



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE
CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica

VALTER SOARES DE CAMARGO

Álgebra Geométrica Conforme e Geometria de Distâncias

Campinas

2015

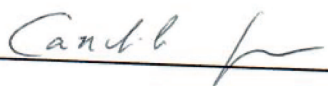
Valter Soares de Camargo

Álgebra Geométrica Conforme e Geometria de Distâncias

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Matemática Aplicada.

Orientador: Carlile Campos Lavor

O arquivo digital corresponde à versão final da Tese defendida pelo aluno Valter Soares de Camargo e orientada pelo Prof. Dr. Carlile Campos Lavor.



Campinas

2015

Agência de fomento: Não se aplica
Nº processo: Não se aplica

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Maria Fabiana Bezerra Muller - CRB 8/6162

C14a Camargo, Valter Soares de, 1977-
Álgebra geométrica conforme e geometria de distâncias / Valter Soares de
Camargo. – Campinas, SP : [s.n.], 2015.

Orientador: Carlile Campos Lavor.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Geometria de distâncias. 2. Álgebra geométrica. 3. Geometria conforme. 4.
Proteínas - Conformação. I. Lavor, Carlile Campos, 1968-. II. Universidade
Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação
Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Conformal geometric algebra and distance geometry

Palavras-chave em inglês:

Distance geometry

Geometric algebra

Conformal geometry

Proteins - Conformation

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Carlile Campos Lavor [Orientador]

Rafael Santos de Oliveira Alves

Roldão da Rocha Junior

Leandro Augusto Frata Fernandes

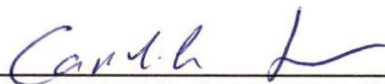
Emerson Vitor Castelani

Data de defesa: 05-08-2015

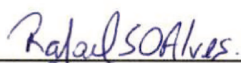
Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 05 de agosto de 2015 e aprovada

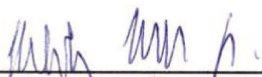
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



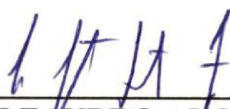
Prof(a). Dr(a). CARLILE CAMPOS LAVOR



Prof(a). Dr(a). RAFAEL SANTOS DE OLIVEIRA ALVES



Prof(a). Dr(a). ROLDÃO DA ROCHA JUNIOR



Prof(a). Dr(a). LEANDRO AUGUSTO FRATA FERNANDES



Prof(a). Dr(a). EMERSON VITOR CASTELANI

*A minha avó materna Marcionila que viu se iniciar esta jornada neste plano e verá
terminar em outro. Aos meus pais José Camargo e Maria Alice, e, aos meus treze irmãos
Eva, Mary, Mauro, Dinha, Tião, Cesar, Luzia, José, Renata, Marcos, Marcela,
Alessandro, Ana Paula e minha linda namorada Luciana que sempre me apoiaram durante
toda a caminhada.*

Agradecimentos

Agradeço ao prof. Carlile Lavor pela oportunidade de realizar este trabalho, com paciência e amizade.

Agradeço ao grande amigo Emerson Castelani pelas várias contribuições ao trabalho e também pelo apoio e amizade que dedicou durante toda a trajetória. Ao quase irmão Wesley que juntamente com o Emerson me cederam uma mesa em sua sala na universidade estadual de Maringá.

Agradeço a todos os amigos do "Lab", em especial ao Jorge, Germano e Felipe que sempre se mostraram dispostos a ajudar quando solicitados.

Agradeço aos vários amigos que fiz ao longo do doutorado, em especial meus novos irmãos, Lino Marcos, Adson, Wender, Lucas, Michel, Bacani e Marcos.

Aos professores e funcionários do IMECC, que direta ou indiretamente contribuíram com este trabalho. Em particular quero agradecer a professora Sandra Augusta por me proporcionar a vinda para UNICAMP.

Agradeço ainda à Universidade Estadual do Paraná-UNESPAR, por permitir meu afastamento durante o período em que cursava as disciplinas.

Por fim, quero agradecer a Fundação de Apoio à Fafipa e Fundação Araucária pelo auxílio financeiro enquanto estava afastado.

Resumo

O problema de determinar um conjunto de pontos num dado espaço geométrico no qual algumas distâncias entre dois desses pontos são conhecidas é chamado de Problema de Geometria de Distâncias. Tradicionalmente, estes problemas são modelados e resolvidos por meio de otimização contínua, entretanto na prática algumas aplicações fornecem informações que possibilitam a discretização do seu espaço de busca. Neste trabalho apresentaremos um método alternativo para a resolução destes problemas cujas instâncias possam ser discretizadas. A abordagem considerada difere da tradicional por tratar os objetos geométricos em um espaço de Minkowski por meio da Álgebra Geométrica Conforme. O modelo geométrico deste espaço proporciona uma interpretação natural como primitivas computacionais dos objetos relevantes ao problema. Além de um estudo teórico, apresentamos uma aplicação que utiliza o método proposto, para resolver problemas referentes ao cálculo de estrutura tridimensional de proteínas, conhecidos na literatura por *Discretizable Molecular Distance Geometry Problem - DMDGP*.

Palavras-chave: Geometria de Distâncias, Estrutura Tridimensional de Proteínas, Espaço de Minkowski, Multivetor, blades, Produto Geométrico, Otimização Combinatória, Álgebra Geométrica Conforme.

Abstract

The problem of determining a set of points in a given geometric space with certain distances between two of these points is called distance geometry problem. Traditionally, these problems are modeled and resolved through continuous optimization. However some practical applications give information which enable the discretization of its search space. In this work, we present an alternative method for solving these problems whose instances can be discretized. The approach differs from the traditional one, since we consider geometric objects in a Minkowski space by conformal geometric algebra. The geometric model of this space establishes a natural interpretation as computational primitive of relevant objects for the problem. Besides a theoretical study, we present an application that uses the proposed method for solving problems related to the calculation of the three-dimensional protein structure known in the literature as the Discretizable Molecular Distance Geometry Problem - DMDGP.

Keywords: Distance Geometry, Three-dimensional Structure of Proteins, Minkowski Space, Multivector, Blades, Geometric Product, Combinatorial Optimization, Conformal Geometric Algebra.

Lista de ilustrações

Figura 1	– Exemplos de cliques em um grafo G .	18
Figura 2	– Há três possibilidades: ou a solução é vazia ou, única ou ainda, pode haver duas soluções.	21
Figura 3	– Grafo G sem ordenação no DGP.((LAVOR; LIBERTI, 2014))	22
Figura 4	– Exemplos de Simplex em $\mathbb{R}^3$.	23
Figura 5	– Exemplo de interseção entre esferas.	25
Figura 6	– Coplanaridade entre os representantes de u, v, r e s , destacando em vermelho a mínima e máxima distância entre u e s [$\text{dist}(x_u, x_s)$], no qual $\text{dist}(x_v, x_s)$ e $\text{dist}(x_r, x_s)$ em amarelo são fixas.	26
Figura 7	– Coplanaridade entre os representantes de u, v, r e s , destacando em vermelho a mínima e máxima distância entre u e s , no qual x_u, x_r e x_s são fixados colinearmente.	27
Figura 8	– Interseção entre três esferas em $\mathbb{R}^3$ dando um par de pontos, com a visualização de um simplex gerado pelos centros das esferas e um ponto na interseção.	28
Figura 9	– À esquerda: árvore de discretização do espaço de busca de um $^k\text{DMDP}$ com 4 átomos e $k = 2$. À direita: Ilustração das simetrias na árvore de busca.	30
Figura 10	– Número de possibilidades para v_4 , as distâncias na cor preta são conhecidas.	31
Figura 11	– Fragmento de planos orientados gerados a partir do produto geométrico dos vetores $a, b \in \mathbb{R}^3$ dado no Exemplo 2.1.5, segundo as regras de orientação dadas pela mão direita (SILVA, 2009).	36
Figura 12	– Os produtos interno e exterior são não invertíveis, mas se combinam para criar um produto invertível.	37
Figura 13	– O produto exterior dos vetores $a, b \in \mathbb{R}^3$ dados no Exemplo 2.1.5 e suas projeções nos planos coordenados. A área é dada de maneira clássica pela norma do produto vetorial entre a e b , denotada aqui por $ a \wedge b $, a orientação pode ser, tanto o sentido horário $a \wedge b$ ou o sentido anti-horário $b \wedge a$ (SILVA, 2009).	38
Figura 14	– Exemplo de produto interno generalizado. Note que o vetor $A \cdot B$ é ortogonal ao vetor A .	47
Figura 15	– Exemplos de imersões estereográficas (figuras retiradas de (PERWASS, 2009)).	56
Figura 16	– Imersão do vetor $x \in \mathbb{R}^1$, primeiro sobre o círculo unitário $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$ e, em seguida, sobre o hiperplano afim $\mathbb{A}_M^2 \subset \mathbb{R}^{2,1}$ (PERWASS, 2009).	57

Figura 17 – Mesma imersão da Figura 16, com a visualização do cone nulo $\mathbb{H}^1$ (PERWASS, 2009).	58
Figura 18 – Imersão do ponto $x \in \mathbb{R}$ no modelo conforme com a visualização da horosfera $\mathbb{H}_a^1$. (PERWASS; HILDENBRAND, 2004)	61
Figura 19 – A figura (a) ilustra a ideia central para interpretação de objetos geométricos no modelo conforme: um plano intersecta a horosfera resultando em uma cônica projetada no plano euclidiano. As projeções são indicadas (aproximadamente) pelas linhas tracejadas. Uma base é apresentada, omitindo a origem e_0 . A figura (b) ilustra que pontos são representados por vetores nulos sobre a horosfera. A figura (c) ilustra que retas são representadas por planos paralelos ao eixo de simetria da horosfera. A figura (d) ilustra que círculos são representados por planos não paralelos ao eixo de simetria da horosfera (FONTIJNE, 2007).	71
Figura 20 – Em amarelo, o simplex $\mathcal{S}(u, v, w) \subset \mathbb{R}^3$ e, em azul, o 3-blade A não imerso em $\mathbb{R}^{4,1}$	76
Figura 21 – Possíveis resultados do produto meet de duas esferas em $\mathcal{Cl}_{3,1}$	77
Figura 22 – Reflexão do ponto x de $\mathbb{R}^2$ em relação a um "plano" que dista " d " da origem e , também, o ponto refletido y determinado pela soma vetorial $\vec{y} = \vec{x} + \vec{z}$	79
Figura 23 – O par de pontos $X_1, X_2 \in \mathbb{H}_a^2$, as esferas S_1, S_2 e o plano P do modelo conforme do Exemplo 3.2.6, representados em $\mathbb{R}^2$	83
Figura 24 – Caminho η na árvore de discretização de um kDMDGP , com $k = 2$ e $n = 7$. Representado pela sequência de pontos $x_{v_1} \rightarrow x_{v_2} \rightarrow \cdots \rightarrow x_{v_7}$ em $\mathbb{R}^2$	86
Figura 25 – Conjunto de planos $\mathcal{P} = \{P_2, P_3, P_4, P_5, P_6\}$ associado ao caminho η em $\mathbb{H}_a^2$, representado pela sequência de pontos $x_{v_1} \rightarrow x_{v_2} \rightarrow \cdots \rightarrow x_{v_7}$ em $\mathbb{R}^2$	87
Figura 26 – Em preto, com pontos em azul, todas as possíveis realizações incongruentes do Exemplo 3.3.1, e em azul claro, os respectivos planos associados à η	90
Figura 27 – Visualização em roxo das possíveis distâncias adicionais entre os níveis 4 e 7 no caminho fixado por x_{v_4} e, também, os caminhos refletidos pelos planos P_4, P_5 e P_6 que podem satisfazer a distância adicional.	92
Figura 28 – Visualização em vermelho dos planos excluídos e das realizações não válidas, em marron as distâncias adicionais dos níveis 2 e 4 ao 7, em preto com pontos em azul escuro as realizações incongruentes válidas na árvore $\mathcal{T}$ e em azul claro a representação dos planos que não foram excluídos do conjunto $\mathcal{P}$	96
Figura 29 – Ligações peptídicas entre aminoácidos (NELSON; COX, 2013).	98

Figura 30 – Proteína hipotética $\mathcal{M}$, onde ϕ e ψ representam rotações em torno de ligações a partir do carbono central do aminoácido C_α e dão origem aos ângulos de torção (NELSON; COX, 2013).	99
Figura 31 – Cadeia principal de $\mathcal{M}$.	99
Figura 32 – Ilustração em 2D de uma esfera com raio $5\text{\AA}$, centralizada no representante do décimo quinto átomo, simulando experimentos de RMN aplicados a uma proteína hipotética com 19 átomos.(LIBERTI et al., 2014)	100
Figura 33 – A esquerda: O átomo i pode estar somente em duas posições (i e i') para ser "viável" com a distância $d_{i-3,i}$. A direita: Ilustração das possíveis conformações da cadeia principal de uma molécula formada por dois aminoácidos (árvore em 3D).	100
Figura 34 – Descrição dos ângulos de dobra ($\theta_{i's}$), ângulo de torção (ω_i) e comprimentos de ligação ($r_{i's}$).	101
Figura 35 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Um círculo, (b) Espaço tangente e (c) Círculo imaginário.	106
Figura 36 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Pontos imaginários, (b) Pontos reais e coincidentes e (c) Pontos reais e distintos.	107
Figura 37 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Ponto imaginário, (b) Ponto real.	109
Figura 38 – Planos P_3 e P_4 associados a primeira possível solução.	116
Figura 39 – Primeira solução possível	116
Figura 40 – Segunda solução possível	116
Figura 41 – Árvore em 3D e os planos P_3 e P_4 associados ao Exemplo 4.4.5.	117
Figura 42 – Realização congruente a 1^a solução	117
Figura 43 – Realização congruente a 2^a solução	117
Figura 44 – Perfil de desempenho: $\tau \in [1, 9]$	123
Figura 45 – $\tau \in [1, 45]$	123
Figura 46 – $\tau \in [1, 1400]$	123
Figura 47 – Perfil de desempenho: $\tau \in [1, 1400]$.	124

Lista de tabelas

Tabela 1	– Classificação dos subespaços de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$.	42
Tabela 2	– Classificação dos subespaços de $\bigwedge(\mathbb{R}^3)$.	43
Tabela 3	– Elementos básicos canônicos de $\bigwedge(\mathbb{R}^3)$.	43
Tabela 4	– Dualidade em $\mathcal{Cl}_3$	52
Tabela 5	– Elementos básicos da álgebra $\mathcal{Cl}_{4,1}$, constituídos a partir dos vetores canônicos da base do espaço conforme $\mathbb{R}^{4,1}$.	65
Tabela 6	– Caracterização geométrica via OPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$.	66
Tabela 7	– Classificação de esferas, planos e pontos em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ a partir da Equação (2.60).	68
Tabela 8	– Objetos geométricos via INPS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$.	71
Tabela 9	– Fatoração QR versus CGA	120
Tabela 10	– Resultados Comparativos: BP versus BP-Coope versus C-SymBP	121

Sumário

Introdução	15
1 Problema Principal	17
1.1 Problema de Geometria de Distância - DGP	17
1.1.1 Solubilidade e Complexidade de um DGP	18
1.2 Discretização do DGP	24
1.2.1 Ordenação	25
1.2.2 interseção entre Esferas	25
1.2.3 Probabilidade	27
1.3 k -Problema de Geometria de Distância Discretizável	28
1.4 k -Problema de Geometria de Distância Molecular Discretizável	29
2 Álgebra Geométrica	33
2.1 Introdução	33
2.1.1 Produto Geométrico	34
2.2 k -Vetores e k -Espaços	38
2.2.1 k -Base Vetorial	39
2.3 Espaço Multivetorial	41
2.3.1 Base Multivetorial	41
2.3.2 Produtos Generalizados em $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$	43
2.4 Axiomática da Álgebra Geométrica	47
2.4.1 Objetos Geométricos em AG	49
2.4.2 Operadores Geométricos em $\mathcal{C}l_{p,q}$	50
2.4.3 interseção e União de Objetos Geométricos	52
2.4.4 Transformações Ortogonais	53
2.5 Álgebra Geométrica Conforme	55
2.5.1 Modelo Conforme	55
2.5.1.1 Imersão Estereográfica de $\mathbb{R}^n$ em $\mathbb{R}^{n+1}$	56
2.5.1.2 Homogeneização da Imersão Estereográfica	57
2.5.2 Álgebra Geométrica Conforme $\mathcal{C}l_{4,1}$	65
3 kDMDGP via CGA	74
3.1 Determinante de Cayley-Menger versus Gramian no Modelo Conforme	74
3.2 Operações fundamentais do kDMDGP em CGA	77
3.2.1 interseção entre Esferas em $\mathcal{C}l_{n+1,1}$	77
3.2.2 Reflexão no Modelo Conforme	78
3.3 Análise Teórica de Instâncias kDMDGP no Modelo Conforme	84
3.3.1 Simetria	86
3.3.2 Distâncias Adicionais e Factibilidade	90

3.3.3	Número de Soluções	93
4	Cálculo de Estrutura de Proteínas via CGA	98
4.1	Estrutura Principal da Proteína	98
4.2	Branch-and-Prune (BP)	101
4.2.1	O Algoritmo	101
4.2.1.1	Estrutura do BP	103
4.3	Estratégia de Coope	104
4.4	Funções Implementadas no Método via CGA	105
4.4.1	<i>function 1</i> : Interseção entre duas esferas	106
4.4.2	<i>function 2</i> : Interseção entre três esferas	107
4.4.3	<i>function 3</i> : interseção entre quatro esferas	108
4.4.4	<i>function 4</i> : Reflexão	110
4.4.5	Algoritmo $C - SymBP$ com $k = 3$	112
4.4.6	Exemplo Detalhado	113
4.4.6.1	Uma descrição do Algoritmo $C - SymBP$ ao resolver o Exemplo 4.4.5.	114
4.5	Experimentos Computacionais	116
4.5.1	Instâncias Artificiais	117
4.5.2	Considerações sobre Máquina e Memória	118
4.5.3	Resultados Comparativos	119
4.5.4	Perfil de Desempenho	121
5	Considerações Finais	125
5.1	Contribuições da Tese	125
5.2	Conclusão e Resultados Futuros	125
	REFERÊNCIAS	127

Introdução

O DGP¹ é definido na literatura como o problema de determinar um conjunto de pontos em um dado espaço geométrico, onde algumas distâncias entre eles são conhecidas (LIBERTI et al., 2014). É o problema fundamental de uma área de pesquisa consolidada, conhecida como *Geometria da Distâncias* - DG^2 , que tem como áreas fundamentais a matemática e a computação. Além de sua área teórica, o interesse nesse problema reside na quantidade de aplicações em que ele pode ser utilizado, tais como: conformação molecular, redes de sensores sem fio, estática, robótica, entre outras (LAVOR; LIBERTI, 2014).

Geralmente, o DGP é formulado como um problema de otimização contínua (LIBERTI et al., 2014), mas a formulação discreta baseada em intersecções de esferas, proposta em (LIBERTI et al., 2014), nos deu inspiração para modelar o problema utilizando a álgebra geométrica conforme - CGA³.

A motivação principal para utilizarmos CGA é que a interpretação geométrica dos objetos geométricos de interesse do problema se "eleva" a um novo patamar, com representação simples na forma de primitivas computacionais, além de apresentar uma clara distinção entre vetores e pontos e de representar transformações de maneira mais intuitiva do que a codificação tradicional por matrizes.

O método proposto neste trabalho leva em consideração todas as simetrias inerentes do problema, proporcionando a busca por uma única solução e obtendo as outras por meio de suas simetrias. Detalhes sobre as simetrias, além dos descritos neste trabalho, podem ser encontrados nas referências (MUCHERINO; LAVOR; LIBERTI, 2012b; LIBERTI et al., 2011).

O trabalho está organizado em cinco capítulos, onde os dois primeiros são capítulos introdutórios e os capítulos 3 e 4 apresentam as principais contribuições da tese. O conteúdo de cada capítulo é apresentado a seguir:

- No capítulo 1 é apresentado o problema central da tese, a ideia da sua discretização e também são apontados alguns métodos que resolvem o problema por meio de otimização combinatória;
- No capítulo 2 é apresentada a álgebra geométrica utilizada por nós para escrever o método de resolução do problema principal da tese;

¹ Do Inglês: Distance Geometry Problem

² Do Inglês: Distance Geometry

³ Do Inglês: Conformal Geometric Algebra

-
- O capítulo 3 faz uma análise teórica do problema principal utilizando a álgebra geométrica conforme;
 - No capítulo 4 é apresentada uma comparação entre o método proposto e o método tradicional utilizado para resolver problemas tridimensionais que envolvem o cálculo estrutural de proteínas;
 - O capítulo 5 apresenta a conclusão e os trabalhos futuros.

1 Problema Principal

Menger caracterizou vários conceitos geométricos em termos de distâncias (Menger, 1930), tais como: congruência, convexidade, etc. Os resultados de Menger, posteriormente completados e apresentados por Blumenthal (Blumenthal, 1970), deram origem a um ramo de estudo denominado Geometria de Distâncias. O problema fundamental desta teoria relaciona o conceito de distância com a geometria do problema. Um estudo detalhado e suas inúmeras aplicações pode ser encontrado em (Liberti et al., 2014).

1.1 Problema de Geometria de Distância - DGP

Atualmente, a formulação do DGP envolve teoria de grafo, no qual cada vértice do grafo corresponde a um ponto no espaço de busca, e se a distância entre dois desses pontos é conhecida, temos uma aresta entre os vértices correspondentes no grafo. Formalmente, a definição para um DGP encontrada na literatura é dada por,

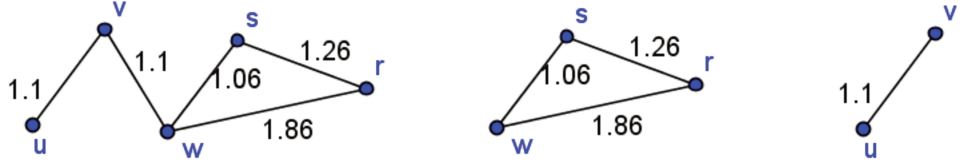
Definição 1.1.1. (DGP) Dado um inteiro $k > 0$, e um grafo simples $G = (V, E, d)$ conectado, onde V é um conjunto de vértices, $E \subset V \times V$ é o conjunto de pares de vértices cujas distâncias entre si são conhecidas, dadas como pesos nas arestas e definidas pela função $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, encontre uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ tal que

$$\forall \{u, v\} \in E, \|x(u) - x(v)\| = d(u, v), \quad (1.1)$$

onde $\|\cdot\|$ representa a norma euclidiana.

A função x é chamada de *realização* de G , ou seja, uma "representação" de seus vértices em algum espaço euclidiano $\mathbb{R}^k$. A norma $\|\cdot\|$ representa a norma euclidiana, a menos que explicitemos outra norma. Se H é um subgrafo de G e $\bar{x}$ é uma realização de H em $\mathbb{R}^k$, dizemos que $\bar{x}$ é uma realização parcial de G em $\mathbb{R}^k$. Chamamos x de *realização válida*, se x satisfaz todas as equações em (1.1).

Definição 1.1.2. Uma m -clique em um grafo $G = (V, E, d)$, onde $|V| = n$, é um outro grafo $H = (V', E', d)$ tal que, $|V'| = m$, $V' \subset V$, $E' \subset E$ e H é completo (ver Figura 1).

(a) Grafo G com pesos nas arestas(b) 3-clique em G (c) 2-clique em G Figura 1 – Exemplos de cliques em um grafo G .

1.1.1 Solubilidade e Complexidade de um DGP

Esta subseção apresenta condições e estratégias para que um DGP seja ou não solúvel e apresenta referências sobre sua complexidade.

Resolver o DGP é associar cada vértice do grafo G a um único ponto do $\mathbb{R}^k$. Assim, é possível obter todas as distâncias entre seus representantes, ou seja, "obtemos" todas as arestas de G . Embora o DGP tenha sido definido via teoria de grafos, sua formulação clássica se dá por meio de um problema de otimização contínua com uma formulação usando programação matemática, definida por

$$\min_{x \in \mathbb{R}^k} \sum_{\{u,v\} \in E} (||x_u - x_v||^2 - d_{uv}^2)^2. \quad (1.2)$$

A grande dificuldade desta abordagem é que existe uma grande quantidade de mínimos locais e desejamos encontrar o mínimo global. Além disto, a quantidade de mínimos locais cresce exponencialmente com o número de vértices do problema associado, como pode ser visto em (LIBERTI et al., 2014).

Supondo que um DGP admite solução, sabemos que o conjunto solução é finito ou infinito não enumerável, visto que na literatura existe um resultado usando geometria algébrica garantindo que o caso infinito, mas enumerável, não ocorre e pode ser visto em (BENEDETTI; RISLER, 1990). No caso finito, podemos pensar em novos métodos para encontrar a solução do problema. Mas que tipo de condições seriam suficientes para garantir que o conjunto solução é finito? Começamos por fixar k , assim podemos associar a cada DGP, que denominaremos por DGP_k devido ao k fixo, uma matriz de distâncias euclidianas com as distâncias conhecidas. De maneira geral, a definição de matrizes euclidianas é dada por,

Definição 1.1.3. (Matrizes de Distâncias Euclidianas) Seja A uma matriz $(k+1) \times (k+1)$ simétrica, tais que suas entradas a_{ij} são positivas para todo $i \neq j$ e iguais a zero se $i = j$. Dizemos que A é uma matriz de distâncias euclidianas em $\mathbb{R}^k$, se existem vetores

$v_1, v_2, \dots, v_k \in \mathbb{R}^n$ tais que,

$$\|v_i - v_j\| = a_{ij}, \forall i, j = 1, \dots, k.$$

Consequentemente, matrizes associadas às instâncias DGP_k com distâncias faltantes, possuem entradas faltantes. Caso a matriz de distância associada seja completa, o conjunto solução do DGP_k associado é unitário, em outras palavras, se A é uma matriz de distâncias euclidianas em $\mathbb{R}^k$, então o grafo $G = (V, E, d)$ que representa o DGP_k correspondente é completo, logo uma solução para o DGP_k , isto é, uma realização x de G em $\mathbb{R}^k$, pode ser encontrada em tempo linear. Detalhes podem ser vistos em (DONG; WU, 2002). Esta característica associa dois problemas independentes, o DGP com o EDMCP¹, que trata dos possíveis completamentos de matrizes euclidianas em $\mathbb{R}^k$ com menor k possível. Detalhes podem ser obtidos em (LAURENT, 2009). Com isto, técnicas para obtenção de matrizes de distâncias podem ser aplicadas na resolução de um DGP após um estudo sobre sua estrutura, como feito na tese do Abud (ABUD, 2014).

Na verdade, não é nada trivial resolver um PGD. Um resultado conhecido na literatura é que o PGD é um problema NP-completo para $k = 1$ e NP-difícil para $k \geq 2$, o que significa que resolver um DGP pode exigir um custo proporcional a $2^{|V|}$. Uma revisão detalhada sobre o tema pode ser vista em (SAXE, 1979). Podemos observar a enorme dificuldade de se resolver o sistema quadrático (1.1), visto que existe uma conjectura de que não seja possível obter uma fórmula fechada para resolvê-lo analiticamente em um espaço euclidiano envolvendo apenas somas, diferenças, produtos, frações, potências e radicais (BAJAJ, 1988).

Mesmo em uma situação simplificada de um DGP, podemos verificar as dificuldades para uma resolução numérica, como observaremos no exemplo abaixo.

Exemplo 1.1.4. Considere o seguinte exemplo, como dado em (LAVOR; LIBERTI, 2014). Seja um DGP com $k = 3$, $V = \{u, v, r, s\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{u, r\}, \{u, s\}, \{v, r\}, \{v, s\}, \{r, s\}\}$. Fixando u, v, r , ou seja, determinando $x(u) = x_1 = (x_{11}, x_{12}, x_{13})$, $x(v) = x_2 = (x_{21}, x_{22}, x_{23})$ e $x(r) = x_3 = (x_{31}, x_{32}, x_{33})$ em $\mathbb{R}^3$, de tal modo que $\|x_1 - x_2\| = d(u, v)$, $\|x_1 - x_3\| = d(u, r)$ e $\|x_2 - x_3\| = d(v, r)$.

Note que $d(s, u)$, $d(s, v)$ e $d(s, r)$ são conhecidos, assim podemos montar um sistema quadrático para posicionar s , ou seja, obter $x(s) = x_s$, da seguinte forma:

$$(SLO) = \begin{cases} \|x_s - x_1\| &= d_1 \\ \|x_s - x_2\| &= d_2 \\ \|x_s - x_3\| &= d_3 \end{cases}$$

¹ Do Inglês: Euclidean Distance Matrix Completion Problem

ou ainda, $\|x_s - x_j\|^2 = d_j^2$, onde $d_j = d(s, j)$; $j = 1, 2, 3$, isto é, elevando ao quadrado ambos os termos das igualdades,

$$\begin{cases} \|x_s\|^2 - 2(x_s \cdot x_1) + \|x_1\|^2 &= d_1^2 \\ \|x_s\|^2 - 2(x_s \cdot x_2) + \|x_2\|^2 &= d_2^2 \\ \|x_s\|^2 - 2(x_s \cdot x_3) + \|x_3\|^2 &= d_3^2 \end{cases}$$

e subtraindo a primeira equação das outras duas obtemos:

$$\begin{cases} 2(x_s \cdot x_2) - 2(x_s \cdot x_1) &= \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ 2(x_s \cdot x_3) - 2(x_s \cdot x_1) &= \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{cases}$$

ou ainda,

$$\begin{cases} 2(x_2 - x_1) \cdot x_s &= \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ 2(x_3 - x_1) \cdot x_s &= \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2. \end{cases}$$

Ou seja, temos um sistema linear

$$Ax = b,$$

onde

$$A = 2 \begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} & x_{v_2} - x_{u_2} & x_{v_3} - x_{u_3} \\ x_{r_1} - x_{u_1} & x_{r_2} - x_{u_2} & x_{r_3} - x_{u_3} \end{bmatrix},$$

$$b = \begin{bmatrix} \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{bmatrix}$$

e

$$x = \begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_2} \\ x_{s_3} \end{bmatrix}.$$

$Ax = b$ pode ser reescrito como:

$$\begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} & x_{v_2} - x_{u_2} \\ x_{r_1} - x_{u_1} & x_{r_2} - x_{u_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v_3} - x_{u_3} \\ x_{r_3} - x_{u_3} \end{bmatrix} [x_{s_3}]$$

ou,

$$\begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} & x_{v_3} - x_{u_3} \\ x_{r_1} - x_{u_1} & x_{r_3} - x_{u_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_3} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v_2} - x_{u_2} \\ x_{r_2} - x_{u_2} \end{bmatrix} [x_{s_2}]$$

ou ainda,

$$\begin{bmatrix} x_{v_2} - x_{u_2} & x_{v_3} - x_{u_3} \\ x_{r_2} - x_{u_2} & x_{r_3} - x_{u_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s_2} \\ x_{s_3} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} \\ x_{r_1} - x_{u_1} \end{bmatrix} [x_{s_1}].$$

As equações acima sugerem uma condição necessária sobre a finitude do DGP.

Ao fixar os vértices u, v e r , ou seja, obter seus representantes em $\mathbb{R}^3$, deve-se fazê-lo de tal modo que x_1, x_2 e x_3 não sejam colineares (isto não acontece nas aplicações),

o que inviabilizaria a finitude do número de soluções. Assim, A tem posto completo e o sistema terá no máximo duas soluções, dadas explicitamente pela interseção entre uma das esferas do sistema original (SLO) e uma reta gerada pela completude de A (ver Figura 2). Para que tenhamos uma ilustração, suponha, sem perda de generalidade, a reta gerada pelas primeiras coordenadas, isto é, definida pela equação

$$X = P + Q[x_{s_3}] \quad (1.3)$$

onde,

$$P = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} & x_{v_2} - x_{u_2} \\ x_{r_1} - x_{u_1} & x_{r_2} - x_{u_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \|x_2\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_2^2 \\ \|x_3\|^2 - \|x_1\|^2 + d_1^2 - d_3^2 \end{bmatrix},$$

$$Q = \begin{bmatrix} x_{v_1} - x_{u_1} & x_{v_2} - x_{u_2} \\ x_{r_1} - x_{u_1} & x_{r_2} - x_{u_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x_{v_3} - x_{u_3} \\ x_{r_3} - x_{u_3} \end{bmatrix} \text{ e } X = \begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_2} \end{bmatrix}.$$

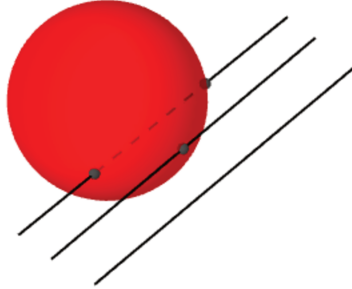


Figura 2 – Há três possibilidades: ou a solução é vazia ou, única ou ainda, pode haver duas soluções.

Note que, com uma solução, pode-se obter uma quantidade infinita de realizações válidas distintas de G via rotações e translações, denominadas *realizações congruentes* do grafo G e definidas como:

Definição 1.1.5. (Realizações Congruentes) Duas realizações x e y de um grafo $G = (V, E, d)$ em $\mathbb{R}^k$ associado a um DGP, são ditas congruentes se,

$$\|x(u) - x(v)\| = \|y(u) - y(v)\|; \forall u, v \in V. \quad (1.4)$$

Realizações congruentes são irrelevantes em termos de aplicações, visto que elas representam a mesma solução. Logo, todo método deve encontrar apenas realizações incongruentes.

Outro fato importante ao observar o Exemplo 1.1.4 é que para cada vértice $s \in V$ a ser realizado em $\mathbb{R}^3$ de um PGD, devem existir arestas $(u, s), (v, s), (r, s) \in E$ tais que os vértices $u, v, r \in V$ já tenham sido realizados, para que se possa gerar um sistema quadrático com $x(s) \in \mathbb{R}^3$ como única variável. O que sugere uma ordem nos vértices de V de tal forma que tenha-se uma realização parcial de G envolvendo u, v e r .

O problema de determinar se tal ordem existe é chamado de DVOP² e pode ser resolvido em tempo polinomial, usando a ideia de se ordenar os vértices seguintes considerando o maior número possível de arestas aos antecessores, como pode ser visto detalhadamente em (LAVOR et al., 2012). Entretanto, estabelecer uma ordem nos vértices do grafo é apenas uma condição suficiente para garantir a finitude do PGD mas não necessária, como pode ser visto no Exemplo 1.1.6 retirado de (LAVOR; LIBERTI, 2014). A condição necessária envolve um estudo sobre a estrutura do grafo G , característica como rigidez do grafo pode ajudar, mas não é muito fácil esse conhecimento a priori, como podemos ver em (GRAVER; SERVATIUS; SERVATIUS, 1993).

Exemplo 1.1.6. Considere um DGP com $k = 2$ e $G = (V, E, d)$, onde $V = \{r, s, t, u, v, w\}$ e $E = \{\{r, s\}, \{r, t\}, \{r, u\}, \{s, t\}, \{s, v\}, \{t, w\}, \{u, v\}, \{u, w\}, \{v, w\}\}$. Queremos encontrar uma ordem tal que os dois primeiros vértices formem uma 2-clique e a partir do terceiro, existam dois vértices anteriores ligados a ele, ou seja, formem uma 3-clique com os vértices anteriores.

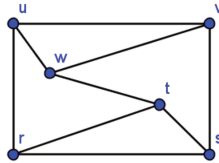


Figura 3 – Grafo G sem ordenação no DGP. ((LAVOR; LIBERTI, 2014))

Uma inicialização a partir de qualquer um dos seus vértices da Figura 3, não permite uma sequência no método de ordenação, que satisfaça as condições do Exemplo 1.1.6, entretanto o conjunto solução do DGP é finito.

Definição 1.1.7. (Simplex) Um k -simplex é um subespaço afim $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$ k -dimensional, representado pelo politopo convexo formado pelos pontos coordenados $p_0, p_1, \dots, p_k \in \mathbb{R}^n$,

² Do Inglês: Discretizable Vertex Ordering Problem

cuja base é $\{v_1, \dots, v_k\}$, com $v_i = p_i - p_0$, ou seja,

$$\mathcal{S} = \{\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_k v_k = 0; \alpha_i \geq 0, 1 \leq i \leq k \text{ e } \sum_{i=0}^k \alpha_i = 1\} \quad (1.5)$$

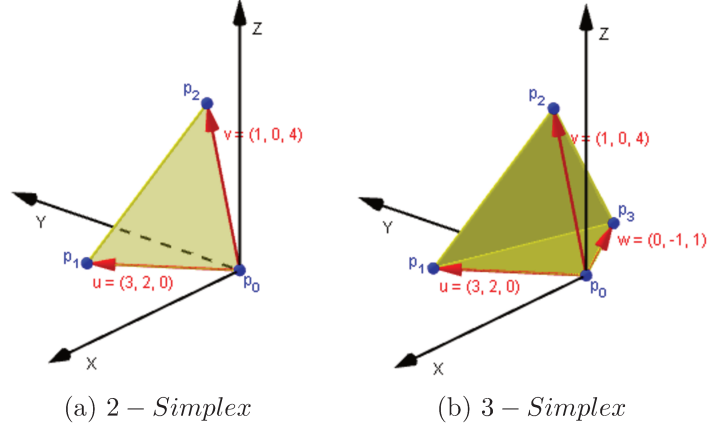


Figura 4 – Exemplos de Simplex em $\mathbb{R}^3$.

Definição 1.1.8. (Matriz com "borda") Uma matriz de distâncias quadradas $D^2 = \{d_{ij}^2\}$ é definida por uma matriz cujas entradas são quadrados dos elementos de uma matriz de distâncias D . Uma matriz com "borda" de distâncias quadradas D_b^2 , é uma matriz de ordem $k + 2$, cujas entradas são as mesmas de D^2 a menos da primeira linha e primeira coluna que são compostas pela $(k + 2) - upla$ $(0, 1, 1, \dots, 1)$, isto é,

$$D_b^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & d^2(p_0, p_1) & \dots & d^2(p_0, p_k) \\ 1 & d^2(p_0, p_1) & 0 & \dots & d^2(p_1, p_k) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d^2(p_0, p_k) & d^2(p_1, p_k) & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.6)$$

Exemplo 1.1.9. Considere os vértices dos simplex dado na Figura 4, então as matrizes de "borda" que os representam são:

$$D_b^2(2\text{-Simplex}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & \sqrt{13} & \sqrt{17} \\ 1 & \sqrt{13} & 0 & \sqrt{24} \\ 1 & \sqrt{17} & \sqrt{24} & 0 \end{bmatrix} \text{ e } D_b^2(3\text{-Simplex}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & \sqrt{13} & \sqrt{17} & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{13} & 0 & \sqrt{24} & \sqrt{19} \\ 1 & \sqrt{17} & \sqrt{24} & 0 & \sqrt{11} \\ 1 & \sqrt{2} & \sqrt{19} & \sqrt{11} & 0 \end{bmatrix}.$$

Arthur Cayley, em 1841 (CAYLEY,), mostrou que o quadrado do volume de um k -simplex $\mathcal{S} = \{\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_k v_k = 0; \alpha_i \geq 0, 1 \leq i \leq k \text{ e } \sum_{i=0}^k \alpha_i = 1\}$ ($\Delta_k^2(\mathcal{S})$), é

proporcional ao determinante da sua matriz de "borda". Quase um século depois, Karl Menger provou que a não-negatividade deste determinante é uma condição suficiente para que qualquer matriz simétrica, de números reais não negativos com zeros na diagonal principal, seja uma matriz de distâncias ao quadrado entre um conjunto de pontos no espaço euclidiano (MENER, 1931). Essa demonstração motivou a seguinte definição.

Definição 1.1.10. (determinante de Cayley-Menger) O determinante $\det(D_b^2)$ é chamado um *determinante de Cayley-Menger*, denotado na literatura por CM .

Assim, o volume de um k – simplex é dado por,

$$\Delta_k(\mathcal{S}) = \sqrt{\frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} CM} = \sqrt{-\left(\frac{1}{k!}\right)^2 \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & -\frac{1}{2}d(p_0, p_1)^2 & \cdots & -\frac{1}{2}d(p_0, p_k)^2 \\ 1 & -\frac{1}{2}d(p_0, p_1)^2 & 0 & \cdots & -\frac{1}{2}d(p_1, p_k)^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & -\frac{1}{2}d(p_0, p_k)^2 & -\frac{1}{2}d(p_1, p_k)^2 & \cdots & 0 \end{vmatrix}}.$$

Seu cálculo tornou-se fundamental ao conceito de imersão de grafo em um espaço euclidiano, descrito pelo teorema:

Teorema 1.1.11. Uma condição necessária e suficiente para que $k + 1$ pontos sejam representados (imersos) em $\mathbb{R}^k$, para $k \leq n$, é que o sinal de todos os determinantes de Cayley-Menger de r pontos seja igual a $(-1)^r$ para todo $r \leq k + 1$, enquanto que o determinante de Cayley-Menger de qualquer quantidade de pontos superior a $k + 1$ é zero. Sua representação é irredutivelmente incorporável em $\mathbb{R}^k$ se, e somente se, além disso, pelo menos um determinante de Cayley-Menger de $k + 1$ pontos é diferente de zero.

A demonstração do Teorema 1.1.11 pode ser encontrada em (HAVEL; KUNTZ; CRIPPEN, 1983).

1.2 Discretização do DGP

Encontrar uma imersão para um grafo não ponderado em um espaço euclidiano possui duas aplicações principais: conformação molecular (HENDRICKSON, 1995) e rede de sensores (EREN et al., 2004; KRISLOCK; WOLKOWICZ, 2010). Em 2005, baseado em condições como as dadas no Exemplo 1.1.4, Lavor et al. (LIBERTI et al., 2014), iniciaram um trabalho que explora as características de problemas práticos e estabeleceram um método que envolve ordenação nos vértices de G , interseção de esferas e probabilidade para discretizar o espaço de busca de um DGP.

1.2.1 Ordenação

Para descrever a ordenação, necessitamos de algumas definições voltadas ao problema, assim, considere inicialmente um grafo simples não orientado $G = (V, S)$, onde V é o conjunto de vértices de G , uma ordem $<$ sobre seus vértices e $S \subset V \times V$ o conjunto de pares de vértices ligados por uma aresta, segue então:

Definição 1.2.1. (Vértices Predecessores) Dado um vértice $v \in V$ e considerando a ordem $<$ sobre V , definimos o *conjunto dos vértices predecessores* de v em V por,

$$\gamma(v) = \{u \in V / u < v\}$$

e a *posição* de v na ordem $<$ como

$$\rho(v) = |\gamma(v)| + 1.$$

Definição 1.2.2. (Vértices Adjacentes) Seja $v \in V$, definimos o *conjunto dos vértices adjacentes* a v como

$$N(v) = \{u \in V / \{u, v\} \in S\}, \quad \forall v \in V.$$

Definição 1.2.3. (Predecessores Adjacentes Imediatos) Para cada $v \in V$ com $\rho(v) > k$, definimos por U_v o *conjunto dos k predecessores adjacentes imediatos* de v .

Note que $U_v \subseteq N(v) \cap \gamma(v)$.

1.2.2 interseção entre Esferas

A interseção de k esferas em $\mathbb{R}^k$ pode ser vazia, conter um ponto, dois pontos ou um número não enumerável de pontos (COOPE, 2000), como podemos ver na Figura 5, onde $k = 3$.

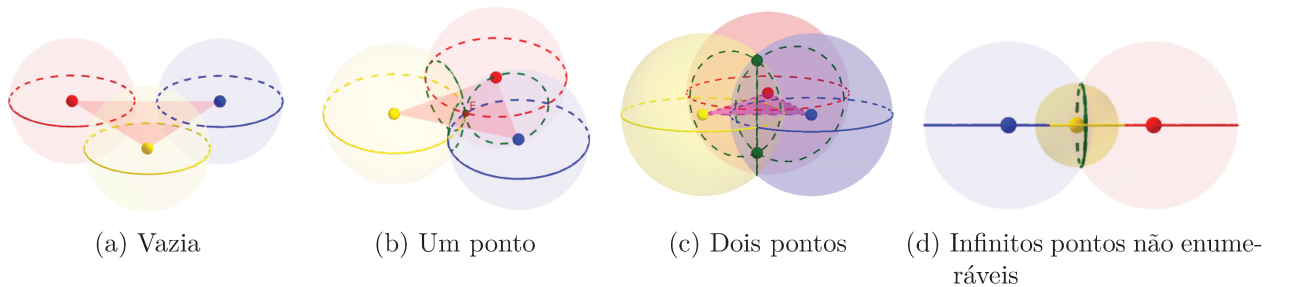


Figura 5 – Exemplo de interseção entre esferas.

De maneira mais geral, considere o conjunto $U = \{x_1, \dots, x_k\} \subset \mathbb{R}^k$ e os números reais positivos $r_1, \dots, r_k$. Seja $Pp = \bigcap_{i \leq k} S_i^{r_i-1}$ a interseção entre k esferas cujos

centros são x_i e os raios $r_i; i = 1, \dots, k$. Se $Pp \neq \emptyset$, mas a dimensão do espaço afim $[U]$, gerado por U for menor do que $k - 1$, então $|Pp|$ é não enumerável, ou ainda, se a dimensão $[U]$ for igual a $k - 1$, temos $|Pp| \in \{0, 1, 2\}$. Mais informações podem ser encontradas em (LAVOR et al., 2012).

Estratégias algébrica e numérica para calcular Pp podem ser encontradas em Coope (COOPE, 2000), entretanto o artigo de Coope apresenta ressalvas quanto a condição de posto completo para matriz formada a partir dos centros das esferas³. Um exemplo desta instabilidade pode ser observado no Exemplo 1.1.4, onde a unicidade da solução acontece se, e somente se, $x(s)$ pertencer ao plano que contém os centros das esferas, o que deve ocorrer quando uma das distâncias dos centros a $x(s)$ é mínima ou máxima possível, como ilustra a Figura 6.

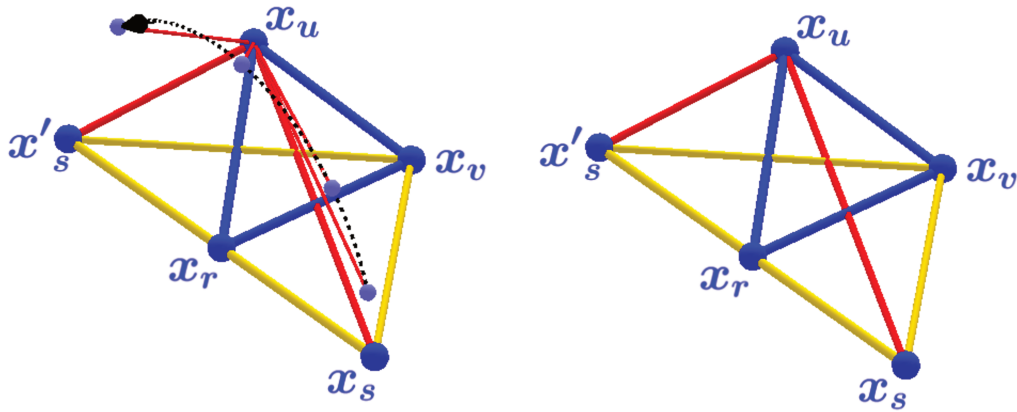


Figura 6 – Coplanaridade entre os representantes de u, v, r e s , destacando em vermelho a mínima e máxima distância entre u e s [$\text{dist}(x_u, x_s)$], no qual $\text{dist}(x_v, x_s)$ e $\text{dist}(x_r, x_s)$ em amarelo são fixas.

Uma consequência direta destas distâncias especiais é que, considerando o Exemplo 1.1.4 como apenas uma etapa na procura de possíveis soluções de um problema maior (com $|V| \geq 5$), na próxima etapa podemos ter uma matriz com posto incompleto, gerada pela etapa anterior, o que inviabiliza a veracidade da solução obtida, caso o método por interseções de esferas obtenha um caminho de busca, o que podemos ver na Figura 7, que ilustra s representado pela máxima distância, de tal modo que os representantes $x(s), x(r)$ e $x(u)$ são colineares.

³ Uma discussão detalhada sobre os efeitos de se obter um ponto errado é apresentada na seção 4 do artigo do Coope (COOPE, 2000).

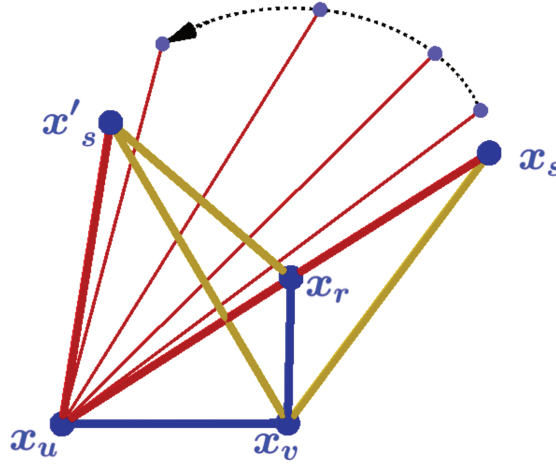


Figura 7 – Coplanaridade entre os representantes de u, v, r e s , destacando em vermelho a mínima e máxima distância entre u e s , no qual x_u, x_r e x_s são fixados colinearmente.

1.2.3 Probabilidade

Consideremos uma realização válida $x = (x_1, \dots, x_n)$, no conjunto de todas as realizações incongruentes do grafo ponderado G em $\mathbb{R}^k$, necessariamente $x \subset \mathcal{B}$, onde $\mathcal{B}$ representa uma bola centrada em x_1 , com raio $r = \sum_{i=1}^{n-1} \max_i \|x_i - x_{i+1}\|$. Portanto, o conjunto $\mathbb{X}$, de todas as realizações de um dado grafo é limitado, digamos $\mathbb{X} \subset \mathcal{B}'$, onde a bola $\mathcal{B}' \subset \mathbb{R}^{kn}$ é induzida por $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^k$.

Suponha G uma $(k+1)$ – clique, considere a distribuição de probabilidade uniforme em $\mathcal{B}'$. A probabilidade de que uma dada realização em $\mathcal{B}'$ pertença a qualquer subconjunto com medida de Lebesgue nula, é zero. Como ambos os subconjuntos $\{x \in \mathbb{R}^{k^2} : CM(U) = 0\}$ e $\{x \in \mathbb{R}^{k^2} : \Delta(U \cup \{x_{k+1}\}, d) = 0\}$ são subvariedades estritamente contidas em $\mathbb{R}^{k^2}$, eles têm medida de Lebesgue nula e assim, consequentemente, as suas restrições a $\mathcal{B}'$ também têm. Logo, a probabilidade de ocorrer $|Pp| = 1$ ou Pp não enumerável para uma dada realização $x \in \mathcal{B}'$ é zero.

Podemos observar na Figura 5 que o único caso de interseção entre esferas que geram simplex com volume positivo de um grafo associado a instâncias DGP, é o caso (c), ilustrado na Figura 8.

Portanto, se assumimos que $Pp \neq \emptyset$, então a interseção de k esferas em $\mathbb{R}^k$ consiste de exatamente dois pontos com probabilidade 1.

Propriedade 1.2.4. (interseção entre Esferas com Probabilidade 1) Dadas k esferas $S_1^{k-1}, \dots, S_k^{k-1} \subset \mathbb{R}^k$, chamamos de *Propriedade da interseção Esférica-PIE* a interseção $S_1^{k-1} \cap \dots \cap S_k^{k-1}$, se o volume do $(k+1)$ – simplex gerado pelos seus centros e um ponto na interseção for positivo, isto é, $\Delta(U \cup \{x_{k+1}\}, d) > 0$, onde $x_{k+1} \in S_1^{k-1} \cap \dots \cap S_k^{k-1}$ e U

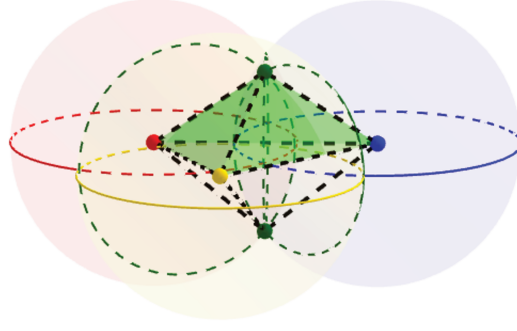


Figura 8 – Interseção entre três esferas em $\mathbb{R}^3$ dando um par de pontos, com a visualização de um simplex gerado pelos centros das esferas e um ponto na interseção.

é o conjunto que contém os centros.

Ou seja, se dado um PGD, com $k+1$ vértices em V , ordenados por $v_1, v_2, \dots, v_{k+1}$ tal que, exista um subgrafo $H \subset G$ completo com k vértices realizado em $\mathbb{R}^k$, com $(v_j, v_s) \in E$, $\forall v_j \in H$ e, $v_s \notin H$. Então, uma solução para o PGD pode ser obtida resolvendo a equação quadrática em $x_s = x(v_s)$ que envolve a interseção entre as k esferas, cujos centros $x_j = x(v_j)$ já estão realizados em $\mathbb{R}^k$, e satisfazem

$$x_s^T x_s - 2x_j^T x_s + x_j^T x_j = d_j^2 \quad (1.7)$$

onde $d_i = \text{dist}(x_j, x_s)$, $\forall v_j \in H$. Uma localização para x_s , se existir, deve pertencer a interseção de k esferas em $\mathbb{R}^k$. Se o DGP satisfaz *PIE*, existem duas possíveis realizações do grafo G em $\mathbb{R}^k$ com probabilidade 1, mas uma única solução para o problema, visto que, as duas realizações são congruentes.

Existem duas classes importantes de problemas DGP, para as quais, existe uma ordem nos vértices de G e satisfazem *PIE*, o que torna possível discretizar o problema. Tais classes são encontradas na literatura pelos seguintes nomes: *k-Problema de Geometria de Distância Discretizável*⁴-*DDGP* e *k-Problema de Geometria de Distância Molecular*⁵-*KDMDGP*.

1.3 *k*-Problema de Geometria de Distância Discretizável

Definição 1.3.1. (*^kDDGP*) Dado um inteiro $k > 0$ e um grafo simples $G = (V, E, d)$ conectado, onde V é um conjunto de vértices, $E \subset V \times V$ o conjunto de pares de vértices cujas distâncias entre si são conhecidas, dadas como peso nas arestas e definidas pela função $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, tais que,

⁴ Do Inglês: Discretizable Distance Geometry Problem.

⁵ Do Inglês: Discretizable Molecular Distance Geometry Problem.

- Dado uma ordem $<$ sobre os vértices de V , em que para todo $v \in V$ com $\rho(v) > k$, existe um subconjunto $S_v \subseteq N(v) \cap \gamma(v)$ que possui exatamente k elementos, tal que S_v é uma k -clique em G ;
- Dado uma realização parcial $\bar{x}$ dos k primeiros vértices de V em $\mathbb{R}^k$ e o k -simplex gerado por $G[S_v]$ possui volume positivo.

Existe uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$ tal que, x é uma realização do grafo G em $\mathbb{R}^k$ e uma extensão de $\bar{x}$.

Note que na Propriedade 1.2.4 o conjunto dos centros das esferas é independente de ordenação, assim podemos substituí-lo por S_v , visto que, possui cardinalidade igual a k . O kDDGP com k fixado é denotado por $DDGP_k$.

Se voltarmos ao Exemplo 1.1.4 e tivéssemos a segunda condição da definição acima na formulação do problema, saberíamos que $\{u, v, r\}$, os três vizinhos predecessores a s , induziriam uma 3-clique, cuja realização são pontos não colineares (volume positivo). Além disto, saberíamos que as possíveis posições para s , pertencem a interseção das esferas centradas em x_u, x_v e x_r , com raios d_{us}, d_{vs} e d_{rs} , respectivamente. Assim, de acordo com a seção anterior, temos duas possíveis posições (com probabilidade 1) para s .

1.4 k -Problema de Geometria de Distância Molecular Discretizável

O kDMDGP , primeiro surgiu de um interesse prático em conformação de proteínas em $\mathbb{R}^3$, posteriormente foi generalizado para um espaço k -dimensional, com k arbitrário, que é o nosso foco neste trabalho, por este motivo, vamos redefini-lo. No kDMDGP , existe uma ordem total sobre os vértices de V , tal que quaisquer $(k+1)$ vértices consecutivos induzem uma clique em G . A diferença entre o kDMDGP e o kDDGP é que kDMDGP , $S_v = U_v$, isto é, os k predecessores devem ser imediatos à v . Logo os dados de entradas de kDMDGP , consistem em:

- Um grafo simples e ponderado $G = (V, E, d)$, com $|V| = n$;
- Um inteiro positivo $k \leq n$;
- Uma ordem total $<$ sobre V de forma que:
 - para cada v , com $\rho(v) > k$, o conjunto $N(v) \cap \gamma(v)$ de adjacentes predecessores à v , possui ao menos k elementos;
 - para cada v , com $\rho(v) > k$, $N(v) \cap \gamma(v)$ contém um subconjunto U_v com exatamente k elementos predecessores imediatos á v , tal que,

- * $G[U_v]$ é um k – clique em G ;
- * a desigualdade triangular estrita $\Delta_{k-1}(U_v, d) > 0$ é verdadeira;
- Uma realização parcial válida $\bar{x}$, dos k primeiros vértices de G , segundo a ordem $<$.

Com este conjunto de hipóteses, é possível mostrar que cada vértice do grafo G , pode ocupar um número finito de posições possíveis no espaço k – dimensional, respeitando as restrições de distâncias em relação aos outros vértices. Segue então, que o espaço de busca por realizações viáveis dos grafos que satisfazem o conjunto com as hipóteses acima, torna-se discreto. Podemos observar que a discretização se dá por níveis simulando uma árvore, representado na Figura 9.

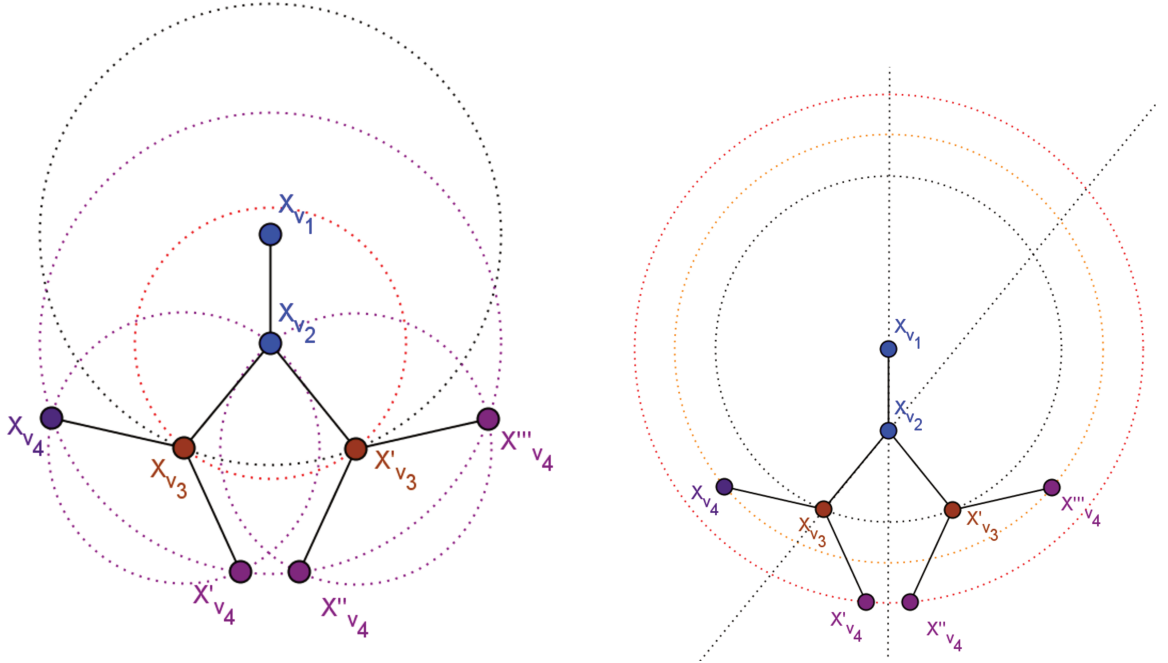


Figura 9 – À esquerda: árvore de discretização do espaço de busca de um k DMDP com 4 átomos e $k = 2$. À direita: Ilustração das simetrias na árvore de busca.

Outra característica em instâncias discretizadas, que se destaca devido a naturalidade que aparece na metodologia proposta por nós neste trabalho, também observada e explorada por Lavor et al. (MUCHERINO; LAVOR; LIBERTI, 2012b; MUCHERINO; LAVOR; LIBERTI, 2011; MUCHERINO; LIBERTI; LAVOR, 2010; LIBERTI et al., 2011), são as simetrias existentes no espaço de busca do k DMDGP. A Figura 9 evidencia estas simetrias para $k = 2$, por meio dos nós folhas da árvore, indicando-os sobre a interseção de circunferências.

Observação 1.4.1. Note na Figura 9 que, $d(x_{v_1}, x_{v_4}) \neq d(x_{v_1}, x'_{v_4})$, portanto distâncias adicionais na formulação do problema refere-se a distância entre o nível de partida e o nível

de chegada, visto que, o que ocorreu no exemplo, ocorre de maneira geral, isto é, se a esfera S_i^{k-1} não é um fator na interseção $S_{j+1}^{k-1} \cap \dots \cap S_{j+k}^{k-1}$, têm-se $d(x_{v_i}, x_{v_{j+k+1}}) \neq d(x_{v_i}, x'_{v_{j+k+1}})$, para todo $i < j + 1$.

Segue um exemplo que visa ilustrar as possíveis posições para os vértices de um grafo G e também apresentar o máximo para o conjuntos de todas as soluções de um ${}^k DMDGP$ associado a G .

Exemplo 1.4.2. Considere os vértices de $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$ ordenados segundo a ordem total do ${}^k DMDGP$, com $k = 2$, tais que $E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}$, ou seja, $d_{1,2}, d_{1,3}, d_{2,3}, d_{2,4}, d_{3,4}$ são conhecidas, então existem duas possibilidades para posicionar o quarto vértice em $\mathbb{R}^2$, na interseção das esferas $S_2^1(v_2, d_{2,4}) \cap S_3^1(v_3, d_{3,4})$, como ilustra a Figura 10.

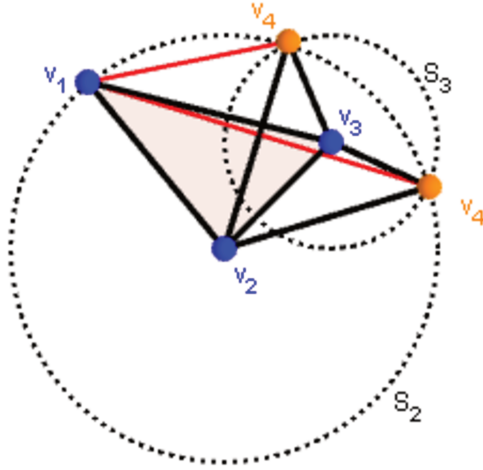


Figura 10 – Número de possibilidades para v_4 , as distâncias na cor preta são conhecidas.

Neste exemplo fica claro que, $d(v_1, v_4) \neq d(v_1, v'_4)$, pois o representante de v_1 pertence a S_2^1 , logo se tivermos o conhecimento a priori desta distância ($d_{1,4}$), o número de possibilidade para se posicionar quarto vértice é único.

Em aplicações, de modo geral, é comum conhecermos a priori algumas distâncias adicionais. Portanto, em uma situação mais geral, se existem pelo menos k predecessores adjacentes à v , satisfazendo as condições de um ${}^k DMDGP$, o conjunto solução tem cardinalidade no máximo $2^{n-(k+1)}$, já que pode existir um número superior a k de predecessores adjacentes à v , cujas distâncias podem ser um dado de entrada, isto é, podem ser conhecidas. Com isso, um teste de factibilidade deve ser realizado, ou seja, ambas, ou pelo menos uma posição para v , poderá ser infactível com respeito a estas restrições de distâncias adicionais.

Observação 1.4.3. O DDGP é uma subclasse de problemas do DGP que tem conjunto solução finito, mas pode ser demonstrado que continua sendo *NP-difícil* (MUCHERINO; LAVOR; LIBERTI, 2012a). Encontrar uma ordem para o ${}^k\text{DMDGP}$, diferentemente do DDGP (polinomial), é um problema *NP-difícil* (CASSIOLI et al., 2015), mas dependendo da aplicação, a ordem pode ser obtida a partir das características do problema, por exemplo o cálculo de estrutura de proteínas (LIBERTI et al., 2014). Queremos destacar que a hipótese sobre os k vértices anteriores é o "mínimo" que podemos exigir para garantir a finitude do conjunto solução, apesar desta condição ser apenas suficiente. Este valor também está no "limite" para atingir a polinomialidade, já que se exigirmos $(k + 1)$ vértices anteriores, ocorrem podas em todos os níveis o que torna a busca proporcional a $|V|$.

2 Álgebra Geométrica

Neste capítulo, apresentaremos alguns conceitos fundamentais das Álgebras Geométricas (GA's¹) e definiremos a Álgebra Geométrica Conforme (CGA²), que utilizaremos em uma subclasse do problema principal. A principal referência foi (PERWASS, 2009), mas outras abordagens sobre o tema podem ser encontradas nas referências (PERWASS; HILDENBRAND, 2004; FONTIJNE, 2007; HESTENES; SOBCZYCK, 1984; VAZ; ROCHA, 2012; DORST; FONTIJNE; MANN, 2007; LOUNESTO, ; PORTEOUS, 1995; ROCHA; VAZ, 2006; ROCHA; VAZ, 2007).

2.1 Introdução

A álgebra geométrica (GA) surgiu na segunda metade do século XIX, com os trabalhos do matemático e filósofo inglês Willian Kingdon Clifford (1809 - 1879), sob influência direta dos trabalhos de Hamilton³ e Grassmann⁴. Clifford percebeu que a álgebra exterior de Grassmann e os quatérnions de Hamilton poderiam ser descritos em uma mesma álgebra fundamentada em um único produto, denominado *produto geométrico*.

Uma vez que definiremos apenas as álgebras geométricas sobre o corpo dos reais neste texto, todo o desenvolvimento se dará sobre o espaço vetorial $\mathbb{R}^{p,q}$ (ver definição abaixo). Por simplicidade, onde aparecer n neste capítulo, entenda $p + q$.

Definição 2.1.1. (Espaço Quadrático) Seja $\mathbb{R}^{p,q}$ o espaço vetorial $n - dimensional$ sobre o corpo dos reais $\mathbb{R}$. Considere o produto comutativo definido como $*$: $\mathbb{R}^{p,q} \times \mathbb{R}^{p,q} \rightarrow \mathbb{R}$, isto é, para todo $a, b \in \mathbb{R}^{p,q}$,

$$a * b = b * a \in \mathbb{R}.$$

O par $(\mathbb{R}^{p,q}, *)$ significa $\mathbb{R}^{p,q}$ munido da métrica $*$ e é denominado espaço quadrático de assinatura (p, q) .

Definição 2.1.2. (Base Vetorial Canônica) A base canônica de $\mathbb{R}^{p,q}$ é definida pelo conjunto totalmente ordenado, indicado por

$$\beta = \{e_1, \dots, e_p, e_{p+1}, \dots, e_{p+q}\} \subset \mathbb{R}^{p,q},$$

¹ Do Inglês: Geometric Algebras.

² Do Inglês: Conformal Geometric Algebra.

³ Willian Rowan Hamilton (1805 - 1865) foi Físico e Matemático Irlandês.

⁴ Hermann Günther Grassmann (1809 — 1877) foi Físico e Matemático Alemão.

onde todo $\{e_i\}$ satisfaz,

$$e_i * e_j = \begin{cases} +1; & 1 \leq i = j \leq p, \\ -1; & p < i = j \leq p + q, \\ 0; & i \neq j. \end{cases} \quad (2.1)$$

2.1.1 Produto Geométrico

A ideia inicial do produto geométrico foi introduzida por Grassmann, mas foi Clifford quem reconheceu seu enorme potencial e o formalizou para dimensões maiores, motivo pelo qual o produto geométrico também é conhecido como *Produto de Clifford*. Com o produto geométrico, as regras de multiplicação dos quatérnions seguem diretamente de combinações de vetores da base, enquanto que a álgebra de Grassmann é preservada.

Baseado nos números reais, com a propriedade $x^2 = |x|^2$, o produto geométrico estende este conceito para vetores em um espaço linear qualquer, com o corpo dos reais e uma métrica neste espaço⁵.

Definição 2.1.3. (Produto Geométrico) O *produto geométrico*⁶ (ou produto de Clifford) é associativo e quando aplicado a um vetor $a \in \mathbb{R}^{p,q}$ por ele mesmo, é definido por:

$$aa = a * a. \quad (2.2)$$

De modo geral, o produto geométrico é definido para quaisquer dois vetores $a, b \in \mathbb{R}^{p,q}$, por meio de dois novos produtos denominados comutador e anti-comutador.

Definição 2.1.4. (Produto geométrico entre dois vetores) Sejam $a, b \in \mathbb{R}^{p,q}$. O *produto geométrico* entre a e b é definido pela expressão

$$ab = a \vee b + a \wedge b, \quad (2.3)$$

onde $a \vee b$ e $a \wedge b$ são chamadas de partes *comutador* e *anti-comutador* do produto geométrico, respectivamente.

Note que,

$$\begin{aligned} (a + b)(a + b) &= (a + b) * (a + b) \\ \iff aa + ab + ba + bb &= a * a + 2a * b + b * b, \end{aligned}$$

implicando em

$$a * b = \frac{1}{2}(ab + ba).$$

⁵ Vale ressaltar que métricas com assinatura negativa pode produzir um produto negativo.

⁶ O produto geométrico será representado aqui por justaposição de símbolos.

Portanto, segue que o símbolo $(\lrcorner)$ representa o produto interno entre vetores de $\mathbb{R}^{p,q}$, usualmente representado por

$$a \cdot b = \frac{1}{2}(ab + ba). \quad (2.4)$$

Analogamente, segue que

$$a \lrcorner b = \frac{1}{2}(ab - ba)$$

que por sua vez representa o produto exterior usual entre vetores, ou seja,

$$a \wedge b = \frac{1}{2}(ab - ba). \quad (2.5)$$

Dois vetores $a, b \in \mathbb{R}^{p,q}$ são ortogonais entre si, se $a * b = 0$, ou, em termos de produto geométrico, se $a \lrcorner b = 0$. Portanto, todo elemento da base canônica satisfaz a seguinte propriedade:

$$e_i * e_i \neq 0 \quad \text{e} \quad e_i * e_j = 0; \quad \forall i \neq j. \quad (2.6)$$

Como para $i \neq j$,

$$e_i e_j = e_i * e_j + e_i \wedge e_j = e_i \wedge e_j \quad \text{e} \quad e_j e_i = e_j * e_i + e_j \wedge e_i = e_j \wedge e_i$$

e como $a \wedge b = -b \wedge a$, por definição,

$$e_i e_j = -e_j e_i. \quad (2.7)$$

Note que, se considerarmos a associatividade e as Equações (2.6) e (2.7) temos que

$$(e_i e_j)^2 = (e_i e_j)(e_i e_j) = e_i(e_j e_i)e_j = e_i(-e_i e_j)e_j = -1. \quad (2.8)$$

Assim, $e_i e_j$ não satisfaz nem a condição de escalar e nem a condição de vetor em $\mathbb{R}^{p,q}$. Na verdade, como ilustrado na Figura 11, $e_i e_j$ é um fragmento de plano orientado que se difere de $e_j e_i$ apenas pela orientação⁷.

Considere o exemplo particular para o caso $p = 3$ e $q = 0$, isto é, $\mathbb{R}^{3,0} \equiv \mathbb{R}^3$ com a métrica euclidiana usual:

Exemplo 2.1.5. Sejam $a = a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3$ e $b = b_1 e_1 + b_2 e_2 + b_3 e_3$ dois vetores de $\mathbb{R}^3$ escritos na base canônica $\{e_1, e_2, e_3\}$. Considerando a distributividade, tem-se que

$$\begin{aligned} aa &= (a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3)(a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3) \\ &= a_1^2 e_1 e_1 + a_2^2 e_2 e_2 + a_3^2 e_3 e_3 + a_1 a_2 [e_1 e_2 + e_2 e_1] \\ &\quad + a_2 a_3 [e_2 e_3 + e_3 e_2] + a_1 a_3 [e_1 e_3 + e_3 e_1]. \end{aligned}$$

⁷ Por simplicidade, considere a abreviação de $e_i e_j$ por e_{ij} .

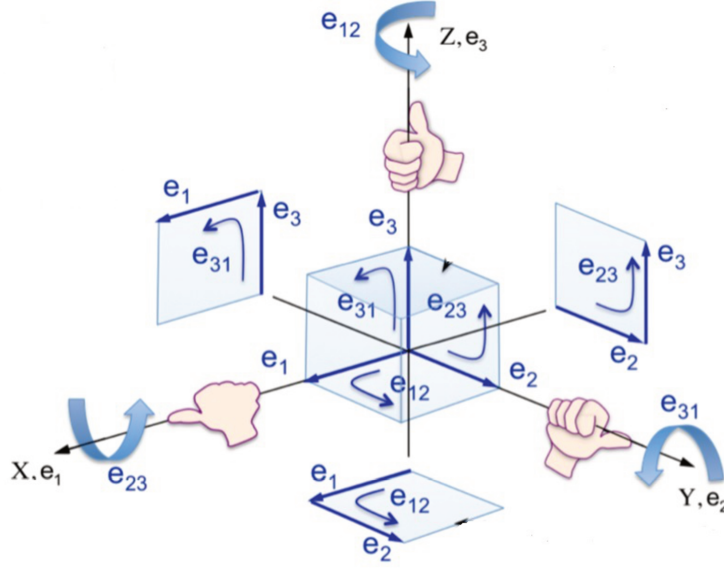


Figura 11 – Fragmento de planos orientados gerados a partir do produto geométrico dos vetores $a, b \in \mathbb{R}^3$ dado no Exemplo 2.1.5, segundo as regras de orientação dadas pela mão direita (SILVA, 2009).

Por outro lado, como $a \cdot a = |a|^2$ (produto interno usual), segue que

$$a \cdot a = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2.$$

Da Definição 2.1.4, vem as relações

$$e_i e_i = 1, \text{ com } i = 1, 2, 3 \quad (2.9)$$

$$e_i e_j + e_j e_i = 0, \quad \forall i \neq j. \quad (2.10)$$

Entretanto, se calcularmos o produto geométrico entre os vetores a e b , considerando as relações dadas nas Equações (2.9) e (2.10), teremos

$$\begin{aligned} ab &= (a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3)(b_1 e_1 + b_2 e_2 + b_3 e_3) \\ &= (a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3) + (a_1 b_2 - a_2 b_1) e_1 e_2 + (a_2 b_3 - a_3 b_2) e_2 e_3 + (a_3 b_1 - a_1 b_3) e_3 e_1 \\ &= a \cdot b + a \wedge b. \end{aligned}$$

Definido a partir da junção dos produtos usuais interno e exterior de vetores, o produto geométrico possui propriedades poderosas, tais como: é um produto invertível e todos os outros produtos lineares e alguns não lineares da álgebra geométrica podem ser descritos em termos dele.

Definição 2.1.6. Para todo vetor $a \in \mathbb{R}^{p,q}$ não nulo, existe um único vetor $b \in \mathbb{R}^{p,q}$ que satisfaz a sentença $ab = 1$. Denotamos b por a^{-1} , definido por,

$$a^{-1} = \frac{a}{||a||^2}. \quad (2.11)$$

As propriedades abaixo seguem diretamente da Definição 2.1.4, para vetores em espaços euclidianos, destacadas em (MACDONALD, October 15, 2012).

Propriedades 2.1.7. Sejam $a, b \in \mathbb{R}^p$. Valem as seguintes propriedades:

$$P_1 : aa = a \wedge a + a \cdot a = a \cdot a;$$

$$P_2 : ab = a \wedge b \Leftrightarrow ab = -ba \Leftrightarrow a \cdot b = 0 \Leftrightarrow a \perp b, \text{ onde } \perp \text{ significa ortogonalidade entre } a \text{ e } b;$$

$$P_3 : ab = a \cdot b \Leftrightarrow ab = ba \Leftrightarrow a \wedge b = 0 \Leftrightarrow a \parallel b, \text{ onde } \parallel \text{ significa paralelismo entre } a \text{ e } b.$$

A interpretação geométrica do produto ab , em espaços euclidianos com a métrica usual, pode ser vista na Figura 12, onde destaca-se que: dado um vetor a e as medidas $a \cdot b$ e $a \wedge b$, o produto interno $a \cdot b$ fixa um valor para o tamanho da projeção de b sobre a e as possíveis extremidades de "chegada" para o vetor b "andam" por cima de uma linha fixa, ortogonal ao vetor a , enquanto que o produto externo $a \wedge b$ fixa uma distância h ortogonal a a . Combinando as duas informações, existe um único vetor b . A unicidade de b nos permite definir a inversão geométrica dos vetores de $\mathbb{R}^n$.

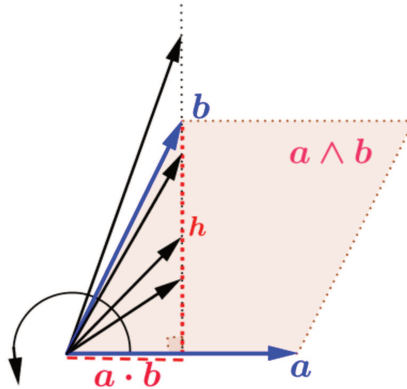


Figura 12 – Os produtos interno e exterior são não invertíveis, mas se combinam para criar um produto invertível.

2.2 k -Vetores e k -Espaços

Assim como os vetores em $\mathbb{R}^p$, que possuem direção, sentido e comprimento, o produto exterior entre dois vetores em $\mathbb{R}^{p,q}$ gera um novo elemento geométrico que possui lugar geométrico bem definido no espaço, uma magnitude que é definida pela "área" deste objeto e uma orientação, definida de acordo com a disposição dos vetores geradores, como ilustra a Figura 13 para o caso particular $p = 3$ e $q = 0$.

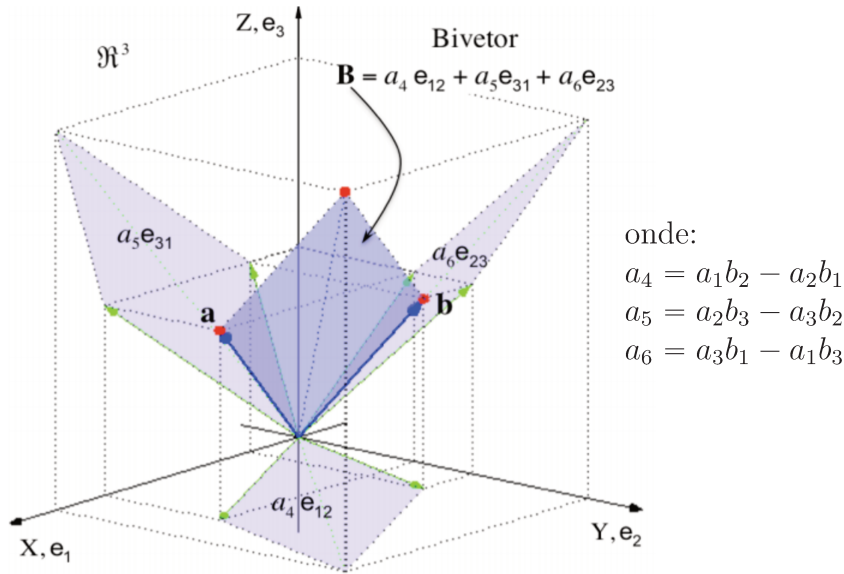


Figura 13 – O produto exterior dos vetores $a, b \in \mathbb{R}^3$ dados no Exemplo 2.1.5 e suas projeções nos planos coordenados. A área é dada de maneira clássica pela norma do produto vetorial entre a e b , denotada aqui por $|a \wedge b|$, a orientação pode ser, tanto o sentido horário $a \wedge b$ ou o sentido anti-horário $b \wedge a$ (SILVA, 2009).

De maneira geral, outros elementos são definidos por meio do produto exterior entre três ou mais vetores, conforme a definição abaixo.

Definição 2.2.1. (k -vetores) Um k – vetor, denotado por A_k , é definido por toda combinação entre produtos exteriores de uma quantidade " k " de vetores do $\mathbb{R}^{p,q}$, descritos pela equação

$$A_k = \sum a_1 \wedge a_2 \wedge \cdots \wedge a_k. \quad (2.12)$$

Por convenção, 0 – vetor é o mesmo que escalar, e segue da definição que 1 – vetor é o mesmo que vetor. É comum usarmos a denominação bivector para um 2 – vetor, trivector para um 3 – vetor, etc.

Se os vetores $a_i \in \mathbb{R}^{p,q}$; $i = 1, 2, \dots, k$, são linearmente independentes, o k – vetor gerado pelo produto exterior sucessivo dos a_i 's é um representante especial de $\mathbb{R}^{p,q}$, definido por:

Definição 2.2.2. (*k-blade*) Um *blade* A de graduação k , denominado por *k-blade*⁸ e denotado por $A_{\langle k \rangle}$, é o produto exterior de “ k ” vetores de $\mathbb{R}^{p,q}$ linearmente independentes, isto é,

$$A_{\langle k \rangle} = \bigwedge_{i=1}^k a_i. \quad (2.13)$$

Dizemos que um *blade* é básico, se os vetores a'_i s são mutuamente ortogonais entre si, assim podemos escrevê-los por

$$A_{\langle k \rangle} = \prod_{i=1}^k a_i. \quad (2.14)$$

Claramente, um k – *blade* é uma combinação linear de *blades* básicos de graduação k . Entretanto, nem toda combinação linear de *blades* básicos de graduação k é um k – *blade*.

Exemplo 2.2.3. Seja A dado pela combinação $A = e_1 e_2 + e_1 e_3$. Segue que A é tanto um bivector quanto um 2 – *blade*, visto que $A = e_1 \wedge (e_2 + e_3)$. Entretanto, $B = e_1 e_2 + e_3 e_4$ é um bivector, mas não é um 2 – *blade*.

Definição 2.2.4. (*k-espaços*) O espaço gerado pelo conjunto dos k – *vetores* é um espaço linear, denominado espaço dos k -vetores e denotado por $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$.

2.2.1 k -Base Vetorial

Definição 2.2.5. (Independência Linear entre *blades*) Sejam $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}^{p,q}$ linearmente independentes. Dois k – *blades* representados por

$$A_{\langle k \rangle}^i = a_{i_1} \wedge a_{i_2} \wedge \dots \wedge a_{i_k} \text{ e } A_{\langle k \rangle}^j = a_{j_1} \wedge a_{j_2} \wedge \dots \wedge a_{j_k}$$

são linearmente independentes se, e somente se, seus termos contêm ao menos um vetor diferente.

Definição 2.2.6. (Base de $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$) Uma base para o espaço linear $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$, com $0 \leq k \leq n$, é obtida combinando todos os possíveis *k-blades linearmente independentes*. Se a base β_i de $\bigwedge^i(\mathbb{R}^{p,q})$ é formada a partir da base canônica de $\mathbb{R}^{p,q}$, a chamamos de *base canônica* de $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$.

⁸ Os termos *k-blade* e objetos geométrico têm o mesmo significado e são ambos utilizados nesse trabalho.

Por exemplo, se considerarmos a base canônica $\beta = \{e_i \in \mathbb{R}^{p,q} / i = 1, \dots, n\}$, o conjunto dos k -blades $A_{\langle k \rangle}^j = \prod_{i=1}^k e_i = e_{j_1} \wedge e_{j_2} \wedge e_{j_3} \wedge \dots \wedge e_{j_k}$ ⁹, onde os k elementos e_{j_i} são tomados k a k em β , estabelece uma base canônica para o espaço linear $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$.

Exemplo 2.2.7. Considere $p = 3, q = 0$ e $\beta = \{e_1, e_2, e_3\}$. As bases $\overline{\beta}_i$ de $\bigwedge^i(\mathbb{R}^3)$; $i = 0, \dots, 3$, são dadas por

- $\overline{\beta}_0 = \{1\}$;
- $\overline{\beta}_1 = \{e_1, e_2, e_3\}$;
- $\overline{\beta}_2 = \{e_{12}, e_{23}, e_{31}\}$;
- $\overline{\beta}_3 = \{e_{123}\}$.

Teorema 2.2.8. O produto exterior de uma quantidade m de vetores do $\mathbb{R}^{p,q}$, (tomando $n = p + q$), se anula sempre que $m > n$, isto é,

$$x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_m = 0; \quad \forall m > n$$

Demonstração. Considere o produto exterior de $n + 1$ vetores $x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_n \wedge x_{n+1}$ em $\mathbb{R}^{p,q}$. Como $n = \dim(\mathbb{R}^{p,q})$, necessariamente o conjunto $\{x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}\}$ é linearmente dependente, ou seja, ao menos um vetor no conjunto pode ser escrito como combinação linear dos outros vetores. Sem perda de generalidade considere $x_{n+1} = \sum_{j=1}^n a_j x_j$. Então,

$$x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_n \wedge x_{n+1} = x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_n \wedge (a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n). \quad (2.15)$$

Desenvolvendo a Equação (2.15), temos que

$$\begin{aligned} x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_n \wedge x_{n+1} &= (-1)^{n-1} a_1 (x_1 \wedge x_1) \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_n \\ &\quad + (-1)^{n-2} a_2 x_1 \wedge (x_2 \wedge x_2) \wedge \dots \wedge x_n \\ &\quad + \dots + a_n x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge (x_n \wedge x_n) \\ &= 0. \end{aligned}$$

□

Portanto, uma fórmula para calcular a dimensão do espaço $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$ é obtida combinando k a k todas as possíveis formações de *blades* com os n vetores da base de $\mathbb{R}^{p,q}$, ou seja,

⁹ A ordem dos vetores usados para construir os elementos da base é uma questão de convenção, mas converter depende apenas da aplicação das propriedades do produto exterior.

Fórmula 2.2.9.

$$\dim \bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q}) = \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

Todo k -vetor $A_k \in \bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$ é escrito como combinação de k -blades, isto é,

$$A_k = \sum_{i=1}^{\binom{n}{k}} a_i A_{\langle k \rangle}^i; \text{ com } a_i \in \mathbb{R}. \quad (2.16)$$

Exemplo 2.2.10. Considere $p = 3, q = 0$ e $\beta = \{e_1, e_2, e_3\}$ uma base para $\mathbb{R}^3$. Então $A_2 = a_1 A_{\langle 2 \rangle}^1 + a_2 A_{\langle 2 \rangle}^2 + a_3 A_{\langle 2 \rangle}^3$, onde $A_{\langle 2 \rangle}^1 = e_{12}$, $A_{\langle 2 \rangle}^2 = e_{31}$ e $A_{\langle 2 \rangle}^3 = e_{23}$, como podemos observar na Figura 13, na decomposição do bivector $\mathbf{B}$.

2.3 Espaço Multivetorial

Definição 2.3.1. (Espaço Multivetorial) Os espaços lineares $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$, para $0 \leq k \leq n = p + q$, não possuem interseção. Assim, se considerarmos a soma direta entre eles, teremos um novo espaço linear nomeado por *Espaço Multivetorial*, denotado por $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, formalmente indicado por

$$\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q}) = \wedge^0(\mathbb{R}^{p,q}) \oplus \wedge^1(\mathbb{R}^{p,q}) \oplus \wedge^2(\mathbb{R}^{p,q}) \oplus \cdots \oplus \wedge^n(\mathbb{R}^{p,q}), \quad (2.17)$$

onde $\bigwedge^0(\mathbb{R}^{p,q}) \equiv \mathbb{R}$ e $\bigwedge^1(\mathbb{R}^{p,q}) \equiv \mathbb{R}^{p,q}$. Seus elementos, representados na Tabela 1, são chamados de *multivetores*, descritos pela equação:

$$A = \sum_{j=0}^n A_j, \quad (2.18)$$

onde $A_j \in \bigwedge^j(\mathbb{R}^{p,q})$.

2.3.1 Base Multivetorial

Definição 2.3.2. (Base) Uma base de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$ é definida por $\overline{\beta} = \bigcup_{i=0}^n \overline{\beta}_i$ e sua dimensão é o somatório de todas as combinações obtidas pela Fórmula 2.2.9, definida por,

Fórmula 2.3.3.

$$\dim \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q}) = \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} = 2^n.$$

Definição 2.3.4. (Pseudo-escalar) O elemento da base β_i de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, de graduação correspondente a do espaço gerador $\mathbb{R}^{p,q}$, quando existe é chamado de pseudo-escalar. Se β_i é a base canônica, então o pseudo-escalar é denotado por I e escrito como

$$I = e_1 \wedge \cdots \wedge e_n, \text{ com } n = p + q.$$

Tabela 1 – Classificação dos subespaços de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$.

Dimensão	Espaço Linear	Elementos
$\binom{n}{0}$	$\bigwedge^0(\mathbb{R}^{p,q})$	0-vetores (ou escalares)
$\binom{n}{1}$	$\bigwedge^1(\mathbb{R}^{p,q})$	1-vetores (ou vetores)
$\binom{n}{2}$	$\bigwedge^2(\mathbb{R}^{p,q})$	2-vetores
$\binom{n}{3}$	$\bigwedge^3(\mathbb{R}^{p,q})$	3-vetores
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\binom{n}{n-1}$	$\bigwedge^{n-1}(\mathbb{R}^{p,q})$	(n-1)-vetores (ou pseudo-vetores)
$\binom{n}{n}$	$\bigwedge^n(\mathbb{R}^{p,q})$	n-vetores (ou pseudo-escalares)

Fonte: (PERWASS, 2009).

Exemplo 2.3.5. Considere o espaço multivetorial $\bigwedge(\mathbb{R}^3) = \bigwedge^0(\mathbb{R}^3) \oplus \bigwedge^1(\mathbb{R}^3) \oplus \bigwedge^2(\mathbb{R}^3) \oplus \bigwedge^3(\mathbb{R}^3)$. Logo, uma base deve conter 8 elementos. Seja $\bar{\beta} = \{E_1, E_2, \dots, E_8\}$ uma base para $\bigwedge(\mathbb{R}^3)$, onde E_i representa o i – ésimo elemento. Então, todo $A \in \bigwedge(\mathbb{R}^3)$, pode ser escrito como $A = \sum_{i=1}^8 a_i E_i$, com $a_i \in \mathbb{R}$, ou ainda, se considerarmos a base canônica para $\mathbb{R}^3$, devemos ter

$$A = a_1 1 + a_2 e_1 + a_3 e_2 + a_4 e_3 + a_5 e_{23} + a_6 e_{31} + a_7 e_{12} + a_8 I,$$

como representados nas Tabelas 2 e 3 abaixo.

Definição 2.3.6. (Projeção de Grau) Seja $E_i \in \bar{\beta}$, o i – ésimo elemento em uma base $\bar{\beta}$ de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$. Então, a projeção de grau para E_i sobre a graduação k é escrita por $\langle E_i \rangle_k$, definida por

$$\langle E_i \rangle_k = \begin{cases} E_i, & gr(E_i) = k; \\ 0, & gr(E_i) \neq k. \end{cases} \quad (2.19)$$

Tabela 2 – Classificação dos subespaços de $\bigwedge(\mathbb{R}^3)$.

Dimensão	Espaço Linear	Elementos
1	$\bigwedge^0(\mathbb{R}^3)$	0-vetores (ou escalares)
3	$\bigwedge^1(\mathbb{R}^3)$	1-vetores (ou vetores)
3	$\bigwedge^2(\mathbb{R}^3)$	2-vetores (ou pseudo-vetores)
1	$\bigwedge^3(\mathbb{R}^3)$	3-vetores (ou pseudo-escalares)

Fonte: (PERWASS, 2009).

Tabela 3 – Elementos básicos canônicos de $\bigwedge(\mathbb{R}^3)$.

Sigla de Posicionamento	<i>blade</i>	Graduação (<i>gr</i>)	Abreviação
E_1	1	0	1
E_2	e_1	1	e_1
E_3	e_2	1	e_2
E_4	e_3	1	e_3
E_5	e_2e_3	2	e_{23}
E_6	e_3e_1	2	e_{31}
E_7	e_1e_2	2	e_{12}
E_8	$e_1e_2e_3$	3	I

Fonte: (PERWASS, 2009).

O operador projeção de grau é distributivo, ou seja, dado $A = \sum_{i=1}^{2^n} a_i E_i \in \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, segue que

$$\langle A \rangle_k = \sum_{i=1}^{2^n} a_i \langle E_i \rangle_k. \quad (2.20)$$

2.3.2 Produtos Generalizados em $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$

Para realizar comparações entre subespaços do espaço multivetorial $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, faz-se necessário a generalização dos conceitos dos produtos geométrico, exterior e escalar. Além disso, definiremos uma generalização do produto interno, que possibilita fazer relações entre *blades* de graduações distintas, e assim, subespaços de diferentes dimensões.

Definição 2.3.7. (Produto Geométrico Generalizado) Dados dois *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \bigwedge \mathbb{R}^{p,q}$, com graduações k e l , respectivamente, o produto geométrico entre eles é dado

pela equação

$$A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} = \sum_{r=0}^n \langle A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} \rangle_r. \quad (2.21)$$

A fórmula geral para o cálculo do *produto geométrico* entre dois *blades* quaisquer é definida neste trabalho segundo Hestenes¹⁰. Sua demonstração se dá por indução finita e uma ideia de como proceder pode ser encontrada em (ZENI, 1992).

$A_{\langle k \rangle}$ e $B_{\langle l \rangle}$ são combinações lineares de *blades* básicos de graduação k e l , respectivamente. Se dois *blades* básicos $E_{\langle k \rangle}, E_{\langle l \rangle}$, na base de $\bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, possuem m vetores básicos em comum, então

$$E_{\langle k \rangle} E_{\langle l \rangle} = \langle E_{\langle k \rangle} E_{\langle l \rangle} \rangle_{k+l-2m}. \quad (2.22)$$

Por exemplo,

$$(e_2 e_3)(e_3 e_1) = e_2(e_3 e_3)e_1 = e_2 e_1 = -e_1 e_2.$$

Fórmula 2.3.8. Dados os *blades* $a_{\langle 1 \rangle}$ e $B_{\langle l \rangle}$ de dimensões 1 e l , respectivamente, o produto geométrico entre eles é dado por:

$$a_{\langle 1 \rangle} B_{\langle l \rangle} = a_{\langle 1 \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} + a_{\langle 1 \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}. \quad (2.23)$$

Uma generalização para quaisquer *blades* também é feita para as partes simétrica (comutador) e anti-simétrica (anti-comutador) do produto geométrico, por meio da relação entre os multivetores resultantes, estabelecida pela fórmula :

Fórmula 2.3.9. (Relação entre AB e BA) Dados os *blades* $A_{\langle k \rangle}$ e $B_{\langle l \rangle}$ com dimensões k e l respectivamente, o produto geométrico entre eles se relacionam pela expressão

$$B_{\langle l \rangle} A_{\langle k \rangle} = \sum_{j=0}^{\min\{k,l\}} (-1)^\delta \langle A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} \rangle_\gamma, \quad (2.24)$$

onde $\delta = \frac{k(k-1) + l(l-1) + \gamma(\gamma-1)}{2}$, com $\gamma = |k-l| + 2j$.

Assim, as partes simétrica e anti-simétrica ficam definidas no espaço multivetorial $\bigwedge \mathbb{R}^{p,q}$ pelas equações:

$$A \vee B = \frac{1}{2}(AB + BA) \text{ e } A \wedge B = \frac{1}{2}(AB - BA), \quad (2.25)$$

para quaisquer multivetores A e B . O produto geométrico na sua forma geral satisfaz as seguintes propriedades.

¹⁰ David Orlin Hestenes (Maio, 1933) é Físico Americano.

Propriedades 2.3.10. O produto geométrico é associativo e distributivo, mas em geral não é comutativo, ou seja, dados multivetores $A, B, C \in \bigwedge \mathbb{R}^{p,q}$, tem-se:

$$P_1 : (AB)C = A(BC);$$

$$P_2 : A(B + C) = AB + AC \text{ e } (B + C)A = BA + CA;$$

$$P_3 : AB \neq BA, \text{ em geral.}$$

Exemplo 2.3.11. Sejam $A, B \in \wedge^2 \mathbb{R}^{p,q} \subset \bigwedge \mathbb{R}^{p,q}$, com $q = 0$ e $p \geq 4$, dois bivectores dados por $A_2 = e_{12} + e_{23}$ e $B_2 = e_{34} + e_{12}$. Então,

$$\begin{aligned} AB &= (e_{12} + e_{23})(e_{34} + e_{12}) \\ &= e_{1234} - 1 + e_{24} + e_{31} \\ &= -1 + e_{24} + e_{31} + e_{1234} \\ &= \langle AB \rangle_0 + \langle AB \rangle_2 + \langle AB \rangle_4. \end{aligned}$$

Assim, pela Equação 2.24, segue que

$$\begin{aligned} BA &= \langle AB \rangle_0 - \langle AB \rangle_2 + \langle AB \rangle_4 \\ &= -1 - (e_{24} + e_{31}) + e_{1234}. \end{aligned}$$

Logo, $AB \neq BA$. Pelas Equações (2.25), segue que

$$A \vee B = \langle C \rangle_0 + \langle C \rangle_4 = -1 + e_{1234} \text{ e } A \wedge B = \langle C \rangle_2 = e_{24} + e_{31}.$$

Note que, entre os multivetores resultantes de dimensões 0 e 4 (parte simétrica), existe um multivetor de dimensão 2 (parte anti-simétrica). De forma geral, tem-se o aparecimento de multivetores de dimensões intermediárias à $|k - l|$ e $k + l$, característico do produto geométrico dado na Definição 2.3.7.

Definição 2.3.12. (Produto Exterior Generalizado) Dados os *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, com $0 \leq k + l \leq n = p + q$, o produto exterior entre eles é definido por

$$A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle} = \langle A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} \rangle_{k+l}. \quad (2.26)$$

A generalização do produto interno no espaço multivetorial permite estabelecer relações entre subespaços de dimensões distintas, eliminando a parte em comum entre os subespaços.

Definição 2.3.13. (Produto Interno Generalizado) Sejam os *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$. O produto interno entre eles é dado por

$$A_{\langle k \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} = \langle A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} \rangle_{|k-l|}. \quad (2.27)$$

Portanto, o produto interno generalizado sempre reduz a graduação do *blade* resultante. A principal diferença entre o produto interno generalizado e o produto exterior generalizado é que o produto interno não é associativo.

Propriedade 2.3.14. Sejam $\alpha_{\langle 0 \rangle}, a_{\langle 1 \rangle}, A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle}, C_{\langle m \rangle} \in \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, com suas respectivas dimensões. Então, valem as seguintes propriedades:

$$P_1 : a_{\langle 1 \rangle} \cdot A_{\langle k \rangle} = \frac{1}{2}(a_{\langle 1 \rangle} A_{\langle k \rangle} - (-1)^k A_{\langle k \rangle} a_{\langle 1 \rangle});$$

$$P_2 : A_{\langle k \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} = (-1)^{k(l+1)} B_{\langle l \rangle} \cdot A_{\langle k \rangle};$$

$$P_3 : (A_{\langle k \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle}) \cdot C_{\langle m \rangle} = A_{\langle k \rangle} \cdot (B_{\langle l \rangle} \cdot C_{\langle m \rangle}), \text{ com } 1 \leq k, l, m \leq n \text{ e } l \geq k + m;$$

$$P_4 : a_{\langle 1 \rangle} \cdot (A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}) = (a_{\langle 1 \rangle} \cdot A_{\langle k \rangle}) \wedge B_{\langle l \rangle} + (-1)^k A_{\langle k \rangle} \wedge (a_{\langle 1 \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle});$$

$$P_5 : (A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}) \cdot C_{\langle m \rangle} = A_{\langle k \rangle} \cdot (B_{\langle l \rangle} \cdot C_{\langle m \rangle}) \text{ com } 1 \leq k, l, m \leq n \text{ e } m \geq k + l.$$

Fórmula 2.3.15. Dados os *blades* $A_{\langle 1 \rangle}$ e $B_{\langle l \rangle}$ com dimensões 1 e l , respectivamente, o produto interno entre eles é dado por

$$A_{\langle 1 \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} = a_{\langle 1 \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} = \sum_{i=1}^l (-1)^{i+1} (a_1 \cdot b_i) [B_{\langle l \rangle} \setminus b_i], \quad (2.28)$$

onde $[B_{\langle l \rangle} \setminus b_i]$ denota o *blade* $B_{\langle l \rangle}$ menos o termo b_i . Para um $k \in \mathbb{N}^+$ qualquer, tem-se:

$$A_{\langle k \rangle} \cdot B_{\langle l \rangle} = (a_1 \cdot (a_2 \cdot (\cdots (a_k \cdot B_{\langle l \rangle}))))). \quad (2.29)$$

A interpretação geométrica da Definição 2.3.13 é: remover de $B_{\langle l \rangle}$, a parte "em comum" com $A_{\langle k \rangle}$. Como podemos observar no exemplo abaixo:

Exemplo 2.3.16. Sejam $A, B \in \mathcal{C}l_{p,q}$, onde $A = e_1 + e_3$ é uma combinação de *blades* de graduação um e $B = e_1 \wedge e_2$ é um *blade* de graduação dois, ilustrado na Figura 14. Temos que

$$\begin{aligned} A \cdot B &= (e_1 + e_3) \cdot (e_1 \wedge e_2) \\ &= e_1 \cdot (e_1 \wedge e_2) + e_3 \cdot (e_1 \wedge e_2) \\ &= (e_1 \cdot e_1)e_2 - (e_1 \cdot e_2)e_1 + (e_3 \cdot e_1)e_2 - (e_3 \cdot e_2)e_1 \\ &= e_2. \end{aligned}$$

Segue da Definição 2.3.12 que

$$A \wedge B = \langle AB \rangle_3 = e_{123},$$

visto que

$$\begin{aligned}
 AB &= (e_1 + e_3)(e_1 \wedge e_2) \\
 &= (e_1 + e_3)(e_1 e_2) \\
 &= e_1(e_1 e_2) + e_3(e_1 e_2) \\
 &= e_2 + e_{123}.
 \end{aligned}$$

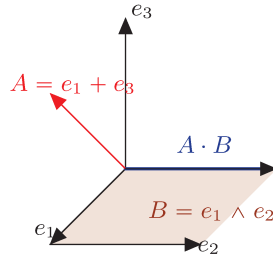


Figura 14 – Exemplo de produto interno generalizado. Note que o vetor $A \cdot B$ é ortogonal ao vetor A .

Definição 2.3.17. (Blade Nulo) Um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q})$ é chamado de *blade-nulo* se

$$A_{\langle k \rangle} \cdot A_{\langle k \rangle} = 0.$$

Definição 2.3.18. (Produto Escalar Generalizado) Dados os *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \bigwedge(\mathbb{R}^{p,q})$, o produto escalar entre eles é definido por

$$A_{\langle k \rangle} * B_{\langle l \rangle} = \langle A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle} \rangle_0. \quad (2.30)$$

Se $k = l \neq 0$, o produto escalar é igual ao produto interno generalizado, e se $k \neq l$, então $A_{\langle k \rangle} * B_{\langle l \rangle} = 0$. Segue da P_2 , nas Propriedades 2.3.14, que para $k = l$, temos que

$$A_{\langle k \rangle} * B_{\langle k \rangle} = (-1)^{k(k+1)} B_{\langle k \rangle} * A_{\langle k \rangle} = B_{\langle k \rangle} * A_{\langle k \rangle}, \quad (2.31)$$

visto que $k(k+1)$ é sempre par.

2.4 Axiomática da Álgebra Geométrica

Definição 2.4.1. Uma *álgebra* $\mathcal{A}^{11}$ sobre um corpo $\mathbb{K}$ é um espaço vetorial sobre $\mathbb{K}$ munido de um produto $\star : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{A}$, $(a, b) \mapsto a \star b$, que é bilinear¹² para todo $a, b \in \mathcal{A}$.

¹¹ $\mathcal{A}$ é dita comutativa (ou abeliana) se: $a \star b = b \star a$ e é dita associativa se: $(a \star b) \star c = a \star (b \star c)$.

¹² Linear em ambas as entradas.

Definição 2.4.2. (Álgebra Geométrica) A *Álgebra Geométrica*, denotada por $\mathcal{Cl}_{p,q}$, é uma álgebra associativa, definida sobre o espaço quadrático $(\mathbb{R}^{p,q}, *)$, descrita pelo espaço multivetorial $\bigwedge \mathbb{R}^{p,q}$ e munida do produto geométrico. Denotamos os espaços lineares $\bigwedge^k \mathbb{R}^{p,q}$ por $\mathcal{Cl}_{p,q}^k$, com $k = 0, 1, \dots, p+q$ e $\mathcal{Cl}_{p,q}$ por,

$$\mathcal{Cl}_{p,q} = \mathcal{Cl}_{p,q}^0 \oplus \mathcal{Cl}_{p,q}^1 \oplus \mathcal{Cl}_{p,q}^2 \oplus \dots \oplus \mathcal{Cl}_{p,q}^n, \quad (2.32)$$

onde $n = p+q$. Seus elementos são multivetores descritos pela expressão

$$A = \langle A \rangle_0 + \langle A \rangle_1 + \langle A \rangle_2 + \dots + \langle A \rangle_n, \text{ onde } \langle A \rangle_k \in \mathcal{Cl}_{p,q}^k. \quad (2.33)$$

$\mathcal{Cl}_{p,q}$ satisfaz os seguintes axiomas:

Axioma 2.4.3. O corpo de escalares $\mathbb{R}$ é um subespaço de $\mathcal{Cl}_{p,q}$, denominado espaço dos multivetores de graduação zero, ou 0-vetores ($\mathcal{Cl}_{p,q}^0 \equiv \mathbb{R}$);

Axioma 2.4.4. O Espaço vetorial $\mathbb{R}^{p,q}$ é um subespaço de $\mathcal{Cl}_{p,q}$, chamado espaço vetorial dos multivetores de graduação 1 ou 1-vetores ($\mathcal{Cl}_{p,q}^1 \equiv \mathbb{R}^{p,q}$);

Axioma 2.4.5. Os demais multivetores resultam do produto geométrico entre 1-vetores;

Axioma 2.4.6. $\mathcal{Cl}_{p,q}$ é fechado para as operações de adição de multivetores e de multiplicação por escalar, isto é, para todos $A, B \in \mathcal{Cl}_{p,q}$ e $\alpha \in \mathbb{R}$, $A + B \in \mathcal{Cl}_{p,q}$ e $\alpha A \in \mathcal{Cl}_{p,q}$;

Axioma 2.4.7. A adição em $\mathcal{Cl}_{p,q}$ é comutativa e associativa, ou seja, dados $A, B, C \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, vale:

$$A + B = B + A \text{ e } (A + B) + C = A + (B + C);$$

Axioma 2.4.8. Existe um único multivetor em $\mathcal{Cl}_{p,q}$, denominado nulo e denotado por 0, tal que,

$$A + 0 = A, \quad \forall A \in \mathcal{Cl}_{p,q};$$

Axioma 2.4.9. Para todo multivetor $A \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, existe um multivetor denotado por $-A \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, denominado inverso aditivo, tal que,

$$A + (-A) = 0;$$

Axioma 2.4.10. A multiplicação por escalar em $\mathcal{Cl}_{p,q}$ é comutativa e associativa, ou seja, dados $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ e $A \in \mathcal{Cl}_{p,q}$ vale:

$$\alpha A = A\alpha \text{ e } \alpha(\beta A) = (\alpha\beta)A;$$

Axioma 2.4.11. Existe um único multivetor em $\mathcal{Cl}_{p,q}$, denominado neutro escalar e denotado por $1 \in \mathbb{R}$, tal que,

$$1A = A1 = A, \quad \forall A \in \mathcal{Cl}_{p,q};$$

Axioma 2.4.12. A multiplicação por escalar satisfaz a distributividade em relação à adição em $\mathcal{C}l_{p,q}$, ou seja,

$$\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B \text{ e } (\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A, \quad \forall A, B, \alpha, \beta \in \mathcal{C}l_{p,q};$$

Axioma 2.4.13. O produto geométrico é associativo em $\mathcal{C}l_{p,q}$, ou seja,

$$(AB)C = A(BC), \quad \forall A, B, C \in \mathcal{C}l_{p,q};$$

Axioma 2.4.14. O produto geométrico satisfaz a distributividade em relação à adição em $\mathcal{C}l_{p,q}$, ou seja,

$$A(B + C) = AB + AC \text{ e } (A + B)C = AC + BC, \quad \forall A, B, C \in \mathcal{C}l_{p,q};$$

Axioma 2.4.15. ¹³ Para todo $a \in \mathbb{R}^{p,q}$, o produto geométrico aa é denominado *magnitude* de a e satisfaz a seguinte relação:

$$aa = a \cdot a \in \mathbb{R}.$$

2.4.1 Objetos Geométricos em AG

A ideia de se construir outros espaços, como $\bigwedge^k(\mathbb{R}^{p,q}) \equiv \mathcal{C}l_{p,q}^k$, a partir dos vetores de $\mathbb{R}^{p,q}$ tem um fundamento geométrico associado a objetos geométricos de natureza distinta no espaço multivetorial. Com a propriedade de inversão do produto geométrico, permite-se estabelecer relações entre esses espaços com significados geométricos bem definidos. Com isso, transformações rígidas entre estes espaços se apresentam de maneira natural por meio do produto geométrico.

De maneira geral, existem duas formas de caracterizar objetos geométricos em AG: uma via espaço nulo do produto interno (IPNS¹⁴) e outra via espaço nulo do produto exterior (OPNS¹⁵).

Definição 2.4.16. (Espaço Nulo do Produto Exterior-OPNS) O espaço nulo do produto exterior de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{C}l_{p,q}^k \subset \mathcal{C}l_{p,q}$, denotado por $\mathcal{N}\mathbb{E}(A_{\langle k \rangle})$, é definido por

$$\mathcal{N}\mathbb{E}(A_{\langle k \rangle}) = \{X \in \mathcal{C}l_{p,q}^1 / X \wedge A_{\langle k \rangle} = 0\}. \quad (2.34)$$

O conjunto acima significa que o objeto geométrico denotado por $A_{\langle k \rangle}$ fica totalmente determinado pelo espaço nulo do produto exterior generalizado.

¹³ O Axioma 2.4.15, em geral, não vale para um multivetor qualquer.

¹⁴ Do Inglês: Inner-Product Null Space

¹⁵ Do Inglês: Outer-Product Null Space

Definição 2.4.17. (Espaço Nulo do Produto Interno-IPNS). O espaço nulo do produto interno de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}^k \subset \mathcal{Cl}_{p,q}$, denotado por $\mathcal{NI}(A_{\langle k \rangle})$, é definido por,

$$\mathcal{NI}(A_{\langle k \rangle}) = \{X \in \mathcal{Cl}_{p,q}^1 / X \cdot A_{\langle k \rangle} = 0\}. \quad (2.35)$$

Analogamente à definição acima, o objeto geométrico representado por $A_{\langle k \rangle}$ fica totalmente determinado pelo espaço nulo do produto interior generalizado.

A principal diferença entre as definições acima é que IPNS depende da métrica do espaço representativo, enquanto que OPNS depende apenas das propriedades algébricas do objeto geométrico.

2.4.2 Operadores Geométricos em $\mathcal{Cl}_{p,q}$

Definição 2.4.18. (Involução) Uma *involução* de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, denotada por $\hat{A}$, é definida pelo operador $\hat{\cdot} : \mathcal{Cl}_{p,q} \rightarrow \mathcal{Cl}_{p,q}$, dada por

$$\hat{A}_{\langle k \rangle} = (-1)^k A_{\langle k \rangle}. \quad (2.36)$$

A graduação (ou dimensão) de $\hat{A}_{\langle k \rangle}$ é par se $(-1)^k = +1$ e ímpar se $(-1)^k = -1$.

Definição 2.4.19. (Reversão) Uma *reversão* de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}^k$, denotada por $\tilde{A}_{\langle k \rangle}$, é definida pelo operador $\sim : \mathcal{Cl}_{p,q} \rightarrow \mathcal{Cl}_{p,q}$, dada por

$$\tilde{A}_{\langle k \rangle} = (-1)^{k(k-1)/2} A_{\langle k \rangle}. \quad (2.37)$$

Portanto, dados dois *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, tem-se,

$$(\widetilde{A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}}) = \tilde{B}_{\langle l \rangle} \wedge \tilde{A}_{\langle k \rangle} \quad \text{e} \quad (\widetilde{A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle}}) = \tilde{B}_{\langle l \rangle} \tilde{A}_{\langle k \rangle}. \quad (2.38)$$

Definição 2.4.20. (Conjugação) A *conjugação* de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, denotada por $\overline{A}$, é definida pelo operador $- : \mathcal{Cl}_{p,q} \rightarrow \mathcal{Cl}_{p,q}$ como uma "*Involução + Reversão*", ou seja,

$$\overline{A_{\langle k \rangle}} = \widetilde{\hat{A}_{\langle k \rangle}}. \quad (2.39)$$

Portanto, dados dois *blades* $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, tem-se,

$$\overline{(A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle})} = \overline{B_{\langle l \rangle}} \wedge \overline{A_{\langle k \rangle}} \quad \text{e} \quad \overline{(A_{\langle k \rangle} B_{\langle l \rangle})} = \overline{B_{\langle l \rangle}} \overline{A_{\langle k \rangle}}. \quad (2.40)$$

Definição 2.4.21. (Magnitude) A magnitude¹⁶ de um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$ é dada por:

$$||A_{\langle k \rangle}|| = \sqrt{|A_{\langle k \rangle} * \tilde{A}_{\langle k \rangle}|}. \quad (2.41)$$

Considere o n – *blade* $A_{\langle n \rangle}$ de maior dimensão, isto é, $n = p + q$. Tal *blade* é sempre proporcional ao pseudoescalar e sempre pode ser escrito em termos dos 1-vetores básicos e_i , isto é,

$$A_{\langle n \rangle} = \alpha \prod_{i=1}^n e_i = \alpha I; \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Portanto, $A_{\langle n \rangle}$ não pode ser nulo. Além disso, se $A_{\langle n \rangle} \in \mathcal{Cl}_n$, isto é, $p = n, q = 0$, para um *blade* na álgebra geométrica euclidiana, vale $I\tilde{I} > 0$ e, assim, $A_{\langle n \rangle}\tilde{A}_{\langle n \rangle} > 0$. Claramente, todo *blade* pode ser escrito pelo produto geométrico de um conjunto ortogonal de vetores. Suponha que $\{a_i\} \subset \mathcal{Cl}_n^1$ denota o conjunto ortogonal de vetores tal que, $A_{\langle n \rangle} = \prod_{i=1}^n a_i$. Temos, então,

$$||A_{\langle n \rangle}|| = \prod_{i=1}^n ||a_i||.$$

Se $\{a_i\}$ é escrito como linhas de uma matriz quadrada G , o determinante desta matriz ortogonal também é dado pelo produto das magnitudes dos vetores de linhas, isto é,

$$A_{\langle n \rangle} = \det(G)I.$$

Definição 2.4.22. (Inversão) Seja $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$ um *blade* não nulo, então seu *inverso geométrico* é dado por

$$A_{\langle k \rangle}^{-1} = \frac{\tilde{A}_{\langle k \rangle}}{A_{\langle k \rangle}\tilde{A}_{\langle k \rangle}}, \quad (2.42)$$

quando $||A_{\langle k \rangle}|| = 0$, dizemos que o *blade* não possui *inverso*.

Pela a teoria de contagem¹⁷, segue que o número de elementos na base dos subespaços $\bigwedge^k \mathbb{R}^n$ e $\bigwedge^{n-k} \mathbb{R}^n$ são iguais. Consequentemente, existe uma relação biunívoca entre os elementos de $\mathcal{Cl}_n^k$ e $\mathcal{Cl}_n^{n-k}$ em $\mathcal{Cl}_n$, definida por

Definição 2.4.23. (Dualidade) Dado um *blade* $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{Cl}_{p,q}$, seu dual é definido pela aplicação $\star : \mathcal{Cl}_n^k \rightarrow \mathcal{Cl}_n^{n-k}$, naturalmente definida por meio do produto geométrico,

$$A_{\langle k \rangle}^\star = A_{\langle k \rangle} I_{\langle n \rangle}^{-1}, \quad (2.43)$$

¹⁶ A magnitude de um *blade* pode ser zero em alguns espaços representativos da álgebra geométrica, por exemplo o espaço conforme.

¹⁷ $\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}$.

onde $I_{\langle n \rangle}^{-1}$ representa o inverso do pseudoescalar. A operação de dualidade sobre *blade* fica mais clara com a relação entre as representações OPNS e IPNS de um *blade*. Sejam $x \in \mathcal{C}l_{p,q}$ e $A_{\langle k \rangle} \in \mathcal{C}l_{p,q}$ não nulos, com $k \geq 1$. Então,

$$(x \wedge A_{\langle k \rangle})^* = (x \wedge A_{\langle k \rangle}) \cdot I^{-1} = x \cdot A_{\langle k \rangle}^*.$$

Como

$$x \wedge A_{\langle k \rangle} = 0 \iff x \cdot A_{\langle k \rangle}^* = 0,$$

segue que

$$\mathcal{N}\mathbb{E}(A_{\langle k \rangle}) = \mathcal{N}\mathbb{I}(A_{\langle k \rangle}^*).$$

Portanto, as representações IPNS e OPNS estão diretamente relacionadas pela operação dual.

Exemplo 2.4.24. Considere os elementos da base canônica de $\mathbb{R}^3$. A Tabela 4 apresenta os duais dos subespaços canônicos da álgebra geométrica $\mathcal{C}l_3$.

Tabela 4 – Dualidade em $\mathcal{C}l_3$

Subespaços	Subespaços Duais
1	$1^* = I_{\langle 3 \rangle}$
e_1	$e_1^* = e_2 e_3$
e_2	$e_2^* = e_3 e_1$
e_3	$e_3^* = e_1 e_2$
$e_3 e_1$	$(e_3 e_1)^* = e_2$
$e_2 e_3$	$(e_2 e_3)^* = e_1$
$e_1 e_2$	$(e_1 e_2)^* = e_3$
$I_{\langle 3 \rangle}$	$I_{\langle 3 \rangle}^* = 1$

Fonte: (PERWASS, 2009).

2.4.3 interseção e União de Objetos Geométricos

A interseção e união de entidades geométricas em AG é definida por duas operações denominadas *Meet* e *Join*, respectivamente (DORST; FONTIJNE; MANN, 2007).

Definição 2.4.25. (Soma Direta) Sejam $A, B \subset \mathbb{R}^{p,q}$, então sua soma direta é definida por,

$$A \oplus B = \{a + b : a \in A, b \in B\}.$$

Com esta definição em mente, segue que, para $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \mathcal{C}l_{p,q}$, com $A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle} \neq 0$, temos

$$\mathcal{N}\mathbb{E}(A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}) = \mathcal{N}\mathbb{E}(A_{\langle k \rangle}) \oplus \mathcal{N}\mathbb{E}(B_{\langle l \rangle}). \quad (2.44)$$

Definição 2.4.26. (*Meet*) Sejam $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \mathcal{C}l_{p,q}$, sua interseção (*meet*) é definida como um *blade* $M_{\langle s \rangle}$ tal que,

$$\mathcal{NE}(M_{\langle s \rangle}) = \mathcal{NE}(A_{\langle k \rangle}) \cap \mathcal{NE}(B_{\langle l \rangle}).$$

O *meet* está definido aqui em um contexto geral. Entretanto, no modelo conforme ele é usado na construção de elementos que são interseções de outros elementos, como veremos na próxima seção. Uma vez que os elementos básicos, como pontos, esferas e planos são representados via IPNS como vetores, é mais fácil de estudar o *meet* na sua forma dual, descrita por

$$(A \cap B)^* = B^* \wedge A^*, \quad (2.45)$$

onde A e B são *Blades* com representação via OPNS. O princípio fundamental do *meet* é que ele constrói o maior *subblade* comum entre os *blades* A e B (DORST; FONTIJNE; MANN, 2007).

Definição 2.4.27. (*Join*) Sejam $A_{\langle k \rangle}, B_{\langle l \rangle} \in \mathcal{C}l_{p,q}$, sua união (*join*) é definida como um *blade* $J_{\langle r \rangle}$ tal que,

$$\mathcal{NE}(J_{\langle r \rangle}) = \mathcal{NE}(A_{\langle k \rangle}) \oplus \mathcal{NE}(B_{\langle l \rangle}), \quad \|J_{\langle r \rangle}\| = 1.$$

Se $\mathcal{NE}(A_{\langle k \rangle}) \cap \mathcal{NE}(B_{\langle l \rangle}) = \emptyset$, então $J_{\langle r \rangle} = A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle}$.

A equação que define o *meet* (M) em relação ao *join* (J), em um contexto geral, é dada por

$$M = (A \cdot J^{-1}) \cdot B. \quad (2.46)$$

Se A e B são disjuntos, M é um escalar (0 – *blade*).

2.4.4 Transformações Ortogonais

Definição 2.4.28. (Transformação Ortogonal) Uma transformação ortogonal em $\mathbb{R}^{p,q}$ é uma aplicação $\rho : \mathbb{R}^{p,q} \rightarrow \mathbb{R}^{p,q}$ que preserva a norma.

Uma transformação ortogonal se dá, em álgebra geométrica, por meio de elementos denominados versores¹⁸.

Definição 2.4.29. (Versor) Um versor é um multivetor que pode ser descrito como o produto geométrico de 1-vetores não nulos, isto é, um versor $V \in \mathcal{C}l_{p,q}$, pode ser escrito como $V = \prod_{i=1}^k X_i$, com X_i vetores não nulos para todo índice i .

¹⁸ O termo "Versor" foi "cunhado" por David Hestenes (PERWASS; HILDENBRAND, 2004).

Proposição 2.4.30. Para todo versor $V \in \mathcal{C}l_{p,q}$, existe $V^{-1} \in \mathcal{C}l_{p,q}$ tal que, $VV^{-1} = V^{-1}V = 1$.

Demonstração. Seja $V = \prod_{i=1}^k v_i$, onde v_i é não nulo para todo i . Por 2.55, segue que existe $v_i^{-1}; \forall i$. Portanto, $V^{-1} = \prod_{i=k}^1 v_i^{-1}$. $\square$

Lema 2.4.31. Se $V \in \mathcal{C}l_{p,q}$ é um versor e $a \in \mathcal{C}l_{p,q}^1$, então $VaV^{-1} \in \mathcal{C}l_{p,q}^1$.

Demonstração. Considere $V = \prod_{i=1}^k v_i$, onde v_i são todos não nulos. Assim,

$$VaV^{-1} = v_1 \cdots v_{k-1} (v_k a v_k^{-1}) v_{k-1}^{-1} \cdots v_1^{-1}.$$

Como $v_k a v_k^{-1} \in \mathcal{C}l_{p,q}^1$, por recursividade concluímos que $VaV^{-1} \in \mathcal{C}l_{p,q}^1$. $\square$

Proposição 2.4.32. Se $V \in \mathcal{C}l_{p,q}$ é um versor, então para todo $a \in \mathbb{R}^{p,q}$ e $Va\hat{V}^{-1} \in \mathbb{R}^{p,q}$, a aplicação

$$\rho_{\mathbb{R}^{p,q},V} : a \mapsto Va\hat{V}^{-1}$$

é um automorfismo ortogonal em $\mathbb{R}^{p,q}$.

Demonstração. Para cada $a \in \mathbb{R}^{p,q}$, tem-se:

$$(\rho_{\mathbb{R}^{p,q},V}(a))^2 = (\widehat{Va\hat{V}^{-1}})(Va\hat{V}^{-1}) = (\hat{V}\hat{a}V^{-1})(Va\hat{V}^{-1}) = \hat{a}a = a^2,$$

logo $\rho_{\mathbb{R}^{p,q},V}$ é uma aplicação ortogonal. Além disso, ela é injetora, visto que $VaV^{-1} = 0$ se, e somente se, $a = 0$. Finalmente, como $\mathbb{R}^{p,q}$ possui dimensão finita, segue que $\rho_{\mathbb{R}^{p,q},V}$ é também sobrejetora. $\square$

Proposição 2.4.33. Sejam a um elemento invertível de $\mathbb{R}^{p,q}$, isto é, um versor em $\mathcal{C}l_{p,q}$, e R_a uma reta em $\mathbb{R}^{p,q}$ gerada por a . Então, a aplicação $\rho_{\mathbb{R}^{p,q},a}$ é uma reflexão através do hiperplano $(R_a)^\perp$.

Demonstração. Como $\mathbb{R}^{p,q} = R_a \oplus (R_a)^\perp$, segue que todo elemento de $\mathbb{R}^{p,q}$ é da forma $\lambda a + b$, onde $\lambda \in \mathbb{R}$ e $a \cdot b = 0$. Então,

$$\begin{aligned} \rho_{\mathbb{R}^{p,q},a}(\lambda a + b) &= a(\lambda a + b)\hat{a}^{-1} && [a \in \mathcal{C}l_{p,q}^1, \text{ segue da Definição 2.4.18 que } \hat{a} = -a] \\ &= -a(\lambda a + b)a^{-1} \\ &= -\lambda a a a^{-1} - a b a^{-1} && [\text{Por } P_2 \text{ das Propriedades 2.1.7 vem que } ab = -ba] \\ &= -\lambda a a a^{-1} + b a a^{-1} \\ &= -\lambda a + b. \end{aligned}$$

Portanto, a aplicação $\rho_{\mathbb{R}^{p,q},a}$ é uma reflexão. $\square$

Lema 2.4.34. Seja $V \in \mathcal{C}l_{p,q}$ um versor e seja $\{a_1, \dots, a_k\} \subset \mathcal{C}l_{p,q}^1$ um conjunto linearmente independente de vetores. Então,

$$V \left(\bigwedge_{i=1}^k a_i \right) V^{-1} = \bigwedge_{i=1}^k (V a_i V^{-1}).$$

Demonstração. A demonstração se dá por indução sobre k . Seja $A_{\langle k-j \rangle} := \bigwedge_{i=1}^{k-j} a_i$ e note que

$$A_{\langle k-1 \rangle} \wedge a_k = \frac{1}{2} (A_{\langle k-1 \rangle} a_k + (-1)^{k-1} a_k A_{\langle k-1 \rangle}),$$

implicando em

$$\begin{aligned} V(A_{\langle k-1 \rangle} \wedge a_k) V^{-1} &= \frac{1}{2} (V A_{\langle k-1 \rangle} a_k V^{-1} + (-1)^{k-1} V a_k A_{\langle k-1 \rangle} V^{-1}) \\ &= \frac{1}{2} (V A_{\langle k-1 \rangle} V^{-1} V a_k V^{-1} + (-1)^{k-1} V a_k V^{-1} V A_{\langle k-1 \rangle} V^{-1}) \\ &= V A_{\langle k-1 \rangle} V^{-1} \wedge V a_k V^{-1}. \end{aligned}$$

Dessa maneira, concluímos o resultado. $\square$

2.5 Álgebra Geométrica Conforme

Objetos geométrico são representados na álgebra geométrica por modelos denominados *Modelos de Geometria*, mais especificamente, a álgebra geométrica se utiliza destes modelos para atribuir uma interpretação geométrica às transformações rígidas no espaço multivetorial. E, também, aos objetos geométricos por meio de métricas convenientes seu formalismo algébrico é aplicado em vários problemas práticos. O modelo mais conhecido é o modelo vetorial com a métrica euclidiana, utilizado com frequência como exemplo para justificar a construção da álgebra geométrica na Seção anterior. Trataremos aqui do modelo de geometria conhecido por *Modelo Conforme*.

2.5.1 Modelo Conforme

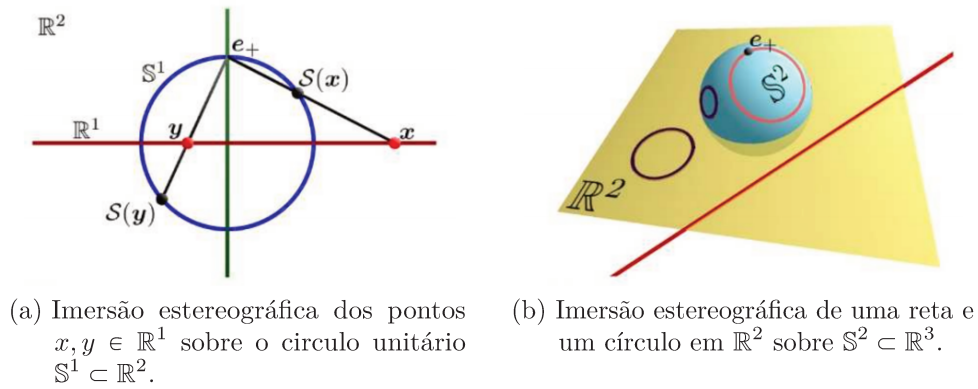
O espaço conforme é obtido em uma sequência "dupla" de incorporações, onde a cada passo se estende a dimensão do espaço em uma dimensão, descrita por $\mathbb{R}^n \hookrightarrow \mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$ e, por fim, em um espaço de Minkowski, denotado por $\mathbb{R}^{n+1,1}$. Faremos $p = n + 1$ e $q = 1$ nesta seção.

2.5.1.1 Imersão Estereográfica de $\mathbb{R}^n$ em $\mathbb{R}^{n+1}$

O espaço euclidiano $\mathbb{R}^n$ é incorporado em $\mathbb{S}^n$ de maneira não linear, por meio da aplicação $\mathcal{S} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$, definida como

$$\mathcal{S}(x) = \frac{2}{x^2 + 1}x + \frac{x^2 - 1}{x^2 + 1}e_+, \quad (2.47)$$

onde $e_+ \equiv e_{n+1}$. Todos os pontos incorporados ficam em uma hipersfera de raio unitário, centrada na origem de $\mathbb{R}^{n+1}$, implicando em $\|\mathcal{S}(x)\| = 1$. Um exemplo ilustrativo é dado na Figura 15 para dimensões menores.



(a) Imersão estereográfica dos pontos $x, y \in \mathbb{R}^1$ sobre o círculo unitário $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$. (b) Imersão estereográfica de uma reta e um círculo em $\mathbb{R}^2$ sobre $\mathbb{S}^2 \subset \mathbb{R}^3$.

Figura 15 – Exemplos de imersões estereográficas (figuras retiradas de (PERWASS, 2009)).

Os polos de $\mathbb{S}^1$ representados pelos vetores e_- , e_+ indicam a origem e as extremidades de $\mathbb{R}$ respectivamente, como pode ser visto na Figura 15(a). Logo, todos os pontos da reta estão cobertos pela imersão estereográfica, implicando que uma transformação inversa só está definida nos pontos de $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$. Podemos expressar esta restrição por meio de uma projeção estereográfica de volta, fazendo com que apenas vetores $x \in \mathbb{R}^{n+1}$ que satisfazem $\|x\| = 1$ possam ser projetados em $\mathbb{R}^n$. Para esses vetores, o operador inverso $\mathcal{S}^{-1}$ é dado pela equação

$$\mathcal{S}^{-1}(x) = \frac{1}{1 - x \cdot e_+} \sum_{i=1}^{n+1} (x \cdot e_i) e_i. \quad (2.48)$$

Agora, vamos estender em mais uma dimensão o espaço $\mathbb{R}^{n+1}$, "gerando" $\mathbb{R}^{n+1,1}$, e projetar nesta nova direção a hipersfera $\mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$ no plano afim de Minkowski, denotado por $\mathbb{A}_M^{n+1} \subset \mathbb{R}^{n+1,1}$. O espaço $\mathbb{R}^{n+1,1}$ possui $n+1$ vetores na sua base ortonormal cujo quadrado é 1 e um vetor com o quadrado igual a -1. Uma ilustração deste processo pode ser visto na Figura 16.

A Figura 16 ilustra a incorporação de um vetor $x \in \mathbb{R}$ no espaço de Minkowski $\mathbb{R}^{2,1}$ segundo os dois passos descritos acima. Uma descrição detalhada é dada abaixo.

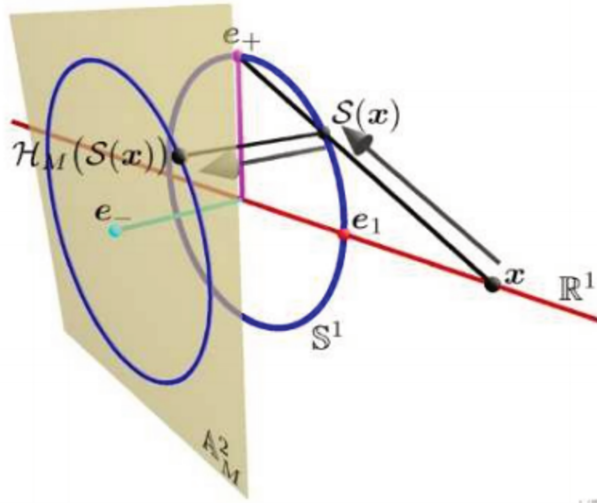


Figura 16 – Imersão do vetor $x \in \mathbb{R}^1$, primeiro sobre o círculo unitário $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{R}^2$ e, em seguida, sobre o hiperplano afim $\mathbb{A}_M^2 \subset \mathbb{R}^{2,1}$ (PERWASS, 2009).

2.5.1.2 Homogeneização da Imersão Estereográfica

A imersão homogênea de $\mathbb{R}^{n+1}$ no espaço de Minkowski $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é descrita pela aplicação $\mathcal{H}_M : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{A}_M^{n+1} \subset \mathbb{R}^{n+1,1}$, definida por

$$\mathcal{H}_M(x) = x + e_- \quad (2.49)$$

onde a "dimensão homogênea" é $e_- \equiv e_{n+2}$, que satisfaz a seguinte propriedade:

$$e_- \cdot e_- = -1.$$

Definição 2.5.1. (Vetor Nulo) Um vetor $X \in \mathbb{R}^{n+1,1}$ é dito nulo se, e somente se, $X \cdot X = 0$.

Um resultado imediato da utilização de uma dimensão homogênea, com assinatura negativa, é a geração de vetores nulos, ou seja,

$$\begin{aligned} (\alpha \mathcal{H}_M(\mathcal{S}(x)))^2 &= \alpha^2 (\mathcal{S}(x) + e_-)^2 \\ &= \alpha^2 ((\mathcal{S}(x))^2 + e_-^2) \\ &= \alpha^2 (1 - 1) \\ &= 0, \end{aligned}$$

onde $\alpha \in \mathbb{R}^*$ é um escalar não nulo. Este fato é relevante ao trabalho, visto que pontos cartesianos de $\mathbb{R}^n$ são representados no espaço conforme por estes objetos geométricos com característica especial. Esta propriedade é específica do espaço conforme. O conjunto dos

vetores com esta propriedade define um subconjunto de $\mathbb{R}^{n+1,1}$, denominado *Cone Nulo*, denotado por $\mathbb{H}^n$, isto é

$$\mathbb{H}^n = \{X \in \mathbb{R}^{n+1,1} | X^2 = 0\}, \quad (2.50)$$

ou ainda,

$$\mathbb{H}^n = \{\alpha \mathcal{H}(\mathcal{S}(x)); \alpha \in \mathbb{R} \setminus 0 \text{ e } x \in \mathbb{R}^n\}$$

Seja $\mathbb{SA}_M^n \subset \mathbb{A}_M^{n+1}$ o conjunto dos vetores em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ que resultaram da imersão estereográfica $\mathcal{S}$ de um vetor de $\mathbb{R}^n$. Note que se $X \in \mathbb{SA}_M^n$, então $X \in \mathbb{H}^n$ e mais, $\mathbb{SA}_M^n = \mathbb{A}_M^{n+1} \cap \mathbb{H}^n = \mathcal{H}_M(\mathcal{S}(\mathbb{R}^n))$.

Uma visualização particular é dada na Figura 17, onde os vetores de $\mathbb{SA}_M^1 \subset \mathbb{A}_M^2 \subset \mathbb{R}^{2,1}$ residem sobre o cone $\mathbb{H}^1$.

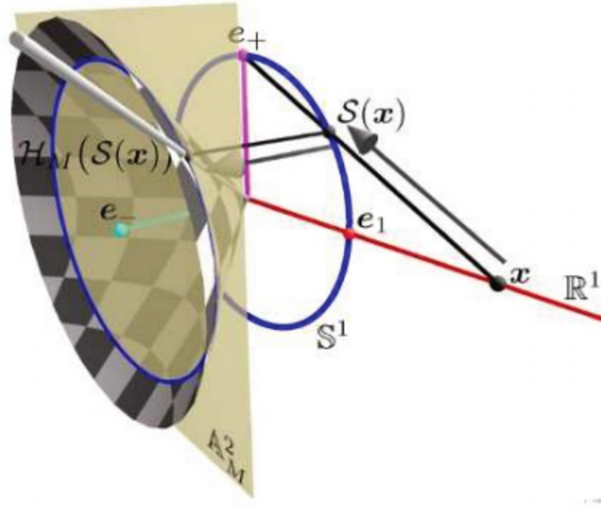


Figura 17 – Mesma imersão da Figura 16, com a visualização do cone nulo $\mathbb{H}^1$ (PERWASS, 2009).

Assim, uma operação que leva vetores de $\mathbb{SA}_M^n$ em $\mathbb{S}^n$, deve ser definida apenas em vetores que satisfazem a propriedade $X \cdot e_- \neq 0$, ou seja, o operador de transformação inversa $\mathcal{H}_M^{-1} : \mathbb{SA}_M^n \rightarrow \mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$ é dado por

$$\mathcal{H}_M^{-1}(X) = X - e_-. \quad (2.51)$$

O diagrama abaixo descreve os dois passos:

$$\mathbb{SA}_M^n \subset \mathbb{S}_M^{n+1} \subset \mathbb{R}^{n+1,1} \quad \hookrightarrow \quad \mathbb{SA}_M^n \subset \mathbb{S}_M^{n+1} \subset \mathbb{R}^{n+1,1}$$

$$\mathcal{H}_M \uparrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \mathcal{H}_M^{-1}$$

$$\mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1} \qquad \qquad \qquad \hookrightarrow \qquad \mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$$

$$\mathcal{S} \uparrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \mathcal{S}^{-1}$$

$$\mathbb{R}^n \qquad \qquad \qquad \hookrightarrow \qquad \mathbb{R}^n$$

Ao compor as Equações (2.47) e (2.49), obtemos uma imersão direta de vetores de $\mathbb{R}^n$ no espaço conformal $\mathbb{R}^{n+1,1}$ (homogeneizado), dada pela equação

$$\mathcal{H}_M(\mathcal{S}(x)) = \frac{2}{x^2 + 1}x + \frac{x^2 - 1}{x^2 + 1}e_+ + e_-. \quad (2.52)$$

Considerando que no espaço projetivo¹⁹ um escalar não "influência" na representação do objeto geométrico euclidiano correspondente, podemos redimensionar a Equação (2.52), sem alterar o vetor em $\mathbb{R}^n$ que ele representa. Uma maneira conveniente é a multiplicação pelo escalar $\frac{1}{2}(x^2 + 1)$, uma vez que a expressão $x^2 + 1$ nunca pode ser nula. Veja que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(x^2 + 1)\mathcal{H}_M(\mathcal{S}(x)) &= x + \frac{1}{2}(x^2 - 1)e_+ + \frac{1}{2}(x^2 + 1)e_- \\ &= x + \frac{1}{2}(e_+ + e_-) + \frac{1}{2}(e_- - e_+) \\ &= x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0. \end{aligned}$$

Assim, ficam definidos dois novos vetores, e_0 e e_∞ , com características próprias descritas na próxima seção.

Definição 2.5.2. (Vetores da base nula) Os novos vetores e_0 e e_∞ são vetores apenas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ e representam a origem e o ponto no infinito do $\mathbb{R}^n$, respectivamente, descritos pelas expressões:

$$e_\infty = e_+ + e_- \quad \text{e} \quad e_0 = \frac{1}{2}(e_- - e_+). \quad (2.53)$$

Temos, então, um operador de imersão direta entre o espaço euclidiano $\mathbb{R}^n$ e o espaço conformal $\mathbb{R}^{n+1,1}$, descrito por

$$\mathcal{C}(x) = x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0. \quad (2.54)$$

¹⁹ Espaço projetivo de dimensão n , com origem em um ponto $O \in \mathbb{R}^{n+1}$, é definido como o conjunto de retas que passam por O (menos o próprio O).

$\mathcal{C}(\mathbb{R}^n)$ descreve um modelo de geometria com características apropriadas no cone nulo $\mathbb{H}^n$. A transformação inversa é obtida pelo operador $\mathcal{C}^{-1}$, definido por

$$\mathcal{C}^{-1}(X) = \mathcal{H}_M^{-1}(\mathcal{S}^{-1}(X)). \quad (2.55)$$

Um novo diagrama relacionando $\mathbb{R}^n$ com o modelo conforme $\mathcal{C}(\mathbb{R}^n)$ seria o seguinte:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{C}(\mathbb{R}^n) \subset \mathbb{R}^{n+1,1} & \hookrightarrow & \mathcal{C}(\mathbb{R}^n) \subset \mathbb{R}^{n+1,1} \\ \mathcal{C} \uparrow & & \downarrow \mathcal{C}^{-1} \\ \mathbb{R}^n & \hookrightarrow & \mathbb{R}^n \end{array}$$

Definição 2.5.3. (Horosfera) O lugar geométrico descrito pelo operador de imersão $\mathcal{C} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{H}^n \subset \mathbb{R}^{n+1,1}$ e denotado por $\mathbb{H}_a^n$, é o que chamamos de *horosfera*, definida por meio da interseção

$$\mathbb{H}_a^n = \mathcal{H}_H(\mathbb{R}^n) \cap \mathbb{H}^n, \quad (2.56)$$

onde $\mathcal{H}_H(\mathbb{R}^n) \subset \mathbb{R}^{n+1,1}$ é o hiperplano afim definido na direção do vetor nulo e_∞ , dado pelo conjunto $\{X \in \mathbb{R}^{n+1,1} \mid X \cdot e_\infty = -1\}$.

Definição 2.5.4. (Espaço Conforme de $\mathbb{R}^n$) Seja $\phi = \{e_1, \dots, e_n, e_\infty, e_0\}$ uma base para $\mathbb{R}^{n+1,1}$. O espaço linear gerado por ϕ é chamado de *espaço conforme* do $\mathbb{R}^n$. Todo vetor X deste espaço, é escrito como:

$$X = x_1 e_1 + \dots + x_n e_n + x_{n+1} e_\infty + x_{n+2} e_0, \quad (2.57)$$

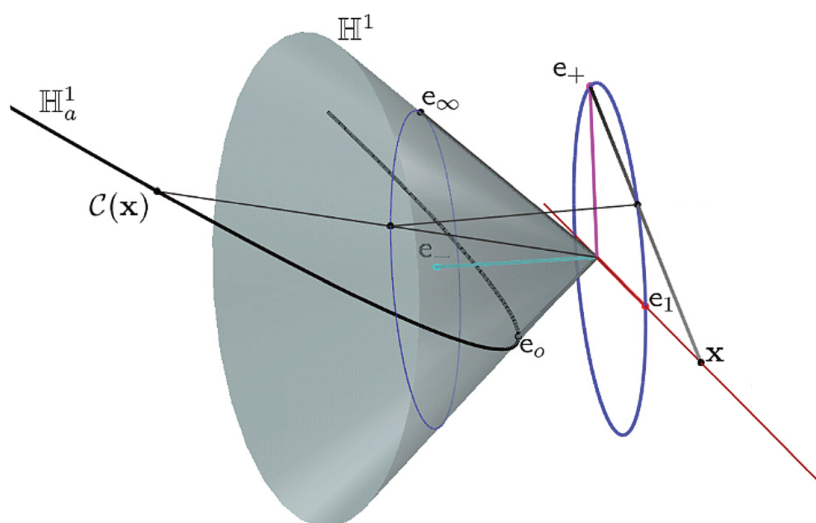
onde $x = x_1 e_1 + \dots + x_n e_n$ é um vetor puramente euclidiano.

Se $x_{n+2} = 1$, dizemos que X é um vetor normalizado, portanto todo $\mathcal{C}(x) \in \mathbb{H}_a^n$ é um vetor normalizado.

O conjunto $\{e_0, e_\infty\}$ é denominado base nula do modelo conforme, e é definido como dimensão homogênea do espaço conforme. Uma visualização do modelo conforme, caso partircular, pode ser visto na Figura 18, onde ilustra a imersão dada nas Figuras 16 e 17 com a visualização da horosfera correspondente.

O vetor e_0 representa a origem no modelo conforme. E, mais, e_0 e e_∞ têm propriedades herdadas dos vetores e_+ e e_- , descritas a seguir.

Propriedade 2.5.5. Os vetores e_0 e e_∞ são nulos, isto é, pertencem a $\mathbb{H}^n$.


$$\mathbb{H}_{g,\bullet}^1(\text{PERWASS; HILDENBRAND, 2004})$$

o resultado. Com efeito,

$$\begin{aligned} e_{\infty} \cdot e_{\infty} &= (e_{-} + e_{+}) \cdot (e_{-} + e_{+}) \\ &= (e_{-} \cdot e_{-} + e_{-} \cdot e_{+} + e_{+} \cdot e_{-} + e_{+} \cdot e_{+}) \\ &= (-1 + 0 + 0 + 1) \\ &= 0 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} e_0 \cdot e_0 &= \frac{1}{2}(e_- - e_+) \cdot \frac{1}{2}(e_- - e_+) \\ &= \frac{1}{4}(e_- \cdot e_- - e_- \cdot e_+ - e_+ \cdot e_- + e_+ \cdot e_+) \\ &= \frac{1}{4}(-1 - 0 - 0 + 1) \\ &= 0. \end{aligned}$$

☐

Propriedade 2.5.6. O produto interno $e_\infty \cdot e_0$ é igual a -1 .

Demonstração. De fato,

$$\begin{aligned} e_\infty \cdot e_0 &= (e_- + e_+) \cdot \frac{1}{2}(e_- - e_+) \\ &= \frac{1}{2}(e_- \cdot e_- - e_- \cdot e_+ + e_+ \cdot e_- - e_+ \cdot e_+) \\ &= \frac{1}{2}(-1 + 0 + 0 - 1) \\ &= -1. \end{aligned}$$

Portanto $e_0 \in \mathbb{H}_a^n$. □

As Propriedades 2.5.5 e 2.5.6 caracterizam a métrica de Minkowski de assinatura $(n+1, 1)$, representada pela tabela métrica abaixo:

$\cdot$	e_1	$\cdots$	e_n	e_∞	e_0
e_1	1	$\cdots$	0	0	0
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	0	0	0
e_n	0	$\cdots$	1	0	0
e_∞	0	$\cdots$	0	0	-1
e_0	0	$\cdots$	0	-1	0

O conjunto de vetores $\{e_1, \dots, e_n\}$ representa a parte euclidiana do espaço.

Lema 2.5.7. O produto interno de dois vetores nulos, $X = \mathcal{C}(x), Y = \mathcal{C}(y) \in \mathbb{H}_a^n$, representando os elementos $x, y \in \mathbb{R}^n$, satisfaz a seguinte identidade

$$X \cdot Y = -\frac{1}{2}d^2(x, y), \quad (2.58)$$

onde $d^2(x, y)$ é a distância euclidiana ao quadrado dos vetores x e y em $\mathbb{R}^n$.

Demonstração. Pela Equação 2.54, segue que $X = x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0$ e $Y = y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0$ representam as incorporações dos vetores $x, y \in \mathbb{R}^n$. Então, o produto interno entre eles é dado por

$$X \cdot Y = \left(x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0\right) \cdot \left(y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0\right).$$

Como $x \cdot e_0 = 0$ e $x \cdot e_\infty = 0$, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, e usando as Propriedades 2.5.5 e 2.5.6, segue que:

$$\begin{aligned} X \cdot Y &= x \cdot y + \left(\frac{1}{2}x^2e_\infty\right) \cdot e_0 + \left(\frac{1}{2}y^2e_\infty\right) \cdot e_0 \\ &= -\frac{1}{2}(x^2 - 2 \cdot x \cdot y + y^2), \text{ pois } e_\infty \cdot e_0 = -1 \\ &= -\frac{1}{2}(x - y)^2. \end{aligned}$$

Como $d^2(x, y) = (x - y)^2$, temos a distância euclidiana ao quadrado dos vetores x e y em $\mathbb{R}^n$. □

Uma consequência direta do Lema 2.5.7 é que pontos em $\mathbb{R}^n$ são representados por vetores nulos no modelo conforme dados pela Equação (2.54), visto que todo ponto em $\mathbb{R}^n$ dista zero dele mesmo.

Teorema 2.5.8. A aplicação $\mathcal{C} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{H}_a^n$ é uma isometria.

Demonstração. Sejam $X = \mathcal{C}(x), Y = \mathcal{C}(y) \in \mathbb{H}_a^n$, representantes de $x, y \in \mathbb{R}^n$. Então, pelo Lema 2.5.7, segue que,

$$\begin{aligned} \|X - Y\|_M^2 &= (X - Y) \cdot (X - Y) \\ &= X \cdot X - 2X \cdot Y + Y \cdot Y \\ &= -2 \left(-\frac{1}{2}(x - y)^2 \right) \\ &= \|x - y\|_2^2, \end{aligned}$$

onde $\|\cdot\|_M, \|\cdot\|_2$ representam as normas nas métricas de Minkowski de assinatura $(n + 1, 1)$ e de Euclides, respectivamente. $\square$

Definição 2.5.9. (CGA²⁰) Uma *Álgebra Geométrica Conforme*, denotada por $\mathcal{Cl}_{n+1,1}$, é a álgebra associativa gerada a partir do espaço quadrático conforme $(\mathbb{R}^{n+1,1}, \cdot)$, munido do produto geométrico.

Definição 2.5.10. (Pseudoescalar Conforme) O pseudoescalar em CGA é definido por

$$I_c = IE,$$

onde $E = e_\infty \wedge e_0$ e $I = e_1 \cdots e_n$ é o pseudoescalar da álgebra geométrica $\mathcal{Cl}_n$.

Lema 2.5.11. $e_\infty E = e_\infty$, $e_0 E = -e_0$ e $EE = 1$.

Demonstração. Com efeito, segue das Fórmulas 2.3.8 e 2.3.15, que

$$\begin{aligned} e_\infty E &= e_\infty \cdot (e_\infty \wedge e_0) \\ &= (e_\infty \cdot e_\infty)e_0 - (e_\infty \cdot e_0)e_\infty \\ &= e_\infty \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} e_0 E &= e_0 \cdot (e_\infty \wedge e_0) \\ &= (e_0 \cdot e_\infty)e_0 - (e_0 \cdot e_0)e_\infty \\ &= -e_0. \end{aligned}$$

²⁰ Do Inglês: Conformal Geometric Algebra

Por fim,

$$\begin{aligned}
 EE &= (e_\infty \wedge e_0) \cdot (e_\infty \wedge e_0) \\
 &= (e_\infty \cdot (e_0 \cdot (e_\infty \wedge e_0))) \\
 &= (e_\infty \cdot ((e_0 \cdot e_\infty)e_0 - (e_0 \cdot e_0)e_\infty)) \\
 &= e_\infty \cdot (-e_0) \\
 &= -(-1) \\
 &= 1.
 \end{aligned}$$

□

Lema 2.5.12. $I_c \tilde{I}_c = -1$

Demonstração. Com efeito,

$$\begin{aligned}
 I_c \tilde{I}_c &= IE\tilde{I}E \\
 &= IE\tilde{E}\tilde{I} \\
 &= -IEE\tilde{I}, & [\text{pois, } EE = 1] \\
 &= -I\tilde{I} \\
 &= -1.
 \end{aligned}$$

□

Teorema 2.5.13. $I_c^{-1} = E\tilde{I}$.

Demonstração. Com efeito, temos que

$$I_c^{-1} = \frac{\tilde{I}_c}{I_c \tilde{I}_c}$$

Pelo Lema 2.5.12, segue que

$$\begin{aligned}
 I_c^{-1} &= -\tilde{I}_c \\
 &= -\tilde{I}E \\
 &= -\tilde{E}\tilde{I} \\
 &= -(-E\tilde{I}) \\
 &= E\tilde{I},
 \end{aligned}$$

implicando em

$$I_c I_c^{-1} = IEE\tilde{I} = I\tilde{I} = 1.$$

□

A seguir, desenvolveremos a álgebra geométrica conforme para o espaço euclidiano tridimensional, entretanto todos os resultados aqui obtidos podem ser generalizados para as álgebras geométricas construídas a partir de espaços euclidianos de dimensões arbitrárias.

2.5.2 Álgebra Geométrica Conforme $\mathcal{Cl}_{4,1}$

A álgebra geométrica conforme $\mathcal{Cl}_{4,1}$ é definida a partir do espaço quadrático conforme $(\mathbb{R}^{4,1}, \cdot)$, via métrica de Minkowski de assinatura (4,1), munido do produto geométrico definido na Seção 2.3.

Tabela 5 – Elementos básicos da álgebra $\mathcal{Cl}_{4,1}$, constituídos a partir dos vetores canônicos da base do espaço conforme $\mathbb{R}^{4,1}$.

Elementos	<i>blades básicos</i> (Abreviações)	Número de <i>blades</i>
escalar	1	1
vetores	$e_1, e_2, e_3, e_0, e_\infty$	5
bivetores	$e_{12}, e_{23}, e_{13}, e_{1\infty}, e_{10}, e_{2\infty}, e_{20}, e_{3\infty}, e_{30}, e_{0\infty}$	10
trivetores	$e_{123}, e_{120}, e_{12\infty}, e_{130}, e_{13\infty}, e_{230}, e_{23\infty}, e_{10\infty}, e_{20\infty}, e_{30\infty}$	10
quadrivetores	$e_{1230}, e_{123\infty}, e_{12E}, e_{13E}, e_{23E}$	5
pseudoescalar	$I_c = IE$	1

Fonte: (PERWASS, 2009). $E = e_\infty \wedge e_0$ e $I = e_{123}$.

Objetos geométricos de $\mathbb{R}^3$, tais como ponto, reta, plano, par de pontos, círculos e esferas, são primitivas computacionais, traduzidos como subespaços "básicos" de $\mathcal{Cl}_{4,1}$. A próxima subseção trás caracterizações destes objetos em CGA.

Representação de Objetos Geométricos no Modelo Conforme

Matematicamente, estes objetos são representados por *blades* em CGA. Suas representações se dão de duas maneiras: direta, identificando pontos euclidianos com a horosfera no modelo conforme, por meio do operador de imersão definido pela Equação (2.54), ou ainda, através de intersecções de outros objetos, traduzidos na forma do produto *meet*.

Como vimos na Seção anterior, um ponto no espaço euclidiano $\mathbb{R}^3$, deve ser representado por um vetor nulo em $\mathcal{Cl}_{4,1}$, logo podemos ver objetos caracterizados por pontos no espaço euclidiano na Tabela 6, representados em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ por meio da representação por espaço nulo do produto exterior (OPNS).

Entretanto, vetores no modelo conforme não representam apenas pontos finitos na álgebra geométrica $\mathcal{Cl}_{4,1}$. Representações como as de esferas e planos também podem ser

Tabela 6 – Caracterização geométrica via OPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$

Objeto Geométrico em $\mathbb{R}^3$	Grau do Representante	Representação $\mathcal{Cl}_{4,1}$.
Ponto - x_1	1	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1)$
Par de Pontos - (x_1, x_2)	2	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2)$
Reta - x_1, x_2	3	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2 \wedge e_\infty)$
Círculo - x_1, x_2, x_3	3	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2 \wedge X_3)$
Plano - x_1, x_2, x_3	4	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge e_\infty)$
Esfera - x_1, x_2, x_3, x_4	4	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge X_4)$
$\mathbb{R}^3$	5	$\mathcal{N}\mathbb{E}(X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge X_4 \wedge X_5)$

Fonte: (PERWASS; HILDENBRAND, 2004).

representadas por vetores em $\mathcal{Cl}_{4,1}$, visto que os subespaços $\mathcal{Cl}_{4,1}^1$ e $\mathcal{Cl}_{4,1}^4$ são complementares ortogonais. Portanto, por meio do operador dual, é possível obter uma representação vetorial para esses objetos.

Propriedade 2.5.14. Sejam os vetores nulos $X = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0$, $Y = y_1e_1 + y_2e_2 + y_3e_3 + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0$ e $Z = z_1e_1 + z_2e_2 + z_3e_3 + \frac{1}{2}z^2e_\infty + e_0$ em $\mathcal{Cl}_{4,1}$. Considere o plano Π gerado por estes vetores em $\mathcal{Cl}_{4,1}$, isto é,

$$\begin{aligned}
\Pi &= X \wedge Y \wedge Z \wedge e_\infty \\
&= (x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0) \wedge (y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0) \wedge (z + \frac{1}{2}z^2e_\infty + e_0) \wedge e_\infty \\
&= P_1e_{123\infty} + P_2e_{23\infty 0} + P_3e_{31\infty 0} + P_4e_{12\infty 0},
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
P_1 &= (x_1y_2z_3 - x_2y_1z_3) + (x_2y_3z_1 - x_3y_2z_1) - (x_1y_3z_2 - x_3y_1z_2) \\
P_2 &= (x_2z_3 - y_2z_3) - (x_3z_2 - y_3z_2) - (x_2y_3 - x_3y_2) \\
P_3 &= (x_3z_1 - y_3z_1) + (x_1y_3 - x_3y_1) - (x_1z_3 - y_1z_3) \\
P_4 &= (x_1z_2 - y_1z_2) - (x_2z_1 - y_2z_1) - (x_1y_2 - x_2y_1)
\end{aligned}$$

Tem-se, pelo Teorema 2.5.13, que o inverso do pseudoescalar conforme é $I_c^{-1} = Ee_3e_2e_1$, onde $E = e_\infty \wedge e_0$. Aplicando o operador dual ao plano Π , segue que a sua forma vetorial na álgebra $\mathcal{Cl}_{4,1}$ é dada por

$$\begin{aligned}
P &= \Pi I_c^{-1} \\
&= (P_1e_{123\infty} + P_2e_{23E} - P_3e_{31E} + P_4e_{12E})(Ee_3e_2e_1) \\
&= P_2e_1 - P_3e_2 + P_4e_3 - P_1e_\infty.
\end{aligned}$$

Portanto, escrevemos $P = \Pi^*$.

Considere agora o vetor nulo $W = w_1e_1 + w_2e_2 + w_3e_3 + \frac{1}{2}w^2e_\infty + e_0$ em $\mathcal{Cl}_{4,1}^1$ e seja $\Sigma = X \wedge Y \wedge Z \wedge W$, a representação de uma esfera em $\mathcal{Cl}_{4,1}$.

Para obter a representação vetorial S da esfera e facilitar as operações, dividiremos o produto exterior entre dois bi-vetores $X \wedge Y$ e $Z \wedge W$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} X \wedge Y &= (x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0) \wedge (y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0) \\ &= a_1e_{23} + a_2e_{31} + a_3e_{12} + a_4e_{1\infty} + a_5e_{2\infty} + a_6e_{3\infty} + a_7e_{10} + a_8e_{20} + a_9e_{30} + a_{10}E, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} a_1 &= x_2y_3 - x_3y_2 & \text{e} & & a_6 &= x_3 - y_3 \\ a_2 &= x_3y_1 - x_1y_3 & & & a_7 &= x_1 - y_1 \\ a_3 &= x_1y_2 - x_2y_1 & & & a_8 &= x_2 - y_2 \\ a_4 &= x_1 - y_1 & & & a_9 &= x_3 - y_3 \\ a_5 &= x_2 - y_2 & & & a_{10} &= \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \end{aligned}$$

Analogamente, tem-se

$$\begin{aligned} Z \wedge W &= (z + \frac{1}{2}z^2e_\infty + e_0) \wedge (w + \frac{1}{2}w^2e_\infty + e_0) \\ &= b_1e_{23} + b_2e_{31} + b_3e_{12} + b_4e_{1\infty} + b_5e_{2\infty} + b_6e_{3\infty} + b_7e_{10} + b_8e_{20} + b_9e_{30} + b_{10}E, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} b_1 &= z_2w_3 - z_3w_2 & \text{e} & & b_6 &= z_3 - w_3 \\ b_2 &= z_3w_1 - z_1w_3 & & & b_7 &= z_1 - w_1 \\ b_3 &= z_1w_2 - z_2w_1 & & & b_8 &= z_2 - w_2 \\ b_4 &= z_1 - w_1 & & & b_9 &= z_3 - w_3 \\ b_5 &= z_2 - w_2 & & & b_{10} &= \frac{1}{2}(z^2 - w^2) \end{aligned}$$

Assim,

$$(X \wedge Y) \wedge (Z \wedge W) = c_1e_{1230} + c_2e_{123\infty} + c_3e_{12E} + c_4e_{13E} + c_5e_{23E}. \quad (2.59)$$

Aplicando o operador dual na Equação (2.59) e fazendo as devidas adaptações, segue que

$$\begin{aligned} S &= \Sigma I_c^{-1} \\ &= (c_1e_{1230} + c_2e_{123\infty} + c_3e_{12E} + c_4e_{13E} + c_5e_{23E})(Ee_3e_2e_1) \\ &= c_5e_1 - c_4e_2 + c_3e_3 - c_2e_\infty + c_1e_0, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} c_1 &= a_6b_1 - a_5b_2 + a_4b_3 + a_3b_4 - a_2b_5 + a_1b_6 \\ c_2 &= a_9b_1 - a_8b_2 + a_7b_3 + a_3b_7 - a_2b_8 + a_1b_9 \\ c_3 &= a_{10}b_1 + a_8b_4 - a_7b_5 - a_5b_7 + a_4b_8 + a_1b_{10} \\ c_4 &= a_{10}b_2 + a_9b_4 - a_7b_6 - a_6b_7 + a_4b_9 + a_2b_{10} \\ c_5 &= a_{10}b_3 + a_9b_5 - a_8b_6 - a_6b_8 + a_5b_9 + a_3b_{10} \end{aligned}$$

Portanto, escrevemos $S = \Sigma^*$.

A Tabela 7 apresenta um pequeno resumo dos objetos geométricos de $\mathbb{R}^3$ representados por vetores no modelo conforme. Temos que, todo vetor X no espaço conforme $\mathbb{R}^{4,1}$ é definido pela equação

$$X = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 + x_4e_\infty + x_5e_0, \quad (2.60)$$

onde $x = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3$ denota um ponto no espaço euclidiano $\mathbb{R}^3$. Logo, sua representação dual é o pseudo-vetor descrito por,

$$X^* = x_5e_{1230} - x_4e_{123\infty} + x_3e_{12\infty 0} + x_2e_{31\infty 0} + x_1e_{23\infty 0}. \quad (2.61)$$

Tabela 7 – **Classificação de esferas, planos e pontos em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ a partir da Equação (2.60).**

	$x_5 = 0$	$x_5 \neq 0$
$x_4 = 0$	plano passando pela origem	origem ou esfera passando pela origem
$x_4 \neq 0$	plano	esfera ou ponto

Fonte: (PERWASS; HILDENBRAND, 2004).

Segue abaixo um conjunto de definições, retiradas de (PERWASS, 2009), sem muitos detalhes.

Definição 2.5.15. (Esferas) Uma esfera em $\mathbb{R}^3$, com centro em x , é representada no modelo conforme, via IPNS, pela expressão

$$S = x + \frac{1}{2}(x^2 - r^2)e_\infty + e_0. \quad (2.62)$$

Note que, da Equação (2.60), tem-se que $x_4 = \frac{1}{2}(x^2 - r^2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - r^2)$ e $x_5 = 1$.

Ainda podemos escrevê-la em termos de vetores nulos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 S &= x + \frac{1}{2}(x^2 - r^2)e_\infty + e_0 \\
 &= x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0 - \frac{1}{2}r^2e_\infty \\
 &= X - \frac{1}{2}r^2e_\infty \\
 &= X - \frac{1}{2}(x - y)^2e_\infty,
 \end{aligned}$$

partindo do princípio de que o raio r é a distância entre o centro da esfera e um ponto qualquer $y \in \mathbb{R}^3$, que pertence a esfera. Segue do Teorema 2.5.7 que

$$S = X + X \cdot Y e_\infty, \quad (2.63)$$

onde $Y \in \mathbb{H}_a^3$.

Pontos finitos são esferas degeneradas no modelo conforme com raio igual a zero.

Definição 2.5.16. (Pontos) O ponto euclidiano $x \in \mathbb{R}^3$ é representado no modelo conforme, via IPNS, pelo vetor nulo $\mathcal{C}(x) \in \mathbb{H}_a^3$, descrito pela equação

$$X = x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0. \quad (2.64)$$

Note que $x_4 = \frac{1}{2}x^2$ e $x_5 = 1$, na representação vetorial.

Planos são esferas degeneradas no modelo conforme com raio infinito.

Definição 2.5.17. (Planos) Um plano euclidiano é caracterizado no modelo conforme, via IPNS, pela equação

$$P = n + \mathbf{d}e_\infty, \quad (2.65)$$

cujo ponto finito euclidiano $n = n_1e_1 + n_2e_2 + n_3e_3$ representa o vetor normal do plano em $\mathbb{R}^3$, satisfazendo a identidade $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$, e $x_4 = \mathbf{d}$ é a distância do plano até a origem.

Observação 2.5.18. O equivalente dual (OPNS) das entidades geométricas apresentadas acima é justamente sua representação direta, como podemos observar na Tabela 6.

A caracterização de objetos geométricos, tais como, Círculos, Retas e Par de pontos em CGA, via IPNS, se dá utilizando o produto *meet*, como segue abaixo.

Definição 2.5.19. (Círculo) O círculo euclidiano é definido no modelo conforme, via IPNS, pela equação

$$C = S_2 \wedge S_1, \quad (2.66)$$

onde S_1, S_2 são esferas, representadas via IPNS, se intersectando em mais de um ponto.

A equivalência dual (OPNS) é dada pelo produto exterior entre os vetores nulos que representam no modelo conforme os pontos $x, y, z \in S_1^2 \cap S_2^2 \subset \mathbb{R}^3$. Definido pela equação

$$C^* = X \wedge Y \wedge Z.$$

Definição 2.5.20. (Retas) A reta euclidiana é caracterizada no modelo conforme, via IPNS, pela equação

$$L = P_1 \wedge P_2, \quad (2.67)$$

onde P_1, P_2 são planos, representados via IPNS, se intersectando.

Sua equivalência dual (OPNS) é dada pelo produto exterior entre os vetores nulos que representam no modelo conforme os pontos $x, y \in \pi_1 \cap \pi_2 \subset \mathbb{R}^3$ com e_∞ . Definida pela equação

$$L^* = X \wedge Y \wedge e_\infty.$$

Em CGA, sempre podemos representar um par de pontos por meio da interseção de três esferas (PERWASS; HILDENBRAND, 2004).

Definição 2.5.21. (Par de Pontos) Um par de pontos Pp é definido em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ via IPNS, por meio da operação *meet* entre três esferas, isto é, definido pela equação,

$$Pp = S_1 \wedge S_2 \wedge S_3, \quad (2.68)$$

onde $S_1, S_2, S_3 \in \mathfrak{R}^{4,1}$ são esferas, representadas via IPNS.

Observação 2.5.22. Em ambas as definições 2.5.19, 2.5.20 e 2.5.21, se a representação euclidiana não se intersecta, dizemos que o objeto geométrico consequente, obtido no modelo conforme, é imaginário.

A Tabela 8 apresenta um resumo das caracterizações desses objetos geométricos via IPNS.

Observação 2.5.23. Note que, pela Tabela 8, um ponto ainda pode ser definido via IPNS, por meio da interseção de quatro esferas.

A característica fundamental do modelo conforme tridimensional é que ele é um modelo euclidiano. Uma interpretação geométrica de alguns desses objetos pode ser vista na Figura 19 retirada da referência (FONTIJNE, 2007).

Tabela 8 – Objetos geométricos via INPS em $Cl_{4,1}$.

Objeto Geométrico	Grau	Elementos Básicos	Fórmula
Esfera (S)	1	$e_1, e_2, e_3, e_0, e_\infty$	$s + \frac{1}{2}(s^2 - r^2)e_\infty + e_0$
Ponto (X)	1	$e_1, e_2, e_3, e_0, e_\infty$	$x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0$
Plano (P)	1	e_1, e_2, e_3, e_∞	$n + \mathbf{d}e_\infty$
Reta (L)	2	$e_{12}, e_{23}, e_{13}, e_{1\infty}, e_{2\infty}, e_{3\infty}$	$P_1 \wedge P_2$
Círculo (C)	2	$e_{12}, e_{23}, e_{13}, e_{1\infty}, e_{10}, e_{2\infty}, e_{20}, e_{3\infty}, e_{30}, e_{0\infty}$	$S_1 \wedge S_2$
Par de Pontos (Pp)	3	$e_{123}, e_{120}, e_{12\infty}, e_{130}, e_{13\infty}, e_{230}, e_{23\infty}, e_{10\infty}, e_{20\infty}, e_{30\infty}$	$S_1 \wedge S_2 \wedge S_3$
Ponto (X)	4	$e_{1230}, e_{123\infty}, e_{12\infty 0}, e_{13\infty 0}, e_{23\infty 0}$	$S_1 \wedge S_2 \wedge S_3 \wedge S_4$

Fonte: (PERWASS, 2009).

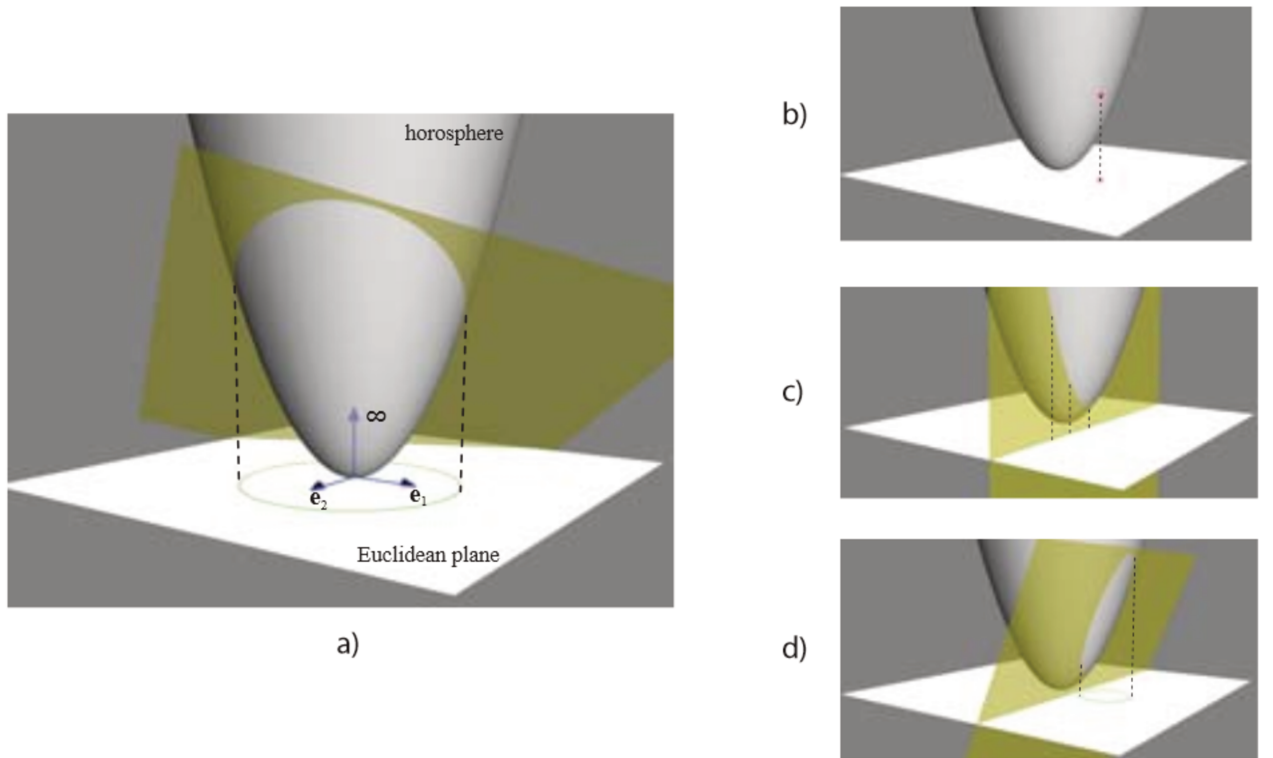


Figura 19 – A figura (a) ilustra a ideia central para interpretação de objetos geométricos no modelo conforme: um plano intersecta a horosfera resultando em uma cônica projetada no plano euclidiano. As projeções são indicadas (aproximadamente) pelas linhas tracejadas. Uma base é apresentada, omitindo a origem e_0 . A figura (b) ilustra que pontos são representados por vetores nulos sobre a horosfera. A figura (c) ilustra que retas são representadas por planos paralelos ao eixo de simetria da horosfera. A figura (d) ilustra que círculos são representados por planos não paralelos ao eixo de simetria da horosfera (FONTIJNE, 2007).

Distâncias entre Vetores

O cálculo de distância entre vetores no modelo conforme está diretamente ligado a proximidade destes objetos representados em $\mathbb{R}^3$. Por exemplo, podemos estabelecer

critérios para que dois pontos representem apenas um ponto, ou se um ponto pertence ou não a um determinado plano ou, ainda, decidir a pertinência de um ponto a uma esfera dada. Estas relações se traduzem em CGA por meio do produto interno entre seus vetores representantes.

Propriedade 2.5.24. Considere dois vetores $X, Y \in \mathcal{Cl}_{4,1}$, descritos pela Equação (2.60), e o produto interno entre eles, isto é,

$$\begin{aligned}
 X \cdot Y &= (x + x_4 e_\infty + x_5 e_0) \cdot (y + y_4 e_\infty + y_5 e_0) \\
 &= x \cdot y + y_4 \underbrace{x \cdot e_\infty}_0 + y_5 \underbrace{x \cdot e_0}_0 \\
 &\quad + x_4 \underbrace{e_\infty \cdot y}_0 + x_4 y_4 \underbrace{e_\infty^2}_0 + x_4 y_5 \underbrace{e_\infty \cdot e_0}_{-1} \\
 &\quad + x_5 \underbrace{e_0 \cdot y}_0 + x_5 y_4 \underbrace{e_0 \cdot e_\infty}_{-1} + x_5 y_5 \underbrace{e_0^2}_0 \\
 &= x \cdot y - x_4 y_5 - x_5 y_4,
 \end{aligned}$$

onde x_4, x_5, y_4 e y_5 definem quais objetos geométricos esta representado no modelo conforme.

Como visto anteriormente, no Teorema 2.5.7, fazendo $x_4 = \frac{1}{2}x^2, y_4 = \frac{1}{2}y^2, x_5 = y_5 = 1$, tem-se

$$X \cdot Y = \frac{1}{2}(x - y)^2. \quad (2.69)$$

Assim, o produto $X \cdot Y$ estabelece a proximidade entre os *pontos finitos* x e y em $\mathbb{R}^3$.

De maneira semelhante, se $x_4 = \mathbf{d} \neq 0, y_4 = \frac{1}{2}y^2, x_5 = 0$ e $y_5 = 1$, tem-se o produto interno entre o vetor nulo Y (ponto finito em $\mathbb{R}^3$) e o plano representado por X , o produto fica definido pela equação

$$X \cdot Y = x \cdot y - \mathbf{d}. \quad (2.70)$$

Assim, $X \cdot Y = 0 \Rightarrow x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 = \mathbf{d}$. Note que, x representa o vetor normal do plano em $\mathbb{R}^3$. Uma propriedade de pertinência por ser escrita como:

Propriedade 2.5.25. (Pertinência entre ponto e plano) Para todo $Y \in \mathbb{H}_a^3$, tem-se $X \cdot Y = 0$ se, e somente se, y pertence ao plano em $\mathbb{R}^3$ representado por X no modelo conforme.

Se $x_4 = \frac{1}{2}(x^2 - r^2), y_4 = \frac{1}{2}y^2, x_5 = y_5 = 1$, tem-se o produto interno entre o vetor nulo Y (ponto finito em $\mathbb{R}^3$) e a esfera representada por X . Se consideramos $z \in \mathbb{R}^3$ um ponto nesta esfera, segue da Equação (2.63) que podemos reescrever sua equação por

$$X = \mathcal{C}(x) + (\mathcal{C}(x) \cdot Z)e_\infty, \quad (2.71)$$

onde Z é o vetor nulo que representa z no modelo conforme.

É claro que, considerando a esfera dada pela Equação (2.71), um ponto em $\mathbb{R}^3$, representado pelo vetor nulo Y em $\mathbb{H}_a^3$, só pertence a esfera, se a distância dele até o centro da esfera é igual ao seu raio. Logo, a seguinte propriedade estabelece critérios para que um ponto Y pertença a uma esfera no modelo conforme.

Propriedade 2.5.26. (Pertinência entre ponto e esfera) Dado Y em $\mathbb{H}_a^3$, dizemos que Y pertence a esfera representada por X no modelo conforme, tal que $Z \in X$ se, e somente se, satisfaz a identidade

$$\mathcal{C}(x) \cdot Y = \mathcal{C}(x) \cdot Z.$$

Assim,

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{C}(x) \cdot Y - \mathcal{C}(x) \cdot Z \\ &= -\mathcal{C}(x) \cdot Z - \frac{1}{2}(x - y)^2 \\ &= -\mathcal{C}(x) \cdot Z - \frac{1}{2}(x^2 - 2x \cdot y + y^2) \\ &= -\mathcal{C}(x) \cdot Z + x \cdot y - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}y^2. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} Y \cdot X &= (y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0) \cdot (\mathcal{C}(x) + (\mathcal{C}(x) \cdot Z)e_\infty) \\ &= (y + \frac{1}{2}y^2e_\infty + e_0) \cdot (x + \frac{1}{2}x^2e_\infty + e_0 + (\mathcal{C}(x) \cdot Z)e_\infty) \\ &= -\mathcal{C}(x) \cdot Z + x \cdot y - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}y^2. \end{aligned}$$

Portanto, um ponto em $\mathbb{R}^3$ pertence a uma esfera, se o produto interno entre seus representantes em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ é zero, isto é

$$Y \cdot X = 0. \quad (2.72)$$

Observação 2.5.27. A Propriedade 2.5.26 pode ser generalizada para esferas S^{n-1} em $\mathbb{R}^n$ com pontos em seu modelo conforme.

3 k DMDGP via CGA

David Hestenes, em seu trabalho intitulado *The Design of Linear Algebra and Geometry* (HESTENES, 1991), mostrou que a representação do grupo conformal de $\mathbb{R}^{p,q}$ em $\mathbb{R}^{p+1,q+1}$ pode ser elegantemente construída usando uma linguagem de Álgebra Geométrica. Devido a este resultado, Havel e Andreas (ANDREAS; HAVEL, 1993) apresentaram uma maneira de interpretar o trabalho clássico de Menger, Blumenthal e Seidel sobre geometria da distância (GD). Inspirados por este trabalho desenvolvemos este capítulo.

3.1 Determinante de Cayley-Menger versus Gramian no Modelo Conforme

Em álgebra linear, o volume de um sólido k – dimensional ("hiperparalelepípedo") gerado por um conjunto de vetores $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, com $v_i = x_i - x_0$ e $x_i \in \mathbb{R}^k$, onde x_0 representa a origem de $\mathbb{R}^k$, pode ser obtido pelo determinante de uma matriz (matriz de Gram), denominado Gramian. O Gramian de V é o determinante $G(v_1, \dots, v_n) = \det(M)$ da matriz M , cujas entradas são produtos internos entre os vetores v_i , dada por

$$M = \begin{bmatrix} \langle v_1, v_1 \rangle & \cdots & \langle v_1, v_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_n, v_1 \rangle & \cdots & \langle v_n, v_n \rangle \end{bmatrix},$$

onde posto de M é igual a k . Uma vez que M é semidefinida positiva de posto igual a dimensão do subespaço gerado pelos vetores $v_1, \dots, v_n$, o Gramian é não negativo. Além disso, sempre que $M = V^T V$, podemos encontrar uma matriz $R_{n \times k}$ tal que, $M = R R^T$ e as linhas de R são as coordenadas dos vetores v_i . Como $\det(M) = (\det(R))^2$, segue que se $k = n$, o Gramian define o quadrado do volume do sólido gerado pelos vetores $v_1, \dots, v_n$.

Teorema 3.1.1. Seja $G(e_\infty, e_0, X_1, \dots, X_n)$ o Gramian do conjunto linearmente independente $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, com $v_i = p_i - p_0$, $i = 1, \dots, n$ em $\mathbb{R}^n$, imerso no espaço conforme $\mathbb{R}^{n+1,1}$. Se $CM = D(p_0, \dots, p_n)$ é o determinante de Cayley-Menger do conjunto de pontos $\{p_0, \dots, p_n\}$, então o Gramian de V é proporcional a CM .

Demonstração. Com efeito, dados os pontos $p_0, \dots, p_n$, sejam $v_i = p_i - p_0$, $i = 1, \dots, n$, pela lei dos cossenos, segue que

$$\langle v_i, v_j \rangle = \frac{1}{2}((d^2(p_0, p_i)) + (d^2(p_0, p_j)) - (d^2(p_i, p_j))),$$

onde, $\|v_i\|^2 = d^2(p_0, p_i) = \|p_i\|^2$.

Sejam $X_i = \mathcal{C}(p_i) \in \mathbb{H}_a^n$, $\forall i = 0, 1, \dots, n$. Usando a métrica do espaço conformal e o Lema 2.5.7, segue que $X_i \cdot X_j = -\frac{1}{2}d^2(p_i, p_j)$. Então, o Gramian de V no modelo conforme é dado por,

$$\begin{aligned}
 G(e_\infty, e_0, X_1, \dots, X_n) &= \begin{vmatrix} e_\infty \cdot e_\infty & e_\infty \cdot e_0 & e_\infty \cdot X_1 & \cdots & e_\infty \cdot X_n \\ e_0 \cdot e_\infty & e_0 \cdot e_0 & e_0 \cdot X_1 & \cdots & e_0 \cdot X_n \\ X_1 \cdot e_\infty & X_1 \cdot e_0 & X_1 \cdot X_1 & \cdots & X_1 \cdot X_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_n \cdot e_\infty & X_n \cdot e_0 & X_n \cdot X_1 & \cdots & X_n \cdot X_n \end{vmatrix} \\
 &= \begin{vmatrix} 0 & -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & 0 & -\frac{1}{2}p_1^2 & \cdots & -\frac{1}{2}p_n^2 \\ -1 & -\frac{1}{2}p_1^2 & 0 & \cdots & -\frac{1}{2}d^2(p_1, p_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -\frac{1}{2}p_n^2 & -\frac{1}{2}d^2(p_1, p_n) & \cdots & 0 \end{vmatrix} \\
 &= \frac{(-1)^{n+2}}{2^n} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & d^2(p_0, p_1) & \cdots & d^2(p_0, p_n) \\ 1 & d^2(p_0, p_1) & 0 & \cdots & d^2(p_1, p_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d^2(p_0, p_n) & d^2(p_1, p_n) & \cdots & 0 \end{vmatrix} \\
 &= \left(-\frac{1}{2}\right)^n CM.
 \end{aligned}$$

A menos do fator de proporcionalidade $(-1)^n 2^{-n}$, temos o determinante Cayley-Menger $D(p_0, \dots, p_n)$ (ver Definição 1.1.10). $\square$

Ao realizar a mesma dedução, em sentido inverso, obtemos as coordenadas de um conjunto de pontos no espaço euclidiano de dimensão n , cujas distâncias são mutuamente iguais às distâncias dadas nas entradas da matriz de Cayley-Menger.

Combinando a interpretação geométrica do Gramian, como o volume quadrado do paralelepípedo, gerado por vetores linearmente independentes, segue o corolário abaixo.

Corolário 3.1.2. Considere o simplex $\mathcal{S}$, formado pelos pontos $p_0, \dots, p_n$ em $\mathbb{R}^n$, com base $\{v_1, \dots, v_n\}$, onde $v_i = p_i - p_0$. Seja A o *blade* imerso em $\mathbb{R}^{n+1,1}$, isto é, $A = X_1 \wedge \cdots \wedge X_n \wedge e_\infty \wedge e_0 \in \mathcal{C}l_{n+1,1}$, com $X_i = \mathcal{C}(p_i) \in \mathbb{H}_a^n$, para todo i . O quadrado do volume (Δ^2) do simplex $\mathcal{S}$, é proporcional ao quadrado da magnitude de A , com constante de proporcionalidade $-\left(\frac{1}{n!}\right)^2$, isto é,

$$\Delta^2(\mathcal{S}) = -\left(\frac{1}{n!}\right)^2 \|A\|^2. \quad (3.1)$$

Exemplo 3.1.3. Sejam $u = 3e_1 + 2e_2, v = e_1 + 4e_3$ e $w = -e_2 + e_3$ vetores em $\mathbb{R}^3$ e seja $\mathcal{S}$ o simplex formado por $\{u, v, w\}$. Se $X, Y, Z \in \mathbb{H}_a^3$ são os representantes de u, v e w respectivamente, descritos por: $X = 3e_1 + 2e_2 + \frac{13}{2}e_\infty + e_0, Y = e_1 + 4e_3 + \frac{17}{2}e_\infty + e_0$ e $Z = -e_2 + e_3 + e_\infty + e_0$. Então, o blade $A = X \wedge Y \wedge Z \wedge e_\infty \wedge e_0$, é dado por

$$A = 10I_c,$$

implicando em $\tilde{A} = 10\tilde{I}_c$. Portanto, pelo Lema 2.5.12, segue que

$$||A||^2 = A * \tilde{A} = 100I_c\tilde{I}_c = -100.$$

Donde vem, que

$$\Delta(\mathcal{S}) = \frac{1}{3!}10 = \frac{5}{3}.$$

Usando geometria euclidiana, podemos facilmente verificar o resultado acima (ver Figura 20).

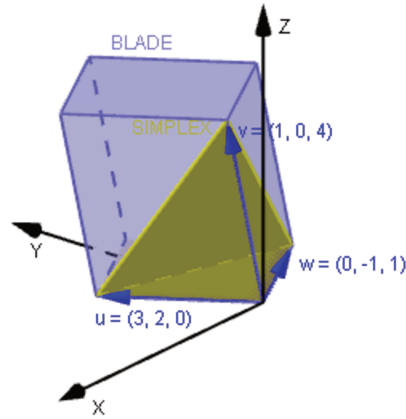


Figura 20 – Em amarelo, o simplex $\mathcal{S}(u, v, w) \subset \mathbb{R}^3$ e, em azul, o 3-blade A não imerso em $\mathbb{R}^{4,1}$.

O modelo conforme da álgebra geométrica nos permite simplificar os cálculos de interseção de objetos geométricos. Sua capacidade de representar diversos elementos geométricos, como primitivas computacionais, unido ao produto *meet* usado para calcular intersecções, faz deste modelo uma boa ferramenta matemática para lidar com instâncias discretizada do DGP, como veremos na próxima seção.

3.2 Operações fundamentais do ${}^k\text{DMDGP}$ em CGA

3.2.1 interseção entre Esferas em $\mathcal{C}_{n+1,1}$

Vimos na Seção 1.2 que instâncias DGP discretizáveis com probabilidade 1 fornecem pontos viáveis aos pares. Em $\mathcal{C}_{n+1,1}$, par de pontos é um objeto "nativo" da álgebra (como pode ser observado na Tabela 8). E mais, o par de ponto em $\mathcal{C}_{n+1,1}$ é obtido diretamente, calculando o *meet* de n esferas representadas, via IPNS. Entretanto, se faz necessário decidir se tal par, é constituído por pontos imaginário (interseção vázia), pontos reais e coincidentes, ou pontos reais e distintos (veja a Figura 21, exemplificada em $\mathbb{R}^2$).

Seja Pp o produto *meet* de n esferas, representadas via IPNS, em $\mathcal{C}_{n+1,1}$ por S_i , com $i = 1, \dots, n$, ou seja, a interseção das n esferas $S_1^{n-1}, \dots, S_n^{n-1} \in \mathbb{R}^n$, é dada em $\mathcal{C}_{n+1,1}$ por

$$Pp = S_1 \wedge \dots \wedge S_n. \quad (3.2)$$

Um teste para verificar se Pp representa pontos imaginários, reais coincidentes ou reais distintos pode ser feito observando o valor de $\Delta = D \cdot D$, onde D representa o dual de Pp , isto é, $D = (Pp)^*$. Temos os possíveis resultados:

- i) Se $\Delta < 0$, então Pp é um par de pontos imaginários;
- ii) Se $\Delta = 0$, então Pp é um par de pontos reais e coincidentes;
- iii) Se $\Delta > 0$, então Pp é um par de pontos reais e distintos.

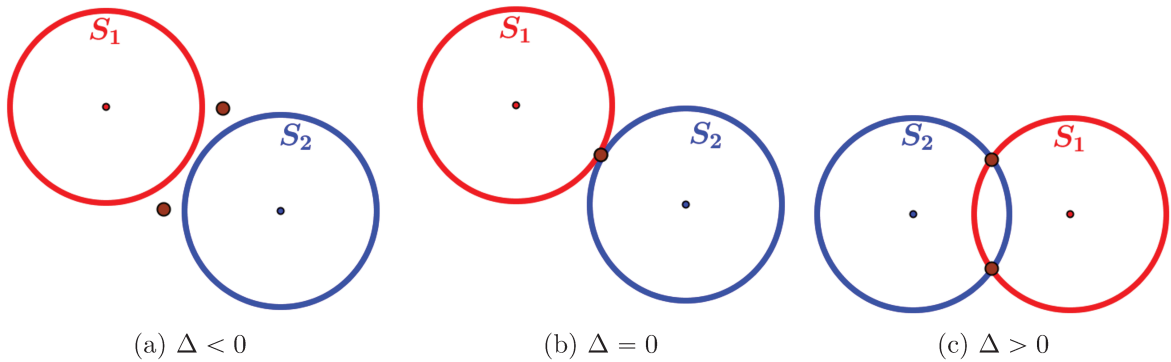


Figura 21 – Possíveis resultados do produto *meet* de duas esferas em $\mathcal{C}_{3,1}$.

Uma maneira de obter os pontos X_1 e X_2 , oriundos do produto *meet* $Pp \in \mathcal{C}_{n+1,1}$, é dado pela fórmula abaixo.

Fórmula 3.2.1. (DORST; FONTIJNE; MANN, 2007; ALVES, 2013)

$$X_1 = \frac{D - \sqrt{\Delta}}{-e_{\infty \cdot D}} \text{ e } X_2 = \frac{D + \sqrt{\Delta}}{-e_{\infty \cdot D}}. \quad (3.3)$$

Observação 3.2.2. Note que, a Fórmula 3.2.1, nos permite obter o par de pontos em $\mathbb{R}^n$, oriundo da interseção de n esferas que satisfaz a Propriedade 1.2.4.

Segue da Propriedade 2.5.26 que um vetor nulo $X \in \mathbb{H}_a^n$ pertence a uma esfera S no modelo conforme se, e somente se, satisfaz a identidade $X \cdot S = 0$. Logo, para que um ponto finito em $\mathbb{R}^n$ seja representado por Pp , em $\mathcal{Cl}_{n+1,1}$, deve satisfazer o seguinte resultado:

Teorema 3.2.3. Um ponto finito $x \in \mathbb{R}^n$ pertence a interseção de n esferas se, e somente se, seu representante em $\mathbb{H}_a^n$ pertence a todas as representantes das n esferas no modelo conforme.

Demonstração. Este fato é facilmente verificado por:

$$\begin{aligned} X \cdot Pp &= X \cdot (S_1 \wedge S_2 \wedge \cdots \wedge S_n) \\ &= \sum_{j=1}^n (-1)^{j-1} (X \cdot S_j) (S_1 \wedge \cdots \wedge S_{j-1} \wedge S_{j+1} \wedge \cdots \wedge S_n) \\ &= (X \cdot S_1) (S_2 \wedge \cdots \wedge S_n) + \cdots + (-1)^{n-1} (X \cdot S_n) (S_1 \wedge \cdots \wedge S_{n-1}). \end{aligned}$$

Desconsiderando os casos em que o produto exterior é nulo para as esferas $S_1, S_2, \dots, S_n$, ou seja, onde $S_i \wedge S_j = 0$ com $i \neq j$, segue que $X \cdot Pp = 0$ se, e somente se, $X \cdot S_i = 0$, para todo $i \in \{1, \dots, n\}$. $\square$

3.2.2 Reflexão no Modelo Conforme

Seja $P = \mathbf{n} + \mathbf{d}e_{\infty}$, tal que $\|P\|_M = 1$, um plano no modelo conforme representado, via IPNS, em $\mathcal{Cl}_{n+1,1}$. Segue da Subseção 2.4.4 que, para qualquer $X = \mathcal{C}(x) \in \mathbb{H}_a^n$ seu reflexo Y em relação à P em $\mathcal{Cl}_{n+1,1}$, é dada por

$$\begin{aligned} PXP &= (\mathbf{n} + \mathbf{d}e_{\infty})(x + \frac{1}{2}x^2e_{\infty} + e_0)(\mathbf{n} + \mathbf{d}e_{\infty}) \\ &\cong x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n} + \frac{1}{2}(x^2 + 4\mathbf{d}^2 - 4\mathbf{d}\mathbf{n} \cdot x)e_{\infty} + e_0 \\ &= x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n} + \frac{1}{2}(x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n})^2 e_{\infty} + e_0, \end{aligned}$$

onde $\cong$ denota a igualdade a menos de escalar, que não "influência" na representação geométrica (PERWASS, 2009).

Note que PXP pertence ao cone nulo $\mathbb{H}^n$, pois

$$(PXP)^2 = PXPPXP = P^4X^2 = 0, \quad (3.4)$$

visto que $P^2 = 1$ e $X^2 = 0$. Além disso, ele representa um ponto em $\mathbb{R}^n$, visto que está normalizado, ou seja, o coeficiente de e_0 é 1, o que implica em $Y \in \mathbb{H}_a^n$.

Assim, seu representante em $\mathbb{R}^n$ é dado por

$$\begin{aligned} y &= C^{-1} \left(x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n} + \frac{1}{2}(x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n})^2 e_\infty + e_0 \right) \\ &= x + 2(\mathbf{d} - \mathbf{n} \cdot x)\mathbf{n}. \end{aligned}$$

Veja a Figura 22.

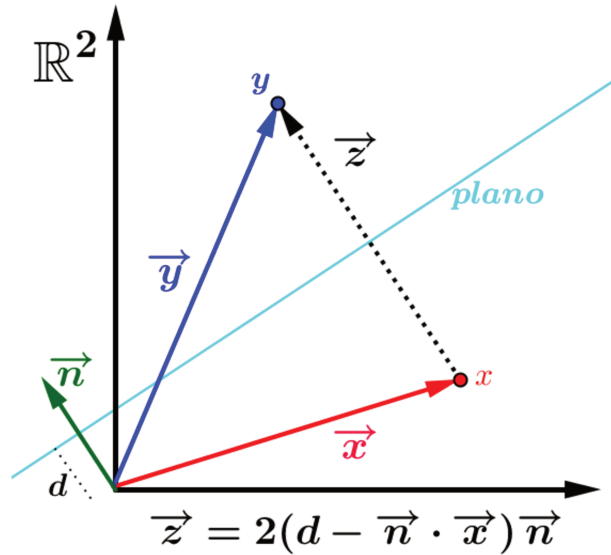


Figura 22 – Reflexão do ponto x de $\mathbb{R}^2$ em relação a um "plano" que dista " d " da origem e , também, o ponto refletido y determinado pela soma vetorial $\vec{y} = \vec{x} + \vec{z}$.

Observação 3.2.4. Os centros de n esferas em $\mathbb{R}^n$ geram um plano, no modelo conforme se consideramos $X_{S_1}, \dots, X_{S_n}$ centros dessas esferas, representadas por $S_1, \dots, S_n$, este plano é escrito de maneira direta pela equação

$$\Pi = X_{S_1} \wedge \dots \wedge X_{S_n} \wedge e_\infty. \quad (3.5)$$

E mais, o produto *meet* dessas esferas, que denotamos por Pp , como na Equação (3.2), gera pontos refletidos em relação a este plano. Se chamamos de X^{Sym} o reflexo de X em relação a Π , podemos escrevê-lo como

$$X^{Sym} = PXP, \text{ onde } P = \frac{\Pi^\star}{\|\Pi^\star\|}.$$

Outra maneira de se obter o plano refletor gerado pelos centros de k esferas em $\mathbb{R}^k$ via CGA é através da seguinte proposição.

Proposição 3.2.5. Sejam $S_1, \dots, S_k$ esferas em $\mathcal{C}l_{k+1,1}$. O plano P formado pelos seus centros em CGA, representado via IPNS, é dado por $(-1)^k e_\infty \cdot D$, com $D = (S_1 \wedge \dots \wedge S_k)^\star$.

Demonstração. Segue da Definição 2.5.15 que podemos escrever as esferas S_i , como

$$S_i = X_i - \frac{1}{2}r_i^2 e_\infty; \quad i = 1, \dots, k.$$

Assim, a operação *meet* fica definida por

$$\begin{aligned} S_1 \wedge S_2 \wedge \dots \wedge S_k &= X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge \dots \wedge X_k \\ &+ (-1)^1 \frac{1}{2}r_1^2 (e_\infty \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge \dots \wedge X_k) \\ &+ (-1)^2 \frac{1}{2}r_2^2 (e_\infty \wedge X_1 \wedge X_3 \wedge \dots \wedge X_k) \\ &+ \vdots \\ &+ (-1)^k \frac{1}{2}r_k^2 (e_\infty \wedge X_1 \wedge X_2 \wedge \dots \wedge X_{k-1}). \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} e_\infty \wedge S_1 \wedge S_2 \wedge \dots \wedge S_k &= e_\infty \wedge X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge \dots \wedge X_k \\ &= (-1)^k X_1 \wedge X_2 \wedge X_3 \wedge \dots \wedge X_k \wedge e_\infty. \end{aligned}$$

A menos do coeficiente $(-1)^k$, temos a equação do plano gerado pelos centros das k esferas (Equação 3.5). Por outro lado,

$$e_\infty \wedge S_1 \wedge S_2 \wedge \dots \wedge S_k \equiv e_\infty \cdot D,$$

com $D = (S_1 \wedge \dots \wedge S_k)^\star$, o que conclui o resultado. $\square$

Exemplo 3.2.6. Sejam $S_1^1 : (x-1)^2 + (y-1)^2 = 1$ e $S_2^1 : (x-2)^2 + y^2 = 1$ em $\mathbb{R}^2$. Suas representações, via IPNS, em $\mathcal{C}l_{3,1}$, são dadas por $S_1 = e_1 + e_2 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0$ e $S_2 = 2e_1 + \frac{3}{2}e_\infty + e_0$. Determine X_1 e X_2 .

Temos que,

$$\begin{aligned} Pp &= S_1 \wedge S_2 \\ &= (e_1 + e_2 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0) \wedge (2e_1 + \frac{3}{2}e_\infty + e_0) \\ &= -2e_{12} + \frac{1}{2}e_{1\infty} + \frac{3}{2}e_{2\infty} - e_{10} + e_{20} - E. \end{aligned}$$

Como $I_c = IE$ com $I = e_1e_2$, usando o Lema 2.5.12 e o Teorema 2.5.13, segue que

$$\begin{aligned}
 D &= (Pp)^\star \\
 &= (Pp)I_c^{-1} \\
 &= (Pp)E\tilde{I} \\
 &= e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E.
 \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
 \Delta &= D \cdot D \\
 &= \left(e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E \right) \cdot \left(e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E \right) \\
 &= \langle DD \rangle_0 \\
 &= 1.
 \end{aligned}$$

Portanto, utilizando as equações dadas em (3.3), segue que

$$\begin{aligned}
 X_1 &= \frac{e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E - \sqrt{1}}{-e_\infty \cdot (e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E)} \\
 &= \frac{e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E - 1}{e_1 + e_2 + 2e_\infty} \\
 &= e_1 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 X_2 &= \frac{e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E + \sqrt{1}}{-e_\infty \cdot (e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E)} \\
 &= \frac{e_{12} + \frac{3}{2}e_{1\infty} - \frac{1}{2}e_{2\infty} - e_{10} - e_{20} - 2E + 1}{e_1 + e_2 + 2e_\infty} \\
 &= 2e_1 + e_2 + \frac{5}{2}e_\infty + e_0.
 \end{aligned}$$

(Pertinência)

$$\begin{aligned}
 X_1 \cdot S_1 &= \left(e_1 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0 \right) \cdot \left(e_1 + e_2 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0 \right) \\
 &= 1 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \\
 &= 0;
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 X_1 \cdot S_2 &= \left(e_1 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0 \right) \cdot \left(2e_1 + \frac{3}{2}e_\infty + e_0 \right) \\
 &= 2 - \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} X_2 \cdot S_1 &= \left(2e_1 + e_2 + \frac{5}{2}e_\infty + e_0\right) \cdot \left(e_1 + e_2 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0\right) \\ &= 2 + 1 - \frac{5}{2} - \frac{1}{2} \\ &= 0; \end{aligned}$$

Por fim,

$$\begin{aligned} X_2 \cdot S_2 &= \left(2e_1 + e_2 + \frac{5}{2}e_\infty + e_0\right) \cdot \left(2e_1 + \frac{3}{2}e_\infty + e_0\right) \\ &= 4 - \frac{5}{2} - \frac{3}{2} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Portanto,

$$x_1 = e_1 \quad \text{e} \quad x_2 = 2e_1 + e_2$$

pertencem à $S_1^1 \cap S_2^1 \subset \mathbb{R}^2$, como podemos ver na Figura 23.

(Simetria). Como os centros de S_1 e S_2 são, respectivamente,

$$X_{S_1} = e_1 + e_2 + e_\infty + e_0 \text{ e } X_{S_2} = 2e_1 + 2e_\infty + e_0.$$

Temos que, o plano ("reta") formado por eles no espaço conforme $\mathbb{R}^{3,1}$, é dado por

$$\begin{aligned} \Pi &= X_{S_1} \wedge X_{S_2} \wedge e_\infty \\ &= (e_1 + e_2 + e_\infty + e_0) \wedge (2e_1 + 2e_\infty + e_0) \wedge e_\infty \\ &= e_1 E - e_2 E - 2e_{12\infty}. \end{aligned}$$

Sua representação, via IPNS, é obtida aplicando a operação de dualidade, ou seja,

$$\begin{aligned} \Pi^\star &= \Pi I_c^{-1} \\ &= \Pi E \tilde{I} \\ &= -e_1 - e_2 - 2e_\infty. \end{aligned}$$

Donde vem que

$$P = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 + e_2 + 2e_\infty). \quad (3.6)$$

Sabemos que a reflexão de X_1 em relação a P é dada por

$$\begin{aligned} PX_1P &= \frac{1}{2} \left([(e_1 + e_2 + 2e_\infty)(e_1 + \frac{1}{2}e_\infty + e_0)](e_1 + e_2 + 2e_\infty) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left([-1 - \frac{3}{2}e_1e_\infty - \frac{1}{2}e_2e_\infty + e_1e_0 - e_2e_0 + e_1e_2 + 2E](e_1 + e_2 + 2e_\infty) \right) \\ &= -2e_1 - e_2 - \frac{5}{2}e_\infty - e_0. \end{aligned}$$

Como,

$$\begin{aligned} -e_\infty \cdot (PX_1P) &= -e_\infty \cdot (-2e_1 - e_2 - \frac{5}{2}e_\infty - e_0) \\ &= -1, \end{aligned}$$

segue que,

$$X_2 = \frac{PX_1P}{-e_\infty \cdot (PX_1P)}. \quad (3.7)$$

Portanto, x_1 e x_2 são simétricos em $\mathbb{R}^2$, com respeito ao plano representado por P , via IPNS, no modelo conforme (ver Figura 23).

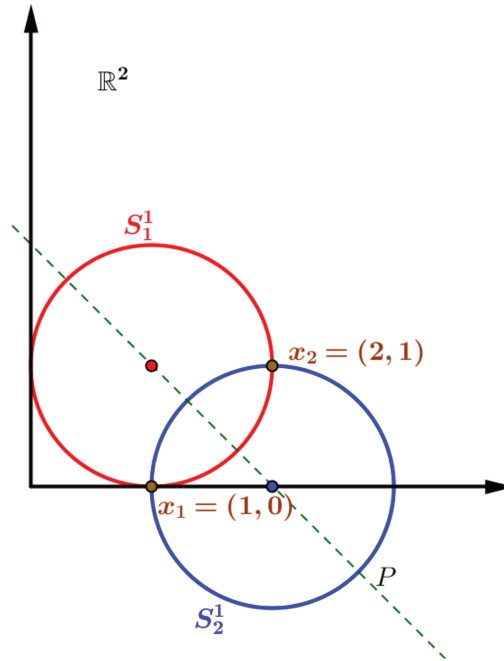


Figura 23 – O par de pontos $X_1, X_2 \in \mathbb{H}_a^2$, as esferas S_1, S_2 e o plano P do modelo conforme do Exemplo 3.2.6, representados em $\mathbb{R}^2$.

A interpretação geométrica dos vetores nulos obtidos pelas Equações (3.3) é dada por um segmento de reta em $\mathcal{Cl}_{n+1,1}$ e são representados por $(Pp)^\star = X \wedge Y$, como pode ser verificado no resultado abaixo.

Teorema 3.2.7. Sejam $X, Y \in \mathbb{H}_a^n$ distintos. Um elemento $Z \in \mathcal{Cl}_{n+1,1}$ que pertence ao segmento de reta $X \wedge Y$ é um vetor nulo, isto é, representa um ponto finito em $\mathbb{R}^n$ se, e somente se, $Z = Y$ ou $Z = X$.

Demonstração. Como Z pertence a um segmento de reta, devemos ter $Z = \alpha X + \beta Y$. Logo,

$$Z^2 = 2\alpha\beta X \cdot Y,$$

visto que $X^2 = Y^2 = 0$. Para Z representar um ponto em $\mathbb{R}^n$, ele deve pertencer ao cone nulo, ou seja $Z^2 = 0$, ou,

$$2\alpha\beta X \cdot Y = 0. \quad (3.8)$$

Donde vem, que $\alpha = 0$ ou $\beta = 0$. E, portanto, ou $Z = Y$ ou $Z = X$. $\square$

Motivados pelos objetos geométricos que envolvem o kDMDGP (esferas, distâncias euclidianas e pontos) e pela relação estabelecida entre o espaço euclidiano $\mathbb{R}^k$ com o modelo conforme, dado na Seção 3.1, apresentamos na próxima seção uma análise teórica desta classe de problemas via álgebra geométrica conforme.

3.3 Análise Teórica de Instâncias kDMDGP no Modelo Conforme

Como já visto anteriormente, esferas representadas via IPNS em CGA são elementos geométricos básicos. Por serem definidas como vetores não nulos nesta representação, os cálculos que envolvem a obtenção do par de pontos é sistematizado em uma fórmula simples. Outro detalhe que se destaca é: os pontos oriundos deste cálculo são vetores nulos e esta característica peculiar torna clara a distinção entre esferas e pontos neste ambiente. Estas considerações por si só justificam uma abordagem ao kDMDGP via CGA. Segue abaixo uma descrição do kDMDGP no modelo conforme correspondente.

Seja $G = (V, E, d)$ um grafo não orientado e ponderado, associado a um kDMDGP , com $|V| = n$, como definido no Capítulo 2. Defina $\mathbb{E}$, como o conjunto das distâncias associadas ao conjunto de pares E , isto é,

$$\mathbb{E} = \{d_{ij}/\{v_i, v_j\} \in E\}.$$

Considere os seguintes itens:

- Uma partição $\mathcal{E} \cup \mathcal{F}$ do conjunto de distâncias conhecidas $\mathbb{E}$, tais que, o conjunto $\mathcal{E}$ possui todas as distâncias entre os pares até k vértices imediatos, denominado por *conjunto de discretização*, e o conjunto $\mathcal{F}$, possui as distâncias dos pares de pontos separados por $k + 1$, ou mais, pontos consecutivos na ordem do kDMDGP , denominado por *conjunto de poda*. Em termos matemáticos, temos que

$$\mathcal{E} = \{d_{ij} \in \mathbb{E}/1 \leq j - i \leq k\} \text{ e } \mathcal{F} = \{d_{ij} \in \mathbb{E}/j - i > k\};$$

- Um caminho η da raiz até o nó folha da árvore $\mathcal{T}$, que representa a discretização de uma instância kDMDGP , representado pela sequência $(X_{v_1}, X_{v_2}, \dots, X_{v_n}) \subset \mathbb{H}_a^k$. Veja a construção ilustrada na Figura 24;

- Sejam $X_{S_1}, \dots, X_{S_n}$ em $\mathbb{H}_a^k$, tais que para todo $i = 1, \dots, n$, $X_{S_i} = \mathcal{C}(x_i)$ com x_i o representante em $\mathbb{R}^k$ do vértice v_i em V no grafo G associado ao kDMDGP . Considere as n esferas S_i no espaço conforme $\mathbb{R}^{k+1,1}$, cujos centros são X_{S_i} respectivamente, associadas à discretização do espaço de busca definido pelo conjunto $\mathcal{E}$. O conjunto dos planos induzidos pelos centros de k a k destas esferas, na ordem de V , é dado por

$$\mathcal{P} = \left\{ P_j \in \mathbb{R}^{k+1,1} / P_j = (-1)^k \frac{e_\infty \cdot D_j}{\|e_\infty \cdot D_j\|}; \forall j = k, \dots, n-1 \right\}, \quad (3.9)$$

com

$$D_j = (S_j \wedge S_{j-1} \wedge \dots \wedge S_{j-k+1})^*; \forall j = k, \dots, n-1.$$

Se $X_{S_j} \equiv X_{v_j} \in \eta$, para todo j , dizemos que o conjunto $\mathcal{P}$ está associado a η . Veja a construção ilustrada na Figura 25;

Exemplo 3.3.1. Considere uma instância kDMDGP com as seguintes hipóteses:

- i - $k = 2$ e $n = 7$;
- ii - $\mathcal{F} = \emptyset$ e $\mathcal{E} = \{d_{12} = 1, d_{13} = 1.7, d_{23} = 1, d_{24} = 1.7, d_{34} = 0.8, d_{35} = 1.4, d_{45} = 0.7, d_{46} = 1.2, d_{56} = 0.6, d_{57} = 1, d_{67} = 0.5\}$;
- iii - Uma realização parcial do grafo G em $\mathbb{R}^2$, definida por

$$\bar{x} = (x_{v_1} = (5.12, 4.84), x_{v_2} = (5.92, 4.79)).$$

- a) Determine uma realização válida de G em $\mathbb{R}^2$;
- b) Denominando por η , o caminho na árvore de discretização do 2DMDGP , ilustre o conjunto $\mathcal{P}$ de planos em $\mathbb{R}^2$, associado a η .

Solução: Segue do item (ii), que a matriz de distâncias é da forma:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1.7 & ? & ? & ? & ? \\ 1 & 0 & 1 & 1.7 & ? & ? & ? \\ 1.7 & 1 & 0 & 0.8 & 1.4 & ? & ? \\ ? & 1.7 & 0.8 & 0 & 0.7 & 1.2 & ? \\ ? & ? & 1.4 & 0.7 & 0 & 0.6 & 1 \\ ? & ? & ? & 1.2 & 0.6 & 0 & 0.5 \\ ? & ? & ? & ? & 1 & 0.5 & 0 \end{pmatrix}.$$

a) Todas as contas foram feitas de maneira análoga ao Exemplo 3.2.6. Uma realização é dada pela sequência de pontos de $\mathbb{R}^2$, definida por:

$$\begin{aligned} x &= \{x_{v_1}, x_{v_2}, x_{v_3}, x_{v_4}, x_{v_5}, x_{v_6}, x_{v_7}\} \\ &= \{(5.12, 4.84), (5.92, 4.79), (6.65, 4.16), (7.45, 4.03), (7.92, 3.52), (8.52, 3.5), (8.84, 3.12)\} \end{aligned}$$

Ilustrada abaixo pela Figura 24.

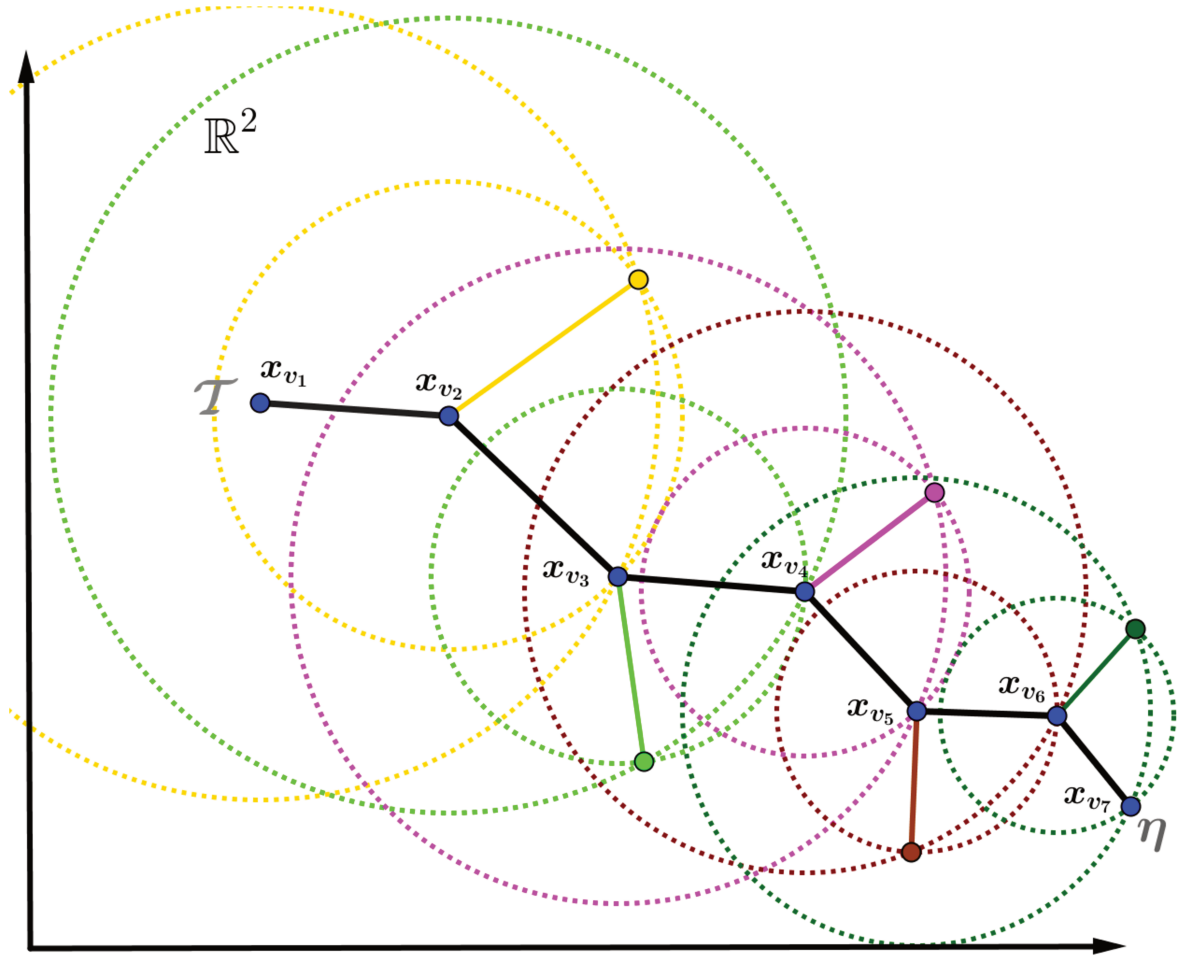


Figura 24 – Caminho η na árvore de discretização de um kDMDGP , com $k = 2$ e $n = 7$. Representado pela sequência de pontos $x_{v_1} \rightarrow x_{v_2} \rightarrow \cdots \rightarrow x_{v_7}$ em $\mathbb{R}^2$.

b) O conjunto de planos $\mathcal{P} = \{P_2, P_3, P_4, P_5, P_6\}$ associado à sequência de pontos $x_{v_1} \rightarrow x_{v_2} \rightarrow \cdots \rightarrow x_{v_7}$ em $\mathbb{R}^2$ está ilustrado abaixo na Figura 25, com suas devidas equações.

3.3.1 Simetria

Vimos na Subseção 3.2.2 que a operação de reflexão no modelo conforme é representada por uma operação geométrica adjunta de versor no objeto a ser refletido, ou seja, para todo $x_{v_q} \in \mathbb{R}^k$ associado a uma realização de um dado kDMDGP , tal que $\rho(v_q) > k$ em V , seu representante $X_{v_q} \in \mathbb{H}_a^k$ possui um simétrico $X_{v_q}^{Sym_j} \in \mathbb{H}_a^k$ (¹reflexo) em relação ao plano $P_j \in \mathcal{P}$ determinado pelos vetores nulos $X_{v_j}, X_{v_{j-1}}, \dots, X_{v_{j-k+1}}, e_\infty$,

¹ Note na Figura 25 que $x_{v_i}^{Sym_{i-1}}$ é simétrico a x_{v_i} em relação a P_{i-1} , para todo $i = 3, 4, 5, 6, 7$.

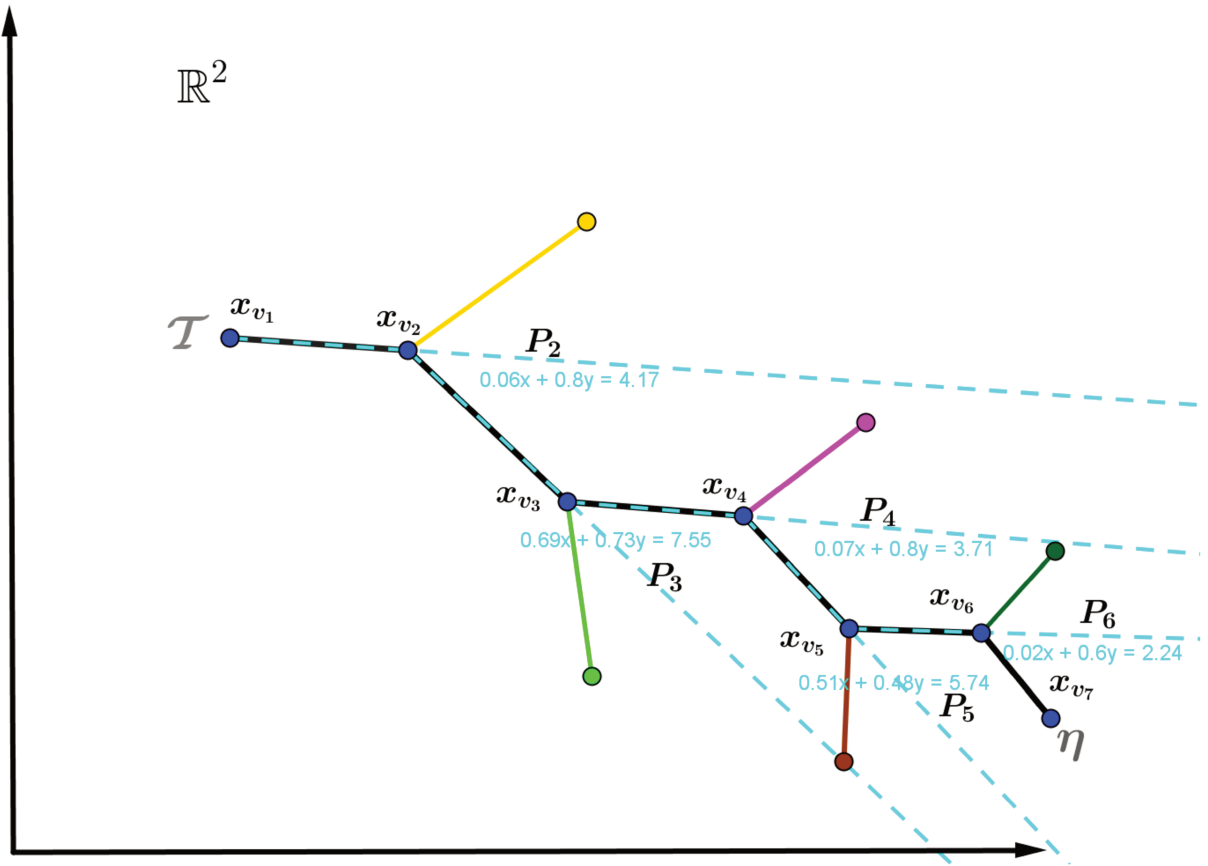


Figura 25 – Conjunto de planos $\mathcal{P} = \{P_2, P_3, P_4, P_5, P_6\}$ associado ao caminho η em $\mathbb{H}_a^2$, representado pela sequência de pontos $x_{v_1} \rightarrow x_{v_2} \rightarrow \dots \rightarrow x_{v_7}$ em $\mathbb{R}^2$.

que representam em $\mathbb{H}_a^k$ vértices predecessores a v_q em V e são associados ao caminho η que representa à realização dada. Matematicamente temos,

$$X_{v_q}^{Sym_j} = P_j X_{v_q} P_j. \quad (3.10)$$

Consequentemente, existe um ponto simétrico a x_{v_q} em $\mathbb{R}^k$, em relação ao hiperplano gerado pelos pontos $x_{v_j}, x_{v_{j-1}}, \dots, x_{v_{j-k+1}} \in \mathbb{R}^k$, tal que $\rho(v_j) < \rho(v_q) - k + 1$.

Lema 3.3.2. Sejam $X_p, X_q \in \mathbb{H}_a^k$ fixos em um caminho η , representando uma realização de G em $\mathbb{R}^k$ na árvore de busca do kDMDGP associado e, $P_j = n + de_\infty$, com $\|n\|_2 = 1$ um plano associado a η , tal que $j < p < q$. Se $X_p^{Sym_j}, X_q^{Sym_j} \in \mathbb{H}_a^k$ são simétricos a X_p e X_q em relação a P_j respectivamente, então, vale a seguinte identidade

$$\|X_q^{Sym_j} - X_p^{Sym_j}\|_M^2 = \|X_q - X_p\|_M^2,$$

onde $\|\cdot\|_M$ é a métrica de Minkowski.

Demonstração. De fato, temos que

$$\begin{aligned}
\|X_q^{\text{Sym}_j} - X_p^{\text{Sym}_j}\|_M^2 &= (X_q^{\text{Sym}_j} - X_p^{\text{Sym}_j}) \cdot (X_q^{\text{Sym}_j} - X_p^{\text{Sym}_j}) \\
&= X_q^{\text{Sym}_j} \cdot X_q^{\text{Sym}_j} - 2X_q^{\text{Sym}_j} \cdot X_p^{\text{Sym}_j} + X_p^{\text{Sym}_j} \cdot X_p^{\text{Sym}_j} \\
&= -2 \left(-\frac{1}{2}(z_1 - z_2)^2 \right) \\
&= \|z_1 - z_2\|_2^2,
\end{aligned}$$

com $z_1 = x_p + 2(d - n \cdot x_p)n$ e $z_2 = x_q + 2(d - n \cdot x_q)n$. Assim, continuando o desenvolvendo acima, temos

$$\begin{aligned}
\|z_1 - z_2\|_2^2 &= \|(x_q - x_p) - 2[(x_q - x_p) \cdot n]n\|_2^2 \\
&= \|x_q - x_p\|_2^2 - 4\|x_q - x_p\|_2^2\|n\|_2^2 + 4(\|x_q - x_p\|_2^2\|n\|_2^2)\|n\|_2^2 \\
&= \|x_q - x_p\|_2^2,
\end{aligned}$$

visto que $\|n\|_2 = 1$. Logo,

$$\|X_q^{\text{Sym}_j} - X_p^{\text{Sym}_j}\|_M^2 = \|x_q - x_p\|_2^2.$$

Por outro lado, segue do Teorema 2.5.8 que

$$\|X_q - X_p\|_M^2 = \|x_q - x_p\|_2^2,$$

donde vem o resultado. $\square$

Considerando que todo ponto em $\mathbb{R}^k$ sempre pode ser refletido por um hiperplano, segue o resultado que garante a existência de realizações refletidas por hiperplanos associados a um caminho na árvore $(\mathcal{T})$ de busca associada a um ${}^k\text{DMDGP}$.

Teorema 3.3.3. (Existência) Seja $x = (x_{v_1}, \dots, x_{v_j}, x_{v_{j+1}}, \dots, x_{v_n})$ uma realização do grafo G em $\mathbb{R}^k$ associada a uma instância ${}^k\text{DMDGP}$, representada pelo caminho η em $\mathcal{C}_{k+1,1}$ descrito pela sequência $(X_{v_1}, \dots, X_{v_j}, X_{v_{j+1}}, \dots, X_{v_n})$. Se P_j é um plano no conjunto de planos $\mathcal{P}$ associado a η , então existe uma outra realização y para o grafo G em $\mathbb{R}^k$ que define um novo caminho na árvore $\mathcal{T}$, representado por uma sequência η_j parcialmente refletida de η em relação à P_j , a partir do nível j , dada por

$$y = (x_{v_1}, \dots, x_{v_j}, x_{v_{j+1}}^{\text{Sym}_j}, \dots, x_{v_n}^{\text{Sym}_j}).$$

Demonstração. Segue do conjunto de planos dado pela Equação (3.9) que $P_j = (-1)^k \frac{e_\infty \cdot D_j}{\|e_\infty \cdot D_j\|}$, onde, $D_j = (S_j \wedge S_{j-1} \wedge \dots \wedge S_{j-k+1})^*$.

Para obter η_j , utilizamos a Equação (3.10) de maneira recorrente nas entradas da sequência η a partir do vetor nulo de índice $j + 1$, ou seja,

$$X_{v_{j+1}}^{Sym_j} = P_j X_{v_{j+1}} P_j, X_{v_{j+2}}^{Sym_j} = P_j X_{v_{j+2}} P_j, \dots, X_{v_n}^{Sym_j} = P_j X_{v_n} P_j.$$

Assim, η_j é representado pela sequência $(X_{v_1}, \dots, X_{v_j}, X_{v_{j+1}}^{Sym_j}, \dots, X_{v_n}^{Sym_j})$. Segue do Lema 3.3.2 que

$$d(x_{v_p}, x_{v_{p+1}}) = d(x_{v_p}^{Sym_j}, x_{v_{p+1}}^{Sym_j}),$$

bastando tomar $q = p + 1$, para todo $p = j + 1, \dots, n$. Portanto, aplicando a transformação inversa em cada vetor nulo de η_j , definida pela Equação (2.55), obtemos a realização y , o que conclui o resultado. $\square$

Corolário 3.3.4. Se a sequência x no Teorema 3.3.3 for uma realização válida do grafo G em $\mathbb{R}^k$ e se, $j \neq k$, então a realização y , também é uma realização válida, isto é, ambas são soluções para o ${}^k\text{DMDGP}$ associado.

Demonstração. Vimos que x e y satisfazem as restrições de distâncias do ${}^k\text{DMDGP}$ associado, logo y também é uma realização válida. E mais, $j \neq k$, ou seja, $P_j \neq P_k$, donde vem que y não é congruente a x . Portanto, y é uma nova solução para o ${}^k\text{DMDGP}$ associado. $\square$

Corolário 3.3.5. Seja η um caminho na árvore $\mathcal{T}$ de discretização de uma dada instância ${}^k\text{DMDGP}$. Se η_j é o caminho em $\mathcal{T}$ associado ao plano P_j , então $\eta_{j_j} = \eta$.

Demonstração. De fato, basta observar que para todo $i > j$, temos

$$\begin{aligned} (X_i^{Sym_j})^{Sym_j} &= P_j(P_j X_i P_j) P_j \\ &= (P_j P_j) X_i (P_j P_j) \\ &= X_i, \end{aligned}$$

visto que $P_j P_j = 1$. $\square$

Exemplo 3.3.6. Considere os dados do Exemplo 3.3.1. A Figura 26 ilustra todos os possíveis caminhos η_j que representam realizações incongruentes de G em $\mathbb{R}^2$ na árvore de busca do ${}^2\text{DMDGP}$.

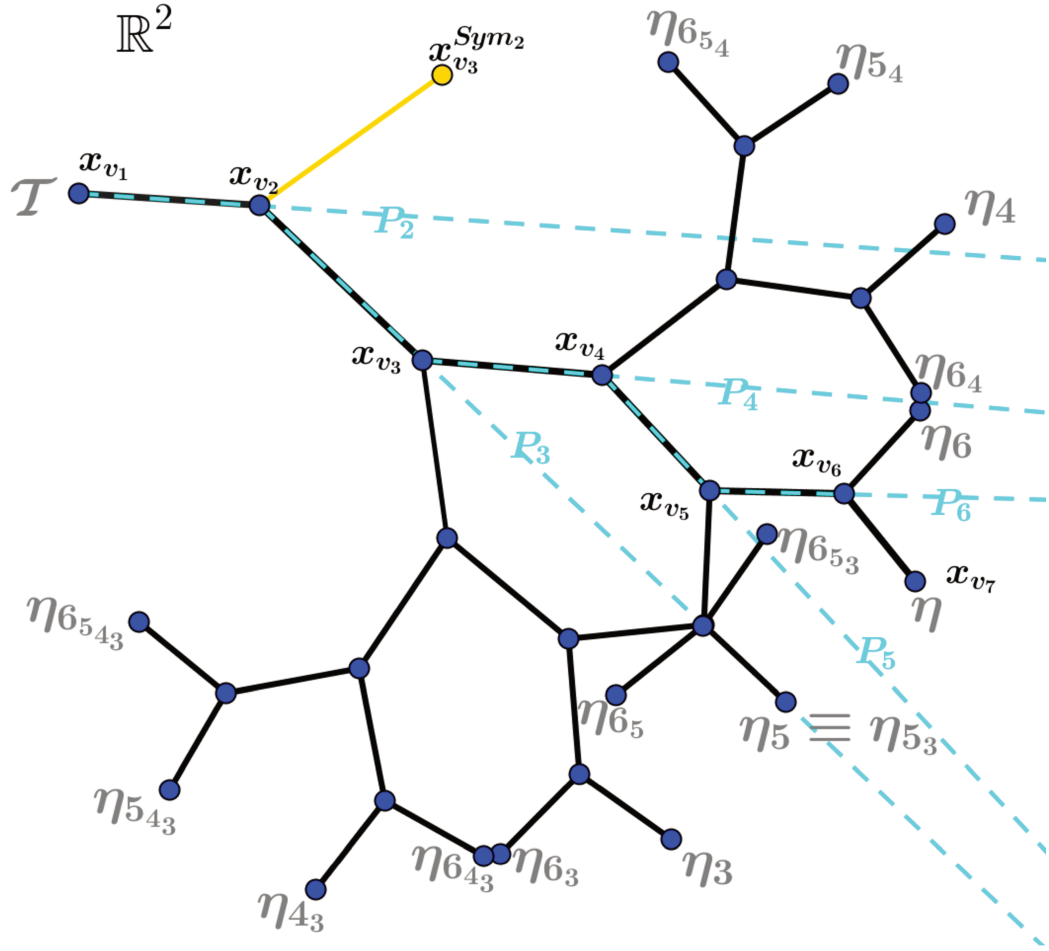


Figura 26 – Em preto, com pontos em azul, todas as possíveis realizações incongruentes do Exemplo 3.3.1, e em azul claro, os respectivos planos associados à η .

3.3.2 Distâncias Adicionais e Factibilidade

Cada $x_q \in \mathbb{R}^k$, obtido no processo de discretização da árvore de busca de uma dada instância k DMDGP, deve passar por um processo de verificação, cujo objetivo é avaliar sua viabilidade como parte de uma possível solução. O processo se resume em: x_q é aceito como ponto viável da realização parcial $\bar{x}$ ($\bar{x} = (x_1, \dots, x_{q-1}) \subset \mathbb{R}^{kn}$) do grafo G em $\mathbb{R}^k$, se cumpre as restrições de distância do conjunto de distâncias adicionais. Mais especificamente, se $d_{i,q} \in \mathcal{F}$, devemos conferir se a condição

$$|d_{i,q} - \|x_i - x_q\|| < \varepsilon_i \quad (3.11)$$

é verificada para todo $i \in \{1, \dots, q - (k + 1); d_{i,q} > 0\}$. Uma vez que um ponto é aceito, ele é imediatamente adicionado à realização parcial. Ou seja, temos uma nova subsequência acrescida de x_q , isto é, $(x_1, \dots, x_{q-1}, x_q) \subset \mathbb{R}^{kn}$. Este é um processo básico que surge naturalmente do supracitado problema, quando aplicado a situações práticas.

Definição 3.3.7. (Esfera Adicional) Sejam d_{pq} , com $p < q - k$, uma distância adicional em um kDMDGP , isto é, distância entre os níveis p e q da árvore $(\mathcal{T})$ de busca na sua discretização e η a representação de um caminho de $\mathcal{T}$ no modelo conforme. Fixando X_p em η , representando o nível p de $\mathcal{T}$, chamamos de *esfera adicional associada a d_{pq}* , a esfera cujo centro é $x_p \in \mathbb{R}^k$ e o raio é $r = d_{pq}$. Sua representante em $\mathcal{Cl}_{k+1,1}$, via IPNS, é dada pela equação

$$S_{a_p} = X_p - \frac{1}{2}d_{pq}^2 e_\infty. \quad (3.12)$$

Teorema 3.3.8. Seja $d_{pq} \in \mathcal{F}$, uma distância adicional² em uma instância kDMDGP . Considere um ponto $x_q \in \mathbb{R}^k$ no nível q da árvore de discretização. Então, x_q é factível se, e somente se, satisfaz a restrição de distância d_{pq} , isto é, seu representante $X_q \in \mathbb{H}_a^k$ pertence a esfera adicional S_{a_p} em $\mathcal{Cl}_{k+1,1}$.

Demonstração. Temos que,

$$X_q = x_q + \frac{1}{2}x_q^2 e_\infty + e_0 \quad \text{e} \quad S_{a_p} = X_p - \frac{1}{2}r^2 e_\infty.$$

Segue da Propriedade 2.5.26, que $X_q \in S_{a_p}$ é equivalente a $X_q \cdot S_{a_p} = 0$, por outro lado, segue da Propriedade 2.5.24 que:

$$\begin{aligned} X_q \cdot S_{a_p} &= X_q \cdot \left(X_p - \frac{1}{2}r^2 e_\infty \right) \\ &= X_q \cdot X_p - \frac{1}{2}r^2 (X_q \cdot e_\infty) \\ &= X_q \cdot X_p + \frac{1}{2}r^2 \\ &= -\frac{1}{2}d_{pq}^2 + \frac{1}{2}r^2. \end{aligned}$$

Portanto, x_q é um ponto factível se, e somente se, $r = d_{pq}$. O que conclui o resultado. $\square$

Exemplo 3.3.9. Considerando a hipótese adicional $\mathcal{F} = \{d_{47}\}$ no item ii) do Exemplo 3.3.1, representamos através da ilustração dada na Figura 27 os possíveis caminhos na árvore a partir do quarto nível que satisfaz a restrição de distância adicional.

Note que, no nível q , temos x_q e $x_q^{Sym_{q-1}}$ associado a η na árvore, porém $d_a(x_{v_p}, x_{v_q}) \neq d_a(x_{v_p}, x_{v_q}^{Sym_{q-1}})$, logo, ou uma, ou outra, deve satisfazer a distância adicional d_{pq} .

² Vale lembrar que a distância d_{pq} refere-se a distância entre o ponto x_p fixo por um caminho no nível p e o nível q da árvore de busca $\mathcal{T}$.

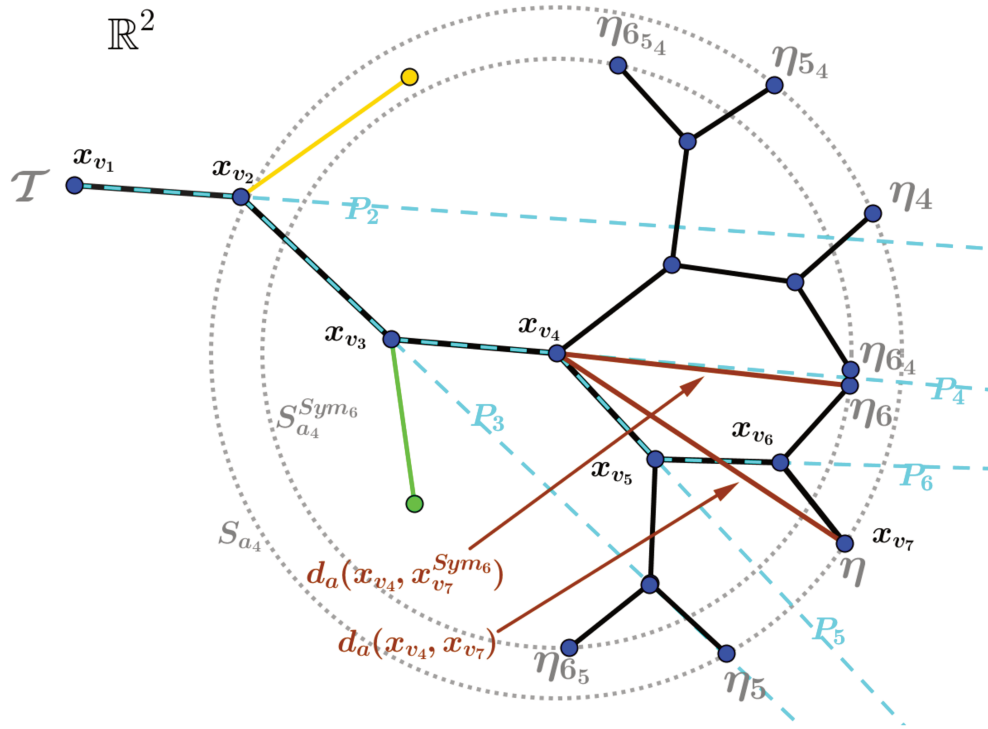


Figura 27 – Visualização em roxo das possíveis distâncias adicionais entre os níveis 4 e 7 no caminho fixado por x_{v4} e, também, os caminhos refletidos pelos planos P_4, P_5 e P_6 que podem satisfazer a distância adicional.

Corolário 3.3.10. Suponha que existam duas distâncias adicionais d_{iq} e d_{jq} ao nível q . Então, x_q pertence a interseção das esferas adicionais S_{a_i} e S_{a_j} .

Demonstração. Pelo Teorema 3.3.8, segue que $x_q \in S_{a_i}$ e $x_q \in S_{a_j}$, donde vem o resultado. $\square$

Observação 3.3.11. O corolário acima pode, sem perda de generalidade, ser estendido para três ou mais distâncias adicionais. É claro que a interseção de $k + 1$ esferas em $\mathbb{R}^k$ fornece um único ponto, indicado em CGA na Tabela 8. Portanto, o conjunto unitário $\{X_q\}$ é exatamente a interseção entre $k + 1$, ou mais, esferas no modelo conforme.

A Observação 3.3.11, aliada aos resultados acima, motiva um teste de viabilidade que depende apenas do número de esferas adicionais, sistematizado na forma de um algoritmo intitulado por *Factibility test*, inicializado a partir do nível q , dado que existam distâncias adicionais até este nível.

Algoritmo 1: *Factibility test*

Dados de entrada: Todas as distâncias adicionais, $d_{iq} \in \mathcal{F}$, ao nível q ;

Passo 0: Calcule $C = \cap_{i=1}^r S_{a_i}$, com $r \leq k + 1$;

- Se $C = \emptyset$, então exiba a mensagem "Problema sem solução";
- Senão, avance ao passo 1;

Passo 1: Calcule $t = X_q \cdot C$;

Passo 2:

- Se $t = 0$, então $X_q \in C$, i.e. X_q é factível;
- Senão, X_q é infactível.

3.3.3 Número de Soluções

Sejam $\mathcal{T}$ a árvore de busca associada a uma instância kDMDGP e $\mathcal{P}$ o conjunto de planos em $\mathcal{C}_{k+1,1}$ associado a um caminho η representado em $\mathcal{T}$. Considere os seguintes itens:

- Se $\mathcal{F}$ é o conjunto de distâncias adicionais associado ao kDMDGP , então $\bigcup_{j=k+2}^n \mathcal{F}_j$, onde $\mathcal{F}_j = \{d_{pj} \in \mathcal{F} / p = 1, \dots, j\}$, é uma partição de $\mathcal{F}$ associada aos níveis de $\mathcal{T}$;
- Para todo $\mathcal{F}_j$, associe o conjunto de planos $\mathcal{P}_j = \{P_{p_{min}+k}, \dots, P_{j-1}\}$, onde p_{min} é o menor índice p , tal que $d_{pj} \in \mathcal{F}_j$;

Note que $\mathcal{P}_j \subsetneq \mathcal{P}$ e, além disso, $\mathcal{F}_j = \emptyset$ implica em $\mathcal{P}_j = \emptyset$.

O número de realizações válidas de G em $\mathbb{R}^k$, associado à uma instância kDMDGP dada, está diretamente ligado à quantidade de planos no conjunto $\mathcal{P}$ associado à um caminho η em $\mathcal{C}_{k+1,1}$, que representa uma de suas realizações válidas na árvore de busca do dado kDMDGP . Os resultados abaixo estabelecem esta quantidade de planos e permitem quantificar o número de soluções de uma instância kDMDGP .

Teorema 3.3.12. Sejam $G = (V, E, d)$ um grafo simples, ponderado associado a uma instância kDMDGP , com $|V| = n$, uma ordem total em V representada por $v_1, \dots, v_n$ e o caminho η em $\mathcal{T}$, representando uma realização válida de G em $\mathbb{R}^k$. Se existe uma distância adicional d_{pq} em $\mathcal{F}_q \subset \mathcal{F}$, então o conjunto de planos $\mathcal{P} = \{P_i | i = k, \dots, n-1\}$, associado a η , se reduz ao seu subconjunto $\overline{\mathcal{P}} = \{P_i | i = k, \dots, p+k-1, q, \dots, n-1\}$, ou seja, $\overline{\mathcal{P}} = \mathcal{P} - \mathcal{P}_q$.

Demonstração. Seja S_{a_p} a esfera adicional representada, via IPNS, em $\mathcal{C}_{k+1,1}$, centrada em $X_p \in \eta$ e com raio d_{pq} . Sabemos que o produto *meet* genérico entre k esferas, dado

pela equação,

$$Pp = S_{r-1} \wedge \cdots \wedge S_{r-k}; \quad \forall r > k, \quad (3.13)$$

representa o par de vetores nulos $X_r, X_r^{Sym_{r-1}} \in \mathbb{H}_a^k$, com $X_r^{Sym_{r-1}} = P_{r-1}X_rP_{r-1}$ ou $X_r = P_{r-1}X_r^{Sym_{r-1}}P_{r-1}$, (Observação 3.2.4). Temos também, que $d(x_{v_p}, x_{v_r}) \neq d(x_{v_p}, x_{v_r}^{Sym_{r-1}})$ se $X_p \notin P_{r-1}$ (Observação 1.4.1).

De maneira indutiva, suponha $r = q$, devido a esfera adicional S_{a_p} , só existe uma possibilidade para o q –ésimo vetor nulo em η , que satisfaz a restrição de distância d_{pq} , visto que ele pode ser obtido de maneira direta por meio do produto *meet* de $k + 1$ esferas, definido pela equação,

$$Pp = S_{a_p} \wedge S_{q-1} \wedge \cdots \wedge S_{q-k}. \quad (3.14)$$

Consequentemente, $x_{v_q} \in \mathbb{R}^k$ é representado por X_q ou $X_q^{Sym_{q-1}}$, fixando em η esse vetor nulo. E mais, isso nos leva a concluir que o plano P_{q-1} deve ser excluído do conjunto $\mathcal{P}$ associado a η .

Supondo $r = q - 1$, segue da Equação 3.13 que $x_{v_{q-1}}$ é representado por X_{q-1} ou $X_{q-1}^{Sym_{q-2}}$ em η , visto que, a unicidade da representação de x_{v_q} implica que só um dos vetores nulos deve satisfazer as restrições de distâncias $d_{q-1,q}$ e $d_{p,q-1}$, por estarem em lados opostos do plano P_{q-2} . Donde vem, que o plano P_{q-2} também deve ser excluído do conjunto $\mathcal{P}$.

De maneira recorrente, os planos P_{r-1} com $r = q - 2, \dots, p + k + 1$ devem ser excluídos do conjunto de planos $\mathcal{P}$, dado que as representações únicas em $\mathcal{Cl}_{k+1,1}$, fixadas uma a uma em η , dos pontos x_{v_r} , com $r = q - 1, \dots, p + k + 2$, são X_r ou $X_r^{Sym_{r-1}}$, com $r = q - 2, \dots, p + k + 1$, dado que eles pertencem a lados opostos dos respectivos planos P_{r-1} .

Note que, se $r = p + i$ com $i = k, k - 1, \dots, 0$, os planos P_{p+i-1} não devem ser excluídos do conjunto de planos $\mathcal{P}$, pois $X_p \in P_{p+i-1}$, o que implica em $d(x_{v_p}, x_{v_q}) = d(x_{v_p}, x_{v_q}^{Sym_{p+i-1}})$ e $d(x_{v_p}, x_{v_{p+i}}) = d(x_{v_p}, x_{v_{p+i}}^{Sym_{p+i-1}})$. E mais, segue do Lema 3.3.2 que,

$$d(x_{v_{p+i}}, x_{v_q}) = d(x_{v_{p+i}}^{Sym_{p+i-1}}, x_{v_q}^{Sym_{p+i-1}}).$$

Portanto, as duas representações X_{p+i} e $X_{p+i}^{Sym_{p+i-1}}$ em $\mathcal{Cl}_{k+1,1}$ para $x_{v_{p+i}}$, satisfazem as restrições de distâncias $d_{p+i,q}$ e $d_{p,p+i}$ para todo $i = k, k - 1, \dots, 0$, o que conclui o resultado. $\square$

Corolário 3.3.13. Nas condições do Teorema 3.3.12, a tese pode ser generalizada para: Se $d_{pq_i} \in \mathcal{F}$, os conjuntos $\mathcal{P}_{q_i} = \{P_j / j = p_{min} + k, \dots, q_i - 1\}$ são subtraídos do conjunto de planos $\mathcal{P}$, ou seja,

$$\overline{\mathcal{P}} = \mathcal{P} - \bigcup_{\forall i} \mathcal{P}_{q_i}, \quad \text{com } p_{min} + k < q_i \leq n - 1.$$

Demonstração. A demonstração se dá associando a cada $\mathcal{F}_{q_i}$ o conjunto $\mathcal{P}_{q_i}$ e aplicando o Teorema 3.3.12 para cada i . $\square$

Observação 3.3.14. Note que sempre temos $\mathcal{P} \neq \emptyset$, visto que para todo $d_{i,k}$, $i+k \geq k+1$, ou seja, ao menos devemos ter $\mathcal{P} = \{P_k\}$.

Teorema 3.3.15. Sejam $G = (V, E, d)$ um grafo não ponderado associado a uma instância kDMDGP , com $|V| = n$, e uma ordem total em V representada por $v_1, \dots, v_n$. Se o kDMDGP possui realizações válidas para G em $\mathbb{R}^k$, então o número de soluções para esta instância é $2^{|\overline{\mathcal{P}}|-1}$.

Demonstração. Com efeito, seja $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ uma realização válida para o kDMDGP que representaremos por η em $\mathcal{C}l_{k+1,1}$ e, seja $\mathcal{P}$ seu conjunto de planos associados.

Suponha que $\bigcup_i \mathcal{P}_{q_i} = \{P_{k+1}, \dots, P_{n-1}\}$, o que implica em $\overline{\mathcal{P}} = \{P_k\}$, logo pelo Teorema (3.3.3) existe uma outra realização válida $y = (x_1, x_2, x_3, x_4^{sym_k}, \dots, x_n^{sym_k})$, entretanto, pela Definição 1.1.5 segue que x e y são realizações congruentes e nestas condições, o kDMDGP possui apenas uma solução, isto é, $2^0 = 2^{|\overline{\mathcal{P}}|-1}$.

De maneira análoga suponha $|\overline{\mathcal{P}}| = 2$, ou seja, $\overline{\mathcal{P}} = \{P_k, P_j\}$ para algum $j = k+1, \dots, n-1$, ou ainda, $\overline{\mathcal{P}} = \{P_k\} \cup \{P_j\}$. Como $x \equiv y$, segue novamente do Teorema (3.3.3) mais uma solução, a partir de x ou y associada a P_j representada pelo caminho η_j , conseqüentemente, o kDMDGP possui duas soluções, isto é, $2^{|\overline{\mathcal{P}}|-1}$ soluções.

Prosseguindo com o argumento combinatório, segue que, cada plano a mais no subconjunto de planos $\overline{\mathcal{P}} \subset \mathcal{P}$, temos o número de soluções multiplicado por dois, ou seja, se $|\overline{\mathcal{P}}| = r$ (ou $\overline{\mathcal{P}} = \{P_k\} \cup \{P_{i_1}\} \cup \dots \cup \{P_{i_{r-1}}\}$), devemos ter pelo Teorema (3.3.3), $\underbrace{2 \times 2 \times \dots \times 2}_{(r-1)\text{-vezes}} = 2^{|\overline{\mathcal{P}}|-1}$ soluções para o kDMDGP , o que conclui o resultado. $\square$

Exemplo 3.3.16. Considerando a hipótese adicional $\mathcal{F} = \{d_{27} = d_a(x_{v_2}, x_{v_7}), d_{47} = d_a(x_{v_4}, x_{v_7})\}$ no item ii), no Exemplo 3.3.1, o número de soluções do 2DMDGP é ilustrado pela Figura 28.

Note que, de acordo com a Figura 28, temos que o conjunto $\mathcal{F} = \bigcup_{i=4}^7 \mathcal{F}_i$, onde cada $\mathcal{F}_j$ é dado por

$$\mathcal{F}_4 = \mathcal{F}_5 = \mathcal{F}_6 = \emptyset$$

e

$$\mathcal{F}_7 = \{d_a(x_{v_2}, x_{v_7}), d_a(x_{v_4}, x_{v_7})\}.$$

Então, a relação de associação se dá apenas no nível 7 da árvore de busca, por

$$\mathcal{F}_7 \longleftrightarrow \mathcal{P}_7 = \{P_4, P_5, P_6\}.$$

Algoritmo 2: C-SymBP

Dados de entrada: $k > 0$; matriz de distâncias $A_{n \times n}$; realização parcial $\bar{x} = (x_{v_1}, \dots, x_{v_k})$ dos k primeiros vértices; tolerância estabelecida $\epsilon > 0$.

Passo 0: Calcule a imersão de $\bar{x}$ em $\mathbb{H}_a^k$, pela Equação (2.54) aplicada a cada x_{v_i} ;

Passo 1: $\mathcal{P} := \{\}$;

Passo 2: $i \leftarrow k + 1$;

Passo 3: Calcule Pp e resgate X_i^0 e X_i^1 por meio da Fórmula 3.2.1;

Passo 4: Faça $X_i \leftarrow X_i^0$;

Passo 5: Teste a factibilidade de X_i de acordo com o Algoritmo 1 *Factibility test*;

Passo 6: Se X_i resultou em factível no passo 5, faça
 $i \leftarrow i + 1$;
 Se $i = n$, então $(X_1, \dots, X_n)$ é uma solução, avance ao passo 7;
 Senão, $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \cup \{P_i\}$ e, volte ao passo 3;
 Senão, encontre t tal que $t = \max\{j \mid j = k + 1, \dots, i \text{ e } X_j = X_j^0\}$ e faça
 $i \leftarrow t$;
 Se $i = k + 1$, então pare e exiba a mensagem "Problema sem solução";
 Senão, faça $X_i = X_i^1$ e volte ao passo 5;

Passo 7: $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} - \bigcup_q \mathcal{P}_{p_{min}, q}$, para todo $d_{pq} \in \mathcal{F}$;

Passo 8: Realizar reflexões nos elementos de $\mathcal{P}$ para obter as demais soluções.

Devemos observar que, na prática, temos pontos em $\mathbb{R}^k$ e estes são imersos no espaço conforme. Assim, os pontos X_i^0 e X_i^1 , estão no espaço conforme, mas obter um representante em $\mathbb{R}^k$ é trivial.

4 Cálculo de Estrutura de Proteínas via CGA

As moléculas de proteínas são necessárias para o funcionamento de uma célula, entretanto, para que possam ser usadas, elas precisam se "dobrar" numa determinada forma tridimensional específica. Determinar esta estrutura tridimensional é um fator chave para o entendimento das suas propriedades bioquímicas, entretanto, existem duas maneiras de determinar sua estrutura experimentalmente: por meio de técnicas de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) ou técnicas de Cristalografia de Raios X (BRÜNGER; NILGES, 1993). Nosso trabalho se baseia em dados da primeira, mas de maneira geral, a RMN fornece apenas um conjunto esparsa de distâncias entre os átomos da molécula. Assim, o problema se resume a determinar sua estrutura usando as informação sobre distâncias obtidas por RMN.

4.1 Estrutura Principal da Proteína

Proteínas são macromoléculas geradas a partir de ligações peptídicas entre aminoácidos (Figura 29). O processo químico que une os aminoácidos na formação da proteína é conhecido por hidrólise por envolver a quebra de uma molécula por ação da molécula de água, formando a cadeia principal da proteína por meio de sequências $N - C_\alpha - C \cdots N - C_\alpha - C$, representada pelas Figuras 30 e 31.

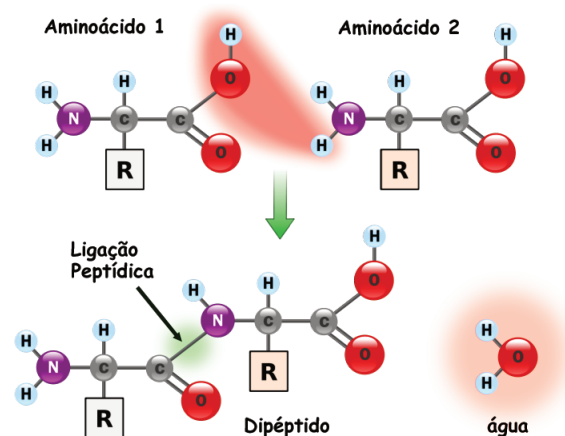


Figura 29 – *Ligações peptídicas entre aminoácidos*(NELSON; COX, 2013).

O cálculo estrutural desta cadeia principal pode ser modelado por um k DMDGP, onde $k = 3$, conhecido na literatura simplesmente por DMDGP, o qual trata-se da determinação de coordenadas cartesianas (x, y, z) de pontos no $\mathbb{R}^3$, quando são dadas distâncias

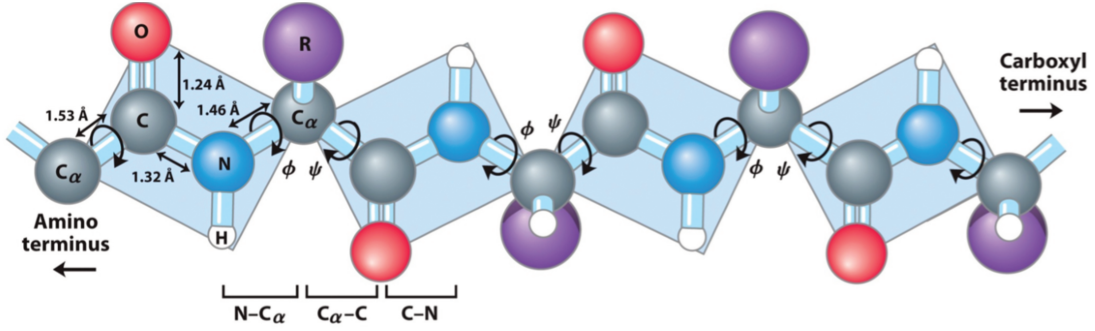


Figura 30 – Proteína hipotética $\mathcal{M}$, onde ϕ e ψ representam rotações em torno de ligações a partir do carbono central do aminoácido C_α e dão origem aos ângulos de torção (NELSON; COX, 2013).

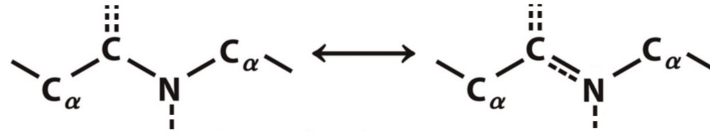


Figura 31 – Cadeia principal de $\mathcal{M}$.

entre pontos consecutivos e ângulos de dobra. De modo geral, segundo a ordem em V , as distâncias $d_{j-1,j}$ entre vértices do grafo G estão associadas aos comprimentos de ligação entre os átomos da molécula de proteína, para todo $j \in \{2, \dots, n\}$, e os ângulos $\theta_{j-2,j}$ entre os vértices v_{j-2}, v_{j-1}, v_j estão associados aos ângulos de ligação da molécula, para $j \in \{3, \dots, n\}$.

As proteínas possuem conformações que se dobras no espaço de modo específico, entretanto, experimentos de ressonância magnética nuclear são capazes de detectar distâncias entre átomos que estejam a uma distância média de cinco angstroms ($5\text{\AA}$), embora essas imagens sejam fornecidas em um plano, não em $3D$. É possível fazer simulações matemáticas de modo a encaixar os comprimentos e ângulos obtidos da RMN em estruturas tridimensionais que satisfaçam as condições de mínima energia, ou seja, que reproduzam a molécula tridimensional no seu estado nativo, ou "ideal" (LIBERTI et al., 2014). Isto permite uma modelagem do problema de cálculo estrutural de proteínas via um 3DMDGP .

A Figura 32 ilustra uma esfera de raio $5\text{\AA}$ centrada no representante em $\mathbb{R}^3$ de um dado átomo da molécula, evidenciando os dados de distâncias necessários na formulação do $DMDGP$, ou seja, é possível conhecer a priori todas distâncias entre quatro átomos consecutivos. E mais, muitas vezes dependendo do dobramento da molécula é possível obter distâncias adicionais ao problema.

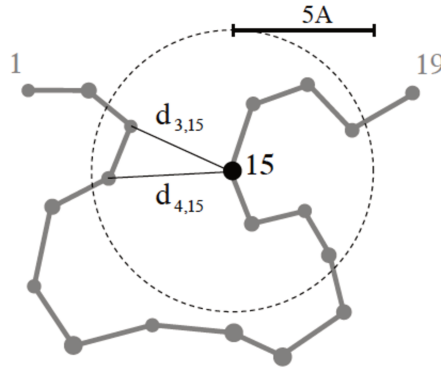


Figura 32 – Ilustração em 2D de uma esfera com raio $5\text{\AA}$, centralizada no representante do décimo quinto átomo, simulando experimentos de RMN aplicados a uma proteína hipotética com 19 átomos. (LIBERTI et al., 2014)

Note que todas as distâncias internas à circunferência são detectadas pela RMN. Se acontecer de todas as distâncias do problema serem detectadas pela RMN, o problema será resolvido em tempo linear (DONG; WU, 2002). E mais, se a ordem sobre os átomos da molécula for dada de tal modo que todo conjunto de cinco átomos formem uma clique no grafo G , o problema é resolvido em tempo polinomial (EREN et al., 2004). Mas de modo geral, temos que o problema é NP-difícil (SAXE, 1979).

O processo de discretização do espaço de busca no problema de cálculo estrutural de proteínas é exemplificado abaixo na Figura 33, que indica que o representante do i -ésimo átomo em $\mathbb{R}^3$ pertence a interseção de três esferas, cujos centros e raios são representados pelos átomos $i-3$, $i-2$ e $i-1$ e as distâncias $d_{i-3,i}$, $d_{i-1,i}$ e $d_{i-2,i}$, respectivamente.

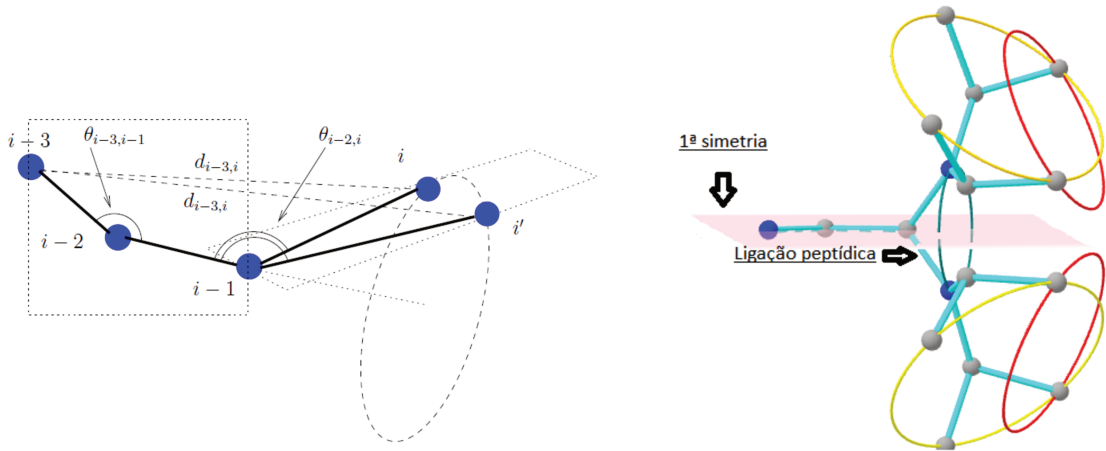


Figura 33 – A esquerda: O átomo i pode estar somente em duas posições (i e i') para ser "viável" com a distância $d_{i-3,i}$. A direita: Ilustração das possíveis conformações da cadeia principal de uma molécula formada por dois aminoácidos (árvore em 3D).

4.2 Branch-and-Prune (BP)

Considere uma molécula com n átomos na sua cadeia principal com coordenadas cartesianas dadas por $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^3$ e tal que exista uma ligação covalente entre todos os pares de átomos $(i, i+1)$, com $i = 1, \dots, n-1$, que denotaremos por r_{i+1} . Os ângulos de dobras $\theta_i \in [0, \pi]$ são os ângulos entre r_{i+1} e r_{i+2} , para todo $i = 1, \dots, n-2$. Os ângulos de torção $\omega_{i+3} \in [0, 2\pi]$ são os ângulos entre os vetores normais aos planos $P_{i+2} = [x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$, para todo $i = 1, \dots, n-2$. Veja Figura 34.

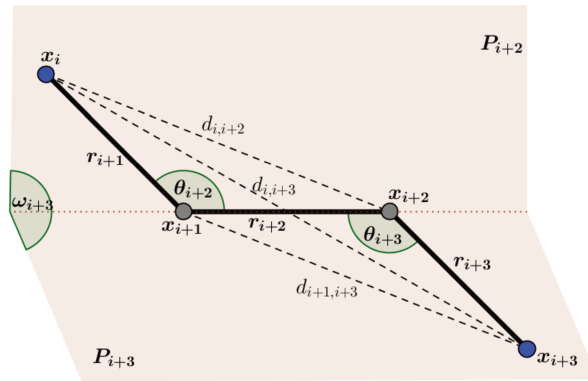


Figura 34 – Descrição dos ângulos de dobra ($\theta_{i's}$), ângulo de torção (ω_i) e comprimentos de ligação ($r_{i's}$).

No cálculo estrutural de proteínas, todas as ligações covalentes e os ângulos de dobras são conhecidos a priori (PHILLIPS; ROSEN; WALKE, 1996). Logo, para cada quatro átomos consecutivos na cadeia principal da molécula $x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}$, o cosseno do ângulo de torção ω_{i+3} pode ser expresso em termos das distâncias $r_{i+1}, d_{i+1,i+3}, d_{i,i+3}$ e os ângulos de dobra θ_i, θ_{i+1} , por meio da equação (LIBERTI; LAVOR; MACULAN, 2008)

$$\cos \omega_{i+3} = \frac{r_{i+1}^2 + d_{i+1,i+3}^2 - 2r_{i+1} d_{i+1,i+3} \cos \theta_{i+2} \cos \theta_{i+3} - d_{i,i+3}^2}{2r_{i+1} d_{i+1,i+3} \sin \theta_{i+2} \sin \theta_{i+3}}. \quad (4.1)$$

Como todas as distâncias de ligações covalentes (r_i), os ângulos de dobras (θ_i) e as distâncias dos átomos separados por três ligações covalentes ($d_{i,i+3}$) são conhecidas a priori para todo $i = 1, \dots, n-3$, segue que a Equação (4.1) está bem definida, visto que o denominador é sempre diferente de zero.

4.2.1 O Algoritmo

No Branch-and-Prune, as coordenadas cartesianas (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) para cada átomo i na molécula são obtidos usando a seguinte fórmula (PHILLIPS; ROSEN; WALKE, 1996).

Fórmula 4.2.1.

$$\begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ 1 \end{bmatrix} = B_1 B_2 \cdots B_i \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (4.2)$$

onde

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & -r_2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_3 = \begin{bmatrix} -\cos \theta_3 & -\sin \theta_3 & 0 & -r_3 \cos \theta_3 \\ \sin \theta_3 & -\cos \theta_3 & 0 & r_3 \sin \theta_3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e

$$B_i = \begin{bmatrix} -\cos \theta_i & -\sin \theta_i & 0 & -r_i \cos \theta_i \\ \sin \theta_i \cos \omega_i & -\cos \theta_i \cos \omega_i & -\sin \omega_i & r_i \sin \theta_i \cos \omega_i \\ \sin \theta_i \sin \omega_i & -\cos \theta_i \sin \omega_i & \cos \omega_i & r_i \sin \theta_i \sin \omega_i \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad \forall i = 4, \dots, n. \quad (4.3)$$

Chamamos as matrizes $B_{i's}$ de *matrizes de torção* e denotamos a matriz $C_i = \prod_{j \leq i} B_j$ por *i-ésima matriz de torção acumulada*.

Usando os comprimentos de ligação covalente r_2, r_3 e o ângulo de dobra θ_3 , pode-se determinar as matrizes de torção B_2 e B_3 e obter

$$x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_2 = \begin{pmatrix} -r_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } x_3 = \begin{pmatrix} r_3 \cos \theta_3 - r_2 \\ r_3 \sin \theta_3 \\ 0 \end{pmatrix},$$

fixando os três primeiros átomos da molécula. Como a distância $d_{1,4}$ é conhecida, usando a Equação (4.1) pode-se obter o valor $\cos \omega_4$. Com isto, existem duas possibilidades para fixar x_4 , visto que existem dois valores para o seno, definidos por $\sin \omega_4 = \pm \sqrt{1 - \cos^2 \omega_4}$. Portanto,

$$(x_4, 1)^T = C_3 B_4 (0, 0, 0, 1)^T \text{ e } (x'_4, 1)^T = C_3 B'_4 (0, 0, 0, 1)^T, \quad (4.4)$$

onde C_3 é a terceira matriz de torção acumulada e B_4, B'_4 as respectivas matrizes de torção. Em termos de coordenadas cartesianas, tem-se

$$x_4 = \begin{bmatrix} -r_2 + r_3 \cos \theta_3 - r_4 \cos \theta_3 \cos \theta_4 + r_4 \sin \theta_3 \sin \theta_4 \cos \omega_4 \\ r_3 \sin \theta_3 - r_4 \sin \theta_3 \cos \theta_4 - r_4 \cos \theta_3 \sin \theta_4 \cos \omega_4 \\ -r_4 \sin \theta_4 \sqrt{1 - \cos^2 \omega_4} \end{bmatrix},$$

$$x'_4 = \begin{bmatrix} -r_2 + r_3 \cos \theta_3 - r_4 \cos \theta_3 \cos \theta_4 + r_4 \sin \theta_3 \sin \theta_4 \cos \omega_4 \\ r_3 \sin \theta_3 - r_4 \sin \theta_3 \cos \theta_4 - r_4 \cos \theta_3 \sin \theta_4 \cos \omega_4 \\ r_4 \sin \theta_4 \sqrt{1 - \cos^2 \omega_4} \end{bmatrix}.$$

Para o quinto átomo, podemos obter quatro possibilidades para seu posicionamento em $\mathbb{R}^3$, uma para cada combinação entre $\pm\sqrt{1 - \cos^2 \omega_4}$ e $\pm\sqrt{1 - \cos^2 \omega_5}$. Com este argumento combinatório, segue que existirá 2^{i-3} possibilidade de se posicionar o i –ésimo átomo da cadeia principal da molécula em $\mathbb{R}^3$.

4.2.1.1 Estrutura do BP

Seja $\mathcal{T}$ a representação da árvore de busca. $\mathcal{T}$ é inicializada pelos representantes dos três primeiros átomos segundo a ordem dada. Para cada passo existem quatro possibilidades:

1. Ambos, x_i e x'_i são viáveis, assim ambas as posições são armazenadas e exploradas de maneira mais profunda em $\mathcal{T}$;
2. Apenas x_i é viável, então a posição x_i é armazenada, enquanto que o ramo que contém x'_i é podado de $\mathcal{T}$;
3. Apenas x'_i é viável, então a posição x'_i é armazenada, enquanto que o ramo que contém x_i é podado de $\mathcal{T}$;
4. Nem x_i , nem x'_i é viável, logo todo o ramo da árvore é podado e o algoritmo retrocede ao nível $i - 1$ (*backtrack*) em $\mathcal{T}$.

Em cada nó de posto i , na árvore de busca $\mathcal{T}$ são armazenados:

- A posição $x_i \in \mathbb{R}^3$ para o i –ésimo átomo;
- A matriz de torção acumulativa $C_i = \prod_{j=1}^i B_j$;
- Um ponteiro $P(i)$ para o nó de saída;
- Ponteiros para os sub-nós $L(i)$ e $R(i)$ (inicializado de maneira fictícia e podado se são inviáveis).

Note que a estrutura de extremidade (nós folhas) da árvore de busca $\mathcal{T}$ é codificada nos operadores $P()$, $L()$ e $R()$ definidos para cada nó de saída. O procedimento é recursivo no nível $i - 1$.

Seja $y = (0, 0, 0, 1)^T$, considere $\epsilon > 0$ uma tolerância dada e seja v um nó com posto $i - 1$ na árvore de busca $\mathcal{T}$, segue na íntegra o algoritmo 3 retirado do artigo (LIBERTI; LAVOR; MACULAN, 2008).

Algoritmo 3: BP *algorithm*

0: BranchAndPrune(T, v, i)

Se ($i \leq n - 1$), **então**

 CALCULE AS POSSÍVEIS POSIÇÕES PARA O i –ésimo ÁTOMO:

 calcule as matrizes de torção B_i, B'_i via Equação (4.3);

 recupere a matriz de torção acumulada C_{i-1} por meio do nó de saída $P(v)$;

 calcule $C_i = C_{i-1}B_i$, $C'_i = C_{i-1}B'_i$ e x_i, x'_i por meio das matrizes $C_i y, C'_i y$;

 Seja $\lambda = 1, \rho = 1$;

 TESTE DE VIABILIDADE:

Para todo $(j, i) \in \mathcal{F}$ **faça**

 Seja $\delta_{ji} = (\|x_j - x_i\|^2 - d_{ji}^2)^2$ e $\delta'_{ji} = (\|x_j - x'_i\|^2 - d'_{ji}^2)^2$;

Se ($\delta_{ji} > \epsilon$) **então**

$\lambda = 0$;

Se ($\delta'_{ji} > \epsilon$) **então**

$\rho = 0$;

 CRIAR SUB-NÓS:

Se ($\lambda = 1$) **então**

 crie um nó z , armazene C_i e x_i em z , seja $P(z) = v$ e $L(v) = z$;

$T \leftarrow T \cup \{z\}$;

 BranchAndPrune($T, z, i + 1$);

Senão

$L(v) = \text{PODADO}$

Se ($\rho = 1$) **então**

 crie um nó z' , armazene C_i e x_i em z' , seja $P(z) = v$ e $R(v) = z'$;

$T \leftarrow T \cup \{z'\}$;

 BranchAndPrune($T, z', i + 1$);

Senão

$R(v) = \text{PODADO}$

Senão

 POSTO IGUAL A n , UMA SOLUÇÃO FOI ENCONTRADA:

 a solução é apresentada de $n \longleftrightarrow 1$ como um dado de saída;

4.3 Estratégia de Coope

Sejam $a_j \in \mathbb{R}^3$; $j = 1, 2, 3$ os centros de 3 esferas e d_j ; $j = 1, 2, 3$ seus raios. Então, os dois pontos na interseção das 3 esferas descritos pelo sistema não linear

$$\|x - a_j\|^2 = d_j^2; \quad j = 1, 2, 3, \quad (4.5)$$

ou equivalentemente,

$$x^T x - 2x^T a_j + a_j^T a_j = d_j^2; \quad j = 1, 2, 3, \quad (4.6)$$

podem ser obtidos utilizando a seguinte estratégia.

Considere $\hat{A}_{3 \times 2}$ a matriz de centro deslocado, definida por

$$\hat{A} = [a_1 - a_3 \quad a_2 - a_3].$$

Faça a decomposição ortogonal (fatoração QR) de $\hat{A}$, isto é

$$\hat{A} = Q \begin{bmatrix} R \\ 0^T \end{bmatrix},$$

onde Q é uma matriz ortogonal de ordem 3 e R uma matriz triangular superior de ordem 2, assim x pode ser escrito como,

$$x = Q \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} + a_3, \quad (4.7)$$

onde $y \in \mathbb{R}^2$ e $z \in \mathbb{R}$. Assim, a Equação (4.5) pode ser escrita como,

$$\|y - r_j\|^2 + z^2 = d_j^2; \quad j = 1, 2, \quad (4.8)$$

e

$$\|y\|^2 + z^2 = d_3^2, \quad (4.9)$$

onde r_j representa a j -ésima coluna de R . Substituindo (4.9) em (4.8) tem-se

$$R^T y = c, \quad (4.10)$$

onde $c \in \mathbb{R}^2$ e suas componentes são dadas por $c_j = \frac{1}{2}(d_3^2 - d_j^2 + \|r_j\|^2)$. Uma vez resolvido o sistema linear (4.10) em y , segue que,

$$z = \pm \sqrt{d_3^2 - \|y\|^2}. \quad (4.11)$$

Portanto, existem dois valores possíveis para x , obtidos pela Equação (4.7).

Esta estratégia pode ser facilmente implementada em qualquer dos algoritmos citados neste trabalho para se obter a interseção entre esferas. Esta e outra versão via redução gaussiana pode ser encontrada em (COOPE, 2000).

4.4 Funções Implementadas no Método via CGA

Seguindo a representação no modelo conforme dos elementos envolvidos, esta proposta, ao contrário da implementada no *Branch-and-Prune*, não ataca o problema por matrizes de rotação. O método consiste basicamente nos cálculos de intersecções de esferas para localizar coordenadas em $\mathbb{R}^3$, incluindo os testes de viabilidade quando necessário. Uma única solução é obtida, enquanto que as outras são reflexões de vetores nulos (representantes dos átomos em $\mathcal{Cl}_{4,1}$) em relação aos planos que se originam ao longo do processo de busca. Nas subseções que se seguem, são apresentadas as operações e técnicas em CGA utilizadas no método e também sua versão sistematizada na forma de um algoritmo.

4.4.1 *function 1*: Interseção entre duas esferas

Considere as esferas $S_1^2, S_2^2 \subset \mathbb{R}^3$ e suas representações S_1 e S_2 via IPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$. Então, $S_1^2 \cap S_2^2$ é representada por

$$C = S_1 \wedge S_2, \quad (4.12)$$

que define um círculo, um único ponto (espaço tangente), ou ainda, um conjunto vazio (um círculo imaginário). Veja a Figura 35.

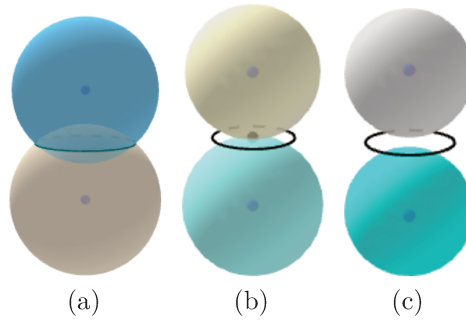


Figura 35 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Um círculo, (b) Espaço tangente e (c) Círculo imaginário.

Fórmula 4.4.1. (*function 1*) Sejam $S_1 = x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0$ e $S_2 = y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0$. Então,

$$\begin{aligned} C &= \left(x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0\right) \wedge \left(y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0\right) \\ &= a_1 e_{12} + a_2 e_{23} + a_3 e_{31} + b_1 e_{1\infty} + b_2 e_{2\infty} + b_3 e_{3\infty} + c_1 e_{10} + c_2 e_{20} + c_3 e_{30} + dE, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} a_1 &= (x_1 y_2 - x_2 y_1) \\ a_2 &= (x_2 y_3 - x_3 y_2) \\ a_3 &= (x_3 y_1 - x_1 y_3) \\ b_1 &= 0.5(x_1(y^2 - r_2^2) - y_1(x^2 - r_1^2)) \\ b_2 &= 0.5(x_2(y^2 - r_2^2) - y_2(x^2 - r_1^2)) \\ b_3 &= 0.5(x_3(y^2 - r_2^2) - y_3(x^2 - r_1^2)) \\ c_1 &= (x_1 - y_1) \\ c_2 &= (x_2 - y_2) \\ c_3 &= (x_3 - y_3) \\ d &= 0.5((x^2 - r_1^2) - (y^2 - r_2^2)). \end{aligned}$$

Como $D = C^* = CI_c^{-1}$, segue que,

$$D = -c_1 e_{230} - c_2 e_{310} - c_3 e_{120} - a_1 e_3 E + a_2 e_1 E + a_3 e_2 E + b_1 e_{23\infty} + b_2 e_{31\infty} + b_3 e_{12\infty} - d e_{123}. \quad (4.13)$$

Um teste para verificar se há interseção entre S_1 e S_2 pode ser feito observando o valor de $\Delta = D \cdot D$, com os possíveis resultados:

- i) Se $\Delta < 0 \Rightarrow$ círculo imaginário;
- ii) Se $\Delta = 0 \Rightarrow$ espaço tangente;
- iii) Se $\Delta > 0 \Rightarrow$ círculo real.

Algoritmo 4: *function 1*

Dados de entrada: Os centros $x, y \in \mathbb{R}^3$ e o raios $r_1, r_2 \in \mathbb{R}$.

Passo 1: Calcule C em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ pela Fórmula 4.4.1;

Passo 2: Calcule D utilizando a Equação (4.13);

Passo 3: Calcule $\Delta = D \cdot D$ e faça o teste:

- Se $\Delta \geq 0$, $C = S_1 \wedge S_2$;
 - Senão, $C = \emptyset$.
-

4.4.2 *function 2:* Interseção entre três esferas

Considere as esferas $S_1^2, S_2^2, S_3^2 \subset \mathbb{R}^3$ e suas representações S_1, S_2 e S_3 via IPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$, então $S_1^2 \cap S_2^2 \cap S_3^2$ é representada por,

$$Pp = S_1 \wedge S_2 \wedge S_3 \quad (4.14)$$

e define um par de pontos imaginário (interseção vazia) ou um par de pontos coincidentes ou ainda, um par de pontos distintos. Veja a Figura 36.

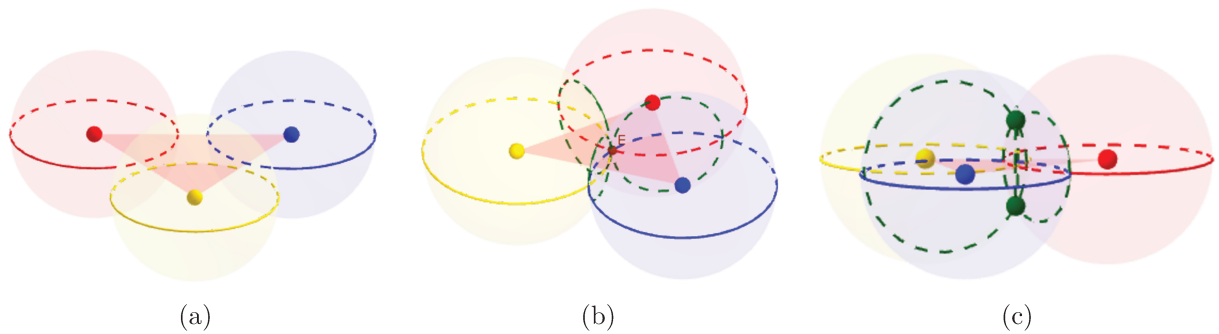


Figura 36 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Pontos imaginários, (b) Pontos reais e coincidentes e (c) Pontos reais e distintos.

Fórmula 4.4.2. (*function 2*) Sejam $S_1 = x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0$, $S_2 = y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0$ e $S_3 = z + \frac{1}{2}(z^2 - r_3^2)e_\infty + e_0$. Então,

$$\begin{aligned} Pp &= (x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0) \wedge (y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0) \wedge (z + \frac{1}{2}(z^2 - r_3^2)e_\infty + e_0) \\ &= a_1 e_{23} \wedge e_\infty + a_2 e_{31} \wedge e_\infty + a_3 e_{12} \wedge e_\infty + b_1 e_{23} \wedge e_0 + b_2 e_{31} \wedge e_0 + b_3 e_{12} \wedge e_0 + \\ &+ c_1 e_1 \wedge E + c_2 e_2 \wedge E + c_3 e_3 \wedge E + d e_{123}, \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.5((x_2 y_3 - x_3 y_2)(z^2 - r_3^2) + (x_3 z_2 - x_2 z_3)(y^2 - r_2^2) + (y_2 z_3 - y_3 z_2)(x^2 - r_1^2)) \\ a_2 &= 0.5((x_3 y_1 - x_1 y_3)(z^2 - r_3^2) + (x_1 z_3 - x_3 z_1)(y^2 - r_2^2) + (y_3 z_1 - y_1 z_3)(x^2 - r_1^2)) \\ a_3 &= 0.5((x_1 y_2 - x_2 y_1)(z^2 - r_3^2) + (x_2 z_1 - x_1 z_2)(y^2 - r_2^2) + (y_1 z_2 - y_2 z_1)(x^2 - r_1^2)) \\ b_1 &= (x_2 y_3) - (x_2 z_3) - (x_3 y_2) + (x_3 z_2) + (y_2 z_3) - (y_3 z_2) \\ b_2 &= (x_3 y_1) - (x_3 z_1) - (x_1 y_3) + (x_1 z_3) + (y_3 z_1) - (y_1 z_3) \\ b_3 &= (x_1 y_2) - (x_1 z_2) - (x_2 y_1) + (x_2 z_1) + (y_1 z_2) - (y_2 z_1) \\ c_1 &= 0.5((x_1 - z_1)(y^2 - r_2^2) - (x_1 - y_1)(z^2 - r_3^2) - (y_1 - z_1)(x^2 - r_1^2)) \\ c_2 &= 0.5((x_2 - z_2)(y^2 - r_2^2) - (x_2 - y_2)(z^2 - r_3^2) - (y_2 - z_2)(x^2 - r_1^2)) \\ c_3 &= 0.5((x_3 - z_3)(y^2 - r_2^2) - (x_3 - y_3)(z^2 - r_3^2) - (y_3 - z_3)(x^2 - r_1^2)) \\ d &= (x_1 y_2 z_3) - (x_1 y_3 z_2) - (x_2 y_1 z_3) + (x_2 y_3 z_1) + (x_3 y_1 z_2) - (x_3 y_2 z_1). \end{aligned}$$

Como $D = (Pp)^\star = (Pp)I_c^{-1}$, segue que

$$D = -c_1 e_{23} - c_2 e_{31} - c_3 e_{12} - a_1 e_{1\infty} - a_2 e_{2\infty} - a_3 e_{3\infty} + b_1 e_{10} + b_2 e_{20} + b_3 e_{30} + dE. \quad (4.15)$$

Analogamente, tem-se um teste para verificar se há interseção entre as três esferas, observando o valor de $\Delta = D \cdot D$, onde $D = (Pp)^\star$:

- i) Se $\Delta < 0 \Rightarrow$ pontos imaginários;
- ii) Se $\Delta = 0 \Rightarrow$ ponto reais e coincidentes;
- iii) Se $\Delta > 0 \Rightarrow$ pontos reais e distintos.

4.4.3 *function 3*: interseção entre quatro esferas

Segue da Tabela 8 que um ponto é obtido com a interseção de quatro esferas em $\mathbb{R}^3$. Considere então as esferas $S_1^2, S_2^2, S_3^2, S_4^2 \subset \mathbb{R}^3$ e suas representações S_1, S_2, S_3 e S_4 via IPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$. Então, $S_1^2 \cap S_2^2 \cap S_3^2 \cap S_4^2$ é representada em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ por

$$Pp = S_1 \wedge S_2 \wedge S_3 \wedge S_4, \quad (4.16)$$

que define um ponto imaginário (interseção vazia) ou um ponto real. Veja a Figura 37.

Algoritmo 5: *function 2*

Dados de entrada: Os centros $x, y, z \in \mathbb{R}^3$ e o raios $r_1, r_2, r_3 \in \mathbb{R}$.

Passo 1: Calcule Pp , através da Fórmula 4.4.2;

Passo 2: Calcule D , utilizando a Equação (4.15);

Passo 3: Calcule Δ e faça o teste:

- Se $\Delta \geq 0$, $Pp = C$;
- Senão, $C = \emptyset$.

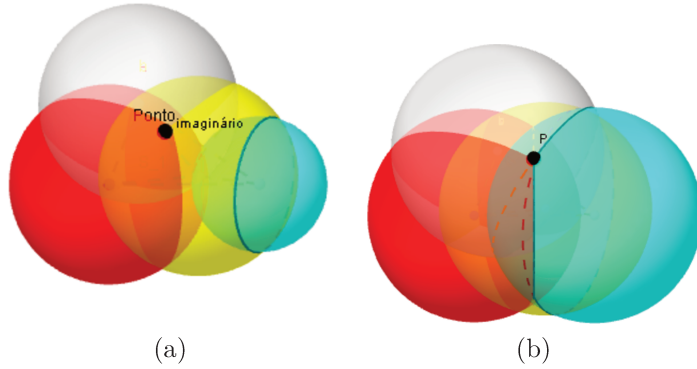


Figura 37 – Possíveis situações em $\mathcal{Cl}_{4,1}$: (a) Ponto imaginário, (b) Ponto real.

Fórmula 4.4.3. (*function 3*) Sejam $S_1 = x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0$, $S_2 = y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0$, $S_3 = z + \frac{1}{2}(z^2 - r_3^2)e_\infty + e_0$ e $S_4 = s + \frac{1}{2}(s^2 - r_4^2)e_\infty + e_0$. Então,

$$\begin{aligned}
 C &= (x + \frac{1}{2}(x^2 - r_1^2)e_\infty + e_0) \wedge (y + \frac{1}{2}(y^2 - r_2^2)e_\infty + e_0) \wedge \\
 &\quad \wedge (z + \frac{1}{2}(z^2 - r_3^2)e_\infty + e_0) \wedge (s + \frac{1}{2}(s^2 - r_4^2)e_\infty + e_0) \\
 &= \underbrace{-a_1s_1 - a_2s_2 - a_3s_3 + \frac{d}{2}(s^2 - r_4^2)}_{D_4} e_{123\infty} \underbrace{-b_1s_1 - b_2s_2 - b_3s_3 + d}_{D_5} e_{1230} + \\
 &\quad + \underbrace{c_1s_2 - c_2s_1 - \frac{b_3}{2}(s^2 - r_4^2) + a_3}_{D_3} e_{12\infty 0} + \underbrace{c_3s_1 + c_1s_3 - \frac{b_2}{2}(s^2 - r_4^2) + a_2}_{D_2} e_{31\infty 0} + \\
 &\quad + \underbrace{c_2s_3 - c_3s_2 - \frac{b_1}{2}(s^2 - r_4^2) + a_1}_{D_1} e_{23\infty 0},
 \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
a_1 &= 0.5((x_2y_3 - x_3y_2)(z^2 - r_3^2) + (x_3z_2 - x_2z_3)(y^2 - r_2^2) + (y_2z_3 - y_3z_2)(x^2 - r_1^2)) \\
a_2 &= 0.5((x_3y_1 - x_1y_3)(z^2 - r_3^2) + (x_1z_3 - x_3z_1)(y^2 - r_2^2) + (y_3z_1 - y_1z_3)(x^2 - r_1^2)) \\
a_3 &= 0.5((x_1y_2 - x_2y_1)(z^2 - r_3^2) + (x_2z_1 - x_1z_2)(y^2 - r_2^2) + (y_1z_2 - y_2z_1)(x^2 - r_1^2)) \\
b_1 &= (x_2y_3) - (x_2z_3) - (x_3y_2) + (x_3z_2) + (y_2z_3) - (y_3z_2) \\
b_2 &= (x_3y_1) - (x_3z_1) - (x_1y_3) + (x_1z_3) + (y_3z_1) - (y_1z_3) \\
b_3 &= (x_1y_2) - (x_1z_2) - (x_2y_1) + (x_2z_1) + (y_1z_2) - (y_2z_1) \\
c_1 &= 0.5((x_1 - z_1)(y^2 - r_2^2) - (x_1 - y_1)(z^2 - r_3^2) - (y_1 - z_1)(x^2 - r_1^2)) \\
c_2 &= 0.5((x_2 - z_2)(y^2 - r_2^2) - (x_2 - y_2)(z^2 - r_3^2) - (y_2 - z_2)(x^2 - r_1^2)) \\
c_3 &= 0.5((x_3 - z_3)(y^2 - r_2^2) - (x_3 - y_3)(z^2 - r_3^2) - (y_3 - z_3)(x^2 - r_1^2)) \\
d &= (x_1y_2z_3) - (x_1y_3z_2) - (x_2y_1z_3) + (x_2y_3z_1) + (x_3y_1z_2) - (x_3y_2z_1).
\end{aligned}$$

Fazendo $D = C^*$, ao aplicar a técnica envolvendo $\Delta = D \cdot D$ para obter o ponto X , teremos duas situações possíveis: ou $\Delta < 0$ ou $\Delta = 0$. Caso aconteça a segunda opção, ilustrada no item (b) da Figura 37, o ponto é obtido pela equação

$$X = \frac{D}{-e_\infty \cdot D}. \quad (4.17)$$

Assim, o dual D é dado por

$$D = D_1e_1 + D_2e_2 + D_3e_3 - D_4e_\infty + D_5e_0. \quad (4.18)$$

Portanto, o ponto, caso exista, fica definido por

$$X = \frac{D_1}{D_5}e_1 + \frac{D_2}{D_5}e_2 + \frac{D_3}{D_5}e_3 - \frac{D_4}{D_5}e_\infty + e_0. \quad (4.19)$$

Algoritmo 6: *function 3*

Dados de entrada: Os centros $x, y, z, s \in \mathbb{R}^3$ e o raios $r_1, r_2, r_3, r_4 \in \mathbb{R}$.

Passo 1: Calcule C através da Fórmula 4.4.3;

Passo 2: Calcule D utilizando a Equação (4.18);

Passo 3: Calcule Δ e faça o teste:

- Se $\Delta = 0$, $C = X$;
 - Senão, $C = \emptyset$.
-

4.4.4 *function 4*: Reflexão

A operação de reflexão em $\mathbb{R}^{4,1}$ é representada por uma operação geométrica adjunta de versor no objeto a ser refletido como descrito na Subseção 3.4.

Fórmula 4.4.4. (*function 4*) Seja $P := [Y, Z, W, e_\infty]$ um plano em $\mathbb{R}^{4,1}$, considere sua representação IPNS em $\mathcal{Cl}_{4,1}$ dada pelo vetor $P = P_1e_1 + P_2e_2 + P_3e_3 + P_4e_\infty$ e seja $X \in \mathbb{H}_a^3$

dado por $X = X_1e_1 + X_2e_2 + X_3e_3 + X_4e_\infty + e_0$. A reflexão de X , denominada X^{Sym} , em relação a P , é definida pela equação,

$$X^{Sym} = \frac{PXP}{-e_\infty \cdot (PXP)}, \quad (4.20)$$

ou seja,

$$X^{Sym} = X_{1P}e_1 + X_{2P}e_2 + X_{3P}e_3 + X_{4P}e_\infty + e_0, \quad (4.21)$$

obtido por meio do desenvolvimento,

$$\begin{aligned} X_{1P} &= (t_0P_2 + t_1P_3 + t_2P_4 + t_8P_1) / - (t_8P_2 + t_9P_3 + t_{10}P_4) \\ X_{2P} &= (-t_1P_2 + t_0P_3 + t_4P_4 + t_9P_1) / - (t_8P_2 + t_9P_3 + t_{10}P_4) \\ X_{3P} &= (-t_2P_2 - t_4P_3 + t_0P_4 + t_{10}P_1) / - (t_8P_2 + t_9P_3 + t_{10}P_4) \\ X_{4P} &= (-t_3P_2 - t_5P_3 - t_6P_4 - (t_7 + t_0)P_1) / - (t_8P_2 + t_9P_3 + t_{10}P_4). \end{aligned}$$

Os t'_i s são dados por:

$$\begin{aligned} t_0 &= P_2X_1 + P_3X_2 + P_4X_3 + P_1 \\ t_1 &= P_2X_2 - P_3X_1 \\ t_2 &= P_2X_3 - P_4X_1 \\ t_3 &= P_2X_4 - P_1X_1 \\ t_4 &= P_3X_3 - P_4X_2 \\ t_5 &= P_3X_4 + P_1X_2 \\ t_6 &= P_4X_4 + P_1X_3 \\ t_7 &= P_1 \\ t_8 &= P_2 \\ t_9 &= P_3 \\ t_{10} &= P_4 \end{aligned}$$

Algoritmo 7: *function 4*

Dados de entrada: Os centros $y, z, w \in \mathbb{R}^3$ e $X \in \mathbb{H}_a^3$.

Passo 1: Calcule P usando a Propriedade 2.5.14;

Passo 2: Calcule X^{Sym} utilizando a Equação (4.20);

Passo 3: Imprima X^{Sym} .

4.4.5 Algoritmo $C - SymBP$ com $k = 3$ **Algoritmo 8:** $C - SymBP_{k=3}$

Dados de entrada: Matriz de distâncias $A_{n \times n}$ e uma tolerância estabelecida $\epsilon > 0$.

Passo 0: Defina:

$$X_1 = e_0,$$

$$X_2 = -A_{1,2}e_1 + \frac{1}{2}A_{1,2}^2e_\infty + e_0$$

$$X_3 =$$

$$(A_{2,3} \cos(\theta) - A_{1,2})e_1 + (A_{2,3} \sin(\theta))e_2 + \frac{1}{2}((A_{2,3} \cos(\theta) - A_{1,2})^2 + (A_{2,3} \sin(\theta))^2)e_\infty + e_0,$$

onde

$$\cos(\theta) = \frac{-A_{1,3}^2 + A_{1,2}^2 + A_{2,3}^2}{2A_{1,2}A_{2,3}} \text{ e } \sin(\theta) = \sqrt{1 - \cos^2(\theta)}.$$

Passo 1: $\mathcal{P} := \{\}$;

Passo 2: $i \leftarrow 4 \cdots n$;

Passo 3: Calcule Pp usando a *function 2* e resgate X_i^0 e X_i^1 utilizando a Fórmula 3.2.1;

Passo 4: Faça $X_i \leftarrow X_i^0$;

Passo 5: Teste a factibilidade de X_i fazendo:

- Se $\mathcal{F}_i = \emptyset$, X_i é factível;
- Senão, se $|\mathcal{F}_i| = 1$, faça $C = S_{a_i}$ no passo 0 do Algoritmo 1 *Factibility test*;
- Senão, se $|\mathcal{F}_i| = 2$, use a *function 1* no passo 0 do Algoritmo 1 *Factibility test*;
- Senão, se $|\mathcal{F}_i| = 3$, use a *function 2* no passo 0 do Algoritmo 1 *Factibility test*;
- Senão, se $|\mathcal{F}_i| \geq 4$, use a *function 3* no passo 0 do Algoritmo 1 *Factibility test*.

Passo 6:

- Se X_i resultou em factível no passo 5 faça:

$$i \leftarrow i + 1;$$

Se $i = n$, então $X = (X_{v_1}, \dots, X_{v_n})$ é uma solução. Avance ao passo 7;

Senão, $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} \cup \{P_i\}$. Volte ao passo 3;

- Senão, encontre t tal que $t = \max\{j \mid j = 4, \dots, i \text{ e } X_j = X_j^0\}$ e faça

$$i \leftarrow t;$$

Se $i = 4$, então pare e exiba a mensagem "Problema sem solução";

Senão, faça $X_i = X_i^1$ e volte ao passo 5;

Passo 7: $\mathcal{P} \leftarrow \mathcal{P} - \bigcup \mathcal{P}_q$, para todo $d_{pq} \in \mathcal{F}$;

Passo 8: Realizar reflexões nos elementos de $\mathcal{P}$ utilizando a *function 4* para obter as demais soluções.

4.4.6 Exemplo Detalhado

Uma discussão detalhada de uma aplicação do algoritmo C-SymBP é dada aqui por meio de um exemplo simples retirado do artigo (LIBERTI; LAVOR; MACULAN, 2008), que foi utilizado para detalhar o algoritmo principal do artigo (BP *algorithm*), reescrito neste trabalho na Seção anterior por meio do Algoritmo 3. A instância em questão está associada a uma proteína gerada artificialmente como em (LAVOR, 2006), denominada *lavor117*, cujos comprimentos de ligações covalentes medem 1.526 angstrom e os ângulos de dobras medem 1.91 radianos.

Exemplo 4.4.5. Seja M uma molécula de proteína gerada artificialmente com 11 átomos na sua cadeia principal e considere a instância *lavor117* de um kDMDGP , com $k = 3$, relacionada a M , cuja matriz de distância entre os átomos da molécula de proteína é dada por:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1.526 & 2.491389 & 3.83929 & ? & ? & ? & ? & ? & ? & ? \\ 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 3.831422 & ? & ? & ? & 3.387634 & ? & ? \\ 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 3.835602 & ? & 3.96678 & 3.003368 & 3.796280 & ? \\ 3.83929 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 3.030585 & 2.60830 & 2.102385 & 3.159309 & ? \\ ? & 3.831422 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 2.899348 & 2.689078 & 3.132251 & ? \\ ? & ? & 3.835602 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 3.086914 & 3.557526 & ? \\ ? & ? & ? & 3.030585 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 2.788611 & 3.228657 \\ ? & ? & 3.96678 & 2.60830 & 2.899348 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 & 2.888815 \\ ? & 3.387634 & 3.003368 & 2.102385 & 2.689078 & 3.086914 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 & 2.491389 \\ ? & ? & 3.796280 & 3.159309 & 3.132251 & 3.557526 & 2.788611 & 2.491389 & 1.526 & 0 & 1.526 \\ ? & ? & ? & ? & ? & ? & 3.228657 & 2.888815 & 2.491389 & 1.526 & 0 \end{pmatrix},$$

Note que nem todas as distâncias são conhecidas. As entradas da matriz destacadas na cor azul definem o conjunto de discretização, ou seja,

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \{ & 1.526, 2.491389, 3.83929, \\ & 1.526, 2.491389, 3.831422, \\ & 1.526, 2.491389, 3.835602, \\ & 1.526, 2.491389, 3.030585, \\ & 1.526, 2.491389, 2.899348, \\ & 1.526, 2.491389, 3.086914, \\ & 1.526, 2.491389, 2.788611, \\ & 1.526, 2.491389, 2.888815, \\ & 1.526, 2.491389, \\ & 1.526 \}, \end{aligned}$$

onde a i – ésima linha contém as distâncias $d_{i,i+1}, d_{i,i+2}, d_{i,i+3}$ (entre o átomo i e os átomos $i + 1, i + 2$ e $i + 3$), então as duas últimas linhas trazem as distâncias $d_{9,10}, d_{9,11}$ e

a distância $d_{10,11}$, respectivamente. Seu conjunto de poda é dado por

$$\mathcal{F} = \{3.96678, 2.60830, 3.387634, 3.003368, 2.102385, 2.689078, \\ 3.796280, 3.159309, 3.132251, 3.557526, 3.228657\}.$$

Sua partição por níveis da árvore $\mathcal{T}$ fica definida por $\mathcal{F} = \bigcup_{i=5}^{11} \mathcal{F}_i$, onde cada $\mathcal{F}_i$ é dado por,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_5 = \mathcal{F}_6 = \mathcal{F}_7 &= \emptyset \\ \mathcal{F}_8 &= \{d_{3,8}, d_{4,8}\} = \{3.96678, 2.60830\} \\ \mathcal{F}_9 &= \{d_{2,9}, d_{3,9}, d_{4,9}, d_{5,9}\} = \{3.387634, 3.003368, 2.102385, 2.689078\}; \\ \mathcal{F}_{10} &= \{d_{3,10}, d_{4,10}, d_{5,10}, d_{6,10}\} = \{3.796280, 3.159309, 3.132251, 3.557526\}; \\ \mathcal{F}_{11} &= \{d_{7,11}\} = \{3.228657\}. \end{aligned}$$

Então, temos as seguintes relações de associação entre os conjuntos de poda e os conjuntos de planos associados aos níveis da árvore de busca:

- $\mathcal{F}_8 \longleftrightarrow \mathcal{P}_8 = \{P_6, P_7\};$
- $\mathcal{F}_9 \longleftrightarrow \mathcal{P}_9 = \{P_5, P_6, P_7, P_8\};$
- $\mathcal{F}_{10} \longleftrightarrow \mathcal{P}_{10} = \{P_6, P_7, P_8, P_9\};$
- $\mathcal{F}_{11} \longleftrightarrow \mathcal{P}_{7,11} = \{P_{10}\}.$

Das relações acima, vem que $\bigcup_i \mathcal{P}_{q_i} = \{P_5, P_6, P_7, P_8, P_9, P_{10}\}$. Portanto, pelo Corolário 3.3.13, temos que $\overline{\mathcal{P}} = \{P_3, P_4\}$. Assim, antes de iniciar a busca por conformações de M em $\mathbb{R}^3$, é possível utilizar os Teoremas 3.3.12 e 3.3.15 para prever o número de soluções para a instância *DMDGP* associada a M . A saber, existem 4 possíveis conformações para M no espaço tridimensional, visto que $\overline{\mathcal{P}} = \{P_3, P_4\}$. Entretanto, duas delas são obtidas das outras, isto é, são realizações congruentes, e portanto, existem apenas duas soluções para o problema.

4.4.6.1 Uma descrição do Algoritmo $C - SymBP$ ao resolver o Exemplo 4.4.5.

O algoritmo se inicializou com os representantes dos três primeiros átomos da molécula M , ou seja, são fixados suas representações X_1, X_2 e X_3 no modelo conforme, que são previamente conhecidas. Em seguida, após escolher a direção da ¹ esquerda, o algoritmo passa para o quarto nível da árvore, calcula os pontos X_4^0, X_4^1 por meio da Fórmula 3.2.1 e fixa X_4^0 em $\mathbb{H}_a^3$, representado x_4 em $\mathbb{R}^3$, oriundo do produto *meet* das

¹ Na prática, são atribuídos algarismos 0 para o nó da esquerda e 1 para o da direita.

esferas S_1, S_2 e S_3 em $\mathcal{Cl}_{4,1}$. Assim segue, calculando os pares de pontos X_i^0, X_i^1 e fixando x_i em $\mathbb{R}^3$ até o nível 7, escolhendo a direção da esquerda.

No nível 8, existem duas distâncias adicionais $d_{3,8}, d_{4,8}$ (dos níveis 3 e 4 ao nível 8), assim o Algoritmo 1 ao testar a viabilidade de X_8^0 , utilizou a *function 1* no seu passo inicial. Se X_8^0 caracterizou viabilidade, sua realização parcial é representada em $\mathbb{H}_a^3$ pelo caminho

$$\eta = X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow X_3 \rightarrow X_4^0 \rightarrow X_5^0 \rightarrow X_6^0 \rightarrow X_7^0 \rightarrow X_8^0. \quad (4.22)$$

Senão, ele testa X_8^1 , a viabilidade de X_8^1 substitui X_8^0 na representação (4.22) acima. Caso nem X_8^0 e nem X_8^1 se caracterizou viável, ocorre o processo de "poda" e o algoritmo retrocede² (*backtracking*) na árvore, repete o processo e altera η a partir do sétimo nível, trocando X_7^0 por X_7^1 e calculando novos pontos X_8^0, X_8^1 , oriundo do produto *meet* das esferas $S_5, S_6^{Sym_5}$ e $S_7^{Sym_5}$ em $\mathcal{Cl}_{4,1}$, por meio da Fórmula 3.2.1. Com isto, fixa-se novamente X_8^0 em $\mathbb{H}_a^3$.

Nos níveis 9 e 10, o procedimento é análogo ao do nível 8, entretanto, por existir quatro distâncias adicionais, os testes de viabilidade se dão por meras comparações, visto que a interseção das quatro esferas adicionais resulta em um único ponto, obtido de maneira direta por meio da *function 3*.

No nível 11 não há mais retrocessos, o ponto X_{11} é obtido de maneira direta por interseção de quatro esferas. Ao término deste processo, têm-se a primeira possível solução, exemplificada nas Figuras 38 e 39, representado pelo caminho em $\mathbb{R}^3$,

$$x := x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow x_4 \rightarrow x_5 \rightarrow x_6 \rightarrow x_7 \rightarrow x_8 \rightarrow x_9 \rightarrow x_{10} \rightarrow x_{11}.$$

Então, fazendo uso do Teorema (3.3.12), o algoritmo analisa o conjunto de distâncias adicionais $\mathcal{F} = \bigcup_{i=5}^{11} \mathcal{F}_i$. Por meio dos conjuntos de planos $\mathcal{P}_i$ associados aos $\mathcal{F}_{i's}$ exclui os planos desnecessários, em seguida, reflete os pontos do caminho representado por x , com índices maiores ou iguais a $j + 1$, onde j é o índice para cada plano restante em $\overline{\mathcal{P}}$, obtendo assim, todas as outras possíveis soluções do DMDGP.

As soluções do problema são ilustradas nas Figuras 39 e 40 e as Figuras 42 e 43 representam realizações congruentes as duas soluções. A Figura 38 ilustra os dados de saída do algoritmo $C - SymBP$, isto é, a primeira possível solução e os dois planos restantes, já a Figura 41 ilustra a representação em $\mathbb{R}^3$ do espaço de busca $\mathcal{T}$, feito as devidas podas nos galhos que levavam a soluções inviáveis.

² De maneira geral, o algoritmo C-SymBP retrocede da seguinte forma: Se existe d_{ij} adicional, ele pode retroceder até o nível $i + k + 1$.

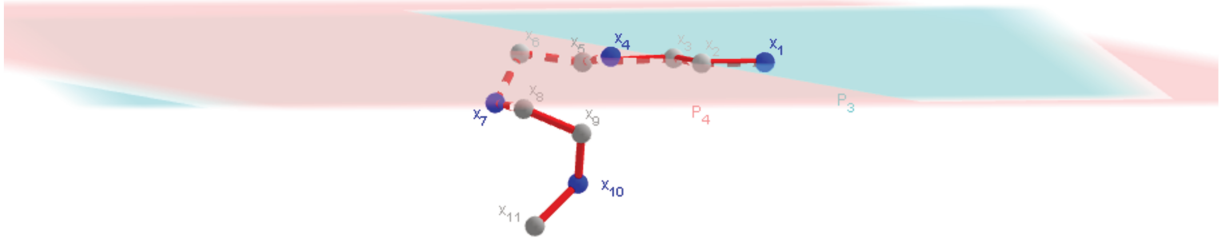
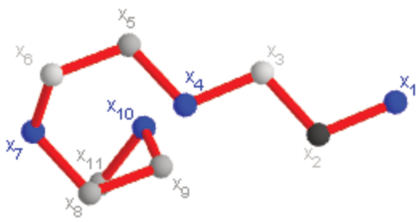
Figura 38 – Planos P_3 e P_4 associados a primeira possível solução.

Figura 39 – Primeira solução possível

Primeira Solução
$(0, 0, 0)$
$(-1.5260, 0, 0)$
$(-2.0338, 1.4390, 0)$
$(-3.5589, 1.4393, 0.0502)$
$(-4.0749, 2.8536, -0.1993)$
$(-5.5843, 2.8899, 0.0222)$
$(-6.2803, 2.1201, -1.0966)$
$(-5.7625, 0.6849, -1.1237)$
$(-4.3624, 0.6616, -1.7301)$
$(-4.3487, 1.4951, -3.0083)$
$(-5.3984, 0.9572, -3.9765)$

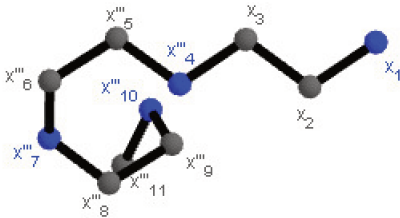


Figura 40 – Segunda solução possível

Segunda Solução
$(0, 0, 0)$
$(-1.5260, 0, 0)$
$(-2.0338, 1.4390, 0)$
$(-3.5589, 1.4393, -0.0502)$
$(-4.0585, 2.8594, -0.3002)$
$(-5.5792, 2.8917, -0.1777)$
$(-6.1995, 2.1486, -1.3574)$
$(-5.6800, 0.7140, -1.3838)$
$(-4.2429, 0.7037, -1.8971)$
$(-4.1458, 1.5667, -3.1519)$
$(-5.1291, 1.0522, -4.1994)$

4.5 Experimentos Computacionais

Os experimentos computacionais para analisar o método sistematizado na forma do algoritmo *C-SymBP* foram realizados com instâncias artificiais. Resultados comparativos são apresentados entre o *C-SymBP* e outros dois algoritmos implementados por nós, no qual um é uma versão clássica para resolver instâncias DMDGP que envolvem proteínas, conhecido na literatura por *Branch and Prune*, proposto pela primeira vez em 2006 por Lavor em colaboração com outros pesquisadores (LIBERTI; LAVER; MACULAN,

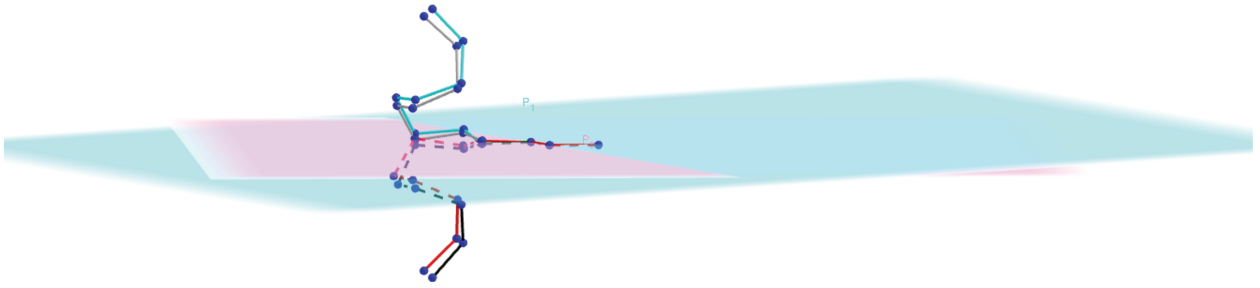


Figura 41 – Árvore em 3D e os planos P_3 e P_4 associados ao Exemplo 4.4.5.

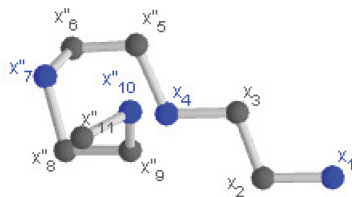


Figura 42 – Realização congruente a 1ª solução

Realização Congruente
(0, 0, 0)
(-1.5260, 0, 0)
(-2.0338, 1.4390, 0)
(-3.5589, 1.4393, -0.0502)
(-4.0749, 2.8536, 0.1993)
(-5.5843, 2.8899, -0.0222)
(-6.2803, 2.1201, 1.0966)
(-5.7625, 0.6849, 1.1237)
(-4.3624, 0.6616, 1.7301)
(-4.3487, 1.4951, 3.0083)
(-5.3984, 0.9572, 3.9765)

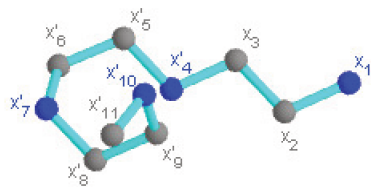


Figura 43 – Realização congruente a 2ª solução

Realização Congruente
(0, 0, 0)
(-1.5260, 0, 0)
(-2.0338, 1.4390, 0)
(-3.5589, 1.4393, 0.0502)
(-4.0585, 2.8594, 0.3002)
(-5.5792, 2.8917, 0.1777)
(-6.1995, 2.1486, 1.3574)
(-5.6800, 0.7140, 1.3838)
(-4.2429, 0.7037, 1.8971)
(-4.1458, 1.5667, 3.1519)
(-5.1291, 1.0522, 4.1994)

2008). Mais detalhes do BP e sua evolução histórica pode ser encontrado em (LIBERTI et al., 2014).

4.5.1 Instâncias Artificiais

As instâncias artificiais são baseadas em um modelo proposto por Phillips et al. (PHILLIPS; ROSEN; WALKE, 1996), onde a molécula é representada como uma cadeia linear de átomos. Os comprimentos de ligações e ângulos de ligações são fixos e

um conjunto de ângulos de torção é gerado aleatoriamente. Dependendo da escolha dos comprimentos e ângulos de ligação, estas instâncias fornecem um modelo realístico de uma proteína.

A fim de testar a viabilidade do método, foram gerados três blocos com instâncias artificiais simulando tamanhos e realidades distintas entre as moléculas de proteínas. Estes blocos contemplam vinte e cinco instâncias, listadas na Tabela 10. As onze primeiras instâncias, cuja quantidade de átomos n variam entre 10 e 90 são ditas pequenas, as dez seguintes com a quantidade de átomos definidas por $n = 100i$; com $i = 1, \dots, 10$ são consideradas de tamanhos médios e as outras quatro com $n = 2000, 3000, 4000, 5000$ consideradas de tamanhos grandes considerando a realidade das moléculas de proteínas.

Observação 4.5.1. O conhecimento de ângulos, tanto de dobra quanto de torção, é irrelevante para o desempenho do $C - SymBP$, visto que ele trabalha apenas com o conhecimento de distâncias.

4.5.2 Considerações sobre Máquina e Memória

Todos os testes foram realizados em um computador *Macbook Pro, CORETM i5, 2.3 GHz* com *4GB RAM*, executando *OSX Mavericks*. Ambos os códigos implementados nos algoritmos $C - SymBP$, BP e $BP - Coope$ foram executados pelo *MatLab 7.12R 2011*. Entretanto, devido ao caráter recursivo da implementação do BP , explorar o espaço de busca pode exigir muita memória, especialmente se nenhuma poda ocorre no início da execução. Consequentemente, quando a memória (RAM) física da máquina está esgotada, o sistema operacional começa a troca de disco e o tempo de CPU torna-se incontrolável, com isso, instâncias com muitos átomos não foram resolvidas com a nossa implementação do BP .

Quanto a versão do BP utilizando estratégia de Coope, denominada $BP - Coope$, tem duas versões. A primeira implementada por nós, ilustrada na Tabela 9 ela visa somente a obtenção da primeira solução, esta versão não possui qualquer tipo de refinamento no código assim como o código do $C - SymBP$. A segunda implementada por Jorge Alencar e ilustrada na Tabela 10, embora tenha recebido refinamentos em sua implementação para se obter todas as soluções, ainda assim utiliza-se da ideia do BP clássico e portanto também sofre dos mesmos problemas com a memória.

Embora, em geral, os algoritmos sejam rápidos para resolver instâncias pequenas, o $C - SymBP$ além de superar em tempo de CPU, também resolveu todas as instâncias médias e grandes geradas por nós. Fazer uso da álgebra geométrica conforme para calcular interseções entre esferas no processo de busca por uma solução e na obtenção de todas as outras por meio de operação adjunta, faz do $C - SymBP$ um algoritmo natural para resolver instâncias discretizáveis. Entretanto, o quesito em que ele mais se diferencia do

algoritmo *BP* é seu teste de viabilidade. O *BP* realiza seu teste de viabilidade com as distâncias conhecidas em cada nó ramificado, enquanto que, o *C – SymBP* se utiliza de no máximo 4 distâncias ditas adicionais ao problema, o que justifica seu ganho de tempo.

Algumas versões do algoritmo *BP* com implementação mais sofisticada em C++ podem ser encontradas no endereço <http://www.antoniomucherino.it/en/mdjeep.php>.

4.5.3 Resultados Comparativos

As Tabelas 9 e 10 apresentam em detalhes todos os resultados computacionais obtidos pelos testes em instâncias artificiais geradas por nós. O parâmetro ϵ , em todos os algoritmos, assumiu o valor 1×10^{-3} em todos os testes.

Na Tabela 9 foi realizado um corte nas entradas da matriz de distância, considerando todas entradas com valor maior que 5.5 angstrom desconhecidas, simulando experimentos de ressonância magnética com esta limitação de distâncias. Os detalhes de tempo e precisão encontrados na tabela se referem a obtenção da primeira solução. A tabela é descrita em colunas, dos quais a primeira apresenta o nome da instância, a segunda indica o número n de átomos na cadeia principal da molécula e a terceira coluna contém a cardinalidade $|E|$, obtida pela fórmula

$$|E| = \frac{|D| - n}{2},$$

onde E é o conjunto de todas as distâncias conhecidas a priori e D é o conjunto que contém as entradas da matriz de distâncias que são menores que o valor de corte estabelecido. A LDE^3 encontrada na quinta e sétima coluna é usada para medir a qualidade da solução numérica (maior erro comparativo), definida por

$$LDE = \frac{1}{|E|} \sum_{(i,j) \in E} \frac{|2X_i \cdot X_j - d_{ij}^2|}{d_{ij}^2}.$$

O número de instâncias testadas foi menor devido incomparabilidade em tempo computacional dos métodos quando aplicados a instâncias grandes. A instância com 200 átomos (*Inst₂₀₀*) gera uma matriz de distâncias mal condicionada, o que justifica a falha do método que envolve a estratégia de Coope para esta instância e valida ainda mais o uso de CGA como uma aplicação natural para este tipo de problema.

Nos testes apresentados na Tabela 10 fizemos cortes mais exigentes, de 4.5 angstroms nas matrizes de distâncias de cada instância, com isso o número de distâncias conhecidas diminuem e conseqüentemente o número de soluções para os DMDGP associados a essas instâncias aumentam. O objetivo foi testar o tempo computacional para se obter

³ Do Inglês: Largest Distance Error.

Tabela 9 – Fatoração QR versus CGA

Instância			BP - Coope - One		C-SymBP - One	
NOME	n	$ E $	CPU (seg.)	LDE	CPU (seg.)	LDE
<i>Inst</i> ₁₀	10	45	0.061587	0.1×10^{-9}	0.038783	5.4×10^{-7}
<i>Inst</i> ₁₅	15	73	0.052081	0.1×10^{-11}	0.041765	0.1×10^{-9}
<i>Inst</i> ₂₀	20	126	0.052047	0.1×10^{-11}	0.039486	2.6×10^{-9}
<i>Inst</i> ₂₅	25	222	0.057239	0.1×10^{-10}	0.044077	0.1×10^{-9}
<i>Inst</i> ₃₀	30	195	0.049208	0.1×10^{-10}	0.040741	0.1×10^{-9}
<i>Inst</i> ₄₀	40	415	0.085252	0.1×10^{-9}	0.040289	0.1×10^{-6}
<i>Inst</i> ₅₀	50	438	0.091174	0.1×10^{-7}	0.040221	2.7×10^{-6}
<i>Inst</i> ₆₀	60	799	0.062183	0.1×10^{-8}	0.043541	5.8×10^{-7}
<i>Inst</i> ₇₀	70	1103	0.065530	0.1×10^{-11}	0.042618	0.1×10^{-8}
<i>Inst</i> ₈₀	80	923	0.096359	0.1×10^{-8}	0.045703	1.6×10^{-6}
<i>Inst</i> ₉₀	90	671	0.077168	0.1×10^{-9}	0.047624	0.1×10^{-7}
<i>Inst</i> ₁₀₀	100	1291	0.101005	0.1×10^{-11}	0.050142	0.1×10^{-6}
<i>Inst</i> ₂₀₀	200	2747	*	*	0.058722	0.1×10^{-6}
<i>Inst</i> ₃₀₀	300	5236	0.174087	0.1×10^{-10}	0.072840	1.5×10^{-6}
<i>Inst</i> ₄₀₀	400	5761	0.162932	1.3×10^{-7}	0.090980	3.7×10^{-6}
<i>Inst</i> ₅₀₀	500	8051	0.931596	0.1×10^{-8}	0.107732	1.8×10^{-6}

* Não resolveu dentro do tempo estabelecido (100 segundos).

todas as soluções. No caso da implementação do C-SymBP utilizando as simetrias inerentes ao problema.

Os detalhes da Tabela 10 são: as três primeiras colunas possuem representações equivalentes as três primeiras colunas da Tabela 9, as três colunas subsequente apresentam comparações entre tempo médio⁴ de CPU dos três métodos supracitados acima e por fim, as duas últimas trazem uma descrição da solução de cada DMDGP com o devido corte de precisão na matriz de distâncias proeminente de cada instância avaliada.

O número de instâncias resolvidas e/ou resolvidas no tempo estipulado pelos dois primeiros métodos foram menores e com isso surgem alguns questionamentos. O fato do C-SymBP se favorecer das simetrias do problema enquanto que o BP e o BP-Coope não para estas implementações explica a parte de resolver em tempo, como pode ser observado com os testes das instâncias *Inst*₈₀₀, *Inst*₉₀₀ e *Inst*₁₀₀₀. Entretanto o tamanho da proteína influencia fortemente no tempo e na solubilidade destas implementações, como podemos ver no teste da instância *Inst*₅₀₀₀ em destaque na Tabela 10, onde houve um aumento no corte para que o problema tivesse uma única solução, o qual apenas o C-SymBP resolveu.

⁴ Média referente a três execuções por instância.

Tabela 10 – Resultados Comparativos: BP versus BP-Coope versus C-SymBP

Instância			CPU (segundos)			SOLUÇÃO	
NOME	n	$ E $	BP	BP-Coope	C-SymBP	QUANTIDADE	CORTE
<i>Inst</i> ₁₀	10	43	0.052137	0.142125	0.043903	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₁₅	15	57	0.058683	0.197429	0.045885	2 ¹	4.5A
<i>Inst</i> ₂₀	20	101	0.060417	0.239517	0.061892	2 ²	4.5A
<i>Inst</i> ₂₅	25	165	0.050350	0.172753	0.046771	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₃₀	30	157	0.054902	0.201655	0.041924	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₄₀	40	303	0.064750	0.231952	0.048917	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₅₀	50	304	0.076956	0.213967	0.050310	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₆₀	60	564	0.087488	0.323432	0.051412	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₇₀	70	871	0.068098	0.274081	0.053976	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₈₀	80	660	0.066407	0.315164	0.060897	2 ⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₉₀	90	511	0.530597	6.158656	0.154538	2 ⁶	4.5A
<i>Inst</i> ₁₀₀	100	912	0.075554	0.875226	0.061378	2 ¹	4.5A
<i>Inst</i> ₂₀₀	200	2001	0.825446	21.363832	0.287690	2 ⁶	4.5A
<i>Inst</i> ₃₀₀	300	3716	0.158510	4.630694	0.104843	2 ¹	4.5A
<i>Inst</i> ₄₀₀	400	3817	0.567705	49.554446	0.307304	2 ⁶	4.5A
<i>Inst</i> ₅₀₀	500	5331	2.441809	11.463033	0.800330	2 ⁶	4.5A
<i>Inst</i> ₆₀₀	600	7275	3.157523	436.457171	0.899807	2 ⁶	4.5A
<i>Inst</i> ₇₀₀	700	7782	3.041658	398.893074	0.291804	2 ³	4.5A
<i>Inst</i> ₈₀₀	800	7347	239.590048	*	2.652892	2 ⁷	4.5A
<i>Inst</i> ₉₀₀	900	12223	*	*	308.181782	2 ¹⁴	4.5A
<i>Inst</i> ₁₀₀₀	1000	9796	*	*	130.643907	2 ⁹	4.5A
<i>Inst</i> ₂₀₀₀	2000	21969	**	*	185.163721	2 ¹²	4.5A
<i>Inst</i> ₃₀₀₀	3000	31290	**	*	*	2 ³⁸	4.5A
<i>Inst</i> ₄₀₀₀	4000	49754	**	**	*	2 ³⁰	4.5A
<i>Inst</i> ₅₀₀₀	5000	61324	**	**	3.210838	2 ⁰	5.0A

* Resolveu, porém não no tempo limite estabelecido (500 segundos).

** Não resolveu o problema para esta instância.

4.5.4 Perfil de Desempenho

Sejam $\mathcal{I}$ um conjunto de problemas testes com instâncias artificiais e $\mathcal{S}$ o conjunto de *solvers*, que aqui serão chamados simplesmente de métodos. O perfil de desempenho⁵ é uma ferramenta utilizada para avaliar e comparar o desempenho do conjunto de métodos $\mathcal{S}$ na resolução dos problemas do conjunto $\mathcal{I}$.

Seja $t_{i,s} \geq 0$ uma estatística correspondente a solução de uma instância teste $i \in \mathcal{I}$ por um método $s \in \mathcal{S}$. Esta estatística pode ser, por exemplo, o tempo computacional de resolução do problema ou o número de iterações do método. Suponha que quanto menor for o valor $t_{i,s}$, melhor será considerado o método s . Além disso, seja t_i o valor mínimo atingido na resolução da instância teste i por um método qualquer do conjunto $\mathcal{S}$ em

⁵ Do Inglês: Performance Profile

análise, e seja r_M um valor dado tal que $r_M \geq \frac{t_{i,s}}{t_i}$ para todo $s \in \mathcal{S}$. O desempenho do método s na resolução da instância i é comparado com o melhor desempenho t_i obtido por qualquer outro método na resolução desta instância. Isto é, considera-se a relação de desempenho

$$r_{i,s} = \frac{t_{i,s}}{t_i}. \quad (4.23)$$

O valor r_M escolhido é tal que $r_M \geq r_{i,s}$ para todo $s \in \mathcal{S}$ e $r_{i,s} = r_M$ se, e somente se, o método s não resolve o problema i . Mostra-se que a escolha de r_M não afeta a avaliação do desempenho dos métodos (DOLAN; MORÉ, 2001).

O perfil de desempenho do método s é definido como

$$\rho(\tau) = \frac{\text{número de problemas } i \in \mathcal{I} \text{ tais que } r_{i,s} \leq \tau}{|\mathcal{I}|}, \quad \tau \geq 1, \quad (4.24)$$

Em outras palavras, $\rho(\tau)$ é a fração de problemas para o qual $t_{i,s}$ está dentro de um fator τ do valor mínimo t_i . Em $\tau = 1$, o perfil de desempenho indica o percentual de problemas para os quais o método s é o melhor método, enquanto o percentual de problemas que são resolvidos pelo método s é dada por

$$\lim_{\tau \rightarrow r_M^-} \rho(\tau). \quad (4.25)$$

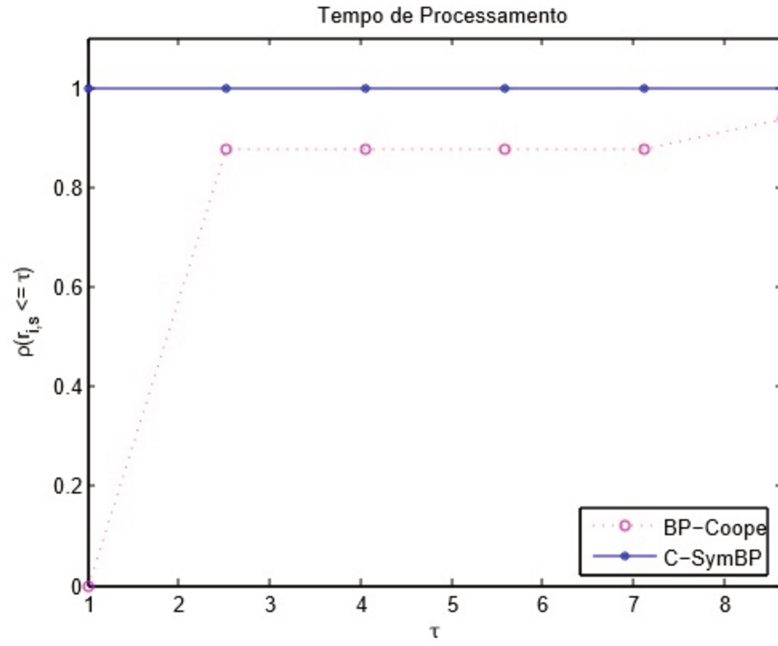
Finalmente, note que quando os valores dos quocientes de desempenho $\frac{t_{i,s}}{t_i}$ têm diferentes magnitudes, pode ser conveniente usar um perfil de desempenho em escala logarítmica, isto é,

$$\rho_{\log}(\tau) = \frac{\text{número de problemas } i \in \mathcal{I} \text{ tais que } \log(r_{i,s}) \leq \tau}{|\mathcal{I}|}, \quad \tau \geq 0. \quad (4.26)$$

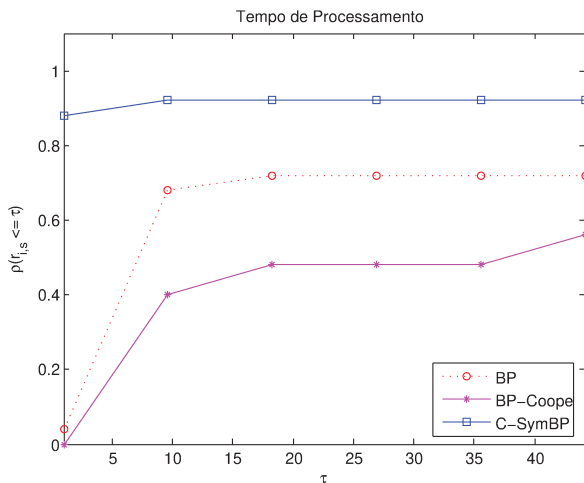
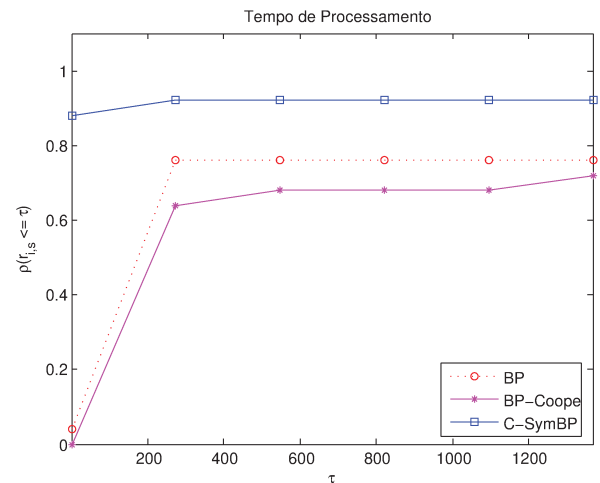
Neste trabalho, foi utilizado o sistema simples para medir os tempos de CPU, tanto para obtenção da primeira solução quanto na obtenção de todas as soluções, para cada DMDGP associado as instâncias listadas nas Tabelas 9 e 10, veja as Figuras 44, 45, 46 e 47.

Observação 4.5.2. O código da função de desempenho foi baseado no *script* de Elizabeth Dolan e Jorge J. Moré descrito em (DOLAN; MORÉ, 2001).

Notemos pela Figura 44 que representa a obtenção da primeira solução dos métodos C-SymBP versus BP-Coope versão nossa, que comparativamente a implementação do C-SymBP leva vantagem em 100% dos casos. Entretanto, com um fator τ de 2.5 o BP-Coope implementado por nós se torna competitivo em quase 90% dos casos. Se aumentamos o fator de tolerância τ para 9.0 temos que o BP-Coope resolveu 93.7% das instâncias indicadas na Tabela 9.

Figura 44 – Perfil de desempenho: $\tau \in [1, 9]$

As Figuras 45, 46 e 47 referem-se a Tabela 10 e trazem o perfil de desempenho dos métodos BP, BP-Coope e C-SymBP. Porém, as duas primeiras consideram tanto os problemas não resolvidos quanto os resolvidos acima do tempo estabelecido como não resolvidos, enquanto que a Figura 47 levou em consideração apenas os problemas resolvidos. Os casos em que ultrapassou o tempo estipulado considerou-se que tenham sido resolvidos em 500 segundos.

Figura 45 – $\tau \in [1, 45]$ Figura 46 – $\tau \in [1, 1400]$

Notemos pela Figura 45 que quando exigimos que o intervalo de discrepância entre os tempos de CPU tenha fator menor que 45.0 apenas 96.2% dos problemas são resolvidos. Novamente o C-SymBP se mostrou mais promissor e atinge os 96.2% resolvidos

com um fator τ de 10.0, enquanto que o BP resolve 70% dos casos e o BP-Coope apenas 40% com esse fator. Quando se aumenta o intervalo de discrepância entre os tempos de CPU dos métodos, nota-se que BP-Coope melhora consideravelmente sua competitividade em relação aos outros dois, também pode-se notar que o BP e o BP-Coope aumenta o percentual de instâncias resolvidas no tempo estipulado, enquanto que o C-SymBP permanece resolvendo os 96.2% como pode ser visto na Figura 46.

Quando consideramos apenas os problemas resolvidos independente do tempo estipulado, pode-se observar que os métodos são bastantes competitivos como podemos ver na Figura 47. Note que com um fator entre 200.0 e 300.0 o C-SymBP resolve todos os problemas enquanto que o BP e BP-Coope resolvem 84%, com este fator nota-se também que o BP-Coope começa a superar o BP em quantidade de problemas resolvidos, entretanto, só o C-SymBP resolve todos.

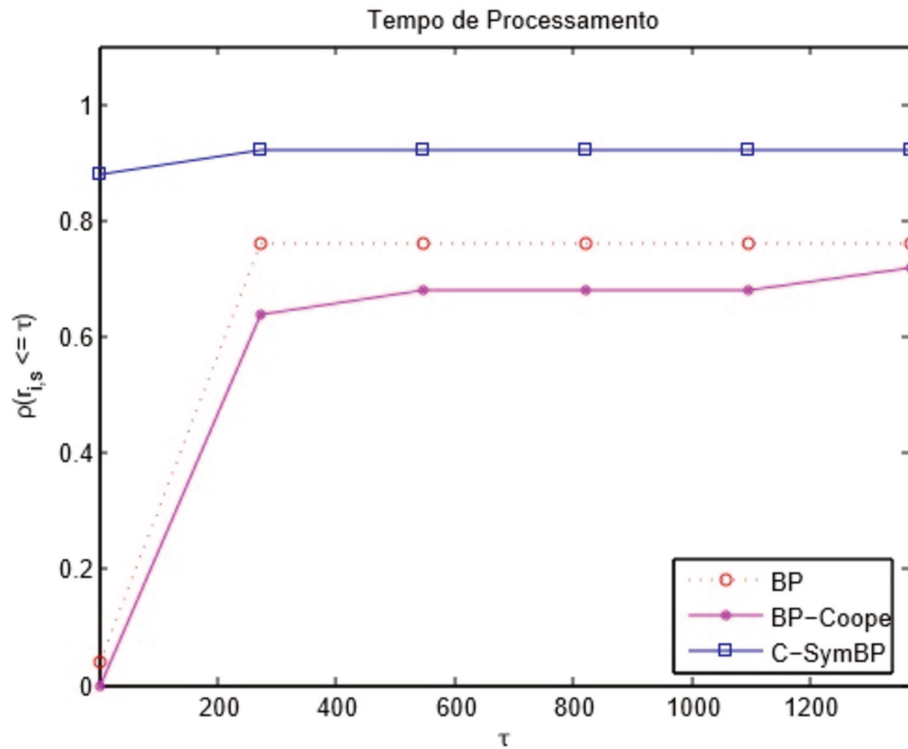


Figura 47 – Perfil de desempenho: $\tau \in [1, 1400]$.

5 Considerações Finais

5.1 Contribuições da Tese

A principal contribuição deste trabalho foi apresentar uma alternativa para resolução de problemas de geometria de distâncias utilizando álgebras geométricas. Baseado nesta nova abordagem, foi implementado um algoritmo utilizando ferramentas da álgebra geométrica conforme intitulado *C – SymBP algorithm*. Sua característica fundamental é que independente da dimensão do seu espaço de realização, ele pode ser adaptado para resolver qualquer problema de geometria de distâncias, desde que possa ser modelado por um grafo que admite uma ordenação nos seus vértices, de maneira que o problema admita uma discretização.

Primeiramente, modelamos o problema discretizado (kDMDGP), utilizando álgebra geométrica conforme. Resultados teóricos relacionados a essa classe de problemas surgiram ao longo do processo, todos foram apresentados e demonstrados no Capítulo 4. Também, foi neste capítulo que apresentamos o método de resolução implementado.

Experimentos numéricos, baseados em problemas já abordados na literatura, amplamente divulgado em (LIBERTI et al., 2014), ilustram o desempenho do *C – SymBP*. Comparações entre ele e uma implementação de um algoritmo clássico, que dispõe de ferramentas da álgebra linear para resolver essa classe de problemas são feitas no Capítulo 5. Em geral, em termos de tempo médio de CPU, os algoritmos possuem desempenho semelhantes, com alguma vantagem para o Algoritmo *C – SymBP*. Ainda neste capítulo, foi apresentada uma adaptação do algoritmo *C – SymBP* que via redução de matrizes, obtém os pontos em $\mathbb{R}^3$ oriundos da interseção de três esferas, que é parte principal de ambos os métodos.

5.2 Conclusão e Resultados Futuros

Como era esperado, devido à representação algébrica dos objetos que envolvem kDMDGP , em CGA, o método implementado se mostrou muito promissor. Devido ao pouco conhecimento que temos, tais implementações não trás qualquer refinamento.

Uma profunda investigação da aplicabilidade do método são objetos de pesquisa futura. Um estudo numérico comparando várias escolhas do parâmetro k em estratégias aplicadas ao problema combinatório é feito em (LIBERTI et al., 2014), mas até onde sabemos não existem referências relacionadas a escolhas práticas para k qualquer que

utilize CGA na implementação de algoritmos para resolver problema de geometria de distâncias.

Também, sugerimos como proposta de pesquisa futura, a possibilidade de enfraquecimento das hipóteses, em especial a exigência de k distâncias conhecidas entre os representantes dos vértices de G em $\mathbb{R}^k$. Nesse sentido, a técnica para se obter pontos oriundos de interseções entre objetos geométricos, produto *meet*, da álgebra geométrica podem ser de grande valia. Aliás, esse foi o principal motivo que nos levou à investigação desses resultados.

Referências

- ABUD, G. R. *Explorando a Dualidade em Geometria de Distâncias*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, 2014.
- ALVES, R. S. O. *Álgebra de Clifford Aplicada ao Cálculo de Estruturas Moleculares*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, 2013.
- ANDREAS, W. M. D.; HAVEL, T. F. Distance geometry and geometric algebra. *Foundations of Physics*, v. 23, n. 10, p. 1357–1374, 1993.
- BAJAJ, C. The algebraic degree of geometric optimization problems. *Discrete and Computational Geometry*, v. 3, n. 1, p. 177–191, 1988.
- BENEDETTI, R.; RISLER, J. J. *Real Algebraic and Semi-algebraic Sets*. [S.l.]: Paris: Hermann, 1990.
- BLUMENTHAL, L. *Theory and applications of distance geometry*. Chelsea Pub. Co., 1970. ISBN 9780828402422. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=QdcPAQAAMAAJ>>.
- BRÜNGER, A.; NILGES, M. Computational challenges for macromolecular structure determination by x-ray crystallography and solution nmr-spectroscopy. *Quarterly Reviews of Biophysics*, v. 26, p. 49–125, 1993.
- CASSIOLI, A. et al. Discretization vertex orders in distance geometry. *Discrete Applied Mathematics*, p. 27–41, 2015. Vol. 137.
- CAYLEY, A. A theorem in the geometry of position. *Cambridge Mathematical Journal*, p. 267 – 271.
- COOPE, I. Reliable computation of the points of intersection of n spheres in n-space. *ANZIAM J.*, p. 461–477, 2000. 42.
- DOLAN, E. D.; MORE, J. J. Benchmarking optimization software with performance profiles. *Published online October – Springer-Verlag*, v. 2, p. 201–213, 2001. Math. Program., Ser. A 91: 201–213 (2002).
- 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, n. 1-4, p. 365–375, 2002.
- DORST, L.; FONTIJNE, D.; MANN, S. *Geometric Algebra for Computer Science: An Object- Oriented Approach to Geometry (The Morgan Kaufmann Series in Computer Graphics)*. [S.l.]: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2007.
- EREN, T. et al. Rigidity, computation and randomization in network localization. *In IEEE InfoCom*, p. 2673–2684, 2004. Proceedings.
- FONTIJNE, D. *Efficient Implementation of Geometric Algebra*. Tese (Doutorado) — University of Amsterdam, 2007.

- GRAVER, J. E.; SERVATIUS, B.; SERVATIUS, H. *Combinatorial Rigidity*. [S.l.]: [S. l.]: American Mathematical Soc., 1993. v. 2. 172 p.
- 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.
- HENDRICKSON, B. The molecule problem: Exploiting structure in global optimization. *SIAM Journal on Optimization*, v. 5, n. 4, p. 835–857, 1995.
- HESTENES, D. The design of linear algebra and geometry. *Acta Applicandae Mathematicae*, v. 23, p. 65–93, 1991. Kluwer Academic Publishers.
- HESTENES, D.; SOBCZYCK, G. Clifford algebras to geometric calculus. *D. Reidel Publishing Company*, 1984.
- KRISLOCK, N.; WOLKOWICZ, H. Explicit sensor network localization using semidefinite representations and facial reductions. *SIAM Journal on Optimization*, v. 20, n. 5, p. 2679–2708, 2010.
- LAURENT, M. Matrix completion problems. In: *In: C. Floudas, P. Pardalos (eds.) Encyclopedia of Optimization. Springer–New York*. [S.l.: s.n.], 2009.
- LAVOR, C. Instances for the molecular distance geometry problem, in liberti, l. and maculan, n. (eds.). *Global Optimization: from Theory to Implementation*, p. 405–414, 2006. Springer, Berlin.
- LAVOR, C. et al. Discretization orders for distance geometry problems. *Optimization Letters*, Springer, v. 6, n. 4, p. 783–796, 2012.
- LAVOR, C.; LIBERTI, L. *Um Convite à Geometria de Distâncias*. [S.l.]: Notas em Matemática Aplicada, 2014. v. 71. 57 p. SBMAC, São Carlos - SP.
- LIBERTI, L.; LAVOR, C.; MACULAN, N. A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem. *International Transactions in Operational Research*, v. 15, n. 1, p. 1–17, 2008. Janeiro.
- LIBERTI, L. et al. Euclidean distance geometry and applications. *SIAM Review*, v. 56, n. 1, p. 3–69, 2014.
- LIBERTI, L. et al. *On the number of solutions of the discretizable molecular distance geometry problem*. [S.l.]: Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2011. v. 6831 LNCS. 322–342 p.
- LOUNESTO, P. *Clifford Algebras and Spinors*. [S.l.]: Cambridge University Press. 2^o Edition. Series: London Mathematical Society Lecture (No. 286).
- MACDONALD, A. *A Survey of Geometric Algebra and Geometric Calculus*. [S.l.], October 15, 2012.
- MENGER, K. Untersuchungen über allgemeine metrik. *Mathematische Annalen*, v. 103, p. 466–501, 1930. Issue 1.
- MENGER, K. New foundation of euclidean geometry. *American Journal of Mathematics*, p. 721 – 745, 1931. 53.

- MUCHERINO, A.; LAVOR, C.; LIBERTI, L. A symmetry-driven bp algorithm for the discretizable molecular distance geometry problem. In: *2011 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine Workshops, BIBMW 2011*. [S.l.: s.n.], 2011. p. 390–395.
- MUCHERINO, A.; LAVOR, C.; LIBERTI, L. The discretizable distance geometry problem. *Optimization Letters*, v. 6, n. 8, p. 1671–1686, 2012.
- MUCHERINO, A.; LAVOR, C.; LIBERTI, L. Exploiting symmetry properties of the discretizable molecular distance geometry problem. *Journal of Bioinformatics and Computational Biology*, v. 10, n. 3, 2012.
- MUCHERINO, A.; LIBERTI, L.; LAVOR, C. *MD-jeep: An implementation of a Branch and Prune algorithm for distance geometry problems*. [S.l.]: Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 2010. v. 6327 LNCS. 186–197 p. Cited By (since 1996):4.
- NELSON, D. L.; COX, M. M. *Lehninger Principles of Biochemistry*. [S.l.]: W.H. Freeman and Company, Sixth Edition, 2013. New York.
- PERWASS, C. B. U. *Geometric Algebra with Applications in Engineering*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2009.
- PERWASS, C. B. U.; HILDENBRAND, D. *Aspects of Geometric Algebra in Euclidean, Projective and Conformal Space (An Introductory Tutorial)*. [S.l.], 2004.
- PHILLIPS, A.; ROSEN, J.; WALKE, V. Molecular structure determination by convex global underestimation of local energy minima. *DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, v. 23, p. 181–198, 1996. American Mathematical Society, Providence.
- PORTEOUS, I. R. *Clifford Algebras and the Classical Groups*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995.
- ROCHA, R. da; VAZ, J. J. Extended grassmann and clifford algebras. *Adv. Appl. Clifford Algebras*, p. 103–125, 2006. ArXiv:math-ph/0603050.
- ROCHA, R. da; VAZ, J. J. Conformal structures and twistors in the paravector model of spacetime. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, p. 547–576, 2007. Vol. 4, No. 4 (2007).
- SAXE, J. B. Embeddability of weighted graphs in k-space is strongly np-hard. In: *Proc. 17th Allerton Conference in Communications, Control and Computing*. [S.l.: s.n.], 1979. p. 480–489.
- SILVA, W. F. *Estruturas Atômicas com Álgebra Geométrica*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.
- VAZ, J. J.; ROCHA, R. da. *Algebras De Clifford e Espinores*. [S.l.]: Sao Paulo: Editora Livraria da Fisica, 2012.
- ZENI, J. R. *Álgebras de Clifford, Transformações de Lorentz e o Movimento de Partículas Carregadas*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, 1992.