^k$

Existen varios métodos eficientes para disminuir el tiempo y la frecuencia de la transformada discreta de Fourier, los cuales no ampliaré en esta sección.

2.1.1.4. TRANSFORMADA DE FOURIER CON VENTANA

El gran problema que presenta la transformada de Fourier es que sólo nos arroja información relevante si la señal a estudiar es bastante periódica, pero en la realidad hay pocas señales de este tipo. Una forma de contrarrestar este problema es utilizar una función ventana con la cual se puede hacer el análisis por sectores donde las frecuencias pueden ser más constantes. De esta idea nace la transformada de Fourier con ventana (TFV) introducida en 1946 por Dennis Gabor [1], se define como se ve en la ecuación 7 [2]:

$$Sf(\mu, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t - \mu)e^{-i\xi t} dt \quad (7)$$

Donde $g(t - \mu)$ es la función ventana y μ es el valor de desplazamiento en el eje de tiempo. Un esquema de la TFV se puede ver en la figura 4:



Figura 4: Diagrama esquemático de cómo actúa la TFV en una señal (Extraído de Mathworks,1997)

Sin embargo la TFV también presenta varios problemas, uno de los cuales tiene que ver con el tamaño de la ventana en tiempo y frecuencia [1]. Para señales estacionarios no es un método muy adecuado.

2.1.2. PROPIEDADES DE LA VENTANA WAVELET

En la primera parte de la década de los 80's Grossman y Morlet introducen el término de Wavelet (Ondícula en español, también ondito u ondeleta) [1] como unidades atómicas en las que se puede descomponer una señal sin necesidad de las ventanas de Gabor. El análisis wavelet una técnica que utiliza ventanas de tamaño variable, es un paso lógico de la TFV. Un esquema que explica el concepto se puede ver en la figura 5:



Figura 5: Diagrama esquemático de cómo actúa la CWT en una señal (Extraído de Mathworks, 1997)

Las Wavelets son una especie de ventanas especiales que deben cumplir las siguientes condiciones [2]:

1. Su promedio debe ser cero, o sea que la integral desde menos infinito a infinito debe ser cero, ecuación 8:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) dt = 0 \quad (8)$$

2. Debe cumplir con la condición de admisibilidad ecuación 9, donde C_{ψ} es un valor constante:

$$C_{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\psi}(\omega)|^2}{\omega} d\omega < \infty \quad (9)$$

3. Deben tener soporte comparto, o sea, estar definida en un conjunto finito. En caso de no cumplirse esta propiedad se puede cortar los extremos de la función en puntos fijo en los que se sigan cumpliendo las dos propiedades anteriores.

Donde, si se cumple la segunda condición automáticamente se cumple la primera. Otra propiedad de la wavelets es que al derivar una wavelet la nueva función es también una wavelet.

2.1.2.1. WAVELET MADRE

La wavelet sin trasladar ni dilatar es conocida como wavelet madre [1], a partir de esta creamos las demás wavelet hijas que tienen la forma de la ecuación 10:

$$\psi_{u,s}(t) = \frac{1}{\sqrt{s}} \psi\left(\frac{t-u}{s}\right) \quad (10)$$

Donde s tiene que ver con la dilatación de la wavelet y u con el desplazamiento en el eje de tiempo.

2.1.2.2. WAVELET HAAR

Llamada así en honor al matemático húngaro Alfred Haar y conocida también como función escala, se puede construir a partir de una función constante a trozos [2], ecuación 11:

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ -1 & \frac{1}{2} \leq x < 1 \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (11)$$

En la figura 6 se puede apreciar una representación gráfica de esta función:

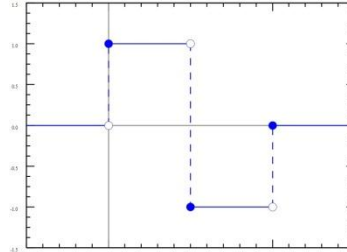


Figura 6. Representación en el plano de la wavelet Haar.

Fácilmente podemos ver que $\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t)dt = 0$, además de que tiene soporte compacto en $[0,1]$ y cumple la condición de admisibilidad pues [1], al hallar la transformada de Fourier (ecuación 12):

$$\hat{\psi}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{(\text{sen } \frac{\omega}{4})^2}{\omega/4} e^{-i(\omega-\pi)/2} \quad (12)$$

Entonces al reemplazarla en la ecuación 9, obtenemos el resultado de la ecuación 13:

$$C_{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\psi}(\omega)|^2}{\omega} d\omega = \frac{8}{\pi\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\text{sen } \frac{\omega}{4}|^4}{|\omega|^3} < \infty \quad (13)$$

2.1.2.3. WAVELETS GAUSSIANNAS

El término “wavelet gaussianas” se refiere a las wavelets creadas a partir de las derivadas de la función gaussiana, ecuación 14:

$$\varphi(x) = e^{\frac{-x^2}{2}} \quad (14)$$

Esta primera función que por sí sola no es una wavelet se conoce como “wavelet padre”. Una wavelet famosa es la segunda derivada de la gaussiana, conocida como sombrero mejicano [1], que tiene la forma (ecuación 15):

$$\psi(x) = (1 - x^2)e^{\frac{-x^2}{2}} \quad (15)$$

Esta sería una wavelet madre, pero al dilatarla y trasladarla en el eje de tiempo se convierte en una wavelet que podemos usar para el análisis wavelet, ecuación 16:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left(1 - \left(\frac{x-b}{a} \right)^2 \right) e^{\frac{-(x-b)^2}{2a^2}} \quad (16)$$

2.1.2.4. WAVELETS DAUBECHIES

Un importante grupo de wavelets son la “Daubechies” propuestas por Ingrid Daubechies en la década de los 80’s. Cada una tiene un orden N que depende de sus momentos de desvanecimiento, que indican la suavidad de la wavelet [5]. N es un número entero positivo que representa la cantidad de filtros de esa wavelet, por ejemplo la db1 (Daubechies de orden 1) es la wavelet Haar. Existen muchas wavelets de acuerdo a su coeficiente que se muestran en la figura 7, no se va a ahondar más en su explicación.

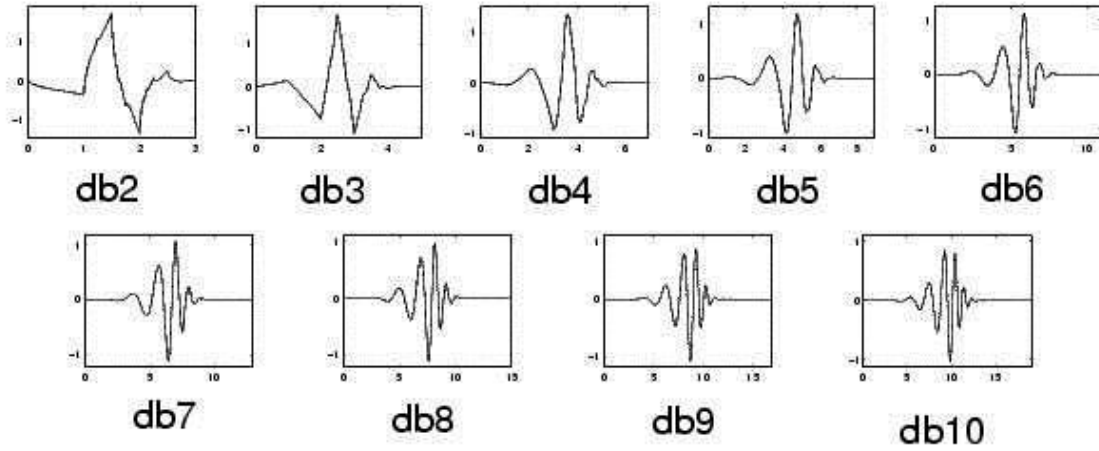


Figura 7. Representación de las wavelets Doubechies desde la bd1 hasta la db 10.
Tomada de <http://ceres.ugr.es/~alumnos/sigpro/cap4.html>

2.1.3. TRANSFORMADA WAVELET CONTINUA

Para realizar la transformación de una función usando la transformada wavelet continua se utiliza la ecuación 17:

$$Wf(u, s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \frac{1}{\sqrt{s}} \psi^* \left(\frac{t-u}{s} \right) dt = f(t) * \overline{\psi_s}(\mu) \quad (17)$$

La transformación Wavelet continua también tiene una inversa que nos permite volver a obtener la función origina, se puede ver en la ecuación 18:

$$f(t) = \frac{1}{C_\psi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty Wf(u, s) \frac{1}{\sqrt{s}} \psi \left(\frac{t-u}{s} \right) du \frac{ds}{s^2} \quad (18)$$

2.1.4 ANÁLISIS DE MULTIRRESOLUCIÓN

El análisis de multirresolución se refiere a la sucesión de subespacios $\{V_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$ de $L^2(\mathbb{R})$, tales que [1]:

1. $\dots \subset V_{-1} \subset V_0 \subset V_1 \subset V_2 \dots$
2. $v(x) \in V_j \Leftrightarrow v(2x) \in V_{j+1}$
3. $v(x) \in V_0 \Leftrightarrow v(x+1) \in V_0$
4. $\bigcup_{j=-\infty}^{\infty} V_j$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$ y $\bigcap_{j=-\infty}^{\infty} V_j = \{0\}$
5. $v(x) \in V_0 \Leftrightarrow v(x-k) \in V_0$
6. Existe una función de escala $\phi \in V_0$ tal que $\{\phi(x-k) : k \in \mathbb{Z}\}$ es una base ortonormal de V_0 .

El análisis de multirresolución permite estudiar una señal en diferentes resoluciones y extraer características propias de cada resolución [6] o una global de todas juntas. También se puede utilizar para encontrar características de fractalidad o multifractalidad.

2.2. GENERALIDADES DE LAS PROTEÍNAS

Todas las Proteínas son polímeros y los monómeros que se combinan para formarlas son los α -aminoácidos [7]. Las proteínas realizan una gran variedad de funciones entre las que están transportar y almacenar moléculas pequeñas, constituir la organización estructural de las células y los tejidos o más específicas cómo coagular la sangre. Cada célula de cada organismo posee millones de proteínas que le ayudan a cumplir con la diversidad de funciones necesarias para sobrevivir. Cada proteína tiene su propia estructura funcional lógica y determinadas características comunes con las demás proteínas. Para comprender las proteínas se debe primero

hacer un recorrido por las unidades que las conforman llamadas aminoácidos y las uniones de estas llamadas péptidos.

2.2.1. AMINOÁCIDOS

En los α -aminoácidos el Grupo Amino está unido al carbono central α y contiguo al carbono se encuentra el Grupo Carboxilo; de aquí el nombre *aminoácido*. Al carbono α también está unido un átomo de *hidrogeno* y una cadena lateral *R* que es diferente para cada aminoácido [8]. Cómo se esquematiza en la figura 8:

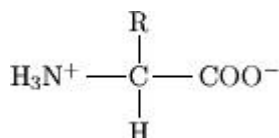


Figura 8. Esquema aminoácido.

La figura 9 lista los 20 α aminoácidos de acuerdo a sus características:

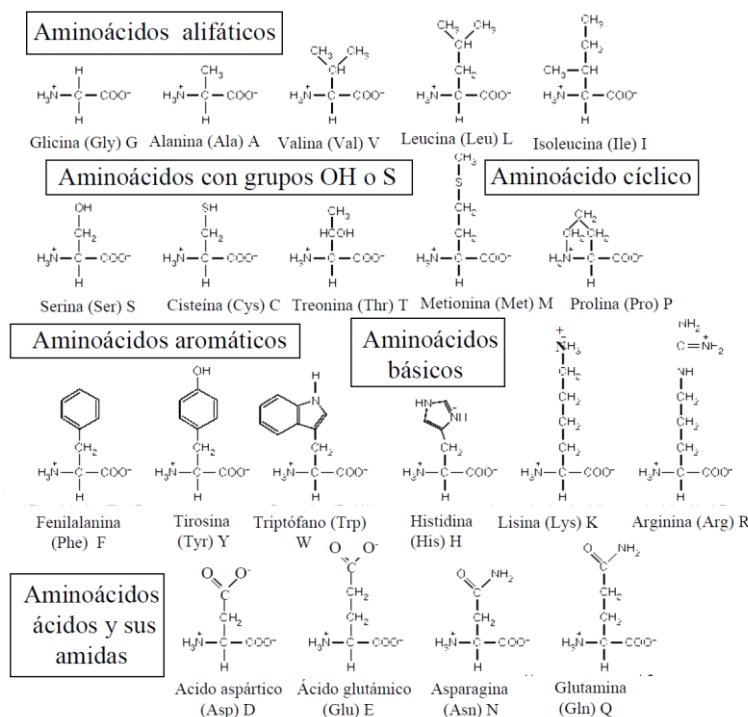


Figura 8. 20 aminoácidos organizados de acuerdo a sus características. Tomado de *Estructura de los aminoácidos*

Los enlaces alrededor del carbono α son tetraédricos como cabe esperar. Cuando un carbono está conectado a cuatro cadenas formando una molécula asimétrica se dice que es quiral, también se le puede llamar ‘carbono asimétrico’ simplemente [7]. Las moléculas con un carbono asimétrico tienen dos estereoisómeros distinguibles, son imágenes especulares que no se pueden superponer una sobre otra o enantiómeros donde se tienen dos casos L y D. Todos los aminoácidos, exceptuando la glicina, pueden existir en la forma L y D pues el α carbono es quiral para todos los casos. “Todos los aminoácidos que incorporan los organismos a las proteínas son de la forma L” [7] contrario al ADN o ARN que prefieren la forma D.

Los α -aminoácidos son 20 en total, con 20 cadenas laterales diferentes, de los cuales que se agrupan de la siguiente manera 5 son aminoácidos con cadenas laterales alifáticas, 4 tienen cadenas laterales que contienen hidroxilo o azufre, 1 es cíclico, 3 son básicos, 3 son aromáticos y el último grupo que contiene 2 aminoácidos que tienen sus respectivas 2 amidas [7] dibujados en la figura 8. Dentro de estas características se incluyen caracteres como hidrofobia o hidrofilia, polaridad y presencia o ausencia de grupos ionizables. Existen muchas formas de clasificar los aminoácidos pero ninguna es completamente satisfactoria. La figura 8 muestra un orden desde la más sencilla hasta la más compleja. A continuación un breve resumen de los 6 grupos.

2.2.1.1. AMINOÁCIDOS CON CADENAS LATERALES ALIFÁTICAS

Los aminoácidos en este grupo son la glicina, la alanina, la valina, la leucina y la isoleucina. Se nombraron en orden del menos al más hidrófobo [7]. La prolina a pesar de tener una cadena lateral cíclica comparte propiedades con los aminoácidos alifáticos.

2.2.1.2. AMINOÁCIDOS CON CADENAS LATERALES QUE CONTIENEN HIDROXIOLO O AZUFRE

Aquí se sitúa a la serina, la cisteína, la treonina y la metionina. Que son aminoácidos hidrófilos pese a que la metionina es bastante hidrófoba [7]. Sus cadenas laterales son débilmente polares. La cisteína se puede ionizar a pH relativamente bajo. De la oxidación de las cadenas laterales de dos cisteínas se da la cistina, que pese a no estar codificada en el ADN juega un papel estructural importante.

2.2.1.3. AMINOÁCIDOS AROMÁTICOS

Son tres los aminoácidos de este grupo la felinanina, la tirosina y el triptófano. El primero es uno de los más hidrófobos junto con los alifáticos, los otros dos son ligeramente hidrófobos atenuado por los grupos polares de su cadena lateral [7]. La tirosina se ioniza a pH elevado. Además como todos los compuestos que llevan anillos conjugados absorben luz con fuerza del rango ultravioleta cercano.

2.2.1.4. AMINOÁCIDOS BÁSICOS

En este grupo se tiene a la histidina, la lisina y la arginina. La lisina y la arginina son los más básicos, teniendo su cadena lateral siempre cargada positivamente en condiciones fisiológicas. Estos aminoácidos son muy polares por lo que se hayan normalmente en la superficie de las proteínas, donde se hidratan con el medio acuoso alrededor [7].

2.2.1.5. AMINOÁCIDOS ÁCIDOS Y SUS AMIDAS

Los dos aminoácidos del grupo el ácido aspártico y el ácido glutámico son los únicos con cargas negativas a pH 7. Estos mantienen carga negativa en condiciones fisiológicas aún al acoplarse a la proteína, a su residuos se les suele llamar aspartato y glutamato. Sus respectiva amidas son la asparagina y la glutamina que los acompañan. Estos tienen cadena lateral sin carga aunque igual son polares. Todos los aminoácidos básicos y ácidos son hidrófilos y se encuentran regularmente en la superficie de la proteína donde entran en contacto con el agua que los rodea.

Estos son los 20 aminoácidos codificados en el ADN y se incorporan directamente en las proteínas. Sin embargo es posible que algunos aminoácidos se modifiquen químicamente una vez se han ensamblado en las proteínas.

2.2.2. PÉPTIDOS

La unión de aminoácidos es conocida como Enlace Péptido. En el Enlace Péptido el grupo carboxílico de un aminoácido se condensa con el grupo amino de otro perdiendo una molécula de agua, esta unión de dos aminoácidos recibe el nombre de Dipéptido [8], en la Figura 9 vemos un esquema:

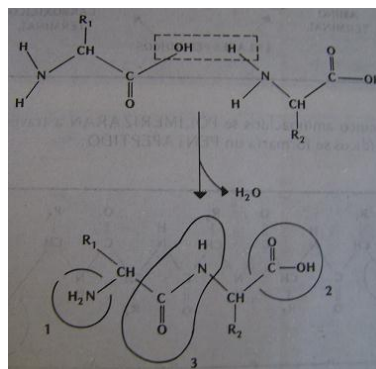


Figura 9. Esquema del enlace Dipéptido. (1) es el Grupo Amino Termina, (2) es el Grupo Carboxilo Termina y (3) es el enlace Péptido.
Tomada de *Aminoácidos, Péptidos y Proteínas: Teoría y Problemas*

Todos los Enlaces Péptidos tienen un Grupo Amino Terminal y un Grupo Carboxilo Terminal. Si el Grupo Amino Terminal del Dipéptido se condensara (polimerizara) con el Grupo Carboxilo de otro aminoácido el Grupo Carboxilo Terminal del Dipéptido se condensara con el Grupo Amino de otro aminoácido se formaría un Tripéptido, y si continuáramos polimerizando más aminoácidos a la cadena obtendríamos péptidos más grandes como el Pentapéptido [8] de la figura 10:

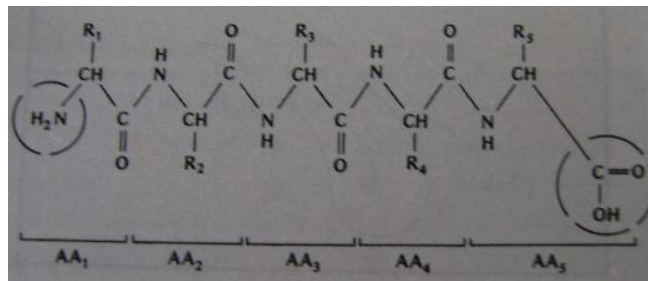


Figura 10. Esquema del enlace Pentapéptido.
Tomada de *Aminoácidos, Péptidos y Proteínas: Teoría y Problemas*

Las cadenas que contienen unos pocos aminoácidos se conocen como Oligopéptidos. Si la cadena contiene muchos aminoácidos es conocida como Polipéptidos.

Todas las proteínas son polipéptidos [7]. Por eso es tan importante conocer la naturaleza de los polipéptidos y los enlaces péptidos para la ciencia. Al ser todos los aminoácidos coplanares en un péptido, se puede presentar dos configuraciones *trans* y *cis*, como se representa en la figura 11:



Figura 11. Configuraciones *trans* y *cis* del enlace péptido.

La configuración *trans* está favorecida principalmente por la interferencia que se puede dar en los radicales R muy grandes con los carbonos α .

2.2.3. PROTEÍNAS

Las Proteínas son un tipo de Polipéptido especial pues tienen una secuencia de aminoácidos bien definida [7]. Las proteínas más pequeñas tienen cadenas de pocos cientos de aminoácidos mientras las más grandes pueden tener miles. El pH del entorno determina en gran parte qué funciones puede tener una proteína y cómo las va a realizar. Es importante resaltar que las proteínas son singulares para cada especie concreta, a menos que haya una mutación en el ADN que cambie la configuración entre un individuo y otro. En las proteínas aún más importante que saber de qué aminoácidos está compuesta una proteína, es saber la secuencia de conformación pues esta da información de la función que tiene la proteína. La secuencia de aminoácidos de una proteína y qué funciones determina es el interés principal de este trabajo.

2.3. BIOINFORMÁTICA

Se puede considerar la bioinformática como una disciplina novísima [9], en la base de datos de Medline, que compila literatura científica de medicina y biología, no existe un artículo que mencione el término antes de 1990. Aunque podemos rastrear su nacimiento hasta el año de 1947 cuando la científica Margaret Oakley Dayhoff resuelve un problema biológico usando tarjetas perforadas [10], creando más tarde ella misma una base de datos donde quedaría la información de las secuencias de dos de los pilares básicos de la vida el ADN y las proteínas.

La metodología por la cual el ordenador es empleado para simular situaciones reales, dadas unas condiciones iniciales y parámetros, es el enfoque clásico de lo que se conoce como técnicas de simulación [10]. Una aplicación de esto es el Algoritmo Genético que se basa principalmente en la obra de John Holland llamada *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, que modela y estudia con un ordenador procesos

genéticos simples. Otra aplicación interesante que surgió de la posibilidad de simular sistemas reales fue la posibilidad de crear moléculas distintas, moléculas inventadas, haciendo cambios en sus partes funcionales para diseñar de esta manera nuevos fármacos, drogas, etc. Estos son ejemplos de bioinformática, pero no son los únicos. Más adelante se verá que existen varias escuelas o corrientes de la bioinformática de acuerdo a la aplicación que se desee, que van desde simples bases de datos hasta la fabricación de nuevos seres biológicos. Por ahora se puede hacer una definición general de la bioinformática como: “la disciplina que resulta de la aplicación del ordenador, así como de las teorías, métodos y procedimientos que le son propios, al ámbito de la Ciencias de la Vida”.

2.3.1 CONEXÓN BIOLOGÍA – COMPUTACIÓN – FÍSICA

La relación entre biología y computación se puede decir que se establece a un nivel más íntimo que entre la computación y otras ciencias, esto debido principalmente a razones históricas [9]. La biología molecular y la informática se desarrollaron paralelamente y es normal ver que su vocabulario es común como código o programa genético, traducción, transcripción, procesamiento, etc. El discurso informático forma parte así del biológico en cual se pueden ver los organismos vivos como el resultado de la computación de la secuencia del genoma. Pero no es sólo una metáfora y el ejemplo más claro es la traducción de las secuencias de cuatro letras del ADN (ACGT), a través del ARN, a las secuencias de proteínas de 20 letras (ACDEFGHIKLMNPQRSTUWY). Se ve una operación en la cual una de las 64 posibles combinaciones del input, combinaciones de tres letras del alfabeto de los nucleótidos, da como resultado un output, una letra en el alfabeto de los aminoácidos.

El desarrollo del hardware en la informática se dio gracias a los avances de la física en el siglo pasado. Los lectores de discos, discos duros y microprocesadores se lograron gracias a los avances en la fabricación de láseres y la investigación en

nuevos materiales. La computación también tiene una estrecha relación con la física pues para poder transmitirse una información es necesario primero que se transforme a un objeto medible, para después ser estudiado lógicamente. Esto no es más que un proceso físico como por ejemplo la transmisión de ondas. Es por lo tanto la bioinformática una disciplina interdisciplinar que requiere tanto del conocimiento de las propiedades bioquímicas de los seres vivos, como de las propiedades físicas de los sistemas. Ya sea en la transmisión, almacenamiento u ordenamiento de datos a través de sistemas biológicos (ADN, proteínas), como en la teorización de esta.

2.3.2. ESCUELAS DE LA BIOINFORMÁTICA

Al comenzar el siglo XXI no parece que haya un consenso general en cuanto a los objetivos y ámbito de la aplicación de la bioinformáticas [10]. Por el contrario desde la última década del siglo pasado se han venido consolidando tres escuelas o tendencias entre los investigadores, de las cuales se hablará a continuación por considerárseles las principales.

2.3.2.1. ESCUELA FORMAL

Iniciando la década de los 90's del siglo pasado confluyen conocimientos de áreas como la inteligencia artificial, biofísica, informática, etc. y de investigadores con mentalidad interdisciplinar que conducen a planteamientos de lo que el concepto y objeto de la bioinformática debe ser [10]. Este enfoque se caracteriza por la ruptura con el concepto anterior de simulación y la búsqueda de una síntesis entre la biología y otras disciplinas. En esta síntesis tienen cabida líneas bastante diferentes como los algoritmos genéticos, los autómatas celulares, los sistemas de Lindenmayer, las redes neuronales artificiales o el estudio y diseño de robots y agentes autónomos. Con estos

se pone a prueba en el mundo real los conceptos aprendidos de la simulación en el ordenador.

En esta nueva tendencia o enfoque sintético de la simulación [10], nace el término vida artificial en el que se trata de definir una nueva disciplina que reúna en un término común los principios de esta. A continuación se señalan 4 de los principios más importantes:

- I. El concepto de propiedad emergente
- II. El modelado de sistemas biológicos por medio de unidades interactivas.
- III. El concepto de comportamiento global como resultado de las reglas locales que actúan a nivel de cada unidad interactiva.
- IV. La estrategia de modelización “arriba hacia abajo” o bottom-up contrario al enfoque clásico de simulación.

Para terminar se puede decir que este enfoque está más emparentado con la programación orientada a objetos que con la simulación clásica.

2.3.2.2. ESCUELA ESTRUCTURAL

En esta tendencia se define a la bioinformática como la aplicación de los sistemas computacionales en la recogida, almacenamiento y análisis de la información biológica [10]. Entendiendo la información biológica como las secuencias de proteínas o ácidos nucleicos, donde se puede ver que es la escuela que representa a la idea inicial de bioinformática pero en una evolución posterior. Dentro de esta escuela encontramos ramas como la genómica y la proteómica dedicadas a las secuencias de ADN y de proteínas respectivamente. También se puede llamar biocomputación o biología computacional en una mezcla entre la genómica y la proteómica. No hay un consenso sobre su ámbito de aplicación exacto, la biología computacional se puede

ver como una rama de la bioinformática que analiza secuencias, y por lo tanto tiene como principios:

- I. Identificar los genes en una secuencia de ADN
- II. Desarrollar métodos para predecir la estructura y/o funcionamiento de una proteína.
- III. EL agrupamiento de proteínas en familias de secuencias similares y el modelado de estas.
- IV. Alinear proteínas similares en arboles filogenéticos para estudiar su evolución

En la última década la genómica fue la rama de esta escuela que tuvo mayor impacto debido al proyecto genoma humano [10]. En los últimos años la proteómica a comenzado a hacerse visible al tratar de resolver el problema del llamado plegamiento de proteínas que determina características de la proteínas además de las dadas por su secuencia. En resumen esta escuela estudia principalmente los problemas relacionados con la búsqueda de patrones en proteínas y ADN y la predicción de la estructura 3-dimensional de las proteínas. Es por esto que las investigaciones en esta escuela son interdisciplinarias y llevadas a cabo principalmente por biólogos moleculares, biofísicos e informáticos.

2.3.2.3. ESCUELA INSTRUMENTAL

Esta escuela es la más fácil de definir y la que menos problemas tiene en la definición de su finalidad. Se puede sintetizar en la siguiente frase “la bioinformática es la aplicación de los ordenadores a la gestión de información biológica” [10]. O sea para esta escuela la bioinformática sólo debe interesarse por la forma en la que se gestiona la información en la base de datos y la realización de experimentos simulados.

2.3.3. APLICACIONES DE LAS WAVELET EN LA BIOINFORMÁTICA

Las wavelet se pueden usar en todos los aspectos de la investigación en la estructura proteica [11]. En la determinación de las estructura primarias, secundarias y terciarias, refinamiento de la cristalografía de rayos X, visualización y diseño de drogas, etc. Recientemente (2002) Murray utilizó la transformada wavelet continua para analizar la hidrofobicidad y relativa accesibilidad al área superficial de una variedad de proteína de motivo repetitivo.

2.4. FRACTALES

El nombre de fractal fue propuesto por el matemático Benoit Mandelbrot (1924-2010) para hacer referencia a la traducción del latín *fractus* o sea quebrado [12] y popularizó esta nueva geometría [13]. Pero aunque a este matemático se deba el auge de la matemática fractal no fue el primero que pensó y trabajo en ella, haciendo un rastreo histórico podemos llegar hasta Karl Theodor Wilhelm Weierstrass (1815-1897) [14] quien definió la primera curva continua no diferenciable. Siguiendo con Georg Ferdinand Ludwig Philipp Cantor (1845-1918) que estableció una sucesión de segmentos conocida como "*polvo de Cantor*" de la que se hablará más adelante. Aleksandr Mikhailovich Lyapunov (1857-1918) quien abrió el camino para el estudio de *sistemas dinámicos*. Giuseppe Peano (1858 - 1932) que diseñó una curva que, al desarrollarse, pasa por todos los puntos del plano. Wacław Sierpinski (1882-1969) con su *triángulo* que es, probablemente, el fractal más conocido. Niels Fabian Helge von Koch (1815 - 1897) que aportó una famosa curva conocida como "*Copo de nieve*". Gaston Maurice Julia (1893 - 1978) quien estudio por primera vez la iteración de funciones racionales y es el predecesor de Mandelbrot. A continuación se pasa entonces a definir qué es un fractal, a mostrar algunos de los ejemplos más representativos y a definir una característica matemática conocida como dimensión que será muy útil al analizar físicamente un sistema fractal.

2.4.1. ¿QUÉ ES UN FRACTAL?

En pocas palabras es un objeto que presenta recursividad o autosimilitud a cualquier escala [15]. O sea que si tomamos una pequeña parte de un fractal veremos que esa sección será una réplica a pequeña escala de la imagen principal, una parte es igual al todo [13]. Otra característica importante es que su dimensión es fraccionaria, es decir, no puede ser representada con un número entero. En casi todos los casos los fractales poseen las características anteriores pero se pueden dar casos en los que no. Al hacer zoom a un fractal podríamos no ver una réplica de la figura principal, sino un nuevo patrón.

2.4.1.1. POLVO DE CANTOR

El polvo o conjunto de Cantor es conocido como el fractal más fácil de construir [16]. Para construirlo lo primero que debemos hacer es dibujar una línea que una el intervalo $[0,1]$. Después se divide en tres partes y se elimina la del centro. Para una nueva iteración se divide los dos intervalos que quedan, en el caso regular $[0,1/3]$ y $[2/3,1]$, y se dividen en tres partes eliminando el de la mitad de cada uno, y así sucesivamente. El proceso se puede apreciar en la figura 12:

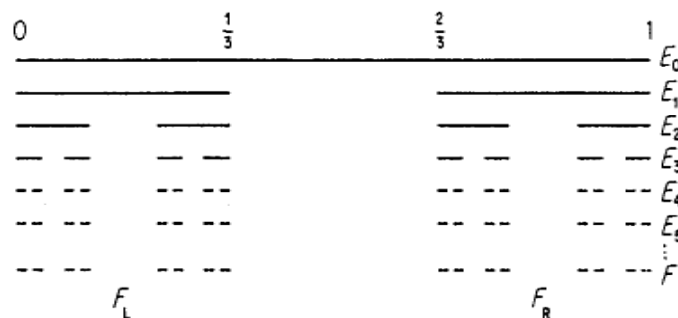


Figura 12. Construcción del polvo de Cantor. Tomado de *Fractal Geometry*, Kenneth Falconer

Se puede apreciar que aunque es una figura sencilla recoge todas las características de un fractal [15], presenta autosimilitud en todas las escalas y su dimensión es el fraccionario $\log(2)/\log(3)$. Y además introduce una característica de la que no se había hablado y es que los fractales se fabrican a partir de iteraciones.

2.4.1.2. CURVA DE VON KOCH

Para construir la curva de von Koch partimos de una línea que une el segmento $[0,1]$, al igual que el polvo de Cantor lo dividimos en tres partes, pero en lugar de eliminar el centro lo que se hace es replicarlo formando un triángulo equilátero [13]. El nuevo segmento tendrá cuatro lados de tamaño $1/3$. Para una segunda iteración se hace el mismo proceso para cada uno de los cuatro lados que quedaron obteniendo 16 lados [16], y así sucesivamente como se ve en la figura 13 (a). Para obtener el copo de nieve partimos de un triángulo equilátero y realizamos los mismos pasos anteriores con sus tres lados [12], obteniendo la figura 13 (b).

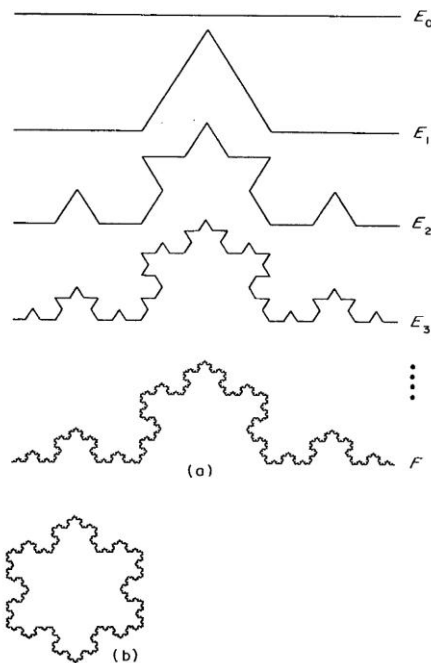


Figura 13. Construcción de la curva de von Koch (a) y el copo de nieve (b). Tomado de *Fractal Geometry*, Kenneth Falconer

2.4.1.3. TRIANGULO DE SIERPINSKI

Por último se muestra un fractal que no parte de una figura lineal, en este caso el triángulo de Sierpinski es un triángulo equilátero al que en una primera iteración se le retira un triángulo equilátero cuyas aristas coinciden con los puntos medios de sus lados, quedando tres nuevos triángulos equiláteros [16]. Luego en una nueva iteración se realiza el mismo proceso para los triángulos pequeños, obteniéndose como resultado el triángulo de Sierpinski [15]. Cabe anotar que cuando se retira el triángulo central se refiere a eliminar este conjunto de puntos por lo que ya no van a pertenecer al espacio. Una representación se puede apreciar en la figura 14:

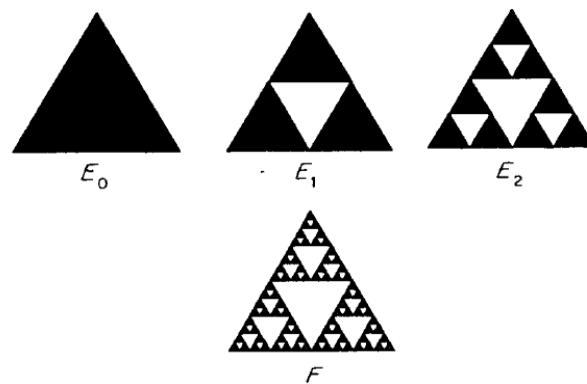


Figura 14. Construcción del triángulo de Sierpinski. Tomado de *Fractal Geometry*, Kenneth Falconer

2.4.2. DIMENSIÓN FRACTAL

El concepto de dimensión tiene que ver con que al dividir una figura cuántas partes quedan de esta y a qué valor se debe elevar un exponente q para hacer la multiplicación entre el corte y las partes igual a 1 [13]. En el siguiente esquema se puede visualizar el a lo que se refiere:

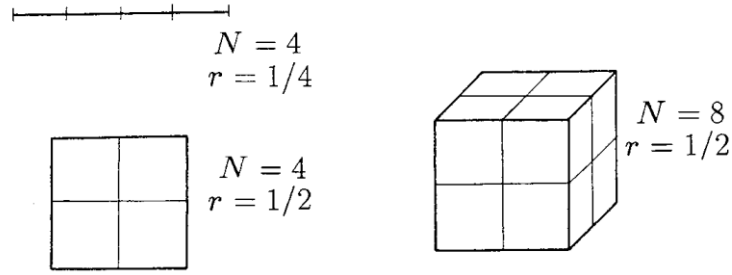


Figura 15. Esquema de la división de una figura en segmentos de tamaño r y las parte obtenidas representadas por N . Tomado de *Orden y caos en sistemas complejos*

Donde N es el número de partes resultantes y r es el tamaño de la división. Y se debe cumplir que:

$$Nr^q = 1 \quad (19)$$

Entonces q en este caso sería la dimensión y el resultado es uno para el caso normalizado. Se puede comprobar fácilmente que q es 1, 2 y 3, para la línea, el cuadrado y el cubo respectivamente. En el caso de un fractal esto no es tan sencillo pues por ejemplo para el caso del polvo de cantor por cada división de tamaño $1/3$ obtenemos 2 partes, si nos vamos al caso extremo de infinitas iteraciones tendríamos que la ecuación 19 quedaría:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 2^n \left(\frac{1}{3}\right)^{nq} = 1 \quad o \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{2}{3^q}\right)^n = 1 \quad (20)$$

Obteniendo que para el caso del polvo de cantor la dimensión es igual a:

$$q = \frac{\ln 2}{\ln 3} = 0,630929753 \quad (21)$$

Que se llama dimensión medida y coincide con la dimensión fractal siempre que $n \rightarrow \infty$ o sea que $1/n \rightarrow 0$.

En fractales existen principalmente dos métodos para calcular la dimensión fractal, el box-counting y la medida de Hausdorff [16]. Donde la primera utiliza particiones del espacio o cajas para que al contarlas una a una se pueda encontrar la dimensión del espacio. En la segunda se recubre el objeto para medir su dimensión.

2.4.3. MULTIFRACTAL

El cálculo del espectro multifractal de un objeto autosimilar es una herramienta analítica con clara interpretación física [13]. Es una extensión del concepto de fractal y fue propuesto en 1974 por B. B. Mandelbrot para describir más precisamente el fenómeno de la turbulencia. Una primera visión intuitiva de un multifractal se da al pensar en un objeto en el que se pueda percibir autosimilitud pero que se pueda fabricar con ninguna regla sencilla de iteraciones. Utilizando el método de box-counting se podría calcular la dimensión fractal del objeto. Al hacer la gráfica de la pendiente box-counting se nota que no es única, más bien que cambia con la escala, de aquí se deduce que la medida del conjunto no es autosimilar. La solución está precisamente ahí para el multifractal no existe una dimensión única, sino un espectro de dimensiones; más si la medida del fractal no está repartida uniformemente. Los fractales que necesitan ser descritos por este conjunto infinito de exponentes se conocen como multifractales.

Un primer valor con sentido físico que se puede calcular es la función de partición global del espectro wavelet, que se define en la ecuación 22 [2]:

$$Z(q, s) = \sum_p |Wf(u_p, s)|^q \quad (22)$$

Donde q es la dimensión, s la escala y u_p representa los máximos de la transformada wavelet. De aquí deriva una importante medida conocida como Escala de exponentes

y representado con $\tau(q)$ que es una de las tres funciones que caracteriza a los multifractales. Se define como en la ecuación 23:

$$\tau(q) = \lim_{s \rightarrow 0} \inf \left(\frac{\log Z(q,s)}{\log s} \right) \quad (23)$$

Obteniendo la relación de Z con la escala s , ecuación 24:

$$Z(q, s) \sim s^{\tau(q)} \quad (24)$$

El teorema de Arneodo, Bacry, Jaffard y Muzy [2] relaciona al $\tau(q)$ como una transformada de Legendre de la función $f(\alpha)$, ecuación 25:

$$\tau(q) = \min_{\alpha \in \Lambda} \left(q \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) - f(\alpha) \right) \quad (25)$$

$f(\alpha)$ es el espectro de dimensiones fractales [13] y se define en relación a la función $D(q)$ conocida como las dimensiones de correlación. Donde $D(0)$ es la dimensión calculada por box-counting y es el máximo de $f(\alpha)$, $D(1)$ definida como dimensión de información y con $f(\alpha)$ tangente a la recta que se forma con la pendiente de este valor y $D(2)$ conocida como dimensión de correlación que es simplemente la entropía de Shannon para la escala s . Las ecuaciones 26 y 27 muestran las definiciones de $D(q)$ y $f(\alpha)$ respectivamente:

$$D(q) = \lim_{s \rightarrow 0} \left(\frac{1}{(q-1)} \frac{\log Z(q,s)}{\log s} \right) \quad (26)$$

$$f(\alpha) = q\alpha(q) - D(q)(q-1) \quad (27)$$

Con

$$\alpha(q) = \frac{d}{dq} ((q-1)D(q)) \quad (28)$$

De las ecuaciones 23 y 26 se obtiene la relación:

$$\tau(q) = (q-1)D(q) \quad (29)$$

La forma genérica de las tres funciones se puede ver en la figura 16:

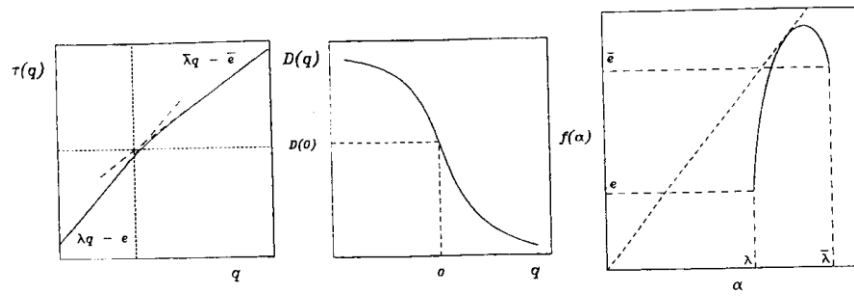


Figura 16. Forma genérica de las fuciones $\tau(q)$, $D(q)$ y $f(\alpha)$. Tomado de *Orden y caos en sistemas complejos*.

3. PROCEDIMIENTO ANALÍTICO

3.1. FABRICACIÓN DE LA PROTEÍNA ARTIFICIAL

Para la fabricación de la proteína artificial de este trabajo se utilizó la función conocida como escalera del diablo. La escogencia de esta función tiene que ver con que la forma general de la proteína comparte ciertas similitudes con ella. Por ejemplo los escalones, líneas horizontales, de la escalera podrían representar partes donde la secuencia de aminoácidos se repite, o lugares donde el coeficiente de hidrofobicidad es similar. Para asegurar que la escalera representara una proteína lo más real posible, se eligió una que se fabricara de manera diferente la tradicional integrada a partir del conjunto de Cantor, polvo de Cantor. El proceso se detalla a continuación.

3.1.1. ESCALERA DEL DIABLO

Antes de explicar el proceso para la fabricación de la escalera del diablo, se hará una pequeña introducción teórica. La escalera del diablo se fabrica a partir de la integración del polvo de cantor [2] y es una proyección al plano cartesiano de esta. En el caso de la escalera tradicional obtendríamos que para la primera iteración la ecuación de la función quedaría:

$$f(t) = \begin{cases} p_1(3t) & \text{si } t \in [0 ; 1/3) \\ p_1 & \text{si } t \in [1/3 ; 2/3) \\ p_2 + p_1(3t - 2) & \text{si } t \in [2/3 ; 1] \end{cases}$$

Donde p_1 y p_2 indican las distancias en las que se parte el eje y en el caso tradicional valen $1/2$. Aquí se ve que para este primer paso tenemos cuatro puntos en el eje x que se llamarán $a_N = \{0; \frac{1}{3}; \frac{2}{3}; 1\}$, tres puntos en el eje y que se llamarán $p_n = \{0; \frac{1}{2}; 1\}$ y un total de tres ecuaciones dos líneas en diagonal y una horizontal o escalón. Si se quisiera seguir iterando el polvo de cantor e integrando se obtendría que para la segunda iteración habrían ocho a_N , cinco p_n y siete ecuaciones. En general por cada iteración quedarían $N = 2^{i+1}$ para a, $n = 2^i + 1$ para p y $2^{i+1} - 1$ ecuaciones,

donde i es el número de iteración. Para complicar un poco la escalera se pueden elegir longitudes del corte del polvo de cantor diferentes del tradicional $1/3$ y cortes del eje y diferentes de $1/2$.

3.1.2. ITERACIONES PARA LA FABRICACIÓN DE LA ESCALERA

Para fabricar la escalera del diablo analizada en este trabajo se escogieron particiones del polvo de Cantor con longitudes $1/2$, $1/4$, y $1/4$ y cortes en el eje y de $1/3$ y $2/3$ con lo que nos quedarían valores de a_N y p_n :

$$a_0 = 0, a_1 = \frac{1}{2}, a_2 = \frac{3}{4}, a_3 = 1$$

$$p_0 = 0, p_1 = \frac{1}{3}, p_2 = 1$$

Y con gráfica representada en la figura 17:

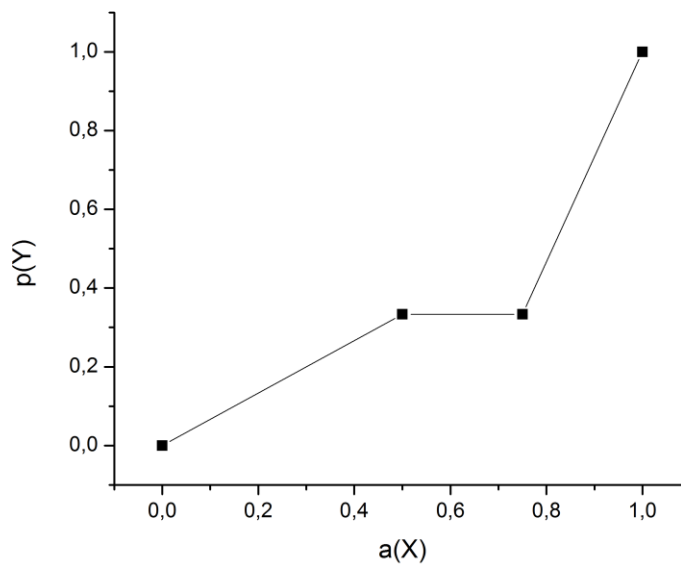


Figura 17. Representación en el plano de la primera iteración de la escalera del diablo utilizado.

A las distancias que quedan tanto en el eje x como en el y, se les multiplica cada una por las mismas dos anteriores y así se itera hasta alcanzar una escalera con suficientes escalones. Para el caso de este trabajo se iteró cuatro veces obteniendo la escalera con ecuación 30:

$$f(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{16}{8}x, & 0 \leq x < \frac{32}{512} \\ \frac{1}{81}, & \frac{32}{512} \leq x < \frac{512}{48} \\ \frac{64}{81}x - \frac{5}{81}, & \frac{512}{48} \leq x < \frac{512}{64} \\ \frac{3}{81}, & \frac{512}{64} \leq x < \frac{512}{96} \\ \frac{32}{81}x - \frac{1}{81}, & \frac{512}{96} \leq x < \frac{512}{112} \\ \frac{5}{81}, & \frac{512}{112} \leq x < \frac{512}{120} \\ \frac{256}{81}x - \frac{55}{81}, & \frac{512}{120} \leq x < \frac{512}{128} \\ \frac{9}{81}, & \frac{512}{128} \leq x < \frac{512}{192} \\ \frac{64}{81}x - \frac{15}{81}, & \frac{512}{192} \leq x < \frac{512}{208} \\ \frac{11}{81}, & \frac{512}{208} \leq x < \frac{512}{216} \\ \frac{256}{81}x - \frac{97}{81}, & \frac{512}{216} \leq x < \frac{512}{224} \\ \frac{15}{81}, & \frac{512}{224} \leq x < \frac{512}{240} \\ \frac{256}{81}x - \frac{105}{81}, & \frac{512}{240} \leq x < \frac{512}{248} \\ \frac{19}{81}, & \frac{512}{248} \leq x < \frac{512}{252} \\ \frac{1024}{81}x - \frac{485}{81}, & \frac{512}{252} \leq x < \frac{512}{256} \\ \frac{27}{81}, & \frac{512}{256} \leq x < \frac{512}{384} \\ \frac{64}{81}x - \frac{21}{81}, & \frac{512}{384} \leq x < \frac{512}{400} \\ \frac{29}{81}, & \frac{512}{400} \leq x < \frac{512}{408} \\ \frac{256}{81}x - \frac{175}{81}, & \frac{512}{408} \leq x < \frac{512}{416} \\ \frac{33}{81}, & \frac{512}{416} \leq x < \frac{512}{432} \\ \frac{256}{81}x - \frac{183}{81}, & \frac{512}{432} \leq x < \frac{512}{440} \\ \frac{37}{81}, & \frac{512}{440} \leq x < \frac{512}{444} \\ \frac{1024}{81}x - \frac{851}{81}, & \frac{512}{444} \leq x < \frac{512}{448} \\ \frac{45}{81}, & \frac{512}{448} \leq x < \frac{512}{480} \\ \frac{256}{81}x - \frac{195}{81}, & \frac{512}{480} \leq x < \frac{512}{488} \\ \frac{49}{81}, & \frac{512}{488} \leq x < \frac{512}{492} \\ \frac{1024}{81}x - \frac{935}{81}, & \frac{512}{492} \leq x < \frac{512}{496} \\ \frac{57}{81}, & \frac{512}{496} \leq x < \frac{512}{504} \\ \frac{1024}{81}x - \frac{951}{81}, & \frac{512}{504} \leq x < \frac{512}{508} \\ \frac{65}{81}, & \frac{512}{508} \leq x < \frac{512}{510} \\ \frac{4096}{81}x - \frac{4015}{81}, & \frac{512}{510} \leq x \leq \frac{512}{512} \end{array} \right. \quad (30)$$

Cuya gráfica se puede ver en la figura 18:

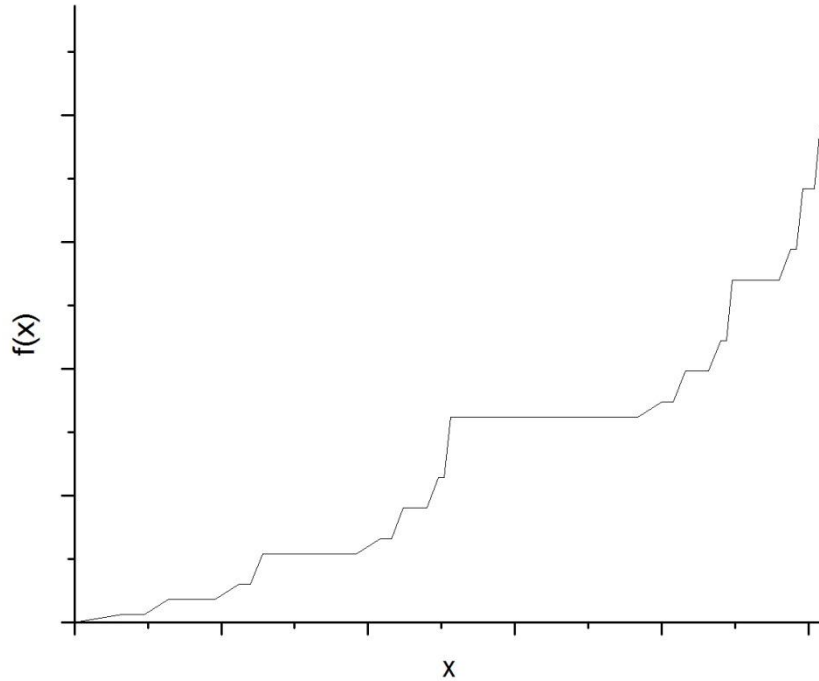


Figura 18. Representación en el plano de la cuarta iteración de la escalera del diablo utilizado.

3.2. TRANSFORMACIÓN WAVELET DE LA PROTEÍNA ARTIFICIAL

Para realizar la transformada wavelet de la proteína artificial elegida para este trabajo se utilizó en un primer momento la teoría wavelet continua, en específico la wavelet primero derivada de la gaussiana ($-\Theta'$). El gran inconveniente que presentó fue a la hora de integrar pues mientras más iteraciones se hicieran a la escalera del diablo más ecuaciones quedarían, y esto combinado con que la wavelet debe tener soporte compacto y por lo tanto debía ser cortada en sus extremos generó que se necesitara de mucho tiempo de máquina y programas para poder resolverlo. Como la intención del trabajo era realizar un cálculo analítico sencillo se optó finalmente por discretizar la escalera y realizar una transformada wavelet discreta con la función Haar que lo único que hace es sacar promedios entre dos puntos consecutivos y con lo cual se puede realizar el cálculo a mano.

3.2.1. TRANSFORMADA CONTINUA (1RA DERIVADA DE LA GAUSSIANA)

Para calcular la transformada wavelet continua con la primera derivada de la gaussiana se utiliza la ecuación 17 reemplazando $\psi\left(\frac{t-u}{s}\right)$ por $\left(\frac{t-s}{u}\right)e^{-\left(\frac{t-u}{s}\right)^2}$. Quedando así:

$$Wf(u, s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \frac{1}{\sqrt{s}} \left(\frac{t-u}{s}\right) e^{-\left(\frac{t-u}{s}\right)^2} dt \quad (31)$$

Para poder que esta sea una wavelet útil para el análisis se deben cortar sus extremos escogiendo un valor no muy grande, programas como el MATLAB lo cortan en el intervalo [-5,5].

Un primer problema de esta transformada es que para poder integrar hay que tener en cuenta todos los límites de los conjuntos de cada parte de la función escalera del diablo, que crecen en $2^{n+1} - 1$ donde n es el número de iteraciones, con los límites de la wavelet. Esto hace que analíticamente sea casi imposible calcular un resultado y se pase a necesitar de un computador para realizar el trabajo, lo que no estaba dentro de los objetivos del trabajo. Pero el gran inconveniente con el resultado de esta transformación es que arroja una función donde se hace necesario hallar los máximos locales y así poder analizar el sistema. Estos problemas se pueden resolver al utilizar la wavelet Haar discreta, por ejemplo, donde sólo es necesario realizar una serie de promedios y el resultado obtenido ya está indicando los máximos. Debido a esto se decidió no continuar con la wavelet continua a pesar de estar en el título del trabajo y continuar haciendo el cálculo con la wavelet Haar discreta.

3.2.2. TRANSFORMADA DISCRETA (HAAR)

A partir de la función escalera del diablo en su cuarta iteración se discretizó utilizando 512 datos cada $1/512$ y se fue reemplazando en la ecuación, no se tomó el punto (0,0). Quedando de la forma $\mathbf{F} = (f_1, f_2, f_3, \dots, f_{512})$ [17]. Una vez discretizada se pasó a realizar el cálculo de la transformada wavelet discreta realizando promedios cada dos valores, sumándolos y dividiendo el resultado entre 2, con lo que quedaron 256 datos de una nueva función que se llamará $A^1 = (A_1, A_2, A_3, \dots, A_{D/2})$ donde D es la cantidad de valores en que se discretizó la función original. Como segundo paso se saca la wavelet resultante $W^1 = (W_1, W_2, W_3, \dots, W_{D/2})$ haciendo restas cada dos valores cercanos y dividiendo el resultado en dos. El método se explica mejor en las ecuaciones 32 y 33:

$$A_m = \frac{f_{2m-1} + f_{2m}}{2} \quad \text{para } m = 1, 2, 3, \dots, D/2 \quad (32)$$

$$W_m = \frac{f_{2m-1} - f_{2m}}{2} \quad \text{para } m = 1, 2, 3, \dots, D/2 \quad (33)$$

En donde $\mathbf{F}$ se transformaría en $(A^1|W^1)$. El mismo proceso se puede hacer para A^1 obteniendo A^2 y W^2 con lo que $\mathbf{F}$ quedaría transformada en $(A^2|W^2|W^1)$, y así sucesivamente. Para este trabajo a la escalera del diablo en su cuarta iteración discretizada en 512 puntos, se le realizó la transformación hasta la escala 5.

3.3. CALCULO DE LA DIMENSIÓN MULTIFRACTAL

Para calcular la dimensión multifractal lo que se hizo fue en primer lugar hallar el valor de la función de partición para cada dimensión $Z(q, s)$ y realizar un gráfico de $\text{Log}_2(Z)$ Vs $\text{Log}_2(s)$ de donde la pendiente de cada línea, una por dimensión, da los valores del $\tau(q)$. Una vez hallados esos valores se usa la relación del $\tau(q)$ con $D(q)$ de la ecuación 25, con la cual se hallan los valores numéricos del $D(q)$.

3.3.1. POSIBLE PROCEDIMIENTO ALTERNO

Sería posible para no utilizar la función logaritmo en el cálculo del $\tau(q)$ utilizar la aproximación hecha en spin glass de esta función. Ecuación 34:

$$\text{Log}(x) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n} \quad (34)$$

Realizando un pequeño cambio de la variable n a $m = 1/n$ con lo que quedaría:

$$\text{Log}(x) = \lim_{m \rightarrow \infty} (x^{1/m} - 1) m \quad (35)$$

Con esto se podría hacer todos los pasos a mano sin necesidad de ningún cálculo en computador. Pero a pesar de repetidos intentos no se logró hacer que el resultado correspondiera al esperado por lo cual se deja a consideración de un trabajo futuro.

4. RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1. DE LAS TRANSFORMADAS WAVELET

El primer paso fue discretizar la escalera del diablo en su cuarta iteración en 512 puntos que se muestran en la tabla 1 a continuación:

Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)
1	1/512	1/2592	39	39/512	1/81	77	77/512	3/81	115	115/512	5/81
2	2/512	2/2592	40	40/512	1/81	78	78/512	3/81	116	116/512	5/81
3	3/512	3/2592	41	41/512	1/81	79	79/512	3/81	117	117/512	5/81
4	4/512	4/2592	42	42/512	1/81	80	80/512	3/81	118	118/512	5/81
5	5/512	5/2592	43	43/512	1/81	81	81/512	3/81	119	119/512	5/81
6	6/512	6/2592	44	44/512	1/81	82	82/512	3/81	120	120/512	10/162
7	7/512	7/2592	45	45/512	1/81	83	83/512	3/81	121	121/512	11/162
8	8/512	8/2592	46	46/512	1/81	84	84/512	3/81	122	122/512	12/162
9	9/512	9/2592	47	47/512	1/81	85	85/512	3/81	123	123/512	13/162
10	10/512	10/2592	48	48/512	8/648	86	86/512	3/81	124	124/512	14/162
11	11/512	11/2592	49	49/512	9/648	87	87/512	3/81	125	125/512	15/162
12	12/512	12/2592	50	50/512	10/648	88	88/512	3/81	126	126/512	16/162
13	13/512	13/2592	51	51/512	11/648	89	89/512	3/81	127	127/512	17/162
14	14/512	14/2592	52	52/512	12/648	90	90/512	3/81	128	128/512	9/81
15	15/512	15/2592	53	53/512	13/648	91	91/512	3/81	129	129/512	9/81
16	16/512	16/2592	54	54/512	14/648	92	92/512	3/81	130	130/512	9/81
17	17/512	17/2592	55	55/512	15/648	93	93/512	3/81	131	131/512	9/81
18	18/512	18/2592	56	56/512	16/648	94	94/512	3/81	132	132/512	9/81
19	19/512	19/2592	57	57/512	17/648	95	95/512	3/81	133	133/512	9/81
20	20/512	20/2592	58	58/512	18/648	96	96/512	64/1296	134	134/512	9/81
21	21/512	21/2592	59	59/512	19/648	97	97/512	65/1296	135	135/512	9/81
22	22/512	22/2592	60	60/512	20/648	98	98/512	66/1296	136	136/512	9/81
23	23/512	23/2592	61	61/512	21/648	99	99/512	67/1296	137	137/512	9/81
24	24/512	24/2592	62	62/512	22/648	100	100/512	68/1296	138	138/512	9/81
25	25/512	25/2592	63	63/512	23/648	101	101/512	69/1296	139	139/512	9/81
26	26/512	26/2592	64	64/512	3/81	102	102/512	70/1296	140	140/512	9/81
27	27/512	27/2592	65	65/512	3/81	103	103/512	71/1296	141	141/512	9/81
28	28/512	28/2592	66	66/512	3/81	104	104/512	72/1296	142	142/512	9/81
29	29/512	29/2592	67	67/512	3/81	105	105/512	73/1296	143	143/512	9/81
30	30/512	30/2592	68	68/512	3/81	106	106/512	74/1296	144	144/512	9/81
31	31/512	31/2592	69	69/512	3/81	107	107/512	75/1296	145	145/512	9/81
32	32/512	1/81	70	70/512	3/81	108	108/512	76/1296	146	146/512	9/81
33	33/512	1/81	71	71/512	3/81	109	109/512	77/1296	147	147/512	9/81
34	34/512	1/81	72	72/512	3/81	110	110/512	78/1296	148	148/512	9/81
35	35/512	1/81	73	73/512	3/81	111	111/512	79/1296	149	149/512	9/81
36	36/512	1/81	74	74/512	3/81	112	112/512	5/81	150	150/512	9/81
37	37/512	1/81	75	75/512	3/81	113	113/512	5/81	151	151/512	9/81
38	38/512	1/81	76	76/512	3/81	114	114/512	5/81	152	152/512	9/81

Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)
153	153/512	9/81	191	191/512	9/81	229	229/512	15/81	267	267/512	27/81
154	154/512	9/81	192	192/512	72/648	230	230/512	15/81	268	268/512	27/81
155	155/512	9/81	193	193/512	73/648	231	231/512	15/81	269	269/512	27/81
156	156/512	9/81	194	194/512	74/648	232	232/512	15/81	270	270/512	27/81
157	157/512	9/81	195	195/512	75/648	233	233/512	15/81	271	271/512	27/81
158	158/512	9/81	196	196/512	76/648	234	234/512	15/81	272	272/512	27/81
159	159/512	9/81	197	197/512	77/648	235	235/512	15/81	273	273/512	27/81
160	160/512	9/81	198	198/512	78/648	236	236/512	15/81	274	274/512	27/81
161	161/512	9/81	199	199/512	79/648	237	237/512	15/81	275	275/512	27/81
162	162/512	9/81	200	100/512	80/648	238	238/512	15/81	276	276/512	27/81
163	163/512	9/81	201	201/512	81/648	239	239/512	15/81	277	277/512	27/81
164	164/512	9/81	202	202/512	82/648	240	240/512	30/162	278	278/512	27/81
165	165/512	9/81	203	203/512	83/648	241	241/512	31/162	279	279/512	27/81
166	166/512	9/81	204	204/512	84/648	242	242/512	32/162	280	280/512	27/81
167	167/512	9/81	205	205/512	85/648	243	243/512	33/162	281	281/512	27/81
168	168/512	9/81	206	206/512	86/648	244	244/512	34/162	282	282/512	27/81
169	169/512	9/81	207	207/512	87/648	245	245/512	35/162	283	283/512	27/81
170	170/512	9/81	208	208/512	11/81	246	246/512	36/162	284	284/512	27/81
171	171/512	9/81	209	209/512	11/81	247	247/512	37/162	285	285/512	27/81
172	172/512	9/81	210	210/512	11/81	248	248/512	19/81	286	286/512	27/81
173	173/512	9/81	211	211/512	11/81	249	249/512	19/81	287	287/512	27/81
174	174/512	9/81	212	212/512	11/81	250	250/512	19/81	288	288/512	27/81
175	175/512	9/81	213	213/512	11/81	251	251/512	19/81	289	289/512	27/81
176	176/512	9/81	214	214/512	11/81	252	252/512	19/81	290	290/512	27/81
177	177/512	9/81	215	215/512	11/81	253	253/512	21/81	291	291/512	27/81
178	178/512	9/81	216	216/512	22/162	254	254/512	23/81	292	292/512	27/81
179	179/512	9/81	217	217/512	23/162	255	255/512	25/81	293	293/512	27/81
180	180/512	9/81	218	218/512	24/162	256	256/512	27/81	294	294/512	27/81
181	181/512	9/81	219	219/512	25/162	257	257/512	27/81	295	295/512	27/81
182	182/512	9/81	220	220/512	26/162	258	258/512	27/81	296	296/512	27/81
183	183/512	9/81	221	221/512	27/162	259	259/512	27/81	297	297/512	27/81
184	184/512	9/81	222	222/512	28/162	260	260/512	27/81	298	298/512	27/81
185	185/512	9/81	223	223/512	29/162	261	261/512	27/81	299	299/512	27/81
186	186/512	9/81	224	224/512	15/81	262	262/512	27/81	300	300/512	27/81
187	187/512	9/81	225	225/512	15/81	263	263/512	27/81	301	301/512	27/81
188	188/512	9/81	226	226/512	15/81	264	264/512	27/81	302	302/512	27/81
189	189/512	9/81	227	227/512	15/81	265	265/512	27/81	303	303/512	27/81
190	190/512	9/81	228	228/512	15/81	266	266/512	27/81	304	304/512	27/81

Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)
305	305/512	27/81	343	343/512	27/81	381	381/512	27/81	419	419/512	33/81
306	306/512	27/81	344	344/512	27/81	382	382/512	27/81	420	420/512	33/81
307	307/512	27/81	345	345/512	27/81	383	383/512	27/81	421	421/512	33/81
308	308/512	27/81	346	346/512	27/81	384	384/512	216/648	422	422/512	33/81
309	309/512	27/81	347	347/512	27/81	385	385/512	217/648	423	423/512	33/81
310	310/512	27/81	348	348/512	27/81	386	386/512	218/648	424	424/512	33/81
311	311/512	27/81	349	349/512	27/81	387	387/512	219/648	425	425/512	33/81
312	312/512	27/81	350	350/512	27/81	388	388/512	220/648	426	426/512	33/81
313	313/512	27/81	351	351/512	27/81	389	389/512	221/648	427	427/512	33/81
314	314/512	27/81	352	352/512	27/81	390	390/512	222/648	428	428/512	33/81
315	315/512	27/81	353	353/512	27/81	391	391/512	223/648	429	429/512	33/81
316	316/512	27/81	354	354/512	27/81	392	392/512	224/648	430	430/512	33/81
317	317/512	27/81	355	355/512	27/81	393	393/512	225/648	431	431/512	33/81
318	318/512	27/81	356	356/512	27/81	394	394/512	226/648	432	432/512	66/162
319	319/512	27/81	357	357/512	27/81	395	395/512	227/648	433	433/512	67/162
320	320/512	27/81	358	358/512	27/81	396	396/512	228/648	434	434/512	68/162
321	321/512	27/81	359	359/512	27/81	397	397/512	229/648	435	435/512	69/162
322	322/512	27/81	360	360/512	27/81	398	398/512	230/648	436	436/512	70/162
323	323/512	27/81	361	361/512	27/81	399	399/512	231/648	437	437/512	71/162
324	324/512	27/81	362	362/512	27/81	400	400/512	29/81	438	438/512	72/162
325	325/512	27/81	363	363/512	27/81	401	401/512	29/81	439	439/512	73/162
326	326/512	27/81	364	364/512	27/81	402	402/512	29/81	440	440/512	37/81
327	327/512	27/81	365	365/512	27/81	403	403/512	29/81	441	441/512	37/81
328	328/512	27/81	366	366/512	27/81	404	404/512	29/81	442	442/512	37/81
329	329/512	27/81	367	367/512	27/81	405	405/512	29/81	443	443/512	37/81
330	330/512	27/81	368	368/512	27/81	406	406/512	29/81	444	444/512	37/81
331	331/512	27/81	369	369/512	27/81	407	407/512	29/81	445	445/512	39/81
332	332/512	27/81	370	370/512	27/81	408	408/512	58/162	446	446/512	41/81
333	333/512	27/81	371	371/512	27/81	409	409/512	59/162	447	447/512	43/81
334	334/512	27/81	372	372/512	27/81	410	410/512	60/162	448	448/512	45/81
335	335/512	27/81	373	373/512	27/81	411	411/512	61/162	449	449/512	45/81
336	336/512	27/81	374	374/512	27/81	412	412/512	62/162	450	450/512	45/81
337	337/512	27/81	375	375/512	27/81	413	413/512	63/162	451	451/512	45/81
338	338/512	27/81	376	376/512	27/81	414	414/512	64/162	452	452/512	45/81
339	339/512	27/81	377	377/512	27/81	415	415/512	65/162	453	453/512	45/81
340	340/512	27/81	378	378/512	27/81	416	416/512	33/81	454	454/512	45/81
341	341/512	27/81	379	379/512	27/81	417	417/512	33/81	455	455/512	45/81
342	342/512	27/81	380	380/512	27/81	418	418/512	33/81	456	456/512	45/81

Dato	x	f(x)	Dato	x	f(x)
457	457/512	45/81	495	495/512	55/81
458	458/512	45/81	496	496/512	57/81
459	459/512	45/81	497	497/512	57/81
460	460/512	45/81	498	498/512	57/81
461	461/512	45/81	499	499/512	57/81
462	462/512	45/81	500	500/512	57/81
463	463/512	45/81	501	501/512	57/81
464	464/512	45/81	502	502/512	57/81
465	465/512	45/81	503	503/512	57/81
466	466/512	45/81	504	504/512	57/81
467	467/512	45/81	505	505/512	59/81
468	468/512	45/81	506	506/512	61/81
469	469/512	45/81	507	507/512	63/81
470	470/512	45/81	508	508/512	65/81
471	471/512	45/81	509	509/512	65/81
472	472/512	45/81	510	510/512	65/81
473	473/512	45/81	511	511/512	73/81
474	474/512	45/81	512	512/512	81/81
475	475/512	45/81			
476	476/512	45/81			
477	477/512	45/81			
478	478/512	45/81			
479	479/512	45/81			
480	480/512	90/162			
481	481/512	91/162			
482	482/512	92/162			
483	483/512	93/162			
484	484/512	94/162			
485	485/512	95/162			
486	486/512	96/162			
487	487/512	97/162			
488	488/512	49/81			
489	489/512	49/81			
490	490/512	49/81			
491	491/512	49/81			
492	492/512	49/81			
493	493/512	51/81			
494	494/512	53/81			

Tabla 1. Valores de la discretización en 512 puntos de la escalera del diablo en su cuarta iteración.

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 32, para la primera resolución se obtuvo los valores del conjunto A^1 de la tabla 2:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	3/5184	39	3/81	77	9/81	115	15/81
2	7/5184	40	3/81	78	9/81	116	15/81
3	11/5184	41	3/81	79	9/81	117	15/81
4	15/5184	42	3/81	80	9/81	118	15/81
5	19/5184	43	3/81	81	9/81	119	15/81
6	23/5184	44	3/81	82	9/81	120	15/81
7	27/5184	45	3/81	83	9/81	121	63/324
8	31/5184	46	3/81	84	9/81	122	67/324
9	35/5184	47	3/81	85	9/81	123	71/324
10	39/5184	48	3/81	86	9/81	124	75/324
11	43/5184	49	131/2596	87	9/81	125	19/81
12	47/5184	50	135/2596	88	9/81	126	19/81
13	51/5184	51	139/2596	89	9/81	127	44/162
14	55/5184	52	143/2596	90	9/81	128	52/162
15	59/5184	53	147/2596	91	9/81	129	27/81
16	63/5184	54	151/2596	92	9/81	130	27/81
17	1/81	55	155/2596	93	9/81	131	27/81
18	1/81	56	159/2596	94	9/81	132	27/81
19	1/81	57	5/81	95	9/81	133	27/81
20	1/81	58	5/81	96	9/81	134	27/81
21	1/81	59	5/81	97	147/1296	135	27/81
22	1/81	60	5/81	98	151/1296	136	27/81
23	1/81	61	23/324	99	155/1296	137	27/81
24	1/81	62	27/324	100	159/1296	138	27/81
25	19/1296	63	31/324	101	163/1296	139	27/81
26	23/1296	64	35/324	102	167/1296	140	27/81
27	27/1296	65	9/81	103	171/1296	141	27/81
28	31/1296	66	9/81	104	175/1296	142	27/81
29	35/1296	67	9/81	105	11/81	143	27/81
30	39/1296	68	9/81	106	11/81	144	27/81
31	43/1296	69	9/81	107	11/81	145	27/81
32	47/1296	70	9/81	108	11/81	146	27/81
33	3/81	71	9/81	109	47/324	147	27/81
34	3/81	72	9/81	110	51/324	148	27/81
35	3/81	73	9/81	111	55/324	149	27/81
36	3/81	74	9/81	112	59/324	150	27/81
37	3/81	75	9/81	113	15/81	151	27/81
38	3/81	76	9/81	114	15/81	152	27/81

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
153	27/81	191	27/81	229	45/81
154	27/81	192	27/81	230	45/81
155	27/81	193	435/1296	231	45/81
156	27/81	194	439/1296	232	45/81
157	27/81	195	443/1296	233	45/81
158	27/81	196	447/1296	234	45/81
159	27/81	197	451/1296	235	45/81
160	27/81	198	455/1296	236	45/81
161	27/81	199	459/1296	237	45/81
162	27/81	200	463/1296	238	45/81
163	27/81	201	29/81	239	45/81
164	27/81	202	29/81	240	45/81
165	27/81	203	29/81	241	183/324
166	27/81	204	29/81	242	187/324
167	27/81	205	119/324	243	191/324
168	27/81	206	123/324	244	195/324
169	27/81	207	127/324	245	49/81
170	27/81	208	131/324	246	49/81
171	27/81	209	33/81	247	104/162
172	27/81	210	33/81	248	112/162
173	27/81	211	33/81	249	57/81
174	27/81	212	33/81	250	57/81
175	27/81	213	33/81	251	57/81
176	27/81	214	33/81	252	57/81
177	27/81	215	33/81	253	120/162
178	27/81	216	33/81	254	128/162
179	27/81	217	135/324	255	65/81
180	27/81	218	139/324	256	154/162
181	27/81	219	143/324		
182	27/81	220	147/324		
183	27/81	221	37/81		
184	27/81	222	37/81		
185	27/81	223	80/162		
186	27/81	224	88/162		
187	27/81	225	45/81		
188	27/81	226	45/81		
189	27/81	227	45/81		
190	27/81	228	45/81		

Tabla 2. Valores del conjunto A^1 de la primera resolución de la transformada wavelet.

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 33, para la primera resolución se obtuvo los valores del conjunto W^1 de la tabla 3:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	1/5184	39	0	77	0	115	0
2	1/5184	40	0	78	0	116	0
3	1/5184	41	0	79	0	117	0
4	1/5184	42	0	80	0	118	0
5	1/5184	43	0	81	0	119	0
6	1/5184	44	0	82	0	120	0
7	1/5184	45	0	83	0	121	1/324
8	1/5184	46	0	84	0	122	1/324
9	1/5184	47	0	85	0	123	1/324
10	1/5184	48	0	86	0	124	1/324
11	1/5184	49	1/2592	87	0	125	0
12	1/5184	50	1/2592	88	0	126	0
13	1/5184	51	1/2592	89	0	127	1/81
14	1/5184	52	1/2592	90	0	128	1/81
15	1/5184	53	1/2592	91	0	129	0
16	1/5184	54	1/2592	92	0	130	0
17	0	55	1/2592	93	0	131	0
18	0	56	1/2592	94	0	132	0
19	0	57	0	95	0	133	0
20	0	58	0	96	0	134	0
21	0	59	0	97	1/1296	135	0
22	0	60	0	98	1/1296	136	0
23	0	61	1/324	99	1/1296	137	0
24	0	62	1/324	100	1/1296	138	0
25	1/1296	63	1/324	101	1/1296	139	0
26	1/1296	64	1/324	102	1/1296	140	0
27	1/1296	65	0	103	1/1296	141	0
28	1/1296	66	0	104	1/1296	142	0
29	1/1296	67	0	105	0	143	0
30	1/1296	68	0	106	0	144	0
31	1/1296	69	0	107	0	145	0
32	1/1296	70	0	108	0	146	0
33	0	71	0	109	1/324	147	0
34	0	72	0	110	1/324	148	0
35	0	73	0	111	1/324	149	0
36	0	74	0	112	1/324	150	0
37	0	75	0	113	0	151	0
38	0	76	0	114	0	152	0

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
153	0	191	0	229	0
154	0	192	0	230	0
155	0	193	1/1296	231	0
156	0	194	1/1296	232	0
157	0	195	1/1296	233	0
158	0	196	1/1296	234	0
159	0	197	1/1296	235	0
160	0	198	1/1296	236	0
161	0	199	1/1296	237	0
162	0	200	1/1296	238	0
163	0	201	0	239	0
164	0	202	0	240	0
165	0	203	0	241	1/324
166	0	204	0	242	1/324
167	0	205	1/324	243	1/324
168	0	206	1/324	244	1/324
169	0	207	1/324	245	0
170	0	208	1/324	246	0
171	0	209	0	247	1/81
172	0	210	0	248	1/81
173	0	211	0	249	0
174	0	212	0	250	0
175	0	213	0	251	0
176	0	214	0	252	0
177	0	215	0	253	1/81
178	0	216	0	254	1/81
179	0	217	1/324	255	0
180	0	218	1/324	256	4/81
181	0	219	1/324		
182	0	220	1/324		
183	0	221	0		
184	0	222	0		
185	0	223	1/81		
186	0	224	1/81		
187	0	225	0		
188	0	226	0		
189	0	227	0		
190	0	228	0		

Tabla 3. Valores del conjunto W^1 de la primera resolución de la transformada wavelet.

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 32, para la segunda resolución se obtuvo los valores del conjunto A^2 de la tabla 4:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	5/5184	33	9/81	65	27/81	97	437/1296
2	13/5184	34	9/81	66	27/81	98	445/1296
3	21/5184	35	9/81	67	27/81	99	453/1296
4	29/5184	36	9/81	68	27/81	100	461/1296
5	37/5184	37	9/81	69	27/81	101	29/81
6	45/5184	38	9/81	70	27/81	102	29/81
7	53/5184	39	9/81	71	27/81	103	121/324
8	61/5184	40	9/81	72	27/81	104	129/324
9	1/81	41	9/81	73	27/81	105	33/81
10	1/81	42	9/81	74	27/81	106	33/81
11	1/81	43	9/81	75	27/81	107	33/81
12	1/81	44	9/81	76	27/81	108	33/81
13	21/1296	45	9/81	77	27/81	109	137/324
14	29/1296	46	9/81	78	27/81	110	145/324
15	37/1296	47	9/81	79	27/81	111	37/81
16	45/1296	48	9/81	80	27/81	112	84/162
17	3/81	49	149/1296	81	27/81	113	45/81
18	3/81	50	157/1296	82	27/81	114	45/81
19	3/81	51	165/1296	83	27/81	115	45/81
20	3/81	52	173/1296	84	27/81	116	45/81
21	3/81	53	11/81	85	27/81	117	45/81
22	3/81	54	11/81	86	27/81	118	45/81
23	3/81	55	49/324	87	27/81	119	45/81
24	3/81	56	57/324	88	27/81	120	45/81
25	133/2596	57	15/81	89	27/81	121	185/324
26	141/2596	58	15/81	90	27/81	122	193/324
27	149/2596	59	15/81	91	27/81	123	49/81
28	157/2596	60	15/81	92	27/81	124	108/162
29	5/81	61	65/324	93	27/81	125	57/81
30	5/81	62	73/324	94	27/81	126	57/81
31	25/324	63	19/81	95	27/81	127	124/162
32	33/324	64	48/162	96	27/81	128	142/162

Tabla 4. Valores del conjunto A^2 de la segunda resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 33, para la segunda resolución se obtuvo los valores del conjunto W^2 de la tabla 5:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	1/2596	33	0	65	0	97	1/648
2	1/2596	34	0	66	0	98	1/648
3	1/2596	35	0	67	0	99	1/648
4	1/2596	36	0	68	0	100	1/648
5	1/2596	37	0	69	0	101	0
6	1/2596	38	0	70	0	102	0
7	1/2596	39	0	71	0	103	1/162
8	0	40	0	72	0	104	1/162
9	0	41	0	73	0	105	0
10	0	42	0	74	0	106	0
11	0	43	0	75	0	107	0
12	1/648	44	0	76	0	108	0
13	1/648	45	0	77	0	109	1/162
14	1/648	46	0	78	0	110	1/162
15	1/648	47	0	79	0	111	0
16	0	48	0	80	0	112	2/81
17	0	49	1/648	81	0	113	0
18	0	50	1/648	82	0	114	0
19	0	51	1/648	83	0	115	0
20	0	52	1/648	84	0	116	0
21	0	53	0	85	0	117	0
22	0	54	0	86	0	118	0
23	0	55	1/162	87	0	119	0
24	0	56	1/162	88	0	120	0
25	1/1296	57	0	89	0	121	1/162
26	1/1296	58	0	90	0	122	1/162
27	1/1296	59	0	91	0	123	0
28	1/1296	60	0	92	0	124	2/81
29	0	61	1/162	93	0	125	0
30	0	62	1/162	94	0	126	0
31	1/162	63	0	95	0	127	2/81
32	1/162	64	2/81	96	0	128	6/81

Tabla 5. Valores del conjunto W^2 de la segunda resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 32, para la tercera resolución se obtuvo los valores del conjunto A^3 de la tabla 6:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	9/5184	17	9/81	33	27/81	49	441/1296
2	25/5184	18	9/81	34	27/81	50	457/1296
3	41/5184	19	9/81	35	27/81	51	29/81
4	57/5184	20	9/81	36	27/81	52	125/324
5	1/81	21	9/81	37	27/81	53	33/81
6	1/81	22	9/81	38	27/81	54	33/81
7	25/1296	23	9/81	39	27/81	55	141/324
8	41/1296	24	9/81	40	27/81	56	79/162
9	3/81	25	153/1296	41	27/81	57	45/81
10	3/81	26	169/1296	42	27/81	58	45/81
11	3/81	27	11/81	43	27/81	59	45/81
12	3/81	28	53/324	44	27/81	60	45/81
13	137/2596	29	15/81	45	27/81	61	184/324
14	153/2596	30	15/81	46	27/81	62	103/162
15	5/81	31	69/324	47	27/81	63	57/81
16	29/324	32	43/162	48	27/81	64	133/162

Tabla 6. Valores del conjunto A^3 de la tercera resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 33, para la tercera resolución se obtuvo los valores del conjunto W^3 de la tabla 7:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	1/1296	17	0	33	0	49	1/324
2	1/1296	18	0	34	0	50	1/324
3	1/1296	19	0	35	0	51	0
4	1/1296	20	0	36	0	52	1/81
5	0	21	0	37	0	53	0
6	0	22	0	38	0	54	0
7	1/324	23	0	39	0	55	1/81
8	1/324	24	0	40	0	56	5/162
9	0	25	1/324	41	0	57	0
10	0	26	1/324	42	0	58	0
11	0	27	0	43	0	59	0
12	0	28	1/81	44	0	60	0
13	1/648	29	0	45	0	61	1/81
14	1/648	30	0	46	0	62	5/162
15	0	31	1/81	47	0	63	0
16	1/81	32	5/162	48	0	64	1/18

Tabla 7. Valores del conjunto W^3 de la tercera resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 32, para la cuarta resolución se obtuvo los valores del conjunto A^4 de la tabla 8:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	25/5184	9	9/81	17	27/81	25	49/1296
2	49/5184	10	9/81	18	27/81	26	241/648
3	1/81	11	9/81	19	27/81	27	33/81
4	33/1296	12	9/81	20	27/81	28	299/648
5	3/81	13	161/1296	21	27/81	29	45/81
6	3/81	14	97/648	22	27/81	30	45/81
7	145/2592	15	15/81	23	27/81	31	146/324
8	49/648	16	155/648	24	27/81	32	247/324

Tabla 8. Valores del conjunto A^4 de la cuarta resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 33, para la cuarta resolución se obtuvo los valores del conjunto W^4 de la tabla 9:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	1/648	9	0	17	0	25	1/162
2	1/648	10	0	18	0	26	9/648
3	0	11	0	19	0	27	0
4	1/162	12	0	20	0	28	17/648
5	0	13	1/162	21	0	29	0
6	0	14	9/648	22	0	30	0
7	1/162	15	0	23	0	31	11/324
8	9/648	16	17/648	24	0	32	19/324

Tabla 9. Valores del conjunto W^4 de la cuarta resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 32, para la quinta resolución se obtuvo los valores del conjunto A^5 de la tabla 10:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	11/1728	5	11/1728	9	27/81	13	931/2592
2	49/2592	6	49/2592	10	27/81	14	563/1296
3	3/81	7	3/81	11	27/81	15	45/81
4	341/5184	8	341/5184	12	27/81	16	393/648

Tabla 10. Valores del conjunto A^5 de la quinta resolución de la transformada wavelet

Al realizar la transformada wavelet discreta, ecuación 33, para la quinta resolución se obtuvo los valores del conjunto W^5 de la tabla 11:

Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)	Dato	f(x)
1	1/324	5	0	9	0	13	11/864
2	17/2592	6	0	10	0	14	35/1296
3	0	7	11/864	11	0	15	0
4	17/1728	8	35/1296	12	0	16	101/648

Tabla 11 Valores del conjunto W^5 de la quinta resolución de la transformada wavelet

4.2. DE LA DIMENSIÓN MULTIFRACTAL

A partir de los resultados diferentes de cero para las wavelets W^1 , W^2 , W^3 , W^4 y W^5 se procedió a hacer el cálculo del logaritmo en base dos de la función de partición para el logaritmo en base dos de las primeras cinco escalas, ecuación 22, obteniendo los resultados de la tabla 12 para algunos q:

s\q	-1000	-100	-10	-5	-3
-9	12343,8500028846	1237,98500028846	127,399206360642	65,7236991682375	41,1389800577723
-8	11342,8500028846	1136,98500028846	116,399206360642	59,7236991682381	37,1389800762795
-7	10341,8500028846	1035,98500028846	105,399206360642	53,7236991781492	33,1389939725710
-6	9340,8500028846	934,9850002884620	94,3992063612616	47,7237343160260	29,1415662914923
-5	8339,8500028846	833,9850002884620	83,3992831782373	41,7386499939130	25,241690690463
s\q	-2	-1	2	3	4
-9	28,9721665641163	17,1279565488498	-8,00131994066013	-12,842007594145	17,3144916150139
-8	25,9721694350180	15,1282964623921	-6,89281781210455	-11,0565114281279	14,9492105119026
-7	22,9726305513755	13,1397431873888	-7,1743846496330	-11,8486371713885	16,3006668669029
-6	19,9924906771515	11,2554667845384	-7,2269439767368	-11,7732733141619	16,1019252673932
-5	17,2383839289431	9,73221230945062	-5,21474816521131	-8,02106858932097	10,7226335102792
s\q	5	10	100	1000	
-9	-21,6879899623269	-43,398489021967	-433,985000288462	-4.339,85000288462	
-8	-18,7508142691795	-37,5487772959962	-375,488750216346	-3.754,88750216346	
-7	-20,6329886231373	-41,6871762344011	-416,992500144231	-4169,92500144231	
-6	-20,3179753625554	-40,9122097376787	-409,1922489441030	-4091,922489441030	
-5	-13,4075339572461	-26,8163851045824	-268,1638520132820	-2681,6385201328300	

Tabla 12. Valores de $\text{Log}_2 Z$ y $\text{Log}_2 s$ para algunos q.

La figura 19 muestra la representación gráfica de los resultados obtenidos, se eliminaron las líneas para $q = -1000$, -100 , 100 y 1000 para poder apreciar mejor el comportamiento de los demás:

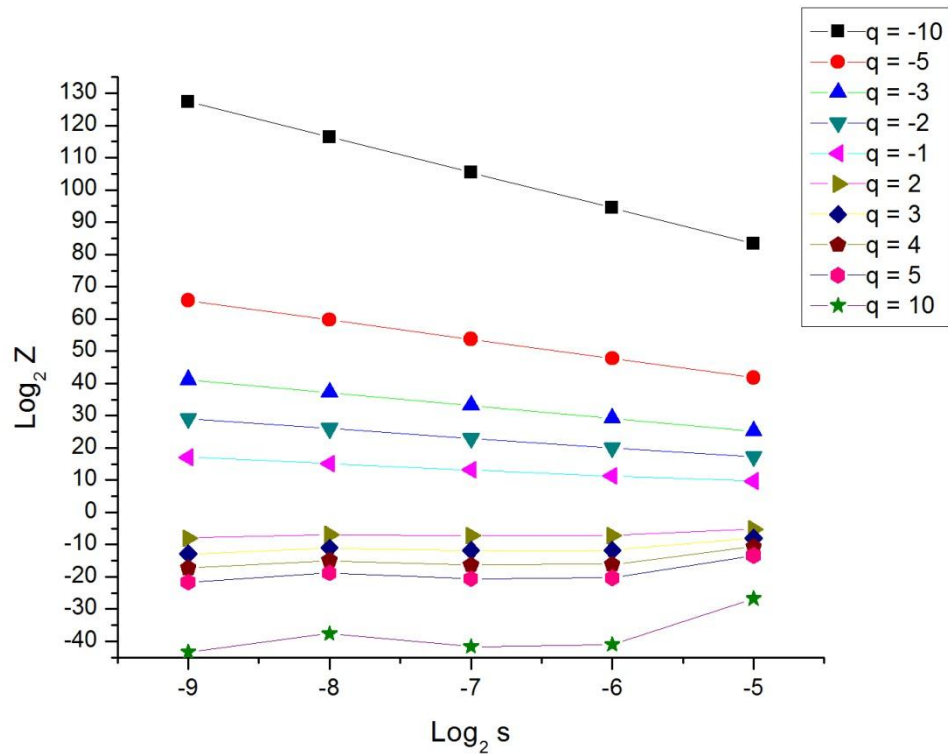


Figura 19. Gráfica de $\text{Log}_2 Z$ Vs $\text{Log}_2 s$ para algunos q .

De la gráfica anterior se hace el proceso de mínimos cuadrados para encontrar la mejor línea y se utiliza la relación siguiente, obtenida de la ecuación 22, para hallar los valores de $\tau(q)$ que no son más que estas pendientes:

$$\log_2 Z \approx \tau(q) \log_2 s + C \quad (36)$$

Y reemplazando en la ecuación 37:

$$D(q) = \frac{\tau(q)}{(q - 1)}$$

Se obtiene los valores de $D(q)$. Ambos valores calculados se pueden apreciar en la tabla 13:

q	-1000	-100	-10	-5	-3	-2	-1
$\tau(q)=$	-1001	-101	-11	-5,997	-3,9792	-2,9447	-1,8664
$D(q)=$	1	1	1	0,995	0,9948	0,9816	0,9332
q	2	3	4	5	10	100	1000
$t(q)=$	0,55239	0,8925	1,2031	1,4994	2,9801	29,794	297,94
$D(q)=$	0,55239	0,4463	0,401	0,3749	0,3311	0,3009	0,3009

Tabla 13. Valores de $D(q)$ y $\tau(q)$ para algunos valores de q .

Se pueden apreciar gráficamente en las figuras 20 y 21:

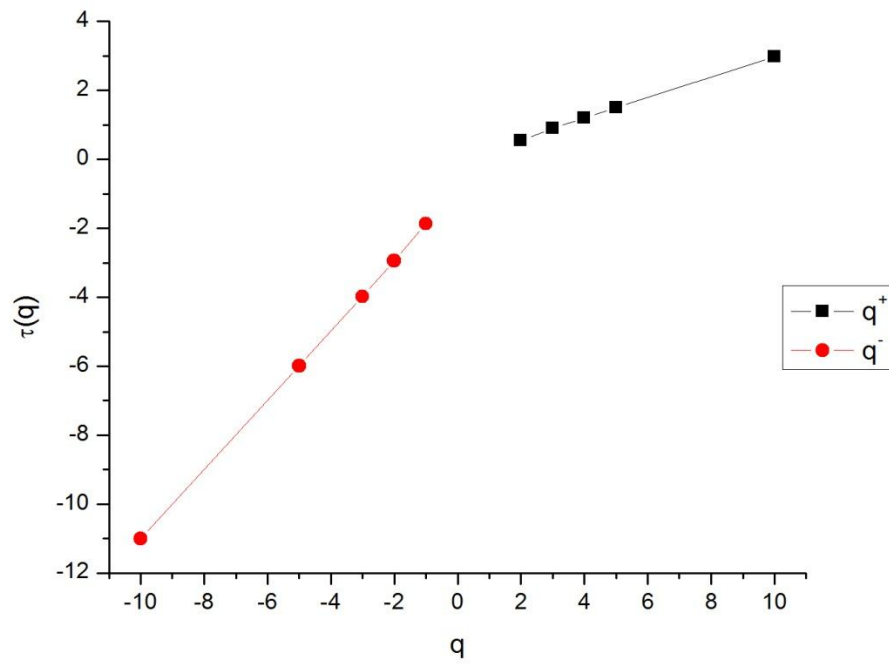


Figura 20. Representación gráfica de los valores de $\tau(q)$ hallados.

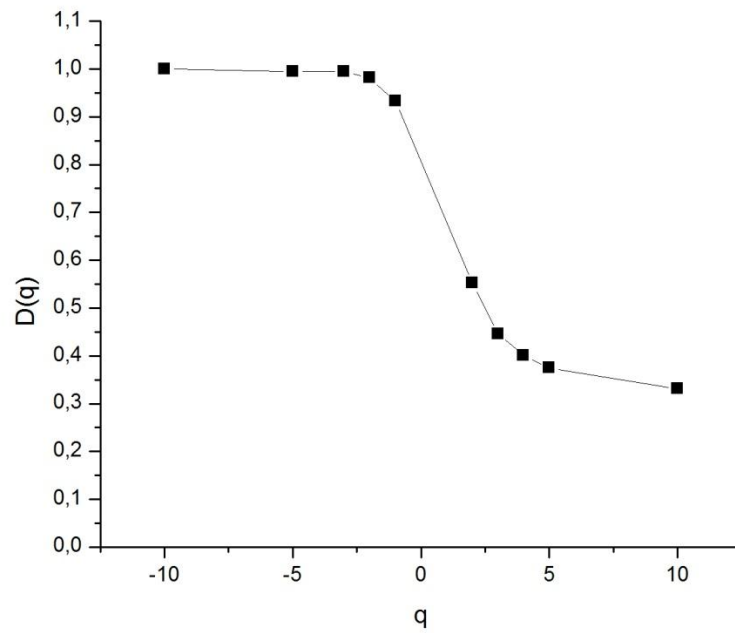


Figura 21. Representación gráfica de los valores de $D(q)$ hallados

4.3. ANÁLISIS FINAL

El análisis de los resultados de este trabajo va a seguir el orden en que se propuso en los objetivos específicos para ir aclarando cada uno, y después se hará un análisis general de lo obtenido.

En primer lugar se puede ver que como proceso analítico para transformar una curva tipo escalera del diablo el mejor proceso es el de la wavelet discreta Haar que sólo demanda de sumas y restas con lo que se puede llevar a cabo casi a mano, o sea, facilitando bastante este proceso. Al elegir 512 datos de la curva se limitó la cantidad de escalas en las que se podía trabajar, pero esto no impidió que se obtuviera un resultado coherente con la teoría. Además se eliminó la necesidad de tener que hallar los máximos locales de la wavelet resultantes pues la transformada Haar discreta sólo arrojó máximos.

En segundo lugar se observa que de los datos no nulos obtenidos de las transformadas wavelet se puede calcular el valor de la función de partición que es la pieza fundamental del análisis multifractal, que es finalmente lo que nos indica si existen índices bioinformáticos, es decir, si hay multifractalidad hay información. Como se trató de utilizar una representación lo más cercana a la realidad de la proteína a partir de la simulación con una función escalera del diablo se espera que este resultado constataste que la proteína tiene una forma lógica y que guarda información de una manera que se espera descubrir muy pronto. Para hacer la función escalera del diablo cercana a una proteína real se utilizaron cortes del polvo de cantor diferentes al tradicional $1/3$ y cortes del eje y diferentes al tamaño del cantor.

En tercer lugar los resultados obtenidos a partir de un proceso sencillo de promediar valores en escalas cada vez más grandes y hechos a mano sin el uso siquiera de la calculadora muestra que pese a la complejidad del concepto de multifractalidad es posible de manera analítica y muy sencilla hallarla en señales que se puedan discretizar. Si se ven las figuras 20 y 21 se puede observar que son muy cercanas a los que la teoría plantea que es el comportamiento de un sistema multifractal. De la gráfica 21 en especial se puede ver que la diferencia entre el valor al que tiende $D(q)$ para q muy negativos y q muy positivos conocida como fuerza espectral se obtiene un

resultado de entre 6,7 y 7 que es muy cercano al valor teórico de 6,3 esperado para la escalera del diablo tradicional. Recordando el teorema la información de Shannon que dice que si se discretiza una señal de tal forma que la frecuencia de muestreo sea dos veces la frecuencia más alta no se perderá información al reconstruirla. Se puede ver la razón por la que a pesar del proceso sucesivo de promediar las wavelets de escala cada vez más grande aún arrojaban información sobre la multifractalidad, pues el intervalo más pequeño en la escalera del diablo utilizada en este trabajo era de $1/256$ y es por esto que se eligieron intervalos de $1/512$.

Finalmente y para centrar los resultados del trabajo se puede decir que: Al utilizar un proceso muy sencillo de discretizar una señal que representa una proteína artificial, transformarla sacando promedios y elevar a la q los resultados no nulos de los residuos, se pudo constatar que esta tiene características multifractales y que por lo tanto guarda información, es decir, posee patrones bioinformáticos.

5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

5.1 CONCLUSIONES

Conclusión 1

Se puede analíticamente transformar con una wavelet una función de tipo cantoriana, pero es la wavelet discreta más fácil de manejar que la continua por la no necesidad de hallar los máximos locales.

Conclusión 2

Los valores de la función de partición calculados a partir de las wavelets resultantes arrojaron información del carácter multifractal de la proteína artificial, o sea, de que posee patrones bioinformáticos.

Conclusión 3

Es posible analíticamente calcular de manera sencilla la multifractalidad de una señal o un sistema.

Conclusión 4

La fuerza espectral del análisis de $D(q)$ indicaría el soporte escalar de la función, es decir, hasta que zoom se podrían ver las regularidades de esta.

Conclusión 5

El análisis wavelet es una herramienta útil para encontrar factores bioinformáticos en la secuencia de aminoácidos de una proteína.

5.2 PERSPECTIVAS

Este trabajo se enmarca en una línea de investigación interdisciplinar como es la bioinformática, por lo que existen diferentes perspectivas en las que la continuación en la investigación de este tema tendría un impacto importante como son:

- La determinación de las funciones de una nueva proteína a partir de su secuencia.
- La solución al problema del plegamiento de las proteínas.
- La creación de nanobots a partir de proteínas hechas en laboratorio.
- La creación de nuevos fármacos a partir de proteínas simuladas en laboratorio.

Entre muchas otras posibilidades en el futuro.

6. BIBLIOGRAFÍA GENERAL

- [0] Jimeno, Antonio; Ballesteros, Manuel; Ugedo, Luis. *Biología*. Fuenlabrada: Santillana, 1997.
- [1] HINESTROZA, Doris, *Cursillo Introducción a las Wavelets*, Univalle, Cali, 2009.
- [2] MALLAT, Sthéphane, *A Wavelet Tour of Signal Processing*, Academic Press, 3rd edition, Burlington, 2009.
- [3] <http://www.seriefourier.com.ar/>
- [4] STUART, Robert, *Introducción al Análisis de Fourier*, Serie Manuales Uteha. Seccion 1 Ciencias Matematicas (192), Uteha, Juárez, 1965.
- [5] HERNADEZ, Marianito, *Análisis Comparativo de Algoritmos para Reducción de Ruido en Señales Utilizando Wavelets*, Tesis, Universidad de las Américas Puebla, Cholula, 2003.
- [6] LUGO, Jorge, SAMPALLO, Guillermo, GONZÁLES, Arturo, *Detección de Zonas de Diferentes Texturas Usando Análisis de Multiresolución*, <http://www1.unne.edu.ar/cyt/exactas/e-010.pdf>, Corrientes.
- [7] MATHEWS, Christopher K., VAN HOLDE, Kensal Edward, AHERN, Kevin G., *Bioquímica*,: Addison - Wesley, España, 2002.
- [8] MORENO YANES, José Antonio, *Aminoácidos, Péptidos y Proteínas: Teoría y Problemas*, Parte de Conceptos Fundamentales en Bioquímica, Espasande Editores, Caracas, 1986.
- [9] GUIGÓ, Roderic, *La difusa frontera entre la biología y computación*, en *Anthropos: pensamiento y computación, inversiones técnicas y dimensión ética*, n° 214, págs. 131 – 133, Anthropos editorial, España, enero – marzo de 2007.
- [10] LA HOZ-BELTRÁ, Rafael, *Bioinformática*, Ediciones Díaz de Santos, España, 2004.
- [11] LIÓ, Pietro, *Wavelets in bioinformatics and computational biology: state of art and perspectives*, en *Bioinformatics Review*, vol 19, n°1, pag 2 – 9, Oxford Journals, Reino Unido, 2003.

- [12] Departamento de matemática Aplicada y estadística <http://www.dmae.upm.es/cursosfractales/capitulo1/2.html>, Universidad Politecnica de Madrid.
- [13] SOLÉ, Ricard, MANRUBIA, Susanna, *Orden y caos en sistemas complejos*, Ediciones UPC, Cataluña, 1993.
- [14] Geometría Fractal, <http://www.geometriafractal.com/protagonistes.htm>.
- [15] La naturaleza de los fractales, *¿Qué es un fractal?*, http://www.fractovia.org/art/es/what_es1.shtml, 2007.
- [16] FALCONER, Kenneth, *Fractal Geometry*, John Wiley & sons Ltd, EEUU, 1990.
- [17] WALKER, James, *A Primer on Wavelets and their Scientific Applications*, Chapman & Hall\CRC, 1999.

OTRA BIBLIOGRAFÍA REVISADA

APOSTOL, Tom M., *Análisis Matemático*, Segunda Edición, Editorial Reverté S.A., España, 1989.

GÓMEZ-MORENO C., Carlos, SANCHO S., Javier, *Estructura de proteínas*, Editorial Ariel S.A., España, 2003.

LIÒ, Pietro, VANNUCCI, Marina, *Wavelet change-point prediction of transmembrane proteins*, in Bioinformatics, Volume 16, N° 4, USA, 2000, Pages 376 – 382.

TAKEUCHI, Yu, *Integral de Lebesgue*, Universidad Nacional de Colombia-Departamento de Matemáticas, Colombia, 1970.

TSIGELNY, Igor F., *Protein Prediction: Bioinformatic Approach*, Part of IUL Biotechnology Series, International University Line, USA, 2002.

UNWIN, Nigel, HENDERSON, Richard, *The Structure of Proteins in Biological Membranes*, in Scientific American, Volume 250, N° 2, USA, February 1984, Pages 78 – 94.