

Volume 91, 2020

## Corpo Editorial

**Sandra Mara Cardoso Malta (Editor Chefe)**

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC  
Petrópolis, RJ, Brasil

**Eduardo V. O. Teixeira (Editor Executivo)**

University of Central Florida - UCF  
Orlando, FL, EUA

**Lilian Markenzon**

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ  
Rio de Janeiro, RJ, Brasil

**Marcelo Sobottka**

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC  
Florianópolis, SC, Brasil

**Paulo F. de Arruda Mancera**

Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita - UNESP  
Botucatu, SP, Brasil

**Sandra Augusta Santos**

Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP  
Campinas, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC em 2003, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa a publicar, também, livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o MikTeX versão 2.9)**, as **figuras em eps** e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja todos os títulos publicados nesta série na página  
<https://proceedings.science/notas-sbmac>

# Geometria de Distâncias: aspectos teóricos e computacionais

Douglas Soares Gonçalves  
douglas@mtm.ufsc.br

Departamento de Matemática  
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas  
Universidade Federal de Santa Catarina



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil  
2020

Coordenação Editorial: Mateus Bernardes

Coordenação Editorial da Série: Sandra M. C. Malta

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2020 by Douglas S. Gonçalves. Direitos reservados, 2020 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

**Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP**  
**Bibliotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner**

Gonçalves, Douglas S.

Geometria de Distâncias: aspectos teóricos e computacionais  
São Carlos, SP : SBMAC, 2020, 106 p., 21,5 cm - (Notas em  
Matemática Aplicada; v. 91)

ISBN 978-65-86388-03-9 e-ISBN 978-65-86388-02-2

1. Geometria de Distâncias 2. Determinantes de Cayley-Menger  
3. Matrizes de Distâncias Euclidianas 4. Rigidez de grafos  
5. Algoritmos de reconstrução sequencial  
IV. Título. V. Série

CDD - 51

A meus pais, Carlos e Rosa,  
e a meus irmãos Diógenes e Danilo.



# Agradecimentos

Sou grato ao Prof. Carlile Lavor por ter me apresentado a área de Geometria de Distâncias e pelo constante incentivo e parceria.

Agradeço aos professores Antonio Mucherino e Leo Liberti pela colaboração nos últimos anos, e pela hospitalidade durante minhas visitas a Université de Rennes 1, em 2013 e a École Polytechnique em 2020, respectivamente.

A principal motivação deste texto para as Notas em Matemática Aplicada da SBMAC, sem dúvidas, vem do trabalho realizado nos últimos anos com alunos de iniciação científica e mestrado. Deixo aqui meus agradecimentos a: Bruna Trajano, Phillip Henry Mettrau, Fernando Correia, Eliane França, Letícia Figueredo de Carvalho, Gustavo Café e Vinícius Cerutti, pelo interesse e dedicação em seus estudos sobre diversos temas relacionados a Geometria de Distâncias.

Também agradeço ao CNPq pelo apoio a pesquisa e ao programa CAPES/Print que possibilitou minha visita a École Polytechnique, durante o primeiro semestre de 2020, viabilizando a conclusão deste livro-texto.



# Conteúdo

<b>Prefácio</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 O problema fundamental . . . . .	1
1.2 Sistemas não-lineares e quadrados mínimos . . . . .	3
1.3 Complexidade e Classes especiais do PGD . . . . .	6
1.4 Aplicações . . . . .	10
1.4.1 Sincronização de relógios . . . . .	10
1.4.2 Rede de sensores . . . . .	10
1.4.3 Estruturas de proteínas . . . . .	11
1.4.4 Redução de dimensionalidade . . . . .	12
<b>2 Determinantes de Cayley-Menger</b>	<b>15</b>
2.1 Definição e exemplos . . . . .	15
2.2 Determinantes e volumes orientados . . . . .	21
2.3 Condições necessárias e suficientes . . . . .	24
<b>3 Matrizes de Distâncias Euclidianas</b>	<b>29</b>
3.1 Definição . . . . .	29
3.2 Matriz de Gram . . . . .	30
3.3 Propriedades de uma matriz EDM . . . . .	31
3.4 Teorema de Schoenberg . . . . .	33
3.5 Realização de grafos completos . . . . .	34
3.5.1 Dados com ruído . . . . .	35
3.6 Completamento de EDMs . . . . .	38
<b>4 Rigidez de grafos e estruturas</b>	<b>41</b>
4.1 Rigidez de estruturas . . . . .	41
4.1.1 Matriz de rigidez . . . . .	43
4.1.2 Estruturas Genéricas . . . . .	47
4.2 Rigidez de grafos . . . . .	48
<b>5 Algoritmos de reconstrução sequencial</b>	<b>51</b>
5.1 Distâncias exatas, resolução em tempo linear . . . . .	51
5.2 Uma abordagem combinatória para o PGD . . . . .	53

5.2.1	Branch-and-prune . . . . .	55
5.3	Algoritmo usando EDMs . . . . .	58
5.4	Qualidade da solução encontrada . . . . .	60
5.4.1	LDE e MDE . . . . .	60
5.4.2	RMSD . . . . .	61
5.5	Algoritmo de ordenação . . . . .	62
5.6	Um estudo de caso . . . . .	64
<b>6</b>	<b>Problemas em aberto</b> . . . . .	<b>69</b>
6.1	PGD intervalar . . . . .	69
6.2	PGD não-rotulado . . . . .	71
6.3	PGD dinâmico . . . . .	73
6.4	PGD em Ciência de Dados . . . . .	75





# Prefácio

Na história da matemática, a Geometria de Distâncias aparece em diferentes momentos [63, 6, 7]: o Teorema de Heron de Alexandria (50AC), sobre a área do triângulo em função de seus lados, que foi posteriormente generalizado por Cayley (1841) para volumes de simplexes em dimensão arbitrária; a conjectura de Euler sobre rigidez de poliedros (1776), seguida pelo Teorema de Cauchy (1813) para poliedros convexos e o contra-exemplo de Connelly para poliedros não-convexos (1978); o tratado sobre o tema organizado por Menger (1931), o resultado de Gödel (1933) sobre realização de simplexes na esfera e o Teorema de Schoenberg (1935) relacionando matrizes de distâncias e matrizes positivas semidefinidas são alguns destes marcos.

Na maior parte deste passado da Geometria de Distâncias, o que hoje chamamos de problema fundamental (Problema de Geometria de Distâncias, ou PGD) apareceu apenas implicitamente e restrito a grafos completos. Em outras palavras, buscava-se a correspondência entre distâncias e pontos apenas quando *todas* as distâncias entre pares de pontos eram conhecidas. Embora existam traços da importância do PGD no passado, somente muito tempo depois, provavelmente em decorrência do avanço dos computadores, é que este problema central foi formalizado pela primeira vez no trabalho de Yemini [114].

O PGD é um modelo abstrato adequado em diversas aplicações em ciências e engenharias, onde é possível obter distâncias entre objetos adjacentes, com a finalidade de determinar as posições de tais objetos. Dentre estas aplicações, destacamos o problema de sincronização de relógios [103], a localização em rede de sensores [114, 18, 104, 55, 9], a determinação de estruturas de proteínas a partir de dados experimentais [51, 112, 71, 82, 5, 16], algumas aplicações em processamento de sinais [31] e em ciência de dados [20, 29, 76], além da forte relação com rigidez de grafos e estruturas [58, 41, 11, 12, 25, 54, 3].

Nestas notas, o objetivo é apresentar os conceitos teóricos fundamentais em Geometria de Distâncias, acompanhados de considerações práticas e/ou computacionais, sempre que possível. Sendo um texto voltado a um minicurso no Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, cuidado foi tomado para que as definições sejam apresentadas de forma clara e os principais conceitos ilustrados por meio de exemplos e aprofundados em exercícios.

Apesar de existirem outros livros introdutórios sobre o tema [62, 77, 65, 70, 60], inclusive um deles [62] publicado pela SBMAC no CNMAC 2014, o tratamento aqui apresentado é diferente dos anteriores e tem o objetivo de servir como referência para um curso de final de graduação ou início de mestrado, de modo a fornecer o conteúdo necessário ao aluno e/ou professor/pesquisador interessado para iniciar seus estudos nessa fascinante área que é a Geometria de Distâncias, preenchendo de alguma forma a carência deste tipo de material em língua portuguesa.

Como pré-requisitos para o bom entendimento do texto, o leitor deve estar familiarizado com conceitos de geometria analítica, álgebra linear e cálculo, além de ter algum conhecimento sobre teoria de grafos.

O texto está organizado em seis capítulos. O Capítulo 1 traz a definição formal do problema fundamental em Geometria de Distâncias (PGD), bem como comentários sobre a dificuldade deste problema, classes especiais e aplicações. A questão da existência de soluções para o PGD é apresentada no Capítulo 2 através do conceito de determinantes de Cayley-Menger. Matrizes de distâncias Euclidianas, que são uma importante ferramenta, tanto teórica quanto prática, são apresentadas no Capítulo 3. A questão da unicidade de soluções do PGD está associada à rigidez de grafos e estruturas, que é o assunto do Capítulo 4. O Capítulo 5 apresenta os algoritmos de reconstrução geométrica sequencial, fundamentados na teoria apresentada nos capítulos anteriores. Ainda assim, o leitor interessado unicamente nos métodos de resolução pode, após a leitura do primeiro capítulo, seguir diretamente para o Capítulo 5, retornando a capítulos anteriores para detalhes teóricos e/ou de implementação. O texto é encerrado no Capítulo 6 que traz problemas recentes e desafios na área de Geometria de Distâncias que podem servir de tema para pesquisas futuras.

Douglas S. Gonçalves

*Florianópolis, Paris  
2019–2020*





# Capítulo 1

## Introdução

Dado um conjunto de  $n$  pontos em  $\mathbb{R}^k$ , de posições  $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}^k$  conhecidas, é uma tarefa simples determinar a distância Euclidiana  $\|x_i - x_j\|$  entre qualquer par de pontos  $i$  e  $j$  (ao longo do texto,  $\|\cdot\|$  denotará a norma Euclidiana e  $x_i \in \mathbb{R}^k$  um vetor coluna de  $k$  componentes). Por argumentos combinatórios, não é difícil verificar que o total de distâncias entre estes  $n$  pontos é de  $n(n-1)/2$ .

Agora, suponha que nos é dada uma lista de distâncias  $\mathcal{D} = \{d_{ij}\}_{ij \in E}$  entre *alguns* destes  $n(n-1)/2$  pares de pontos e que precisamos encontrar  $n$  vetores  $x_i$  em  $\mathbb{R}^k$  tais que as distâncias realizadas  $\|x_i - x_j\|$  coincidam com as distâncias  $d_{ij}$  nesta lista  $\mathcal{D}$ . A este problema inverso damos o nome de *Problema Fundamental em Geometria de Distâncias*.

Este problema encontra aplicações em diversas áreas, como em localização em rede de sensores [18, 55], determinação de estruturas de proteínas [28, 80, 32] e nanoestruturas [16], além de estar relacionado a problemas em ciência de dados [76], como redução de dimensionalidade [107, 29].

Discutiremos brevemente tais aplicações ao final deste capítulo. Antes, apresentaremos alguns aspectos teóricos.

### 1.1 O problema fundamental

Dado um conjunto  $\mathcal{D}$  de distâncias entre pares de pontos, o problema de Geometria de Distâncias (PGD) consiste em encontrar, quando possível, as posições desses pontos em um dado espaço Euclidiano  $k$ -dimensional de modo que as distâncias em  $\mathcal{D}$  sejam satisfeitas.

Podemos formalizar o problema através da realização de grafos. Seja  $\mathcal{G} = (V, E, d)$  um grafo simples, conexo, não-orientado, em que  $\{u, v\} \in E$  somente se a distância entre  $u \in V$  e  $v \in V$  é conhecida, e  $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$  atribui a uma certa aresta a distância correspondente.

**Definição 1.1** (PGD). *Dado  $\mathcal{G} = (V, E, d)$  e um inteiro positivo  $k$ , o Problema Fundamental de Geometria de Distâncias consiste em determinar*

(quando possível), uma aplicação  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ , tal que

$$\|x_u - x_v\| = d_{uv}, \quad \forall \{u, v\} \in E. \quad (1.1.1)$$

Na definição acima, usamos  $d_{uv}$  para denotar  $d(\{u, v\})$ , a distância entre os vértices  $u$  e  $v$ , e  $x_u = x(u)$  e  $x_v = x(v)$  para denotar os respectivos vetores posição. Uma solução  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$  para o PGD é chamada de *realização*. Assim, encontrar uma solução para o PGD (quando possível) consiste em associar cada vértice em  $V$  a um ponto em  $\mathbb{R}^k$  de modo que as equações (1.1.1) sejam satisfeitas.

**Exemplo 1.1.** *Suponha que as distâncias entre 3 objetos são dadas por  $d_{12} = d_{13} = d_{23} = 1$ , e que queremos saber se existe realização em  $\mathbb{R}^2$  para tal conjunto de distâncias. Não é difícil imaginar que posicionando os objetos como vértices de um triângulo equilátero, obtemos uma realização em duas dimensões. Por exemplo,  $x_1 = (0, 0)^T$ ,  $x_2 = (1, 0)^T$  e  $x_3 = (1/2, \sqrt{3}/2)^T$  formam uma possível solução para o sistema de equações (1.1.1).*

É importante notar que, dada uma realização  $x$ , é possível encontrar outras soluções para o PGD através de translações, rotações ou reflexões totais. Estas transformações são chamadas de *isometrias*. Se uma realização é obtida a partir de outra por meio de isometrias, dizemos que tais realizações são *congruentes*<sup>1</sup>.

**Definição 1.2.** *Dizemos que uma aplicação  $T : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^k$  é uma isometria se*

$$\|T(x) - T(y)\| = \|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^k.$$

**Exercício 1.1.** *Encontre uma outra realização para o PGD do Exemplo 1.1 na qual as coordenadas de cada ponto são não positivas.*

**Exercício 1.2.** *Seja  $Q \in \mathbb{R}^{k \times k}$  uma matriz ortogonal.*

a) *Prove que  $\|Qx\| = \|x\|, \forall x \in \mathbb{R}^k$ .*

b) *Mostre que  $Q$  define uma isometria.*

c) *Dê exemplos de matrizes ortogonais  $Q$  que representam rotações e reflexões.*

**Exercício 1.3.** *Toda isometria é uma transformação linear?*

**Exercício 1.4.** *É possível encontrar soluções distintas para o sistema (1.1.1) que não sejam congruentes?*

---

<sup>1</sup>O conceito de congruência de realizações/estruturas será discutido em mais detalhes no Capítulo 4.

## 1.2 Sistemas não-lineares e quadrados mínimos

À primeira vista, o problema (1.1.1) pode ser considerado como um sistema de equações não-lineares:

$$\|x_u - x_v\|^2 = d_{u,v}^2, \quad \forall \{u, v\} \in E. \quad (1.2.2)$$

Seja  $m = |\mathcal{D}| = |E|$ , i.e., o número de equações em (1.2.2), e  $n = |V|$ . Assim, se  $k$  é a dimensão de interesse, teremos  $kn$  variáveis em nosso problema. Ao longo do texto, organizaremos essas variáveis em uma matriz  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ , denotando as colunas por  $x_i$ .

O número de variáveis pode ser reduzido, removendo os graus de liberdade de translação e rotação (já que tais operações preservam as distâncias). Se existe um clique<sup>2</sup> de  $k$  pontos, então tais pontos podem ser previamente fixados de modo a evitar soluções congruentes módulo rotação e translação. Por exemplo, podemos fixar algumas variáveis (coordenadas de certos pontos) iguais a zero:

$$\begin{aligned} x_1 &= (0, 0, 0, \dots, 0) \\ x_2 &= (*, 0, 0, \dots, 0) \\ x_3 &= (*, *, 0, \dots, 0) \\ &\vdots \\ x_k &= (*, *, *, \dots, 0) \\ x_{k+1} &= (*, *, *, \dots, *) \\ &\vdots \\ x_n &= (*, *, *, \dots, *). \end{aligned}$$

Desse modo, ficamos com um número de variáveis igual a:

$$k(n - k) + \binom{k}{2}.$$

Em geral, em várias aplicações, temos que  $m > kn$ , isto é, temos mais equações que variáveis, e portanto o sistema (1.2.2) é sobredeterminado. Tal sistema sobredeterminado pode ser reformulado como um problema de quadrados mínimos não-linear:

$$\min_X f(X) = \frac{1}{2} \sum_{\{u,v\} \in E} (\|x_u - x_v\|^2 - d_{u,v}^2)^2. \quad (1.2.3)$$

O problema (1.2.3) é um problema de otimização *não-convexa*, já que a função objetivo  $f(X)$  é não-convexa, e para o qual  $X^*$  é minimizador global se e somente se  $f(X^*) = 0$ .

---

<sup>2</sup>Um subgrafo completo de  $\mathcal{G}$ .

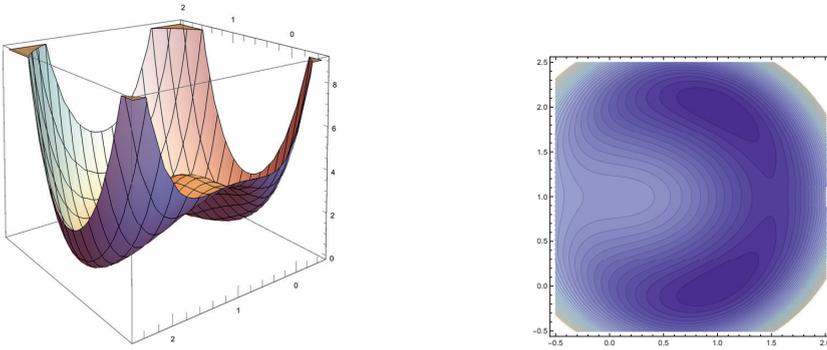


Figura 1.1: Gráfico e curvas de níveis da função objetivo do Exemplo 1.2.

Uma das razões para a não convexidade de  $f(X)$  é que distintas soluções para o problema podem ser obtidas por meio de reflexões parciais de uma realização conhecida. Por exemplo, considere  $k = 3$ . Supondo que tenhamos um clique entre 3 vértices, tais vértices podem ser fixados, para remover graus de liberdade de translação e rotação, e reduzir o número de variáveis de  $3n$  para  $3n - 6$ . Estes três vértices fixados, definem um plano  $P_0$ , e se  $X$  é uma solução para o problema, então  $X'$ , uma reflexão de  $X$  em torno  $P_0$ , também será uma solução.

**Exemplo 1.2.** Considere os seguintes pontos em  $\mathbb{R}^2$ :

$$x_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_B = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_C = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

e a seguinte função a ser minimizada:

$$f(x) = (\|x_B - x\|^2 - 2)^2 + (\|x_C - x\|^2 - 1)^2.$$

Isto é, queremos encontrar  $x \in \mathbb{R}^2$  tal que  $\|x_B - x\| = \sqrt{2}$  e  $\|x_C - x\| = 1$ . A Figura 1.1 apresenta o gráfico da função bem como suas curvas de nível.

A não convexidade da função fica evidente no gráfico. Analisando as curvas de nível, é possível classificar os pontos estacionários de  $f(x)$ . Os pontos

$$x_1^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_2^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix},$$

correspondem aos minimizadores globais do problema. Já os pontos

$$x^+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x' = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 1 \end{pmatrix},$$

correspondem, respectivamente, a um maximizador local e um ponto de sela.

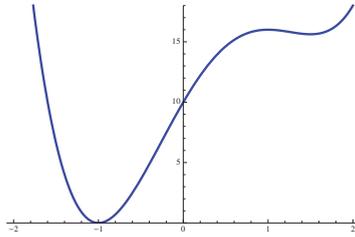


Figura 1.2: Gráfico de  $f(x)$  para o Exemplo 1.3.

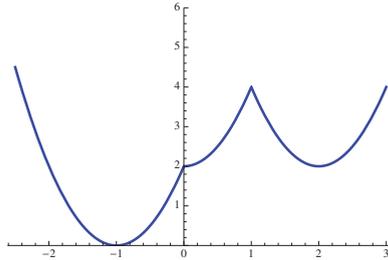


Figura 1.3: Gráfico de  $\bar{f}(x)$  da Equação (1.2.4).

Além disso, nem todo mínimo local é global, como mostra o exemplo unidimensional ( $k = 1$ ) a seguir.

**Exemplo 1.3.** Considere agora a seguinte função em  $\mathbb{R}$ :

$$f(x) = ((x - x_a) - 1)^2 + ((x - x_b) - 2)^2,$$

onde  $x_a = 0$  e  $x_b = 1$ . Note que queremos encontrar  $x \in \mathbb{R}$  cuja distância em relação a zero é um e a distância em relação a um é dois. A Figura 1.2 mostra o gráfico da função.

Claramente, o ponto  $x' = 3/2$ , é um minimizador local, não global de nosso problema.

Mesmo para a função alternativa

$$\bar{f}(x) = (|x - x_a| - 1)^2 + (|x - x_b| - 2)^2, \quad (1.2.4)$$

que não envolve o quadrado das distâncias, também notamos o problema dos mínimos locais, conforme mostra a Figura 1.3.

No entanto, nos dois exemplos anteriores, não consideramos exatamente (1.2.3), mas uma versão *restrita* deste problema de otimização na qual algumas posições ( $x_a$  e  $x_b$ , ou  $X_B$  e  $X_C$ ) estão fixadas. Se substituirmos no

Exemplo 1.3,  $x_a$  por uma variável  $y$  e  $x_b$  por uma variável  $z$  e, consequentemente  $f(x)$  por  $f(x, y, z)$ , então  $\nabla f(3/2, 0, 1) = (0, -15/2, 15/2)$ , indicando que  $(3/2, 0, 1)$  não é nem ponto estacionário.

A função

$$\sigma(X) = \sum_{i < j} (\|x_i - x_j\| - d_{ij})^2 \quad (1.2.5)$$

é conhecida na literatura de redução de dimensionalidade [115, 29] como *STRESS*, enquanto que a função

$$s(X) = \sum_{i < j} (\|x_i - x_j\|^2 - d_{ij}^2)^2, \quad (1.2.6)$$

é chamada de *SSTRESS* (Smooth STRESS). Em [109, 115], é apresentada uma análise mais detalhada sobre minimizadores locais e globais, das funções STRESS e SSTRESS *sob certas condições*. Porém, a existência de minimizadores não-globais de (1.2.3) no caso geral (sem fixar/restringir algumas variáveis) ainda é um problema em aberto. Para mais detalhes, veja [86] e [96, Capítulo 3, Seção 3.5].

### 1.3 Complexidade e Classes especiais do PGD

Acabamos de ver que, ao tentar reformular o PGD como um problema de otimização, chegamos a um problema de otimização não-convexa, já que a função objetivo de (1.2.3) é não-convexa e pode apresentar mínimos locais, não-globais, caso alguns graus de liberdade sejam removidos. Logo, é de se esperar que, em geral, o problema de geometria de distâncias seja um problema difícil. Com efeito, foi provado em [100] que o PGD é NP-difícil [38].

No entanto, é comum que PGDs relacionados a problemas reais tenham uma estrutura especial. Ao longo do texto, veremos que duas classes especiais do PGD admitem métodos eficientes de resolução:

1. PGDs em que  $\mathcal{G}$  é completo: nestes problemas, todas as distâncias estão disponíveis, i.e.,  $|E| = n(n-1)/2$  em que  $n = |V|$ ;
2. PGDs em que  $\mathcal{G}$  admite uma  $(k+1)$ -lateração: embora nem todas as distâncias estejam disponíveis, é possível reordenar os vértices de  $\mathcal{G}$  de modo que os  $k+1$  primeiros formem um clique (subgrafo completo) e para os demais vértices, há pelo menos  $k+1$  distâncias em relação a vértices predecessores.

A realização de grafos completos será tratada em detalhes no Capítulo 3, enquanto que algoritmos sequenciais para os grafos de  $(k+1)$ -lateração serão discutidos no Capítulo 5. Veremos que para estas classes, a solução (quando existente) é única, o que é explicado pela teoria de rigidez de grafos e estruturas do Capítulo 4. A questão da existência será discutida em detalhes no Capítulo 2.

Por enquanto, apresentaremos apenas exemplos destas classes de PGDs em  $\mathbb{R}^2$  e  $\mathbb{R}^3$ , e como ideias de resolução passam por problemas geométricos como o de intersecção de esferas [26, 85].

**Exemplo 1.4.** *Considere o grafo formado pelo conjunto de vértices  $V = \{a, b, c\}$  e seu devido conjunto de arestas  $E = \{\{a, b\}, \{a, c\}, \{b, c\}\}$  com pesos  $d_{ab} = 1$ ,  $d_{ac} = 1$  e  $d_{bc} = \sqrt{2}$ , e suponha que buscamos uma realização em  $\mathbb{R}^2$ .*

*Fixando  $x_a = (0, 0)$  e  $x_b = (0, 1)$ , temos o sistema*

$$\begin{aligned}\|x_c - x_a\| &= d_{ac}, \\ \|x_c - x_b\| &= d_{bc}.\end{aligned}\tag{1.3.7}$$

*Elevando as duas igualdades ao quadrado obtemos um sistema não linear*

$$\|x_c\|^2 - 2x_c \cdot x_a + \|x_a\|^2 = d_{ac}^2,\tag{1.3.8}$$

$$\|x_c\|^2 - 2x_c \cdot x_b + \|x_b\|^2 = d_{bc}^2,\tag{1.3.9}$$

onde  $x_i \cdot x_j$  denota o produto escalar

$$x_i \cdot x_j = x_i^T x_j = \sum_{\ell} (x_i)_{\ell} (x_j)_{\ell}.$$

*Subtraindo (1.3.9) de (1.3.8), temos*

$$2x_c \cdot (x_b - x_a) + \|x_a\|^2 - \|x_b\|^2 = d_{ac}^2 - d_{bc}^2,$$

$$2(x_b - x_a) \cdot x_c = d_{ac}^2 - d_{bc}^2 + \|x_b\|^2 - \|x_a\|^2.$$

*Considerando  $x_c = (x, y)$ , segue que*

$$2(0, 1) \cdot (x, y) = 1 - 2 + 1 - 0 = 0,$$

*isto é,  $y = 0$ . Substituindo este valor em (1.3.7), temos*

$$\sqrt{(x-0)^2 + (0-0)^2} = 1 \Rightarrow |x| = 1.$$

*Portanto podemos observar duas soluções para este PGD: a primeira em que  $x_a = (0, 0)$ ,  $x_b = (0, 1)$ ,  $x_c = (1, 0)$  e a segunda  $x_a = (0, 0)$ ,  $x_b = (0, 1)$ ,  $x_c = (-1, 0)$ . Note que uma é reflexão da outra sobre o eixo vertical.*

O Exemplo 1.4 é um caso particular do processo de  $k$ -lateração que será discutido no Capítulo 5, Seção 5.2, e que se baseia na seguinte proposição.

**Proposição 1.1.** *A intersecção de  $k$  esferas em  $\mathbb{R}^k$ , com centros afimemente independentes, resulta em no máximo 2 pontos.*

**Exercício 1.5.** *Provar a Proposição 1.1.*

**Exercício 1.6.** *Generalizar a Proposição 1.1 para o caso de  $k + 1$  esferas em  $\mathbb{R}^k$ .*

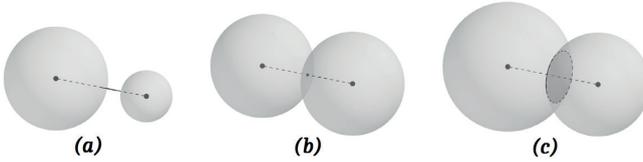


Figura 1.4: Determinação do vértice 2.

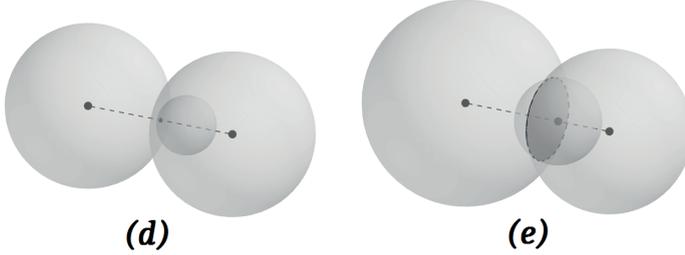


Figura 1.5: Determinação do vértice 3.

Considere agora um grafo completo  $\mathcal{G}$  com 4 vértices  $\{v_0, v_1, v_2, v_3\}$  e suponha que buscamos uma realização em  $\mathbb{R}^3$ . Denotemos as distâncias conhecidas por  $d_{01}, d_{02}, d_{03}, d_{12}, d_{13}, d_{23}$ .

Inicialmente, fixe uma aresta no espaço que possua a distância  $d_{01}$ : suas extremidades serão as posições  $x_0$  e  $x_1$  para os vértices  $v_0$  e  $v_1$ .

A partir dos centros  $x_0$  e  $x_1$ , traçamos as esferas de raios  $d_{02}$  e  $d_{12}$  respectivamente. Note que recaímos na situação do Exemplo 1.4. Analisando este problema de intersecção de esferas, temos três casos:

- (a) as esferas não se interceptam em nenhum ponto;
- (b) as esferas se interceptam em um único ponto, ou seja, são tangentes;
- (c) as esferas se cruzam tendo uma circunferência como intersecção.

Note que, na Figura 1.4, o caso (a) corresponde à intersecção vazia: isso ocorre quando as distâncias envolvidas  $\{d_{01}, d_{02}, d_{12}\}$  violam a desigualdade triangular. Neste caso,  $\mathcal{G}$  não admitiria realização em  $\mathbb{R}^3$ , tampouco em  $\mathbb{R}^k$ , para qualquer  $k$ .

No caso (b), temos os vértices  $x_0, x_1$  e  $x_2$  alinhados. Tracemos novas esferas de centros nestes pontos e raios  $d_{03}, d_{13}$  e  $d_{23}$ . Será possível localizar o vértice 3 somente quando estas três esferas se intersectarem num único ponto ou em infinitos pontos de uma circunferência como mostra a Figura 1.5.

Portanto, na Figura 1.5, tomando o ponto de intersecção do caso (d) e escolhendo um ponto qualquer da circunferência gerada no caso (e), teríamos como realização de  $\mathcal{G}$  as estruturas da Figura 1.6.

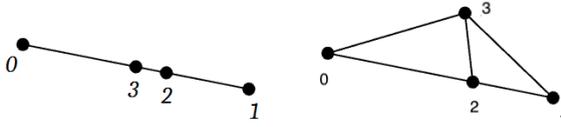


Figura 1.6: Possíveis realizações de  $\mathcal{G}$  correspondentes aos casos (d) e (e).



Figura 1.7: Determinação do vértice 4.

No caso (c), representado na Figura 1.4, tomando o vértice 2 como um ponto qualquer da circunferência da interseção das duas esferas, temos que os vértices 0, 1 e 2 estão não alinhados e, portanto, formam um triângulo.

Novamente, tracemos as esferas de centro  $x_0$ ,  $x_1$  e  $x_2$  e raios  $d_{03}$ ,  $d_{13}$  e  $d_{23}$  respectivamente. Haverá posicionamento para o vértice 3 somente quando as esferas se cruzarem num único ponto ou em dois pontos distintos. Perceba pela Figura 1.7 que, para que as esferas se cruzem num único ponto, é preciso que duas destas esferas sejam tangentes e a terceira esfera contenha o ponto de tangência: caso (f). E ainda, para que as esferas se cruzem em dois pontos distintos, as três esferas devem se cruzar não sendo tangentes duas a duas: caso (g).

Da Figura 1.7, tomando os pontos gerados no caso (f) e escolhendo um dos dois pontos da interseção das três esferas do caso (g), temos outras novas estruturas como realização do 4-clique, que podem ser visualizados, respectivamente, na Figura 1.8.

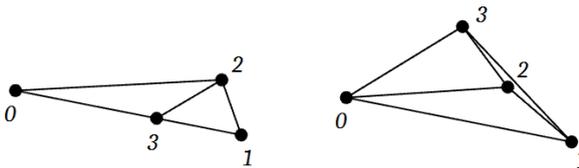


Figura 1.8: Possíveis realizações de  $\mathcal{G}$  nos casos (f) e (g).

Perceba que, somente no caso ( $g$ ), obtemos um 3-simplex<sup>3</sup> como a realização do 4-clique. É importante ressaltar que para que a construção desse 3-simplex seja possível, as distâncias devem obedecer a desigualdade triangular, isto é, todas as faces (2-simplex) que compõem este 3-simplex devem satisfazer tal condição.

Embora necessária, a validade das desigualdades triangulares não é suficiente para garantir que um conjunto de distâncias admita realização. Condições necessárias e suficientes serão apresentadas no Capítulo 2.

**Exercício 1.7.** *Dê um exemplo de um conjunto de 6 distâncias entre 4 vértices que satisfaz as desigualdades triangulares para todas as triplas de vértices, mas não admite realização em  $\mathbb{R}^k$  para  $k = 1, 2, 3$ .*

## 1.4 Aplicações

Uma das razões para o crescente interesse em Geometria de Distâncias nas últimas décadas é a diversidade de aplicações em ciências e engenharias [49, 92, 81, 31, 16]. Como já mencionamos, encontramos aplicações do PGD em: localização em rede de sensores [18, 55], determinação de estruturas de proteínas [28, 80, 32] e nanoestruturas [16], ciência de dados [76], redução de dimensionalidade [107, 29], entre outras áreas. Nesta seção, descreveremos brevemente algumas destas aplicações.

### 1.4.1 Sincronização de relógios

Neste problema é conhecida apenas a diferença no horário indicado por relógios de certos indivíduos (estes estão adiantados e/ou atrasados em relação uns aos outros) e a diferença do horário de alguns destes para um servidor central que indica a hora certa. O objetivo é determinar os possíveis horários nos relógios de cada indivíduo.

Embora não apareçam distâncias, no sentido estrito da palavra, estas podem ser empregadas para modelar a diferença (o módulo da diferença) entre os horários dos relógios. Temos então um PGD na reta, i.e., em dimensão  $k = 1$ .

**Exercício 1.8.** *O relógio de Alice está errado em 5 minutos. A diferença do relógio de Bob para o de Alice é de 7 minutos, o de Charles está 3 minutos atrasado em relação a Alice e 4 minutos adiantados em relação a Bob. Se a hora correta é 11:27, quais os horários nos relógios de Alice, Bob e Charles?*

### 1.4.2 Rede de sensores

Nesta segunda aplicação, a dimensão de interesse geralmente é  $k = 2$ . Imagine que em um determinado andar de uma empresa existam roteadores de

---

<sup>3</sup>Um  $k$ -simplex é um conjunto de  $k + 1$  pontos afimemente independentes em  $\mathbb{R}^k$ .

internet, de posição conhecida, aos quais se conectam dispositivos utilizados por funcionários, equipados com sensores. Tais sensores são capazes de se comunicar com roteadores e outros sensores dentro de um certo raio e, com base na intensidade de sinal por exemplo, é possível estimar a distância entre um determinado sensor e seus dispositivos vizinhos.

Suponha que por algum motivo, o gerente da empresa tenha interesse em determinar a posição dos dispositivos/funcionários em um dado instante de tempo. A Figura 1.9 traz um exemplo de tal situação, em que as âncoras (sensores fixos, roteadores) são representadas por nós escuros e a distância entre dispositivos vizinhos é representada por uma aresta. O círculo pontilhado representa o alcance (a vizinhança) dos sensores e roteadores.

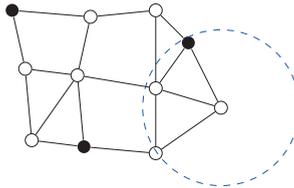


Figura 1.9: Exemplo do problema de localização de sensores em uma rede.

**Exercício 1.9.** *Proponha uma estratégia de resolução do PGD em  $\mathbb{R}^2$  associado a rede de sensores da Figura 1.9. Lembre-se de que os nós escuros correspondem a sensores de posições conhecidas e arestas indicam que a distância entre um par de sensores é conhecida. Assuma também que o raio de alcance (o raio do círculo pontilhado) é conhecido.*

### 1.4.3 Estruturas de proteínas

O cálculo da estrutura tridimensional de proteínas é um problema fundamental na área de bioinformática, com importantes aplicações na indústria farmacêutica, a exemplo do desenvolvimento de novos medicamentos. A importância do problema reside no fato de a função de uma proteína ser determinada não só por sua composição, mas também pela conformação que esta assume no interior das células [28, 65].

Aqui a dimensão de interesse é  $k = 3$  e as distâncias entre pares de átomos são obtidas de modelos teóricos e dados experimentais. Do modelo teórico para a proteína, como uma cadeia de amino-ácidos [28, 32], podemos considerar que a distâncias entre átomos separados por uma ligação covalente é conhecida, bem como o ângulo entre duas ligações covalentes consecutivas. Assim, pela lei dos cossenos, podemos deduzir a distância entre átomos separados por até duas ligações covalentes. As distâncias entre átomos separados por 3 ou mais ligações covalentes podem ser obtidas através de procedimentos experimentais como cristalografia e difração de raios-X, ou por ressonância magnética nuclear.

Em geral, o grafo associado a este problema não é completo, pois os experimentos não são capazes de fornecer todas as distâncias, mas somente aquelas entre átomos próximos no espaço.

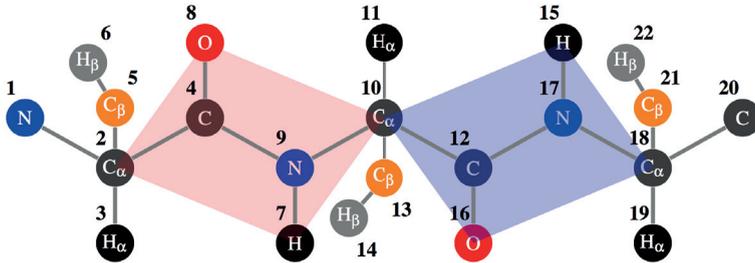


Figura 1.10: Modelo para a cadeia principal de uma proteína. As barras em cinza representam ligações covalentes.

A Figura 1.10 apresenta um modelo para a estrutura de uma proteína como uma cadeia de amino-ácidos: cada tripla  $N - C_\alpha - C$  consecutiva delimita um amino-ácido, juntamente com o oxigênio  $O$  ligado a  $C$  e o hidrogênio  $H_\alpha$  ligado a  $C_\alpha$ . O que difere um amino-ácido do outro é o chamado resíduo (ou cadeia lateral), que em nosso modelo simplificado é representado apenas pela dupla  $C_\beta, H_\beta$  (veja [113] para conhecer os 20 tipos de amino-ácido).

As seqüências  $N - C_\alpha - C$  formam a chamada *cadeia principal* (ou backbone) da proteína. Em nosso modelo, os amino-ácidos aparecem “em linha reta”, um a lado do outro, mas é comum uma proteína “se enovelar” e formar estruturas específicas como hélices, por exemplo [28, 32]. Além disso, é interessante mencionar que devido a restrições físico-químicas, algumas regiões da proteína podem ser consideradas rígidas, como os chamados planos peptídicos e os tetraedros em torno dos carbonos  $C_\alpha$ .

Explorando este modelo teórico e, assumindo que experimentos são capazes de fornecer distâncias adicionais (por exemplo, entre átomos separados por 3 ligações covalentes), é possível mostrar que o grafo resultante admite trilateração e, então, métodos sequenciais (veja Capítulo 5) podem ser empregados para a reconstrução de estruturas de proteínas.

**Exercício 1.10.** *Suponha que as distâncias entre átomos separados por até 3 ligações covalentes consecutivas são conhecidas. Verifique que a ordem (enumeração) da Figura 1.10 garante que para cada átomo  $i > 3$ , as distâncias entre  $i$  e pelo menos 3 átomos anteriores são conhecidas. Com esta informação, e aproveitando as ideias usadas para resolver os exercícios anteriores, proponha uma estratégia para posicionar os átomos da proteína.*

#### 1.4.4 Redução de dimensionalidade

Nosso último exemplo de aplicação da geometria de distâncias está relacionado a estatística e ciência de dados. No problema de redução de di-

mensionalidade linear [29], busca-se representar pontos  $x_i$  de um espaço de dimensão elevada  $\mathbb{R}^d$  por pontos  $\hat{x}_i$  em um espaço de dimensão  $k \ll d$ , de modo que alguma relação entre os pontos seja preservada.

Por exemplo, na análise de componentes principais (PCA: Principal Component Analysis), buscamos  $P \in \mathbb{R}^{k \times d}$  tal que os dados projetados  $\hat{X} = PX$  preservem a variância nos dados originais  $X$  da melhor maneira possível [29]. Se os dados originais são representados como colunas de uma matriz  $X$ , uma solução para este problema pode ser obtida pela decomposição espectral da matriz de Gram  $X^T X$  que, por sua vez, está relacionada a matrizes de distâncias Euclidianas, assunto do Capítulo 3.

Um problema um pouco mais geral é o Multidimensional Scaling (MDS). Diferente do PCA, neste problema não conhecemos explicitamente as posições dos pontos, mas sim *dissimilaridades* (ou distâncias) entre pares de pontos em um espaço  $d$ -dimensional, e buscamos novamente  $\hat{X}$  em um espaço de dimensão  $k \ll d$  tal que as dissimilaridades par-a-par sejam preservadas da melhor forma possível [20].

**Exemplo 1.5.** *A Tabela 1.1 apresenta as correlações entre crimes ocorridos em 50 estados Americanos no século passado.*

		1	2	3	4	5	6	7
assassinato	1	1.00	0.52	0.34	0.81	0.28	0.06	0.11
estupro	2	0.52	1.00	0.55	0.70	0.68	0.60	0.44
latrocínio	3	0.34	0.55	1.00	0.56	0.62	0.44	0.62
assalto	4	0.81	0.70	0.56	1.00	0.52	0.32	0.33
roubo	5	0.28	0.68	0.62	0.52	1.00	0.80	0.70
furto	6	0.06	0.60	0.44	0.32	0.80	1.00	0.55
roubo de carro	7	0.11	0.44	0.62	0.33	0.70	0.55	1.00

Tabela 1.1: Tabela de correlação entre diferentes crimes. Extraído de [20].

*Suponha que buscamos uma representação no plano destes 7 tipos de crime de modo que os que apresentem maior correlação fiquem mais próximos. Note que não temos exatamente a informação sobre as distâncias, ou dissimilaridades, mas sim a correlação entre estes delitos. Uma maneira de obter tais dissimilaridades, por exemplo, é definir  $d_{ij} = 1 - \rho_{ij}$ , em que  $\rho_{ij}$  corresponde a correlação entre os crimes  $i$  e  $j$ . Com isso obtemos uma matriz de “distâncias”  $D := [d_{ij}]$ .*

*A seguir, aplicando as técnicas do Capítulo 3 para obter uma realização para esta matriz de distâncias, obtemos a visualização da Figura 1.11.*

*Desta visualização, não é difícil inferir a associação entre “latrocínio” e “roubo de carro”, e entre “assalto” e “assassinato”.*

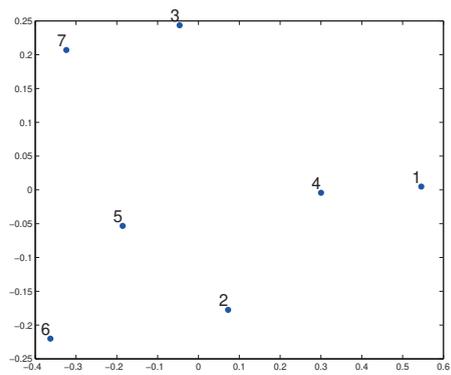


Figura 1.11: Realização em  $\mathbb{R}^2$  para a matriz de dissimilaridades.

## Capítulo 2

# Determinantes de Cayley-Menger

Seja  $D$  uma matriz simétrica, com diagonal nula, e com entradas  $D_{ij} = d_{ij}^2 \geq 0$ . Chamamos  $D$  de *matriz de distâncias* ou *semimétrica*.

Dada uma matriz de distâncias  $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , uma pergunta que aparece naturalmente é se o conjunto de  $n(n-1)/2$  distâncias representadas em  $D$  é realizável em  $\mathbb{R}^k$  para alguma dimensão  $k$  específica, i.e., se existem vetores  $x_i \in \mathbb{R}^k$  tais que  $\|x_i - x_j\|^2 = D_{ij}$ ,  $\forall i, j$ .

Neste capítulo, veremos que uma ferramenta útil para decidir se uma semimétrica é realizável num espaço Euclidiano de certa dimensão é dada pelo determinante de Cayley-Menger [81, 50, 49].

### 2.1 Definição e exemplos

**Definição 2.1.** A *matriz de distâncias* associada a  $n+1$  pontos  $p_0, \dots, p_n$  é dada por

$$D(p_0, \dots, p_n) = [d_{ij}^2],$$

em que  $i, j \in \{0, \dots, n\}$  e  $d_{ij}^2$  corresponde ao quadrado da distância entre os pontos  $p_i$  e  $p_j$ .

Na Definição 2.1, e ao longo deste capítulo,  $p_i$  denotará um vértice do grafo  $\mathcal{G} = (V, E, d)$ , cujo conjunto de vértices é  $V(\mathcal{G}) = \{p_0, p_1, \dots, p_n\}$ . Não confundir  $p_i$  com  $x_i = x(p_i)$ , o vetor posição de  $p_i$ .

A matriz de distâncias associada a estes  $n+1$  pontos tem o formato

$$D(p_0, \dots, p_n) = \begin{bmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & d_{03}^2 & \dots & d_{0n}^2 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & \dots & d_{1n}^2 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & d_{23}^2 & \dots & d_{2n}^2 \\ d_{03}^2 & d_{13}^2 & d_{23}^2 & 0 & \dots & d_{3n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ d_{0n}^2 & d_{1n}^2 & d_{2n}^2 & d_{3n}^2 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

Sabendo que as entradas de tal matriz correspondem a distâncias ao quadrado, fica claro que tal matriz deve ser simétrica e que os elementos da diagonal são nulos.

**Definição 2.2.** *O determinante de Cayley-Menger de um conjunto de  $n + 1$  pontos  $p_0, p_1, \dots, p_n$  é dado por*

$$CM(p_0, \dots, p_n) = \begin{vmatrix} D(p_0, \dots, p_n) & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{vmatrix},$$

em que  $D(p_0, p_1, \dots, p_n)$  é a matriz de distâncias correspondente e  $\mathbf{1}$  é um vetor coluna de uns de dimensão apropriada.

Vejamos, através de exemplos, como se comportam os determinantes de Cayley-Menger, para diferentes problemas de geometria de distâncias.

**Exemplo 2.1.** *Dada somente uma distância (entre pontos  $p_0$  e  $p_1$ ), é trivial concluir que haverão infinitas soluções para o PGD, pois há infinitas possibilidades de posicionamento de dois pontos sobre uma reta satisfazendo tal distância. Porém, se fixarmos um dos pontos, digamos  $p_0$  na posição  $x_0$ , o outro deverá obedecer a igualdade  $\|x_0 - x_1\| = d_{01}$ , podendo haver então apenas duas soluções distintas.*

*Por exemplo, seja  $d_{01} = 5$  e  $x_0 = 2$ . Então  $\|x_0 - x_1\| = d_{01}$ , logo  $\|2 - x_1\| = 5$ , que implica em  $x_1 = 7$  ou  $x_1 = -3$ .*

*Tomando ainda a distância  $d_{01} = 5$ , o determinante de Cayley-Menger é dado por*

$$CM(p_0, p_1) = \begin{vmatrix} D(p_0, p_1) & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 5^2 & 1 \\ 5^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 50$$

*Perceba que  $CM(p_0, p_1) \geq 0$ . Naturalmente esse resultado já poderia ser esperado pois*

$$\begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2d_{01}^2,$$

e como  $d_{01} \in \mathbb{R}$  então  $CM(p_0, p_1) \geq 0$ .

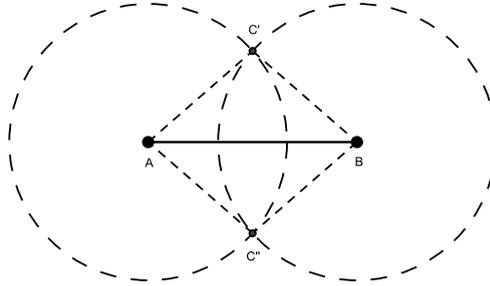
No caso em que  $d_{01} = 0$ , i.e.  $CM(p_0, p_1) = 0$ , teríamos uma realização degenerada, com dois pontos de mesmas coordenadas.

O próximo exemplo mostra que para  $n > 2$  pontos, nem sempre haverá realização em  $\mathbb{R}^2$ .

**Exemplo 2.2.** *Considere três distâncias  $d_{AB} = 4$ ,  $d_{AC} = 2$  e  $d_{BC} = 1$ . Fixada a aresta  $\{A, B\}$ , as circunferências de raios  $d_{AC}$  e  $d_{BC}$  não se interceptam e, com isso, não há um ponto  $C$  em  $\mathbb{R}^2$  tal que  $\|x_A - x_C\| = 2$  e  $\|x_B - x_C\| = 1$ .*

*Neste exemplo, os determinantes  $CM(A, B)$ ,  $CM(B, C)$ ,  $CM(A, C)$  e  $CM(A, B, C)$  são todos positivos (verifique!).*

Figura 2.1: PGD com duas soluções.



No Exemplo 2.2 as distâncias dadas não satisfazem a *desigualdade triangular* e, portanto, o PGD associado não possui solução.

**Proposição 2.1.** *Dadas três distâncias  $d_{AB}$ ,  $d_{BC}$  e  $d_{AC}$ , haverá uma realização dos pontos  $A$ ,  $B$  e  $C$  em  $\mathbb{R}^k$  se, e somente se, forem satisfeitas as desigualdades triangulares*

$$\begin{aligned} d_{AB} &\leq d_{BC} + d_{AC}, \\ d_{BC} &\leq d_{AB} + d_{AC}, \\ d_{AC} &\leq d_{AB} + d_{BC}. \end{aligned} \tag{2.1.1}$$

**Exercício 2.1.** *Demonstre a Proposição 2.1.*

**Exercício 2.2.** *Mostre que*

$$|d_{BC} - d_{AC}| \leq d_{AB} \leq d_{BC} + d_{AC},$$

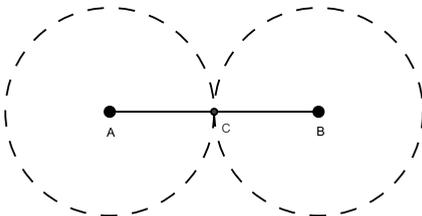
*se, e somente se, as condições (2.1.1) são satisfeitas.*

**Exemplo 2.3.** *Considere as distâncias  $d_{AB} = 3$ ,  $d_{AC} = 2$  e  $d_{BC} = 2$ . Fixando a aresta  $\{A, B\}$  e traçando as circunferências centradas em  $A$  e  $B$  de raios  $d_{AC}$  e  $d_{BC}$ , obtemos dois pontos de interseção  $C'$  e  $C''$ , como mostra a Figura 2.1. Para cada escolha de um ponto  $C$  teremos um conjunto de pontos que será uma realização deste 3-clique em  $\mathbb{R}^2$ . Lembre-se que em  $\mathbb{R}^2$  outras realizações podem ser obtidas por translações, rotações ou reflexões totais. Além disso, a partir de uma realização em  $\mathbb{R}^2$  podemos obter realizações em  $\mathbb{R}^k$ , para  $k > 2$ , simplesmente adicionando coordenadas nulas aos vetores posição.*

*Note que  $CM(A, B)$ ,  $CM(A, C)$  e  $CM(B, C)$  são todos positivos e agora  $CM(A, B, C) < 0$ .*

Outra situação particular ocorre quando a soma de duas distâncias é igual a terceira, caso que ainda satisfaz as desigualdades triangulares.

Figura 2.2: PGD com solução única.



**Exemplo 2.4.** Sejam distâncias  $d_{AB} = 4$ ,  $d_{AC} = 2$  e  $d_{BC} = 2$ . Neste caso a Figura 2.2 mostra que a única solução (a menos de transformações rígidas) será o ponto  $C$  localizado sobre a própria aresta  $\{A, B\}$ . Agora, temos que  $CM(A, B)$ ,  $CM(A, C)$  e  $CM(B, C)$  são positivos e  $CM(A, B, C) = 0$ .

Para este caso em que uma das desigualdades triangulares é satisfeita através da própria relação de igualdade, tem-se não só a realização de um 3-clique em  $\mathbb{R}^2$ , mas também em  $\mathbb{R}$ .

Dos exemplos acima, notamos que há uma relação entre a desigualdade triangular e o sinal do determinante de Cayley-Menger de três pontos. Dadas as distâncias  $d_{01}$ ,  $d_{02}$  e  $d_{12}$ , a matriz das distâncias associada será dada por

$$D(p_0, p_1, p_2) = \begin{bmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Com isto, temos o determinante de Cayley-Menger de  $p_0, p_1, p_2$ :

$$\begin{aligned} CM(p_0, p_1, p_2) &= \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} \\ &= d_{01}^4 + d_{02}^4 + d_{12}^4 - 2(d_{01}^2 d_{02}^2 + d_{01}^2 d_{12}^2 + d_{02}^2 d_{12}^2). \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

Se substituirmos as distâncias dos três exemplos anteriores e analisarmos o sinal dos determinantes de Cayley-Menger, podemos conjecturar que, a tripla de distâncias  $d_{01}, d_{02}, d_{12}$  admite realização em  $\mathbb{R}^2$  quando  $CM(p_0, p_1, p_2) \leq 0$  e  $CM(p_i, p_j) \geq 0$  para  $i, j \in \{0, 1, 2\}$  e  $i \neq j$ .

**Exercício 2.3.** Calcule os determinantes de Cayley-Menger de três pontos para os três exemplos anteriores.

Para provar esta afirmação, será utilizada a Fórmula de Heron. Esta fórmula relaciona a área de um triângulo com as medidas de seus lados e seu semiperímetro.

**Teorema 2.1** (Fórmula de Heron). *Considere um triângulo de área  $A \geq 0$  cujas medidas dos lados valem  $a$ ,  $b$  e  $c$ . Então*

$$A = \sqrt{p(p-a)(p-b)(p-c)}$$

em que  $p$  é o semiperímetro, ou seja,  $p = \frac{a+b+c}{2}$ .

A Fórmula de Heron toma como hipótese a existência de um triângulo de área  $A \geq 0$ , de modo que existe uma realização de um 3-clique, em  $\mathbb{R}^2$  caso  $A > 0$ , ou ainda em  $\mathbb{R}$ , caso  $A = 0$ .

Admitindo a existência de um triângulo de vértices 0, 1 e 2 e suas distâncias como  $d_{01}$ ,  $d_{02}$  e  $d_{12}$  tem-se pela fórmula de Heron

$$\sqrt{p(p-d_{01})(p-d_{02})(p-d_{12})} \geq 0,$$

ou seja  $p(p-d_{01})(p-d_{02})(p-d_{12}) \geq 0$ . Como  $p = \frac{d_{01}+d_{02}+d_{12}}{2}$  segue que

$$\frac{1}{2^4}(d_{01}+d_{02}+d_{12})(-d_{01}+d_{02}+d_{12})(d_{01}-d_{02}+d_{12})(d_{01}+d_{02}-d_{12}) \geq 0,$$

de onde, após algumas manipulações algébricas e utilizando a Equação (2.1.2), podemos concluir que

$$CM(p_0, p_1, p_2) = d_{01}^4 + d_{02}^4 + d_{12}^4 - 2(d_{01}^2 d_{02}^2 + d_{01}^2 d_{12}^2 + d_{02}^2 d_{12}^2) \leq 0.$$

Assim, se há alguma solução para o PGD em  $\mathbb{R}^2$ , então o determinante de Cayley-Menger formado pelas três distâncias dadas deve ser um valor real não positivo, enquanto que  $CM(p_0, p_1)$ ,  $CM(p_0, p_2)$  e  $CM(p_1, p_2)$  devem ser não negativos.

Já analisamos quando um 3-clique admite realização em  $\mathbb{R}^2$ . Vejamos agora quando um 4-clique admite realização em  $\mathbb{R}^3$ . De acordo com [63], Tartaglia deduziu uma fórmula para o cálculo do volume de um tetraedro qualquer.

**Teorema 2.2** (Fórmula de Tartaglia). *Considere um tetraedro qualquer de vértices 0, 1, 2 e 3 e arestas de medidas  $d_{01}$ ,  $d_{02}$ ,  $d_{03}$ ,  $d_{12}$ ,  $d_{13}$ ,  $d_{23}$ . Então o quadrado do volume do tetraedro é dado por*

$$\mathbb{V}^2 = \frac{1}{288} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & d_{03}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & d_{23}^2 & 1 \\ d_{03}^2 & d_{13}^2 & d_{23}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{(-1)^4}{2^3(3!)^2} CM(p_0, p_1, p_2, p_3).$$

Perceba que esta fórmula já considera o determinante de Cayley-Menger em sua essência.

Note que se  $\mathbb{V} = 0$ , ou seja, quando se trata de um poliedro *degenerado* em  $\mathbb{R}^2$ , tem-se  $CM(p_0, \dots, p_3) = 0$ . Assim, podemos dizer que se a realização de um 4-clique para um 3-simplex não-degenerado (tetraedro) então  $CM(p_0, \dots, p_3) > 0$ .

**Exemplo 2.5.** Para exemplificar o resultado acima, considere o tetraedro regular de lados unitários. Assim

$$CM(p_0, \dots, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1^2 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 0 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 0 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 1^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 4 > 0.$$

Modificando a distância  $d_{03} = 2$ , o novo valor do determinante de Cayley-Menger será

$$CM(p_0, \dots, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1^2 & 1^2 & 2^2 & 1 \\ 1^2 & 0 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 0 & 1^2 & 1 \\ 2^2 & 1^2 & 1^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -8 < 0.$$

Não é difícil verificar que se todas as distâncias entre  $\{p_0, p_1, p_2, p_3\}$  são iguais a um, com exceção a  $d_{03}$ , então o 4-clique admite realização em  $\mathbb{R}^3$  somente se  $d_{03} \in (0, \sqrt{3})$ .

**Exercício 2.4.** Usando a lei dos cossenos e o conceito de ângulo entre planos, mostre que  $\{1, 1, 1, 1, 1, d_{03}\}$  admite realização em  $\mathbb{R}^3$ , se  $d_{03} \in (0, \sqrt{3})$  e em  $\mathbb{R}^2$  se  $d_{03} = 0$  ou  $d_{03} = \sqrt{3}$ .

No entanto, é importante destacar que não basta que  $CM(p_0, \dots, p_3) > 0$  para que se obtenha um 3-simplex em  $\mathbb{R}^3$ . Todas as faces deste tetraedro também devem satisfazer a condição  $CM(p_i, p_j, p_l) \leq 0$ , i.e., as desigualdades triangulares também devem ser satisfeitas. O exemplo a seguir, extraído de [98], ilustra este fato.

**Exemplo 2.6.** Considere o conjunto de seis distâncias entre os pontos 0, 1, 2 e 3 listadas abaixo:

$$\begin{array}{lll} d_{01} = 1 & d_{02} = 1,78 & d_{03} = 2,67582 \\ d_{12} = 0,5 & d_{13} = 1,06066 & d_{23} = 0,25. \end{array}$$

Temos que  $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = 3,20375 > 0$ . Contudo, tomando apenas os pontos 0, 1 e 2 temos que  $CM(p_0, p_1, p_2) = 2,68026 > 0$ . Perceba que estes três pontos não satisfazem a desigualdade triangular, pois  $d_{01} + d_{12} = 1 + 0,5 = 1,5 < 1,78 = d_{02}$ .

Nesta seção, vimos que condições para existência de triângulos e tetraedros estão relacionadas a determinantes de Cayley-Menger. Esta conexão se dá através das noções de área e volume. A próxima seção generaliza estes conceitos para mais de três dimensões.

## 2.2 Determinantes e volumes orientados

Já vimos que o determinante de Cayley-Menger pode ser usado para calcular a área de um triângulo ou o volume de um tetraedro. Para os casos de um  $k$ -simplex, em que  $k > 3$ , também é possível calcular seu volume pela generalização das fórmulas de Heron e Tartaglia.

Antes de apresentar tal generalização, precisaremos de alguns lemas auxiliares cujas demonstrações detalhadas podem ser encontradas em [47, 49].

**Lema 2.1.** *Considere um  $k$ -simplex em  $\mathbb{R}^k$  de vértices  $x_i$ ,  $i = 0, \dots, k$ , cujas coordenadas  $x_i^j$ ,  $j = 1, \dots, k$ , são conhecidas. O volume orientado  $\mathbb{V}$  desse  $k$ -simplex é dado pela expressão*

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 \end{vmatrix}.$$

*Demonstração.* Em  $\mathbb{R}^2$ , três pontos não colineares determinam um triângulo cuja área pode ser calculada através dos vetores formados por estes pontos. Se as coordenadas de tais pontos são  $x_0, x_1$  e  $x_2$ , respectivamente, é sabido da geometria analítica que a área orientada do paralelogramo definido pelos vetores coluna  $x_1 - x_0$  e  $x_2 - x_0$  é dada por

$$A = \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

Assim, a área orientada  $\mathbb{V}_2$  do triângulo induzido pelos vetores  $x_1 - x_0$  e  $x_2 - x_0$  é

$$\mathbb{V}_2 = \frac{1}{2} |A|.$$

Analogamente, quatro pontos afimemente independentes em  $\mathbb{R}^3$  determinam um tetraedro. Dados os pontos de coordenadas  $x_0, x_1, x_2$  e  $x_3$ , respectivamente, o volume orientado  $\mathbb{V}_3$  deste tetraedro é dado por

$$\mathbb{V}_3 = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \\ (x_3 - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

A fórmula para o cálculo de um volume orientado  $\mathbb{V}_n$  de um  $n$ -simplex pode ser entendida como a generalização desta fórmula. Uma observação deve ser feita quanto ao fator multiplicativo que aparecerá na expressão. Perceba que o volume  $\mathbb{V}_2$  é obtido através da metade da área do paralelogramo, assim como o volume  $\mathbb{V}_3$  é obtido por um sexto do volume do paralelepípedo. Estes fatores estão diretamente relacionados com a dimensão  $k$  do espaço no qual se encontra o  $k$ -simplex. Assim, é possível provar (por indução) que a expressão do volume  $\mathbb{V}_k$  conterá o fator  $\frac{1}{k!}$  [47].

Deste modo temos

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \\ \vdots \\ (x_k - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

Pela expansão de Laplace, temos que

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_0)^T & 1 \\ (x_1 - x_0)^T & 0 \\ (x_2 - x_0)^T & 0 \\ \vdots & \vdots \\ (x_k - x_0)^T & 0 \end{vmatrix},$$

e como adicionar a uma linha um múltiplo de outra não altera o determinante, chegamos a

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_0)^T & 1 \\ (x_1)^T & 1 \\ (x_2)^T & 1 \\ \vdots & \vdots \\ (x_k)^T & 1 \end{vmatrix},$$

concluindo a demonstração.  $\square$

**Lema 2.2.** *Considere um  $k$ -simplex em  $\mathbb{R}^k$  de vértices  $x_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, k$ . O quadrado do volume deste  $k$ -simplex é dado pela expressão*

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

*Demonstração.* Pelo Lema 2.1 temos

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 \end{vmatrix}.$$

Se aumentarmos a matriz do determinante com uma borda de zeros e um 1 na diagonal não alteraremos o valor do determinante. Logo temos

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 & 0 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} := \frac{1}{k!} \det(A). \quad (2.2.3)$$

Permutando as duas últimas colunas, alteramos o sinal do determinante anterior e como  $\det(A) = \det(A^T)$ , temos que

$$\mathbb{V} = -\frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_1^1 & \dots & x_k^1 & 0 \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_k^2 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_0^k & x_1^k & \dots & x_k^k & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix} := -\frac{1}{k!} \det(A^T). \quad (2.2.4)$$

Como ambas matrizes dos determinantes de (2.2.3) e (2.2.4) são quadradas de ordem  $k + 2$ , temos que  $\det(AA^T) = \det(A)\det(A^T)$ , logo

$$\mathbb{V}^2 = -\left(\frac{1}{k!}\right)^2 \begin{vmatrix} x_0^T x_0 & x_0^T x_1 & \dots & x_0^T x_k & 1 \\ x_1^T x_0 & x_1^T x_1 & \dots & x_1^T x_k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^T x_0 & x_k^T x_1 & \dots & x_k^T x_k & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Mais ainda, usando o fato de que

$$x_i^T x_j = \frac{1}{2} (x_i^T x_i + x_j^T x_j - d_{ij}^2), \quad (2.2.5)$$

podemos alterar cada linha de índice  $i$  ( $i = 0, \dots, k$ ) pela soma da própria com a última linha previamente multiplicada por  $-\frac{1}{2}x_i^T x_i$  e, também alterar cada coluna de índice  $j$  ( $j = 0, \dots, k$ ) pela soma da própria com a última coluna previamente multiplicada por  $-\frac{1}{2}x_j^T x_j$ , para obter

$$\mathbb{V}^2 = -\left(\frac{1}{k!}\right)^2 \begin{vmatrix} -\frac{1}{2}d_{00}^2 & -\frac{1}{2}d_{01}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{0k}^2 & 1 \\ -\frac{1}{2}d_{01}^2 & -\frac{1}{2}d_{11}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{2}d_{0k}^2 & -\frac{1}{2}d_{1k}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{kk}^2 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Para cada coluna, retiramos o fator  $-\frac{1}{2}$  de dentro do determinante, obtendo

$$\mathbb{V}^2 = \frac{-1}{(k!)^2} \left(-\frac{1}{2}\right)^{k+1} \begin{vmatrix} d_{00}^2 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & d_{11}^2 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & d_{kk}^2 & 1 \\ -2 & -2 & \dots & -2 & 0 \end{vmatrix}.$$

Segue que

$$\mathbb{V}^2 = (-2) \frac{-1}{(k!)^2} \frac{(-1)^{k+1}}{2^{k+1}} \begin{vmatrix} d_{00}^2 & d_{01}^2 & \cdots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & d_{11}^2 & \cdots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \cdots & d_{kk}^2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Portanto, sendo  $d_{ii} = 0$  para qualquer  $i = 0, \dots, k$ , temos como expressão final,

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \cdots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \cdots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

□

Concluimos então que o determinante de Cayley-Menger está relacionado com o quadrado do volume orientado de um  $k$ -simplex em  $\mathbb{R}^k$  pela expressão

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} CM(p_0, \dots, p_k). \quad (2.2.6)$$

Na próxima seção utilizaremos esta expressão para determinar condições necessárias e suficientes para a realização de um  $(n+1)$ -clique em  $\mathbb{R}^k$ , para  $k \leq n$ .

## 2.3 Condições necessárias e suficientes

A relação entre volumes orientados e determinantes de Cayley-Menger permitem estabelecer condições necessárias e suficientes para existência de uma realização de um conjunto completo de distâncias. O teorema a seguir tem como referência [49].

**Teorema 2.3.** *Uma condição necessária e suficiente para que um  $(n+1)$ -clique tenha uma realização em  $\mathbb{R}^k$ , para  $k \leq n$ , é que todos os determinantes de Cayley-Menger, não nulos, de  $m+1$  pontos tenham sinal dado por  $(-1)^{m+1}$ , para todo  $m = 1, 2, \dots, k$ . Além disso, os determinantes de Cayley-Menger de mais de  $k+1$  pontos devem ser nulos.*

A prova de que a condição acima é necessária pode ser encontrada em [49], enquanto que a prova da suficiência é apresentada em [105]. Para uma apresentação unificada e detalhada, consulte [27].

Em verdade, segundo [19], a última condição do Teorema 2.3 pode ser simplificada, exigindo-se apenas que os determinantes de  $k+2$  e  $k+3$  pontos sejam iguais a zero.

Além disso, um  $(n + 1)$ -clique é realizável em  $\mathbb{R}^k$ , mas não em  $\mathbb{R}^s$ , com  $s < k$ , se pelo menos um dos determinantes de  $k + 1$  pontos é não nulo. Por exemplo, se estamos interessados em condições para realização em  $\mathbb{R}^3$ , o teorema acima nos diz que:

1. os determinantes de Cayley-Menger de 3 pontos não colineares, devem ser negativos,  $CM(p_i, p_j, p_k) < 0$ , o que significa que a desigualdade triangular deve ser satisfeita;
2. os determinantes de 4 pontos, não coplanares, devem ser positivos, i.e.,  $CM(p_i, p_j, p_k, p_l) > 0$ . Essa condição, conhecida como *desigualdade tetragonal*, corresponde ao volume positivo de um tetraedro em  $\mathbb{R}^3$  (veja Exercício 2.4);
3. os determinantes de 5 e 6 pontos, devem ser nulos.

**Exercício 2.5.** Considere a matriz de distâncias

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Calcule os determinantes de Cayley-Menger de 2, 3 e 4 pontos e determine se  $D$  é realizável em  $\mathbb{R}^2$  ou em  $\mathbb{R}^3$ .

Note que o Teorema 2.3 supõe que todas as distâncias entre os  $n + 1$  pontos são conhecidas. Porém, em grande parte dos problemas reais, relacionados a Geometria de Distâncias, é comum que nem todas as distâncias entre pares de objetos sejam conhecidas. Ainda assim, podemos explorar o Teorema 2.3 para *completar* distâncias faltantes.

**Exemplo 2.7.** Considere 4 pontos  $(p_0, p_1, p_2, p_3)$  em  $\mathbb{R}^3$  tais que

$$d_{01} = 1, \quad d_{02} = \sqrt{2}, \quad d_{03} = 2, \quad d_{12} = 2, \quad d_{13} = \sqrt{2}.$$

Queremos determinar os possíveis valores de  $d_{23}$  para que exista uma realização de um 4-clique em  $\mathbb{R}^3$ .

Inicialmente perceba que

$$CM(p_0, p_1, p_2) = CM(p_0, p_1, p_3) = -7 < 0,$$

ou seja, estes dois 3-cliques que compõem o 4-clique satisfazem as hipóteses do Teorema 2.3. Além disso, chamando  $d_{23}^2 = x$ , temos que

$$CM(p_0, p_2, p_3) = CM(p_1, p_2, p_3) = x^2 - 12x + 4 < 0,$$

que nos fornece como conjunto solução

$$\{x \in \mathbb{R} : 6 - 4\sqrt{2} < x < 6 + 4\sqrt{2}\}. \quad (2.3.7)$$

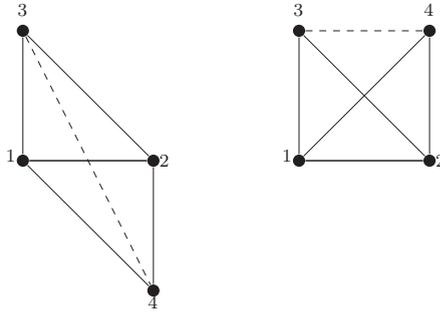


Figura 2.3: Valores máximo e mínimo para a distância  $d_{34}$ . Tal intervalo é determinado pela desigualdade tetragonal, que pode ser obtida via determinantes de Cayley-Menger. Para valores no interior do intervalo, a realização é em  $\mathbb{R}^3$ , e para os valores máximo e mínimo temos uma realização em  $\mathbb{R}^2$ .

De acordo com o Teorema 2.3, devemos verificar que  $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) > 0$ . Segue que

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 & 4 & 1 \\ 1 & 0 & 4 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 0 & x & 1 \\ 4 & 2 & x & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -2x^2 + 30x - 88 > 0.$$

Considerando (2.3.7) e a desigualdade acima, temos que  $4 < x < 11$ . Segue que

$$2 \leq d_{23} \leq \sqrt{11}.$$

Perceba que para  $d_{23} = 2$  ou  $d_{23} = \sqrt{11}$  obtemos a realização do 4-clique em  $\mathbb{R}^2$ , ou seja, um 3-simplex degenerado, pois  $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = 0$  e então, em  $\mathbb{R}^3$ , o volume do 3-simplex é nulo, de acordo com (2.2.6).

**Exemplo 2.8.** Considere 5 pontos  $(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4)$  em  $\mathbb{R}^3$  e apenas uma distância faltante. Suponha que esta distância é  $d_{34}$ , e as demais distâncias dadas por

$$\begin{aligned} d_{01} &= 1, & d_{02} &= 1, & d_{03} &= 1, & d_{04} &= \sqrt{3}, \\ d_{12} &= \sqrt{2}, & d_{13} &= \sqrt{2}, & d_{14} &= \sqrt{2}, \\ d_{23} &= \sqrt{2}, & d_{24} &= \sqrt{2}, & d_{34} &= \sqrt{x}. \end{aligned}$$

Note que  $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = CM(p_0, p_1, p_2, p_4) = 8 > 0$ . Além disso

$$\begin{aligned} CM(p_0, p_1, p_2) &= CM(p_0, p_1, p_3) = CM(p_0, p_2, p_3) = \\ &= CM(p_0, p_1, p_4) = -4 < 0. \end{aligned}$$

Também

$$CM(p_1, p_2, p_3) = CM(p_1, p_2, p_4) = -12 < 0$$

e

$$CM(p_0, p_2, p_4) = -8 < 0.$$

Logo, os 4-cliques e 3-cliques de distâncias conhecidas acima satisfazem as condições do Teorema 2.3.

Veja também que

$$CM(p_0, p_3, p_4) = x^2 - 8x + 4 < 0 \Rightarrow 2(2 - \sqrt{3}) < x < 2(2 + \sqrt{3})$$

$$CM(p_1, p_3, p_4) = CM(p_2, p_3, p_4) = x^2 - 8x < 0 \Rightarrow 0 < x < 8$$

A interseção desses intervalos resulta em

$$2(2 - \sqrt{3}) < x < 2(2 + \sqrt{3}).$$

Se queremos uma realização do 5-clique em  $\mathbb{R}^3$ , segundo o Teorema 2.3,

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4) = 0,$$

ou seja,

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & x & 1 \\ 3 & 2 & 2 & x & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 4x^2 - 32x + 48 = 0.$$

Segue que  $x = 2$  ou  $x = 6$ . Ambas são possíveis soluções pois pertencem ao intervalo encontrado anteriormente. Assim, se  $d_{34}$  assume os valores  $\sqrt{2}$  ou  $\sqrt{6}$ , então o 5-clique é realizável em  $\mathbb{R}^3$ .

**Exercício 2.6.** Considere a matriz de distâncias incompleta

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & x^2 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ x^2 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Para quais valores de  $x$  a matriz  $D$  é realizável em  $\mathbb{R}^3$ , mas não em  $\mathbb{R}^2$ ?

Portanto, além de fornecer condições necessárias e suficientes para a realização de um conjunto completo de distâncias, vimos que os determinantes de Cayley-Menger também podem ser úteis quando precisamos completar algumas poucas entradas de uma matriz de distâncias incompleta.

Por outro lado, se o objetivo é assegurar a realização de uma dada matriz de distâncias  $D$ , ao invés de impor várias restrições de Cayley-Menger sobre os subdeterminantes de  $D$ , basta exigir que uma transformação linear de  $D$  seja positiva semidefinida. Este é o assunto do Capítulo 3.



## Capítulo 3

# Matrizes de Distâncias Euclidianas

No capítulo anterior vimos que, dado um conjunto *completo* de distâncias, para decidir se o PGD associado admite solução em  $\mathbb{R}^k$  precisamos verificar certas condições sobre os determinantes de Cayley-Menger. Apesar de sua importância teórica, o uso destes determinantes pode não ser atrativo do ponto de vista computacional.

Neste capítulo, explorando a relação entre norma Euclidiana e produto interno, veremos que podemos associar uma matriz de distâncias  $D$  a uma “matriz de produtos internos”  $G$ . Se esta matriz  $G$  for positiva semidefinida, então o PGD associado a  $D$  admite solução para todo  $k \geq r = \text{posto}(G)$ . Este é o famoso Teorema de Schoenberg [101].

Do ponto de visto prático, é computacionalmente mais viável determinar se uma matriz é simétrica positiva semidefinida do que avaliar um grande número de determinantes. Além disso, veremos como obter uma realização  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$  a partir de  $G$ , o que será útil para o desenvolvimento de algoritmos de reconstrução sequencial em capítulos posteriores.

Além disso, a teoria deste capítulo também é útil ao desenvolvimento de algoritmos de completamento de matrizes de distâncias com dados faltantes ou com ruído, estes últimos tendo aplicações em machine learning, psicometria, cristalografia, acústica, etc [56, 31].

### 3.1 Definição

Lembramos que uma matriz simétrica  $D$  com entradas não negativas e diagonal nula é chamada *matriz de distâncias*. Uma matriz de distâncias  $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$  é dita uma *matriz de distâncias Euclidiana* (ou EDM, do inglês Euclidean Distance Matrix) se existe um inteiro positivo  $r$  e  $X \in \mathbb{R}^{r \times n}$ ,  $r < n$  tal que

$$D_{ij} = \|x_i - x_j\|^2, \quad \forall i, j, \quad (3.1.1)$$

em que  $x_i$  denota a  $i$ -ésima coluna de  $X$ . O menor inteiro  $r$  para o qual (3.1.1) é satisfeito é chamado de *dimensão de realização* [31].

A principal diferença entre o problema de determinar se  $D$  é uma EDM e o PGD é que no PGD a dimensão de interesse é fixada, enquanto que para  $D$  ser EDM, basta que exista realização em qualquer dimensão.

**Exercício 3.1.** *Verifique se as matrizes abaixo são ou não Euclidianas. Justifique.*

$$(a) D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 5 \\ 1 & 5 & 0 \end{bmatrix} \quad (b) D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

**Exercício 3.2.** *Para que valores de  $x$  a matriz abaixo é Euclidiana? Para que valores de  $x$  a dimensão de realização é  $k = 2$ ? Para que valores a dimensão de realização é  $k = 3$ ?*

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & x \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ x & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

## 3.2 Matriz de Gram

Na literatura de álgebra linear, uma matriz de produtos internos da forma  $G = X^T X$ , com  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ , é conhecida como *matriz de Gram*.

Sendo  $X$  uma matriz formada por  $n$  vetores coluna  $x_i \in \mathbb{R}^k$ , temos que  $G$  pode ser escrita como

$$G = \begin{bmatrix} x_1^T x_1 & \dots & x_1^T x_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n^T x_1 & \dots & x_n^T x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_n^T \end{bmatrix} [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n] = X^T X.$$

**Exercício 3.3.** *Dizemos que uma matriz simétrica  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  é positiva semidefinida, quando  $x^T A x \geq 0$  para todo  $x \in \mathbb{R}^n$ . Mostre que as seguintes afirmações são equivalentes:*

- (i)  $A$  é simétrica positiva semidefinida;
- (ii) os autovalores de  $A$  são reais e não-negativos;
- (iii) existe  $B \in \mathbb{R}^{k \times n}$  tal que  $A = B^T B$ .

**Exercício 3.4.** *Mostre que toda matriz de Gram é simétrica positiva semidefinida.*

**Exercício 3.5.** *Mostre que toda matriz positiva semidefinida é a Gramiana de algum conjunto de vetores.*

É importante destacar que a matriz de Gram  $G = X^T X$  é invariante por transformações ortogonais de  $X$ . Por exemplo, rotações e reflexões podem ser representadas por uma matriz ortogonal  $Q \in \mathbb{R}^{k \times k}$ . Ao aplicarmos esta transformação a um conjunto de pontos  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ , i.e.  $X' = QX$ , temos

$$X'^T X' = (QX)^T QX = X^T Q^T QX = X^T X.$$

Nas próximas seções, veremos que se  $D$  é Euclidiana, então ela pode ser associada a uma matriz de Gram  $G$  dos pontos correspondentes a uma realização.

### 3.3 Propriedades de uma matriz EDM

Sejam  $X$  e  $D$  tais que (3.1.1) é satisfeito e assumamos que a realização  $X$  é *centralizada*, i.e.,  $X\mathbf{1} = 0$ , em que  $\mathbf{1}^T = (1, 1, \dots, 1, 1)$  é um vetor coluna de uns de dimensão apropriada. Da relação entre norma Euclidiana e produto interno:

$$\|x_i - x_j\|^2 = \|x_i\|^2 - 2x_i^T x_j + \|x_j\|^2,$$

a EDM  $D$  é relacionada a *matriz de Gram*  $G = X^T X$  pela equação

$$D = \mathcal{K}(G) := \text{diag}(G)\mathbf{1}^T + \mathbf{1}\text{diag}(G)^T - 2G, \quad (3.3.2)$$

em que  $\text{diag}(G)$  denota um vetor com os elementos da diagonal de  $G$ .

**Exercício 3.6.** *Prove a relação (3.3.2).*

**Exercício 3.7.** *Se  $D$  é uma EDM correspondente a um conjunto de  $n > k$  pontos em  $\mathbb{R}^k$ , mostre que o posto de  $D$  é no máximo  $k + 2$ .*

Embora a matriz de Gram seja afetada por translações do conjunto de pontos, é notório que (3.3.2) permaneça invariante por tais transformações.

**Exercício 3.8** (Invariância por translações). *Mostre que a relação (3.3.2) é invariante por translações, i.e., se  $X' = X + b\mathbf{1}^T$ , então  $\mathcal{K}(X^T X) = \mathcal{K}(X'^T X')$ .*

Uma consequência dessa invariância é que não é possível determinar a posição *absoluta* de um conjunto de pontos usando apenas as distâncias entre eles.

Vejamos agora como obter  $G$  a partir de uma matriz de distâncias Euclidiana. A matriz

$$J = I - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T$$

é chamada *matriz de centragem* e será usada com frequência no restante do texto. Perceba o efeito de  $J$  quando aplicada a direita da matriz de coordenadas  $X$ :

$$XJ = X\left(I - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^T\right) = X - \frac{1}{n}(X\mathbf{1})\mathbf{1}^T,$$

ou seja, as colunas de  $XJ$  correspondem às colunas de  $X$  centralizadas ao redor da origem, uma vez que  $\frac{1}{n}(X\mathbf{1})$  é o “centro de massa” das colunas de  $X$ .

**Exercício 3.9.** *Prove que  $J$  é projetor ortogonal sobre o complemento ortogonal de  $\text{span}\{\mathbf{1}\}$ .*

**Exercício 3.10.** *Mostre que o conjunto das matrizes simétricas  $n \times n$  é subespaço vetorial do espaço de matrizes de ordem  $n$ .*

Definiremos dois importantes subespaços vetoriais do espaço vetorial das matrizes simétricas  $\mathbb{S}^n$  de ordem  $n$ . Seja

$$\mathbb{S}_C^n = \{Y \in \mathbb{S}^n : JYJ = Y\}$$

o subespaço das matrizes simétricas centralizadas e

$$\mathbb{H}^n = \{Z \in \mathbb{S}^n : \text{diag}(Z) = 0\}$$

o subespaço das matrizes simétricas com diagonal nula.

Por um lado, a aplicação  $\mathcal{K} : \mathbb{S}_C^n \rightarrow \mathbb{H}^n$  de (3.3.2) define uma transformação linear de  $\mathbb{S}_C^n$  para  $\mathbb{H}^n$  [1].

**Exercício 3.11.** *Mostre que  $\mathcal{K} : \mathbb{S}_C^n \rightarrow \mathbb{H}^n$  é de fato uma transformação linear.*

Por outro lado, podemos obter a matriz de produtos internos  $G$  a partir de  $D$  pela expressão:

$$G = \mathcal{K}^\dagger(D) := -\frac{1}{2}JDJ, \quad (3.3.3)$$

em que  $\mathcal{K}^\dagger$  denota a inversa generalizada de  $\mathcal{K}$  [1].

De fato, sem perda de generalidade, suponha que  $X\mathbf{1} = 0$ . Tal condição equivale a *centralizar* uma outra realização  $X_0$ :

$$X = X_0J = X_0 - \frac{1}{n}X_0\mathbf{1}\mathbf{1}^T.$$

Multiplicando a Eq. (3.3.2) por  $J$  de ambos os lados, obtemos

$$JDJ = -2JGJ,$$

já que  $J\mathbf{1} = 0$ , e assim

$$-\frac{1}{2}JDJ = JGJ = G,$$

uma vez que  $G\mathbf{1} = 0$ , pois  $G = X^T X$  e  $X\mathbf{1} = 0$ .

Para resumir, denotando o conjunto das matrizes simétricas positivas semidefinidas por  $\mathbb{S}_+^n$  e por  $\mathcal{E}^n$  o conjunto das matrizes de distâncias Euclidianas de ordem  $n$ , em vista da equação (3.3.2), uma elegante caracterização de EDMs é dada por [30]:

$$\mathcal{E}^n = \mathcal{K}(\mathbb{S}_+^n \cap \mathbb{S}_C^n). \quad (3.3.4)$$

### 3.4 Teorema de Schoenberg

O teorema a seguir, demonstrado por Schoenberg [101], estabelece a conexão entre matrizes de distâncias Euclidianas e as matrizes positivas semidefinidas, através da relação (3.3.3).

**Teorema 3.1.** *Uma matriz de distâncias  $D$  é uma matriz de distâncias Euclidiana se, e somente se,  $\mathcal{K}^\dagger(D)$  é positiva semidefinida. Além disso, a dimensão de realização  $r$  é igual ao posto de  $\mathcal{K}^\dagger(D)$ .*

*Demonstração.* Se  $D$  é EDM, sabemos que existe uma matriz  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ , com  $X\mathbf{1} = 0$ , tal que  $D_{ij} = \|x_i - x_j\|^2, \forall \{i, j\}$  (lembrando que  $x_i \in \mathbb{R}^k$  denota a  $i$ -ésima coluna de  $X$ ). Então, da relação (3.3.3), temos que  $X^T X = G = -\frac{1}{2}JDJ$ . Logo,  $\forall v \in \mathbb{R}^n, v^T (-\frac{1}{2}JDJ)v = v^T Gv = v^T (X^T X)v \geq 0$ .

Por outro lado, seja  $D$  uma matriz de distâncias e defina  $\tilde{G} = -\frac{1}{2}JDJ$ . Suponha que  $\tilde{G}$  é positiva semidefinida. Como  $D$  é matriz de distâncias, temos que  $D$  é matriz simétrica e, assim,  $-\frac{1}{2}JDJ$  também é simétrica. Pelo teorema espectral, temos que existe  $Q$  matriz ortogonal tal que  $\tilde{G} = Q\Lambda Q^T$ , em que  $\Lambda$  é uma matriz diagonal cujas entradas são os autovalores de  $\tilde{G}$ . Temos então que:

$$\tilde{G} = Q\Lambda Q^T = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_n & \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{bmatrix}.$$

Como  $\tilde{G}$  é positiva semidefinida, assuma que os autovalores estão em ordem decrescente  $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0$ . Dessa forma, podemos considerar a matriz  $\tilde{G}$  em blocos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tilde{G} &= \begin{bmatrix} Q_r & \vdots & \tilde{Q}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_r & \vdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \\ 0 & \vdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_r^T \\ \cdots \\ \tilde{Q}_r^T \end{bmatrix} \\ &= Q_r \Lambda_r Q_r^T = \left( Q_r \sqrt{\Lambda_r} \right) \left( \sqrt{\Lambda_r} Q_r^T \right), \end{aligned}$$

em que  $\Lambda_r$  é matriz diagonal com os autovalores positivos de  $\tilde{G}$  na diagonal,  $Q_r$  é matriz ortogonal com entradas sendo os  $r$  autovetores associados aos  $r$  autovalores positivos de  $\Lambda_r$  e  $\tilde{Q}_r$  é matriz ortogonal com os demais autovetores associados aos autovalores nulos.

Temos então que as colunas de  $X = \sqrt{\Lambda_r}Q_r^T$  formam uma realização para  $D$  em  $\mathbb{R}^r$  e portanto  $D$  é EDM com matriz de Gram associada  $\tilde{G} = -(1/2)JDJ$  e dimensão de realização  $r = \text{posto}(\tilde{G})$ .

□

Portanto, dada uma matriz de distâncias  $D$ , após calcular  $\mathcal{K}^\dagger(D)$  pela expressão (3.3.3), para determinar se  $D$  é EDM, podemos calcular a decomposição em autovalores  $\mathcal{K}^\dagger(D) = Q\Lambda Q^T$ , em que  $\text{diag}(\Lambda) = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , e checar se todos os autovalores  $\lambda_i$  são não negativos.

Em caso afirmativo,  $\mathcal{K}^\dagger(D)$  é de fato uma matriz de Gram, e podemos escrever  $\mathcal{K}^\dagger(D) = G = X^T X$ . Para determinar a realização  $X \in \mathbb{R}^{r \times n}$  seguimos os passos a seguir. Assumindo que  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0$ , uma realização para  $D$  em  $\mathbb{R}^r$  é dada por

$$X = \sqrt{\Lambda_r}Q_r^T = \sqrt{\Lambda(1:r, 1:r)}Q(:, 1:r)^T, \quad (3.4.5)$$

em que  $\Lambda_r := \Lambda(1:r, 1:r)$  corresponde ao primeiro bloco  $r \times r$  de  $\Lambda$  e  $Q_r := Q(:, 1:r)$  denota a matriz formada pelas primeiras  $r$  colunas de  $Q$ .

**Exercício 3.12.** *Se o objetivo é apenas determinar se  $D$  é uma matriz de distâncias Euclidianas, sem obter uma realização, proponha uma alternativa computacionalmente mais barata que a decomposição espectral.*

### 3.5 Realização de grafos completos

A demonstração do Teorema 3.1 nos fornece um procedimento para encontrar (quando possível) uma realização de  $n$  pontos em  $\mathbb{R}^r$ , para algum  $r$  inteiro positivo, caso todas as  $n(n-1)/2$  distâncias entre estes  $n$  pontos sejam conhecidas.

Basta organizar as distâncias ao quadrado em uma matriz de distâncias  $D$  e então obter uma realização  $X \in \mathbb{R}^{r \times n}$  por meio da decomposição espectral de  $-(1/2)JDJ$ .

Se  $G = -(1/2)JDJ$  é simétrica positiva semidefinida e seu posto  $r = k$ , em que  $k$  é a dimensão desejada, então as coordenadas dos  $n$  pontos correspondem às colunas de

$$X = \sqrt{\Lambda_r}Q_r^T.$$

Porém, se  $G$  é simétrica positiva semidefinida mas a dimensão desejada é  $k < r = \text{posto}(G)$ , encontraremos uma realização  $X \in \mathbb{R}^{r \times n}$  em dimensão  $r$ , mas não em dimensão  $k$ . Isto implica que o PGD associado, em dimensão  $k$ , não possui solução.

No entanto, em algumas situações é de interesse então encontrar uma realização aproximada em  $\mathbb{R}^k$ . Neste caso, uma possibilidade é considerar a melhor aproximação de posto  $k$  para  $G$ , dada por  $\tilde{G} = \tilde{X}^T \tilde{X}$ , em que

$$\tilde{X} = \sqrt{\Lambda(1:k, 1:k)} Q(:, 1:k)^T \quad (3.5.6)$$

define uma realização correspondente em  $\mathbb{R}^k$ . Não é difícil observar que  $\tilde{X}$  pode violar algumas restrições em (3.1.1), e teremos apenas uma realização aproximada. Mais detalhes são discutidos na Seção 3.5.1.

**Exercício 3.13.** *Encontre uma realização em  $\mathbb{R}^2$  para a matriz de distâncias abaixo.*

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 16 & 2 & 10 \\ 16 & 0 & 10 & 2 \\ 2 & 10 & 0 & 4 \\ 10 & 2 & 4 & 0 \end{bmatrix}.$$

**Exercício 3.14.** *Seja*

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

*Mostre que  $D$  é EDM e que sua dimensão de realização é  $r = 3$ . Encontre uma solução aproximada  $\tilde{X}$  em  $\mathbb{R}^2$  ( $k = 2$ ) segundo (3.5.6). Qual é a maior violação de  $\tilde{X}$  em relação às distâncias de  $D$ ?*

### 3.5.1 Dados com ruído

No caso em que as entradas de  $D$  são perturbadas por ruído, a matriz  $G = -(1/2)JDJ$  pode inclusive apresentar autovalores *negativos*.

Seja  $G = Q\Lambda Q$  a decomposição espectral de  $G$  e assumamos que os autovalores em  $\Lambda$  estão em ordem não-crescente. A matriz  $G_+$  positiva semidefinida de posto no máximo  $k$  mais próxima de  $G$  (na norma de Frobenius<sup>1</sup>) é dada por  $G_+ = X_+^T X_+$ , em que

$$X_+ = \sqrt{\Lambda(1:k, 1:k)_+} Q(:, 1:k)^T, \quad (3.5.7)$$

e  $(\Lambda_+)_{ii} = \lambda_i^+ := (\lambda_i)_+ = \max\{\lambda_i, 0\}$ . Em outras palavras,  $X_+$  é solução para o problema de minimizar  $\|X^T X - G\|_F$  sujeito a  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ .

Este resultado é similar ao conhecido teorema de Eckart-Young [36] sobre a melhor aproximação de posto  $k$  e formalizado no teorema a seguir.

**Teorema 3.2.** *Seja  $G$  uma matriz simétrica tal que  $G = Q\Lambda Q^T$  e os autovalores em  $\Lambda$  estão em ordem não-crescente. A matriz simétrica positiva*

<sup>1</sup>Lembre-se que a norma de Frobenius de uma matriz  $A$  é dada por  $\|A\|_F^2 = \sum_i \sum_j a_{ij}^2 = \text{tr}(A^T A)$ , em que  $\text{tr}(B)$  denota o traço de uma matriz  $B$ .

semidefinida  $G_+$ , de posto menor ou igual a  $k$ , mais próxima de  $G$  na norma de Frobenius é

$$G_+ = \sum_{i=1}^k \max\{\lambda_i, 0\} q_i q_i^T.$$

*Demonstração.* A prova é similar àquela apresentada em [87].

Suponha que os autovalores de  $G$  estão em ordem decrescente. Usando a invariância da norma de Frobenius por transformações ortogonais, temos

$$\begin{aligned} \|G_+ - G\|_F^2 &= \|Q^T G_+ Q - \Lambda\|_F^2 \\ &= \sum_{i=1}^n ((Q^T G_+ Q)_{ii} - \lambda_i)^2 + \sum_{i \neq j} (Q^T G_+ Q)_{ij}^2 \\ &\geq \sum_{i=1}^n ((Q^T G_+ Q)_{ii} - \lambda_i)^2. \end{aligned}$$

Desta última desigualdade, temos que, dentre as matrizes simétricas positivas semidefinidas de posto menor ou igual a  $k$ , aquela que minimiza  $\|G_+ - G\|_F^2$  é dada por  $G_+ = Q\Lambda_+Q^T$ , em que  $(\Lambda_+)_{ii} = \max\{\lambda_i, 0\}$  para  $i \leq K$  and  $(\Lambda_+)_{ii} = 0$ , para  $i > k$ .  $\square$

**Exemplo 3.1.** O grafo abaixo representa cinco aeroportos brasileiros e o peso de cada aresta traz o tempo estimado de vôo entre dois aeroportos.

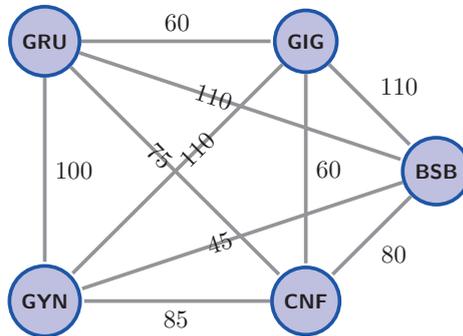


Figura 3.1: Tempo estimado de vôo entre alguns aeroportos brasileiros.

Apesar do tempo de vôo não ser uma estimativa precisa da distância entre os aeroportos, podemos ainda montar uma “matriz de distâncias”, e.g., se associamos 1 a GRU e 2 a GIG, então  $D_{12} = 60^2$ , e assim por diante. Para a bijeção 1 – GRU, 2 – GIG, 3 – BSB, 4 – CNF, 5 – GYN, obtemos a

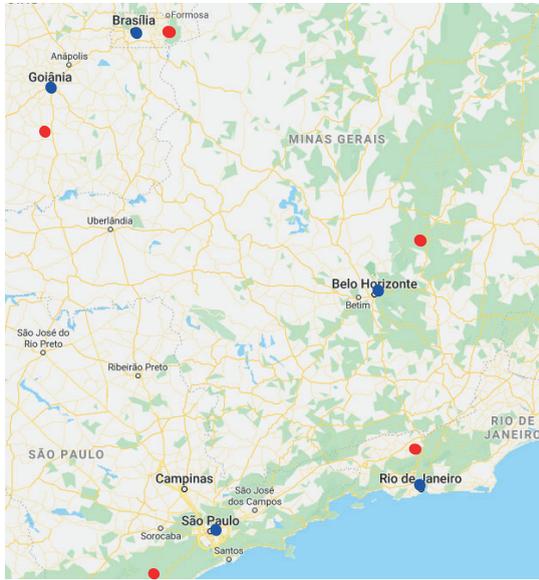


Figura 3.2: Localização dos aeroportos (em azul) e localização aproximada (em vermelho) com base nos tempos de vôo.

seguinte matriz de distâncias

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 3600 & 12100 & 5625 & 10000 \\ 3600 & 0 & 12100 & 3600 & 12100 \\ 12100 & 12100 & 0 & 6400 & 2025 \\ 5625 & 3600 & 6400 & 0 & 7225 \\ 10000 & 12100 & 2025 & 7225 & 0 \end{bmatrix}.$$

Construindo  $\tilde{G} = -(1/2)JDJ$  e calculando a decomposição espectral  $\tilde{G} = Q\Lambda Q^T$ , verificamos que  $D$  é Euclidiana, mas possui 4 autovalores positivos e, portanto, não admite realização em  $\mathbb{R}^2$ .

No entanto, utilizando o procedimento descrito nesta seção, podemos obter uma visualização (realização aproximada) em  $\mathbb{R}^2$  a partir deste conjunto de “distâncias” (tempos de vôo). A Figura 3.2 apresenta a solução obtida, representada por pontos vermelhos, após um pós-processamento: escalamento, rotação e translação apropriadas (mais detalhes nas Seções 5.3 e 5.4.2).

Embora os tempos de vôos sejam aproximações grosseiras para as distâncias, obtemos uma aproximação razoável para o posicionamento relativo dos aeroportos.

### 3.6 Completamento de EDMs

Dado  $\mathcal{G} = (V, E, d)$ , o problema de Completamento de Matriz de Distâncias Euclidianas (em inglês EDMCP: Euclidian Matrix Completion Problem) consiste em [56]:

$$\begin{aligned} \text{encontrar } & D \in \mathcal{E}^n \\ \text{tal que } & D_{ij} = d_{ij}^2, \quad \forall \{i, j\} \in E, \end{aligned} \quad (3.6.8)$$

lembrando da equação (3.3.4) que  $\mathcal{E}^n$  denota o conjunto de matrizes de distâncias Euclidianas de ordem  $n$ .

Em outras palavras, gostaríamos de encontrar uma EDM  $D$  cujas entradas  $(i, j)$  e  $(j, i)$  coincidam com o quadrado das distâncias  $d_{ij}$ , para todo  $\{i, j\} \in E$ . É como se tivéssemos uma matriz de distâncias *incompleta*  $M$ , na qual apenas as entradas  $(i, j) \in \Omega = \{(i, j) \in V \times V : \{i, j\} \in E\}$  são conhecidas:  $M_{ij} = d_{ij}^2, \forall (i, j) \in \Omega$ .

Por vezes, o problema (3.6.8) é formulado como

$$\begin{aligned} \min_D \quad & \|W \circ (D - M)\|_F^2 \\ \text{s. a } & D \in \mathcal{E}^n, \end{aligned} \quad (3.6.9)$$

em que

$$W_{ij} = \begin{cases} 1, & (i, j) \in \Omega \\ 0, & \text{c.c.}, \end{cases}$$

e  $\circ$  denota o produto de Hadamard. A formulação (3.6.9) é mais adequada quando as distâncias conhecidas não são precisas.

A principal diferença do EDMCP<sup>2</sup> para o PGD é que no EDMCP a dimensão  $k$  não é fixada, i.e., queremos apenas completar  $D$  de modo que esta seja uma EDM, não importando a dimensão de realização.

De um ponto de vista prático, isto nos permite resolver o EDMCP através de Programação Semidefinida (SDP: Semidefinite Programming) [4, 1], com precisão arbitrária, em tempo polinomial [94].

A formulação SDP para (3.6.8) explora a relação  $D = \mathcal{K}(G)$  e o Teorema 3.1:

$$\begin{aligned} \min_G \quad & 0 \\ \text{s. a } & W \circ \mathcal{K}(G) = W \circ M, \\ & G\mathbf{1} = 0 \\ & G \succeq 0, \end{aligned} \quad (3.6.10)$$

em que  $G \succeq 0$  significa que  $G \in \mathbb{S}_+^n$ .

---

<sup>2</sup>Note que já abordamos o EDMCP no Exercício 3.2.

**Exercício 3.15.** *Considere a matriz de distâncias incompleta abaixo:*

$$M = \begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

na qual  $\bullet$  representa as distâncias conhecidas (e por simetria, apresentamos apenas a parte triangular superior). Suponha que  $CM(p_i, p_j, p_\ell)^2 > 0$  para qualquer tripla de índices  $i, j, \ell$  e que as distâncias são exatas. Para esta  $M$ , quantas soluções possui o problema (3.6.8)? E se fixarmos a dimensão  $k = 3$ ?

Para um estudo mais aprofundado sobre matrizes de distâncias Euclidianas, recomendamos o survey [31] e o capítulo de livro [56]. Os artigos [4, 1] discutem a resolução do EDMCP usando programação semidefinida. Para o problema de completamento de EDMs com distâncias intervalares, veja [13].



## Capítulo 4

# Rigidez de grafos e estruturas

Nos capítulos 2 e 3 apresentamos condições para existência de soluções do PGD. Vimos que as distâncias de uma lista completa  $\mathcal{D}$  devem não só satisfazer a desigualdade triangular, mas também outras condições sobre os determinantes de Cayley-Menger, dadas pelo Teorema 2.3. Condições similares podem ser impostas sobre a matriz de distâncias  $D$  associada a uma lista  $\mathcal{D}$ , como no Teorema 3.1. Para uma lista incompleta de distâncias, a existência está relacionada a questão de completar uma matriz de distâncias  $D$  de modo que esta seja EDM, como discutido na Seção 3.6.

Nesta seção, estudaremos a questão da unicidade de soluções para o PGD. Veremos que a unicidade ou finitude de soluções para as equações (1.1.1), módulo transformações rígidas, está ligada à rigidez de possíveis estruturas para o grafo  $\mathcal{G}$  associado.

As notas desta seção são baseadas nas referências [9, 11, 12, 52, 53, 54].

### 4.1 Rigidez de estruturas

**Definição 4.1.** *Chamaremos de estrutura, um grafo  $\mathcal{G} = (V, E)$  juntamente com uma realização  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ , e denotaremos pelo par  $(\mathcal{G}, x)$ .*

**Definição 4.2.** *Dois pares  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  são ditos equivalentes se*

$$\|x_i - x_j\| = \|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j\|, \quad \forall \{i, j\} \in E.$$

**Definição 4.3.** *Dois pares  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  são ditos congruentes se*

$$\|x_i - x_j\| = \|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j\|, \quad \forall i, j \in V.$$

Se  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  são congruentes, então  $(\mathcal{G}, x)$  pode ser obtida de  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  por uma congruência (ou isometria), i.e., uma transformação que preserva todas as distâncias entre pares  $\{i, j\}$ .

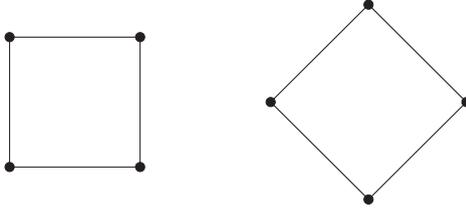


Figura 4.1: Realizações congruentes.



Figura 4.2: Realizações equivalentes mas não congruentes.

**Exercício 4.1.** Com base nas Figuras 4.1, 4.2 e 4.3, dê exemplos de estruturas equivalentes e congruentes com três vértices em  $\mathbb{R}^2$ .

**Definição 4.4.** Uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  é dita *rígida* se existe  $\varepsilon > 0$  para o qual  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  são equivalentes e  $\|x_i - \tilde{x}_i\| < \varepsilon, \forall i \in V$  se e somente se  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  são congruentes.

A definição acima também é conhecida como *rigidez local*:  $(\mathcal{G}, x)$  é localmente rígida se qualquer estrutura  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  localmente equivalente a  $(\mathcal{G}, x)$  é congruente a  $(\mathcal{G}, x)$ . É importante notar que existem estruturas rígidas  $(\mathcal{G}, x)$  e  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  que podem ser equivalentes mas não congruentes. Veja Figura 4.3.

Além disso, perceba que a noção de rigidez local, também depende da dimensão em que consideramos a realização. As estruturas da Figura 4.3 são localmente rígidas em  $\mathbb{R}^2$ , mas se considerarmos  $\mathbb{R}^3$ , a estrutura da esquerda pode ser deformada continuamente até a estrutura da direita. Para isto, basta considerar uma rotação do vértice 4 em torno do eixo que passa pelos vértices 1 e 2.

**Exercício 4.2.** Dê um exemplo de estrutura com 3 vértices que é rígida em  $\mathbb{R}$  mas não em  $\mathbb{R}^2$ .

**Definição 4.5.** Uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  é *globalmente rígida* quando toda estrutura equivalente  $(\mathcal{G}, \tilde{x})$  é também congruente a  $(\mathcal{G}, x)$ .

Por exemplo, toda estrutura associada a um grafo completo é globalmente rígida. Estruturas globalmente rígidas são desejáveis quando lidamos com o PGD, pois se o PGD tiver solução, a solução será única (a menos de movimentos triviais).

**Exercício 4.3.** Se considerarmos estruturas  $(\mathcal{G}, x)$  em  $\mathbb{R}$ , qual a relação entre rigidez e conectividade de  $\mathcal{G}$ ?

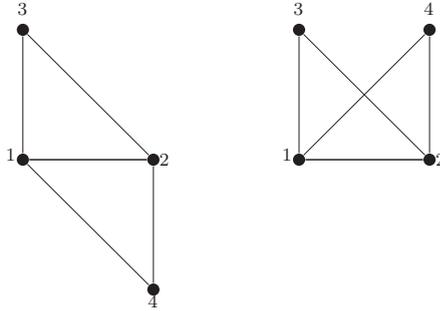


Figura 4.3: Exemplo de duas rígidas que não são globalmente rígidas.

#### 4.1.1 Matriz de rigidez

Um grafo que possui realização única (módulo congruências) não pode ser suscetível a deformações (flexões).

Uma deformação de uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  é uma família de realizações de  $\mathcal{G}$ , parametrizadas por  $t \in [0, 1]$ , tal que  $x_i(t)$  a posição de um vértice  $i$  no tempo  $t$  é uma função diferenciável de  $t$  e

$$\|x_i(t) - x_j(t)\|^2 = d_{ij}^2, \quad \forall \{i, j\} \in E, \quad \forall t \in [0, 1].$$

Diferenciando as equações acima com respeito a  $t$ , avaliando em  $t = 0$  e considerando  $x_i(0) = x_i$ , temos:

$$(x_i - x_j)^T (v_i - v_j) = 0, \quad \forall \{i, j\} \in E, \quad (4.1.1)$$

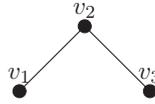
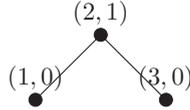
em que  $v_i = x'_i(0)$  pode ser interpretado como a velocidade instantânea do vértice  $i$ . Um vetor de velocidades  $v$  que satisfaça a equação acima para todo  $\{i, j\} \in E$ , é chamado de deformação (deslocamento) infinitesimal da estrutura.

O sistema de equações (4.1.1) pode ser escrito em forma matricial como:

$$Rv = 0,$$

em que  $v \in \mathbb{R}^{nk}$  e  $R \in \mathbb{R}^{m \times nk}$ , com  $m = |E|$ ,  $n = |V|$ , é chamada *matriz de rigidez*.

Algumas vezes, denotaremos a matriz de rigidez por  $R(\mathcal{G}, x)$  para destacar a dependência do grafo  $\mathcal{G}$  e de sua realização específica  $x$ , e outras simplesmente por  $R$ , quando estiver claro pelo contexto qual a estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  associada. Note que uma matriz de rigidez de uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  de dimensão  $k$  terá suas  $m = |E|$  linhas indexadas pelas arestas e as colunas indexadas por cada coordenada de um vértice  $v \in V$ , i.e. terá  $kn$  colunas, em que  $n = |V|$  é o número de vértices do grafo  $\mathcal{G}$ .

Figura 4.4: Grafo  $\mathcal{G}$ Figura 4.5: Estrutura  $(\mathcal{G}, x)$ 

**Exemplo 4.1.** Abaixo temos a matriz de rigidez para uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  qualquer associada ao grafo da Figura 4.4. Por conveniência, denotaremos  $x_i = (x_{i1}, x_{i2})$ , para  $i = 1, 2, 3$ , as coordenadas dos vértices  $v_i$  (já que estamos interessados em estruturas em  $\mathbb{R}^2$ ).

$$R = \begin{bmatrix} x_{11} - x_{21} & x_{12} - x_{22} & x_{21} - x_{11} & x_{22} - x_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x_{21} - x_{31} & x_{22} - x_{32} & x_{31} - x_{21} & x_{32} - x_{22} \end{bmatrix}$$

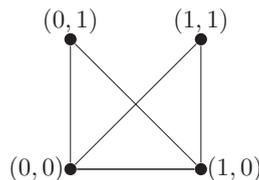
Se consideramos uma função de distância  $d$  que satisfaça  $d(v_1, v_2) = \sqrt{2} = d(v_2, v_3)$ , podemos escolher a realização que toma o mesmo grafo e o coloca nos seguintes pontos da Figura 4.5. Assim

$$R = \begin{matrix} \{1, 2\} \\ \{2, 3\} \end{matrix} \begin{pmatrix} v_{1x} & v_{1y} & v_{2x} & v_{2y} & v_{3x} & v_{3y} \\ 1-2 & 0-1 & 2-1 & 1-0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2-3 & 1-0 & 3-2 & 0-1 \end{pmatrix},$$

ou seja

$$R = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

**Exercício 4.4.** Encontre a matriz de rigidez associada a estrutura em  $\mathbb{R}^2$  da Figura 4.6.

Figura 4.6: Estrutura localmente rígida em  $\mathbb{R}^2$ .

Vejam agora, como o posto da matriz de rigidez está diretamente relacionado com a rigidez da estrutura. Em um espaço de dimensão  $k$ , temos  $k$  translações independentes e  $k(k-1)/2$  rotações. Estes tipos de movimento são ditos *triviais*.

**Definição 4.6.** *Se uma realização admite um movimento infinitesimal não trivial então dizemos que a estrutura é flexível. Caso contrário, ela é dita infinitesimalmente rígida.*

**Exercício 4.5.** *Explique porque as transformações triviais (rotações, translações e reflexões totais) formam um subespaço vetorial  $T \subset N(R)$ , em que  $N(R)$  denota o núcleo da matriz  $R$ .*

**Exercício 4.6.** *Em  $\mathbb{R}^k$ , mostre que o número de graus de liberdade de uma translação é  $k$ , e de uma rotação é  $k(k-1)/2$ .*

Como determinar se uma estrutura é rígida? É intuitivo que grafos com um maior número de arestas tenham maiores chances de serem rígidos que grafos com poucas arestas. Em um espaço de dimensão  $k$ ,  $n$  vértices tem  $nk$  graus de liberdade. Como os movimentos triviais compreendem  $k$  translações e  $k(k-1)/2$  rotações de toda a estrutura, vamos definir uma quantidade útil:

$$S(n, k) := \begin{cases} nk - k(k+1)/2, & n \geq k \\ n(n-1)/2, & n < k. \end{cases}$$

Se cada aresta acrescenta uma restrição independente, então  $S(n, k)$  arestas devem ser necessárias para eliminar os movimentos não rígidos de um grafo.

**Teorema 4.1.**  *$(\mathcal{G}, x)$  é infinitesimalmente rígida em  $\mathbb{R}^k$  se e somente se a matriz de rigidez associada tem posto igual a  $S(n, k)$ .*

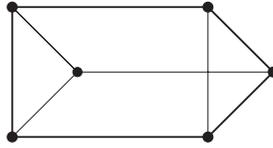
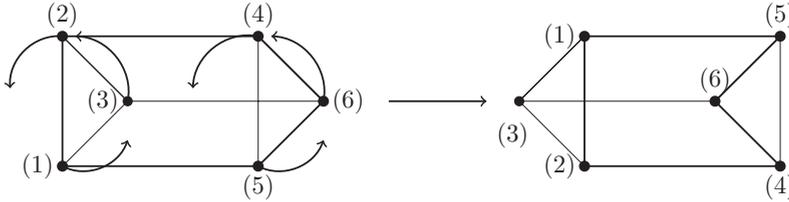
*Demonstração.* Caso  $n \geq k$ : se  $R$  tem posto  $S(n, k)$ , então pelo teorema do núcleo e imagem  $\dim(N(R)) = k(k+1)/2$ . Mas as combinações dos movimentos (globais) triviais sempre formam um subespaço  $T$  de dimensão  $k(k+1)/2$ , tal que  $T \subset N(R)$ . Portanto  $T = N(R)$ , i.e., as equações (4.1.1) tem como solução apenas os movimentos triviais, e portanto,  $(\mathcal{G}, x)$  é infinitesimalmente rígida.

Caso  $n < k$ : neste caso se  $R$  tem posto  $S(n, k) = n(n-1)/2 < n^2 < kn$ ,  $R$  possui  $n(n-1)/2$  linhas linearmente independentes, que correspondem a todas as arestas possíveis entre  $n$  pontos, ou seja, neste caso  $\mathcal{G}$  é completo e portanto rígido.

A recíproca é deixada como um exercício. □

**Exercício 4.7.** *Demonstre que se  $(\mathcal{G}, x)$  é infinitesimalmente rígida, então  $\text{posto}(R) = S(n, k)$ .*

**Exercício 4.8.** *Análise as matrizes de rigidez do Exemplo 4.1 e do Ex. 4.4 e, usando o Teorema 4.1, determine se as estruturas correspondentes são rígidas ou flexíveis.*

Figura 4.7: Estrutura  $(\mathcal{G}_B, x_B)$ Figura 4.8: Rotação parcial da estrutura  $(\mathcal{G}_B, x_B)$ 

Os próximos dois exemplos das Figuras 4.7 e 4.8, foram baseados em Asimov e Roth [11, pg. 288] e [12, pg. 188]. Este grafo, com estrutura  $(\mathcal{G}_B, x_B)$  na Figura 4.7, considerada em  $\mathbb{R}^2$ , aparenta ter uma estrutura rígida mas é na verdade infinitesimalmente flexível, pois podemos rotacionar continuamente (e simultaneamente) os dois triângulos que o compõem, sem violar o tamanho das arestas. De fato, podemos calcular o posto de sua matriz de rigidez  $\text{posto}(R_B) = 8 < 6 \times 2 - 3 = 9 = S(6, 2)$ . Logo, trata-se de uma estrutura infinitesimalmente flexível.

**Teorema 4.2.** *Se  $(\mathcal{G}, p)$  é infinitesimalmente rígida, então a estrutura  $(\mathcal{G}, p)$  é localmente rígida.*

*Demonstração.* Vamos provar pela contra-positiva. Suponha que  $(\mathcal{G}, p)$  não é localmente rígida, então deve existir um movimento não trivial  $x_i(t)$  tal que

$$\|x_i(t) - x_j(t)\|^2 = \|x_i - x_j\|^2$$

para  $t \neq 0$  e  $\forall \{i, j\} \in E$ , mas com

$$\|x_i(t) - x_j(t)\|^2 \neq \|x_i - x_j\|^2$$

para algum  $\{i, j\} \notin E$ ; isto é, um movimento que leva a realizações localmente equivalentes mas não congruentes. Em outras palavras, temos uma realização próxima a nossa realização original que preserva o tamanho das arestas, mas não preserva a distância entre todos os vértices.

Como este movimento  $v$  não é um movimento trivial (pois movimentos triviais são congruências), então  $v \notin T$ , mas  $v \in N(R)$ . Logo temos que  $\dim(N(R)) > \dim(T) = k(k+1)/2$ , e então  $\text{posto}(R) < nk - \dim(T)$ , e concluímos que  $\text{posto}(M) < S(n, k)$ , e pelo Teorema 4.1, a estrutura não é infinitesimalmente rígida.  $\square$

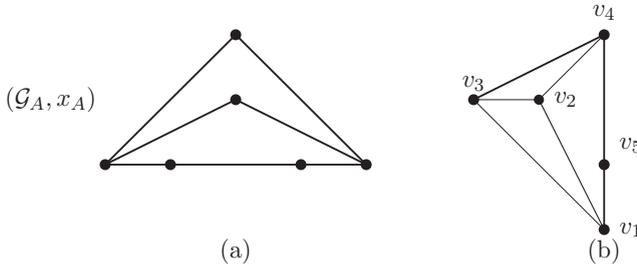


Figura 4.9: Grafos não genéricos.

### 4.1.2 Estruturas Genéricas

Para analisar a recíproca do Teorema 4.2, discutiremos nesta seção o conceito de *estruturas genéricas* [53, pg. 4].

**Definição 4.7.** Uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  é genérica quando o conjunto das coordenadas  $x(v)$ ,  $\forall v \in V$  é algebricamente independente sobre  $\mathbb{Q}$ .

Dizemos que um conjunto é algebricamente independente sobre os racionais quando os elementos deste conjunto não são raízes de nenhum polinômio com coeficientes em  $\mathbb{Q}$ .

Assim, se existe um polinômio  $Q(x_{11}, \dots, x_{kn})$  tal que uma realização  $\bar{x}$  para  $\mathcal{G}$  satisfaz  $Q(\bar{x}_{11}, \dots, \bar{x}_{kn}) = 0$ , então  $(\mathcal{G}, x)$  é chamada de *não genérica*. Tais estruturas terão características que queremos evitar, por exemplo, três (ou mais) pontos colineares, quatro pontos coplanares, etc.

A Figura 4.9 apresenta exemplos de estruturas não genéricas. Tais estruturas são localmente rígidas mas não são infinitesimalmente rígidas.

Por exemplo, a estrutura  $(\mathcal{G}_A, x_A)$  da Figura 4.9(a), quando em  $\mathbb{R}^2$  tem matriz de rigidez com posto 7, porém  $S(6, 2) = 9$ . Logo a estrutura é infinitesimalmente flexível em  $\mathbb{R}^2$ , apesar de ser localmente rígida.

**Exercício 4.9.** Sem calcular o posto da matriz de rigidez, mostre que a estrutura da Figura 4.9(b) é localmente rígida, mas não infinitesimalmente rígida.

Agora, considere novamente grafo da Figura 4.7, mas com outra atribuição de distâncias  $d(u, v)$  de modo que a aresta central seja suficientemente curta para impossibilitar o movimento de rotação que tínhamos antes (veja Figura 4.10). Logo, a estrutura é localmente rígida. Porém, se calculamos explicitamente a matriz de rigidez  $R$  e seu posto, veremos que  $\text{posto}(R) = 8 < 9 = S(6, 2)$ . Desse modo, a estrutura é rígida em  $\mathbb{R}^2$ , mas continua não sendo infinitesimalmente rígida.

Em vista dos exemplos acima, só poderemos garantir a equivalência entre rigidez local e infinitesimal quando tratarmos de estruturas genéricas.

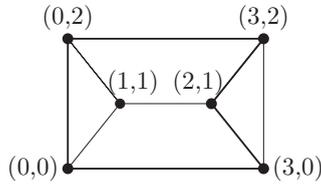


Figura 4.10:  $(\mathcal{G}_C, x_C)$  em  $\mathbb{R}^2$

**Teorema 4.3.** *Seja  $(\mathcal{G}, x)$  uma estrutura genérica, então  $(\mathcal{G}, x)$  é localmente rígida se e somente se é infinitesimalmente rígida.*

*Demonstração.* Veja [12, pg. 173]. □

## 4.2 Rigidez de grafos

Como vimos na seção anterior, a rigidez infinitesimal de uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  pode ser determinada pelo posto de sua matriz de rigidez  $R$ . Assim, podemos dizer informalmente que a rigidez de uma estrutura depende da quantidade de *arestas independentes* existentes no grafo. Por arestas independentes, queremos dizer que as linhas de  $R$  associadas a estas arestas são linearmente independentes. Isto motiva a seguinte definição.

**Definição 4.8.** *Dizemos que um grafo  $\mathcal{G} = (V, E)$  é independente em  $\mathbb{R}^k$  quando  $\text{posto}(R(\mathcal{G}, x)) = |E|$  para toda realização genérica  $x$  de  $\mathcal{G}$  em  $\mathbb{R}^k$ .*

Em outras palavras, dizemos que  $\mathcal{G}$  é independente quando todas as linhas de sua matriz de rigidez *genérica*<sup>1</sup> são linearmente independentes, i.e., o posto de  $R(\mathcal{G}, x)$  é maximal para qualquer realização genérica  $x$  em  $\mathbb{R}^k$ .

A noção de grafo independente nos permite analisar a rigidez de um ponto de vista combinatório, olhando especificamente para o conjunto de arestas do grafo, sem se preocupar com possíveis realizações.

**Definição 4.9.** *Dizemos que uma estrutura genérica  $(\mathcal{G}, x)$  é minimalmente rígida, quando é infinitesimalmente rígida e  $\mathcal{G}$  é independente:*

$$\text{posto}(R(\mathcal{G}, x)) = |E| = S(|V|, k).$$

Note que se uma estrutura é *minimalmente rígida* então ao removermos qualquer aresta, ela se torna (infinitesimalmente) flexível.

**Exercício 4.10.** *Explique porque ao remover uma aresta de uma estrutura minimalmente rígida a mesma se torna infinitesimalmente flexível.*

<sup>1</sup>Determinar o “posto genérico” de  $R(\mathcal{G}, x)$ , considerando  $x$  variável sobre todas as realizações genéricas de  $\mathcal{G}$  em  $\mathbb{R}^k$  não é tarefa fácil; pelo menos não para  $k \geq 3$  [53].

**Definição 4.10.** Dizemos que uma estrutura genérica localmente rígida  $(\mathcal{G}, x)$  é redundantemente rígida, se dado  $\{u, v\} \in E$  e uma subestrutura  $(\mathcal{G}', x')$  tal que  $\mathcal{G}' = (V, E')$  em que  $E' = E \setminus \{u, v\}$ ,  $(\mathcal{G}', x')$  é localmente rígida.

**Exercício 4.11.** Prove que se  $(\mathcal{G}, x)$  é genérica e localmente rígida, então  $|E| \geq S(|V|, k)$ .

**Lema 4.1.** Toda estrutura genérica localmente rígida  $(\mathcal{G}, x)$  admite uma subestrutura localmente rígida  $(\mathcal{G}', x')$  com exatamente  $S(n, k)$  arestas, em que  $n$  é o número de vértices de  $\mathcal{G}$ .

*Demonstração.* Veja [52, pg.5]. □

Estamos prontos para um dos principais resultados desta seção.

**Teorema 4.4** (Condição de Maxwell). *Se um grafo  $\mathcal{G} = (V, E)$  é independente em  $\mathbb{R}^k$ , então para todo subgrafo  $\mathcal{G}' = (V', E')$  com  $|V'| \geq k + 1$ , temos que  $|E'| \leq S(|V'|, k)$ .*

*Demonstração.* Suponha que  $|E'| > |V'|k - \frac{k(k+1)}{2}$ , para algum  $V' \subseteq V$  com  $|V'| \geq k + 1$ . Então temos que,  $H = (V', E')$  terá matriz de rigidez  $R(H, x_H) := R_H$  tal que

$$\text{posto}(R_H) \leq S(|V'|, k) = |V'|k - \frac{k(k+1)}{2} < |E'|,$$

Logo devem haver linhas linearmente dependentes em  $R_H$ , pois esta matriz tem exatamente  $|E'|$  linhas. Como  $H$  é subgrafo de  $\mathcal{G}$  então temos que  $E' \subseteq E$ , e  $R(\mathcal{G}, x)$  tem linhas linearmente dependentes, o que contradiz a hipótese de  $\mathcal{G}$  ser independente. □

A condição de Maxwell é também suficiente para  $k = 1$  como mostra o seguinte resultado discutido em [53, pg.9].

**Lema 4.2.** *Um grafo  $\mathcal{G}$  é independente em  $\mathbb{R}$  se e somente se  $|E'| \leq |V'| - 1$  para todo  $V' \subseteq V$ , com  $|V'| \geq 2$ .*

Com este resultado, caracterizamos complemente a rigidez de grafos realizados na reta.

**Teorema 4.5.** *Seja  $(\mathcal{G}, x)$  uma estrutura genérica em  $\mathbb{R}$ . Então  $(\mathcal{G}, x)$  é localmente rígida se, e somente se,  $\mathcal{G}$  é conexo.*

**Exercício 4.12.** *Demonstrar o Teorema 4.5.*

Laman provou que a condição de Maxwell também é suficiente para  $k = 2$  [53].

**Teorema 4.6** (Teorema de Laman). *Um grafo  $\mathcal{G}$  é independente em  $\mathbb{R}^2$  se e somente se  $|E'| \leq 2|V'| - 3$ ,  $\forall V' \subseteq V$ , com  $|V'| \geq 3$ .*

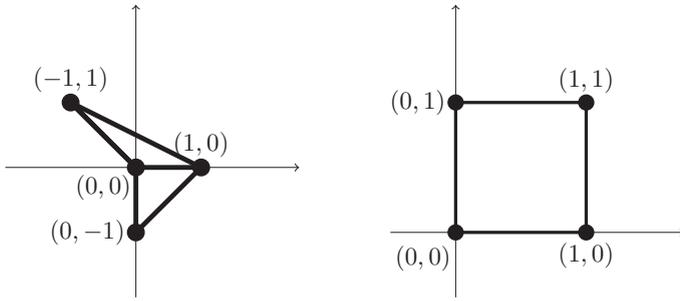


Figura 4.11: Estruturas em  $\mathbb{R}^2$ .

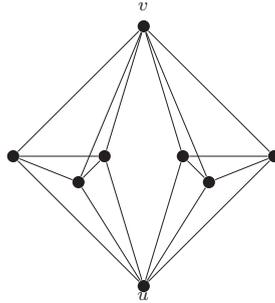


Figura 4.12: Para  $k = 3$ , a estrutura acima (conhecida como *double banana*) satisfaz o critério de Laman, mas não é rígida.

Lembre que uma estrutura é minimalmente rígida se for infinitesimalmente rígida e o grafo correspondente for independente. Então é direto que unindo estas condições com o Teorema de Laman, teremos o seguinte resultado.

**Corolário 4.1.** *Uma estrutura  $(\mathcal{G}, x)$  é minimalmente rígida em  $\mathbb{R}^2$  se e somente se  $|E| = 2|V| - 3$  e para todo  $V' \subseteq V$ , com  $|V'| \geq 3$ ,  $|E'| \leq 2|V'| - 3$ .*

**Exercício 4.13.** *Verifique o Teorema de Laman para os grafos da Figura 4.11. O que podemos dizer com respeito ao Corolário 4.1?*

Infelizmente a condição de Maxwell não é suficiente para  $k \geq 3$ , conforme mostra a Figura 4.12. Para este grafo, cada uma das suas subestruturas obedece a condição de Maxwell, porém a estrutura admite uma flexão em torno do eixo que passa pelos vértices  $u$  e  $v$  e portanto o grafo não pode ser independente.

## Capítulo 5

# Algoritmos de reconstrução sequencial

Neste capítulo apresentaremos métodos de reconstrução geométrica sequencial para classes especiais do PGD. A ideia destes métodos é explorar sequencialmente a rigidez local ou global de subgrafos de  $\mathcal{G}$ , o que garante uma quantidade finita de realizações (módulo movimentos rígidos) para cada subgrafo.

Os métodos mais bem sucedidos, na verdade, assumem que há uma sequência de cliques adjacentes em  $\mathcal{G}$  e acabam reconstruindo a estrutura “um clique após o outro”. Dentre os principais métodos dessa família, destacamos o *Geometric Build-up* [111, 112] que explora sequências de  $(k + 1)$ -cliques adjacentes, obtendo uma realização única em  $\mathbb{R}^k$ , e o *Branch-and-Prune* [22, 66, 67] capaz de trabalhar com  $k$ -cliques adjacentes a fim de determinar uma quantidade finita de soluções incongruentes para o PGD em  $\mathbb{R}^k$ . Estes métodos, detalhes de implementação e variantes serão tratados neste capítulo.

### 5.1 Distâncias exatas, resolução em tempo linear

No Capítulo 3 vimos que se uma matriz de distâncias  $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$  admite uma realização em  $\mathbb{R}^k$  (para algum inteiro positivo  $k$ ), então as coordenadas dos pontos podem ser obtidas, em tempo polinomial, utilizando a decomposição espectral da matriz de Gram  $G$  (veja Seção 3.5).

No entanto, assumindo que  $D$  é realizável, é possível fazer ainda melhor. Em [33], os autores mostram que, se sabemos a priori que  $D$  é realizável em  $\mathbb{R}^3$ , então é possível obter a realização em tempo linear.

Em verdade, *não* precisamos de *todas* as distâncias de  $D$ . O método consiste em posicionar um ponto de cada vez, e assume que pelo menos 4 distâncias são conhecidas, entre o ponto a ser posicionado e outros quatro pontos de referência já realizados.

Assim, supondo que inicialmente podemos fixar as posições de 4 re-

ferências iniciais, digamos  $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ , a posição  $x_k$  do  $k$ -ésimo ponto é dada pela solução de

$$\begin{aligned} \|x_k - x_1\| &= d_{k,1}, \\ \|x_k - x_2\| &= d_{k,2}, \\ \|x_k - x_3\| &= d_{k,3}, \\ \|x_k - x_4\| &= d_{k,4}. \end{aligned} \tag{5.1.1}$$

Elevando as equações ao quadrado, e subtraindo a primeira das demais, obtemos um sistema linear

$$Ax = b, \tag{5.1.2}$$

em que,

$$A = 2 \begin{bmatrix} (x_1 - x_2)^T \\ (x_1 - x_3)^T \\ (x_1 - x_4)^T \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} (d_{k,2}^2 - d_{k,1}^2) - (\|x_1\|^2 - \|x_2\|^2) \\ (d_{k,3}^2 - d_{k,1}^2) - (\|x_1\|^2 - \|x_3\|^2) \\ (d_{k,4}^2 - d_{k,1}^2) - (\|x_1\|^2 - \|x_4\|^2) \end{bmatrix}. \tag{5.1.3}$$

Logo, se  $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$  são não coplanares, existe uma única solução para o sistema linear que corresponde à posição  $x_k$ . Supondo que podemos repetir o processo para todos os  $n - 4$  pontos restantes, teremos a resolução de  $n - 4$  sistemas lineares  $3 \times 3$  e, portanto, o custo computacional é  $O(n)$ . Este método é conhecido como *Geometric Build-up* [33, 111].

**Exercício 5.1.** Explique porque a matriz  $A$  em (5.1.3) é não singular quando  $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$  são não coplanares.

**Exercício 5.2.** Generalize a ideia que resultou no sistema linear definido por (5.1.2) e (5.1.3) para encontrar a posição de um ponto  $x \in \mathbb{R}^k$ , dadas as distâncias entre tal ponto e  $k + 1$  pontos  $x_1, x_2, \dots, x_{k+1}$  previamente posicionados. Sob que condições sobre  $x_1, x_2, \dots, x_{k+1}$ , a matriz  $A$  associada é não singular?

Note que o problema definido por (5.1.1) está relacionado com determinar os pontos na interseção de 4 esferas em  $\mathbb{R}^3$ . Se os centros de tais esferas  $x_1, x_2, x_3, x_4$  não moram no mesmo plano então, quando não vazia, a interseção é única. O procedimento descrito acima quando aplicado a localização de um ponto em  $\mathbb{R}^2$ , usando as distâncias entre tal ponto e outros três pontos de posição conhecida, é também conhecido como *trilateração* [33, 84]. Tal processo pode ser generalizado para  $\mathbb{R}^k$ , com  $k \geq 3$ , desde que para cada novo ponto a ser posicionado, as distâncias em relação a  $k + 1$  pontos já localizados sejam conhecidas. Para detalhes sobre intersecções de esferas em  $\mathbb{R}^k$  e sua aplicação em Geometria de Distâncias, veja [85, 2].

Implicitamente, o método assume a existência de uma ordenação, para os vértices  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$  tal que (i) os primeiros  $k + 1$  vértices formam um clique; e (ii) para todo vértice  $v_i$ , com  $i > k + 1$ , há pelo menos  $k + 1$  predecessores adjacentes, i.e., há pelo menos  $k + 1$  vértices em  $\{v_1, v_2, \dots, v_{i-1}\}$  que são adjacentes a  $v_i$ .

Embora em algumas aplicações, como em localização de rede de sensores [18, 55, 104], tal hipótese seja razoável, ela pode ser restritiva em outros casos, como no problema de determinação de estruturas proteicas [22, 66]. Na próxima seção veremos que esta hipótese pode ser relaxada, ao preço de trocar uma complexidade polinomial (ou linear) por uma exponencial, no pior caso.

## 5.2 Uma abordagem combinatória para o PGD

Para uma classe especial de PGDs, é possível mostrar que o espaço de busca contínuo (lembre-se que buscamos soluções para o sistema não-linear (1.1.1) em  $\mathbb{R}^{nk}$ ) pode ser discretizado e a procura por realizações se reduz a uma busca em árvore [83]. A motivação para esta classe de problemas, vem da trilateração ( $(k+1)$ -lateração), mas com hipóteses um pouco mais fracas.

**Definição 5.1.** *Seja  $\mathcal{G} = (V, E, d)$  uma instância do PGD para a qual buscamos uma realização em  $\mathbb{R}^k$ . Dizemos que tal instância do PGD é discretizável, se existe uma ordem  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$  para os vértices em  $V$  tal que:*

1. o subgrafo induzido  $\mathcal{G}[\{v_1, v_2, \dots, v_k\}]$  é completo;
2. para  $i > k$ , existe um conjunto  $U(i) \subset P(i) := \{v_j \in V : j < i\}$  tal que
  - (a)  $U(i) = \{u_1, u_2, \dots, u_k\}$ ;
  - (b)  $\{u, v_i\} \in E, \quad \forall u \in U(i)$ ;
  - (c)  $CM(u_1, u_2, \dots, u_k)^2 > 0$ .

Na Definição 5.1, a condição (1) assegura que todas as distâncias entre os  $k$  primeiros vértices são conhecidas. Desse modo, temos uma submatriz de distâncias  $k \times k$  completa, e podemos determinar a posição deste  $k$ -clique inicial através da decomposição espectral da matriz de Gram associada, como já discutido na Seção 3.5.

A condição (2) basicamente diz que para todos os vértices  $v_i$  posteriores aos  $k$  primeiros (segundo a ordem definida pela sequência  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$ ) devem possuir ao menos  $k$  predecessores adjacentes. Além disso, a condição (2c) pede que as possíveis realizações dos vértices de referência  $\{u_1, \dots, u_k\}$  sejam não-degeneradas em  $\mathbb{R}^{k-1}$ , isto é, seu volume  $(k-1)$ -dimensional deve ser estritamente positivo. Em (2c),  $CM(u_1, u_2, \dots, u_k)$  denota o determinante de Cayley-Menger discutido no Capítulo 2.

Tais condições garantem que as possíveis posições  $x_i$  para o vértice  $v_i$  podem ser determinadas pela interseção de  $k$  esferas em  $\mathbb{R}^k$  com centros afimemente independentes [85], o que resulta em no máximo duas posições candidatas  $x_i^+$  e  $x_i^-$ . Veja a Figura 5.1 para um exemplo em  $\mathbb{R}^3$ . Em outras palavras, dada uma realização parcial, até o vértice  $v_{i-1}$  por exemplo, o próximo vértice  $v_i$  a ser posicionado poderá ocupar apenas duas posições que

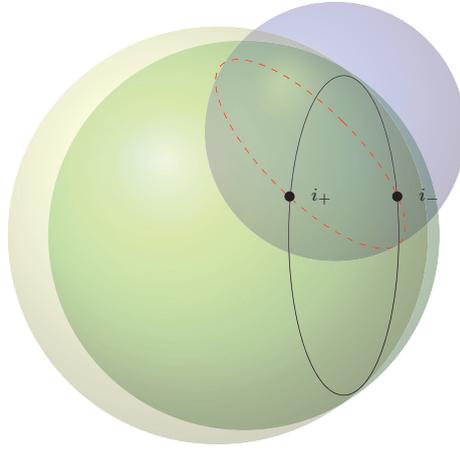


Figura 5.1: Interseção de 3 esferas, com centros não colineares.

dependem das posições dos vértices anteriores (dos vértices de referência). Portanto, este processo nos leva a busca em uma árvore binária, cujos nós de cada nível  $i$  representam as possíveis e *finitas* posições para o vértice  $v_i$ . Assim, temos um problema combinatório.

**Exercício 5.3.** Usando um raciocínio análogo ao usado para obter as equações (5.1.1), (5.1.2) e (5.1.3), mostre que a interseção de 3 esferas em  $\mathbb{R}^3$ , com centros não-colineares, é composta por no máximo 2 pontos.

**Exercício 5.4.** Considere a instância do PGD em  $\mathbb{R}^3$  definida pelas distâncias  $d_{12} = d_{13} = d_{14} = d_{15} = 1$ ,  $d_{23} = d_{24} = d_{34} = d_{35} = d_{45} = \sqrt{2}$ . Mostre que essa instância é discretizável, i.e., que existe uma ordenação dos vértices  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$  tal que as condições da Definição 5.1 são satisfeitas. Em seguida, usando as ideias discutidas nesta seção, encontre todas as soluções para este PGD a menos de transformações rígidas.

**Exercício 5.5.** Seja  $\mathcal{G} = (V, E, d)$  um PGD discretizável em dimensão  $k$ . Determine um limitante inferior para  $|E|$ .

**Exemplo 5.1.** Nos problemas de predição de estruturas protéicas, as distâncias entre átomos separados por uma ou duas ligações covalentes são conhecidas a priori [32, 59, 69]. Portanto, os três primeiros átomos de uma dada molécula de proteína, digamos  $\{i''', i'', i'\}$ , podem ser fixados. O quarto átomo, denotado por  $i$ , é determinado pelo ângulo diedral  $\omega$  formado pelos quatro átomos da sequência.

Se, além das distâncias  $d_{i',i}$  e  $d_{i'',i}$ , a distância  $d_{i''',i}$  também é exata, então é possível calcular o  $\cos(\omega)$  e obter apenas duas possibilidades para a posição do átomo  $i$  (veja Figura 5.2). Esta é a chave para a discretização

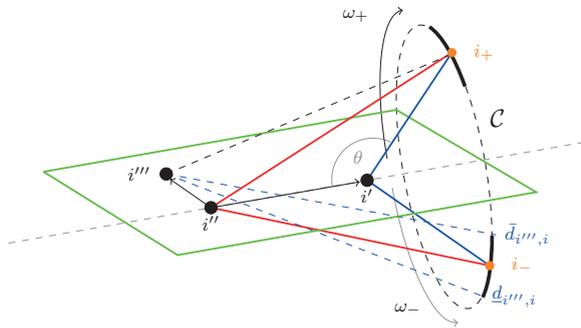


Figura 5.2: Possíveis posições para o átomo  $i$  quando as distâncias entre  $i$  e três átomos de referência  $\{i', i'', i'''\}$  são conhecidas.

do problema, pois sem essa informação, o quarto átomo poderia estar em qualquer ponto da circunferência  $C$  [80, 83, 85].

Conhecendo então todas as distâncias entre átomos separados por uma, duas e três ligações covalentes, o PGD Molecular pode ser visto como um problema combinatório.

**Exercício 5.6.** Na Figura 5.2, suponha que todas as distâncias entre os átomos  $\{i, i', i'', i'''\}$  são conhecidas. Usando  $\{i', i'', i'''\}$  como referências para posicionar  $i$ , e assumindo que  $i'$  está na origem, que  $\{i', i'', i'''\}$  definem o plano  $xy$  com  $i''$  e  $i'$  definindo o eixo  $x$ , encontre uma expressão para  $x_i$  dependendo apenas das distâncias envolvidas, de  $\cos \theta$ ,  $\sin \theta$ ,  $\cos \omega$ ,  $\sin \omega$ . A seguir determine os valores de  $\cos \theta$ ,  $\sin \theta$ ,  $\cos \omega$ ,  $\sin \omega$  em função das distâncias envolvidas.

Em [66], foi introduzida uma nova classe de PGDs moleculares discretizáveis: DMDGP (do inglês Discretizable Molecular Distance Geometry Problem). Com essa estrutura combinatória, o problema continua sendo NP-difícil [80, 83], mas a nova abordagem possibilitou o uso de ferramentas da matemática discreta, trazendo novas maneiras de abordar o problema.

Vale ainda ressaltar que se nas condições (1) e (2) da Definição 5.1 trocarmos  $k$  por  $k + 1$ , então teríamos uma ordenação dos vértices que permitiria a aplicação da  $(k + 1)$ -lateração da Seção 5.1.

### 5.2.1 Branch-and-prune

O procedimento que acabamos de descrever é análogo ao da Seção 5.1, baseando-se também na interseção de esferas, de centros nos átomos de referência e raios iguais a distância entre o átomo a ser posicionado e as referências previamente realizadas. Em  $\mathbb{R}^3$ , o procedimento da Seção 5.2, exige apenas 3 referências (ao invés de 4 como na Seção 5.1) e as 3 distâncias necessárias, geralmente, estão disponíveis em instâncias de proteínas.

**Algorithm 1** Branch-and-Prune (BP)

---

```

1: BP( $i, n, k, \mathcal{G}, \varepsilon, x$ )                                     % ( $i > k$ )
2: if ( $i > n$ ) then
3:   print (imprimir solução encontrada)
4: else
5:   Determine os predecessores adjacentes  $U(i)$ , segundo a Definição 5.1.
6:   Calcule a intersecção de  $k$  esferas em  $\mathbb{R}^k$ : de centros  $u_j \in U(i)$  e raios  $d(u_j, v_i)$ , para
      $i = 1, \dots, k$ , e guarde as posições candidatas  $\{x_i^+, x_i^-\}$ .
7:   if  $x_i^+$  é viável then
8:     Faça  $x_i = x_i^+$  e chame BP( $i + 1, n, k, \mathcal{G}, \varepsilon, x$ ).           % 1ª posição candidata
9:   end if
10:  if  $x_i^-$  é viável then
11:    Faça  $x_i = x_i^-$  e chame BP( $i + 1, n, k, \mathcal{G}, \varepsilon, x$ ).           % 2ª posição candidata
12:  end if
13: end if

```

---

Como consequência, perdemos a unicidade na realização do átomo  $i$ . Após definir uma ordem na qual os átomos serão realizados (de tal modo que cada átomo tenha pelo menos 3 referências [91, 43]), usando as distâncias entre o átomo  $i$  e suas 3 referências (não colineares) obtemos no máximo 2 posições candidatas. Este procedimento pode ser repetido e o espaço de busca representado por uma árvore binária, de tal modo que o  $\ell$ -ésimo nível terá  $2^{\ell-3}$  nós.

Note que usando apenas as distâncias envolvidas na discretização, uma busca na árvore tem um pior caso exponencial. No entanto, geralmente em uma instância do DMDGP temos distâncias adicionais, além daquelas utilizadas para obter as posições candidatas. Tais distâncias são denominadas *distâncias de poda*. Ao tentar realizar o  $i$ -ésimo átomo (com base em uma realização parcial) podemos eliminar uma das 2 posições candidatas, usando a distância de  $i$  a um outro átomo  $h$  anteriormente posicionado (não coplanar com  $\{i''', i'', i'\}$ ). Assim, se  $x_i^+$  e  $x_i^-$  são as posições candidatas para  $i$ , apenas uma das igualdades:

$$\|x_h - x_i^+\| = d_{h,i} \quad \text{ou} \quad \|x_h - x_i^-\| = d_{h,i}$$

é satisfeita. A posição que não satisfaz a igualdade acima (dentro de uma certa tolerância) é podada e o ramo da árvore correspondente não precisa ser explorado.

O algoritmo que emprega o procedimento acima para explorar a árvore de um DMDGP é denominado Branch-and-Prune (BP) [80, 66, 43]. Tal busca em árvore pode ser implementada de forma *recursiva*, como apresentado no Algoritmo 1.

**Limitação na largura da árvore.** Como já mencionado, em um pior caso, quando as distâncias de poda aparecem em um número muito pequeno, o BP é exponencial. No entanto, em determinados procedimentos experimentais, verifica-se que tais distâncias aparecem em uma quantidade razoável, a

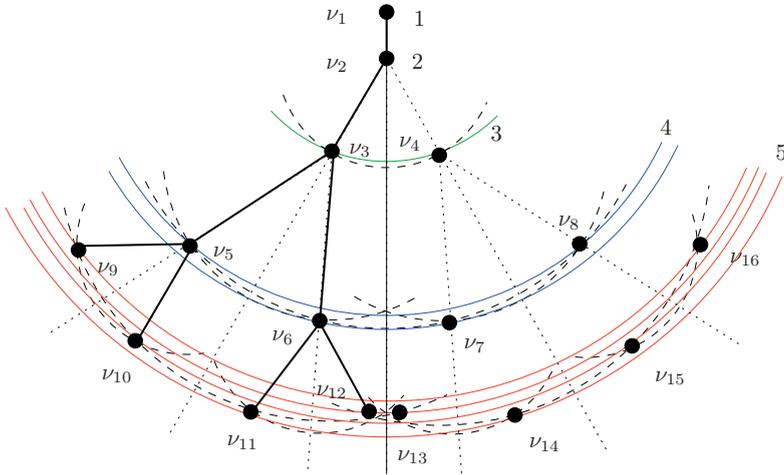


Figura 5.3: Representação da árvore de busca binária do BP, juntamente com possíveis realizações em  $\mathbb{R}^2$  para uma instância do DMDGP. Os arcos coloridos representam as distâncias das possíveis posições dos vértices em relação ao primeiro.

ponto de manter a largura(número de nós ativos) da árvore limitada, o que torna o BP bastante eficiente quando aplicado a DMDGPs provenientes de proteínas [82]. Por exemplo, é possível obter todas as soluções incongruentes de um DMDGP com 3861 átomos e 35028 distâncias em menos de 5s em um computador pessoal [81].

Pela Figura 5.2, podemos perceber que as duas posições candidatas são simétricas com respeito ao plano definido por  $\{i''', i'', i'\}$ . Esse fato, aliado a ordem pré-estabelecida para os átomos, induz uma série de simetrias na árvore de busca de um DMDGP, que permitem provar a limitação no número de nós ativos em um certo nível [84, 37].

**Proposição 5.1.** *Considere um problema DMDGP. Se existe uma distância de poda do primeiro átomo na sequência até o  $j$ -ésimo átomo, então, com probabilidade 1, haverá apenas dois (dentre os  $2^{j-3}$  possíveis) nós factíveis no  $j$ -ésimo nível da árvore de busca do BP.*

Uma demonstração baseada em operadores de reflexão parcial e teoria de grupos pode ser encontrada em [82, 79, 84]. A Figura 5.3 ilustra a proposição anterior para um DMDGP em  $\mathbb{R}^2$ . A vantagem em considerar a dimensão  $k = 2$ , é que podemos representar na mesma figura a estrutura de árvore de busca e as possíveis realizações de cada vértice.

É claro que, se para *todo* átomo tivermos ao menos uma distância de poda, então o método se reduz a aquele da Seção 5.1, e o problema pode ser

resolvido em tempo linear.

**Exercício 5.7.** Considere um DMDGP ( $k = 3$ ) com o seguinte conjunto de arestas

$$E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{1, 4\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}, \{2, 5\}, \{3, 5\}, \\ \{4, 5\}, \{1, 6\}, \{2, 6\}, \{3, 6\}, \{4, 6\}, \{5, 6\}\}.$$

Explique porque não é suficiente que  $x_6$  satisfaça 4 distâncias quaisquer das 5 disponíveis para o vértice 6.

### 5.3 Algoritmo usando EDMs

Nas Seções 5.1 e 5.2 estudamos as bases dos algoritmos de reconstrução geométrica sequencial. Tanto no caso da  $(k+1)$ -lateração (Seção 5.1) quanto da  $k$ -lateração (Seção 5.2), as possíveis posições de um novo ponto podem ser calculadas a partir da resolução de um sistema de equações quadráticas similar a (5.1.1), que corresponde a encontrar a intersecção de  $k+1$  (ou  $k$ ) esferas em  $\mathbb{R}^k$ . Embora esta tarefa possa ser feita através da resolução de sistemas lineares, similares a (5.1.2) e (5.1.3), ou geometricamente (vide Exercício 5.6) [43], nesta seção discutiremos uma alternativa baseada em EDMs (apresentadas no Capítulo 3).

A razão para isto é que o formalismo de EDMs permite uma generalização natural destes algoritmos para dimensões maiores ( $k > 3$ ) bem como o tratamento de dados com ruído. Focaremos no caso da  $(k+1)$ -lateração por ser mais direto, mas a aplicação destes conceitos a  $k$ -lateração (e ao algoritmo BP) também é possível (consulte [42] para mais detalhes).

Na Seção 3.5, vimos como uma realização para um grafo completo pode ser encontrada usando EDMs. A questão é que em problemas práticos não dispomos de todas as distâncias entre pares de pontos. No entanto, se temos um grafo que permite a  $(k+1)$ -lateração, i.e., um grafo associado a um PGD que satisfaz as condições 1 e 2 da Definição 5.1 com  $k+1$  no lugar de  $k$ , então podemos empregar EDMs da seguinte forma.

O clique inicial nos  $k+1$  primeiros vértices pode ser realizado conforme a Seção 3.5.

A seguir, para cada novo vértice  $i$  a ser posicionado, construímos uma (sub)matriz de distâncias com as distâncias entre os pontos  $\{i\} \cup \hat{U}(i)$ , em que  $\hat{U}(i) = \{u \in P(i) \mid \{u, v_i\} \in E\}$  representa o conjunto de *todos* os predecessores adjacentes a  $i$ . Por hipótese,  $\hat{U}(i)$  contém um subconjunto de vértices  $U(i)$  já realizados, tal que  $|U(i)| = k+1$ , e cujas posições são afimemente independentes. Lembre-se que isso garante a unicidade na localização de  $i$ . Também por hipótese, todas as distâncias entre  $i$  e vértices de  $\hat{U}(i)$  são conhecidas. Embora algumas distâncias entre os vértices de  $\hat{U}(i)$  possam não ser conhecidas, estas podem ser explicitamente calculadas, uma vez que os vértices em  $\hat{U}(i)$  já estão posicionados. Assim, temos uma submatriz  $D_i$  com

todas as distâncias entre vértices de  $\{i\} \cup \hat{U}(i)$ . Sem perda de generalidade, assuma que as linhas e colunas de  $G_i$  estão em ordem crescente segundo os índices em  $\{i\} \cup \hat{U}(i)$ , de modo que a última coluna corresponde às distâncias entre  $i$  e os vértices em  $\hat{U}(i)$ .

A partir de  $D_i$ , obtemos  $G_i = -(1/2)JD_iJ$ , em que  $J$  é a matriz de centragem de dimensão compatível. Note que, se  $|\{i\} \cup \hat{U}(i)| = p$ , então  $D_i, G_i \in \mathbb{R}^{p \times p}$ . Pelo que vimos na Seção 3.5, se  $G_i$  é positiva semidefinida, e de posto  $r = k$ , então

$$X_i = \sqrt{\Lambda(1 : k, 1 : k)}Q(:, 1 : k)^T$$

fornece uma realização válida para os vértices de  $\{i\} \cup \hat{U}(i)$ , e a última coluna de  $X_i \in \mathbb{R}^{k \times p}$  corresponde a posição do novo vértice  $i$ .

Aqui é importante notar que, como  $G_i \mathbf{1} = 0$ , então  $X_i \mathbf{1} = 0$ , ou seja, as colunas de  $X_i$  correspondem a vetores posição que estão centralizados na origem. Por essa razão, as novas posições para os vértices de  $\hat{U}(i)$  não coincidem com as posições já calculadas. É necessário realizar um movimento rígido para que os pontos de  $X_i$  (primeiras  $p - 1$  colunas) se encaixem aos pontos previamente localizados.

Para isso, escolhemos  $k + 1$  colunas afimemente independentes de  $X_i$ , com exceção da última, e calculamos uma translação e rotação/reflexão adequadas. Sejam  $Y$  e  $Z$  matrizes cujas  $k + 1$  colunas contêm as posições antigas e novas dos  $k + 1$  pontos que escolhemos de  $\hat{U}(i)$ , respectivamente.

Após centralizar estes pontos:  $Z_c = Z - x_c \mathbf{1}$ ,  $Y_c = Y - y_c \mathbf{1}$ , em que  $y_c$  e  $x_c$  são os respectivos centros de massa, devemos encontrar a matriz ortogonal  $Q$  que minimiza  $\|QZ_c - Y_c\|_F^2$  (a solução deste problema é discutida na Seção 5.4.2). Finalmente, se  $x_i$  representa a última coluna de  $X_i$ , a posição para o vértice  $i$  é dada por

$$\hat{x}_i = Q(x_i - x_c) + y_c. \quad (5.3.4)$$

**Distâncias com ruído.** Como vimos na Seção 3.5.1, se as entradas de  $D_i$  são perturbadas por ruído, a matriz  $G_i = -(1/2)JD_iJ$  pode apresentar autovalores *negativos*, o que indica que  $D_i$  não é EDM. Mesmo assim, podemos considerar  $G_{i+} = X_{i+}^T X_{i+}$ , em que  $X_{i+} = \sqrt{\Lambda(1 : k, 1 : k)}Q_i(:, 1 : k)^T$ , como a melhor aproximação positiva semidefinida de posto  $k$  para  $G_i$ .

Para determinar se esta é uma aproximação “aceitável”, consideramos a razão

$$\rho = \frac{\sum_{j=1}^k \lambda_j^+}{\sum_{j=1}^p \lambda_j^+}, \quad (5.3.5)$$

lembrando que  $\lambda_i^+ = \max\{0, \lambda_i\}$ . Note que  $\rho \leq 1$ , sendo exatamente um quando  $D_i$  é uma EDM com dimensão de realização  $k$ . Como  $G_{i+}$  é uma aproximação para  $G_i$ ,  $\rho$  mede a qualidade de tal aproximação (quanto mais próximo de um, melhor). A razão (5.3.5) aparece com frequência em algoritmos para redução de dimensionalidade [20]. Um valor de  $\rho$  muito menor que um indica que o conjunto de distâncias em  $D_i$  não é realizável em  $\mathbb{R}^k$ .

**Algorithm 2** Geometric Build-up usando EDMs

---

```

1: GBU( $n, D, k, \varepsilon$ )
2: Encontre uma realização  $X(:, 1 : (k + 1))$  para a submatriz  $D(1 : (k + 1), 1 : (k + 1))$ .
3: for  $i = k + 2, \dots, n$  do
4:   Determine  $\hat{U}(i)$ , o conjunto dos predecessores adjacentes a  $i$ . Faça  $p = |\hat{U}(i) \cup \{v_i\}|$ .

5:   Construa a submatriz de distâncias  $D_i$  para  $\hat{U}(i) \cup \{v_i\}$  e a matriz  $G_i$  associada.
6:   Encontre  $X_i \in \mathbb{R}^{k \times p}$  segundo (3.5.7).
7:   Faça  $\rho = \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i^+}{\sum_{i=1}^p \lambda_i^+}$ , em que  $\lambda_i^+ = \max\{\lambda_i, 0\}$ .
8:   if  $(1 - \rho) > \varepsilon$  then
9:     return pare (distâncias incompatíveis).
10:  end if
11:  Use  $X_i(:, p)$  para calcular  $\hat{x}_i$  segundo (5.3.4).
12:  Armazene  $X(:, i) = \hat{x}_i$ .
13: end for
14: return uma realização aproximada  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$ .

```

---

Com a discussão apresentada nesta seção, podemos empregar o algoritmo de reconstrução sequencial descrito na Seção 5.3 mesmo quando as distâncias são corrompidas por um pequeno ruído, bastando usar  $X_{i+}$ , a melhor aproximação positiva semidefinida de posto  $k$ , no lugar de  $X_i$ . Este esquema geral está resumido no Algoritmo 2.

## 5.4 Qualidade da solução encontrada

Para avaliar a qualidade de uma dada realização para um certo PGD, em geral emprega-se dois tipos de medida/erro. Se uma solução esperada é conhecida previamente, então parece natural quantificar o desvio de uma realização encontrada por um algoritmo para tal solução. Tal desvio é dado pelo RMSD (Root Mean Square Deviation) que consiste em uma média das distâncias ponto-a-ponto, após um movimento rígido que minimize tais desvios. Outra medida importante, quando a solução do PGD não é conhecida, ou quando acredita-se que existam soluções diferentes para o PGD, é medir a violação das equações (1.1.1). Estes dois tipos de erro são discutidos nas próximas subseções. Para uma discussão mais detalhada destas e outras medidas de erro para o PGD, veja [57].

### 5.4.1 LDE e MDE

Duas medidas bastantes utilizadas para quantificar a violação das distâncias conhecidas, dada uma realização, são o LDE (Largest distance error) e o MDE (mean distance error).

Dada uma realização  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$  em  $\mathbb{R}^k$  para  $\mathcal{G} = (V, E, d)$ , o LDE é definido por

$$LDE(X, E, d) = \max_{\{i,j\} \in E} \|X_i - X_j\|_2 - d_{ij}, \quad (5.4.6)$$

em que o máximo é tomado sobre todas as distâncias disponíveis/conhecidas, i.e., todos os pares  $\{i, j\} \in E$ .

Por outro lado, o MDE é uma média de tais violações:

$$MDE(X, E, d) = \frac{1}{|E|} \sum_{\{i, j\} \in E} |\|X_i - X_j\|_2 - d_{ij}|. \quad (5.4.7)$$

### 5.4.2 RMSD

RMSD (Root Mean Square Deviation) é uma medida para comparar o quão distantes são duas estruturas (conjuntos de pontos). Sejam  $X \in \mathbb{R}^{k \times n}$  e  $Z \in \mathbb{R}^{k \times n}$  matrizes que representam as coordenadas de dois conjuntos de  $n$  pontos *centrados na origem*. O RMSD é definido por:

$$RMSD(X, Z) = \min_Q \frac{1}{\sqrt{n}} \|QZ - X\|_F, \quad (5.4.8)$$

em que  $Q \in \mathbb{R}^{k \times k}$  é uma matriz ortogonal que representa uma rotação (ou reflexão). Desse modo, busca-se a matriz  $Q$  que rotacione a estrutura  $Z$  de modo que esta fique o mais próximo possível da estrutura  $X$ .

**Teorema 5.1.** *A matriz  $Q$ , solução de (5.4.8), é dada por*

$$Q = UV^T,$$

em que  $U$  e  $V$  são as matrizes ortogonais da decomposição em valores singulares de  $S = ZX^T = U\Sigma V^T$ .

*Demonstração.* O problema (5.4.8) pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \min_Q \quad & \|QZ - X\|_F^2 \\ \text{s.a.} \quad & Q^T Q = Q Q^T = I. \end{aligned} \quad (5.4.9)$$

Este problema é conhecido como problema de Procrustes ortogonal [102]. A condição de Lagrange para o problema acima é dada por:

$$2QZZ^T - 2ZX^T + (L + L^T)Q = 0,$$

em que  $L \in \mathbb{R}^{k \times k}$  é a matriz de multiplicadores de Lagrange. Da equação acima, obtemos

$$ZX^T Q^T = QZZ^T Q^T + (L + L^T)/2,$$

que implica que  $ZX^T Q^T$  é simétrica:

$$QXZ^T = ZX^T Q^T,$$

ou ainda

$$QXZ^T Q = ZX^T.$$

Chamando  $S = ZX^T$ , obtemos

$$SS^T = QS^T SQ^T. \quad (5.4.10)$$

Note que  $S^T S$  e  $SS^T$  são simétricas e portanto unitariamente diagonalizáveis:

$$S^T S = V\Lambda V^T, \quad SS^T = U\Lambda U^T,$$

em que  $U$  e  $V$  estão associadas à decomposição em valores singulares (SVD – Singular Value Decomposition) de  $S$ :  $S = U\Sigma V^T$ . Assim, de (5.4.10) concluímos que

$$Q = UV^T.$$

□

**Exercício 5.8.** *Com a ajuda de um pacote computacional capaz de obter a SVD de uma matriz, determine o RMSD entre as estruturas em  $\mathbb{R}^2$  abaixo, cujas coordenadas estão representadas como colunas das respectivas matrizes:*

$$Z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

## 5.5 Algoritmo de ordenação

Os algoritmos de reconstrução sequencial que vimos neste capítulo presumem (implicitamente) a existência de uma ordenação para os vértices  $(v_1, v_2, \dots, v_n)$  de  $V$  de modo que as hipóteses da Definição 5.1 sejam satisfeitas. No entanto, tais hipóteses podem não ser verificadas *diretamente* na prática, isto é, a ordem/enumeração natural dada aos vértices pode não satisfazer tais hipóteses. Então surge a pergunta: dado  $\mathcal{G} = (V, E)$ , é possível encontrar uma ordenação dos vértices de forma que as hipóteses da Definição 5.1 sejam satisfeitas? Tal ordenação é também conhecida como *ordem de discretização* [61, 43, 23, 73].

Nesta seção discutiremos um algoritmo para determinar a existência (ou não) de uma ordenação de vértices satisfazendo as hipóteses da Definição 5.1 com  $k + 1$  no lugar  $k$ , ou seja, um algoritmo para determinar uma ordem nos vértices que permita a  $(k + 1)$ -lateração.

O algoritmo, discutido em detalhes em [61], tenta completar uma ordem de discretização a partir de um  $(k + 1)$ -clique  $C$  em  $\mathcal{G}$ . No Algoritmo 3,  $\delta(v)$  denota o conjunto de vértices adjacentes a  $v$ .

Perceba que na entrada do Algoritmo 3, é necessário um clique  $C$  em  $k + 1$  vértices de  $\mathcal{G}$ . Uma maneira ingênua de determinar um  $(k + 1)$ -clique é considerar as possíveis combinações de  $k + 1$  dentre  $n$  vértices, e verificar se todas as distâncias na combinação são conhecidas. Em caso afirmativo, podemos invocar o algoritmo acima. Se nenhuma das combinações formar um  $(k + 1)$ -clique, então não existe ordem de  $(k + 1)$ -lateração para  $\mathcal{G}$ .

**Algorithm 3** Algoritmo de ordenação (Ganancioso)

---

```

1: DVOP( $\mathcal{G}(V, E), C, k$ )
2: Faça  $B = C$  e  $C_b = V \setminus B$ .
3: while  $C_b \neq \emptyset$  do
4:   Para todo  $u \in C_b$ , faça  $\alpha(u) = |\delta(u) \cap B|$ .
5:   Seja  $v = \operatorname{argmax}\{\alpha(u) : u \in C_b\}$ .
6:   if  $\alpha(v) < k + 1$  then
7:     pare (não existe ordenação a partir do clique  $C$ ).
8:   end if
9:   Para cada  $u \in \delta(v) \setminus B$ , atualize  $\alpha(v) \leftarrow \alpha(v) + 1$ .
10:  Atualize  $B = B \cup \{v\}$ ,  $C_b = C_b \setminus \{v\}$ .
11: end while
12: return Se não parou por falha,  $B$  representa a ordenação procurada.

```

---

**Exercício 5.9.** *Mostre que o procedimento acima para encontrar um  $(k+1)$ -clique em  $\mathcal{G}$  é polinomial em  $n$  para  $k$  fixo.*

Assumindo que existe um  $(k+1)$ -clique  $C$ , os vértices em  $C$  serão as entradas de uma lista chamada de  $B$ . Então, para cada  $v \in C_b$ , o complementar de  $B$ , calculamos o número de vértices adjacentes a  $v$  que já estão em  $B$ . Tais quantidades são armazenadas como entradas de um vetor  $\alpha$ . Para completar a ordenação (caso possível), enquanto  $C_b \neq \emptyset$ , adicionamos ao conjunto  $B$  o vértice  $v$  em  $C_b$  que possui o maior número de vértices adjacentes em  $B$  (analisando os valores correspondentes no vetor  $\alpha$ ; empates são quebrados arbitrariamente). Assim,  $B = B \cup \{v\}$  e  $C_b = C_b \setminus \{v\}$  (em verdade  $v$  ocupa a nova posição na ordem definida em  $B$ ). Após o vértice em  $C_b$  ter sido incorporado a lista  $B$ , os valores das entradas de  $\alpha$  são atualizados: somamos 1 a cada valor  $\alpha(u)$  caso  $u$  seja adjacente a  $v$ , o vértice recém incluído em  $B$ . O processo se repete para os próximos vértices em  $C_b$ , até que  $C_b = \emptyset$ . Caso exista ordenação válida a partir de  $C$ , esta é revelada ao final do processo na lista  $B$ . Se durante o processo, todos os valores de  $\alpha(v)$ , para  $v \notin B$ , forem menores que  $k+1$ , o algoritmo para pois não há ordenação a partir do clique inicial  $C$ , e então outro clique deve ser testado.

A corretude do algoritmo de ordenação descrito acima foi provada em [61], assim como sua complexidade polinomial. Como no Passo 4 escolhemos o vértice que possui o maior número de vértices adjacentes em  $B$ , o algoritmo em questão também é conhecido como algoritmo ganancioso (greedy).

Embora tenhamos este algoritmo polinomial, ordens de discretização podem ser obtidas de outras maneiras em algumas aplicações, explorando características de um problema em particular. Assim ocorreu com ordenações “artesaniais” desenvolvidas para o problema de determinação de estruturas moleculares [72, 66, 68, 64]. A busca por ordens de discretização ótimas, com respeito a certas propriedades, ainda é um tópico ativo de pesquisa [44, 95].

**Exercício 5.10.** *Dada um grafo  $\mathcal{G}$ , mostre que para existir uma ordem satisfazendo as hipóteses da Definição 5.1, o grau mínimo de cada vértices deve ser  $k$ .*

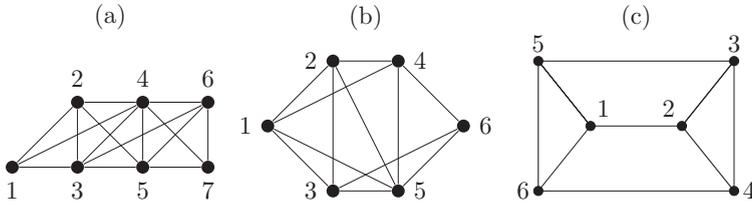


Figura 5.4: Grafos do Exercício 5.11.

**Exercício 5.11.** *Determine (se possível) uma ordem de trilateração para os grafos da Figura 5.4. Primeiro aplique o algoritmo ganancioso e em seguida tente encontrar (manualmente) uma ordenação diferente.*

**Exercício 5.12.** *Em algumas aplicações é desejável que na condição 2 da Definição 5.1, os vértices de  $U(i)$  sejam predecessores adjacentes imediatos de  $i$ , i.e.,  $U(i) = \{v_{i-k}, \dots, v_{i-2}, v_{i-1}\}$ . Neste caso dizemos que temos uma ordem de  $k$ -lateração consecutiva. Para os grafos do exercício anterior, determine se há uma ordem de 2-lateração consecutiva.*

**Exercício 5.13.** *Dê um exemplo de grafo que admite uma ordem de 2-lateração, mas não admite uma ordem de 2-lateração consecutiva.*

## 5.6 Um estudo de caso

Encerramos este capítulo com um estudo de caso relacionado à aplicação discutida na Seção 1.4.2: localização de sensores em rede.

Tipicamente, esta aplicação considera  $n$  sensores espalhados no plano, então  $k = 2$ . Além disso é comum conhecer a posição de alguns destes sensores, que recebem o nome de âncoras. O conhecimento de 3 âncoras não colineares e uma quantidade suficiente de distâncias entre sensores e sensores e âncoras, permite a localização absoluta de todos os objetos da rede.

A fim de simular os dados do problema, vamos considerar  $n = 1000$  pontos distribuídos de forma aleatória, amostrados de uma distribuição uniforme no quadrado unitário:  $[0, 1] \times [0, 1]$  como mostra a Figura 5.5.

Sem perda de generalidade, consideramos como âncoras os 3 pontos mais próximos da origem.

Para gerar os dados deste exemplo, vamos calcular todas as distâncias entre pares de objetos e manter como dados de entrada apenas as distâncias inferiores a um certo limiar  $R$ . Isto serve para simular o alcance do sinal de cada sensor/âncora, que só “enxerga” objetos dentro de um raio  $R$ . Em nosso exemplo, tomamos  $R = 0.07$ . Com isso temos o grafo Figura 5.6.

Agora sim, temos um PGD como na Definição 1.1, em o conjunto de vértices  $V$  é formado por âncoras e sensores, uma aresta  $\{i, j\}$  está em  $E$

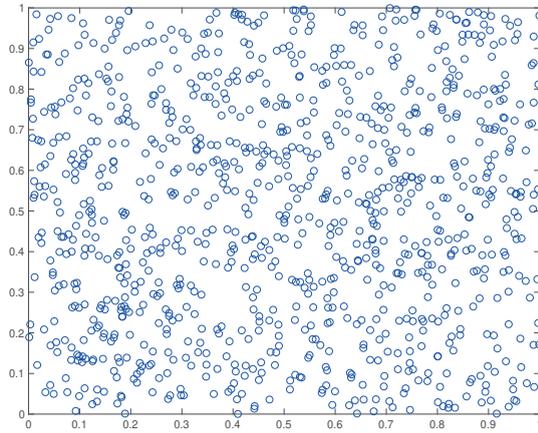


Figura 5.5: Localização original de sensores e âncoras.

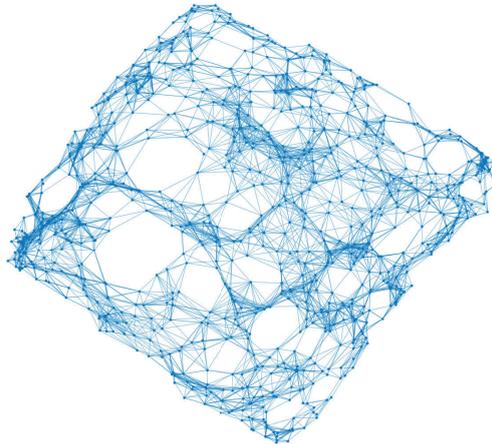


Figura 5.6: Grafo  $\mathcal{G}$  representando nosso exemplo.

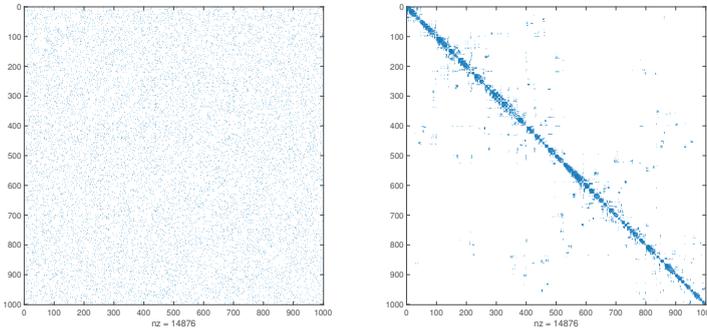


Figura 5.7: Matrizes de distâncias (incompletas) antes e depois da ordenação.

somente se  $d_{ij} \leq R$ , e a dimensão de interesse é  $k = 2$ . Note que  $|E| < n(n-1)/2$ , uma vez que removemos as distâncias maiores que  $R = 0.07$ .

Porém, a fim de aplicar o Algoritmo 2 para resolver este problema, precisamos antes determinar uma ordem de discretização para os vértices de  $V$  que garanta que os primeiros 3 vértices formam um clique e para todos os outros vértices seguindo tal ordem, há pelo menos 3 predecessores adjacentes.

Como clique inicial escolhemos as 3 âncoras de posições conhecidas. Aplicamos então o Algoritmo 3 para obter a ordem de discretização desejada. Neste exemplo, felizmente tal ordem existe, mas nem sempre este é o caso. Pode ser que tal ordenação de interesse exista, mas não com as 3 âncoras como clique inicial. Para ter certeza, todos os cliques devem ser testados. Note que se a ordem de discretização existir com outro 3-clique inicial, isto não nos impede de localizar globalmente os sensores, desde que conheçamos posições de 3 âncoras não colineares. Por fim, é importante notar que a existência de tal ordem depende do limiar  $R$ : para valores muito baixos pode ser que o grafo correspondente seja muito esparsa e não exista ordem de discretização (lembre-se que uma condição necessária para existência de tal ordem é que cada vértice do grafo tenha grau pelo menos  $k+1$ ).

A Figura 5.7 mostra a localização das distâncias conhecidas em uma matriz de distâncias antes e depois da ordenação.

Uma vez os vértices re-ordenados, podemos aplicar o Algoritmo 2 para encontrar uma realização válida. O resultado é apresentado na Figura 5.8, que mostra a sobreposição da realização obtida com a original da Figura 5.5. O RMSD entre as estruturas é de 0.0014 indicando que recuperamos o posicionamento original com boa precisão.

Infelizmente, em problemas reais, as distâncias não são estimadas com precisão e, quando disponíveis, sempre vem acompanhadas de ruído.

Para ter uma noção de como o ruído pode afetar a reconstrução obtida

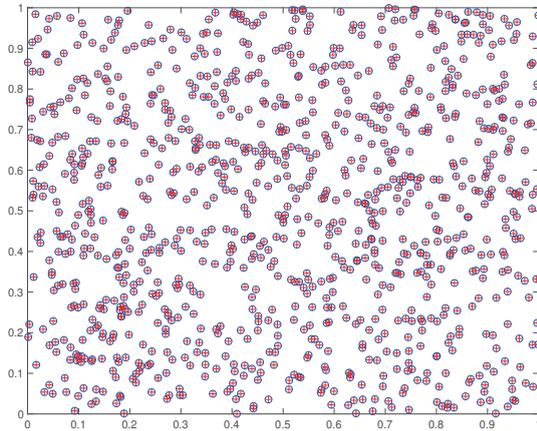


Figura 5.8: Superposição das posições originais e reconstruídas ( $\sigma = 0$ ).

por algoritmos sequenciais, como o Algoritmo 2, vamos introduzir um erro multiplicativo:

$$\tilde{d}_{ij}^2 = d_{ij}^2(1 + \sigma N(0, 1)),$$

em que  $\sigma \in (0, 1)$  e  $N(0, 1)$  denota um valor obtido de uma distribuição Gaussiana padrão.

Para  $\sigma = 0.01$ , após aplicar o Algoritmo 2, obtemos a realização apresentada na Figura 5.9. Agora o RMSD entre a estrutura reconstruída e a original é de 0.0143.

O desenvolvimento de algoritmos para o PGD de larga escala e com distâncias imprecisas ainda é tópico de pesquisas recentes [9, 68, 42].

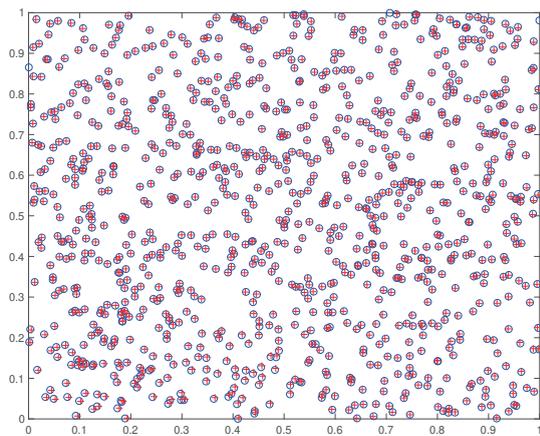


Figura 5.9: Superposição das posições originais e reconstruídas ( $\sigma = 0.01$ ).

# Capítulo 6

## Problemas em aberto

Encerramos estas notas com uma breve discussão sobre alguns problemas em aberto na área de Geometria de Distâncias. As próximas seções descrevem variações do problema fundamental de Geometria de Distâncias que são objeto de pesquisas recentes e que podem servir de tema para estudantes de pós-graduação e novos pesquisadores da área. Para mais detalhes sobre estes e outros desafios em Geometria de Distâncias, veja [78].

### 6.1 PGD intervalar

Já comentamos que para um conjunto incompleto de distâncias, o problema (1.1.1) é NP-difícil [100]. Em aplicações práticas, além do conjunto de distâncias não ser completo, as distâncias disponíveis ainda são imprecisas.

Por exemplo, em conformação de proteínas, métodos experimentais como a Ressonância Magnética Nuclear (RMN) [28, 71, 32, 68] não são capazes de fornecer distâncias exatas  $d_{ij}$ , mas sim, limitantes  $[\underline{d}_{ij}, \bar{d}_{ij}]$ , para algumas distâncias entre pares de átomos afastados não mais do que 5Å [28, 32].

Assim, em situações práticas, o problema (1.1.1) se torna, encontrar  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$  tal que

$$\underline{d}_{i,j} \leq \|x_i - x_j\| \leq \bar{d}_{i,j}, \quad \forall \{i, j\} \in E, \quad (6.1.1)$$

o qual chamamos de *PGD intervalar*. Portanto, o PGD intervalar consiste em encontrar uma realização em  $\mathbb{R}^k$  partindo de um conjunto esparsamente impreciso de distâncias [68, 43, 81].

É importante destacar que, mesmo quando a distância correta  $d_{ij}$  pertence ao intervalo  $[\underline{d}_{ij}, \bar{d}_{ij}]$ , para todo  $\{i, j\} \in E$ , nem todas as distâncias nestes intervalos são realizáveis [45]. Por exemplo, poderíamos amostrar um conjunto de distâncias que violam a desigualdade triangular mesmo pertencendo aos intervalos  $[\underline{d}_{ij}, \bar{d}_{ij}]$ . Este é um dos motivos pelos quais os métodos sequenciais do Capítulo 5 não podem ser estendidos trivialmente para o caso com distâncias intervalares.

Neste cenário, parece mais natural o emprego de métodos de otimização contínua. Uma possibilidade é considerar métodos especializados para o problema de otimização global inspirado em (1.2.3):

$$\begin{aligned} \min_{X,y} \quad & \frac{1}{2} \sum_{\{u,v\} \in E} (\|x_u - x_v\|^2 - y_{u,v}^2) := f(X, y) \\ \text{s.a} \quad & \underline{d}_{uv} \leq y_{u,v} \leq \bar{d}_{uv}, \quad \forall \{u, v\} \in E. \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

Como a função objetivo de (6.1.2) é não-convexa, métodos clássicos de otimização frequentemente acabam encontrando um minimizador local, a menos que o ponto inicial esteja muito próximo da solução global. Lembre que  $X$  é solução de (6.1.1) se, e somente se,  $f(X, y) = 0$ .

Outra linha promissora, é explorar a relação entre EDMs e matrizes semidefinidas positivas estudada no Capítulo 3. Mais especificamente, segundo [31], podemos formular o PGD intervalar como:

$$\begin{aligned} \min_{G=G^T} \quad & 0 \\ \text{s.a} \quad & \underline{d}_{ij}^2 \leq \langle A_{ij}, G \rangle \leq \bar{d}_{ij}^2, \quad \forall \{i, j\} \in E, \\ & G\mathbf{1} = 0, \quad G \succeq 0, \\ & \text{posto}(G) = k, \end{aligned} \quad (6.1.3)$$

em que  $A_{ij} = (e_i - e_j)(e_i - e_j)^T$ ,  $\langle Y, Z \rangle = \text{tr}(YZ^T)$  denota o produto interno do traço,  $e_i$  o  $i$ -ésimo vetor canônico e  $G \succeq 0$  significa que  $G$  é positiva semidefinida.

O problema acima seria um problema de programação semidefinida linear se não houvesse a restrição do posto. Tal restrição torna o conjunto viável de (6.1.3) não-convexo, dificultando a resolução de tal problema. No entanto, omitindo a restrição do posto, obtemos a seguinte *relaxação convexa*:

$$\begin{aligned} \min_{G=G^T} \quad & -\langle I, G \rangle \\ \text{s.a} \quad & \underline{d}_{ij}^2 \leq \langle A_{ij}, G \rangle \leq \bar{d}_{ij}^2, \quad \forall \{i, j\} \in E \\ & G\mathbf{1} = 0, \quad G \succeq 0, \end{aligned} \quad (6.1.4)$$

em que o termo  $-\text{tr}(G)$  é adicionado a função objetivo como uma heurística de redução de posto [5].

A questão é que nem sempre a solução de (6.1.4) terá o posto desejado. Se  $G_*$  é solução ótima de (6.1.4), mas  $\text{posto}(G_*) = r > k$ , a partir de  $G_*$  obtemos uma solução para as equações (6.1.1), mas em dimensão  $r > k$ . Neste caso, uma solução aproximada  $\bar{X}$  pode ser obtida pela melhor aproximação de posto  $k$  da expressão (3.5.6).

Esta solução aproximada  $\bar{X}$  estará na dimensão correta, mas possivelmente violará alguma inequação em (6.1.1). Neste caso, poderíamos aproveitar  $\bar{X}$  para gerar um ponto inicial viável para (6.1.2), por exemplo  $(X_0, y_0) = (\bar{X}, \bar{y})$ , em que  $\bar{y}_{uv} = \max\{\underline{d}_{uv}, \min\{\|\bar{x}_u - \bar{x}_v\|, \bar{d}_{uv}\}\}$ .

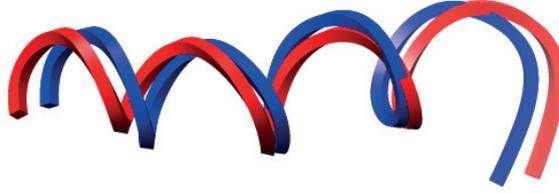


Figura 6.1: Superposição da solução aproximada (em vermelho) com a realização esperada (em azul). A solução aproximada foi obtida por relaxação convexa seguida de refinamento.

Com isso temos o seguinte procedimento para encontrar soluções aproximadas de (6.1.1):

1. Resolva a relaxação convexa (6.1.4) e obtenha  $G$ .
2. Calcule a decomposição espectral  $G = Q\Lambda Q^T$ .
3. Calcule  $\bar{X} = \sqrt{\Lambda_+(1:k, 1:k)}Q(:, 1:k)^T$  e

$$\forall \{u, v\} \in E, \bar{y}_{uv} = \max\{\underline{d}_{uv}, \min\{\|\bar{x}_u - \bar{x}_v\|, \bar{d}_{uv}\}\}.$$

4. Resolva (6.1.2) usando  $(\bar{X}, \bar{y})$  como ponto inicial.

**Exemplo 6.1.** Neste exemplo, consideramos dados intervalares referentes a proteína 2JMY, com 120 átomos e 660 distâncias cujos intervalos  $[\underline{d}, \bar{d}]$  são tais que  $\bar{d} - \underline{d} \in [0, 2; 3, 2]$ . Após resolver (6.1.4) usando o solver SDPT3 [108] para Matlab, e realizar o passo 3 do procedimento acima, obtemos uma solução aproximada  $\bar{X}$  tal que  $f(\bar{X}, \bar{y}) = 18,0336$ , indicando que algumas distâncias violam seus respectivos limitantes.

Em seguida, a partir do ponto inicial  $(\bar{X}, \bar{y})$ , executamos um método de Gradiente Projetado Espectral [17], que após 391 iterações, retornou uma solução refinada  $(X^*, y^*)$  tal que  $f(X^*, y^*) \approx 10^{-9}$ , o que indica que as desigualdades (6.1.1) são satisfeitas com uma boa precisão. A Figura 6.1 mostra a superposição da solução refinada (em vermelho) com uma solução esperada (em azul). O RMSD entre elas é de 1,06.

Infelizmente a abordagem aplicada neste exemplo não escala bem, e a busca de métodos para problemas de geometria de distâncias com dados intervalares que funcionem bem para problemas de grande porte continua sendo um importante tópico de pesquisas na área [8, 46, 5, 45, 93].

## 6.2 PGD não-rotulado

Na definição formal do PGD, utilizamos um grafo  $\mathcal{G}(V, E, d)$  em que o conjunto de arestas  $E$  corresponde aos pares  $\{u, v\}$  de vértices em  $V$  para os

quais as distâncias  $d(u, v)$  são conhecidas, isto é, sabemos a qual par de vértices uma determinada distância está associada.

No entanto, em certas aplicações, como na determinação de nanoestruturas [15], a única informação disponível é uma lista de distâncias  $\mathcal{D}$ , e não se sabe a priori a qual par de vértices cada distância de  $\mathcal{D}$  está associada. Este é o chamado *PGD não-rotulado* [35]: a partir da lista de distâncias  $\mathcal{D}$  buscamos determinar um grafo  $\mathcal{G}$  juntamente com uma realização  $x$  válida para  $\mathcal{G}$  em  $\mathbb{R}^k$ .

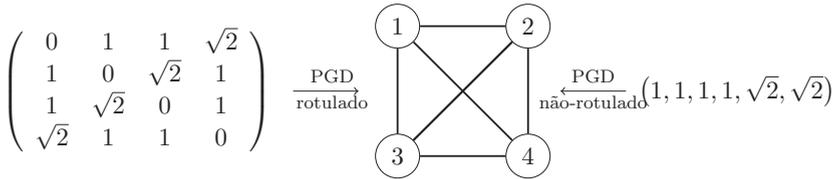


Figura 6.2: PGD rotulado e PGD não-rotulado.

Formalmente, seja  $\mathcal{D} = (d_1, d_2, \dots, d_m)$  uma lista de distâncias e  $M = \{1, \dots, m\}$ . Dado um inteiro  $k > 0$ , o PGD não-rotulado consiste em determinar (se possível) uma função injetiva  $\alpha : M \rightarrow V \times V$  e uma aplicação  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ , tais que

$$\|x_i - x_j\| = d_{\alpha^{-1}(i,j)}, \quad \forall \{i, j\} \in \alpha(M), \quad (6.2.5)$$

em que  $\alpha^{-1}$  denota a imagem inversa de  $\alpha$  e  $\alpha(M)$  a imagem de  $M$  por  $\alpha$ . Perceba que  $\alpha(M)$  faz o papel de  $E$  no caso rotulado, i.e., o conjunto de arestas associadas às distâncias. Como no caso rotulado,  $x$  é chamada de realização e a função  $\alpha$  é chamada de *função de atribuição*.

Segundo [35], este problema é mais envolvente que o caso rotulado pois descobrir uma atribuição adequada já é em si um problema difícil. Note que a atribuição deve ser tal que as distâncias atribuídas satisfaçam as condições do Capítulo 2 pois, do contrário, não existirá realização.

Mais ainda, mesmo quando estão disponíveis todas as  $|V|(|V| - 1)/2$  distâncias, é possível que exista mais de uma atribuição válida. Isto ocorre nas chamadas *estruturas fracamente homométricas* [15, 16], conforme ilustrado na Figura 6.3.

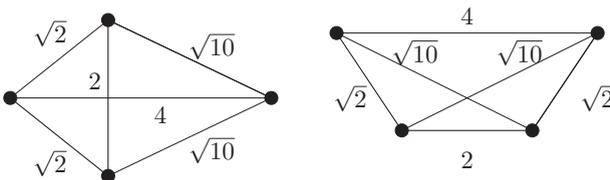


Figura 6.3: Estruturas fracamente homométricas.

Generalizações dos algoritmos de reconstrução sequencial do Capítulo 5 vem sendo propostas [35, 15]. A ideia é explorar subestruturas redundantemente rígidas para, simultaneamente, realizar a atribuição de arestas e posicionar os vértices sequencialmente usando  $(k + 1)$ -lateração e validação cruzada.

Outra possibilidade é formular o problema não-rotulado como um problema de otimização não-linear com variáveis mistas (contínuas e inteiras) [34]. Para facilitar a discussão, vamos assumir que  $m = |\mathcal{D}| = n(n - 1)/2$ ,  $n = |V|$ , o que implicará em  $\mathcal{G}$  completo. Analogamente a (1.2.3), e usando variáveis binárias  $\alpha_{ij}^\ell$  ( $\alpha_{ij}^\ell = 1$ , se  $\alpha(\ell) = \{i, j\}$  e  $\alpha_{ij}^\ell = 0$ , caso contrário) para representar a atribuição, temos o seguinte modelo

$$\begin{aligned} \min_{X, \alpha} \quad & \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \sum_{\ell=1}^m \alpha_{ij}^\ell (\|x_i - x_j\|^2 - d_\ell^2)^2 \\ & \sum_{\ell=1}^m \alpha_{ij}^\ell = 1, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = i + 1, \dots, n \\ & \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \alpha_{ij}^\ell = 1, \quad \ell = 1, \dots, m \\ & \alpha_{ij}^\ell \in \{0, 1\}, \quad \forall \ell, i, j. \end{aligned} \tag{6.2.6}$$

Além do problema (6.2.6) ser não-convexo, o número de variáveis binárias é  $\frac{n^2(n-1)^2}{4}$ , crescendo rapidamente ao aumentar o número de vértices  $n$ . Assim, tal abordagem mostra-se viável para problemas pequenos.

Devido ao elevado número de  $(n(n-1)/2)! / (n(n-1)/2 - m)!$  atribuições possíveis (verifique!), o principal desafio para estas duas abordagens para o PGD não rotulado é a escalabilidade.

Veja o trabalho recente [34] que combina as duas abordagens acima para resolver problemas de conformação molecular com algumas centenas de átomos.

## 6.3 PGD dinâmico

No PGD clássico buscamos localizar os objetos a partir de uma lista de distâncias entre alguns pares destes objetos. Mas e se tais objetos se movem? Neste caso, o PGD clássico pode ser visto como uma fotografia instantânea da configuração de pontos. No entanto, como as posições dependem do tempo, inclusive o conjunto de distâncias conhecidas pode variar a cada instante.

Recentemente, foram apresentadas algumas propostas para estender o PGD estático para o dinâmico [90, 106]. Em [90], é considerado o caso de tempo discreto, em que  $T$  representa um conjunto finito de instantes de tempo. O conjunto de vértices  $V$  é substituído por um conjunto  $V \times T$  que representa os vértices em cada instante de tempo. Agora, o conjunto de arestas

$E$  é um subconjunto de  $(V \times T) \times (V \times T)$ , ou seja, além de indicar distâncias conhecidas entre vértices em um mesmo instante de tempo  $\{u_t, v_t\}$ , restrições de distâncias também são impostas entre vértices em instantes de tempo diferentes  $\{u_t, v_q\}$ . Estas últimas são responsáveis por restringir os tipos de movimento. Assim, o *PGD dinâmico* (dynDGP – dynamical Distance Geometry Problem) é representado por um grafo  $\mathcal{G}(V \times T, E, d)$ , e buscamos uma aplicação  $x : V \times T \rightarrow \mathbb{R}^k$ , tal que

$$\|x(u, t) - x(v, q)\| = d(u_t, v_q), \quad \forall \{u_t, v_q\} \in E. \quad (6.3.7)$$

Note que o subgrafo  $\mathcal{G}[V \times \{t\}]$  representa uma instância do PGD clássico no instante de tempo  $t$ . Em geral, o PGD dinâmico corresponde a um PGD clássico com  $|V| \times |T|$  vértices, mas no qual algumas situações atípicas podem ocorrer: por exemplo, dois pontos podem estar na mesma posição  $x(u, t) = x(u, t + 1)$  caso o vértice  $u$  não se mova. Além disso, quando

$$E \setminus \cup_{t, t' \in T, t \neq t'} (V \times \{t\}) \times (V \times \{t'\}) = \emptyset, \quad (6.3.8)$$

isto é, não há arestas conectando vértices em tempos distintos, o PGD dinâmico se reduz a uma seqüência de PGDs estáticos.

Este modelo para o PGD dinâmico foi aplicado com sucesso em problemas de simulação de posturas e movimentos humanos [89, 14].

Já em [106], é utilizado um modelo diferente, no qual a condição (6.3.8) é satisfeita, mas as trajetórias  $x(v, t)$  são restritas a um conjunto de trajetórias admissíveis, seguindo modelos polinomiais ou periódicos.

Por exemplo, para trajetórias polinomiais, o modelo assume que a realização dependente do tempo  $X(t) \in \mathbb{R}^{k \times n}$  pertence a

$$\mathcal{X} = \left\{ \sum_{p=0}^P t^p A_p : A_p \in \mathbb{R}^{k \times n}, \forall p \right\}.$$

Deste modo, a Gramiana dependente de  $t$  pode ser descrita como

$$G(t) = X(t)^T X(t) = \sum_{i=0}^{2P} t^i B_i, \quad (6.3.9)$$

em que  $B_i = \sum_{j=\max\{0, i-p\}}^{\min\{i, p\}} A_j^T A_{i-j}$ . É possível mostrar que (6.3.9) pode ser reescrita como

$$G(t) = \sum_{\ell=0}^{2P} w_\ell(t) G_\ell, \quad (6.3.10)$$

em que  $G_\ell = G(t_\ell)$ , para  $\ell = 0, 1, \dots, 2P$  são Gramianas constantes em diferentes instantes de tempo  $t_\ell$  e  $w(t) = (w_0(t), w_1(t), \dots, w_{2P}(t))^T$  é solução do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ t_0 & t_1 & \dots & t_{2P} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_0^{2P} & t_1^{2P} & \dots & t_{2P}^{2P} \end{bmatrix} w(t) = \begin{bmatrix} 1 \\ t \\ \vdots \\ t^{2P} \end{bmatrix}.$$

A questão então se torna encontrar as Gramianas  $G_\ell$  que melhor ajustam as distâncias disponíveis em diferentes instantes de tempo. Usando a teoria do Capítulo 3, em particular a formulação (3.6.10), temos o seguinte modelo de programação semidefinida:

$$\begin{aligned} \min_{G_0, \dots, G_{2P}} \quad & \sum_{i=1}^T \alpha_i \left\| W_i \circ \left( \tilde{D}_i - \mathcal{K} \left( \sum_{\ell=0}^{2P} w_\ell(t_i) G_\ell \right) \right) \right\|_F^2 - \lambda \sum_{\ell=0}^{2P} \text{tr}(G_\ell) \\ \text{s. a} \quad & G_\ell \mathbf{1} = 0, \quad \ell = 0, 1, \dots, 2P \\ & G_\ell \succeq 0, \quad \ell = 0, 1, \dots, 2P \\ & \sum_{\ell=0}^{2P} w_\ell(t) G_\ell \succeq 0, \quad \forall t \in \mathcal{T}, \end{aligned} \tag{6.3.11}$$

em que  $\tilde{D}_i$  são matrizes de distâncias incompletas (possivelmente com ruído) coletadas em  $T$  diferentes instantes de tempo,  $\alpha_i$  e  $\lambda$  são pesos escolhidos previamente,  $W_i$  são matrizes de incidência, como  $W$  em (3.6.9) e  $\mathcal{T} \supset T$  é um conjunto discreto de tempos distintos. Para mais detalhes, veja o artigo [106].

## 6.4 PGD em Ciência de Dados

O papel da Geometria de Distâncias em Ciência de Dados, juntamente com técnicas de redução de dimensionalidade, é o de fornecer a representação dos dados como vetores em um espaço vetorial de baixa dimensão, de modo que as dissimilaridades/distâncias sejam preservadas da melhor forma possível. Tais vetores são então usados como entrada para algum algoritmo responsável por uma tarefa de aprendizado não-supervisionado, por exemplo, clusteração usando *K-means* [76].

Para ilustrar, vamos considerar um tópico de pesquisa recente na área de processamento de linguagens naturais que consiste em representar palavras em um corpo de texto como vetores em um espaço vetorial de modo a capturar relações sintáticas e semânticas entre as palavras [21, 110, 74, 24, 48]. Tais vetores são chamados de “vetores de palavras” (*word vectors*) na literatura [88, 97, 75].

Vetores de palavras são úteis em várias tarefas de processamento de linguagens naturais, por exemplo, detecção de analogias, completamento de sequências e classificação. A ideia geral é ilustrada na Figura 6.4. Na detecção de analogias, espera-se que os vetores de palavras forneçam respostas para perguntas do tipo “rei está para homem, assim como rainha está para?” através da regra do paralelogramo. No completamento de sequências esperamos que a resposta para “unidade:dezena:?” seja “centena”. Já em classificação, esperamos que mais próximo ao centróide de “cavalo”, “burro” e “zebra” esteja a palavra “pônei”, ao invés de “cachorro” ou “peixe”.

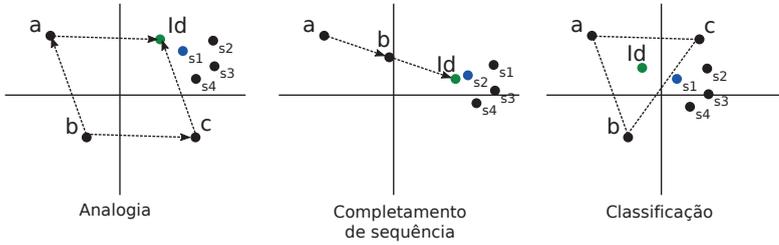


Figura 6.4: Utilidade de vetores de palavras em algumas tarefas comuns em processamento de linguagens naturais. O ponto ideal é representado por “Id” e possíveis escolhas por  $s_i$ . A escolha correta (ponto mais próximo do ideal) está em azul.

Um possível modelo para representar a relações entre palavras é o chamado “grafo de palavras” [99, 39]: cada palavra em um vocabulário  $V$  (extraído do texto) corresponde a um vértice do grafo  $\mathcal{G}$  e uma aresta entre dois vértices  $v_i$  e  $v_j$  indica que duas palavras distintas ocorrem em um mesmo contexto (por contexto, podemos considerar uma sequência de  $m$  palavras consecutivas). O peso  $C_{ij}$  da aresta  $\{v_i, v_j\}$  corresponde ao número de contextos nos quais as palavras  $i$  e  $j$  aparecem juntas.

Este modelo, lembra bastante o PGD (Definição 1.1), exceto pelo fato de que  $C : E \rightarrow \mathbb{R}_+$  não associa arestas a distâncias, mas a *co-ocorrências* [21]. Alguns trabalhos propõe modelos probabilísticos que relacionam as contagens de co-ocorrência com distâncias Euclidianas [40]. Em [10] é estudada a relação entre o produto interno  $\langle x_i, x_j \rangle$  e a informação mutual pontual

$$PMI(i, j) = \log \frac{p(i, j)}{p(i)p(j)},$$

em que  $p(i, j)$  é a probabilidade das palavras  $i$  e  $j$  aparecerem no mesmo contexto e  $p(i)$  é a probabilidade marginal da palavra  $i$ . Ambas probabilidades são aproximadas empiricamente explorando as contagens de co-ocorrências  $C_{ij}$  e ocorrências  $C_i$ . Já em [48], os autores sugerem que quando o tamanho do texto tende a infinito, para um tamanho  $m$  de contexto suficientemente grande,  $\forall, i, j$ , existem  $a_i$  e  $b_i$ , tais que

$$\|x_i - x_j\|^2 \approx -\log(C_{ij}) + a_i + b_j.$$

Os dois modelos parecem condizentes com métodos de fatoração matricial [75] ou regressão para o problema [97]. Um método interessante para obter vetores de palavras a partir de contagens de co-ocorrências  $C_{ij}$  é o chamado *Global Vectors* (GloVe) [97]. GloVe busca obter uma realização  $x$  em  $\mathbb{R}^k$ , resolvendo o problema de otimização:

$$\min_{x, \hat{a}, \hat{b}} \sum_i \sum_j f(C_{ij}) \left( 2\langle x_i, x_j \rangle + \hat{a}_i + \hat{b}_j - \log(C_{ij}) \right)^2,$$

em que  $f(C_{ij}) = \min(C_{ij}, 100)^{3/4}$ . Usando a mudança de variáveis  $\hat{a}_i = a_i - \|x_i\|^2$  e  $\hat{b}_j = b_j - \|x_j\|^2$ , chegamos a

$$\min_{x,a,b} \sum_i \sum_j f(C_{ij}) (a_i + b_j - \log(C_{ij}) - \|x_i - x_j\|^2)^2. \quad (6.4.12)$$

Assim, se conhecêssemos  $a$  e  $b$ , considerando  $d_{ij}^2 = a_i + b_j - \log(C_{ij})$ , poderíamos ver (6.4.12) como uma versão ponderada (por  $f(C_{ij})$ ) de (1.2.3).

Portanto, o uso de técnicas de Geometria de Distâncias para determinação de vetores de palavras parece natural e aponta para uma linha de pesquisa promissora e desafiadora [76].



# Bibliografia

- [1] AL-HOMIDAN, S.; WOLKOWICZ, H. Approximate and exact completion problems for Euclidean distance matrices using semidefinite programming. *Linear Algebra and its Applications*, v. 406, p. 109–141, 2005.
- [2] ALENCAR, J.; LAVOR, C.; LIBERTI, L. Realizing Euclidean distance matrices by sphere intersection. *Discrete Applied Mathematics*, v. 256, p. 5 – 10, 2019.
- [3] ALFAKIH, A. Y. Universal rigidity of bar frameworks in general position: A Euclidean distance matrix approach. In: \_\_\_\_\_. *Distance Geometry: Theory, Methods, and Applications*. New York, NY: Springer New York, 2013. p. 3–22. ISBN 978-1-4614-5128-0.
- [4] ALFAKIH, A. Y.; KHANDANI, A.; WOLKOWICZ, H. Solving Euclidean distance matrix completion problems via semidefinite programming. *Computational Optimization and Applications*, v. 12, p. 13–30, 1999.
- [5] ALIPANAHI, B. et al. Determining protein structures from NOESY distance constraints by semidefinite programming. *Journal of Computational Biology*, v. 20, n. 4, p. 296–310, 2013.
- [6] ALIZADEH, F. et al. Preface: Special issue dedicated to distance geometry. *Journal of Global Optimization*, v. 72, n. 1, p. 1–4, Sep 2018. ISSN 1573-2916.
- [7] ALIZADEH, F. et al. Preface. *Discrete Applied Mathematics*, v. 256, p. 1 – 4, 2019. ISSN 0166-218X. Distance Geometry Theory and Applications (DGTA 16).
- [8] AN, L. T. H. Solving large scale molecular distance geometry problems by a smoothing technique via the Gaussian transform and D.C. programming. *Journal of Global Optimization*, v. 27, p. 375–297, 2003.
- [9] ANDERSON, B. D. O. et al. Formal theory of noisy sensor network localization. *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, v. 24, n. 2, p. 684–698, 2010.

- [10] ARORA, S. et al. A latent variable model approach to PMI-based word embeddings. *Transactions of the Association for Computational Linguistics*, v. 4, p. 385–399, 2016.
- [11] ASIMOW, L.; ROTH, B. The rigidity of graphs I. *Transactions of the American Mathematical Society*, v. 245, p. 279–289, November 1978.
- [12] ASIMOW, L.; ROTH, B. The rigidity of graphs II. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v. 68, p. 171–190, 1979.
- [13] BÁEZ-SÁNCHEZ, A.; LAVOR, C. On the estimation of unknown distances for a class of Euclidean distance matrix completion problems with interval data. *Linear Algebra and Its Applications*, v. 592, p. 287–305, 2020.
- [14] BERNARDIN, A. et al. Normalized Euclidean distance matrices for human motion retargeting. In: *Motion in Games 2017 (MIG17)*. [S.l.: s.n.], 2017. (ACM Conference Proceedings).
- [15] BILLINGE, S. J. L. et al. Assigned and unassigned distance geometry: applications to biological molecules and nanostructures. *4OR - A Quarterly Journal of Operations Research*, v. 14, n. 4, p. 337–376, 2016.
- [16] BILLINGE, S. J. L. et al. Recent results on assigned and unassigned distance geometry with applications to protein molecules and nanostructures. *Annals of Operations Research*, v. 271, n. 1, p. 161–203, 2018. ISSN 1572-9338.
- [17] BIRGIN, E.; MARTÍNEZ, J.; RAYDAN, M. Spectral projected gradient methods: Review and perspectives. *Journal of Statistical Software*, v. 60, n. 3, p. 1–21, 2014.
- [18] BISWAS, P. et al. Semidefinite programming based algorithms for sensor network localization. *ACM Transactions on Sensor Networks*, ACM, New York, NY, USA, v. 2, n. 2, p. 188–220, 2006. ISSN 1550-4859.
- [19] BLUMENTHAL, L. Some imbedding theorems and characterization problems of distance geometry. *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 49, n. 5, p. 321–338, 1943.
- [20] BORG, I.; GROENEN, P. J. F. *Modern Multidimensional Scaling: Theory and Applications*. [S.l.]: Springer, 2005. (Springer Series in Statistics).
- [21] BULLINARIA, J. A.; LEVY, J. P. Extracting semantic representations from word co-occurrence statistics: a computational study. *Behavior Research Methods*, v. 39, n. 3, p. 510–526, 2007.
- [22] CARVALHO, R.; LAVOR, C.; PROTTI, F. Extending the geometric build-up algorithm for the molecular distance geometry problem. *Information Processing Letters*, v. 108, p. 234–237, 2008.

- [23] CASSIOLI, A. et al. Discretization vertex orders in distance geometry. *Discrete Applied Mathematics*, v. 197, p. 27 – 41, 2015. ISSN 0166-218X. Distance Geometry and Applications.
- [24] CHURCH, K. W.; HANKS, P. Word association norms, mutual information, and lexicography. In: *27th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics*. Vancouver, British Columbia, Canada: Association for Computational Linguistics, 1989. p. 76–83.
- [25] CONNELLY, R. Generic global rigidity. *Discrete Computational Geometry*, v. 33, n. 4, p. 549–563, 2005.
- [26] COOPE, I. D. Reliable computation of the points of intersection of  $n$  spheres in  $n$ -space. *ANZIAM Journal*, v. 42, p. 461–477, 2000.
- [27] CORREIA, F. *Condições necessárias e suficientes para realização de um conjunto de distâncias através de determinantes de Cayley-Menger*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2016.
- [28] CRIPPEN, G.; HAVEL, T. *Distance Geometry and Molecular Conformation*. New York: Wiley, 1988.
- [29] CUNNINGHAM, J.; GHAHRAMANI, Z. Linear dimensionality reduction: Survey, insights, and generalizations. *Journal of Machine Learning Research*, v. 16, p. 2859–2900, 2015.
- [30] DATTORRO, J. *Convex Optimization & Euclidean Distance Geometry*. [S.l.]: Meboo, 2011.
- [31] DOKMANIC, I. et al. Euclidean distance matrices: Essential theory, algorithms, and applications. *Signal Processing Magazine, IEEE*, v. 32, n. 6, p. 12–30, 2015.
- [32] DONALD, B. *Algorithms in Structural Molecular Biology*. Boston: MIT Press, 2011.
- [33] DONG, Q.; WU, Z. A linear-time algorithm for solving the molecular distance geometry problem with exact inter-atomic distances. *Journal of Global Optimization*, v. 22, p. 365–375, 2002.
- [34] DUXBURY, P. et al. Unassigned distance geometry and molecular conformation problems. *Journal of Global Optimization*, submitted, 2020.
- [35] DUXBURY, P. M. et al. The unassigned distance geometry problem. *Discrete Applied Mathematics*, v. 204, p. 117–132, 2016.
- [36] ECKART, C.; YOUNG, G. The approximation of one matrix by another of lower rank. *Psychometrika*, v. 1, p. 211–218, 1936.

- [37] FIDALGO, F. et al. A symmetry-based splitting strategy for discretizable distance geometry problems. *Journal of Global Optimization*, v. 71, n. 4, p. 717–733, 2018.
- [38] GAREY, M.; JOHNSON, D. *Computers and Intractability: a Guide to the Theory of NP-Completeness*. New York: Freeman and Company, 1979.
- [39] GIBERT, J.; VALVENY, E.; BUNKE, H. Dimensionality reduction for graph of words embedding. In: JIANG, X.; FERRER, M.; TORSELLO, A. (Ed.). *Graph-Based Representations in Pattern Recognition*. [S.l.: s.n.], 2011. (Lecture Notes in Computer Science, v. 6658), p. 22–31.
- [40] GLOBERSON, A. et al. Euclidean embedding of co-occurrence data. *Journal of Machine Learning Research*, v. 8, p. 2265–2295, 2007.
- [41] GLUCK, H. Almost all simply connected surfaces are rigid. In: *Geometric Topology*. Berlin: Springer-Verlag, 1975, (Lecture Notes in Mathematics). p. 225–239.
- [42] GONÇALVES, D. S. A least-squares approach for discretizable distance geometry problems with inexact distances. *Optimization Letters*, v. 14, n. 2, p. 423–437, 2020.
- [43] GONÇALVES, D. S.; MUCHERINO, A. Discretization orders and efficient computation of cartesian coordinates for distance geometry. *Optimization Letters*, v. 8, n. 7, p. 2111–2125, 2014. ISSN 1862–4472.
- [44] GONÇALVES, D. S.; MUCHERINO, A. Optimal partial discretization orders for discretizable distance geometry. *International Transactions in Operational Research*, v. 23, p. 947–967, 2016.
- [45] GONÇALVES, D. S. et al. Recent advances on the interval distance geometry problem. *Journal of Global Optimization*, v. 69, n. 3, p. 525–545, 2017. ISSN 1573-2916.
- [46] GROSSO, A.; LOCATELLI, M.; SCHOEN, F. Solving molecular distance geometry problems by global optimization algorithms. *Computational Optimization and Applications*, v. 43, p. 23–27, 2009.
- [47] HANSON, A. J. Geometry for  $n$ -dimensional graphics. *Graphics Gems IV*, p. 149–170, 1994.
- [48] HASHIMOTO, T. B.; ALVAREZ-MELIS, D.; JAAKKOLA, T. S. Word embeddings as metric recovery in semantic spaces. *Transactions of the Association for Computational Linguistics*, v. 4, p. 273–286, 2016.
- [49] HAVEL, T. F. Distance geometry: Theory, algorithms and chemical applications. In: *Encyclopedia of Computational Chemistry*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1998. p. 723–742.

- [50] HAVEL, T. F.; KUNTZ, I. D.; CRIPPEN, G. M. The theory and practice of distance geometry. *Bulletin of Mathematical Biology*, v. 45, n. 5, p. 665–720, 1983.
- [51] HAVEL, T. F.; WÜTHRICH, K. An evaluation of the combined use of nuclear magnetic resonance and distance geometry for the determination of protein conformations in solution. *Journal of Molecular Biology*, v. 182, n. 2, p. 281 – 294, 1985.
- [52] HENDRICKSON, B. Conditions for unique graph realizations. *SIAM Journal on Computing*, v. 21(1), p. 65–84, 1992.
- [53] JACKSON, B. Notes on the rigidity of graphs. 2007. Disponível em: <http://www.maths.qmul.ac.uk/~bill/levicoFINAL.pdf> Acesso em: 23 de fevereiro de 2018.
- [54] JACKSON, B.; JORDÁN, T. Connected rigidity matroids and unique realization of graphs. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, v. 94, p. 1–29, 2005.
- [55] KRISLOCK, N.; WOLKOWICZ, H. Explicit sensor network localization using semidefinite representations and facial reductions. *SIAM Journal on Optimization*, v. 20, p. 2679–2708, 2010.
- [56] KRISLOCK, N.; WOLKOWICZ, H. Euclidean distance matrices and applications. In: \_\_\_\_\_. *Handbook on Semidefinite, Conic and Polynomial Optimization*. Boston, MA: Springer US, 2012. p. 879–914. ISBN 978-1-4614-0769-0.
- [57] KY, V. et al. New error measures and methods for realizing protein graphs from distance data. *Discrete & Computational Geometry*, v. 57, p. 371–418, 2017.
- [58] LAMAN, G. On graphs and rigidity of plane skeletal structures. *Journal of Engineering Mathematics*, v. 4, p. 331–340, 1970.
- [59] LAVOR, C. On generating instances for the molecular distance geometry problem. *Nonconvex Optimization and its Applications*, v. 84, p. 405–414, 2006.
- [60] LAVOR, C. *Rigidez em Grafos de Proteínas*. [S.l.]: IMPA, 2019. (Colóquio Brasileiro de Matemática).
- [61] LAVOR, C. et al. Discretization orders for distance geometry problems. *Optimization Letters*, v. 6, n. 4, p. 783–796, 2012. ISSN 1862-4480.
- [62] LAVOR, C.; LIBERTI, L. *Um convite à Geometria de Distâncias*. São Carlos, SP: SBMAC, 2014. (Notas em Matemática Aplicada, v. 71). ISSN 2175-3385. ISBN 978-85-8215-050-4.

- [63] LAVOR, C.; LIBERTI, L. Six mathematical gems from the history of distance geometry. *International Transactions in Operational Research*, Wiley, v. 23, p. 897–920, 2016.
- [64] LAVOR, C. et al. Minimal NMR distance information for rigidity of protein graphs. *Discrete Applied Mathematics*, v. 256, p. 91–104, 2019.
- [65] LAVOR, C. et al. *An Introduction to Distance Geometry applied to Molecular Geometry*. [S.l.]: Springer, 2017.
- [66] LAVOR, C. et al. The discretizable molecular distance geometry problem. *Computational Optimization and Applications*, v. 52, p. 115–146, 2012.
- [67] LAVOR, C. et al. Recent advances on the discretizable molecular distance geometry problem. *European Journal of Operational Research*, v. 219, p. 698–706, 2012.
- [68] LAVOR, C.; LIBERTI, L.; MUCHERINO, A. The *interval* Branch-and-Prune algorithm for the discretizable molecular distance geometry problem with inexact distances. *Journal of Global Optimization*, v. 56, n. 3, p. 855–871, 2013.
- [69] LAVOR, C.; MACULAN, N. A function to test methods applied to global minimization of potential energy of molecules. *Numerical Algorithms*, v. 35, p. 287–300, 2004.
- [70] LAVOR, C. et al. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular*. [S.l.]: IMPA, 2017. (Colóquio Brasileiro de Matemática).
- [71] LAVOR, C. et al. Discrete approaches for solving molecular distance geometry problems using NMR data. *International Journal of Computational Bioscience*, v. 1, p. 88–94, 2010.
- [72] LAVOR, C. et al. On the computation of protein backbones by using artificial backbones of hydrogens. *Journal of Global Optimization*, v. 50, p. 329–344, 2011.
- [73] LAVOR, C. et al. On the polynomiality of finding KDMDGP re-orders. *Discrete Applied Mathematics*, v. 267, p. 190–194, 2019.
- [74] LEVY, O.; GOLDBERG, Y. Linguistic regularities in sparse and explicit word representations. In: *Proceedings of the Eighteenth Conference on Computational Natural Language Learning*. Ann Arbor, Michigan: Association for Computational Linguistics, 2014. p. 171–180.
- [75] LEVY, O.; GOLDBERG, Y. Neural word embedding as implicit matrix factorization. In: GHAMRANI, Z. et al. (Ed.). *NIPS'14: Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems*. [S.l.: s.n.], 2014. v. 2, p. 2177–2185.

- [76] LIBERTI, L. Distance geometry and data science. *TOP*, v. 28, p. 271–339, 2020.
- [77] LIBERTI, L.; LAVOR, C. *Euclidean Distance Geometry: An Introduction*. [S.l.]: Springer, 2017.
- [78] LIBERTI, L.; LAVOR, C. Open research areas in distance geometry. In: \_\_\_\_\_. *Open Problems in Optimization and Data Analysis*. Cham: Springer International Publishing, 2018. p. 183–223. ISBN 978-3-319-99142-9.
- [79] LIBERTI, L. et al. Counting the number of solutions of KDMDGP instances. In: NIELSEN, F.; BARBARESCO, F. (Ed.). *Geometric Science of Information*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 2013, (Lecture Notes in Computer Science, v. 8085). p. 224–230. ISBN 978-3-642-40019-3.
- [80] LIBERTI, L.; LAVOR, C.; MACULAN, N. A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem. *International Transactions in Operational Research*, v. 15, p. 1–17, 2008.
- [81] LIBERTI, L. et al. Euclidean distance geometry and applications. *SIAM Review*, v. 56, p. 3–69, 2014.
- [82] LIBERTI, L.; LAVOR, C.; MUCHERINO, A. The Discretizable Molecular Distance Geometry Problem seems easier on proteins. In: MUCHERINO, A. et al. (Ed.). *Distance Geometry*. [S.l.]: Springer New York, 2013. p. 47–60.
- [83] LIBERTI, L. et al. Molecular distance geometry methods: from continuous to discrete. *International Transactions in Operational Research*, v. 18, p. 33–51, 2010.
- [84] LIBERTI, L. et al. On the number of realizations of certain Henneberg graphs arising in protein conformation. *Discrete Applied Mathematics*, v. 165, 2014.
- [85] MAIOLI, D.; LAVOR, C.; GONÇALVES, D. S. A note on computing the intersection of spheres in  $\mathbb{R}^n$ . *The ANZIAM Journal*, v. 59, n. 2, p. 271–279, 2017.
- [86] MALONE, S. W.; TROSSET, M. W. *A study of the stationary configurations of the SSTRESS criterion for metric multidimensional scaling*. [S.l.], 2000.
- [87] MATHAR, R. The best Euclidean fit to a given distance matrix in prescribed dimensions. *Linear Algebra and its Applications*, v. 67, p. 1–6, 1985.
- [88] MIKOLOV, T. et al. Distributed representations of words and phrases and their compositionality. In: BURGESS, C. J. C.; BOTTOU, L.; WEL-LING, M. (Ed.). *NIPS'13: Proceedings of the 26th International Conference*

- on *Neural Information Processing Systems*. [S.l.]: Curran Associates Inc., 2013. v. 2, p. 3111–3119.
- [89] MUCHERINO, A. et al. A distance-based approach for human posture simulations. In: *Federated Conference on Computer Science and Information Systems (FedCSIS17), Workshop on Computational Optimization (WCO17)*. [S.l.: s.n.], 2017. (IEEE Conference Proceedings).
- [90] MUCHERINO, A.; GONÇALVES, D. S. An approach to dynamical distance geometry. In: NIELSEN, F.; BARBARESCO, F. (Ed.). *Proceedings of Geometric Science of Information (GSI17)*. [S.l.: s.n.], 2017. (Lecture Notes in Computer Science 10589), p. 821–829.
- [91] MUCHERINO, A.; LAVOR, C.; LIBERTI, L. The discretizable distance geometry problem. *Optimization Letters*, v. 6, p. 1671–1686, 2012.
- [92] MUCHERINO, A. et al. (Ed.). *Distance Geometry: Theory, Methods and Applications*. New York: Springer, 2013.
- [93] MUCHERINO, A.; LIN, J.-H. An efficient exhaustive search for the discretizable distance geometry problem with interval data. In: *Proceedings of the Federated Conference on Computer Science and Information Systems*. [S.l.: s.n.], 2019. v. 18, p. 135–141.
- [94] NESTEROV, Y.; NEMIROVSKI, A. *Interior-point polynomial methods in convex programming*. [S.l.]: SIAM, 1994.
- [95] OMER, J.; GONÇALVES, D. S. An integer programming approach for the search of discretization orders in distance geometry problems. *Optimization Letters*, v. 14, n. 2, p. 439–452, 2020.
- [96] PARHIZKAR, R. *Euclidean Distance Matrices: Properties, Algorithms and Applications*. Tese (Doutorado) — ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE, Switserzland, 2013.
- [97] PENNINGTON, J.; SOCHER, R.; MANNING, C. Glove: Global vectors for word representation. In: *Proceedings of the 2014 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP)*. Doha, Qatar: Association for Computational Linguistics, 2014. p. 1532–1543.
- [98] REZENDE, G. A. *Explorando a dualidade em geometria de distâncias*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, 2014.
- [99] ROUSSEAU, F.; VAZIRGIANNIS, M. Graph-of-word and TW-IDF: New approach to ad hoc IR. In: *Proceedings of the 22nd ACM International Conference on Information & Knowledge Management*. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2013. (CIKM'13), p. 59–68. ISBN 9781450322638.

- [100] SAXE, J. B. Embeddability of weighted graphs in  $k$ -space is strongly NP-hard. In: *Proceedings of 17<sup>th</sup> Allerton Conference in Communications, Control and Computing*. Monticello, IL: [s.n.], 1979. p. 480–489.
- [101] SCHOENBERG, I. J. Remarks to Maurice Frechet’s article: Sur la definition axiomatique d’une classe d’espaces vectoriels distances applicables vectoriellement sur l’espace de Hilbert. *Annals of Mathematics*, v. 36, p. 724–732, 1935.
- [102] SCHÖNEMANN, P. H. A generalized solution of the orthogonal Procrustes problem. *Psychometrika*, v. 31, n. 1, p. 1–10, 1966.
- [103] SINGER, A. Angular synchronization by eigenvectors and semidefinite programming. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, v. 30, p. 20–36, 2011.
- [104] SO, A. M.-C.; YE, Y. Theory of semidefinite programming for sensor network localization. *Mathematical Programming B*, v. 109, p. 367–384, 2007.
- [105] SWANEPOEL, K. J. Equilateral sets in finite-dimensional normed spaces. In: SECRETARIADO DE PUBLICACIONES, UNIVERSIDAD DE SEVILLA, SEVILLA. *Seminar of Mathematical Analysis*. Sevilla, 2004. v. 71, p. 195–237.
- [106] TABAGHI, P.; DOKMANIC, I.; VETTERLI, M. Kinetic Euclidean distance matrices. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 68, p. 452–465, 2020.
- [107] TENENBAUM, J. B.; SILVA, V. de; LANGFORD, J. C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, v. 290, p. 2319–2323, 2000.
- [108] TOH, K. C.; TODD, M. J.; TUTUNCU, R. SDPT3 - a Matlab software package for semidefinite programming. *Optimization Methods and Software*, v. 11, p. 545–581, 1999.
- [109] TROSSET, M.; MATHAR, R. On existence of nonglobal minimizers of the STRESS criterion for metric multidimensional scaling. In: *Proceedings of the Statistical Computing Section*. Alexandria, VA: American Statistical Association, 1997. p. 158–162.
- [110] TURNEY, P. D.; PANTEL, P. From frequency to meaning: Vector space models of semantics. *Journal of Artificial Intelligence Research*, v. 37, n. 1, p. 141–188, 2010.
- [111] WU, D.; WU, Z. An updated geometric build-up algorithm for solving the molecular distance geometry problem with sparse distance data. *Journal of Global Optimization*, v. 37, p. 661–673, 2007.

- [112] WU, D.; WU, Z.; YUAN, Y. Rigid versus unique determination of protein structures with geometric buildup algorithm. *Optimization Letters*, v. 2, p. 319–331, 2008.
- [113] WÜTHRICH, K.; BILLETER, M.; BRAUN, W. Pseudo-structures for the 20 common amino acids for use in studies of protein conformations by measurements of intramolecular proton-proton distance constraints with nuclear magnetic resonance. *Journal of Molecular Biology*, v. 169, p. 949–961, 1983.
- [114] YEMINI, Y. The positioning problem — a draft of an intermediate summary. In: *Proceedings of the Conference on Distributed Sensor Networks*. Pittsburgh: Carnegie-Mellon University, 1978. p. 137–145.
- [115] ZILINSKAS, A.; PODLIPSKYTE, A. On multimodality of the SS-TRESS criterion for metric multidimensional scaling. *Informatica*, v. 14, n. 1, p. 121–130, 2003.

# Índice

- $k$ -lateração, 6, 55, 58, 62
- algoritmo
  - Branch-and-Prune, 56
  - de ordenação, 62, 63
  - de reconstrução sequencial, 51
  - Geometric Build-up, 60
- aplicações, 10
  - MDS, 12
  - proteínas, 11
  - rede de sensores, 10
  - sincronização, 10
  - vetores de palavras, 75
- BP, 51
- Branch-and-Prune, 51, 55
- Cayley-Menger
  - determinante, 15
- centragem, 32
- centro de massa, 32, 59
- clique, 3, 4, 6, 17, 24, 25, 34, 51–53, 62
- condição
  - de Cayley-Menger, 24
  - de Maxwell, 49
- congruência, 41
- decomposição
  - espectral, 13, 34, 35
- desigualdade
  - tetragonal, 25
  - triangular, 17
- determinante
  - de Cayley-Menger, 15, 24
- Distância Euclidiana, 1
- distâncias
  - com ruído, 35, 59
  - de poda, 56
  - imprecisas, 69
  - lista de, 1, 72
  - realizáveis, 69
- EDM, 29
  - Completamento de, 25, 38
- esferas
  - intersecção, 7, 8, 52, 53
- estrutura, 41
  - de proteínas, 54
  - flexível, 45
  - genérica, 47
  - infinitesimalmente rígida, 45
- estruturas
  - congruentes, 41
  - equivalentes, 41
  - fracamente homométricas, 72
  - genéricas, 47
- fórmula
  - de Heron, 18
  - de Tartaglia, 19
- Geometria de Distâncias
  - aplicações, 10
  - Problema Fundamental, 1
- Geometric Build-up, 51
- grafo
  - completo, 6, 8, 42
  - conexo, 1
  - independente, 48, 49
  - não-orientado, 1
  - simples, 1
- grafos
  - realização, 1, 6, 34
- graus de liberdade, 3, 45

- isometria, 2, 41
- LDE, 60
- matriz
  - de centragem, 32
  - de distâncias, 15, 29
  - de distâncias Euclidianas, 29
  - de Gram, 13, 30, 31, 34
  - de Gram Dinâmica, 74
  - de rigidez, 43
  - de Vandermonde, 74
  - positiva semidefinida, 30
- Matriz de distâncias, 15
  - Euclidiana, 29
- MDE, 60
- MDS, 13
- minimizador
  - global, 3
- movimentos
  - infinitesimais, 45
  - rígidos, 45
  - triviais, 45
- norma
  - de Frobenius, 35
  - Euclidiana, 1
- NP-difícil, 6
- ordem, 52, 62
  - de discretização, 62, 63
- Otimização global, 3
- PCA, 13
- PGD, 1
  - dinâmico, 73
  - discretizável, 53, 55
  - em Ciência de dados, 75
  - intervalar, 69
  - molecular, 55
  - não-rotulado, 71
- problema
  - de completamento de EDM, 38
  - de Geometria de Distâncias, 1
  - de Procrustes, 61
  - inverso, 1
- Quadrados mínimos, 3
- realização, 1, 2, 29
  - congruente, 2
  - de grafos, 1
  - degenerada, 16
  - parcial, 53
- Realizações
  - congruentes, 2, 3
- Reflexão
  - parcial, 4
- rigidez
  - de estruturas, 41
  - de grafos, 48
  - global, 42
  - infinitesimal, 43
  - local, 42
- RMN, 69
- RMSD, 61
- semimétrica, 15
- simplex, 10
  - não-degenerado, 10, 20
  - volume, 21, 22, 24
- Sistema linear, 52
- Sistema não-linear, 3
- SSTRESS, 6
- STRESS, 6
- SVD, 62
- teorema
  - de Eckart-Young, 35
  - de Laman, 49
  - de Schoenberg, 33
  - existência, 24
- trilateração, 12, 52