



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e Computação
Científica

JOSÉ VICENTE CIPRIANO DE SOUZA

ÁLGEBRA GEOMÉTRICA CONFORME EM GEOMETRIA DE
DISTÂNCIAS COM INCERTEZAS

CAMPINAS
2017

JOSÉ VICENTE CIPRIANO DE SOUZA

**ÁLGEBRA GEOMÉTRICA CONFORME EM GEOMETRIA DE
DISTÂNCIAS COM INCERTEZAS**

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

Orientador: Prof. Dr. Carlile Campos Lavor

Coorientador: Prof. Dr. Rafael Santos de Oliveira Alves

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA
TESE DEFENDIDA PELO ALUNO JOSÉ VICENTE CIPRI-
ANO DE SOUZA, E ORIENTADA PELO PROF. DR. PROF.
DR. CARLILE CAMPOS LAVOR.

**CAMPINAS
2017**

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): Não se aplica.

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

So89a Souza, José Vicente Cipriano de, 1964-
Álgebra geométrica conforme em geometria de distâncias com incertezas /
José Vicente Cipriano de Souza. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.

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

1. Geometria de distâncias. 2. Álgebra geométrica. 3. Proteínas - Estrutura.
4. Algoritmos branch-and-prune. I. Lavor, Carlile Campos, 1968-. II. Alves,
Rafael Santos de Oliveira, 1982-. III. Universidade Estadual de Campinas.
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Conformal geometric algebra in distance geometry with uncertainties

Palavras-chave em inglês:

Distance geometry

Geometric algebra

Proteins - Structure

Branch-and-prune algorithms

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Carlile Campos Lavor [Orientador]

Sueli Irene Rodrigues Costa

Nelson Maculan Filho

Leandro Augusto Frata Fernandes

Ricardo Antonio Mosna

Data de defesa: 30-10-2017

Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

**Tese de Doutorado defendida em 30 de outubro de 2017 e aprovada
pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.**

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

Prof(a). Dr(a). SUELI IRENE RODRIGUES COSTA

Prof(a). Dr(a). NELSON MACULAN FILHO

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

Prof(a). Dr(a). RICARDO ANTONIO MOSNA

As respectivas assinaturas dos membros encontram-se na Ata de defesa

Dedico este trabalho à Verônica e aos meus filhos: Daniel, Lucas e Carlos Henrique

Agradecimentos

Agradeço inicialmente e em especial a Deus pela vida, por ter me permitido chegar até a este ponto e poder realizar integralmente este projeto, atendendo às minhas preces por ânimo e perseverança.

Agradeço a meus pais, Joaquim e Marly, que me deram educação e incentivo aos estudos, pelo exemplo e carinho com que sempre me brindaram. Meu pai, sempre disposto a me tirar as dúvidas de matemática, no ensino fundamental, me serviu de inspiração e minha mãe, que sempre dizia que o estudo pode levar qualquer um a alcançar os seus objetivos.

Agradeço a todos os que, direta ou indiretamente, se viram envolvidos nesta minha fase de estudos e dedicação.

Cito inicialmente a minha companheira Verônica Viana Vieira, que sempre esteve ao meu lado, me incentivando e participando de todas as fases do curso, dando-me todo tipo de apoio e suporte.

Agradeço aos meus filhos Daniel, Lucas e Carlos Henrique, que sempre me apoiaram e incentivaram. Ao Daniel agradeço pela sua paciência em me ouvir falar sobre a tese e por dar ideias computacionais bastante úteis. Ao Lucas, que sempre esteve ao meu lado, também, a seu modo sempre me incentivou. E ao Carlos Henrique, que mesmo morando longe, sempre que possível me incentiva e suporta, apesar de ter formação diversa, ouvir-me falar em Geometria de Distâncias.

Às minhas irmãs Rosaly, Rosângela e Rosana. Rosaly, sempre incansável com suas caronas desde o IMECC e por, inúmeras vezes, me hospedar em sua casa, juntamente com o Franz, seu marido, a quem também agradeço a acolhida. À Rosana, agradeço pelo computador com que gentilmente me presenteou para que eu pudesse desenvolver todo o trabalho. À Rosângela que, mesmo de longe, sempre me incentivou e me serviu de modelo, por ter conquistado um doutorado na FIOCRUZ.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Carlile Campos Lavor, por esta oportunidade, ao aceitar me orientar neste trabalho, por sua paciência, estímulo e competência matemática e ao Prof. Dr. Rafael Santos de Oliveira Alves, coorientador, por sua cooperação, sempre pronto a trocar ideias, revisar o trabalho, tirar dúvidas e por ter me apresentado e ensinado a utilizar o CluCalc, software indispensável a este trabalho. Considero ambos, ao término deste trabalho, grandes amigos.

Ao Prof. Dr. Michael Ferreira de Souza, da UFC, pelas brilhantes ideias e desafios, que me instigavam a pensar nas soluções. Verdadeiro “gentleman”, muito contribuiu para o sucesso dessa empreitada. Mais um amigo que adquiri nessa labuta.

Agradeço a todos os professores e funcionários do IMECC que, direta ou indiretamente, colaboraram para a consecução desse curso de doutorado.

Em particular, agradeço à Prof^a. Dra. Sueli Irene Rodrigues Costa, ao Prof. Dr. Jayme Vaz Jr., meu orientador de mestrado e ao Prof. Dr. Edmundo Capelas de Oliveira, que aceitaram

me recomendar ao curso.

Por último, e não menos importante, gostaria de agradecer a gentiliza da Prof^ª. Dra. Sueli Irene Rodrigues Costa, da UNICAMP, do Prof. Dr. Nelson Maculan Filho, da UFRJ, do Prof. Dr. Leandro Augusto Frata Fernandes, da UFF e do Prof. Dr. Ricardo Antônio Mosna, da UNICAMP, em aceitarem compor a banca de defesa da tese.

“Tudo posso naquele que me fortalece.”

Filipenses 4:13

Resumo

O Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares (PDGDM) consiste na determinação da estrutura 3D de uma proteína, utilizando informações de distâncias interatômicas obtidas em experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). As ferramentas utilizadas para a solução deste problema são a Geometria de Distâncias (GD) e a Álgebra Geométrica (AG), também conhecida como Álgebra de Clifford, tomada no Espaço Conforme. A GD trata de determinar pontos, em um determinado espaço geométrico, conhecendo as distâncias entre alguns deles. Vale-se, para isto, de ferramentas matemáticas como grafos, onde surge o algoritmo BP – Branch and Prune – proposto para resolver o problema, seguindo uma estrutura de árvore binária, onde a solução do problema é representada por um caminho que segue desde a raiz até a folha da mesma. A AG é uma área da matemática que integra e generaliza vários objetos matemáticos como quatérnios, matrizes e números complexos e tem se mostrado particularmente útil em GD. No título deste trabalho aparece o termo “Incertezas”, tendo em vista que algumas das distâncias (ditas intervalares) fornecidas pela RMN não são precisas. A abordagem clássica do PDGDM é a discretização das distâncias intervalares, o que pode acarretar os seguintes contratempos: aumentar extremamente o espaço de busca, caso se tomem muitos pontos na amostragem, ou simplesmente não encontrar solução, caso se tomem poucos pontos. Com o propósito de contornar tal situação, empregamos a AG para tratar o problema de uma forma contínua, minorando o entrave proporcionado pela discretização.

Palavras-chave: Geometria de distâncias, Álgebra geométrica, Proteínas-Estrutura, Algoritmos branch-and-prune.

Abstract

The Discretizable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP) consists of determining the 3D structure of a protein using information of inter atomic distances obtained in experiments of Nuclear Magnetic Resonance (NMR). The tools used to solve this problem are Distance Geometry (DG) and Geometric Algebra (GA), also known as Clifford Algebra, taken in the Conformal Space. The DG attempts to determine points in a given geometric space through the knowledge of the distance between some of them. For this purpose, we use mathematical tools such as graphs, where the BP (Branch and Prune) algorithm is proposed as solution to the problem, followed by a binary tree structure, where the solution of the problem is represented by a path that follows from the root to the leaf. The GA is an area of mathematics that integrates and generalizes several mathematical objects such as quaternions, matrices, and complex numbers and has been shown to be particularly useful for use in DG. In the title of this work the term “Uncertainties” appears, since some of the interval distances provided by NMR are not precise. The classic DMDGP approach is the discretization of interval distances, which can lead to the following setbacks: great increase of the search space, if many points are taken in the sampling, or simply not finding a solution, if few points are taken. In order to overcome this situation, we use GA to treat the problem in a continuous way, reducing the constraint provided by the discretization.

Keywords: Distance geometry, Geometric algebra, Proteins-Structure, Branch-and-prune algorithms.

Lista de Figuras

2.1	Bivetores $\mathbf{B} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ e $-\mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}$, respectivamente.	26
2.2	Associatividade do produto exterior	28
2.3	Trivetor oposto	28
3.1	$\mathbf{u} \times \mathbf{v}$	47
3.2	Vetor projeção: \mathbf{v}_{\parallel}	48
3.3	Vetor rejeição: \mathbf{v}_{\perp}	48
3.4	Vetor refletido: \mathbf{v}_{\top}	49
3.5	Projeção de um vetor em um plano	49
3.6	Rejeição de um vetor em um plano	50
3.7	Reflexão de um vetor em um plano.	50
3.8	Rotação de um vetor \mathbf{v} no sentido de \mathbf{w}_1 para \mathbf{w}_2	51
4.1	Os pontos A e B projetam-se em C , no Plano de Projeção.	56
4.2	O \mathbb{R}^3 embutido no espaço homogêneo. Pontos λP projetam-se em $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$. O plano embaixo representa o \mathbb{R}^3 . O de cima representa uma “cópia” do \mathbb{R}^3 , onde os pontos são projetados. Figura baseada em [14]	56
4.3	Uma reta no espaço homogêneo é representada por um bivector	58
4.4	Projeção estereográfica	60
4.5	Determinação do vetor \mathbf{x}' em uma projeção estereográfica	61
4.6	Projeção estereográfica, com $ x < 1$	61
4.7	O vetor \mathbf{e}_- . Figura baseada em: [31, 33].	62
4.8	A horosfera e o cone nulo [15]	64
5.1	Ângulos de ligação, de torção e distâncias entre átomos [24]	77
5.2	Intersecção entre quatro esferas, sendo duas concêntricas [2]	78
5.3	Distância $d_{1,4}$ precisa.	79
5.4	Distância $d_{1,4}$ intervalar.	79
5.5	Exemplo de árvore para procura de posição para cinco átomos.	79
5.6	Eliminação de posições por distância de poda.	80
5.7	Arcos na Circunferência C_5	82
5.8	Discretização nos arcos.	83
5.9	Estrutura mostrando os átomos em X_i e X_{i+1}	84
5.10	Estrutura após o átomo em X_i sofrer rotação. O átomo em X_{i+1} “acompanha”, mantendo a distância para X_i	84
5.11	Intersecção, em corte, de esferas $S_{2,4}$ e $S_{3,4}$	85
5.12	Idem, com outros raios.	85
5.13	Eixo contendo o centro da circunferência C_4	85

5.14	Idem, para a outra situação acima.	85
5.15	Intersecção da esfera $S_{1,4}$ com a circunferência C_4 , sendo a distância $d_{1,4}$, precisa.	86
5.16	Arcos de possível posicionamento de átomo, com $d_{i-3,i}$ intervalar. [22].	86
5.17	Arcos marcados em C_4	87
5.18	Ângulos e arcos em C_4	88
5.19	Nenhum arco podado e ambos os arcos podados [1].	90
5.20	Redução nos limites do ângulo de rotação e poda em um dos arcos [1].	90
5.21	Redução e eliminação de arcos por distância de poda $d_{i-j,i}$	91
5.22	Um ângulo λ_i aplicado ao rotor retorna o ponto X.	91
5.23	Ângulo máximo a ser utilizado pelo rotor.	92
5.24	Arcos marcados em C_i por uma distância de poda.	93
5.25	Um ângulo λ_i aplicado ao rotor retorna o ponto X.	93
5.26	Exemplo de um quinto átomo, com distâncias de poda.	94
5.27	Situação 01	96
5.28	Situação 02	96
5.29	Situação 03	97
5.30	Situação 04	97
5.31	Situação 05	97
5.32	Situação 06	97
5.33	$\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$	98
5.34	$\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \mathcal{A}_2$	98
5.35	$\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$	98
5.36	$\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \emptyset$	98
6.1	Posições em C_4 . Opção por X_4^1	102
6.2	Arcos em C_5	103
6.3	Intersecção de arcos em C_5	107

Sumário

Dedicatória

Agradecimentos

1	Introdução	15
2	Quatérnios e Produto Exterior	19
2.1	Álgebra dos Quatérnios	19
2.1.1	Operações com os Quatérnios	19
2.1.2	Propriedades da soma e da Multiplicação de Quatérnios	22
2.1.3	Rotação	23
2.2	A Álgebra do Produto Exterior	24
2.2.1	O Produto Exterior	25
2.2.2	k -vetores e k -blades	25
2.2.3	Reversão	28
2.2.4	Espaços Vetoriais	28
2.2.5	Contração	31
3	Álgebra Geométrica	34
3.1	A Álgebra Geométrica do Espaço Euclidiano	34
3.1.1	Espaços Vetoriais e Graduação	35
3.1.2	Graduações	36
3.1.3	Produto Geométrico	36
3.1.4	Multivetores	39
3.1.5	Dualidade	43
3.1.6	Produto Geométrico - Caso Geral	44
3.1.7	A Álgebra Geométrica e os Quatérnios	45
3.1.8	A álgebra geométrica Cl_3 e a álgebra vetorial	46
3.1.9	Projeção, Rejeição e Reflexão	47
3.1.10	Rotações	50
3.1.11	Versores	53
4	Álgebra Geométrica no Espaço Conforme	55
4.1	Considerações Iniciais	55
4.2	Espaço Homogêneo	55
4.2.1	Homogeneidade	55
4.2.2	Pontos no Espaço Homogêneo	57

4.2.3	Retas no Espaço Homogêneo	58
4.2.4	Planos no Espaço Homogêneo	59
4.3	A projeção estereográfica	60
4.4	O Espaço Conforme	63
4.4.1	O Modelo Conforme	63
4.4.2	Representação de pontos	65
4.4.3	Representação de esferas	66
4.4.4	Representação de circunferência	67
4.4.5	Par de pontos	67
4.4.6	Representação de retas	68
4.4.7	Representação de planos	69
4.5	A Álgebra Geométrica no Espaço Conforme	70
4.6	Operações Geométricas	72
4.6.1	Rotações	72
5	Geometria de Distâncias	74
5.1	Introdução	74
5.2	Solução do Problema de Geometria de Distâncias (PGD)	75
5.3	Incertezas	75
5.4	O Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares - PDGDM	76
5.4.1	Arcos de procura	78
5.4.2	Distância de Poda	79
5.4.3	O PDGDM com álgebra linear	80
5.4.4	O PDGDM com Álgebra Geométrica Conforme	83
5.4.5	O ponto “percorrendo” o arco	83
5.4.6	Posicionamento do átomo i , $i \geq 4$	85
5.4.7	Posicionamento dos átomos subsequentes [2, 3].	88
5.4.8	No caso de haver distância de poda	90
5.4.9	Determinação do ângulo para localizar um ponto	91
5.4.10	Obtenção do ângulo correspondente a um ponto X	94
5.4.11	Algoritmo para redução ou eliminação de arco:	99
6	Exemplo de Aplicação	100
6.1	Introdução	100
6.2	Considerações Iniciais	100
6.3	Solução com Álgebra Geométrica Conforme	101
6.3.1	Comandos do Mathematica/CGA5Package	101
6.3.2	Posicionamento do quarto átomo	102
6.3.3	Posicionamento do quinto átomo	103
6.3.4	Posicionamento do sexto átomo	107
6.3.5	Posicionamento do sétimo átomo.	108
6.3.6	Considerações Finais	112
7	Conclusão	114
	Referências	115

Capítulo 1

Introdução

Quando o estudante dos cursos de matemática, física ou engenharia começa o seu estudo de cálculo logo lhe é apresentada a *álgebra vetorial moderna*, cujo desenvolvimento é atribuído ao cientista americano Josiah Willard Gibbs (1839-1903), que em 1881 publicou o primeiro livro sobre vetores, *Vector Analysis* [35], e ao inglês Oliver Heaviside (1850-1925), que o fez de forma independente [10]. A álgebra vetorial trata as operações com vetores, de forma satisfatória para o que vai estudar, e utilizando operações tais como produto vetorial e produto escalar. Tal álgebra ganhou força junto à comunidade científica a partir do final do século XIX [16]. Como os estudos vão, em sua grande maioria, ser tratados apenas até a terceira dimensão, a álgebra vetorial é satisfatória e, portanto, universalmente difundida. Entretanto, para problemas em dimensões maiores, a álgebra vetorial não é apropriada.

Para apresentar uma alternativa à álgebra vetorial é que alguns físicos e matemáticos, em particular David Hestenes (1933-) , começaram a “ressuscitar” a até então esquecida Álgebra Geométrica, ou Álgebra de Clifford, assim denominada em homenagem ao seu criador, o matemático inglês William Kingdom Clifford (1845-1879).

A Álgebra Geométrica foi desenvolvida segundo uma feliz junção da Álgebra dos Quatérnios, do matemático irlandês William Rowan Hamilton (1805-1865), e da Álgebra do Produto Exterior, do matemático alemão Hermann Günther Grassmann (1809–1877), tendo sido feita uma síntese e generalização destas [36]. Cabe ressaltar que a Álgebra Geométrica foi desenvolvida antes da Álgebra Vetorial. Clifford foi um dos poucos matemáticos de seu tempo que conheciam os quatérnios e os sistemas de Grassmann e, em 1878, portanto um ano antes de sua prematura morte, publicou um artigo, no qual apresenta o produto geométrico, base da álgebra geométrica [10]. Infelizmente, a álgebra de Clifford não teve a devida atenção na época em que surgiu, ficando quase esquecida por muito tempo.

Na Álgebra dos Quatérnios, foi feita uma extensão dos números complexos para a terceira dimensão, e na Álgebra do Produto Exterior, aparecem os elementos geométricos que estendem a ideia de vetores para quaisquer dimensões, de forma independente. Por exemplo, dois vetores linearmente independentes, \mathbf{u} e \mathbf{v} , geram um bivector, que está contido no plano gerado por estes vetores. O bivector, contido no plano, define a direção deste, sem que se precise de um vetor normal para este fim. Além disso, um bivector tem magnitude e sentido. Novos objetos vão sendo incorporados em outras dimensões, assim como os bivectores aparecem em 2D. Por exemplo, no espaço tridimensional surgem os trivetores, além dos escalares, vetores e bivectores, e assim sucessivamente.

A Álgebra Geométrica possui as vantagens da associatividade e existência de elemento in-

verso, permite formulação das áreas clássicas da física bem como descrever fenômenos quânticos. Além do mais, é possível definir o produto de quatérnios em um espaço vetorial arbitrário e mesmo em espaços não euclidianos [37]. Devido a esta versatilidade, sua aceitação tem sido crescente no meio acadêmico.

Mais recentemente foi desenvolvida a Álgebra Geométrica do Espaço Conforme (AGC), bastante apropriada para tratar de operações com esferas - nela tomadas como vetores - de uma maneira intuitiva, sem a preocupação direta com um sistema de coordenadas [12], para tratar de intersecções destas esferas, bem como lidar com rotações, de uma maneira diferente da estudada em álgebra linear, com a utilização dos rotores.

Um ramo mais novo da matemática é a Geometria de Distâncias (GD), que investiga as relações existentes entre três situações [23]:

- Distâncias entre objetos relacionados a um determinado problema,
- Distâncias entre pontos (representando tais objetos) em um dado espaço geométrico,
- Localização desses pontos, possivelmente em um espaço geométrico distinto.

As aplicações da Geometria de Distâncias são múltiplas, e podemos citar, entre outras: bioquímica, telecomunicações, robótica, astronomia e nanotecnologia [23].

A Geometria de Distâncias lança mão, em seu desenvolvimento, de vários ramos da matemática tais como Grafos, Álgebra Linear, Álgebra de Matrizes e, objeto do nosso trabalho, da Álgebra Geométrica.

A Álgebra Geométrica, tratada no espaço conforme, é ideal para se representarem círculos e esferas. Um ponto no espaço conforme pode representar um ponto correspondente no \mathbb{R}^3 . A distância entre dois pontos do \mathbb{R}^3 é facilmente obtida utilizando-se os seus representantes no espaço conforme. Com isto, é simples obter a equação de uma esfera. As esferas são, portanto, elementos primários na AGC, sendo fácil a sua manipulação tais como intersecção, que nos interessa neste trabalho.

Os cálculos para este caso são, entretanto, sistemáticas e volumosas, podendo tomar longo tempo. Por este motivo, a sua implementação em computadores é recomendada. Um software adequado para tal é o CIUCalc - Clifford Algebra Library and Utilities - desenvolvido por Christian Perwass.

Esta tese trata do Problema de Geometria de Distâncias - PGD - aplicado ao estudo de estruturas moleculares, que então toma o nome de PDGDM (Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares) no qual, como o próprio nome revela, busca-se determinar a estrutura espacial de moléculas, a partir de dados obtidos das informações obtidas na química, que nos fornecem distâncias entre átomos ligados por ligações covalentes e das informações obtidas com a Ressonância Magnética Nuclear (RMN), tecnologia altamente sofisticada que permite medir a distância entre átomos próximos, ainda que não sejam ligados covalentemente. Como as distâncias obtidas por meio de RMN são fornecidas dentro de um intervalo, no qual se encontra a real distância, aparece, no título da tese, o termo “incertezas”.

O leitor deve estar familiarizado com os conceitos da álgebra linear e da álgebra vetorial para a leitura e entendimento deste trabalho.

Estrutura do Trabalho

Este trabalho divide-se em sete capítulos sendo o primeiro esta Introdução e o último, uma Conclusão.

Nos capítulos de 2 a 5 são apresentados os fundamentos teóricos que serão utilizados na aplicação, que é desenvolvida no capítulo 6. Assim, temos:

- Capítulo 2 - Álgebra dos Quatérnios e Álgebra do Produto Exterior: Neste capítulo são apresentadas as álgebras que deram origem e que compõem a Álgebra Geométrica, sendo discutidas suas principais propriedades.
- Capítulo 3 - Álgebra Geométrica: Aqui a Álgebra Geométrica é mostrada no Espaço Euclidiano, e suas relações com as álgebras que lhe deram origem. É também apresentado o *produto geométrico*, operação característica e fundamental desta álgebra.
- Capítulo 4 - Álgebra Geométrica no Espaço Conforme: Aqui são apresentados o Espaço Homogêneo e o Espaço Conforme e como a Álgebra Geométrica, neste último, é utilizada para tratar de pontos, retas, planos e, em especial, esferas e circunferências, bem como as intersecções destas. Apresentamos a operação de rotação, que será útil na nossa aplicação.
- Capítulo 5 - Geometria de Distâncias: Aqui é apresentada a Geometria de Distâncias e com ela o Problema da Geometria de Distâncias (PGD). Tratamos aqui do Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares (PDGDM) e de como a Álgebra Geométrica no Espaço Conforme pode ser utilizada em busca da sua solução.
- Capítulo 6 - Exemplo de Aplicação: É um exemplo de PDGDM, em que os três primeiros átomos estão localizados em posições conhecidas e queremos determinar a posição dos demais átomos, até o sétimo. Nesta molécula hipotética dispomos, para isto, de algumas distâncias entre os átomos, que retratam aquelas obtidas por meio de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e da química. Algumas distâncias são precisas e outras, estimadas dentro de um intervalo, como o são as obtidas pela RMN.

Contribuições do Trabalho

As contribuições deste trabalho são teóricas. São elas:

1. Um método de se descrever de maneira contínua os pontos em arcos de intersecção de esferas, eliminando os problemas gerados pela discretização destes arcos, que são o aumento significativo do espaço de busca por soluções do PDGDM, bem como a possível perda de solução. Isto está tratado no item “Posicionamento dos átomos subsequentes”, no capítulo 5, subseção 5.4.7, e baseia-se no artigo [3].

2. Além da contribuição acima, esta tese apresenta o sistema de equações 5.4.16, que permite determinar que ângulo devemos atribuir a um rotor para que possamos obter um ponto específico em um arco. O assunto pode ser lido na subseção 5.4.10.

3. De posse dos ângulos obtidos em 5.4.16, podemos determinar que intervalo de ângulos delimita os arcos marcados por uma ou várias distâncias de poda e assim, como mais uma contribuição, esta tese apresenta um algoritmo, intitulado “algoritmo para redução ou eliminação

de arco”, capaz de verificar se determinado arco deve ser eliminado por não atender a todas as distâncias de poda ou se o arco deve ser reduzido por intersecção, proporcionando, desta forma, uma diminuição do espaço de busca por pontos que atendam a todas as distâncias. O assunto pode ser lido na subseção 5.4.11.

Capítulo 2

Quatérnios e Produto Exterior

2.1 Álgebra dos Quatérnios

Os quatérnios surgiram com o objetivo de estender a ideia de números complexos ao espaço tridimensional, com o objetivo de obterem-se rotações de vetores em 3-D, de maneira semelhante às rotações obtidas em 2-D com a utilização de números complexos. A criação dos quatérnios é devida ao matemático irlandês William Rowan Hamilton, em 1843.

O propósito foi introduzir novas unidades imaginárias, à semelhança da unidade i dos complexos. Foram elas j e k . Os quatérnios têm a forma $q = a + bi + cj + dk$, onde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ e $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$ ([18], [28]).

Os quatérnios, assim como os números complexos, têm duas partes: a parte real, $R(q) = a$ e a parte imaginária pura, ou somente pura, $P(q) = bi + cj + dk$. Pode-se ainda, considerar, respectivamente parte escalar e parte vetorial do quatérnio, ou seja, $R(q) = a$ corresponde a um escalar e $P(q) = bi + cj + dk$, a um vetor tridimensional.

Nos quatérnios, podemos considerar as operações de soma, produto e divisão. Além disso, os quatérnios são adequados para se procederem rotações.

2.1.1 Operações com os Quatérnios

Soma

Para somarmos dois ou mais quatérnios devemos, tal qual os complexos, somar os termos semelhantes.

Por exemplo: sendo $q = a + bi + cj + dk$ e $p = e + fi + gj + hk$, então teremos $q + p = (a + e) + (b + f)i + (c + g)j + (d + h)k$. A soma é comutativa e associativa.

Produto por escalar

Podemos multiplicar um quatérnio por um escalar, bastando para isso usar a distributividade, obtendo assim, um novo quatérnio. Sendo, por exemplo, $q = a + bi + cj + dk$ um quatérnio e λ um escalar, obteremos o quatérnio $p = \lambda q = \lambda a + \lambda bi + \lambda cj + \lambda dk$.

Com isto, podemos combinar soma e produto por escalar para operar com os quatérnios. Se temos, por exemplo, os quatérnios $q_1 = a_1 + b_1i + c_1j + d_1k$, $q_2 = a_2 + b_2i + c_2j + d_2k$, \dots , $q_n = a_n + b_ni + c_nj + d_nk$ e os escalares $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, podemos obter o quatérnio:

$$q = \lambda_1 q_1 + \lambda_2 q_2 + \cdots + \lambda_n q_n = (\lambda_1 a_1 + \cdots + \lambda_n a_n) + (\lambda_1 b_1 + \cdots + \lambda_n b_n)i + (\lambda_1 c_1 + \cdots + \lambda_n c_n)j + (\lambda_1 d_1 + \cdots + \lambda_n d_n)k.$$

Multiplicação de Quatérnios

O produto de dois quatérnios é definido levando em conta a regra distributiva do produto e as seguintes relações entre as unidades imaginárias:

$$\begin{aligned} ij &= k; ji = -k; \\ jk &= i; kj = -i; \\ ki &= j; ik = -j; \\ ijk &= -1, \end{aligned}$$

donde concluímos que o produto entre as unidades imaginárias é não comutativo.

Se multiplicarmos os quatérnios $q = a + bi + cj + dk$ e $p = e + fi + gj + hk$ teremos o quatérnio

$$qp = ae + a fi + agj + ahk + bei + bfi^2 + bgi j + bhik + cej + cfji + cgj^2 + chjk + dek + dfki + dgkj + dhk^2 = (ae - bf - cg - dh) + (af + be + ch - dg)i + (ag - bh + ce + df)j + (ah + bg - cf + de)k$$

e o quatérnio:

$$pq = ea + ebi + ecj + edk + fai + fbi^2 + fcij + fdik + gaj + gbji + gcj^2 + gdjk + hak + hbki + hckj + hdk^2 = (ea - fb - gc - hd) + (eb + fa + gd - hc)i + (ec + ga + hb - fd)j + (ed + ha + fc - gb)k.$$

Devemos observar que a parte escalar é a mesma em qp e em pq , mas que a vetorial, não, ou seja, o produto entre dois quatérnios é não-comutativo, mas podemos verificar que é associativo.

Podemos escrever $q = a + \mathbf{v}$ e $p = e + \mathbf{w}$, onde \mathbf{v} e \mathbf{w} são as partes vetoriais de q e p , respectivamente. Neste caso, teremos:

$$qp = ae + a\mathbf{w} + e\mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{w} \tag{2.1.1}$$

Podemos reescrever

$$qp = (ae - bf - cg - dh) + (af + be + ch - dg)i + (ag - bh + ce + df)j + (ah + bg - cf + de)k$$

como:

$$qp = ae + a(fi + gj + hk) + e(bi + cj + dk) + [(ch - dg)i + (df - bh)j + (bg - cf)k - (bf + cg + dh)]$$

Comparando esta última expressão com 2.1.1 e lembrando, da álgebra vetorial, que para os vetores $\mathbf{v} = bi + cj + dk$ e $\mathbf{w} = fi + gj + hk$, temos:

- Produto escalar: $\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = bf + cg + dh$, e
- Produto vetorial: $\mathbf{v} \times \mathbf{w} = (ch - dg)\mathbf{i} + (df - bh)\mathbf{j} + (bg - cf)\mathbf{k}$,

concluimos que o produto das partes vetoriais de q e p é:

$$\mathbf{vw} = \mathbf{v} \times \mathbf{w} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \quad (2.1.2)$$

ou seja, para $q = a + \mathbf{v}$ e $p = e + \mathbf{w}$, teremos:

$$qp = ae + a\mathbf{w} + e\mathbf{v} + \mathbf{v} \times \mathbf{w} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{w}. \quad (2.1.3)$$

Conjugação

A conjugação de um quatérnio é uma operação semelhante à conjugação de um complexo, ou seja, se $q = a + bi + cj + dk$ então o seu conjugado será: $q^\dagger = a - bi - cj - dk$. O quatérnio conjugado de q denota-se por q^\dagger .

Seguem-se as seguintes propriedades:

- $(q + r)^\dagger = q^\dagger + r^\dagger$
- $(qr)^\dagger = r^\dagger q^\dagger$
- $(q^\dagger)^\dagger = q$.

A conjugação de um quatérnio $q = R(q) + P(q)$ nos permite separar a parte escalar $R(q)$ (real) e a parte vetorial $P(q)$ (pura) do mesmo, da seguinte forma:

- $R(q) = \frac{q + q^\dagger}{2}$.
- $P(q) = \frac{q - q^\dagger}{2}$.

Considere, agora, um quatérnio $q = R(q) + P(q)$, sendo $R(q)$ a parte real e $P(q)$ a parte vetorial. Então:

- Se $q^\dagger = q$ é porque $P(q) = 0$ e o quatérnio é um escalar, e
- Se $q^\dagger = -q$ é porque $R(q) = 0$ e o quatérnio será um vetor.

Desta forma, então, podemos distinguir se um quatérnio é um escalar ou um vetor.

Norma

A norma de um quatérnio nada mais é do que a raiz quadrada do produto com o seu conjugado. Ou seja: $\|q\| = \sqrt{qq^\dagger} = \sqrt{q^\dagger q} = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2 + d^2}$.

É importante ressaltar que $\|q\| = 0 \Leftrightarrow q = 0$.

Inverso multiplicativo

Um quatérnio não nulo q admite, sempre, um quatérnio inverso multiplicativo q^{-1} , tal que:

$$qq^{-1} = q^{-1}q = 1.$$

Podemos obtê-lo da seguinte forma:

$$qq^{-1} = 1 \Rightarrow q^\dagger qq^{-1} = q^\dagger \Rightarrow \|q\|^2 q^{-1} = q^\dagger \Rightarrow q^{-1} = \frac{q^\dagger}{\|q\|^2}.$$

O conjunto dos quatérnios é um *campo*, no sentido de que todo quatérnio não nulo q possui um inverso, q^{-1} , permitindo, desta forma, existir divisão por quatérnio, fechada dentro do conjunto, e valendo a lei do cancelamento, ou seja, se $qq' = qq''$ para $q \neq 0$, teremos $q' = q''$. [18]

2.1.2 Propriedades da soma e da Multiplicação de Quatérnios

Tendo em vista a soma e o produto dos quatérnios como foram apresentados acima, podemos verificar que as seguintes regras são válidas:

Sendo p , q e r quatérnios, temos:

Em relação à soma:

- 1) Associatividade: $(p + q) + r = p + (q + r)$.
- 2) Existência de elemento neutro: $q + 0 = 0 + q = q$; 0 é o elemento neutro para a soma.
- 3) Existência de elemento oposto: $q + (-q) = (-q) + q = 0$; $(-q)$ é oposto de q , para a soma.
- 4) Comutatividade: $p + q = q + p$.

Em relação à multiplicação:

- 5) Associatividade: $p(qr) = (pq)r$.
- 6) Existência de elemento neutro: $1q = q1 = q$, onde 1 é o elemento neutro para a multiplicação.
- 7) Distributiva de um escalar em relação à soma de quatérnios: Para $\lambda \in \mathbb{R}$, $\lambda(p + q) = \lambda p + \lambda q$.
- 8) Distributiva da soma de escalares em relação à um quatérnio: Para $\lambda, \alpha \in \mathbb{R}$, $(\lambda + \alpha)p = \lambda p + \alpha p$.
- 9) Existência de elemento inverso: $q^{-1}q = qq^{-1} = 1$, onde q^{-1} é o inverso multiplicativo de q .

Em relação à soma e multiplicação:

- Distributividade: $p(q + r) = pq + pr$.

Chamamos atenção ao fato de a multiplicação dos quatérnios ser não-comutativa.

Espaço Vetorial dos Quatérnios

Tendo em vista as propriedades acima descritas podemos afirmar que o conjunto \mathbb{H} de todos os quatérnios forma um espaço vetorial cuja base canônica é $\{1, i, j, k\}$.

2.1.3 Rotação

Os quatérnios são ferramentas matemáticas úteis para descrever rotações de vetores no espaço tridimensional. A vantagem de se tratar rotações de vetores com quatérnios reside no fato de ser mais simples que o tratamento com matrizes.

Considere um vetor \mathbf{r} , considerado como um quatérnio possuindo apenas a parte pura, ou seja, $\mathbf{r} = 0 + xi + yj + zk$ e um quatérnio $q = a + bi + cj + dk$ unitário, ou seja, $\|q\| = 1$. Podemos mostrar que a expressão qrq^\dagger é também um vetor e possui a mesma norma do vetor \mathbf{r} :

- É também um vetor: vimos que um quatérnio x será um vetor se $x^\dagger = -x$. Então:

$$(qrq^\dagger)^\dagger = (q^\dagger)^\dagger \mathbf{r}^\dagger q^\dagger = q(-\mathbf{r})q^\dagger = -(qrq^\dagger).$$

- Possui a mesma norma do vetor \mathbf{r} : vimos que a norma de um quatérnio x é dada por $\|x\| = \sqrt{xx^\dagger}$ e, como q é unitário, teremos:

$$\|qrq^\dagger\|^2 = (qrq^\dagger)(qrq^\dagger)^\dagger = qrq^\dagger q \mathbf{r}^\dagger q^\dagger = q \mathbf{r} \mathbf{r}^\dagger q^\dagger = \|\mathbf{r}\|^2 q q^\dagger = \|\mathbf{r}\|^2.$$

Temos, portanto, uma aplicação de \mathbb{R}^3 em \mathbb{R}^3 , dada por:

$$\mathbf{r} \rightarrow qrq^\dagger,$$

que preserva a norma e que mostraremos se tratar de uma rotação em \mathbb{R}^3 . [28]

Podemos escrever um quatérnio unitário $q = a + bi + cj + dk$ na forma:

$$q = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \mathbf{u} \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \exp\left(\mathbf{u} \frac{\theta}{2}\right), \quad (2.1.4)$$

sendo \mathbf{u} um vetor unitário, bastando para isso verificar que se $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$, então existe um ângulo θ para o qual podemos tomar $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = a$ e $\operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \sqrt{b^2 + c^2 + d^2}$. [20], onde devemos observar que, sendo $\mathbf{u} = u_1 \mathbf{i} + u_2 \mathbf{j} + u_3 \mathbf{k}$, tomemos $u_1 = b/\operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$, $u_2 = c/\operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$ e $u_3 = d/\operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)$.

Vimos que a operação qrq^\dagger representa um vetor com a mesma norma de \mathbf{r} . Façamos então \mathbf{r}' ser o vetor resultante desta operação, ou seja, $\mathbf{r}' = qrq^\dagger$. Pode-se mostrar que este vetor \mathbf{r}' é o vetor resultante da rotação de \mathbf{r} , em torno de um eixo l cuja direção é dada por \mathbf{u} , de um ângulo θ , ou seja,

$$\mathbf{r}' = qrq^\dagger = \left(\cos\frac{\theta}{2} + \mathbf{u} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{r} \left(\cos\frac{\theta}{2} - \mathbf{u} \operatorname{sen}\frac{\theta}{2}\right) = \mathbf{r} \cos^2\frac{\theta}{2} + (\mathbf{u} \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{u}) \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2} - \mathbf{u} \mathbf{r} \mathbf{u} \operatorname{sen}^2\frac{\theta}{2}.$$

Mas, como visto em 2.1.2, sendo $\mathbf{u} \mathbf{r} = \mathbf{u} \times \mathbf{r} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}$ e $\mathbf{r} \mathbf{u} = -\mathbf{u} \times \mathbf{r} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}$, temos:

- $\mathbf{u} \mathbf{r} - \mathbf{r} \mathbf{u} = 2(\mathbf{u} \times \mathbf{r})$; e
- $\mathbf{u} \mathbf{r} \mathbf{u} = \mathbf{u}(-\mathbf{u} \times \mathbf{r} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}) = -(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} - \mathbf{u}(\mathbf{u} \times \mathbf{r}) = -(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} - [\mathbf{u} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{r}) - \mathbf{u} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{r})]$
 $= -(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} - \mathbf{u} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{r}) = -(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})\mathbf{r} = \|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{r} - 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} \Rightarrow$
 $\mathbf{u} \mathbf{r} \mathbf{u} = \mathbf{r} - 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u}.$

Aplicando, agora, estes resultados, temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= q\mathbf{r}q^\dagger = \mathbf{r} \cos^2 \frac{\theta}{2} + 2(\mathbf{u} \times \mathbf{r}) \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} - (\mathbf{r} - 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u})(\sin^2 \frac{\theta}{2}) = \\ &= \mathbf{r}(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}) + (\mathbf{u} \times \mathbf{r}) \sin \theta + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u} (2 \sin^2 \frac{\theta}{2}) \Rightarrow \\ &= \mathbf{r}' = q\mathbf{r}q^\dagger = \mathbf{r} \cos \theta + (\mathbf{u} \times \mathbf{r}) \sin \theta + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u}(1 - \cos \theta), \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

que é a “Fórmula de Rodrigues”¹ [20, 28]. Esta fórmula representa a rotação de um ângulo θ a que o vetor \mathbf{r} é submetido, em torno do eixo cuja direção é \mathbf{u} , tornando-se o vetor \mathbf{r}' . Por este motivo, dizemos que $q = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \mathbf{u} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ é um “rotor” em torno de l (reta que tem direção \mathbf{u}) por um ângulo θ .

Agora, se aplicarmos o rotor $-q$ ao mesmo vetor \mathbf{r} , observamos que ele vai ser submetido à mesma rotação, resultando no mesmo vetor \mathbf{r}' , ou seja,

$$-q = -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \mathbf{u} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos\left(\pi - \frac{\theta}{2}\right) - \mathbf{u} \sin\left(\pi - \frac{\theta}{2}\right)$$

representa a rotação em torno de $-\mathbf{u}$ de um ângulo $2\pi - \theta$, que é o mesmo que uma rotação de θ em torno de \mathbf{u} [20].

Composição de rotações

Suponha que um vetor \mathbf{r} seja submetido, sucessivamente, a duas rotações:

- Inicialmente, usando um rotor q_1 , em torno de \mathbf{u}_1 , de um ângulo θ_1 , resultando em \mathbf{r}'_1 .
- Em seguida, usando um rotor q_2 , em torno de \mathbf{u}_2 , de um ângulo θ_2 , resultando em \mathbf{r}'_2 .

Para obter \mathbf{r}'_1 , fazemos: $\mathbf{r}'_1 = q_1\mathbf{r}q_1^\dagger$.

Para obter \mathbf{r}'_2 , fazemos: $\mathbf{r}'_2 = q_2\mathbf{r}'_1q_2^\dagger = q_2(q_1\mathbf{r}q_1^\dagger)q_2^\dagger = (q_2q_1)\mathbf{r}(q_1^\dagger q_2^\dagger) = (q_2q_1)\mathbf{r}(q_2q_1)^\dagger$.

Fazendo $q_R = q_2q_1$ e $\mathbf{r}'_R = \mathbf{r}'_2$, podemos escrever:

$$\mathbf{r}'_R = q_R\mathbf{r}q_R^\dagger$$

em que $q_R = q_2q_1$ é o rotor resultante da composição das duas rotações, ou seja, $q_R = q_2 \circ q_1$.

2.2 A Álgebra do Produto Exterior

O matemático alemão Hermann Günther Grassmann (1809-1877) desenvolveu a Álgebra do Produto Exterior.

Os vetores, como sabemos, possuem uma magnitude (módulo), direção e sentido (orientação), e já eram utilizados à época. Entretanto, para representar um plano, Grassmann elaborou

¹Benjamin Olinde Rodrigues (1795-1851), matemático francês, notabilizou-se pelo estudo das rotações de vetores propondo, em 1840, as relações de arco-metade para calcular o efeito da composição de rotações finitas [16].

o chamado produto exterior entre dois vetores deste plano, a que chamou de bivector, que é, portanto, um elemento de plano orientado, da mesma forma que um vetor é um elemento de linha orientado.

Uma vez definida uma representação para o plano, fez-se necessária a representação para o \mathbb{R}^3 . Para isso, basta efetuar um produto exterior entre um bivector e um vetor não coplanares, gerando um trivector que é um segmento de volume orientado.

Na álgebra de Grassmann podemos representar objetos geométricos em quaisquer dimensões, e não apenas até 3 dimensões, ou seja, temos n -vetores para representar objetos n -dimensionais.

2.2.1 O Produto Exterior

O produto exterior é uma ferramenta matemática introduzida por Grassmann, que tem como símbolo a cunha: \wedge . Vejamos, inicialmente, as propriedades operacionais básicas, considerando-se os vetores linearmente independentes \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} :

- Entre escalares: Sendo λ e α dois escalares, teremos: $\lambda \wedge \alpha = \lambda \alpha$, ou seja, o produto usual entre escalares.
- Entre um escalar e um vetor: Sendo λ um escalar, teremos: $\lambda \wedge \mathbf{v} = \mathbf{v} \wedge \lambda = \lambda \mathbf{v}$, o produto usual entre escalar e vetor.
- $\mathbf{u} \wedge \mathbf{u} = 0$;
- $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = -(\mathbf{v} \wedge \mathbf{u})$, antissimetria;
- $(\lambda \mathbf{u}) \wedge \mathbf{v} = \lambda(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})$ e $\mathbf{u} \wedge (\lambda \mathbf{v}) = \lambda(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})$, homogeneidade.
- $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{w} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ e $\mathbf{w} \wedge (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \mathbf{w} \wedge \mathbf{u} + \mathbf{w} \wedge \mathbf{v}$, distributividade.
- $\mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w}$, associatividade.

2.2.2 k -vetores e k -blades

k -blade - Considere uma quantidade k de vetores linearmente independentes a_i em \mathbb{R}^n . Se fizermos o produto exterior entre eles, obteremos um objeto chamado de k -blade, denotado como $A_{\langle k \rangle}$:

$$A_{\langle k \rangle} = a_1 \wedge a_2 \wedge \dots \wedge a_k.$$

Se os vetores a_i , constituintes do k -blade forem ortogonais entre si, teremos um k -blade básico. Um k -blade pode ser escrito como combinação linear de k -blades básicos [11].

Como exemplo, vamos considerar o \mathbb{R}^4 , com a base canônica $\{e_1, e_2, e_3, e_4\}$. Temos: $A_{\langle 2 \rangle} = e_1 \wedge (e_2 + e_3) \Rightarrow A_{\langle 2 \rangle} = e_1 \wedge e_2 + e_1 \wedge e_3$.

k -vetor - É uma combinação linear de k -blades e é denotado por A_k .

Como exemplo de um 2-vetor no \mathbb{R}^4 temos: $A_2 = e_1 \wedge e_2 + e_3 \wedge e_4$.

Observações:

- Nem todo k -vetor é um k -blade, pois nem sempre podemos fatorá-lo como produto exterior de uma quantidade k de vetores. O 2-vetor $A_2 = e_1 \wedge e_2 + e_3 \wedge e_4$ é um exemplo disto. Entretanto, todo k -blade é um k -vetor [16].
- Um escalar é um 0-blade e um vetor é um 1-blade.
- Em \mathbb{R}^n somente 0-vetores, 1-vetores, $(n-1)$ -vetores e n -vetores são sempre blades. Como consequência, no espaço 3-D todos os k -vetores são k -blades [14].

Bivetores

O produto exterior entre dois vetores define o que é chamado de bivector. O bivector \mathbf{B} , resultante do produto exterior entre os vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , nesta ordem, será o bivector $\mathbf{B} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, que possui magnitude dada pela área do paralelogramo formado pelos dois vetores, inclinação do plano que contém os dois vetores e sentido que neste caso será o que se obtém percorrendo a borda de \mathbf{u} para \mathbf{v} . Por outro lado, o bivector $-\mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}$ possui a mesma magnitude, a mesma direção, porém sentido oposto ao do bivector \mathbf{B} . Um bivector não é nem um escalar, nem um vetor.

Um bivector unitário é aquele que possui magnitude 1. No \mathbb{R}^3 , por exemplo, se tomarmos os vetores unitários da base canônica, então o bivector $\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2$ ou qualquer bivector $\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j$, $i, j = 1, 2, 3$, são exemplos de bivectores unitários.



Figura 2.1: Bivetores $\mathbf{B} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ e $-\mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}$, respectivamente.

O bivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ representa, portanto, um paralelogramo orientado sobre o plano gerado por \mathbf{u} e \mathbf{v} . Se fizermos o produto exterior entre os vetores $\lambda\mathbf{u}$ e $\alpha\mathbf{v}$ obteremos o bivector $(\lambda\mathbf{u}) \wedge (\alpha\mathbf{v}) = \lambda(\mathbf{u} \wedge (\alpha\mathbf{v})) = \lambda(\alpha(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})) = (\lambda\alpha)\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, que terá área $(\lambda\alpha)$ vezes a área do bivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$.

Logicamente, devido à interpretação geométrica do produto exterior de dois vetores, o produto exterior de um vetor por ele mesmo será nulo:

$$\mathbf{v} \wedge \mathbf{v} = 0.$$

De forma geral, se tivermos dois vetores paralelos, o produto exterior entre eles será nulo: se $\mathbf{u} = \lambda\mathbf{v}$ então $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \wedge \mathbf{v} = 0$. O inverso disso também é verdadeiro: se soubermos que $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = 0$ então podemos afirmar que $\mathbf{u} \parallel \mathbf{v}$.

Distributividade do produto exterior

O produto exterior é distributivo, e segue as seguintes regras:

- $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{w} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$; e

- $\mathbf{w} \wedge (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \mathbf{w} \wedge \mathbf{u} + \mathbf{w} \wedge \mathbf{v}$.

A prova disso pode ser feito com o uso de determinantes, como veremos à frente.

Antissimetria do produto exterior

Usando a distributividade, e fazendo o produto exterior do vetor $\mathbf{u} + \mathbf{v}$ por ele mesmo, teremos:

$$(\mathbf{u} + \mathbf{v}) \wedge (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = 0 \Rightarrow \mathbf{u} \wedge \mathbf{u} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{v} = 0 \Rightarrow$$

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = -\mathbf{v} \wedge \mathbf{u}.$$

Trivetores

O trivetor é mais um objeto geométrico que foi imaginado por Grassmann em sua álgebra exterior. Um trivetor \mathbf{T} é obtido pelo produto exterior entre um vetor \mathbf{u} e um bivetor $\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$:

$$\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}).$$

Um trivetor representa geometricamente o paralelepípedo formado pelos seus geradores, ou seja, neste caso, pelo vetor \mathbf{u} e pelo bivetor $\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ e sua magnitude é igual ao volume desse paralelepípedo. É interessante notar que o mesmo paralelepípedo será formado se fizermos o produto exterior dos três vetores, ou seja, $\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ ou do bivetor $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ pelo vetor \mathbf{w} , ou seja, $\mathbf{T} = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w}$.

Podemos verificar ainda que, como o produto exterior é antissimétrico, teremos:

$$\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) \Rightarrow \mathbf{u} \wedge (\mathbf{w} \wedge \mathbf{v}) = -\mathbf{T}.$$

Um trivetor é, portanto, um segmento orientado de volume.

Um paralelepípedo gerado pelos vetores $\lambda\mathbf{u}$, $\alpha\mathbf{v}$ e $\beta\mathbf{w}$ será o paralelepípedo representado pelo trivetor $(\lambda\mathbf{u}) \wedge (\alpha\mathbf{v}) \wedge (\beta\mathbf{w}) = (\lambda\alpha\beta)\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$, e terá volume $(\lambda\alpha\beta)$ vezes ao volume do paralelepípedo gerado por $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$.

Associatividade do produto exterior

Tendo em vista a interpretação geométrica de um trivetor, podemos afirmar que o produto exterior é dotado de associatividade, ou seja (vide figura 2.2 abaixo.):

$$\mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}.$$

É oportuno verificar que:

- $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = -\mathbf{v} \wedge \mathbf{u} \wedge \mathbf{w} = -\mathbf{u} \wedge \mathbf{w} \wedge \mathbf{v} = -\mathbf{w} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}$,
- $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} \wedge \mathbf{u} = \mathbf{w} \wedge \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$,
- $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{v} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} = 0$, e
- $\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) \Rightarrow -\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge (\mathbf{w} \wedge \mathbf{v}) \Rightarrow -\mathbf{T} = -\mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})$ (Vide figura 2.3).

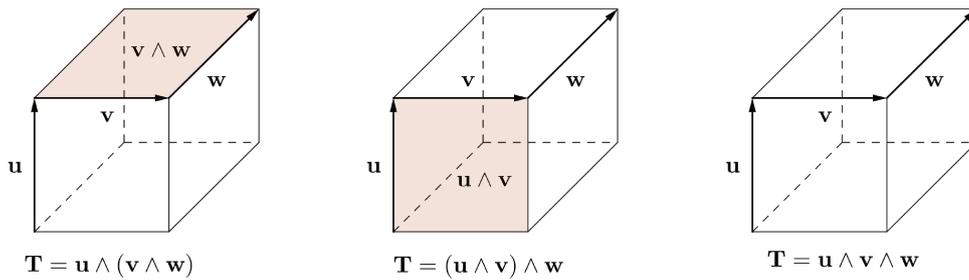


Figura 2.2: Associatividade do produto exterior

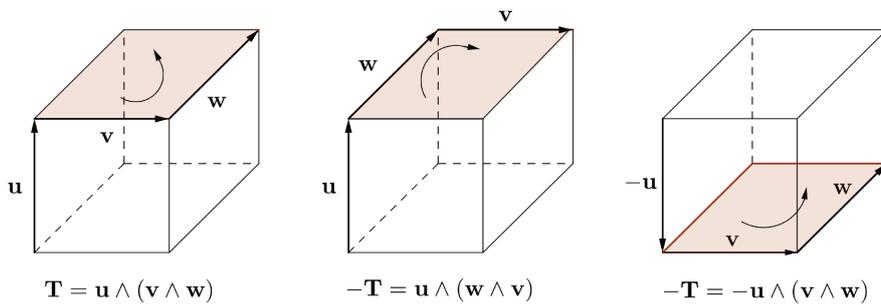


Figura 2.3: Trivetor oposto

Dimensões maiores

Na álgebra do produto exterior podemos representar objetos geométricos em quaisquer dimensões, e não apenas até 3 dimensões, ou seja, se estamos tratando de \mathbb{R}^n , dispomos de vetores, bivectores, trivetores, ..., n-vetores, que podem ser obtidos pela combinação linear de 1-blades, 2-blades, 3-blades, ..., n-blades, respectivamente.

2.2.3 Reversão

Reversão de um blade significa reverter a ordem dos fatores do blade, por exemplo:

$$\widetilde{\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}$$

o que somente muda a orientação do blade. Em geral, temos:

$$\tilde{A}_k = (-1)^{\frac{k(k-1)}{2}} A_k$$

e, ainda: $(A^\sim)^\sim = A$ e $(A \wedge B)^\sim = \tilde{B} \wedge \tilde{A}$ [17].

2.2.4 Espaços Vetoriais

Tendo em vista as propriedades que citamos anteriormente, podemos constatar que os objetos na Álgebra de Grassmann formam diferentes espaços vetoriais. Por exemplo, os bivectores,

quando considerados no \mathbb{R}^3 , formam um espaço vetorial que denotamos $\Lambda^2(\mathbb{R}^3)$. De modo geral, o espaço vetorial gerado pelos k -vetores em um espaço \mathbb{R}^n é denotado por $\Lambda^k(\mathbb{R}^n)$ [36].

Espaços Vetoriais da Álgebra Exterior no Espaço Euclidiano \mathbb{R}^3

Espaço dos escalares ou 0-vetores: $\Lambda^0(\mathbb{R}^3)$.

A base dos escalares na álgebra exterior é $\{1\}$, possuindo, portanto, apenas um elemento (escalar).

Espaço dos vetores ou 1-vetores: $\Lambda^1(\mathbb{R}^3)$.

Vamos adotar inicialmente uma base ortonormal formada por vetores, $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$, a mesma base canônica do \mathbb{R}^3 , com a qual possamos escrever um vetor. Neste caso, teremos:

$$\mathbf{u} = u_1\mathbf{e}_1 + u_2\mathbf{e}_2 + u_3\mathbf{e}_3.$$

Como podemos calcular livremente soma de vetores e produto por escalar, o conjunto de todos os vetores forma um espaço vetorial, cuja base tem três elementos (vetores).

Espaço dos bivectores ou 2-vetores: $\Lambda^2(\mathbb{R}^3)$.

Se quisermos uma expressão para um bivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, teremos:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} &= (u_1\mathbf{e}_1 + u_2\mathbf{e}_2 + u_3\mathbf{e}_3) \wedge (v_1\mathbf{e}_1 + v_2\mathbf{e}_2 + v_3\mathbf{e}_3) = \\ &u_1v_1\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_1 + u_1v_2\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + u_1v_3\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_3 + \\ &u_2v_1\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1 + u_2v_2\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_2 + u_2v_3\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + \\ &u_3v_1\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + u_3v_2\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 + u_3v_3\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_3 = \\ &u_2v_3\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + u_3v_2\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 + u_1v_3\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_3 + u_3v_1\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + u_1v_2\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + u_2v_1\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = (u_2v_3 - u_3v_2)\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + (u_3v_1 - u_1v_3)\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + (u_1v_2 - u_2v_1)\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2. \quad (2.2.1)$$

Verificamos, portanto, que um bivector é escrito utilizando-se uma combinação linear de $\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$, $\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1$ e $\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2$. Estes três elementos compõem a base do espaço dos bivectores.

Um olhar atento nos faz perceber que a expressão de um produto exterior entre dois vetores, que resulta em um bivector, pode ser escrito em forma de determinante como:

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 & \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} \quad (2.2.2)$$

Podemos inferir de 2.2.2 a existência de uma relação entre o produto exterior e o produto vetorial, $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$, e entre suas normas, assunto que será abordado adiante (vide figura 3.1).

Ainda, de 2.2.2, podemos provar, como dissemos, a distributividade do produto exterior:

$$(\mathbf{u} + \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 & \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ u_1 + v_1 & u_2 + v_2 & u_3 + v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 & \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 & \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} =$$

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{w} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$$

Aqui usamos uma propriedade dos determinantes que podemos ler em [7]. Da mesma forma podemos mostrar que $\mathbf{w} \wedge (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \mathbf{w} \wedge \mathbf{u} + \mathbf{w} \wedge \mathbf{v}$.

As propriedades de soma de bivectores e produto por escalar permitem classificar o conjunto dos bivectores como um espaço 2-vetorial, cuja base possui, da mesma forma que os vetores, três elementos (bivectores), a saber: $\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$, $\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1$ e $\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2$.

Espaço dos trivetores ou 3-vetores: $\wedge^3(\mathbb{R}^3)$.

Se quisermos uma expressão para um trivector, teremos:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} &= (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \\ &[(u_2v_3 - u_3v_2)\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + (u_3v_1 - u_1v_3)\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + (u_1v_2 - u_2v_1)\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2] \wedge (w_1\mathbf{e}_1 + w_2\mathbf{e}_2 + w_3\mathbf{e}_3) = \\ &(u_2v_3w_1 - u_3v_2w_1)\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + (u_3v_1w_2 - u_1v_3w_2)\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + (u_1v_2w_3 - u_2v_1w_3)\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 = \\ &(u_2v_3w_1 - u_3v_2w_1 + u_3v_1w_2 - u_1v_3w_2 + u_1v_2w_3 - u_2v_1w_3)\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3. \end{aligned}$$

Logo, ficamos com:

$$\mathbf{T} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = (u_2v_3w_1 - u_3v_2w_1 + u_3v_1w_2 - u_1v_3w_2 + u_1v_2w_3 - u_2v_1w_3)\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$$

e, por conseguinte, podemos escrever o trivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ sob forma de determinante, como:

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix} \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3. \quad (2.2.3)$$

O volume do paralelepípedo formado por \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} é numericamente igual ao módulo do determinante. Perceba que este valor é idêntico ao módulo do produto misto $(\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w}$.

O volume do paralelepípedo definido por \mathbf{u} , \mathbf{v} e $\lambda\mathbf{w} + \beta\mathbf{p}$ é, para quaisquer λ e β , a soma de λ vezes o volume do paralelepípedo definido por \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} e β vezes o volume do paralelepípedo definido por \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{p} , ou seja, $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge (\lambda\mathbf{w} + \beta\mathbf{p}) = \lambda\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} + \beta\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{p}$. Isto também pode ser verificado por meio do uso de determinantes.

O conjunto dos trivetores forma um espaço 3-vetorial, cuja base possui um elemento (trivector), a saber: $\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$, o trivector unitário, que representamos por \mathbf{I} , que é o elemento de volume. Este espaço 3-vetorial tem, portanto, a mesma dimensão dos escalares. Por este motivo, o trivector unitário é também conhecido como “pseudoescalar” [20, 33].

Espaços k-Vetoriais, graduação e bases para a álgebra exterior no \mathbb{R}^n

No \mathbb{R}^n consideramos a existência de k -blades, $k = 0 \dots n$. Consideramos, também, a existência de k -vetores, que são gerados a partir de combinações lineares de k -blades.

Podemos determinar a quantidade de elementos da base de um espaço k -vetorial $\wedge^k(\mathbb{R}^n)$ como sendo o número binomial $\binom{n}{k} = \frac{n!}{(n-k)!k!}$.

Então, por exemplo, no \mathbb{R}^4 , o número de componentes de um 2-vetor é $\binom{4}{2} = \frac{4!}{2!2!} = 6$. Logo, a dimensão do espaço k -vetorial dos bivectores em \mathbb{R}^4 é 6.

Chamamos de graduação de um objeto ao número de vetores que se multiplicam exteriormente para formá-lo, ou seja, um k -blade tem graduação k .

Ainda considerando o \mathbb{R}^4 , teremos:

- Espaços k -vetoriais de dimensão 1: Conjuntos dos escalares e dos 4-vetores.
- Espaços k -vetoriais de dimensão 4: Conjuntos dos 1-vetores e dos 3-vetores; e
- Espaço k -vetoriais de dimensão 6: Conjunto dos 2-vetores.

Isso se dá por causa da conhecida relação de números binomiais: $\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}$.

2.2.5 Contração

Considerando os blades A_j e A_k , se fizermos o produto entre eles, teremos os seguintes resultados:

- **Contração à esquerda:**
Se $j \leq k$, $A_j \rfloor A_k = A_{k-j}$, ou seja, Blade(s) com graduação $k - j$. Caso contrário, 0.
- **Contração à direita:**
Se $j \geq k$, $A_j \lrcorner A_k = A_{j-k}$, ou seja, Blade(s) com graduação $j - k$. Caso contrário, 0.

Se $j = k$, então a contração à esquerda tem o mesmo resultado que o produto interno usual [17].

Observação: Neste trabalho utilizaremos o símbolo “.” para contração à esquerda, a fim de facilitar a notação.

Temos, ainda, a seguinte relação para $j < k$ [[14], [34]]:

$$A_k \lrcorner A_j = (-1)^{j(k+1)} A_j \rfloor A_k \quad (2.2.4)$$

Para calcular a contração de um objeto por outro de menor dimensão utilizamos a regra na qual “o produto interno usual é sucessivamente calculado por alternância do sinal” [20], ou seja, de um modo geral, se temos um Blade A_k , então a regra da contração deste, pela esquerda, por um vetor \mathbf{u} , será [33]:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{A}_k = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}_1)(\mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_4 \wedge \dots \wedge \mathbf{a}_k) - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}_2)(\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_3 \wedge \mathbf{a}_4 \wedge \dots \wedge \mathbf{a}_k) + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2 \wedge \mathbf{a}_4 \wedge \dots \wedge \mathbf{a}_k) - \dots \Rightarrow$$

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{A}_k = \sum_{i=1}^k (-1)^{(i+1)} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}_i) [\mathbf{A}_k \setminus \mathbf{a}_i], \quad (2.2.5)$$

cujo resultado será um $(k - 1)$ -Blade. Na equação 2.2.5, o termo $\mathbf{A}_k \setminus \mathbf{a}_i$ significa \mathbf{A}_k sem o \mathbf{a}_i , ou seja, $\mathbf{A}_k \setminus \mathbf{a}_i = \mathbf{a}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{a}_{i-1} \wedge \mathbf{a}_{i+1} \wedge \dots \wedge \mathbf{a}_k$.

Agora, se quisermos o produto dos Blades \mathbf{A}_j e $\mathbf{B}_k \in Cl_n$, com $j \leq k \leq n$, teremos [33]:

$$\mathbf{A}_j \cdot \mathbf{B}_k = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \cdot (\dots \cdot (\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{B}_k))),$$

cujo resultado será um $(k - j)$ -Blade.

Exemplos de contração no \mathbb{R}^3

Contração de um vetor:

Podemos realizar a contração de um vetor por outro, resultando em um escalar. Então, contrair o vetor \mathbf{u} pelo vetor \mathbf{n} é fazer:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{n} \rfloor \mathbf{u}.$$

A expressão à direita é o produto interno dos vetores \mathbf{n} e \mathbf{u} .

Contração de um bivector:

1. Por um vetor:

O resultado será um vetor. Se fizermos a contração do bivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ pelo vetor \mathbf{n} , utilizando a regra de alternância do sinal, teremos:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}) \wedge \mathbf{v} - \mathbf{u} \wedge (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}), \text{ logo:}$$

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u}.$$

2. Por outro bivector:

Resultará em um escalar. Se fizermos a contração do bivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ pelo bivector $\mathbf{w} \wedge \mathbf{t}$, utilizando a regra de alternância do sinal, teremos: $(\mathbf{w} \wedge \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) = \mathbf{w} \cdot (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) = \mathbf{w} \cdot ((\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u}) = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}) - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{w} \cdot \mathbf{u})$:

$$(\mathbf{w} \wedge \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) = (\mathbf{w} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{w} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}).$$

Contração de um trivector:

1. Por um vetor:

O resultado será um bivector. Se fizermos a contração do trivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ pelo vetor \mathbf{t} , utilizando a regra de alternância do sinal, teremos:

$$\mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} - \mathbf{u} \wedge (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w}):$$

$$\mathbf{t} \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} \wedge \mathbf{w} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} \wedge \mathbf{u} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}.$$

2. Por um bivector

O resultado será um vetor. Se fizermos a contração do trivector $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ pelo bivector

$\mathbf{r} \wedge \mathbf{t}$, utilizando a regra de alternância do sinal, teremos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \wedge \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) &= \mathbf{r} \cdot (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = \mathbf{r} \cdot [(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} \wedge \mathbf{w} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u} \wedge \mathbf{w} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}] = \\ &= ((\mathbf{r} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{w}))\mathbf{u} + ((\mathbf{r} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{w}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}))\mathbf{v} + ((\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}))\mathbf{w}. \end{aligned}$$

3. Por outro trivetor

O resultado será um escalar. Se fizermos a contração do trivetor $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ pelo trivetor $\mathbf{r} \wedge \mathbf{s} \wedge \mathbf{t}$, utilizando a regra de alternância do sinal, teremos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \wedge \mathbf{s} \wedge \mathbf{t}) \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) &= \mathbf{r} \cdot (\mathbf{s} \cdot (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})) = \\ &= \mathbf{r} \cdot (\mathbf{s} \cdot ((\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} \wedge \mathbf{w} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u} \wedge \mathbf{w} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})) = \\ &= \mathbf{r} \cdot [(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})((\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v}) - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})((\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})\mathbf{w} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})\mathbf{u}) + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})((\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u})] = \\ &= \mathbf{r} \cdot ((\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})\mathbf{w} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})\mathbf{u} + (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})\mathbf{v} - (\mathbf{t} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u}) = \\ &= (\mathbf{r} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{w}) + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{w}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) + \\ &= (\mathbf{r} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{s} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}). \end{aligned}$$

Capítulo 3

Álgebra Geométrica

A álgebra geométrica foi desenvolvida pelo matemático inglês William Kingdon Clifford em 1878, tendo o mérito de ser uma verdadeira síntese e generalização dos sistemas de Hamilton e Grassmann [36], pois nela Clifford criou um análogo ao sistema quaterniônico e adotou a ideia dos elementos geométricos de todas as dimensões, como bivectores e trivetores, sendo, portanto, capaz de representar os fenômenos físicos nas diversas dimensões que se fizerem necessárias, com objetos geométricos adequados. Um conceito que foi introduzido na álgebra geométrica é o de “produto geométrico”, que une os produtos interno e exterior. A álgebra geométrica, assim denominada pelo seu criador, é também conhecida como Álgebra de Clifford, em sua homenagem.

O assunto deste capítulo é tratado com maior profundidade no artigo [36], do Prof. Dr. Jayme Vaz Jr e também nas referências [19], [20], [28] e [31], que foram consultadas para a elaboração deste capítulo.

3.1 A Álgebra Geométrica do Espaço Euclidiano

Vamos considerar a base ortonormal do espaço euclidiano tridimensional com os elementos unitários $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ e \mathbf{e}_3 . Um vetor nesta base fica descrito como $\mathbf{v} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$, com $x_i \in \mathbb{R}$. O seu módulo $\|\mathbf{v}\|$ é tal que $\|\mathbf{v}\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$.

Para calcular o módulo, devemos usar a regra distributiva na multiplicação de \mathbf{v} por ele mesmo, adotando um produto P de vetores, tal que $P(\mathbf{v}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{v}\|^2$ [36] e então teremos:

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \mathbf{v}\mathbf{v} = (x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3)(x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3) = x_1^2\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 + x_1x_2\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 + x_1x_3\mathbf{e}_1\mathbf{e}_3 + x_2x_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_1 + x_2^2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + x_2x_3\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 + x_3x_1\mathbf{e}_3\mathbf{e}_1 + x_3x_2\mathbf{e}_3\mathbf{e}_2 + x_3^2\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 \Rightarrow$$

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \mathbf{v}\mathbf{v} = x_1^2\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 + x_2^2\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 + x_3^2\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 + x_1x_2(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1) + x_1x_3(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_1) + x_2x_3(\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3\mathbf{e}_2).$$

Para que tenhamos $\|\mathbf{v}\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$, então deveremos ter:

$$\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i^2 = 1, \tag{3.1.1}$$

$$\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = -\mathbf{e}_j\mathbf{e}_i \tag{3.1.2}$$

Esta é a característica fundamental da álgebra geométrica.

Na álgebra vetorial, de Gibbs, é utilizada a relação $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_j\mathbf{e}_i = 0$, ao invés da (3.1.2) utilizada na álgebra geométrica.

Esta é uma das diferenças fundamentais entre a álgebra de geométrica e a álgebra vetorial.

Ao admitir que $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_j\mathbf{e}_i = 0$, a álgebra vetorial parte do princípio que $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j$ será sempre um escalar.

Ao adotar $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j + \mathbf{e}_j\mathbf{e}_i = 0$, a álgebra geométrica assume a existência do bivector, objeto existente na álgebra de Grassmann.

Ao admitir que $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i = 1$, a álgebra geométrica difere da álgebra de Grassmann, já que esta admite $\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_i = 0$.

Tendo em vista (3.1.1) e (3.1.2) e a associatividade, podemos efetuar operações do tipo:

$$\mathbf{e}_1(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2) = (\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1)\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_2,$$

e

$$(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)\mathbf{e}_1 = (-\mathbf{e}_2\mathbf{e}_1)\mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_2(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1) = -\mathbf{e}_2.$$

Com esta operação, verificamos que $\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2$ não pode ser tomado como um escalar [36]. Da mesma forma, não podemos considerar como escalar qualquer $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j$.

Podemos, ainda, verificar que $(\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2)^2 = \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 = -1$, o que mostra que $\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2$ não é escalar nem vetor. [28]

Quanto ao produto \mathbf{e}_{123} , que veremos se tratar do trivector unitário \mathbf{I} , podemos verificar [31]:

$$\mathbf{I} = \mathbf{e}_{123} = \mathbf{e}_{231} = \mathbf{e}_{312},$$

e

$$-\mathbf{I} = \mathbf{e}_{132} = \mathbf{e}_{213} = \mathbf{e}_{321}.$$

A Álgebra de Clifford pode ser empregada em qualquer dimensão. Quando se tratar de um espaço de dimensão n , dizemos se tratar da álgebra de Clifford Cl_n . Obviamente, quando tratamos do \mathbf{R}^3 , nos referimos à álgebra de Clifford Cl_3 .

3.1.1 Espaços Vetoriais e Graduação

O espaço vetorial dos bivectores em \mathbf{R}^3 é denotado, na álgebra geométrica, pela notação $\wedge^2(\mathbf{R}^3)$. Esta notação já foi verificada na álgebra de Grassmann.

De forma análoga aos bivectores, podemos chamar os vetores de 1-vetores, os trivectores de 3-vetores e os escalares, de 0-vetores.

Todos estes objetos, por sua vez, formam espaços vetoriais em Cl_3 .

O espaço vetorial dos escalares é denotado por $\wedge^0(\mathbf{R}^3)$ e o dos vetores por $\wedge^1(\mathbf{R}^3)$. Quanto aos trivectores, ou 3-vetores, estes constituem um espaço vetorial denotado por $\wedge^3(\mathbf{R}^3)$.

Como vimos anteriormente, temos os espaços $\wedge^k(\mathbf{R}^3)$, $k = 0, 1, 2, 3$, associados ao \mathbf{R}^3 . Se fizermos a soma direta $\wedge(\mathbf{R}^3) = \bigoplus_{k=0}^3 \wedge^k(\mathbf{R}^3)$ teremos uma estrutura coerente [36], no sentido de ser fechada para a soma e para a multiplicação, e um elemento desta estrutura chama-se *multivector*. A dimensão de um multivector no \mathbf{R}^3 será a soma da dimensão de cada espaço componente, ou seja:

$$\binom{3}{0} + \binom{3}{1} + \binom{3}{2} + \binom{3}{3} = 2^3 = 8.$$

Se estivermos, genericamente, tratando do espaço \mathbb{R}^n o multivetor será composto da soma: escalar, mais vetor, mais bivector, \dots mais n -vetor e a dimensão de $\wedge(M)$ será:

$$\binom{n}{0} + \binom{n}{1} + \binom{n}{2} + \dots + \binom{n}{n} = 2^n. \quad [38]$$

3.1.2 Graduações

Dizemos que os trivetores têm graduação 3. Da mesma forma, os escalares, os vetores e os bivectores têm, respectivamente, as graduações 0, 1 e 2. Um n -vetor terá, portanto, graduação n .

3.1.3 Produto Geométrico

Dados dois vetores $\mathbf{u} = u_1\mathbf{e}_1 + u_2\mathbf{e}_2 + u_3\mathbf{e}_3$ e $\mathbf{v} = v_1\mathbf{e}_1 + v_2\mathbf{e}_2 + v_3\mathbf{e}_3$, o produto geométrico entre eles é a **equação fundamental** e característica da álgebra geométrica definida por:

$$\mathbf{u}\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}. \quad (3.1.3)$$

A primeira parcela do segundo membro, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$, é o produto interno. A outra, $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, é o produto exterior, da álgebra de Grassmann.

O produto interno, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$, aqui é calculado da mesma forma que na álgebra vetorial, ou seja: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3$. Devido ao fato de ser comutativo, constitui-se na parte simétrica do produto geométrico. Como o produto interno de dois vetores resulta em um escalar, a operação provoca uma redução de uma unidade na graduação em relação aos objetos envolvidos na operação.

Já vimos como obter o produto exterior, também conhecido produto cunha ou produto de Grassmann [36], $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, em 2.2.2. O produto exterior de vetores é anticomutativo, constituindo-se na parte antissimétrica do produto geométrico.

Se fizermos os produtos geométricos entre os vetores ortonormais \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 , obteremos:

- $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_i = 1 + 0 = 1 = \mathbf{e}_i^2$. Por isso, $\mathbf{e}_i^2 = 1$, o que está de acordo com (3.1.1);
- $\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j + \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = 0 + \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j$. Por isso, podemos escrever $\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i\mathbf{e}_j$. Utiliza-se, ainda, abreviar: $\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_{ij}$.
- $\mathbf{e}_{ji} = \mathbf{e}_j \wedge \mathbf{e}_i = -\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j = -\mathbf{e}_{ij} \Rightarrow \mathbf{e}_{ji} = -\mathbf{e}_{ij}$, o que corrobora (3.1.2).

O módulo do bivector gerado pelo produto exterior dos dois vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} é numericamente igual à área do paralelogramo determinado por eles. Se o ângulo entre os vetores for θ , com $0 \leq \theta \leq \pi$, esta área será calculada por:

$$\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\| = \|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\| \text{sen}\theta.$$

É possível efetuar o produto exterior entre um bivetor \mathbf{B} e um vetor \mathbf{v} . Esta operação gera um paralelepípedo cuja base corresponde ao paralelogramo gerado pelo bivetor e a altura corresponde à projeção de \mathbf{v} sobre o vetor normal ao plano de \mathbf{B} . O objeto gerado é, portanto, um trivetor, dotado de magnitude (corresponde ao volume), direção e sentido, dado pela regra da mão direita. O produto exterior entre o vetor \mathbf{v} e o bivetor $\mathbf{B} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{w}$ será $\mathbf{v} \wedge \mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge (\mathbf{u} \wedge \mathbf{w}) = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} \wedge \mathbf{w}$.

É importante notar que $\mathbf{v} \wedge \mathbf{B} = \mathbf{B} \wedge \mathbf{v}$, pois: $\mathbf{v} \wedge \mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} \wedge \mathbf{w} = -\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = \mathbf{u} \wedge \mathbf{w} \wedge \mathbf{v} = \mathbf{B} \wedge \mathbf{v}$, ou seja, o produto exterior entre um vetor e um bivetor é comutativo.

Propriedades do produto geométrico

a) Não Comutatividade:

O produto geométrico entre dois vetores quaisquer, \mathbf{u} e \mathbf{v} , é não comutativo. Considerando os vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , temos:

$$\mathbf{uv} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$$

e $\mathbf{vu} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{u} \Rightarrow$

$$\mathbf{vu} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{u} \wedge \mathbf{v},$$

logo:

$$\mathbf{uv} \neq \mathbf{vu}. \quad (3.1.4)$$

Podemos observar que:

- se $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$, ou seja, **se os vetores forem ortogonais**, teremos $\mathbf{uv} = -\mathbf{vu}$.

- se $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = 0$, ou seja, **se os vetores forem paralelos**, teremos $\mathbf{uv} = \mathbf{vu}$.

b) Distributividade:

O produto geométrico é distributivo à direita e à esquerda, ou seja, considerando os vetores \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} , temos:

(i) $\mathbf{u}(\mathbf{v} + \mathbf{w}) = \mathbf{uv} + \mathbf{uw}$, pois:

$$\mathbf{u}(\mathbf{v} + \mathbf{w}) = \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{w}) + \mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} + \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{w}) + (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{w}) = \mathbf{uv} + \mathbf{uw}; \text{ e:}$$

(ii) $(\mathbf{u} + \mathbf{v})\mathbf{w} = \mathbf{uw} + \mathbf{vw}$, que se demonstra de modo análogo.

c) Multiplicação por escalar (Homogeneidade):

Sendo \mathbf{u} e \mathbf{v} vetores e λ um escalar, temos:

$$\lambda(\mathbf{uv}) = \mathbf{u}(\lambda\mathbf{v}) = (\lambda\mathbf{u})\mathbf{v}.$$

Tendo visto as propriedades acima, podemos chegar a uma relação entre produto geométrico e produto interno e também a uma relação entre produto geométrico e produto exterior. Ambas são úteis no caso de se querer chegar ao produto interno ou ao produto exterior se se conhecem os produtos geométricos.

d) Relação entre produto interno e produto geométrico:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{uv} + \mathbf{vu}), \quad (3.1.5)$$

pois:

$$\mathbf{uv} + \mathbf{vu} = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) \Rightarrow \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{uv} + \mathbf{vu}).$$

e) Relação entre produto exterior e produto geométrico:

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{uv} - \mathbf{vu}), \quad (3.1.6)$$

pois:

$$\mathbf{uv} - \mathbf{vu} = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} - \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = 2(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \Rightarrow \mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\mathbf{uv} - \mathbf{vu}).$$

f) Associatividade:

O produto geométrico obedece à regra associativa, ou seja: [31]

$$\mathbf{u}(\mathbf{vw}) = (\mathbf{uv})\mathbf{w}$$

g) Produto Geométrico entre um vetor e um bivetor [19]:

Podemos efetuar o produto entre um vetor \mathbf{u} e um bivetor $\mathbf{B} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$. Tal produto pode ser expresso como se segue:

$$\mathbf{uB} = \frac{1}{2}(\mathbf{uB} + \mathbf{uB}) + \frac{1}{2}(\mathbf{Bu} - \mathbf{Bu}) = \frac{1}{2}(\mathbf{uB} - \mathbf{Bu}) + \frac{1}{2}(\mathbf{uB} + \mathbf{Bu}).$$

Como o produto exterior entre vetor e bivetor é comutativo, temos:

• Parte simétrica:

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{B} = \frac{1}{2}(\mathbf{uB} + \mathbf{Bu}) = \mathbf{B} \wedge \mathbf{u}; e \quad (3.1.7)$$

• Parte anti-simétrica:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{u} \lrcorner \mathbf{B} = \frac{1}{2}(\mathbf{uB} - \mathbf{Bu}) = -\mathbf{B} \lrcorner \mathbf{u}, \quad \text{levando em consideração 2.2.4} \quad (3.1.8)$$

Com isso, podemos escrever a expressão para o produto geométrico entre um vetor e um bivetor:

$$\mathbf{uB} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{B}. \quad (3.1.9)$$

Considerando que $\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2}(\mathbf{uB} - \mathbf{Bu})$, que $\mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = \frac{1}{2}(\mathbf{vw} - \mathbf{wv})$ e que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = \frac{1}{2}(\mathbf{vw} + \mathbf{wv})$, teremos:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = \frac{1}{2}[\mathbf{u}(\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) - (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{u}] = \frac{1}{2}[\mathbf{u}\frac{1}{2}(\mathbf{vw} - \mathbf{wv}) - \frac{1}{2}(\mathbf{vw} - \mathbf{wv})\mathbf{u}] =$$

$$\frac{1}{4}(\mathbf{uvw} - \mathbf{uwv} - \mathbf{vwu} + \mathbf{wvu}).$$
 Agora, adicionando-se $\frac{1}{4}[\mathbf{vuw} - \mathbf{wuv} - \mathbf{vuw} + \mathbf{wuv}] = 0$, teremos:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) &= \frac{1}{4}[(\mathbf{uv} + \mathbf{vu})\mathbf{w} - (\mathbf{uw} + \mathbf{wu})\mathbf{v} - \mathbf{v}(\mathbf{wu} + \mathbf{uw}) + \mathbf{w}(\mathbf{vu} + \mathbf{uv})] = \\ &= \frac{1}{4}[2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v} - \mathbf{v}2(\mathbf{w} \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{w}2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})] = \frac{1}{4}[4(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - 4(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v}] \Rightarrow \\ &\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

Isso significa que o produto interno de um vetor com um bivector resulta em um vetor. Podemos, agora, concluir que:

$$\mathbf{uB} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{B} = [(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{w} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})\mathbf{v}] + \mathbf{u} \wedge (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w}). \quad (3.1.11)$$

Ou seja, o produto geométrico entre um vetor e um bivector resulta na soma de um vetor e um trivector.

Podemos generalizar $\mathbf{uv} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$ para o caso de \mathbf{uV}_k , onde \mathbf{V}_k é um k -blade e \mathbf{u} é um vetor, como:

$$\mathbf{uV}_k = \mathbf{u} \lrcorner \mathbf{V}_k + \mathbf{u} \wedge \mathbf{V}_k,$$

onde, utilizando as fórmulas 3.1.5 e 3.1.6 e, de acordo com as regras da contração, podemos escrever [28]:

$$\mathbf{x} \lrcorner \mathbf{V}_k = \frac{1}{2}(\mathbf{xV}_k - (-1)^k \mathbf{V}_k \mathbf{x}) \quad \text{e} \quad \mathbf{x} \wedge \mathbf{V}_k = \frac{1}{2}(\mathbf{xV}_k + (-1)^k \mathbf{V}_k \mathbf{x}).$$

Em se tratando de Cl_3 , se fizermos o produto geométrico entre um vetor e um 3-vetor, o produto exterior anular-se-á.

h) Quadrado da Norma:

$\mathbf{u}^2 = \|\mathbf{u}\|^2$. Mas $\mathbf{u}^2 = \mathbf{uu} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{u} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$. Logo:

$$\mathbf{u}^2 = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = \|\mathbf{u}\|^2.$$

3.1.4 Multivetores

O multivector é um elemento que surge na álgebra geométrica e constitui-se, na sua forma mais completa, sendo a soma de escalar, vetor, bivector e trivector, quando estamos tratando do Cl_3 .

Um multivector $M \in Cl_3$ tem a forma:

$$\mathbf{M} = (m) + (m_1\mathbf{e}_1 + m_2\mathbf{e}_2 + m_3\mathbf{e}_3) + (m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12}) + (m_{123}\mathbf{e}_{123}).$$

Se quisermos nos referir ao objeto de graduação k deste multivetor diremos $\langle \mathbf{M} \rangle_k$ ou simplesmente M_k . Por exemplo, nos referiremos ao bivector que o constitui como:

$$\langle \mathbf{M} \rangle_2 = M_2 = m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12}.$$

Então podemos dizer que $\mathbf{M} = M_0 + \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_3$, sendo componente de graduação 0 um escalar.

Podemos considerar qualquer objeto em álgebra geométrica como sendo um multivetor. Por exemplo, um bivector pode ser entendido como um multivetor em que as partes de graduações 0, 1 e 3 são nulas.

Propriedades dos Multivetores

Considere três multivetores \mathbf{M} , \mathbf{S} e \mathbf{Q} . Como o conjunto dos multivetores é fechado para a soma e para o produto, podemos afirmar que eles constituem uma álgebra [19]. São as seguintes as propriedades, que se baseiam nas dos componentes:

$$\begin{aligned} (1) \mathbf{M} + \mathbf{S} &= \mathbf{S} + \mathbf{M} & (2) (\mathbf{M} + \mathbf{S}) + \mathbf{Q} &= \mathbf{M} + (\mathbf{S} + \mathbf{Q}) & (3) (\mathbf{M}\mathbf{S})\mathbf{Q} &= \mathbf{M}(\mathbf{S}\mathbf{Q}) \\ (4) \mathbf{M}(\mathbf{S} + \mathbf{Q}) &= \mathbf{M}\mathbf{S} + \mathbf{M}\mathbf{Q} & (5) (\mathbf{M} + \mathbf{S})\mathbf{Q} &= \mathbf{M}\mathbf{Q} + \mathbf{S}\mathbf{Q} & (6) \mathbf{M} + \mathbf{0} &= \mathbf{M} \\ (7) 1 \mathbf{M} &= \mathbf{M} & (8) \mathbf{M} + (-\mathbf{M}) &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

Reversão de um Multivetor

A reversão é uma operação aplicada a um blade, segundo a regra:

$$\tilde{A}_k = (-1)^{\frac{k(k-1)}{2}} A_k. \quad (3.1.12)$$

“O nome *reversão* se deve ao fato dela ser equivalente a considerarmos o produto de vetores na ordem reversa” [37]. Exemplos:

- $\widetilde{\mathbf{v}\mathbf{u}} = \mathbf{u}\mathbf{v}$
- $\mathbf{I} = \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 \Rightarrow \tilde{\mathbf{I}} = \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 = -\mathbf{I}$
- Para um blade $A_{\langle k \rangle} = a_1 \wedge a_2 \dots a_k$, temos: $\tilde{A}_{\langle k \rangle} = a_k \wedge \dots \wedge a_2 \wedge a_1$.
- Para um blade $A_{\langle k \rangle}$, temos: $(\tilde{A}_{\langle k \rangle})^\sim = A$.
- Para os blades $A_{\langle k \rangle}$ e $B_{\langle l \rangle}$, temos: $(A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle})^\sim = \tilde{B}_{\langle l \rangle} \wedge \tilde{A}_{\langle k \rangle}$.

O reverso de um multivetor $\mathbf{M} \in Cl_3$ é obtido revertendo-se cada um dos seus componentes, ou seja:

$$\tilde{\mathbf{M}} = \tilde{M}_0 + \tilde{M}_1 + \tilde{M}_2 + \tilde{M}_3 \Rightarrow$$

$$\tilde{\mathbf{M}} = M_0 + M_1 - M_2 - M_3$$

Norma Euclidiana

Utilizando o reverso de um multivetor, poderemos obter a norma deste [36], com:

$\|\mathbf{M}\|^2 = \langle \mathbf{M}\tilde{\mathbf{M}} \rangle_0 = \langle \tilde{\mathbf{M}}\mathbf{M} \rangle_0$, de onde:

$$\|\mathbf{M}\|^2 = m^2 + m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 + m_{23}^2 + m_{31}^2 + m_{12}^2 + m_{123}^2.$$

Involução graduada (ou graduação)

Dado um k -blade $A_{\langle k \rangle}$, definimos Involução Graduada (ou graduação), denotada por $\hat{\cdot}$:

$$\hat{A}_{\langle k \rangle} = (-1)^k A_{\langle k \rangle} \quad (3.1.13)$$

Exemplos:

- $(\hat{A}_{\langle k \rangle})^\wedge = \hat{A}_{\langle k \rangle}$.
- $(A_{\langle k \rangle} \wedge B_{\langle l \rangle})^\wedge = \hat{A}_{\langle k \rangle} \wedge \hat{B}_{\langle l \rangle}$.
- Sendo $\mathbf{M} = M_0 + M_1 + M_2 + M_3 \in Cl_3$, então $\hat{\mathbf{M}} = M_0 - M_1 + M_2 - M_3$.

O inverso multiplicativo

O inverso multiplicativo de um multivetor \mathbf{M} , denotado por \mathbf{M}^{-1} , é o multivetor que obedece à seguinte equação: $\mathbf{M}\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{M} = 1$.

Vejamos como ficam os inversos de cada componente de um multivetor¹. Para um Blade A_k temos que seu inverso será sempre $A_k^{-1} = \frac{\hat{A}_k}{\|A_k\|^2}$, desde que $\|A_k\| \neq 0$ ² [33].

a) O inverso de um vetor:

Quando se trata de um vetor, \mathbf{u} , por exemplo, o seu inverso é dado por $\mathbf{u}^{-1} = \frac{\tilde{\mathbf{u}}}{\|\mathbf{u}\|^2}$, ou seja:

$$\mathbf{u}^{-1} = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|^2}. \quad (3.1.14)$$

Podemos verificar isso com: $\mathbf{u}\mathbf{u}^{-1} = 1 \Rightarrow \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u}^{-1} = \mathbf{u} \Rightarrow \|\mathbf{u}\|^2\mathbf{u}^{-1} = \mathbf{u} \Rightarrow \mathbf{u}^{-1} = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|^2}$.

b) O inverso de um 2-blade:

¹Se k -vetores não forem k -blades a fórmula da inversão aqui apresentada não se aplica. Entretanto, devemos levar em consideração que em Cl_3 todos os k -vetores são k -blades, como já vimos anteriormente.

²Isto faz sentido pois, no Espaço Conforme, que veremos adiante, é possível que um Blade não nulo tenha norma nula.

Quando se trata de um 2-blade, $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, por exemplo, o seu inverso é dado por:

$$(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^{-1} = \frac{\widetilde{\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}}}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|^2}, \text{ ou seja:}$$

$$(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^{-1} = \frac{\mathbf{v} \wedge \mathbf{u}}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|^2} = -\frac{\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|^2} \quad (3.1.15)$$

Vejamos o que aconteceria se não considerássemos o reverso do bivector, utilizando um exemplo simples com bivectores unitários:

$$(\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j)(\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j) = (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j) \cdot (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j) = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j)(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i) - (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i)(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_j) = -1$$

o que, logicamente, não denota o inverso do bivector.

Agora, utilizando o reverso do bivector, teremos:

$$(\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j)(\mathbf{e}_j \wedge \mathbf{e}_i) = (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_j) \cdot (\mathbf{e}_j \wedge \mathbf{e}_i) = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i)(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_j) - (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j)(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i) = 1$$

agora, sim, garantindo que o inverso do bivector seja determinado.

b) O inverso de um 3-blade:

O inverso de um 3-blade $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ é dado por: $(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})^{-1} = \frac{(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})^\sim}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}\|^2}$, ou seja:

$$(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})^{-1} = \frac{\mathbf{w} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{u}}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}\|^2} = -\frac{\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}}{\|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}\|^2} \quad (3.1.16)$$

Aqui podemos verificar, a título de exemplo, que:

$$(\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3) = -1 \text{ e que } (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1) = 1.$$

Podemos concluir que o reverso do blade A_k em $A_k^{-1} = \frac{\tilde{A}_k}{\|A_k\|^2}$ é o que garante que o sinal do produto em $A_k A_k^{-1}$ e em $A_k^{-1} A_k$ seja sempre positivo, garantindo que vamos obter o inverso [33].

Existem multivetores que não admitem inverso. Com efeito, o multivector $\mathbf{f} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_3)$ pode ser citado como exemplo, pois não existe, neste caso, um multivector \mathbf{f}^{-1} com a propriedade $\mathbf{f}\mathbf{f}^{-1} = \mathbf{f}^{-1}\mathbf{f} = 1$.

Pode-se verificar que $\mathbf{f} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_3)$ é idempotente [36], ou seja $\mathbf{f}\mathbf{f} = \mathbf{f}$, pois:

$$\mathbf{f}\mathbf{f} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_3)\frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_3) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3^2) = \frac{1}{4}(2 + 2\mathbf{e}_3) = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{e}_3) = \mathbf{f}.$$

Portanto, se houvesse \mathbf{f}^{-1} neste caso, teríamos: $\mathbf{f}\mathbf{f}^{-1} = 1 \Rightarrow \mathbf{f}\mathbf{f}\mathbf{f}^{-1} = \mathbf{f} \Rightarrow \mathbf{f}\mathbf{f}^{-1} = \mathbf{f} \neq 1$, um absurdo.

A utilização do inverso multiplicativo se dá quando temos a necessidade de dividir um multivector por outro.

Para dividirmos o multivector \mathbf{U} pelo multivector \mathbf{M} temos duas opções: pela direita ou pela esquerda. Isto porque não podemos garantir que \mathbf{U} e \mathbf{M}^{-1} comutam³. Temos, portanto:

- Divisão de \mathbf{U} por \mathbf{M} pela esquerda: $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{U}$, e
- Divisão de \mathbf{U} por \mathbf{M} pela direita: $\mathbf{U}\mathbf{M}^{-1}$. [19]

³A divisão pela esquerda não é equivalente à divisão pela direita, a menos que \mathbf{U} comute com \mathbf{M}^{-1} .

3.1.5 Dualidade

O dual de um k -blade $A_{\langle k \rangle}$ é representado por $A_{\langle k \rangle}^*$ e definido por ⁴:

$$A_{\langle k \rangle}^* = A_{\langle k \rangle} \rfloor I_{\langle k \rangle}^{-1}. \quad (3.1.17)$$

Observações:

- O dual $A_{\langle k \rangle}^*$ tem a mesma norma e a mesma quantidade de componentes de $A_{\langle k \rangle}$ e situa-se no complemento ortogonal deste. É uma operação de $\wedge^k \mathbb{R}^n$ para $\wedge^{n-k} \mathbb{R}^n$.
- Nem sempre o dual do dual de um k -blade será igual a este, ou seja, nem sempre $(A_{\langle k \rangle}^*)^* = A_{\langle k \rangle}$. Para que obtenhamos o k -blade original, deveremos fazer: $A_{\langle k \rangle}^* \rfloor I_{\langle k \rangle} = A_{\langle k \rangle}$. Esta operação é chamada de “desdualização” e representamos-na como [12]:

$$(A_{\langle k \rangle}^*)^{-*} = A_{\langle k \rangle}^* \rfloor I_{\langle k \rangle} = A_{\langle k \rangle}.$$

- Podemos, também, calcular o dual em Cl_3 utilizando: $A_{\langle k \rangle}^* = -A_{\langle k \rangle} \rfloor I$.

No Cl_3 ⁵, se considerarmos um 3-vetor, o seu dual será um escalar (0-vetor) e vice-versa. Por este motivo, o 3-vetor é chamado de pseudo-escalar. Por sua vez, o dual de um bivetor é um vetor e vice-versa e por isso chamamos um bivetor de pseudo-vetor [36].

Vamos calcular, como exemplo, o dual de \mathbf{e}_{12} . Temos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_{12})^* &= (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2) \cdot (\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1) = \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1) = \mathbf{e}_1 \cdot [(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3)\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1 - (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2)\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_1)\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_2] \\ &= \mathbf{e}_1 \cdot [-\mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1] = -[(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3)\mathbf{e}_1 - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1)\mathbf{e}_3] = -(-\mathbf{e}_3) = \mathbf{e}_3, \end{aligned}$$

ou podemos fazer:

$$(\mathbf{e}_{12})^* = \mathbf{e}_{12} \cdot I^{-1} = \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3,$$

ou seja, $(\mathbf{e}_{12})^* = \mathbf{e}_3$. De modo semelhante calculam-se os outros duais.

Assim, temos:

$$\begin{aligned} 1^* &= -\mathbf{I}; \\ \mathbf{e}_1^* &= -\mathbf{e}_{23}; & \mathbf{e}_2^* &= -\mathbf{e}_{31}; & \mathbf{e}_3^* &= -\mathbf{e}_{12}; \\ (\mathbf{e}_{23})^* &= \mathbf{e}_1; & (\mathbf{e}_{31})^* &= \mathbf{e}_2; & (\mathbf{e}_{12})^* &= \mathbf{e}_3; \\ \mathbf{I}^* &= 1. \end{aligned}$$

Entretanto, em álgebras geométricas diferentes da Cl_3 isto não ocorre. Se tomarmos a Cl_4 , por exemplo, temos que tanto os 1-blades quanto os 3-blades são representados por 4 componentes. Logo, em Cl_4 o dual de um 3-blade é um 1-blade e vice-versa. Já em Cl_2 , um 2-blade

⁴Há outras notações para Dual, variando de autor para autor. Em [20] vemos $(\dots)^* = -(\dots) \cdot I$. Em [33] podemos ler: $E_i^* = E_i I^{-1}$. Em [36] vemos que o dual do um k -vetor \mathbf{A}_k é denotado por $\star \mathbf{A}_k$ e definido por: $\star \mathbf{A}_k = \tilde{\mathbf{A}}_k \mathbf{I}$, onde $\tilde{\mathbf{A}}_k$ é o reverso de \mathbf{A}_k , dado por $\tilde{\mathbf{A}}_k = (-1)^{k(k-1)/2} \mathbf{A}_k$. Neste caso, temos o Dual de Hodge, bastante utilizado em aplicações na física.

⁵Lembrando que em Cl_3 todos os k -vetores são, também, k -blades.

é dual de um 1-blade e vice-versa, pois ambos são representados por apenas um componente nesta álgebra.

Podemos determinar a quantidade de componentes de um k -blade em Cl_n . Ele é dado pelo número binomial $\binom{n}{k} = \frac{n!}{(n-k)!k!}$. Então, por exemplo, em Cl_4 o número de componentes de um 3-blade é $\frac{4!}{(4-3)!3!} = 4$ e o de um 1-blade é $\frac{4!}{(4-1)!1!} = 4$.

Veamos, agora, os duais dos elementos presentes na Álgebra Geométrica Cl_3 :

- Escalar: $M = m \Rightarrow M^* = -m\mathbf{e}_{123}$
- Vetor: $\mathbf{M}_1 = m_1\mathbf{e}_1 + m_2\mathbf{e}_2 + m_3\mathbf{e}_3 \Rightarrow \mathbf{M}_1^* = -m_1\mathbf{e}_{23} - m_2\mathbf{e}_{31} - m_3\mathbf{e}_{12}$
- Bivetor: $\mathbf{M}_2 = m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12} \Rightarrow \mathbf{M}_2^* = m_{23}\mathbf{e}_1 + m_{31}\mathbf{e}_2 + m_{12}\mathbf{e}_3$
- Trivetor: $\mathbf{M}_3 = m_{123}\mathbf{e}_{123} \Rightarrow \mathbf{M}_3^* = m_{123}$
- Multivetor: $\mathbf{M} = m + m_1\mathbf{e}_1 + m_2\mathbf{e}_2 + m_3\mathbf{e}_3 + m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12} + m_{123}\mathbf{e}_{123} \Rightarrow$

$$\mathbf{M}^* = m_{123} + m_{23}\mathbf{e}_1 + m_{31}\mathbf{e}_2 + m_{12}\mathbf{e}_3 - m_1\mathbf{e}_{23} - m_2\mathbf{e}_{31} - m_3\mathbf{e}_{12} - m\mathbf{e}_{123}$$

Geometricamente, o dual de um k -blade $A_{\langle k \rangle}$ em Cl_n é um $(n-k)$ -blade que se encontra no complemento ortogonal do espaço de dimensão k do k -blade e ambos possuem a mesma norma. A sua expressão é dada por:

$$A_{\langle k \rangle}^* = (-1)^{n(n-1)/2} A_{\langle k \rangle} \cdot I_{\langle n \rangle} \quad (3.1.18)$$

Por exemplo, o dual $(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^*$ do bivetor $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, em Cl_3 , é um vetor \mathbf{w} , normal ao plano gerado por $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, e com norma $\|\mathbf{w}\| = \|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|$. O sentido é determinado pela regra da mão direita. Já no Cl_4 , o dual de um 1-blade \mathbf{u} será $\mathbf{u}^* = (-1)^6 \mathbf{u} \cdot I_4 = \mathbf{u} \cdot I_4$, um 3-blade.

3.1.6 Produto Geométrico - Caso Geral

O produto geométrico entre um vetor \mathbf{u} e um multivetor arbitrário \mathbf{M} pode ser obtido usando a contração e o produto exterior, como se segue [14]:

$$\mathbf{u}\mathbf{M} = \mathbf{u} \rfloor \mathbf{M} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{M}. \quad (3.1.19)$$

Considerando $\hat{\mathbf{M}} = (-1)^k \mathbf{M}$, como em 3.1.13, teremos [14]:

$$\hat{\mathbf{M}}\mathbf{u} = \hat{\mathbf{M}} \rfloor \mathbf{u} + \hat{\mathbf{M}} \wedge \mathbf{u} = -\mathbf{u} \rfloor \mathbf{M} + \mathbf{u} \wedge \mathbf{M}. \quad (3.1.20)$$

Para o produto geométrico entre blades de quaisquer graduações, o leitor deve consultar [16, 33].

3.1.7 A Álgebra Geométrica e os Quatérnios

Mostraremos aqui que a álgebra geométrica par (Cl_3^+), onde se consideram apenas os multivetores do tipo $\mathbf{M}_+ = (m) + (m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12})$, ou seja, que possuem somente escalar e bivector (ou somente um desses dois objetos, de graduação par), é isomorfa à dos quatérnios (\mathbb{H}).

Já dissemos acima que os quatérnios são elementos que têm a forma

$$q = a + bi + cj + dk \in \mathbb{H},$$

onde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ e $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$. Temos ainda, nos quatérnios, as seguintes relações: $ij = -ji = k$; $jk = -kj = i$ e $ki = -ik = j$.

Seja o multivector $\mathbf{M} = m + m_{23}\mathbf{e}_{23} + m_{31}\mathbf{e}_{31} + m_{12}\mathbf{e}_{12} \in Cl_3^+$.

Fazendo $\mathbf{i} = \mathbf{e}_{32} = -\mathbf{e}_{23}$, $\mathbf{j} = \mathbf{e}_{13} = -\mathbf{e}_{31}$, e $\mathbf{k} = \mathbf{e}_{21} = -\mathbf{e}_{12}$, então podemos reescrever \mathbf{M} como:

$$\mathbf{M} = m - m_{23}\mathbf{i} - m_{31}\mathbf{j} - m_{12}\mathbf{k}.$$

É fácil ver, neste caso, que $\mathbf{i}^2 = (\mathbf{e}_3\mathbf{e}_2)^2 = \mathbf{e}_3\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3\mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 = -1$. Podemos verificar, ainda, que:

$$\mathbf{j}^2 = -1; \quad \mathbf{k}^2 = -1; \quad \mathbf{ijk} = -1; \quad \mathbf{ij} = -\mathbf{ji} = \mathbf{k}; \quad \mathbf{jk} = -\mathbf{kj} = \mathbf{i}; \quad \mathbf{ki} = -\mathbf{ik} = \mathbf{j}.$$

Com isso, fica claro que é possível fazer as associações:

$$i \leftrightarrow \mathbf{i} = \mathbf{e}_{32}; \quad j \leftrightarrow \mathbf{j} = \mathbf{e}_{13}; \quad k \leftrightarrow \mathbf{k} = \mathbf{e}_{21},$$

de onde se conclui que podemos identificar as unidades quaterniônicas $\{i, j, k\}$ com os bivectores $\{\mathbf{e}_{32}, \mathbf{e}_{13}, \mathbf{e}_{21}\}$ da álgebra geométrica, estabelecendo-se, assim, o isomorfismo $Cl_3^+ \simeq \mathbb{H}$. [36]

Utilizando os duais, podemos verificar que:

- $i \leftrightarrow \mathbf{e}_{32} = -\mathbf{e}_{23} = \mathbf{e}_1^* = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{I}^{-1} = -\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{I}$
- $j \leftrightarrow \mathbf{e}_{13} = -\mathbf{e}_{31} = \mathbf{e}_2^* = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{I}^{-1} = -\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{I}$
- $k \leftrightarrow \mathbf{e}_{21} = -\mathbf{e}_{12} = \mathbf{e}_3^* = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{I}^{-1} = -\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{I}$.

Com isso, podemos escrever: $\mathbf{M} = m - m_{23}\mathbf{e}_1^* - m_{31}\mathbf{e}_2^* - m_{12}\mathbf{e}_3^*$, ou seja:

$$\mathbf{M} = m + (m_{23}\mathbf{e}_1 + m_{31}\mathbf{e}_2 + m_{12}\mathbf{e}_3)\mathbf{I} \in Cl_3^+ \simeq \mathbb{H}.$$

O isomorfismo entre os quatérnios e a álgebra geométrica dá-se, portanto, com a identificação entre as unidades quaterniônicas (i, j, k) e os bivectores (ou pseudovectores) da álgebra geométrica.

A álgebra geométrica, isomorfa à dos quatérnios é, entretanto, mais abrangente que esta por não se restringir ao espaço tridimensional, podendo ser utilizada em dimensões maiores.

3.1.8 A álgebra geométrica Cl_3 e a álgebra vetorial

O produto vetorial entre os vetores $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ e $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ é, na álgebra vetorial de Gibbs, considerado um vetor \mathbf{w} ortogonal ao plano formado pelos vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , sendo calculado por:

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} \times \mathbf{v} = \begin{vmatrix} \vec{\mathbf{i}} & \vec{\mathbf{j}} & \vec{\mathbf{k}} \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} = (u_2v_3 - u_3v_2)\vec{\mathbf{i}} + (u_3v_1 - u_1v_3)\vec{\mathbf{j}} + (u_1v_2 - u_2v_1)\vec{\mathbf{k}}.$$

Observe que, se invertermos o sentido dos vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , obteremos $\mathbf{w}' = (-\mathbf{u}) \times (-\mathbf{v}) = \mathbf{w}$, pois:

$$\mathbf{w}' = (-\mathbf{u}) \times (-\mathbf{v}) = \begin{vmatrix} \vec{\mathbf{i}} & \vec{\mathbf{j}} & \vec{\mathbf{k}} \\ -u_1 & -u_2 & -u_3 \\ -v_1 & -v_2 & -v_3 \end{vmatrix} = (u_2v_3 - u_3v_2)\vec{\mathbf{i}} + (u_3v_1 - u_1v_3)\vec{\mathbf{j}} + (u_1v_2 - u_2v_1)\vec{\mathbf{k}} =$$

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = \mathbf{w}.$$

Era de se esperar que ocorresse, neste caso, uma inversão no sentido de \mathbf{w} . Entretanto, vemos que o sentido de \mathbf{w} e de \mathbf{w}' é o mesmo, o que se constitui numa incoerência observada na álgebra vetorial [36].

O resultado do chamado produto misto entre os vetores \mathbf{u} , \mathbf{v} e \mathbf{w} , denotado $\mathbf{u} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w})$ possui, também, uma incoerência. Ao se invertermos os sentidos dos vetores não deveria haver mudança no resultado, que é um escalar o que, no entanto, não ocorre, ou seja, mudando-se os sentidos dos vetores envolvidos muda o sinal do escalar.

Na álgebra geométrica, tais incoerências não ocorrem. Nela o **produto vetorial** é definido como:

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^* = -(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I},$$

ou seja, $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ é o vetor dual do bivetor $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$.

Elevando ao quadrado a relação $\mathbf{u} \times \mathbf{v} = -(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I}$, teremos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \times \mathbf{v})^2 &= (-\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I})^2 = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^2\mathbf{I}^2 = -(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^2 = -[(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})] = \\ &= -[(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) + (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}) \wedge (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})] = -[(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}) - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) + 0] = -[(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2 - \|\mathbf{u}\|^2\|\mathbf{v}\|^2] = \\ &= \|\mathbf{u}\|^2\|\mathbf{v}\|^2 - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2 = \|\mathbf{u}\|^2\|\mathbf{v}\|^2 - \|\mathbf{u}\|^2\|\mathbf{v}\|^2\cos^2\theta = \|\mathbf{u}\|^2\|\mathbf{v}\|^2\sin^2\theta = (\|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\|\sin\theta)^2 = \|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|^2 \end{aligned}$$

ou seja:

$$(\mathbf{u} \times \mathbf{v})^2 = \|\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}\|^2,$$

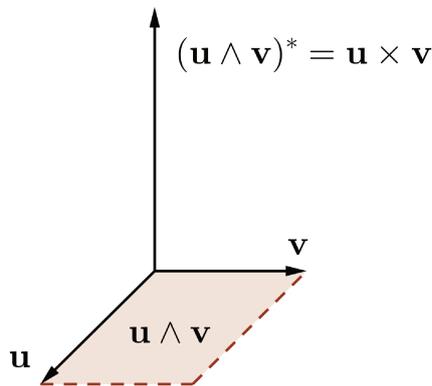
o que significa que a magnitude de $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ é igual à área do paralelogramo formado pelos vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} que compõem $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, o que era de se esperar, pois $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ é o dual de $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$.

Calculando, agora, $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}$, como em (2.2.2), obtemos:

$$\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = (u_2v_3 - u_3v_2)\mathbf{e}_{23} + (u_3v_1 - u_1v_3)\mathbf{e}_{31} + (u_1v_2 - u_2v_1)\mathbf{e}_{12}.$$

Usando as relações de dualidade $\mathbf{e}_{23}^* = \mathbf{e}_1$; $\mathbf{e}_{31}^* = \mathbf{e}_2$; e $\mathbf{e}_{12}^* = \mathbf{e}_3$ no resultado obtido, ficamos com:

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})^* = (u_2v_3 - u_3v_2)\mathbf{e}_1 + (u_3v_1 - u_1v_3)\mathbf{e}_2 + (u_1v_2 - u_2v_1)\mathbf{e}_3, \quad (3.1.21)$$

Figura 3.1: $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$

um vetor, como podemos observar na figura 3.1.

Vamos verificar se, mudando o sentido dos vetores \mathbf{u} e \mathbf{v} , o sentido do produto vetorial na álgebra geométrica também muda. Temos, portanto, $\mathbf{u} \mapsto -\mathbf{u}$, $\mathbf{v} \mapsto -\mathbf{v}$. Como cada \mathbf{e}_i muda de sentido, ou seja, $\mathbf{e}_i \mapsto -\mathbf{e}_i$, verifica-se que $\mathbf{I} = \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 \mapsto -\mathbf{I}$.

Ficamos, portanto, com:

$$\mathbf{u} \times \mathbf{v} = -(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I} \mapsto -[(-\mathbf{u}) \wedge (-\mathbf{v})](-\mathbf{I}) = -[\mathbf{u} \wedge \mathbf{v}](-\mathbf{I}) = (\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I} = -(\mathbf{u} \times \mathbf{v}).$$

Conclusão: quando fazemos uma inversão nos vetores que compõem o produto vetorial (como definido na álgebra geométrica), bem como dos \mathbf{e}_i , o vetor resultante sofre, também, uma inversão, ou seja, o produto vetorial é, neste caso, coerente.

Conforme podemos ler em [19], cabe aqui uma advertência: livros de álgebra vetorial normalmente fazem uma distinção entre vetores polares e vetores axiais, sendo $\mathbf{u} \times \mathbf{v}$ identificado como vetor axial e \mathbf{u} e \mathbf{v} , como vetores polares.

Esta identificação é desnecessária na álgebra geométrica: o produto vetorial de \mathbf{u} e \mathbf{v} , definido como $\mathbf{u} \times \mathbf{v} = -(\mathbf{u} \wedge \mathbf{v})\mathbf{I}$, é um vetor, como vimos em (3.1.21), exatamente da mesma forma que \mathbf{u} e \mathbf{v} são vetores.

Concluimos, portanto, que a álgebra geométrica engloba a de Grassmann e a estrutura dos quatérnios de forma satisfatória e consistente, não apresentando incoerências internas [36].

3.1.9 Projeção, Rejeição e Reflexão

Na álgebra geométrica, podemos fazer as operações de projeção, rejeição e reflexão de um vetor \mathbf{v} em relação a um outro vetor, \mathbf{w} , como se segue [20]:

Projeção de vetor em vetor

Consideremos o vetor projeção de \mathbf{v} sobre \mathbf{w} como sendo o vetor \mathbf{v}_{\parallel} (vide 3.2). Logo, temos:

$$\mathbf{v}_{\parallel} = \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}}{\mathbf{w} \cdot \mathbf{w}} \right) \mathbf{w} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|^2},$$

e então, tendo em vista 3.1.14, como $\frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|^2} = \mathbf{w}^{-1}$, teremos:

$$\mathbf{v}_{\parallel} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1}. \quad (3.1.22)$$

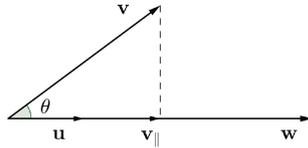


Figura 3.2: Vetor projeção: \mathbf{v}_{\parallel}

Rejeição de vetor em vetor

Consideremos o vetor rejeição de \mathbf{v} em relação a \mathbf{w} como sendo o vetor \mathbf{v}_{\perp} , em que $\mathbf{v}_{\perp} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_{\parallel}$ (vide 3.3). Ficamos, portanto, com: $\mathbf{v}_{\perp} = \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1}$. Sabemos que o produto geométrico entre \mathbf{v} e \mathbf{w} é dado por: $\mathbf{v}\mathbf{w} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$ e, portanto, $\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{v}\mathbf{w} - \mathbf{v} \wedge \mathbf{w}$. Então:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\perp} &= \mathbf{v} - [(\mathbf{v}\mathbf{w} - \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1}] = \mathbf{v} - [\mathbf{v}\mathbf{w}\mathbf{w}^{-1} - (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1}] = \mathbf{v} - \mathbf{v} + (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1} \Rightarrow \\ \mathbf{v}_{\perp} &= (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.1.23)$$

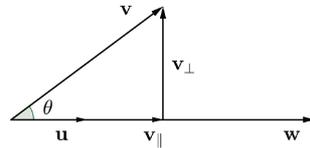


Figura 3.3: Vetor rejeição: \mathbf{v}_{\perp}

Reflexão de vetor em vetor

Consideremos a reflexão do vetor \mathbf{v} em \mathbf{w} como sendo o vetor \mathbf{v}_{\top} . Portanto, temos: $\mathbf{v}_{\top} + 2\mathbf{v}_{\perp} = \mathbf{v}$ (vide 3.4), ou seja, $\mathbf{v}_{\top} = \mathbf{v} - 2\mathbf{v}_{\perp}$, logo:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\top} &= (\mathbf{v}_{\parallel} + \mathbf{v}_{\perp}) - 2\mathbf{v}_{\perp} = \mathbf{v}_{\parallel} - \mathbf{v}_{\perp} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1} - (\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} - \mathbf{v} \wedge \mathbf{w})\mathbf{w}^{-1} = (\mathbf{w} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{w} \wedge \mathbf{v})\mathbf{w}^{-1} \Rightarrow \\ \mathbf{v}_{\top} &= \mathbf{w}\mathbf{v}\mathbf{w}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.1.24)$$

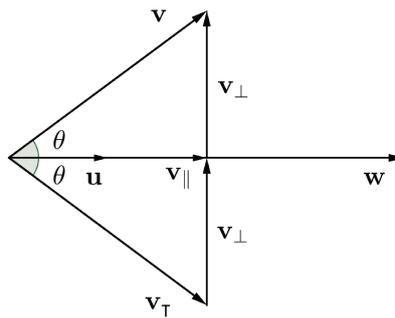


Figura 3.4: Vetor refletido: \mathbf{v}_T

Projeção de vetor em um plano

A projeção de um vetor \mathbf{v} em um plano Π cujo vetor normal é \mathbf{n} é igual à rejeição do vetor \mathbf{v} em relação ao vetor \mathbf{n} , ou seja:

$$\mathbf{v}_{\parallel} = (\mathbf{v} \wedge \mathbf{n})\mathbf{n}^{-1}. \quad (3.1.25)$$

Vide figura 3.5

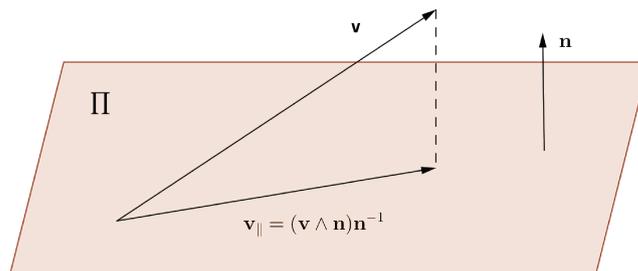


Figura 3.5: Projeção de um vetor em um plano

Rejeição de um vetor em relação a um plano

A rejeição de um vetor \mathbf{v} em relação ao plano Π cujo vetor normal é \mathbf{n} é igual à projeção de \mathbf{v} sobre \mathbf{n} , ou seja:

$$\mathbf{v}_{\perp} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}^{-1}. \quad (3.1.26)$$

Vide figura 3.6

Reflexão de um vetor em relação a um plano

A reflexão do vetor \mathbf{v} em relação ao plano é dada por $\mathbf{v}_T = \mathbf{v}_{\parallel} - \mathbf{v}_{\perp}$, logo:

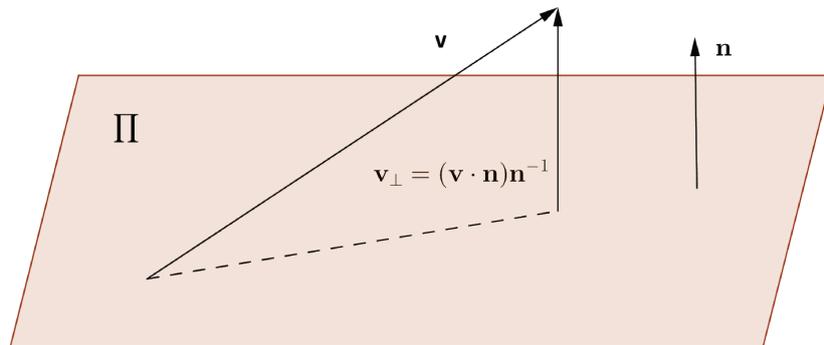


Figura 3.6: Rejeição de um vetor em um plano

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\top &= (\mathbf{v} \wedge \mathbf{n})\mathbf{n}^{-1} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}^{-1} = (\mathbf{v} \wedge \mathbf{n} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}^{-1} = (-\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{n} \wedge \mathbf{v})\mathbf{n}^{-1} = -(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{n} \wedge \mathbf{v})\mathbf{n}^{-1} \Rightarrow \\ &\mathbf{v}_\top = -\mathbf{n}\mathbf{v}\mathbf{n}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.1.27)$$

Vide figura 3.7. Observe, na mesma figura, a reflexão de \mathbf{v} em \mathbf{n} .

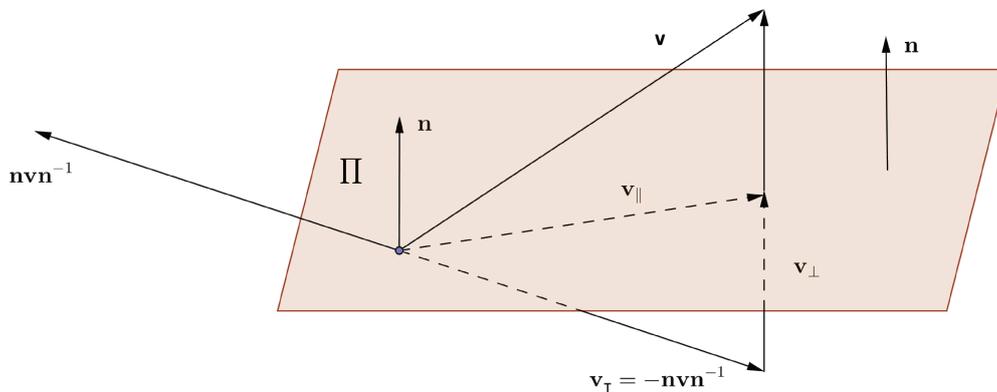


Figura 3.7: Reflexão de um vetor em um plano.

3.1.10 Rotações

Já tratamos de rotações quando falamos de quatérnios, oportunidade em que foi apresentada a fórmula de Rodrigues, [2.1.5]. Ali vimos a rotação de um vetor em torno de um eixo.

Vejam, agora, das rotações realizadas no âmbito da álgebra geométrica.

Rotação de um vetor

A figura 3.8 representa a composição de duas reflexões sofridas por um vetor \mathbf{v} , sucessivamente nos vetores \mathbf{w}_1 e \mathbf{w}_2 , separados por um ângulo $\alpha_1 + \alpha_2$, resultando no vetor \mathbf{v}' , o que corresponde a uma rotação de \mathbf{v} , de um ângulo $2(\alpha_1 + \alpha_2)$, no sentido de \mathbf{w}_1 para \mathbf{w}_2 .

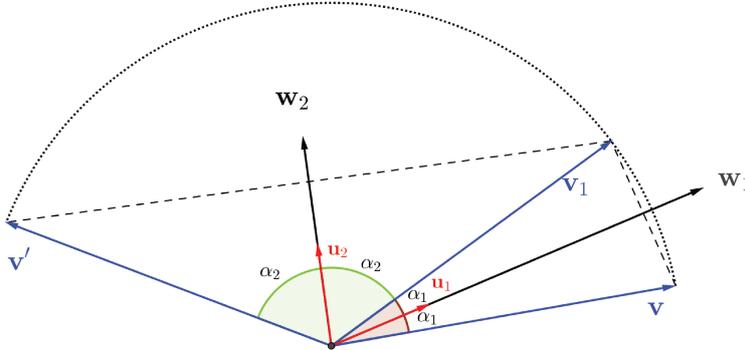


Figura 3.8: Rotação de um vetor \mathbf{v} no sentido de \mathbf{w}_1 para \mathbf{w}_2 .

Inicialmente refletimos o vetor \mathbf{v} em \mathbf{w}_1 , o que resulta no vetor \mathbf{v}_1 segundo a operação:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{w}_1 \mathbf{v} \mathbf{w}_1^{-1}.$$

Em seguida, o vetor \mathbf{v}_1 assim obtido é refletido em \mathbf{w}_2 , resultando no vetor \mathbf{v}' . Esta segunda reflexão é dada por:

$$\mathbf{v}' = \mathbf{w}_2 \mathbf{v}_1 \mathbf{w}_2^{-1}$$

Aplicando $\mathbf{v}_1 = \mathbf{w}_1 \mathbf{v} \mathbf{w}_1^{-1}$ nesta equação obtemos:

$$\mathbf{v}' = \mathbf{w}_2 (\mathbf{w}_1 \mathbf{v} \mathbf{w}_1^{-1}) \mathbf{w}_2^{-1} = (\mathbf{w}_2 \mathbf{w}_1) \mathbf{v} (\mathbf{w}_1^{-1} \mathbf{w}_2^{-1}) = (\mathbf{w}_2 \mathbf{w}_1) \mathbf{v} (\mathbf{w}_2 \mathbf{w}_1)^{-1}.$$

O vetor \mathbf{v}' , resultante desta operação tem a mesma norma de \mathbf{v} e podemos verificar na figura 3.8 que a composição destas duas reflexões seguidas resultam na rotação do vetor \mathbf{v} , no plano gerado pelos vetores \mathbf{w}_1 e \mathbf{w}_2 , de um ângulo igual ao dobro do ângulo entre eles, ou seja, sendo o ângulo entre os vetores \mathbf{w}_1 e \mathbf{w}_2 igual a $\frac{\theta}{2} = \alpha_1 + \alpha_2$, a rotação de \mathbf{v} para \mathbf{v}' será igual a θ .

O plano onde ocorre a rotação contém o bivector $\mathbf{A} = \mathbf{w}_1 \wedge \mathbf{w}_2$, que pode ser normalizado para

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{w}_1 \wedge \mathbf{w}_2}{\|\mathbf{w}_1 \wedge \mathbf{w}_2\|} = \frac{\mathbf{w}_1 \wedge \mathbf{w}_2}{\|\mathbf{w}_1\| \|\mathbf{w}_2\| \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

Ocorre que quaisquer dois vetores não paralelos deste plano onde a rotação acontece podem formar um bivector contido no mesmo plano, em particular, os vetores unitários \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 , na direção respectivamente de \mathbf{w}_1 e \mathbf{w}_2 (os versores destes, como se chamam em álgebra vetorial) e que podem ser obtidos por $\mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{w}_i}{\|\mathbf{w}_i\|}$, $i = 1, 2$.

Tomando estes dois vetores unitários podemos obter o bivector unitário

$$\hat{\mathbf{B}} = \frac{\mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}, \quad (3.1.28)$$

que está no plano de rotação e que será útil adiante para a fórmula que designa a mesma.

Se fizermos a operação de rotação, refletindo \mathbf{v} sucessivamente sobre \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 obteremos o mesmo resultado de refletir sobre \mathbf{w}_1 e \mathbf{w}_2 , já que são vetores respectivamente com a mesma direção e sentido, e todos coplanares, então podemos, agora, descrever a rotação como:

$$\mathbf{v}' = (\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1)\mathbf{v}(\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1)^{-1}.$$

O produto $\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1$ é o produto geométrico entre os vetores unitários \mathbf{u}_2 e \mathbf{u}_1 e o chamaremos de **rotor**. Portanto,

$$R = \mathbf{u}_2\mathbf{u}_1,$$

e podemos verificar que $R^{-1} = (\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1)^{-1} = \mathbf{u}_1^{-1}\mathbf{u}_2^{-1}$ e, conseqüentemente, ficamos com $\mathbf{v}' = R\mathbf{v}R^{-1}$.

Podemos observar que $R^{-1} = \mathbf{u}_1^{-1}\mathbf{u}_2^{-1} = \frac{\mathbf{u}_1}{\|\mathbf{u}_1\|} \frac{\mathbf{u}_2}{\|\mathbf{u}_2\|} = \mathbf{u}_1\mathbf{u}_2 = \tilde{R}$, ou seja:

$$R^{-1} = \tilde{R}.$$

Com isto, podemos escrever $\mathbf{v}' = (\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1)\mathbf{v}(\mathbf{u}_2\mathbf{u}_1)^{-1} = R\mathbf{v}R^{-1}$ como:

$$\mathbf{v}' = R\mathbf{v}\tilde{R} \quad (3.1.29)$$

De $R = \mathbf{u}_2\mathbf{u}_1$, teremos:

$$R = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2 \wedge \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 = \|\mathbf{u}_2\| \|\mathbf{u}_1\| \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{\mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2}{\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

Como \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 são ambos unitários, e considerando o bivector, também unitário, $\hat{\mathbf{B}} = \frac{\mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2}{\text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right)}$, teremos a seguinte expressão:

$$R = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \hat{\mathbf{B}} \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.1.30)$$

onde R é o rotor que, aplicado segundo a expressão $\mathbf{v}' = R\mathbf{v}\tilde{R}$ gira o vetor \mathbf{v} , de um ângulo θ , no sentido de \mathbf{u}_1 para \mathbf{u}_2 , no plano que contém o bivector $\hat{\mathbf{B}}$.

Fazendo o produto do bivector $\hat{\mathbf{B}}$ por ele mesmo e, considerando que este é unitário, teremos $\hat{\mathbf{B}}^2 = \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{B}} = -1$.

Tendo em vista isto, podemos exprimir o rotor R como:

$$R = \exp\left(-\hat{\mathbf{B}}\frac{\theta}{2}\right). \quad (3.1.31)$$

Observação: Há outras formas de se chegar a este mesmo resultado, conforme podemos observar em [31, 36].

3.1.11 Versores

Observando as operações descritas nas subseções 3.1.9 e 3.1.10, podemos verificar:

1. Reflexão do vetor \mathbf{v} no vetor \mathbf{w} : $\mathbf{v}_\top = \mathbf{w}\mathbf{v}\mathbf{w}^{-1}$;
2. Reflexão do vetor \mathbf{v} em relação a um plano Π : $\mathbf{v}_\top = -\mathbf{n}\mathbf{v}\mathbf{n}^{-1}$, onde \mathbf{n} é o vetor normal ao plano Π ; e
3. Rotação do vetor \mathbf{v} no sentido de \mathbf{u}_1 para \mathbf{u}_2 , ambos vetores unitários: $\mathbf{v}' = \mathbf{R}\mathbf{v}\tilde{\mathbf{R}}$, onde $\mathbf{R} = \mathbf{u}_2\mathbf{u}_1$.

Percebemos que não é incomum um vetor que sofre uma operação (nos exemplos, o vetor \mathbf{v}) aparecer “ensanduichado” entre dois outros, na verdade inversos ou reversos um do outro. Observamos, ainda, que ora aparece o sinal negativo antes da fórmula, ora não.

Podemos, ainda, observar que o vetor resultante nestas operações possui a mesma magnitude do vetor que lhes deu origem.

Consideremos, agora, por exemplo, uma operação de reflexão de um vetor \mathbf{v} em um vetor \mathbf{w}_1 , como no item 1. acima. Ou seja,

$$\mathbf{v}_{\top_1} = \mathbf{w}_1\mathbf{v}\mathbf{w}_1^{-1}.$$

Se o vetor \mathbf{v}_{\top_1} assim obtido sofrer uma nova reflexão, agora em um vetor \mathbf{w}_2 , teremos como resultado o vetor \mathbf{v}_{\top_2} que é facilmente calculado: $\mathbf{v}_{\top_2} = \mathbf{w}_2\mathbf{v}_{\top_1}\mathbf{w}_2^{-1} = \mathbf{w}_2(\mathbf{w}_1\mathbf{v}\mathbf{w}_1^{-1})\mathbf{w}_2^{-1}$. Aplicando as propriedades vistas anteriormente, ficamos com: $\mathbf{v}_{\top_2} = (\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)\mathbf{v}(\mathbf{w}_1^{-1}\mathbf{w}_2^{-1}) \Rightarrow \mathbf{v}_{\top_2} = (\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)\mathbf{v}(\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)^{-1}$. Observamos que \mathbf{v} novamente aparece ensanduichado entre as expressões inversas uma da outra, $(\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)$ e $(\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)^{-1}$.

Se o processo prosseguir, ou seja, se houver sucessivas reflexões nos vetores $\mathbf{w}_3 \cdots \mathbf{w}_k$, $k \leq n$, teremos como resultado o vetor \mathbf{v}_{\top_n} que pode ser obtido por meio da operação:

$$\mathbf{v}_{\top_n} = (\mathbf{w}_k \cdots \mathbf{w}_3\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)\mathbf{v}(\mathbf{w}_k \cdots \mathbf{w}_3\mathbf{w}_2\mathbf{w}_1)^{-1}.$$

Se a operação fosse de reflexões sucessivas em planos $\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_n$, de vetores normais respectivamente $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_k$, teríamos:

$$\mathbf{v}_{\top_n} = (-1)^k(\mathbf{n}_k \cdots \mathbf{n}_2\mathbf{n}_1)\mathbf{v}(\mathbf{n}_k \cdots \mathbf{n}_2\mathbf{n}_1)^{-1}.$$

O sinal negativo para k ímpar pode ser entendido devido à fórmula da reflexão de vetor em um plano, que aparece em (3.1.27).

Em geral, consideramos o produto de k vetores

$$\mathcal{V} = \mathbf{v}_k\mathbf{v}_{k-1} \cdots \mathbf{v}_1 \tag{3.1.32}$$

como sendo um *versor* de graduação k , sendo o seu inverso dado por:

$$\mathcal{V}^{-1} = (\mathbf{v}_k\mathbf{v}_{k-1} \cdots \mathbf{v}_1)^{-1} = \mathbf{v}_1^{-1} \cdots \mathbf{v}_{k-1}^{-1}\mathbf{v}_k^{-1}. \tag{3.1.33}$$

Como em algumas operações devemos considerar o sinal negativo, nelas devemos escrever:

$$\mathcal{V}^\dagger = (-1)^k\mathcal{V}^{-1}.$$

As operações com versores são, portanto, escritas como:

$$\mathbf{v}' = \mathcal{V}\mathbf{v}\mathcal{V}^\dagger, \quad (3.1.34)$$

para os casos em que aplicam-se os sinais e

$$\mathbf{v}' = \mathcal{V}\mathbf{v}\mathcal{V}^{-1}, \quad (3.1.35)$$

quando não há necessidade de sinais negativos.

Nas expressões acima, \mathbf{v}' pode ser o resultado de reflexão(s) ou de rotação(s). Quando um versor produz reflexão ele se chama “refletor” e no caso de produzir rotação ele é denominado “rotor”.

Um rotor R é o produto geométrico de um número par de vetores unitários, tais que $R\tilde{R} = 1$ [14]. De um modo geral, um versor é a combinação linear de um número par ou ímpar de 1-vetores (1-blades). No primeiro caso (número par) temos como resultado rotações e no segundo caso, combinação de um número ímpar de 1-blades, temos como resultado a combinação de rotações com reflexão, às vezes chamada de *anti-rotações* [33].

Podemos combinar sucessivas operações com versores. Se inicialmente tivermos $\mathbf{v}' = \mathcal{V}\mathbf{v}\mathcal{V}^\dagger$ e depois submetermos \mathbf{v}' a uma nova operação com um versor \mathcal{V}' para obter \mathbf{v}'' , teremos:

$$\mathbf{v}'' = \mathcal{V}'\mathbf{v}'\mathcal{V}'^\dagger,$$

logo: $\mathbf{v}'' = \mathcal{V}'(\mathcal{V}\mathbf{v}\mathcal{V}^\dagger)\mathcal{V}'^\dagger = \mathcal{V}'\mathcal{V}\mathbf{v}\mathcal{V}^\dagger\mathcal{V}'^\dagger = (\mathcal{V}'\mathcal{V})\mathbf{v}(\mathcal{V}'\mathcal{V})^\dagger$, ou $\mathbf{v}'' = \mathcal{V}''\mathbf{v}\mathcal{V}''^\dagger$, onde

$$\mathcal{V}'' = \mathcal{V}'\mathcal{V},$$

um produto geométrico entre dois versores. Nos casos em que não há necessidade de sinais negativos, basta que se considere \mathcal{V}^{-1} no lugar de \mathcal{V}^\dagger [20].

Considerando que, para um vetor \mathbf{v} , observamos $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v}$, temos que o reverso de um versor $\mathcal{V} = \mathbf{v}_k\mathbf{v}_{k-1}\cdots\mathbf{v}_1$ é dado por:

$$\tilde{\mathcal{V}} = \mathbf{v}_1\cdots\mathbf{v}_{k-1}\mathbf{v}_k. \quad (3.1.36)$$

O inverso \mathcal{V}^{-1} de \mathcal{V} é tal que $\mathcal{V}\mathcal{V}^{-1} = \mathcal{V}^{-1}\mathcal{V} = 1$ e pode ser calculado por: $\mathcal{V}^{-1}\mathcal{V} = 1 \Rightarrow \mathcal{V}^{-1}\mathcal{V}\tilde{\mathcal{V}} = \tilde{\mathcal{V}}$. Logo [17]:

$$\mathcal{V}^{-1} = \frac{\tilde{\mathcal{V}}}{\mathcal{V}\tilde{\mathcal{V}}}. \quad (3.1.37)$$

Capítulo 4

Álgebra Geométrica no Espaço Conforme

4.1 Considerações Iniciais

O assunto que será apresentado neste capítulo - Espaço Homogêneo - pode ser visto com maiores detalhes nas referências [11], [12], [14], [20], [31] e [33]. O Espaço Conforme é obtido adicionando-se duas dimensões ao Espaço Euclidiano e a vantagem é que neste espaço existe uma maior facilidade de manipular objetos geométricos com a Álgebra Geométrica, em particular esferas e circunferências e, principalmente, tratar de rotações, o que terá importância crucial neste trabalho.

4.2 Espaço Homogêneo

4.2.1 Homogeneidade

Considere um espaço $4D$ contando com um eixo ortogonal aos três eixos do espaço $3D$. À semelhança dos vetores unitários \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 , paralelos e associados respectivamente dos eixos x , y e z , considere o vetor \mathbf{e}_0 , paralelo e associado ao quarto eixo ortogonal do espaço $4D$ que estamos considerando.

Dentro deste espaço, um ponto $p \in 3D$ é referido como:

$$P = \mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3.$$

Devemos estar atentos à origem dos sistemas quando nos referirmos a este espaço:

- A origem $4D$ deste sistema é $O = 0\mathbf{e}_0 + 0\mathbf{e}_1 + 0\mathbf{e}_2 + 0\mathbf{e}_3$;
- A origem $(0, 0, 0) \in 3D$ corresponde ao ponto $P = \mathbf{e}_0$.

Uma característica importante a se considerar e que dá origem ao nome - Espaço Homogêneo - é a *homogeneidade*, que é: se tomarmos o ponto $P = \mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$ e o multiplicarmos por uma constante $\lambda \neq 0$ obteremos o ponto $P' = \lambda\mathbf{e}_0 + \lambda x_1\mathbf{e}_1 + \lambda x_2\mathbf{e}_2 + \lambda x_3\mathbf{e}_3$, que representa o mesmo ponto em \mathbb{R}^3 .

A homogeneidade pode ser associada ao estudo de projeção perspectiva, em que dois pontos distintos sobre uma mesma linha de projeção se projetam no mesmo ponto sobre o plano de projeção. Vide as figuras 4.1 e 4.2 abaixo..

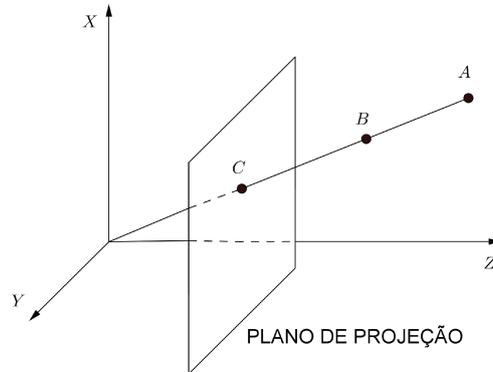


Figura 4.1: Os pontos A e B projetam-se em C , no Plano de Projeção.

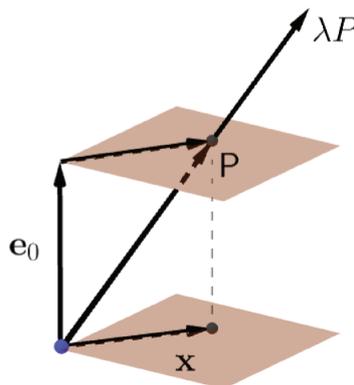


Figura 4.2: O \mathbb{R}^3 embutido no espaço homogêneo. Pontos λP projetam-se em $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$. O plano embaixo representa o \mathbb{R}^3 . O de cima representa uma “cópia” do \mathbb{R}^3 , onde os pontos são projetados. Figura baseada em [14]

Tendo em vista a homogeneidade e a representação de um ponto do $3D$ no espaço homogêneo, qual a interpretação que temos da expressão $P = x_0\mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$, quando $x_0 \neq 0$?

Se multiplicarmos P por $\lambda = \frac{1}{x_0}$, teremos: $P\lambda = P\frac{1}{x_0} = \mathbf{e}_0 + \frac{x_1}{x_0}\mathbf{e}_1 + \frac{x_2}{x_0}\mathbf{e}_2 + \frac{x_3}{x_0}\mathbf{e}_3$, o ponto P que representa $\left(\frac{x_1}{x_0}, \frac{x_2}{x_0}, \frac{x_3}{x_0}\right)$, de $3D$.

Observações:

- A expressão $Q = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 + z\mathbf{e}_3$ significa um “ponto no infinito”, partindo de $P = \mathbf{e}_0 + \lambda x\mathbf{e}_1 + \lambda y\mathbf{e}_2 + \lambda z\mathbf{e}_3$, desde que multipliquemos P por $1/\lambda$ e fizermos $\lambda \rightarrow \infty$, levando

em conta a homogeneidade. Trata-se de um ponto em $4D$, e podemos ler em [[14]] como “ponto impróprio”.

- No item acima, se fizermos $\lambda \rightarrow -\infty$ então obteremos o mesmo ponto Q , significando que se partirmos da origem seguindo a direção de uma reta, atingiremos o mesmo ponto no infinito, independentemente do sentido que nos deslocarmos.
- A expressão $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \in 4D$, ou seja, o ponto $P = \mathbf{e}_0 + x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 + z\mathbf{e}_3$ identifica o vetor-posição $\mathbf{x} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 + z\mathbf{e}_3 \in 3D$. Esta representação, $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$, é a representação direta do ponto P .
- Enquanto $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$ é, em $4D$, um vetor-posição, a expressão $X = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2 + z\mathbf{e}_3 \in 4D$ representa o vetor-direção e, devido à homogeneidade, tanto X quanto $-X$ indicam a mesma direção, ou o mesmo ponto no infinito.

4.2.2 Pontos no Espaço Homogêneo

Sejam P e $Q \in 4D$. Se $P \wedge Q = 0$, então $Q = \alpha P$, $\alpha \in \mathbb{R}$. Se $P = \lambda \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$, então $Q = \alpha \lambda \mathbf{e}_0 + \alpha \mathbf{x}$.

Mas $P = \lambda \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} P = \mathbf{e}_0 + \frac{1}{\lambda} \mathbf{x}$, de onde concluímos que P representa o ponto $\frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$.

Da mesma forma, $Q = \alpha \lambda \mathbf{e}_0 + \alpha \mathbf{x} \Rightarrow \frac{1}{\alpha \lambda} Q = \mathbf{e}_0 + \frac{1}{\lambda} \mathbf{x}$, ou seja, Q também representa $\frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, portanto, $P \wedge Q = 0$ significa que P e Q representam o mesmo ponto no \mathbb{R}^3 .

Agora, se temos $P = \lambda \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$ e $Q = \alpha \mathbf{e}_0 + \mathbf{y}$, então:

$P \wedge Q = (\lambda \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}) \wedge (\alpha \mathbf{e}_0 + \mathbf{y}) = \lambda \alpha \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_0 + \lambda \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{y} + \alpha \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \wedge \mathbf{y} = \mathbf{e}_0 \wedge (\lambda \mathbf{y} - \alpha \mathbf{x}) + \mathbf{x} \wedge \mathbf{y}$.
Logo, temos:

$$P \wedge Q = 0 \Leftrightarrow \lambda \mathbf{y} - \alpha \mathbf{x} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{y} = \frac{\alpha}{\lambda} \mathbf{x} \Leftrightarrow \mathbf{x} \wedge \mathbf{y} = 0$$

Então: $P = \lambda \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} P = \mathbf{e}_0 + \frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \Rightarrow P$ representa $\frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, e $Q = \alpha \mathbf{e}_0 + \mathbf{y} \Rightarrow \frac{1}{\alpha} Q = \mathbf{e}_0 + \frac{1}{\alpha} \mathbf{y} = \mathbf{e}_0 + \frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \Rightarrow Q$ representa o mesmo $\frac{1}{\lambda} \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$.

Concluindo, P e Q representam o mesmo ponto em \mathbb{R}^3 se, e somente se:

$$P \wedge Q = 0, \tag{4.2.1}$$

que é a equação do ponto Q .

Representação dual de um ponto

Um ponto no espaço homogêneo é representado por um vetor. O seu complemento ortogonal é um trivetor. Logo, o dual de um ponto no espaço homogêneo será um trivetor.

Sendo $P = \mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$, podemos calcular o seu dual usando a fórmula (3.1.18), adotando $I = I_4 = \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$. Obteremos, portanto: $P^* = (\mathbf{e}_0)^* + x_1(\mathbf{e}_1)^* + x_2(\mathbf{e}_2)^* + x_3(\mathbf{e}_3)^*$, de onde:

$$P^* = \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 - x_1\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 - x_2\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 - x_3\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2. \quad (4.2.2)$$

Como ilustração, calcularemos o dual de \mathbf{e}_1 , utilizando a fórmula 3.1.18: $\mathbf{e}_1^* = (-1)^{\frac{4-3}{2}}\mathbf{e}_1 I_4 \Rightarrow \mathbf{e}_1^* = \mathbf{e}_1 \cdot I_4$:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1^* &= \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_0) \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_0 \wedge (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1) \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + \\ &\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) \wedge \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3) = -\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3. \end{aligned}$$

4.2.3 Retas no Espaço Homogêneo

Uma reta R que passa por \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 no \mathbb{R}^3 é representada no $4D$ por

$$R = P_1 \wedge P_2, \quad (4.2.3)$$

com $P_1 = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}_1$ e $P_2 = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}_2$.

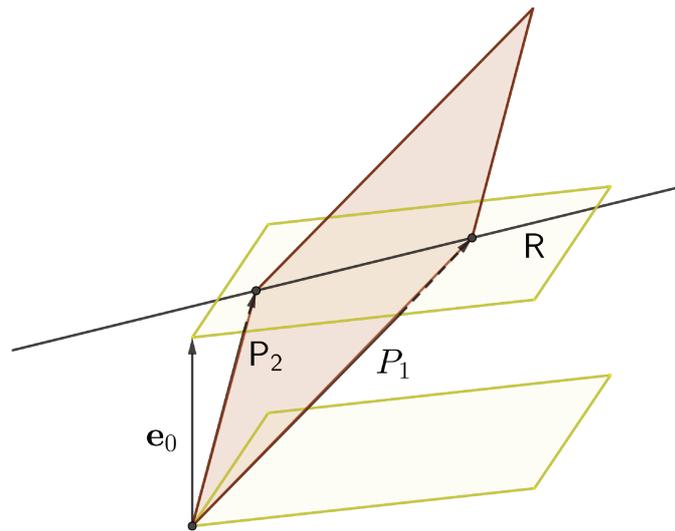


Figura 4.3: Uma reta no espaço homogêneo é representada por um bivector

Podemos observar que a reta é a intersecção entre o plano que contém o bivector e a “cópia” do \mathbb{R}^3 .

Se fizermos $P_1 \wedge R$ ou $P_2 \wedge R$, teremos: $P_1 \wedge (P_1 \wedge P_2) = 0$ e $P_2 \wedge (P_1 \wedge P_2) = 0$, respectivamente. De um modo geral, se $P \in R$, então teremos:

$$P \wedge R = 0 \quad (4.2.4)$$

como a equação da reta R no espaço homogêneo.

Isso se justifica pelo fato de, para um ponto P pertencer à reta $R = P_1 \wedge P_2$ ele deve ser do tipo $P = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2$. Logo:

$$P \wedge R = (\lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2) \wedge (P_1 \wedge P_2) = \lambda_1 P_1 \wedge (P_1 \wedge P_2) + \lambda_2 P_2 \wedge (P_1 \wedge P_2) = 0.$$

Representação dual de uma reta

Uma reta no espaço homogêneo é representada por um bivector. O seu complemento ortogonal é um bivector. Logo, o dual de uma reta no espaço homogêneo também será um bivector.

4.2.4 Planos no Espaço Homogêneo

Analogamente a uma reta no espaço homogêneo, um plano Π passando pelos pontos não colineares \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 e \mathbf{x}_3 no \mathbb{R}^3 é representado no $4D$ por:

$$\Pi = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3, \quad (4.2.5)$$

com $P_1 = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}_1$, $P_2 = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}_2$ e $P_3 = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}_3$.

Uma vez que Π é um trivector, ele possui a seguinte expressão com respeito à base $\{\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$:

$$\Pi = n_1 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + n_2 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + n_3 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + h \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3, \quad (4.2.6)$$

Equação de um Plano

Um ponto $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x}$ está no plano $\Pi = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3$ se, somente se, $P \wedge P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 = 0$, ou seja:

$$P \wedge \Pi = 0. \quad (4.2.7)$$

Esta é a equação do plano Π no espaço homogêneo.

Agora, podemos definir a equação de um plano que passa por uma reta $R = P_1 \wedge P_2$ e por um ponto P fora desta como sendo o plano $\Pi = P \wedge P_1 \wedge P_2$, ou seja:

$$\Pi = P \wedge R. \quad (4.2.8)$$

Representação dual de um plano

Um plano no espaço homogêneo $4D$ é representado por um trivector. O seu complemento ortogonal é um vetor. Logo, o dual de um plano no espaço homogêneo será um vetor.

Sendo $\Pi = n_1 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + n_2 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + n_3 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + h \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$, podemos calcular o seu dual usando a fórmula (3.1.18), fazendo $I = I_4 = \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$. Obteremos, portanto:

$\Pi^* = n_1(\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)^* + n_2(\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1)^* + n_3(\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2)^* + h(\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)^*$, implicando em:

$$\Pi^* = -n_1 \mathbf{e}_1 - n_2 \mathbf{e}_2 - n_3 \mathbf{e}_3 + h \mathbf{e}_0 \quad (4.2.9)$$

Como ilustração, calcularemos o dual de $\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)^* &= (\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3) \cdot (\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3) = \mathbf{e}_0 \cdot (\mathbf{e}_2 \cdot (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3)) = \\ &= \mathbf{e}_0 \cdot (\mathbf{e}_2 \cdot ((\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_0) \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_0 \wedge (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_1) \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_2) \wedge \mathbf{e}_3 - \\ &= \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3))) = \mathbf{e}_0 \cdot (\mathbf{e}_2 \cdot (-\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2)) = \\ &= \mathbf{e}_0 \cdot (-(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_0) \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_0 \wedge (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_1) \wedge \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2)) = \end{aligned}$$

$$\mathbf{e}_0 \cdot (-\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1) = -((\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0) \wedge \mathbf{e}_1) = -\mathbf{e}_1.$$

Aqui $\mathbf{n} = n_1\mathbf{e}_1 + n_2\mathbf{e}_2 + n_3\mathbf{e}_3$ é um vetor normal ao plano e $\frac{h}{\|\mathbf{n}\|}$ é a distância do plano para a origem \mathbf{e}_0 . Isto encontra-se demonstrado em [20].

4.3 A projeção estereográfica

O assunto a seguir pode ser visto com maiores detalhes em [11] e [33].

Tomemos a circunferência de raio unitário abaixo, figura 4.4, na qual encontramos o vetor \mathbf{e}_1 e o vetor \mathbf{e}_+ , que agora apresentamos. É possível tomar cada ponto x da reta que contém \mathbf{e}_1 e obter um ponto correspondente x' sobre a circunferência. Esta relação entre pontos da reta e pontos da circunferência é a “projeção estereográfica” do ponto x .

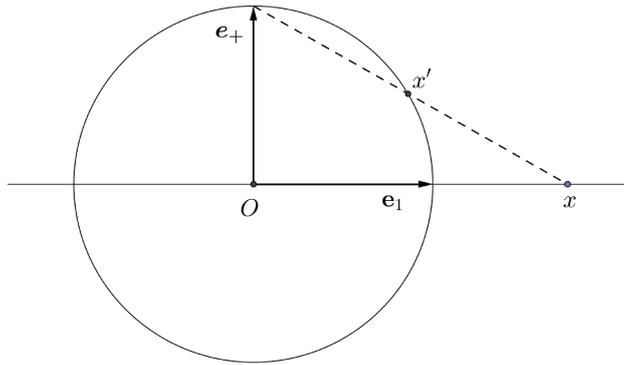


Figura 4.4: Projeção estereográfica

É possível mostrar que x' pode ser determinado pelo vetor

$$\mathbf{x}' = \frac{2x}{1+x^2} \mathbf{e}_1 - \frac{1-x^2}{1+x^2} \mathbf{e}_+. \quad (4.3.1)$$

Para isto, inicialmente temos que considerar:

- $\mathbf{e}_+ \cdot \mathbf{e}_+ = 1$
- $\mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' = 1$, onde $\mathbf{x}' = \overrightarrow{Ox'}$; e
- $\mathbf{e}_+ \cdot \mathbf{x} = 0$, onde $\mathbf{x} = \overrightarrow{Ox} = x\mathbf{e}_1$.

Considere a figura 4.5.

Então, temos: $\mathbf{x}' = \mathbf{e}_+ + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{e}_+)$, de onde, $1 = \mathbf{x}' \cdot \mathbf{x}' = (\mathbf{e}_+ + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{e}_+)) \cdot (\mathbf{e}_+ + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{e}_+))$.

Segue que: $\lambda[(\mathbf{x}^2 + 1)\lambda - 2] = 0 \Rightarrow \lambda = 0$ ou $\lambda = \frac{2}{1 + \mathbf{x}^2}$. Então:

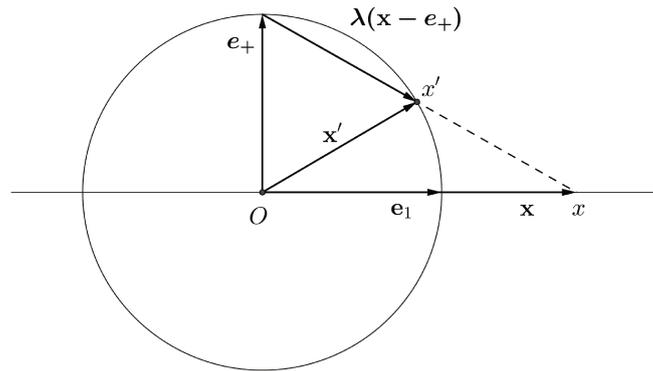


Figura 4.5: Determinação do vetor \mathbf{x}' em uma projeção estereográfica

- Para $\lambda = 0$ em $\mathbf{x}' = \mathbf{e}_+ + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{e}_+)$, temos $\mathbf{x}' = \mathbf{e}_+$, significando que o ponto x encontra-se no infinito.
- Para $\lambda = \frac{2}{1 + \mathbf{x}^2}$, temos:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{e}_+ + \frac{2}{1 + \mathbf{x}^2}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_+) = \frac{2\mathbf{x}}{1 + \mathbf{x}^2} - \frac{(1 - \mathbf{x}^2)\mathbf{e}_+}{1 + \mathbf{x}^2} = \frac{2x\mathbf{e}_1}{1 + x^2\mathbf{e}_1^2} - \frac{(1 - x^2\mathbf{e}_1^2)\mathbf{e}_+}{1 + x^2\mathbf{e}_1^2} \Rightarrow$$

$$\mathbf{x}' = \frac{2x}{1 + x^2} \mathbf{e}_1 - \frac{1 - x^2}{1 + x^2} \mathbf{e}_+, \text{ ou seja, o que consta em 4.3.1.}$$

Podemos observar que todos os pontos da reta têm um correspondente na circunferência, bastando para isto verificar a equação 4.3.1. Destacamos aqui os seguintes pontos: Se $x = 0$, então $\mathbf{x}' = -\mathbf{e}_+$, se $x = 1$ temos $\mathbf{x}' = \mathbf{e}_1$ e, por último, se $x \rightarrow \infty$ ou $x \rightarrow -\infty$ então $\mathbf{x}' = \mathbf{e}_+$. Os pontos $x \in [-1, +1]$ têm seu ponto x' correspondente na semicircunferência inferior, conforme podemos observar em 4.6.

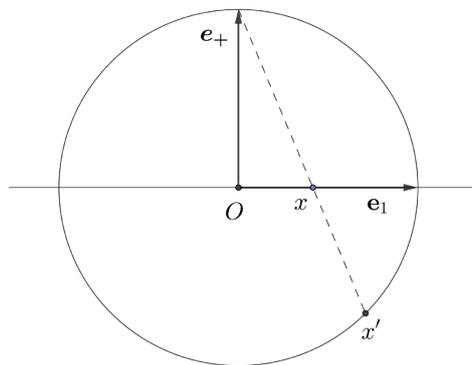


Figura 4.6: Projeção estereográfica, com $|x| < 1$.

Com este processo projetamos pontos de uma reta (dimensão 1) em uma circunferência (dimensão 2). A base utilizada para isto foi $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_+\}$. Além disto, os pontos do infinito são projetados no pólo superior da circunferência [31].

Dizemos, com isto, que todos os pontos da reta estão cobertos pela “imersão” estereográfica [11].

Assinatura de um espaço

Se um espaço n -vetorial tem p vetores unitários \mathbf{e}_i linearmente independentes satisfazendo $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i = 1$ e q vetores unitários \mathbf{e}_j linearmente independentes satisfazendo $\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_j = -1$, então dizemos que o espaço tem p dimensões positivas e q dimensões negativas (com $n = p + q$). Neste caso, ao invés de \mathbb{R}^n escrevemos $\mathbb{R}^{p,q}$ e chamamos (p, q) de “**assinatura**” do espaço [31]. Um espaço Euclidiano n -dimensional é então escrito como $\mathbb{R}^{n,0}$ [14]. Um espaço que contenha em sua base ortonormal $n + 1$ vetores com quadrado igual $+1$ e um vetor com quadrado igual a -1 , por exemplo $\mathbb{R}^{n+1,1}$, é chamado de Espaço de Minkowski [33].

O vetor \mathbf{e}_- e a projeção em $\mathbb{R}^{2,1}$.

Podemos acrescentar mais um vetor, o vetor \mathbf{e}_- , ao sistema $\mathbf{e}_1 \mathbf{O} \mathbf{e}_+$ representado pela figura 4.5. Tal vetor é ortogonal aos vetores \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_+ . Este novo vetor, ora apresentado, é tal que $\mathbf{e}_- \cdot \mathbf{e}_- = -1$.

Com isto, o ponto x da reta que fora projetado na circunferência em $\mathbf{e}_1 \mathbf{O} \mathbf{e}_+$ é agora projetado na *circunferência unitária* paralela à primeira, e com centro na ponta do vetor \mathbf{e}_- , como podemos observar na figura 4.7. Esta circunferência unitária está contida no *plano afim*. Temos, portanto, a projeção do ponto x no espaço $\mathbb{R}^{2,1}$, onde utilizamos a base $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_+, \mathbf{e}_-\}$.

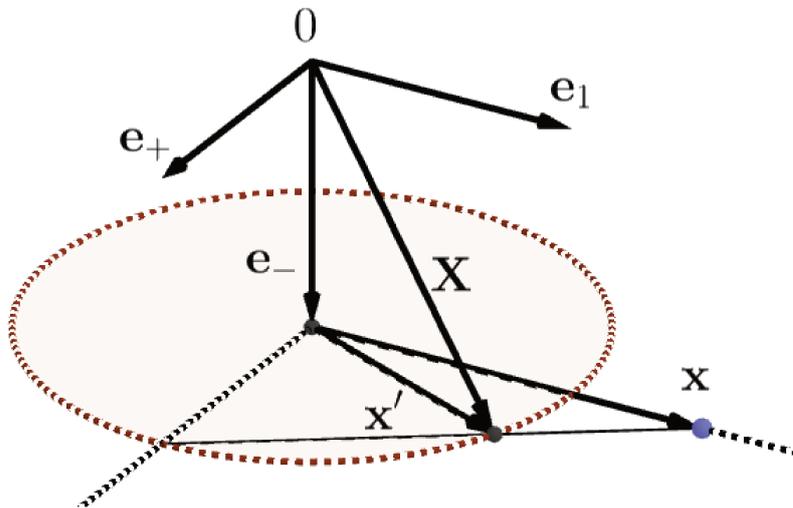


Figura 4.7: O vetor \mathbf{e}_- . Figura baseada em: [31, 33].

Temos que o ponto $x \in \mathbb{R}$ fica denotado pelo vetor \mathbf{X} e, na figura 4.7, vemos que $\mathbf{X} = \mathbf{x}' + \mathbf{e}_-$. Portanto, de 4.3.1:

$$\mathbf{X} = \frac{2}{1+x^2} x \mathbf{e}_1 - \frac{1-x^2}{1+x^2} \mathbf{e}_+ + \mathbf{e}_-. \quad (4.3.2)$$

onde $x \mathbf{e}_1 = \mathbf{x} \in \mathbb{R}^1$ e $x^2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x}^2$.

Vetor Nulo

Considerando-se $\mathbf{e}_- \cdot \mathbf{e}_- = -1$, se fizermos \mathbf{X}^2 obteremos $\mathbf{X}^2 = 0$ e, por conseguinte, $\mathbf{X}\mathbf{X} = \mathbf{X} \cdot \mathbf{X} + \mathbf{X} \wedge \mathbf{X} = 0 \Rightarrow \|\mathbf{X}\|^2 = 0$, caracterizando \mathbf{X} como um *vetor nulo*, assim como qualquer dos seus múltiplos. Um vetor nulo pode ser diferente do vetor $\mathbf{0}$. Tal fato ocorre pela mistura de vetores com assinaturas diferentes na base. Como qualquer múltiplo de um vetor nulo também o é, concluímos que neste espaço também observamos a *homogeneidade*, garantindo que os escalares múltiplos de \mathbf{X} representam o mesmo ponto na circunferência unitária [[31], [33]].

Cone Nulo

Todos os vetores nulos conforme descritos acima formam um lugar geométrico denominado *Cone Nulo*.

Generalização para o Espaço Euclidiano 3D - A projeção em $\mathbb{R}^{4,1}$.

O próximo passo é trocarmos $\mathbf{x} = x\mathbf{e}_1 \in \mathbb{R}$ pelo ponto $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 \in \mathbb{R}^3$ para definirmos \mathbf{X} , projeção de um ponto no \mathbb{R}^3 em um espaço $\mathbb{R}^{4,1}$, cuja base ortogonal é $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_+, \mathbf{e}_-\}$ [31] [33]. Ficamos, portanto, com:

$$\mathbf{X} = \frac{2}{1+x^2} \mathbf{x} - \frac{1-x^2}{1+x^2} \mathbf{e}_+ + \mathbf{e}_-. \quad (4.3.3)$$

onde $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 \in \mathbb{R}^3$ e $x^2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = x^2$.

4.4 O Espaço Conforme

O assunto que será apresentado neste capítulo - Espaço Conforme - pode ser visto com maiores detalhes nas referências [4, 11, 12, 14, 20, 29, 31, 33].

4.4.1 O Modelo Conforme

A Geometria Conforme é equivalente à Projeção Estereográfica no Espaço Euclidiano [4]. Começamos estendendo o \mathbb{R}^n com vetores \mathbf{e}_+ e \mathbf{e}_- , ortogonais entre si e à base canônica do \mathbb{R}^n , e satisfazendo $\mathbf{e}_+^2 = 1$ e $\mathbf{e}_-^2 = -1$.

De 4.3.3, temos:

$$\mathbf{X} = \frac{2}{1+x^2} \mathbf{x} - \frac{1-x^2}{1+x^2} \mathbf{e}_+ + \mathbf{e}_-,$$

então, multiplicando a expressão por $\frac{1+x^2}{2}$ ficamos com:

$$\frac{1+x^2}{2} \mathbf{X} = \mathbf{x} - \frac{1-x^2}{2} \mathbf{e}_+ + \frac{1+x^2}{2} \mathbf{e}_- \Rightarrow \frac{1+x^2}{2} \mathbf{X} = \mathbf{x} + \frac{x^2}{2} (\mathbf{e}_- + \mathbf{e}_+) + \frac{(\mathbf{e}_- - \mathbf{e}_+)}{2} \Rightarrow$$

$$\frac{1+x^2}{2} \mathbf{X} = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{x^2}{2} \mathbf{e}_\infty, \quad (4.4.1)$$

onde:

$$\mathbf{e}_0 = \frac{1}{2}(\mathbf{e}_- - \mathbf{e}_+) \quad \text{e} \quad \mathbf{e}_\infty = \mathbf{e}_- + \mathbf{e}_+. \quad (4.4.2)$$

Para \mathbf{e}_0 e \mathbf{e}_∞ assim definidos, teremos:

$$\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0 = 0; \quad \mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_\infty = 0 \quad \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty = -1. \quad (4.4.3)$$

Consideremos os elementos da base do \mathbb{R}^3 , $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$, e mais os elementos, \mathbf{e}_0 e \mathbf{e}_∞ . Um elemento X do espaço $5D$ gerado pela base $\{\mathbf{e}_0, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_\infty\}$ terá a forma

$$X = x_0\mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 + x_\infty\mathbf{e}_\infty = x_0\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + x_\infty\mathbf{e}_\infty. \quad (4.4.4)$$

Os produtos entre os elementos são, como observados no espaço homogêneo, ($\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_i = 0$, $\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_i = 0$ e $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$ ¹, $i, j = 1, 2, 3$) e mais os observados em 4.4.3. O espaço $5D$ com os produtos internos assim estabelecidos é chamado de *Espaço Conforme*. É um espaço não Euclidiano $\mathbb{R}^{4,1}$.

Já vimos que, neste espaço, é possível obter $X^2 = 0$ com $X \neq 0$. É possível, ainda termos $\|X\|^2 < 0$, já que para $X = x_0\mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 + x_\infty\mathbf{e}_\infty$ teremos $\|X\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 2x_0x_\infty$.

Quanto ao produto interno de dois elementos X e Y , temos que:

$$X \cdot Y = x_0y_0\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0 + x_0y_\infty\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty + x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 + x_\inftyy_0\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0 + x_\inftyy_\infty\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_\infty \Rightarrow$$

$$X \cdot Y = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3 - (x_0y_\infty + x_\inftyy_0). \quad (4.4.5)$$

Horosfera

Vetores que nos interessam no espaço conforme encontram-se no cone nulo, mais precisamente na intersecção deste com o hiperplano $\mathbb{P}(\mathbf{e}_\infty, \mathbf{e}_0)$, que passa pelo ponto \mathbf{e}_0 . Esta intersecção é uma curva chamada Horosfera, região em que os pontos sofrem as restrições $\mathbf{X}^2 = 0$ e $\mathbf{X} \cdot \mathbf{e}_\infty = -1$. [4]. Vide a figura 4.8, retirada de [15].

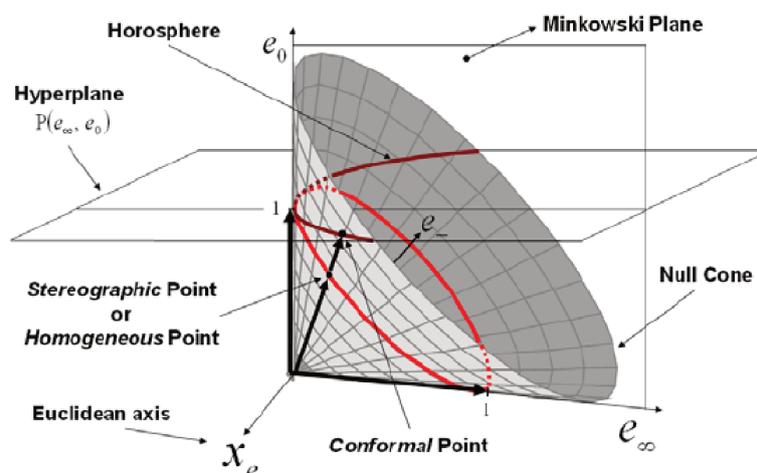


Figura 4.8: A horosfera e o cone nulo [15]

¹Delta de Kronecker: $\delta_{ij} = 0$, se $i \neq j$; $\delta_{ij} = 1$, se $i = j$

4.4.2 Representação de pontos

Existe um isomorfismo entre pontos no espaço conforme e pontos no espaço euclidiano [4].

Da expressão 4.4.1, segue:

$$\frac{1+x^2}{2}X = \mathbf{x} + \frac{x^2}{2}\mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_0 \Rightarrow X = \frac{2}{1+x^2} \left[\mathbf{x} + \frac{1}{2}x^2\mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_0 \right]$$

Como o espaço conforme é, também, homogêneo, segue que:

$$X = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty \in \mathbb{R}^{4,1}. \quad (4.4.6)$$

A expressão acima é a de um ponto associado ao vetor posição $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 \in 3D$.²

Já dissemos que X , definido desta forma, é um vetor nulo, ou seja, $\|X\|^2 = 0$, e isto pode ser verificado assim:

$$\begin{aligned} \|X\|^2 &= (\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty) \cdot (\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty) = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty + \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \cdot \\ &\mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_\infty + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0 + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{4}\|\mathbf{x}\|^4\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_\infty = -\frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{x}\|^2 - \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 = 0. \end{aligned}$$

Distância entre dois pontos

Pode-se verificar que, para dois pontos X e Y no espaço conforme, teremos:

$$X \cdot Y = -\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \quad (4.4.7)$$

pois, sendo $X = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$ e $Y = \mathbf{e}_0 + \mathbf{y} + \frac{1}{2}\|\mathbf{y}\|^2\mathbf{e}_\infty$, teremos:

$$\begin{aligned} X \cdot Y &= (\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty) \cdot (\mathbf{e}_0 + \mathbf{y} + \frac{1}{2}\|\mathbf{y}\|^2\mathbf{e}_\infty) = -\frac{1}{2}\|\mathbf{y}\|^2 + \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} - \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}^2 - \mathbf{x} \cdot \\ &\mathbf{y} - \mathbf{y} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{y}^2) = -\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y}) = -\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2, \text{ ou seja, a distância entre dois pontos } \mathbf{x} \\ &\text{ e } \mathbf{y} \text{ de } \mathbb{R}^3 \text{ é proporcional ao produto interno entre seus representantes no espaço conforme. A} \\ &\text{ expressão 4.4.7 é fácil de ser calculada a partir de 4.4.5.} \end{aligned}$$

Interpretação geométrica dos vetores \mathbf{e}_0 e \mathbf{e}_∞

- Em $X = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$, se fizermos $\mathbf{x} = 0$, obteremos: $p = \mathbf{e}_0$, o que significa que \mathbf{e}_0 é a representação, no espaço conforme, da origem do espaço euclidiano; e
- Devido à homogeneidade do espaço conforme, as expressões $X = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$ e $X' = \frac{\mathbf{e}_0}{\frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2} + \frac{\mathbf{x}}{\frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2} + \mathbf{e}_\infty$ representam o mesmo ponto em \mathbb{R}^3 . Se na última expressão fizermos $\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty$ ou $\|\mathbf{x}\| \rightarrow -\infty$, teremos $X = \mathbf{e}_\infty$. Por isto, dizemos que \mathbf{e}_∞ representa um ponto no infinito.

²Existem outras expressões para isto, de acordo com diferentes autores. Na referência [13], encontra-se $X = 2x + x^2\mathbf{n} - \bar{\mathbf{n}}$ e na referência [39], $X = \frac{1}{2}(2x + x^2n - \bar{n})$.

É interessante notar, ainda, que, sendo $P \in \mathbb{R}^{4,1}$ um ponto do espaço conforme, são observadas as seguintes relações [4]:

- Sendo $X = t(\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty)$, um vetor nulo genérico, então, se fizermos

$$-X \cdot \mathbf{e}_\infty,$$

teremos $-X \cdot \mathbf{e}_\infty = -t(\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty) \cdot \mathbf{e}_\infty = -t(-1) = t$, ou seja, teremos o valor do coeficiente de \mathbf{e}_0 de X . A importância disto é que, se fizermos $\frac{X}{-X \cdot \mathbf{e}_\infty}$, vamos obter:

$\frac{X}{-X \cdot \mathbf{e}_\infty} = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$ e, assim, saberemos quem X representa no \mathbb{R}^3 . Dizemos, então, que X foi normalizado.

- Caso tenhamos P normalizado, ou seja, $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{p} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2\mathbf{e}_\infty$, então a expressão

$$\mathbf{e}_\infty \cdot (P - \mathbf{e}_0) = 0$$

representa um *hiperplano* com vetor normal \mathbf{e}_∞ e passando pelo ponto \mathbf{e}_0 . Aqui, $P - \mathbf{e}_0$ representa um plano.

4.4.3 Representação de esferas

Já vimos, em 4.4.7, que a distância entre dois pontos quaisquer \mathbf{x} e \mathbf{y} do \mathbb{R}^3 é proporcional ao produto interno entre X e Y dos pontos que o representam no espaço conforme, segundo a expressão $X \cdot Y = -\frac{1}{2}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2$.

Podemos verificar, baseados nisto, e considerando uma esfera em \mathbb{R}^3 com centro em \mathbf{c} , raio \mathbf{r} , e ainda, um ponto \mathbf{p} localizado na superfície esférica, qual seria a equação da mesma.

Sendo P e C os representantes de \mathbf{p} e \mathbf{c} no espaço conforme, então, de 4.4.7, temos: $P \cdot C = -\frac{1}{2}\mathbf{r}^2 \Rightarrow P \cdot C + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2 = 0$.

Logo, de $P \cdot C + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2 = 0$ segue: $P \cdot C + \frac{1}{2}\mathbf{r}^2 = P \cdot C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2(-1) = P \cdot C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2(P \cdot \mathbf{e}_\infty) = P \cdot (C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty) = 0$, ou seja, para um ponto P sobre uma esfera de centro C e raio r , teremos:

$$P \cdot (C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty) = 0. \quad (4.4.8)$$

Portanto, dizemos que

$$S^* = C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty \quad (4.4.9)$$

é a representação dual de uma esfera no espaço conforme. Como veremos, a esfera possui outra representação e usamos S^* para nos referirmos à representação dual.

Posição relativa entre ponto e esfera

Para verificar a posição relativa entre um ponto $W = \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} + \frac{1}{2}\|\mathbf{w}\|^2\mathbf{e}_\infty$ e uma esfera $S^* = C - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty$, devemos avaliar o produto $W \cdot S^*$, como se segue:

$W \cdot S^* = W \cdot (C - \frac{1}{2}r^2\mathbf{e}_\infty) = W \cdot C - \frac{1}{2}r^2W \cdot \mathbf{e}_\infty$. Mas $W \cdot C = -\frac{1}{2}\|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|^2$ e $W \cdot \mathbf{e}_\infty = -1$, logo:

$$W \cdot S^* = -\frac{1}{2}\|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|^2 + \frac{1}{2}r^2.$$

O teste então será:

- Se $W \cdot S^* > 0$, o ponto está dentro da esfera, pois: $\frac{1}{2}r^2 - \frac{1}{2}\|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|^2 > 0 \Rightarrow r > \|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|$;
- Se $W \cdot S^* = 0$, o ponto está na superfície esférica pois: $r = \|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|$; e
- Se $W \cdot S^* < 0$, o ponto é exterior à esfera pois: $r < \|\mathbf{w} - \mathbf{c}\|$.

Representação direta de uma esfera

Podemos obter a representação de uma esfera a partir de quatro pontos distintos, $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$ e $\mathbf{p}_4 \in \mathbb{R}^3$ localizados na superfície esférica. Sendo P_1, P_2, P_3 e P_4 os representantes destes pontos no espaço conforme, então a representação direta da esfera será:

$$S = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge P_4 \quad (4.4.10)$$

A partir desta representação também é possível saber se um ponto \mathbf{w} está sobre a esfera, bastando verificar se $W \wedge S = 0$.

4.4.4 Representação de circunferência

Podemos determinar uma circunferência a partir de três pontos distintos localizados sobre esta. Suponha que sejam os pontos $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ e \mathbf{p}_3 , de \mathbb{R}^3 , com representantes no espaço conforme, respectivamente P_1, P_2 e P_3 . Então a representação direta da circunferência C será dada por

$$C = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \quad (4.4.11)$$

e sua equação será $P \wedge C = 0$.

Uma circunferência C pode ser obtida pela intersecção de duas esferas, S_1 e S_2 . Neste caso, teremos a representação dual da circunferência, que é dada pela expressão [33]:

$$C^* = S_1^* \wedge S_2^*. \quad (4.4.12)$$

Sabemos que uma esfera, $S = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge P_4$, é o lugar geométrico (lg) dos pontos em $3D$ que são equidistantes de um dado ponto, o centro da esfera. Já a circunferência, $C = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3$, é o lg dos pontos em $2D$ que são equidistantes de um dado ponto, o seu centro. O que dizer sobre a expressão $Pp = P_1 \wedge P_2$? Esta expressão representa o “par de pontos”:

4.4.5 Par de pontos

O par de pontos representados por $Pp = P_1 \wedge P_2$ representa o lg dos pontos em $1D$ que são equidistantes de um ponto dado. Se considerarmos a variante $Pp = P_1 \wedge \mathbf{e}_\infty$, teremos a representação de apenas um ponto, especialmente chamado de *flat point*, que aparece na intersecção de uma reta com um plano ou na intersecção de três planos [20].

A intersecção de três esferas, S_1^* , S_2^* e S_3^* pode ser um par de pontos, pois duas esferas, S_1^* e S_2^* , por exemplo, se intersectam em uma circunferência e a terceira esfera intersecta esta circunferência em no máximo dois pontos. Temos, portanto, a representação dual:

$$Pp^* = S_1^* \wedge S_2^* \wedge S_3^*. \quad (4.4.13)$$

Se os pontos são P_+ e P_- então temos a representação direta do par de pontos:

$$Pp = P_+ \wedge P_-. \quad (4.4.14)$$

Para extrairmos os pontos, utilizando quaisquer das representações, utilizamos:

$$P_{\pm} = \frac{Pp \pm \sqrt{Pp \cdot Pp}}{-\mathbf{e}_{\infty} \cdot Pp} \quad (4.4.15)$$

que encontra-se demonstrada em [12].

4.4.6 Representação de retas

A representação direta de uma reta R que passa pelos pontos \mathbf{p}_1 e $\mathbf{p}_2 \in \mathbb{R}^3$ distintos, representados no espaço conforme por P_1 e P_2 é

$$R = P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_{\infty}. \quad (4.4.16)$$

A expressão 4.4.16 pode ser escrita como $R = (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty}$, pois:

$$\begin{aligned} P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_{\infty} &= (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1 + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2 + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty}) \wedge \mathbf{e}_{\infty} = \\ &[\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{p}_2 + \mathbf{e}_0 \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty} + \mathbf{p}_1 \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1 \wedge \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1 \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \mathbf{e}_0 + \\ &\frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \mathbf{p}_2 + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty}] \wedge \mathbf{e}_{\infty} = \\ &[(\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1 \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1 \wedge \mathbf{p}_2) + \mathbf{e}_0 \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty} + \mathbf{p}_1 \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \mathbf{e}_0 + \\ &\frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \mathbf{p}_2] \wedge \mathbf{e}_{\infty} = \\ &(\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty} + (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge \mathbf{e}_{\infty} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty} \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty} \Rightarrow \\ &R = P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_{\infty} = (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty}. \end{aligned}$$

Um ponto P pertencerá a esta reta se $P \wedge R = 0$, pois:

$$P \wedge R = (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2\mathbf{e}_{\infty}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1 + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_1\|^2\mathbf{e}_{\infty}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2 + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_2\|^2\mathbf{e}_{\infty}) \wedge \mathbf{e}_{\infty} \Rightarrow$$

$$P \wedge R = (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty}$$

Agora, se fizermos $P \wedge R = 0$ teremos: $(\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge \mathbf{e}_{\infty} = 0$.

Como \mathbf{e}_{∞} é ortogonal a \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 , ele é linearmente independente dos três primeiros fatores, logo $p \wedge L = 0$ implica em $(\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) = 0$ em um espaço homogêneo [20], o que confirma que P está em R .

Reta como uma circunferência de raio infinito

Vimos em 4.4.11 que uma circunferência por três pontos tem a forma $C = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3$. Se fizermos $P_3 = \mathbf{e}_{\infty}$, então a expressão torna-se $C = P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_{\infty}$, o que mostra que uma reta pode ser interpretada como uma circunferência de raio infinito.

Representação dual de uma reta

Uma reta pode ser representada como sendo a intersecção de dois planos como:

$$R^* = \Pi_1^* \wedge \Pi_2^*.$$

4.4.7 Representação de planos

A expressão de uma reta passando pelos pontos distintos P_1 e P_2 , como vimos em 4.4.16, é: $R = P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_\infty$. Caso um ponto P esteja alinhado aos pontos P_1 e P_2 então a equação $P \wedge (P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_\infty) = 0$ é satisfeita. Caso os pontos não estejam alinhados eles definem um plano. Portanto, neste caso, teremos a expressão $P \wedge P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_\infty$ como definindo este plano.

Por conseguinte, o plano Π determinado pelos pontos distintos não colineares P_1 , P_2 e P_3 é dado por:

$$\Pi = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge \mathbf{e}_\infty \quad (4.4.17)$$

e sua equação será $P \wedge \Pi = 0$. Podemos interpretar o plano como sendo uma esfera de raio infinito, bastando na equação direta da esfera vista em 4.4.10 considerarmos P_4 como \mathbf{e}_∞ , e então teremos a equação do plano como $\Pi = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge \mathbf{e}_\infty$.

Representação dual de planos

Se fizermos $P_i = \mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_i + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}_i\|\mathbf{e}_\infty$, com $i = 1, 2, 3$ teremos:

$\Pi = P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge \mathbf{e}_\infty = (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_1) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_2) \wedge (\mathbf{e}_0 + \mathbf{p}_3) \wedge \mathbf{e}_\infty$, de onde, utilizando as coordenadas de Plücker como em 4.2.6, obteremos:

$$\Pi = (n_1\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3 + n_2\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 + n_3\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 + h\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_3) \wedge \mathbf{e}_\infty$$

e, então, utilizando o dual Π^* obteremos, à semelhança de 4.2.9, a seguinte expressão dual para um plano:

$$\Pi^* = -n_1\mathbf{e}_1 - n_2\mathbf{e}_2 - n_3\mathbf{e}_3 - h\mathbf{e}_\infty = -(\mathbf{n} + h\mathbf{e}_\infty), \quad (4.4.18)$$

onde $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ é vetor normal ao plano representado por Π^* e h , a distância do plano à origem, no \mathbb{R}^3 [20]. Como o espaço conforme é, também homogêneo, o sinal $(-)$ que aparece em 4.4.18 pode “cair”.

Distância de Ponto a Plano [33]:

Para P representando um ponto, temos: $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{p} + \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2\mathbf{e}_\infty$.

Para Π^* representando um plano, com vetor normal unitário \mathbf{n} e distância à origem h , temos: $\Pi^* = -\mathbf{n} - h\mathbf{e}_\infty$.

Logo, temos:

$$P \cdot \Pi^* = h - \mathbf{p} \cdot \mathbf{n}$$

o que fornece a distância euclidiana entre o ponto e o plano.

	$x_0 = 0$	$x_0 \neq 0$
$x_\infty = 0$	Plano passando pela origem	Esfera passando pela origem/ Origem
$x_\infty \neq 0$	Plano	Esfera/Ponto

Tabela 4.1: Significados no Espaço Conforme

Quadro resumo

Se temos $X = x_0\mathbf{e}_0 + x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3 + x_\infty\mathbf{e}_\infty$, então teremos as seguintes representações no Espaço Conforme [33]:

Exemplos:

- Origem: $O = \mathbf{e}_0$;
- Ponto fora da origem: $A = \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{e}_1 + 2\mathbf{e}_\infty$. Representa o ponto $(2, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$;
- Esfera contendo a origem com centro em $(1, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$ e raio unitário: $S_1^* = \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_1$;
- Esfera com centro em $(2, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$, com raio unitário: $S_2^* = \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{e}_1 + \frac{3}{2}\mathbf{e}_\infty$;
- Plano contendo a origem: $\Pi_1^* = \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$. Representa um plano que passa pela origem;
e
- Plano não contendo a origem: $\Pi_2^* = \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_\infty$. Representa o plano com normal \mathbf{e}_3 e que dista 1 da origem.

Tabela Resumo de Objetos

Objeto	Representação Direta	Representação Dual
Reta	$P_1 \wedge P_2 \wedge \mathbf{e}_\infty$	$\Pi_1^* \wedge \Pi_2^*$
Plano	$P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge \mathbf{e}_\infty$	$\mathbf{n} + h\mathbf{e}_\infty$
Esfera	$P_1 \wedge P_2 \wedge P_3 \wedge P_4$	$C - 0.5\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty$
Circunferência	$P_1 \wedge P_2 \wedge P_3$	$S_1^* \wedge S_2^*$
Equações [20]	$P \wedge (\dots) = 0$	$P \cdot (\dots) = 0$

Tabela 4.2: Representações no Espaço Conforme (Direta e Dual)

4.5 A Álgebra Geométrica no Espaço Conforme

Para estudarmos a Álgebra Geométrica, considerada no Espaço Conforme, vamos introduzir o produto geométrico neste espaço. Para $i, j \in \{1, 2, 3\}$, temos:

$$\mathbf{e}_0^2 = \mathbf{e}_\infty^2 = 0; \quad \mathbf{e}_0\mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty\mathbf{e}_0 = -2; \quad \mathbf{e}_i\mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty\mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i\mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0\mathbf{e}_i = 0; \quad (4.5.1)$$

E, como antes:

$$\mathbf{e}_i^2 = 1 \quad \text{e} \quad \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = -\mathbf{e}_j \mathbf{e}_i$$

As equações 4.5.1 justificam-se por:

$\mathbf{e}_0^2 = \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_0 = 0$. Da mesma forma: $\mathbf{e}_\infty^2 = 0$. Temos, ainda:

$\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 = -2$, pois: $\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 = (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty) + (\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0) = (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty) + (\mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0) + (\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0) = (-1) + (-1) + (0) = -2$, e também:

$\mathbf{e}_i \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_i = 0$, pois: $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_i = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_0) + (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_i) = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_0) + (\mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_i) + (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_i) = 0 + 0 + (0) = 0$, e da mesma forma: $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_i = 0$.

Os vetores \mathbf{e}_0 e \mathbf{e}_∞ são ambos anticomutativos com \mathbf{e}_i . Por exemplo, para \mathbf{e}_0 , temos: $\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_i = -\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{e}_0 = -\mathbf{e}_i \mathbf{e}_0$. O mesmo acontece com \mathbf{e}_∞ .

Com estas relações, podemos calcular o produto geométrico e outras relações. Sendo os pontos X e Y , pontos do espaço conforme, e $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$, como visto em 4.4.4, ou seja:

$$X = x_0 \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + x_\infty \mathbf{e}_\infty$$

e

$$Y = y_0 \mathbf{e}_0 + \mathbf{y} + y_\infty \mathbf{e}_\infty,$$

teremos:

$$\text{a) } XY = (x_0 \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + x_\infty \mathbf{e}_\infty)(y_0 \mathbf{e}_0 + \mathbf{y} + y_\infty \mathbf{e}_\infty) = (y_0 \mathbf{x} - x_0 \mathbf{y}) \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \mathbf{y} + x_0 y_\infty \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + x_\infty y_0 \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 + (y_\infty \mathbf{x} - x_\infty \mathbf{y}) \mathbf{e}_\infty.$$

$$\begin{aligned} \text{b) } X \cdot Y &= \frac{1}{2}(XY + YX), \text{ pois:} \\ XY + YX &= (y_0 \mathbf{x} - x_0 \mathbf{y} + x_0 \mathbf{y} - y_0 \mathbf{x})x_0 + \mathbf{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \mathbf{x} + (x_0 y_\infty + y_0 x_\infty) \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + (x_\infty y_0 + y_\infty x_0) \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 + (y_\infty \mathbf{x} - x_\infty \mathbf{y} + x_\infty \mathbf{y} - y_\infty \mathbf{x}) \mathbf{e}_\infty \Rightarrow \\ XY + YX &= \mathbf{x} \mathbf{y} + \mathbf{y} \mathbf{x} + x_0 y_\infty (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0) + y_0 x_\infty (\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0) = 2(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) - 2x_0 y_\infty - 2y_0 x_\infty \Rightarrow \\ XY + YX &= 2(x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 - x_0 y_\infty - y_0 x_\infty) = 2(X \cdot Y) \Rightarrow (X \cdot Y) = \frac{1}{2}(XY + YX). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{c) } X \wedge Y &= \frac{1}{2}(XY - YX). \text{ Demonstração:} \\ XY - YX &= (y_0 \mathbf{x} - x_0 \mathbf{y} - x_0 \mathbf{y} + y_0 \mathbf{x}) \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \mathbf{y} - \mathbf{y} \mathbf{x} + (x_0 y_\infty - y_0 x_\infty) \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + (x_\infty y_0 - y_\infty x_0) \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 + (y_\infty \mathbf{x} - x_\infty \mathbf{y} - x_\infty \mathbf{y} + y_\infty \mathbf{x}) \mathbf{e}_\infty \Rightarrow \\ XY - YX &= 2y_0 \mathbf{x} \mathbf{e}_0 - 2x_0 \mathbf{y} \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{x} \wedge \mathbf{y} + 2y_\infty \mathbf{x} \mathbf{e}_\infty - 2x_\infty \mathbf{y} \mathbf{e}_\infty + (x_0 y_\infty - y_0 x_\infty) \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty + (x_\infty y_0 - y_\infty x_0) \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0. \end{aligned}$$

Agora, usaremos o fato de que $\mathbf{x} \mathbf{e}_0 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0 = \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0$ e, da mesma forma, $\mathbf{y} \mathbf{e}_0 = \mathbf{y} \wedge \mathbf{e}_0$, $\mathbf{x} \mathbf{e}_\infty = \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_\infty$ e $\mathbf{y} \mathbf{e}_\infty = \mathbf{y} \wedge \mathbf{e}_\infty$.

Usaremos, também, o fato de que $\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty = \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty$, pois $\mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\infty = \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_\infty + \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty = \mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0 - \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_\infty \cdot \mathbf{e}_0 + \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0 - 2\mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_\infty \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty$.

Continuando, teremos: $XY - YX = 2y_0 \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0 - 2x_0 \mathbf{y} \wedge \mathbf{e}_0 + 2\mathbf{x} \wedge \mathbf{y} + 2y_\infty \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_\infty - 2x_\infty \mathbf{y} \wedge \mathbf{e}_\infty + 2(x_0 y_\infty - y_0 x_\infty) \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty \Rightarrow$

$XY - YX = 2(x_0 \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{y} + x_0 y_\infty \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty + y_0 \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \wedge \mathbf{y} + y_\infty \mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_\infty + x_\infty y_0 \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0 + x_\infty \mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{y})$.

Esta última expressão entre parênteses é exatamente igual a $X \wedge Y$, pois: $X \wedge Y =$

$$(x_0\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + x_\infty\mathbf{e}_\infty)(y_0\mathbf{e}_0 + \mathbf{y} + y_\infty\mathbf{e}_\infty) = x_0\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{y} + x_0y_\infty\mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{e}_\infty + y_0\mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} \wedge \mathbf{y} + y_\infty\mathbf{x} \wedge \mathbf{e}_\infty + x_\infty y_0\mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{e}_0 + x_\infty\mathbf{e}_\infty \wedge \mathbf{y}, \text{ o que confirma ser } X \wedge Y = \frac{1}{2}(XY - YX).$$

- d) Se fizermos $XY = X \cdot Y + X \wedge Y$, obteremos o mesmo resultado de a), ou seja, a equação fundamental (3.1.3) da álgebra geométrica vale também para os vetores no espaço conforme.
- e) $X^2 = X \cdot X + X \wedge X = X \cdot X = \|X\|^2$.
- f) Um vetor, X por exemplo, anticomuta com \mathbf{e}_0 e com \mathbf{e}_∞ , pois, por exemplo:
 $X\mathbf{e}_0 = X \cdot \mathbf{e}_0 + X \wedge \mathbf{e}_0 = X \wedge \mathbf{e}_0 = -\mathbf{e}_0 \wedge X = -\mathbf{e}_0 \cdot X - \mathbf{e}_0 \wedge X = -\mathbf{e}_0 X$.

4.6 Operações Geométricas

Com a álgebra geométrica no espaço conforme (AGC), podemos realizar diversas operações importantes com os objetos geométricos já estudados, tais como rotação, translação, reflexão, dilatação e inversão. Estas operações utilizam-se de versores, como vimos em 3.1.32. Neste trabalho, será mostrada a operação de rotação, que será bastante utilizada.

4.6.1 Rotações

No capítulo anterior, na seção que trata de rotações, vimos que se aplicarmos o rotor

$$R = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \hat{\mathbf{B}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

na expressão $R\mathbf{v}\tilde{R}$, estaremos aplicando uma rotação ao vetor \mathbf{v} , de um ângulo θ , no plano que contém $\hat{\mathbf{B}}$.

Na AGC, se tomarmos um vetor com a expressão $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$ e aplicarmos a operação $RP\tilde{R}$ também obteremos uma rotação:

Vejamos agora o efeito da operação, se aplicada à origem \mathbf{e}_0 :

$$R\mathbf{e}_0\tilde{R} = \exp\left(-\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{w}}\right)\mathbf{e}_0\exp\left(\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{w}}\right) = (\cos\frac{\theta}{2} - \hat{\mathbf{w}}\sin\frac{\theta}{2})\mathbf{e}_0(\cos\frac{\theta}{2} + \hat{\mathbf{w}}\sin\frac{\theta}{2}) =$$

$\cos^2\frac{\theta}{2}\mathbf{e}_0 + \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\mathbf{e}_0\hat{\mathbf{w}} - \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{w}}\mathbf{e}_0 - \sin^2\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{w}}^2 = \mathbf{e}_0(\cos^2\frac{\theta}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}) = \mathbf{e}_0$, ou seja, o efeito é nenhum:

$$R\mathbf{e}_0\tilde{R} = \mathbf{e}_0.$$

Pode-se verificar, da mesma forma, que:

$$R\mathbf{e}_\infty\tilde{R} = \mathbf{e}_\infty.$$

Aplicando o rotor, finalmente, ao ponto $P = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty$, obteremos:

$$R(\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty)\tilde{R} = R\mathbf{e}_0\tilde{R} + R\mathbf{x}\tilde{R} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2R\mathbf{e}_\infty\tilde{R} = \mathbf{e}_0 + R\mathbf{x}\tilde{R} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty =$$

$\mathbf{e}_0 + R\mathbf{x}\tilde{R} + \frac{1}{2}\|R\mathbf{x}\tilde{R}\|^2\mathbf{e}_\infty$, ou seja:

$$\mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty \rightarrow \mathbf{e}_0 + R\mathbf{x}\tilde{R} + \frac{1}{2}\|R\mathbf{x}\tilde{R}\|^2\mathbf{e}_\infty,$$

o que significa que o efeito da rotação é levar o ponto da posição \mathbf{x} para a posição $R\mathbf{x}\tilde{R}$.
[20]

Observação sobre sinal em rotores

O que acontece se, na expressão do rotor, trocarmos o sinal? A resposta a esta pergunta podemos encontrar em [33]: se utilizamos $R = \exp\left(-\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{B}}\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \hat{\mathbf{B}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ teremos uma rotação no sentido matematicamente positivo de valor θ , ou seja, no sentido anti-horário, em relação ao eixo $\hat{\mathbf{B}}^*$.

Se trocarmos o sinal, ou seja, se utilizarmos $R = \exp\left(\frac{\theta}{2}\hat{\mathbf{B}}\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \hat{\mathbf{B}}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ o efeito será o oposto, ou seja, a rotação ocorrerá no sentido horário.

A decisão de usar um ou outro sinal dependerá do efeito que se deseja.

Capítulo 5

Geometria de Distâncias

5.1 Introdução

Geometria de Distâncias (GD) é um ramo relativamente novo da matemática e que se ocupa em “determinar um conjunto de pontos em um dado espaço geométrico, cujas distâncias, entre alguns deles, são conhecidas.” [23]

Sua origem remonta aos trabalhos em geometria de Menger, em 1928 [30], resultados estes que foram compilados e apresentados por Blumenthal em 1953, dando origem à GD [6, 27].

O problema fundamental com que a geometria de distâncias lida pode ser definido como [22, 27]:

Definição: O Problema de Geometria de Distâncias (PGD): Dado um inteiro $K > 0$ e um grafo simples $G = (V, E, d)$ conectado e cujas arestas são ponderadas por uma função não negativa $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, determinar se existe uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ tal que:

$$\forall \{u, v\} \in E, \quad \|x(u) - x(v)\| = d(u, v). \quad (5.1.1)$$

Isto significa que devemos achar x de tal forma que cada aresta $\{u, v\}$ do grafo G que conecta vértices u e v , distantes $d(u, v)$ entre si, obedeça à relação $\|x(u) - x(v)\|$ estabelecida por x . A função x é chamada de “realização” de G em \mathbb{R}^K , e se ela satisfizer 5.1.1, é uma “realização válida”. [27]

A definição do PGD suporta diversas métricas, variados espaços, inclusive os não euclidianos e em diversas dimensões, e possui várias aplicações tais como robótica, nanotecnologia, astronomia, bioquímica, entre outras [5, 32]. Em geral, são considerados os casos em que $K = 2$ ou $K = 3$, mas todos os resultados podem ser estendidos para \mathbb{R}^K [23]. Neste trabalho, iremos considerar problemas associados à estrutura de moléculas no \mathbb{R}^3 . Além disto, assumiremos a norma euclidiana e o produto interno usual.

5.2 Solução do Problema de Geometria de Distâncias (PGD)

Utilizando a norma euclidiana no PGD, para $K = 3$, por exemplo, sendo $x_u = (x_{u1}, x_{u2}, x_{u3})$ e $x_v = (x_{v1}, x_{v2}, x_{v3})$, temos as seguintes equações:

$$\sqrt{\sum_{i=1}^3 (x_{ui} - x_{vi})^2} = d_{uv}, \quad \forall \{u, v\} \in E. \quad (5.2.1)$$

Ou seja, temos um sistema de equações quadráticas com $3|V|$ variáveis e $|E|$ equações [23]. Resolver este sistema quadrático diretamente não é uma boa estratégia [23], bem como resolvê-lo numericamente [23], [27].

A forma clássica de resolver o PGD é minimizando a função [3, 23, 24]:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i,j\} \in E} \left(\|x_i - x_j\|^2 - d_{i,j}^2 \right)^2, \quad (5.2.2)$$

com $x_i \in \mathbb{R}^K, i = 1, \dots, n$, expressão que engloba todas as equações encontradas em 5.2.1. A solução para isto é encontrar o mínimo global da função, dentre os vários mínimos locais existentes, tarefa nem sempre simples de se realizar [25].

Número de soluções do PGD e Complexidade Computacional

O conjunto solução de um PGD pode ser vazio, finito ou infinito não enumerável [23].

O PGD é um problema NP-completo para $K = 1$ e NP-difícil para $K \geq 2$ [23].

5.3 Incertezas

Para o problema que trataremos nesta tese, e que será estudado deste ponto em diante, relacionado ao cálculo de estruturas moleculares, utilizamos dados obtidos na química, que nos fornece a distância entre átomos unidos por ligações covalentes e ângulos planos formado por duas ligações consecutivas (dados esses considerados precisos) e distâncias obtidas por meio de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), experimento altamente sofisticado, com o uso do qual Kurt Würthrich (1938-) recebeu o Prêmio Nobel de Química de 2002 ao desenvolver um método para determinação de distâncias entre átomos próximos, ainda que não ligados covalentemente, em macromoléculas biológicas em solução.

Ocorre que os dados obtidos por meio de RMN são representados por intervalos de números reais que contém o valor correto associado. Mais precisamente, os experimentos de RMN fornecem apenas os limites superiores destes intervalos, já que os limites inferiores podem ser obtidos usando conhecimentos de química [25]. Estes dados representados por intervalos constituem as incertezas que serão tratadas neste trabalho.

5.4 O Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares - PDGDM

Podemos recorrer à Geometria de Distâncias para estudar a estrutura de uma molécula, particularmente a de proteína. Esse estudo vem sendo realizado com bastante sucesso e pode ser consultado nos documentos de referência [12], [22], [23] e [27]. A finalidade da presente tese é dar continuidade a esta pesquisa, contribuindo para o seu aprofundamento. Nela, trabalharemos com a Geometria de Distâncias e com a Álgebra Geométrica.

Para obtermos as distâncias entre átomos de uma molécula de proteína recorreremos, inicialmente, às características químicas e estruturais da mesma, que são de fundamental importância [3]. As distâncias entre átomos ligados por ligações covalentes são conhecidas. Atualmente, a utilização de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) [40] permite serem estimadas as distâncias entre átomos próximos, mesmo os não ligados por ligações químicas. Portanto, os átomos de hidrogênio, que não se ligam entre si nas moléculas, podem ter as distâncias medidas, desde que atendam às restrições de distância da RMN, de cerca de 5 angstroms [25].

O estudo combinatório PGD requer uma “ordem” nos vértices do grafo associado. Para o caso especial do estudo da estrutura das proteínas, usando as informações de distâncias disponíveis, faz-se necessário que se conheçam as distâncias de cada vértice, a partir do quarto, para os três predecessores imediatos. Tal classe de instâncias do PGD recebe o nome especial de *Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares (PDGDM)* [[3], [9], [22]]. Vejamos a sua definição [[1],[23], [24]]:

Definição - PDGDM

Considere o Grafo $G = (V, E, d)$ de um PGD com $K = 3$ e uma ordem em V , denotada por v_1, \dots, v_n , tal que:

1. Existe uma realização válida para v_1, v_2, v_3 ;
2. Para todo $v_i, i = 4, \dots, n$, existem 3 vértices imediatamente anteriores $v_{i-3}, v_{i-2}, v_{i-1}$, com

$$\{\{v_{i-3}, v_i\}, \{v_{i-2}, v_i\}, \{v_{i-1}, v_i\}\} \subset E; \text{ e}$$

3. A desigualdade triangular estrita é observada, isto é: $d_{v_{i-3}, v_{i-2}} + d_{v_{i-2}, v_{i-1}} > d_{v_{i-3}, v_{i-1}}$.

Existe uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $\forall \{v_i, v_j\} \in E, \|x_{v_i} - x_{v_j}\| = d_{v_i v_j}$?

Observe que, neste caso, qualquer conjunto $\{v_{i-3}, v_{i-2}, v_{i-1}, v_i\}$ é uma “clique”, ou seja, um grafo completo (aquele que possui todas as arestas possíveis).

Algumas considerações sobre a definição acima [3, 23]:

- A primeira condição, de haver uma realização válida para os três primeiros átomos, garante que excluiremos soluções congruentes obtidas por meio de rotação e translação.
- A segunda propriedade fornece uma estrutura combinatorial ao espaço de busca.

- A terceira propriedade evita uma quantidade não enumerável de soluções.

No estudo de uma molécula de proteína dispomos das distâncias associadas às ligações covalentes, dos ângulos formados por duas ligações consecutivas (ângulo plano, que veremos adiante) e das distâncias fornecidas por RMN [23] de tal forma que, se um átomo ocupa a posição $i \geq 4$ teremos, em princípio, as informações das distâncias entre os átomos que estão entre $i - 3$ e i . As distâncias fornecidas por RMN contêm incertezas, ou seja, a distância entre átomos fornecida é representada por um intervalo de números reais que contém o valor correto associado. Neste caso, dizemos que a distância é intervalar [25].

Além das coordenadas cartesianas, podemos determinar a estrutura de uma molécula utilizando as distâncias das ligações covalentes, os ângulos formados entre as ligações de três átomos consecutivos, $0 < \theta_{i-2,i} < \pi$, bem como o “ângulo de torção” $\omega_{i-3,i}$ formado entre o plano dos átomos de posições $i, i - 1$ e $i - 2$ e pelo plano dos átomos de posições $i - 1, i - 2$ e $i - 3$. Estes valores definem o sistema de *coordenadas internas* da molécula [23]. A figura 5.1, retirada de [24], retrata estes elementos.

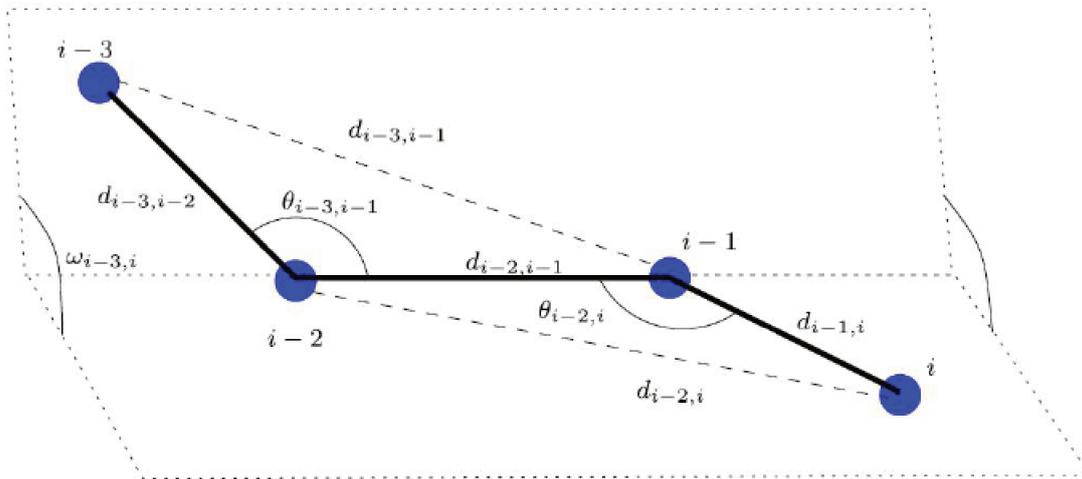


Figura 5.1: Ângulos de ligação, de torção e distâncias entre átomos [24]

Uma vez fixados os três primeiros átomos da cadeia, surge o problema de se determinar a posição do quarto átomo. Se dispusermos de $d_{i-1,i}$, $\theta_{i-2,i}$ e de $\omega_{i-3,i}$ é possível determinar a posição do quarto átomo. Entretanto, o problema é que nem sempre é possível determinar o ângulo de torção, pois necessitamos do plano formado pelo próprio quarto átomo e seus dois átomos anteriores.

Uma maneira de se determinar a posição do i -ésimo átomo, sendo observadas as condições do PDGDM, é por meio de intersecção de esferas [1, 2]:

- A primeira esfera, $S_{i-1,i}$, terá centro no átomo $i - 1$ e raio $d_{i-1,i}$. Obviamente, o i -ésimo átomo encontrar-se-á na superfície desta esfera.
- A segunda esfera, $S_{i-2,i}$, terá centro em $i - 2$ e raio igual à distância entre os átomos $i - 2$ e i , $d_{i-2,i}$. O átomo procurado estará na circunferência $C_i = S_{i-1,i} \cap S_{i-2,i}$, intersecção das superfícies das duas esferas, $S_{i-1,i}$ e $S_{i-2,i}$, lugar geométrico que atende às distâncias $d_{i-1,i}$ e $d_{i-2,i}$.

- Para a terceira esfera, $S_{i-3,i}$, centrada em $i-3$ e distância $d_{i-3,i}$, poderemos ter uma das seguintes situações [2, 1]:
 - Se a distância $d_{i-3,i}$ for precisa, teremos duas posições possíveis para o átomo: os dois pontos de intersecção das três esferas, sobre a circunferência C_i ; e
 - Se a distância $d_{i-3,i}$ é dada por meio de um intervalo $[\underline{d}_{i-3,i}, \bar{d}_{i-3,i}]$, onde $\underline{d}_{i-3,i} \leq d_{i-3,i} \leq \bar{d}_{i-3,i}$, teremos duas regiões possíveis, os arcos determinados em C_i pelas esferas centradas em $i-3$ e com raios $\underline{d}_{i-3,i}$ e $\bar{d}_{i-3,i}$. Vide figura 5.2, retirada de [2].

Isto é possível pelo fato de os centros das três esferas serem não colineares, devido à desigualdade triangular estrita.

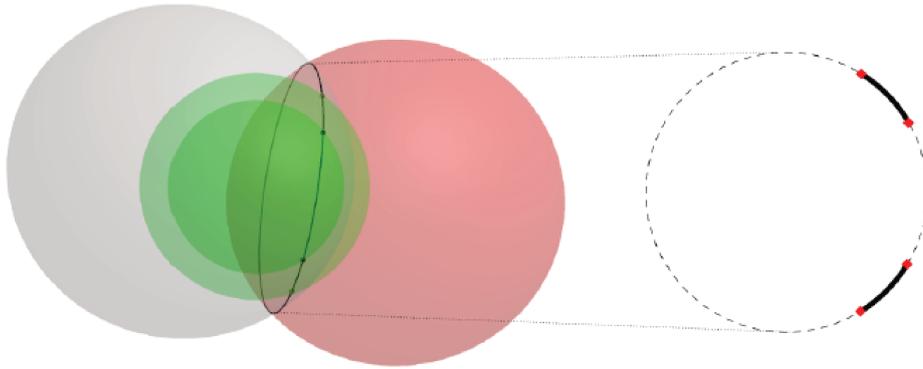


Figura 5.2: Intersecção entre quatro esferas, sendo duas concêntricas [2]

5.4.1 Arcos de procura

Para melhor visualizar as possíveis posições a serem ocupadas por um átomo na sua procura de posições podemos utilizar uma “árvore binária” do espaço de busca [23] como as apresentadas nas figuras 5.3 e 5.4. As condições do PDGDM garantem a possibilidade de representarmos o espaço de busca por meio da árvore. Nela, os três primeiros átomos, dos quais conhecemos precisamente as posições, são representados pelos três pontos iniciais, na ordem crescente, de cima para baixo.

Nas figuras 5.3 e 5.4, representamos as possíveis posições do quarto átomo. Em ambas, as distâncias $d_{3,4}$ e $d_{2,4}$ são conhecidas e exatas. Entretanto:

- Na figura 5.3, a distância $d_{1,4}$ é conhecida e tem valor exato, dando origem a exatamente duas posições possíveis para o quarto átomo.
- Na figura 5.4, a distância $d_{1,4}$ é conhecida, entretanto não é exata, mas sim dada por meio de um intervalo $[\underline{d}_{1,4}, \bar{d}_{1,4}]$, onde $\underline{d}_{1,4} \leq d_{1,4} \leq \bar{d}_{1,4}$. O quarto átomo, portanto, pode estar em um dos dois intervalos representados por arcos, à esquerda ou à direita da árvore. Isto corresponde à situação retratada na figura 5.2 acima.

As posições possíveis para o quarto átomo são simétricas em relação ao plano formado pelas posições dos três primeiros [23].

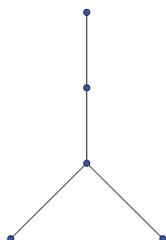


Figura 5.3: Distância $d_{1,4}$ precisa.

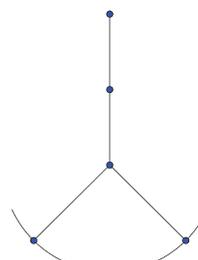


Figura 5.4: Distância $d_{1,4}$ intervalar.

5.4.2 Distância de Poda

Em algumas situações, devido à conformação espacial da molécula, é possível obter-se a distância entre átomos separados por mais de três átomos na sequência [1], o que será bastante útil. Por exemplo, se quisermos determinar a posição do quinto átomo, pode ser que, além das distâncias usualmente conhecidas, $d_{4,5}$, $d_{3,5}$ e $d_{2,5}$, tenhamos a distância $d_{1,5}$ à nossa disposição. Esta distância, conhecida como “distância de poda”, poderá ser usada para eliminarmos posições em que o quinto átomo não poderia estar, pelo simples fato de não atender à distância de poda.

Desta forma, uma distância de poda será uma distância $d_{i-j,i}$, com $j > 3$.

No caso da procura de posições para o quinto átomo, tendo as distâncias exatas, as posições possíveis são quatro, como mostrado na figura 5.5 abaixo.

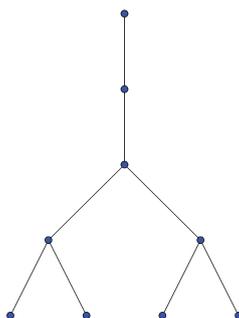


Figura 5.5: Exemplo de árvore para procura de posição para cinco átomos.

É fácil perceber que a quantidade de posições possíveis para uma molécula de n átomos com as distâncias exatas seria 2^{n-3} , tendo em vista que os três primeiros átomos estão em posições determinadas.

Agora, voltando ao caso da procura por posições do quinto átomo, devemos considerar que as possíveis soluções para este átomo serão simétricas em relação ao plano formado pelos três primeiros átomos [24]. Caso seja fornecida uma distância de poda, então se uma das posições possíveis é confirmada, por atendê-la, automaticamente a posição simétrica a esta, em relação ao

plano formado pelos três primeiros átomos, também o será. O mesmo ocorrerá para as posições porventura eliminadas por não atenderem à distância de poda, pois as posições simétricas a elas também serão eliminadas, de tal sorte que “o conjunto solução tem uma quantidade par de soluções” [23]. Mais do que isto: a quantidade de soluções do PDGDM é sempre potência de dois [25].

Este fato se repete para todos os átomos, não somente para o quinto. Como consequência, a árvore binária terá um desenho simétrico. Devemos considerar, ainda, que quando uma posição é eliminada por poda, então todas as outras posições após aquela que foi eliminada devem ser descartadas para a procura da posição dos átomos subsequentes.

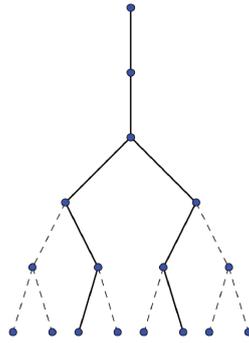


Figura 5.6: Eliminação de posições por distância de poda.

Na figura 5.6, por exemplo, temos o caso de posições do quinto e do sexto átomos eliminadas por não atenderem a distâncias de poda.

É claro que, se quisermos determinar a posição do sexto átomo e a distância $d_{3,6}$ for intervalar, teremos arcos para as possíveis posições deste. Na figura 5.6, estas distâncias foram supostas exatas.

5.4.3 O PDGDM com álgebra linear

Para resolver o PDGDM, utilizando álgebra linear, temos que lançar mão da fórmula da distância entre dois pontos, com os dados disponíveis.

De um modo geral, tendo as distâncias $d_{i-2,i}$ e $d_{i-1,i}$ precisas e $d_{j,i} \in [\underline{d}_{j,i}, \bar{d}_{j,i}]$, com $j \leq i-3$ e $i > 3$, representando uma distância intervalar, para acharmos a posição x_i , devemos encontrar a solução para o sistema [3]:

$$\begin{cases} \|x_{i-1} - x_i\| = d_{i-1,i} \\ \|x_{i-2} - x_i\| = d_{i-2,i} \\ \underline{d}_{j,i} \leq \|x_j - x_i\| \leq \bar{d}_{j,i} \end{cases} \quad (5.4.1)$$

onde $x_{i-2}, x_{i-1}, x \in \mathbb{R}^3$.

Para exemplificar, vejamos o procedimento para a procura de posições até o quinto átomo. As posições dos três primeiros átomos são conhecidas. Para o quarto átomo dispomos de: $d_{1,4}$, $d_{2,4}$ e $d_{3,4}$. Vamos supor que temos estas distâncias todas exatas. Fazendo:

$$\|x_3 - x_4\| = d_{3,4},$$

determinamos a esfera $S_{3,4}$, com centro em x_3 e raio $d_{3,4}$, em cuja superfície o ponto x_4 se encontra. Em seguida, fazendo:

$$\|x_2 - x_4\| = d_{2,4},$$

determinamos outra esfera, $S_{2,4}$, de raio $d_{2,4}$ e centro x_2 , onde também iremos encontrar o ponto x_4 . Então o ponto está na circunferência C_4 , interseção destas duas esferas.

Por fim, supondo a distância $d_{1,4}$ como exata, determinamos uma outra esfera, $S_{1,4}$, com centro em x_1 e distância $d_{1,4}$:

$$\|x_1 - x_4\| = d_{1,4}.$$

Tendo em vista que os centros das três esferas são não-colineares, esta última esfera determina dois pontos em C_4 (vide figura 5.15). Escolhamos um dos pontos assim determinados, digamos, x_4^1 .

A partir desta escolha para o quarto átomo temos dois ramos que podemos escolher para prosseguirmos na nossa pesquisa por uma solução, agora para o quinto átomo.

Vamos supor agora que, na procura para a posição deste quinto átomo, após termos definido a posição dos quatro primeiros e qual ramo seguir a partir do quarto, nós tenhamos os pontos todos obedecendo às condições do PDGDM e disponhamos das seguintes distâncias:

- Distâncias exatas: $d_{3,5}$ e $d_{4,5}$.
- Distância intervalar: $d_{2,5}$.
- Distância de poda: $d_{1,5}$, também intervalar.

Usando procedimento análogo ao anterior, determinamos as esferas, $S_{3,5}$ e $S_{4,5}$, respectivamente por meio de:

$$\|x_3 - x_5\| = d_{3,5}$$

$$\|x_4 - x_5\| = d_{4,5}$$

Estas duas esferas determinam, em sua intersecção, a circunferência C_5 . Em seguida, usamos a distância $d_{2,5} \in [\underline{d}_{2,5}, \bar{d}_{2,5}]$, intervalar. Usando os raios menor e maior, respectivamente $\underline{d}_{2,5}$ e $\bar{d}_{2,5}$, teremos, respectivamente, as esferas $\underline{S}_{2,5}$ e $\bar{S}_{2,5}$:

$$\|x_2 - x_5\| = \underline{d}_{2,5}$$

$$\|x_2 - x_5\| = \bar{d}_{2,5}$$

Estas duas esferas, concêntricas em x_2 , determinam, em C_5 , dois arcos, \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{252} , onde x_5 poderá ser encontrado. Vide figura (5.7).

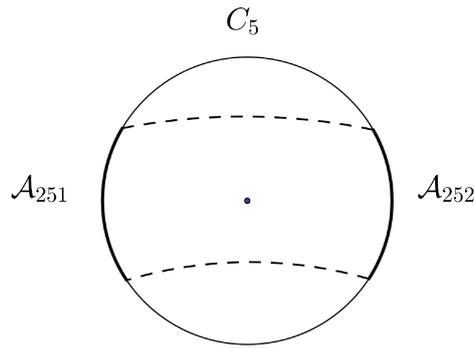


Figura 5.7: Arcos na Circunferência C_5 .

A distância de poda $d_{1,5} \in [\underline{d}_{1,5}, \bar{d}_{1,5}]$, que dispomos, para ratificar a posição de x_5 , é utilizada para definir as esferas $\underline{S}_{1,5}$ e $\bar{S}_{1,5}$:

$$\|x_1 - x_5\| = \underline{d}_{1,5}$$

$$\|x_1 - x_5\| = \bar{d}_{1,5}$$

Em relação às esferas $\underline{S}_{1,5}$ e $\bar{S}_{1,5}$, uma das seguintes situações pode ocorrer:

1. Não há intersecção entre as esferas com a circunferência C_5 .
2. As esferas determinam dois arcos em C_5 : \mathcal{A}_{151} e \mathcal{A}_{152} .

No caso de não haver intersecção o problema foi a escolha do ramo a seguir a partir do quarto átomo. Deveremos retroceder e escolher o outro ramo. Este “retroceder” e mudar uma escolha anterior (troca de ramo ou mesmo de posição de átomo anterior em alguns casos) é a base do processo Branch-and-Prune (BP) [23, 26].

Havendo intersecção, deveremos selecionar pontos nos intervalos \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{252} e testá-los com as distâncias de poda, “a fim de resolver o sistema e continuar a busca pela árvore” [3].

Utilizando este processo de discretização podemos nos deparar com dois problemas [1]:

- Se tomamos muitos valores de amostra, o espaço de busca cresce drasticamente;
- Para pequenas amostras, podem não ser encontradas soluções.

Na figura 5.8 podemos observar a situação em que oito pontos foram testados nos arcos \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{252} e, ainda assim, não foi encontrada uma solução para o problema, por não haver coincidência com algum dos arcos \mathcal{A}_{151} ou \mathcal{A}_{152} .

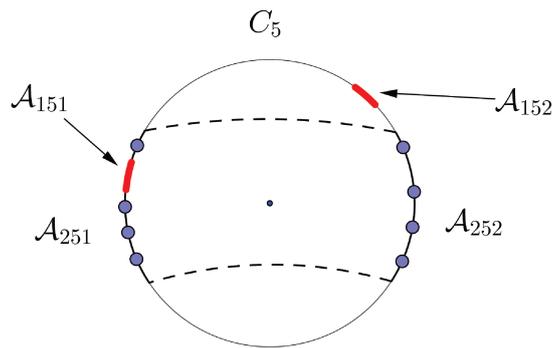


Figura 5.8: Discretização nos arcos.

Para resolver tal situação, outros pontos deveriam ser testados para C_5 , na tentativa de se achar um ponto que atenda a todas as distâncias. Se tal fato se repetir em átomos adiante o processo deverá ser repetido para estes átomos, e podemos imaginar o custo computacional que tal fato acarretaria, tendo em vista o aumento considerável do espaço de busca.

5.4.4 O PDGDM com Álgebra Geométrica Conforme

Podemos utilizar a Álgebra Geométrica Conforme (AGC) para determinar a posição dos pontos na cadeia que estamos estudando [1]. Uma aplicabilidade da AGC está em que a procura se dá não por processo de amostragem, mas utilizando-se soluções analíticas, que descrevem todos os pontos dos arcos [3]. É, portanto, um método alternativo à álgebra linear para a resolução do problema.

5.4.5 O ponto “percorrendo” o arco

Vamos supor que a distância $d_{1,4}$ seja exata, o que disponibiliza exatamente dois pontos em C_4 , dos quais escolhemos um. Após esta escolha, o quarto átomo terá a sua posição definida.

Suponha que queiramos determinar a posição do quinto e do sexto átomos da cadeia, considerando que os quatro primeiros já estão determinados e que dispomos das seguintes distâncias:

- Para o quinto átomo:
 - Distâncias exatas: $d_{3,5}$ e $d_{4,5}$; e
 - Distância intervalar: $d_{2,5} \in [\underline{d}_{2,5}, \bar{d}_{2,5}]$.
- Para o sexto átomo:
 - Distâncias exatas: $d_{4,6}$ e $d_{5,6}$; e
 - Distância intervalar: $d_{3,6} \in [\underline{d}_{3,6}, \bar{d}_{3,6}]$.

Como temos as distâncias $d_{2,5}$ e $d_{3,6}$ intervalares, teremos a determinação de arcos respectivamente nas circunferências C_5 e C_6 . Veremos que se pode considerar, em cada arco, um ponto móvel, que percorre o mesmo.

Sabemos que o quinto átomo está sobre a circunferência C_5 , intersecção das esferas $S(X_3, d_{3,5})$ e $S(X_4, d_{4,5})$, que possuem centros respectivamente em X_3 e X_4 , posições do terceiro e quarto átomos, respectivamente, e que possuem raios determinados pelas distâncias exatas $d_{3,5}$ e $d_{4,5}$.

Vimos anteriormente que a distância intervalar $d_{2,5}$ nos permite estabelecer duas esferas com centro em X_2 e raios $\underline{d}_{2,5}$ e $\bar{d}_{2,5}$ e que a intersecção destas com a circunferência C_5 determinam arcos nesta última, regiões onde o quinto átomo poderá ser encontrado.

Uma maneira de proceder à busca é considerar a posição do quinto átomo como um ponto que não está fixo em um arco, mas um ponto que percorre o arco. Isto decorre de considerarmos a esfera $S(X_2, d_{2,5})$ como sendo uma esfera de raio variável. Designamos como X_5 o ponto móvel onde está o quinto átomo.

Portanto, temos: X_1, X_2, X_3 e X_4 posições fixas definidas dos quatro primeiros átomos, e X_5 , posição do quinto átomo, ponto móvel dentro de um arco na circunferência C_5 .

Como consequência, a circunferência C_6 , que depende da posição de X_5 , também não é fixa. Entretanto, a distância $d_{5,6}$ é exata, logo, uma variação na posição do quinto átomo (causada pela variação de $d_{2,5}$), apesar de ocasionar uma mudança na posição do sexto, não muda a posição relativa entre estes dois.

Concluimos que a variação de $d_{2,5}$ acarreta uma mudança na posição de X_5 e em toda a estrutura a partir daí. Entretanto, do sexto átomo em diante, a mudança ocorre de maneira uniforme, sendo mantidas as posições relativas, como se fosse uma estrutura rígida [2].

Isto será sempre observado. Genericamente, podemos dizer que uma mudança na distância $d_{i-3,i}$ acarreta uma mudança de posição no átomo em X_i e, a partir do átomo X_{i+1} , toda estrutura é deslocada de maneira uniforme.

As figuras 5.9 e 5.10 ilustram tal fato.

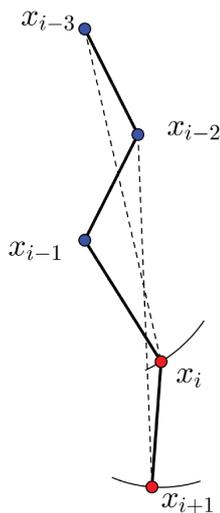


Figura 5.9: Estrutura mostrando os átomos em X_i e X_{i+1} .

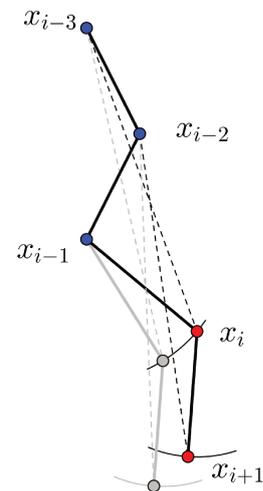


Figura 5.10: Estrutura após o átomo em X_i sofrer rotação. O átomo em X_{i+1} “acompanha”, mantendo a distância para X_i .

5.4.6 Posicionamento do átomo i , $i \geq 4$

Inicialmente, devemos determinar a região (arcos) ou pontos onde podemos encontrar o átomo i . Isto dependerá se a distância $d_{i-3,i}$ for, respectivamente, intervalar ou precisa.

A circunferência C_i ¹ será obtida pela intersecção das esferas de raios de distâncias exatas, $S_{i-2,i} = S(X_{i-2}, d_{i-2,i})$ e $S_{i-1,i} = S(X_{i-1}, d_{i-1,i})$, que é expressa como:

$$C_i = S_{i-2,i} \wedge S_{i-1,i}. \quad (5.4.2)$$

A circunferência C_i , intersecção das esferas $S_{i-2,i}$ e $S_{i-1,i}$, tem o seu centro sobre a reta Z_i que liga os pontos X_{i-2} e X_{i-1} , centros daquelas esferas. A reta é obtida pela fórmula [2]:

$$Z_i = X_{i-2} \wedge X_{i-1} \wedge \mathbf{e}_\infty, \quad (5.4.3)$$

sendo Z_i^* o seu dual. Além disso, o plano π , chamado de “radical” [8], que contém C_i , é perpendicular a esta reta.

Podemos observar, nas figuras 5.11 e 5.12, exemplos de intersecção de esferas $S_{2,4}$ e $S_{3,4}$, que determinam a circunferência C_4 .

Nas figuras 5.13 e 5.14, observamos o eixo Z_4 , que liga os pontos X_2 e X_3 e que é perpendicular ao eixo radical π . A intersecção entre Z_4 e π é o centro da circunferência C_4 .

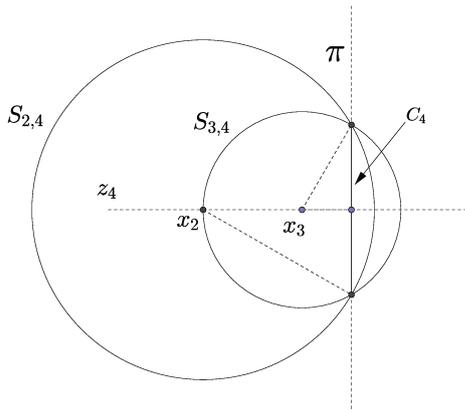


Figura 5.11: Intersecção, em corte, de esferas $S_{2,4}$ e $S_{3,4}$.

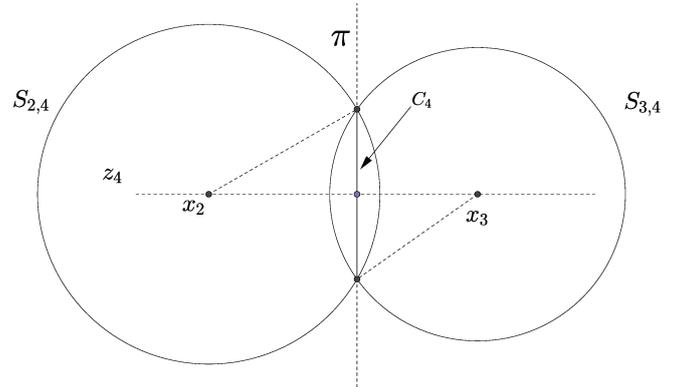


Figura 5.12: Idem, com outros raios.

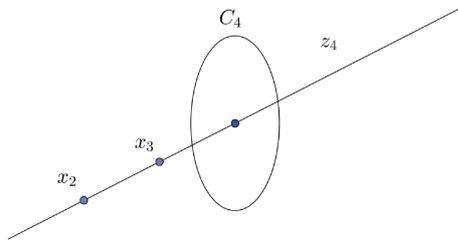


Figura 5.13: Eixo contendo o centro da circunferência C_4 .

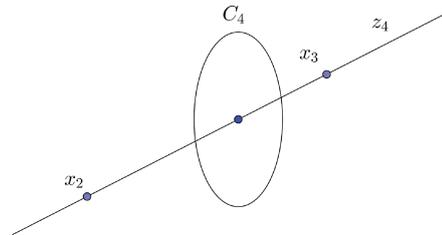


Figura 5.14: Idem, para a outra situação acima.

¹Omitiremos o sinal * para simplificar a notação.

Caso a distância $d_{i-3,i}$ seja precisa.

Se a distância $d_{i-3,i}$ for precisa, a intersecção entre a esfera $S_{i-3,i}$ e a circunferência C_i dar-se-á, em princípio, em dois pontos, a saber, X_i^1 e X_i^2 . Neste caso, o átomo i estará posicionado em um destes pontos. Na figura 5.15 podemos observar a intersecção da esfera $S_{1,4}$ com a circunferência C_4 .

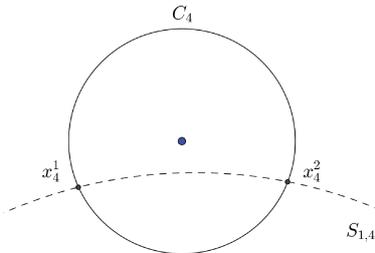


Figura 5.15: Intersecção da esfera $S_{1,4}$ com a circunferência C_4 , sendo a distância $d_{1,4}$, precisa.

Caso a distância $d_{i-3,i}$ seja intervalar.

Neste caso a intersecção da esfera $S_{i-3,i}$ e a circunferência C_i ocorrerá segundo dois arcos nesta última, limitados pelas intersecções da esfera $\underline{S}_{i-3,i}$ tendo como raio a menor distância, $\underline{d}_{i-3,i}$ e a circunferência e pelas intersecções da esfera $\overline{S}_{i-3,i}$ tendo como raio a maior distância, $\overline{d}_{i-3,i}$ e a mesma circunferência. Podemos considerar que essas duas esferas, $\underline{S}_{i-3,i}$ e $\overline{S}_{i-3,i}$ formam uma “casca esférica” centrada em X_{i-3} . Portanto, os arcos são determinados pela intersecção desta casca esférica com a circunferência C_i .

Na figura 5.16, podemos verificar como são obtidos os arcos onde podem estar o átomo X_i após considerar-se a distância intervalar $d_{i-3,i}$. Esta figura foi retirada de [22]:

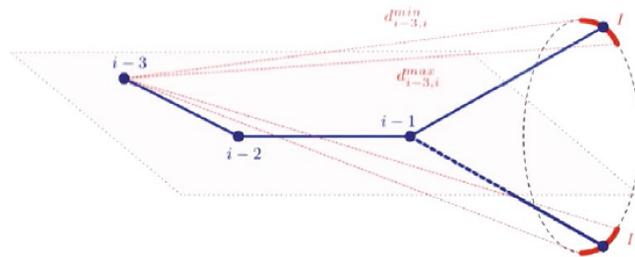


Figura 5.16: Arcos de possível posicionamento de átomo, com $d_{i-3,i}$ intervalar. [22].

Exemplo a partir do quarto átomo

Para ficar mais claro, vamos supor que a distância $d_{1,4}$ seja intervalar e então vejamos o que ocorre para a localização do átomo 4, neste caso:

Sabendo que o raio da esfera $S(X_1, d_{1,4})$ é variável, pois $d_{1,4} \in [\underline{d}_{1,4}, \bar{d}_{1,4}]$, é de se esperar que sejam determinados dois arcos na esfera C_4 . Se tomarmos $\underline{d}_{1,4}$, serão obtidos dois pontos em C_4 , X_4^1 e X_4^2 , ambos extremidades em cada arco. Para determiná-los, utilizaremos o par de pontos [2]:

$$Pp_{14-} = S(X_1, \underline{d}_{1,4}) \wedge S(X_2, d_{2,4}) \wedge S(X_3, d_{3,4}) \quad (5.4.4)$$

e podemos determinar cada ponto utilizando a expressão 4.4.15 [2]:

$$X_4^{1,2} = \frac{Pp_{14-} \mp \sqrt{Pp_{14-}^2}}{-\mathbf{e}_\infty \cdot Pp_{14-}}. \quad (5.4.5)$$

Tomando $\bar{d}_{1,4}$, obteremos os outros dois pontos extremos em cada arco, X_4^3 e X_4^4 . A expressão para o par de pontos correspondente é:

$$Pp_{14+} = S(X_1, \bar{d}_{1,4}) \wedge S(X_2, d_{2,4}) \wedge S(X_3, d_{3,4}) \quad (5.4.6)$$

e para determinar cada ponto utilizamos [2]:

$$X_4^{3,4} = \frac{Pp_{14+} \mp \sqrt{Pp_{14+}^2}}{-\mathbf{e}_\infty \cdot Pp_{14+}}. \quad (5.4.7)$$

Podemos verificar, na figura 5.17, a circunferência C_4 com os referidos arcos e pontos marcados:

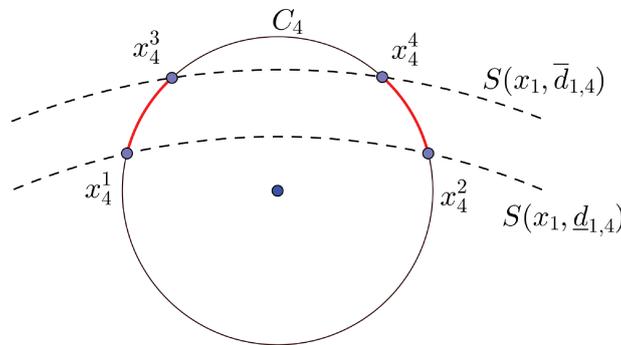


Figura 5.17: Arcos marcados em C_4

Podemos calcular os arcos sobre a circunferência C_4 que são determinados pela intersecção desta com a casca esférica $S(X_1, d_{1,4})$, com a utilização de um rotor que toma como eixo a reta Z_4 . O ângulo ϕ_4 , formado pelas extremidades de cada arco, tendo o centro de C_4 como vértice, é o ângulo máximo que deve ser expresso pelo rotor [1]. A metade do valor deste ângulo pode ser encontrada pelo produto interno entre os vetores $\overrightarrow{X_4^3 X_4^2}$ e $\overrightarrow{X_4^3 X_4^4}$ e, desta forma, obtemos ϕ_4 [12]. A figura 5.18 ilustra tal fato.

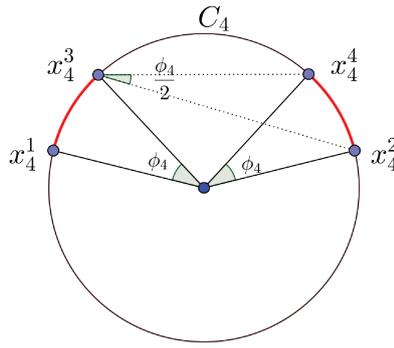


Figura 5.18: Ângulos e arcos em C_4

O rotor é dado pela expressão:

$$R_4(\lambda_4) = \cos \frac{\lambda_4}{2} - Z_4^* \operatorname{sen} \frac{\lambda_4}{2}, \quad 0 \leq \lambda_4 \leq \phi_4. \quad (5.4.8)$$

onde λ_4 é o ângulo de rotação efetuado pelo rotor.

Para determinarmos a posição do átomo com a utilização do rotor, começando pelos pontos obtidos pela intersecção de C_4 com $S(X_1, d_{1,4})$, devemos fazer:

- $X_4 = R_4 X_4^1 \tilde{R}_4$, para a rotação no sentido $X_4^1 \rightarrow X_4^3$; ou
- $X_4 = \tilde{R}_4 X_4^2 R_4$, para a rotação no sentido $X_4^2 \rightarrow X_4^4$, ou usar $R_4 X_4^2 \tilde{R}_4$, tomando o ângulo $(-\lambda_4)$. Vide figura 5.18.

Teste do sentido de rotação: Devemos testar a operação $X = R_4 X_4^1 \tilde{R}_4$ para verificar se o resultado é realmente X_4^3 . Se o resultado for diferente, o motivo é que a rotação está no sentido contrário ao esperado e devemos, por isto, mudar o sentido da mesma, mudando o sinal do rotor ou trocando o sinal do ângulo ou, ainda, fazendo $X = \tilde{R}_4 X_4^1 R_4$.

5.4.7 Posicionamento dos átomos subsequentes [2, 3].

A obtenção do posicionamento do quinto átomo dá-se de maneira análoga ao do quarto. Para isto, dispomos das distâncias exatas $d_{3,5}$ e $d_{4,5}$, que, a partir respectivamente das esferas centradas nos terceiro e quarto átomos, vão determinar a circunferência C_5 . Dispomos, também, da distância $d_{2,5}$, que pode ser precisa ou intervalar. Neste último caso, obteremos a casca esférica $S(X_2, d_{2,5})$, a qual vai determinar em C_5 dois arcos de medida ϕ_5 , em que o átomo estará localizado.

Considerando o quarto átomo já posicionado, se o quinto átomo sofrer uma rotação $0 \leq \lambda_5 \leq \phi_5$, seu posicionamento será determinado pelo rotor $R_5(\lambda_5) = \cos \frac{\lambda_5}{2} - Z_5^* \operatorname{sen} \frac{\lambda_5}{2}$, onde

²Se fizermos $R_4(\lambda_4) = \cos \frac{\lambda_4}{2} + Z_4^* \operatorname{sen} \frac{\lambda_4}{2}$, com $\lambda > 0$, a operação $R_4 x \tilde{R}_4$ resulta numa rotação de x em sentido horário (em relação ao eixo Z_4^* , no sentido de X_2 para X_3). Se tomarmos $\lambda < 0$ ou $\tilde{R}_4 x R_4$, a rotação será no sentido anti-horário. Se tomarmos $R_4(\lambda_4) = \cos \frac{\lambda_4}{2} - Z_4^* \operatorname{sen} \frac{\lambda_4}{2}$, dar-se-á o oposto. Tal fato será sempre observado para um rotor R_i . [33]

$Z_5 = X_3 \wedge X_4 \wedge \mathbf{e}_\infty$ é a reta que passa por X_3 e X_4 .

Se temos $X_4(\lambda_4) = R_4 X_4^1 \tilde{R}_4$, por exemplo, e o quinto átomo sofre uma rotação de λ_5 dentro de seu arco, a partir de X_5^1 , por exemplo, então podemos afirmar que [3]:

$$X_5 = R_5 R_4 X_5^1 \tilde{R}_4 \tilde{R}_5, \quad 0 \leq \lambda_4 \leq \phi_4, \quad 0 \leq \lambda_5 \leq \phi_5, \quad (5.4.9)$$

pois o posicionamento de X_5 vai depender diretamente do de X_4 .

Verificando os átomos anteriores ao X_5 sabemos que os átomos X_1 , X_2 e X_3 são fixos e o quarto átomo, X_4 , é móvel, o que afeta a esfera $S(X_4, d_{4,5})$, ou $S_{4,5}$, tornando esta uma “esfera móvel”, bem como afeta também o eixo Z_5 , que fica deslocado. Considerando o átomo X_4 posicionado em X_4^1 teremos [2]:

- $Z_5 = R_4(X_3 \wedge X_4^1 \wedge \mathbf{e}_\infty) \tilde{R}_4$
- $R_5 = \cos \frac{\lambda_5}{2} - Z_5^* \sin \frac{\lambda_5}{2}$, com $0 \leq \lambda_5 \leq \phi_5$
- $X_5(\lambda_4, \lambda_5) = R_5 R_4 X_5^1 \tilde{R}_4 \tilde{R}_5$

onde X_5 sofreu somente a transformação local dada por R_5 . [2]

O posicionamento do sexto átomo segue o mesmo raciocínio, só que agora, dos três átomos predecessores do sexto, somente o átomo X_3 encontra-se em uma posição fixa. Teremos, portanto:

- $Z_6 = R_5 R_4(X_4^1 \wedge X_5^1 \wedge \mathbf{e}_\infty) \tilde{R}_4 \tilde{R}_5$
- $R_6 = \cos \frac{\lambda_6}{2} - Z_6^* \sin \frac{\lambda_6}{2}$, com $0 \leq \lambda_6 \leq \phi_6$
- $X_6(\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6) = R_6 R_5 R_4 X_6^1 \tilde{R}_4 \tilde{R}_5 \tilde{R}_6$.

Para concluir, temos o sétimo átomo, cujos três predecessores não possuem posição fixa. Temos, para ele:

- $Z_7 = R_6 R_5 R_4(X_5^1 \wedge X_6^1 \wedge \mathbf{e}_\infty) \tilde{R}_4 \tilde{R}_5 \tilde{R}_6$
- $R_7 = \cos \frac{\lambda_7}{2} - Z_7^* \sin \frac{\lambda_7}{2}$, com $0 \leq \lambda_7 \leq \phi_7$; e
- $X_7(\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7) = R_7 R_6 R_5 R_4 X_7^1 \tilde{R}_4 \tilde{R}_5 \tilde{R}_6 \tilde{R}_7$ [2]

Logicamente, se algum átomo anterior não for afetado por um rotor, este não entrará nos cálculos para o eixo e posições dos átomos subsequentes a ele.

Generalizando, conforme podemos verificar em [3], obtemos:

$$C_i = S_{i-2,i} \wedge S_{i-1,i}, \quad (5.4.10)$$

circunferência onde iremos encontrar o átomo i ,

$$X_i(\lambda_4 \dots \lambda_i) = (R_i \dots R_4) X_i^b(\tilde{R}_4 \dots \tilde{R}_i), \quad (5.4.11)$$

onde:

$$Z_i = X_{i-2}^b(\lambda_4 \dots \lambda_{i-2}) \wedge X_{i-1}^b(\lambda_4 \dots \lambda_{i-1}) \wedge \mathbf{e}_\infty \quad (5.4.12)$$

é o eixo de rotação a ser empregado em R_i .

Tudo isso mostra que a circunferência em torno de Z_i resulta da aplicação de todos os rotores $R_4 \dots R_{i-1}$, bem como os arcos são obtidos na circunferência pela aplicação dos mesmos rotores considerados.

As operações com rotores, do tipo $X_i = R_i X_i^b \tilde{R}_i$ fornecem soluções analíticas para o sistema 5.4.1. Essas expressões com rotores descrevem analiticamente todos os pontos dos arcos onde são aplicados [3], o que confere uma vantagem sobre a procura de soluções por meio de discretização.

5.4.8 No caso de haver distância de poda

No caso de haver distância de poda, deveremos sempre testá-la para ratificar ou retificar as escolhas das posições dos átomos que vamos fazendo no desenrolar da procura por posições de cada átomo da molécula.

O uso de distâncias de poda intervalares tem duas consequências principais: pode mudar os limites dos ângulos de rotação e pode possibilitar uma definição do caminho a se escolher na árvore de procura [1]. Pode ainda inviabilizar ambas as posições ou nenhuma das posições possíveis para a escolha do átomo. As figuras (5.19 e 5.20) foram retiradas da referência [1] e mostram possíveis situações decorrentes das distâncias de poda.

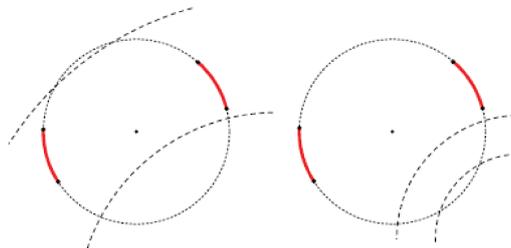


Figura 5.19: Nenhum arco podado e ambos os arcos podados [1].

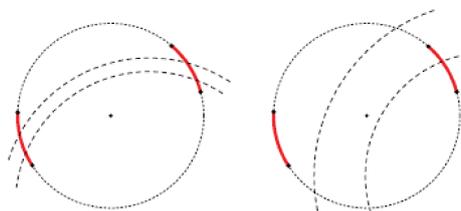


Figura 5.20: Redução nos limites do ângulo de rotação e poda em um dos arcos [1].

O processo Branch-and-Prune (BP) [26] deve ser sempre utilizado e, se determinada posição de átomo não for confirmada, devemos retroceder e fazer novas escolhas para obtermos sucesso na procura.

Caso haja distância de poda $d_{i-j,i}$ a ser atendida, devemos verificar as extremidades da interseção dos arcos e então determinar a amplitude possível do ângulo a ser aplicado ao rotor:

$[\lambda_j, \lambda'_j]$. Verifique a figura 5.21, onde o arco \mathcal{A}_1 foi reduzido a $[\lambda_j, \lambda'_j]$, para atender à distância de poda e o arco \mathcal{A}_2 foi eliminado, por não atendê-la.

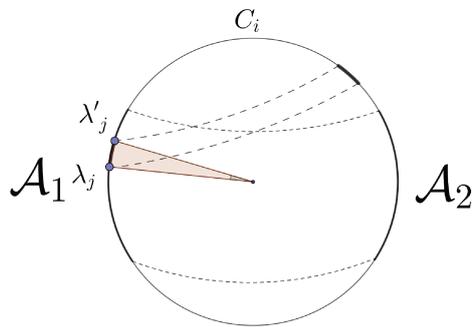


Figura 5.21: Redução e eliminação de arcos por distância de poda $d_{i-j,i}$.

Pode acontecer que, analisando a posição de um i -ésimo arco, o mesmo disponha de mais de uma distância de poda. Neste caso deveremos testar todas elas para que se possa concluir se o arco é viável ou não e, em sendo viável, que redução sofrerá, a fim de que se possa determinar o arco final onde o átomo pode ser encontrado.

5.4.9 Determinação do ângulo para localizar um ponto

Para cada valor de λ_i lançado em R_i , que posteriormente será aplicado na operação $X = R_i X_i^1 \tilde{R}_i$, teremos como retorno um único ponto X (vide figura 5.22). O contrário é verdadeiro, ou seja, se temos um ponto no arco, teremos um único λ_i correspondente, a menos de ângulos cômputos. Fazendo λ_i variar dentro do intervalo $[0, \phi_i]$ podemos obter todos os pontos do arco $X_i^1 X_i^3$.

Para o outro arco aplicamos o rotor no ponto X_i^2 com $-\lambda_i$ em $R_i X_i^2 \tilde{R}_i$ ou aplicamos $\tilde{R}_i X_i^2 R_i$, com λ_i , pois o efeito será o mesmo. A rotação, neste caso, ocorrerá no sentido oposto ao observado no primeiro.

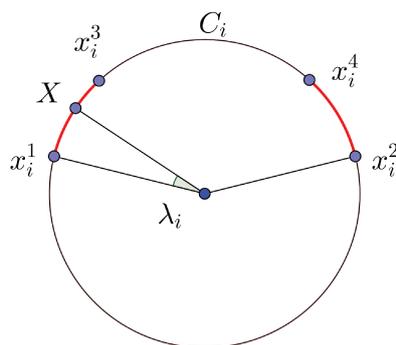


Figura 5.22: Um ângulo λ_i aplicado ao rotor retorna o ponto X .

Resta-nos, agora, verificar de que modo deveremos proceder a fim de determinar que ângulo deve ser lançado no rotor para acharmos o ponto X por meio da operação $X = R_i X_i^1 \tilde{R}_i$.

Vejam, adiante, o caso onde existe uma, depois duas e, por fim, o caso onde existem n distâncias de poda. Em seguida, apresentamos um algoritmo para solucionar tal problema.

1) O caso do átomo i , com uma distância de poda:

Para atender à distância de poda de um átomo i , no caso $d_{i-j,i}$, com $j \geq 4$, tendo os átomos anteriores ao i devidamente “realizados”, devemos proceder como se segue (levando em consideração que $d_{i-3,i}$ seja intervalar):

Inicialmente devemos levar em consideração que o átomo i pode ser encontrado em um dos arcos marcados pela interseção de distância intervalar $d_{i-3,i}$. Estes são os arcos $\mathcal{A}_{i-3,i,1}$ e $\mathcal{A}_{i-3,i,2}$, e delimitam um ângulo máximo ϕ_i , a ser utilizado no rotor R_i . Vide figura (5.23).

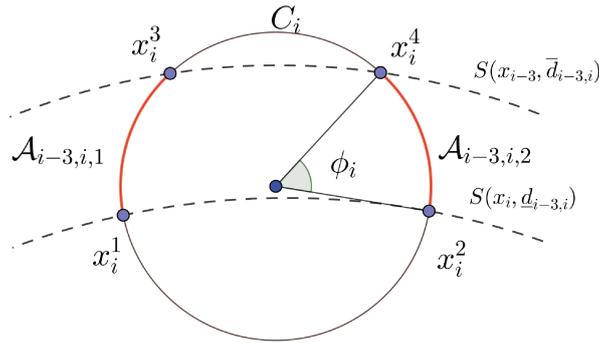


Figura 5.23: Ângulo máximo a ser utilizado pelo rotor.

Para a distância de poda, devemos encontrar as interseções entre as esferas $\underline{S}_{i-j,i}$ e $\bar{S}_{i-j,i}$ e a circunferência C_i , onde deve se encontrar o átomo i . Serão estas interseções que irão demarcar até dois arcos em C_i :

- O arco $\mathcal{A}_{i-j,i,1}$, delimitado pelos pontos $X_{i-j,i}^1$ e $X_{i-j,i}^3$; e
- O arco $\mathcal{A}_{i-j,i,2}$, delimitado pelos pontos $X_{i-j,i}^2$ e $X_{i-j,i}^4$.

Os pontos $X_{i-j,i}^1$ e $X_{i-j,i}^2$ são obtidos pela interseção de $\underline{S}_{i-j,i}$ com C_i , e os pontos $X_{i-j,i}^3$ e $X_{i-j,i}^4$, pela interseção de $\bar{S}_{i-j,i}$ com C_i . Estes pontos são “extraídos” dos pares de ponto

assim formados pelas fórmulas $x = \frac{Pp \mp \sqrt{Pp^2}}{-\mathbf{e}_\infty \cdot Pp}$. Vide a figura (5.24).

O próximo passo é verificar se existe coincidência ou não entre os arcos $\mathcal{A}_{i-3,i,1}$ e $\mathcal{A}_{i-3,i,2}$, e os arcos da distância de poda, $\mathcal{A}_{i-j,i,1}$ e $\mathcal{A}_{i-j,i,2}$. Vimos nas figuras 5.19 e 5.20 situações que podem ocorrer ao compararmos os arcos iniciais com aqueles gerados pelas distâncias de poda.

Para determinarmos analiticamente qual o efeito que determinada distância de poda terá sobre o arco $\mathcal{A}_{i-3,i,1}$, por exemplo, devemos lançar mão do rotor que é expresso por

$$R_i = \cos\left(\frac{\lambda_i}{2}\right) - Z_i^* \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda_i}{2}\right),$$

onde λ_i será o valor da rotação que o ponto X_i^1 sofrerá, quando submetido à operação $X = R_i X_i^1 \tilde{R}_i$.

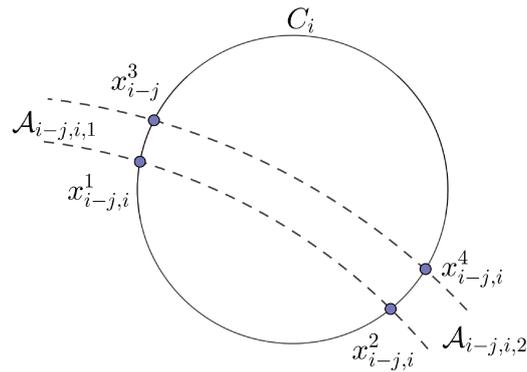


Figura 5.24: Arcos marcados em C_i por uma distância de poda.

Para cada valor de λ_i registrado em R_i e posteriormente aplicado na operação $X = R_i X_i^1 \tilde{R}_i$ teremos como retorno um único ponto X (vide figura 5.25). O contrário é verdadeiro, ou seja, se temos um ponto no arco, teremos um único λ_i correspondente, a menos de ângulos cômputos. Fazendo λ_i variar dentro do intervalo $[0, \phi_i]$ podemos obter todos os pontos do arco $X_i^1 X_i^3$.

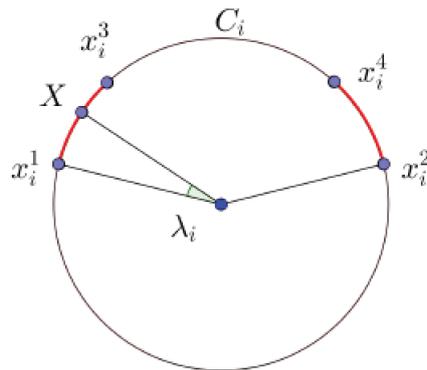


Figura 5.25: Um ângulo λ_i aplicado ao rotor retorna o ponto X .

Para o outro arco aplicamos o rotor no ponto X_i^2 , com $-\lambda$ em $R_i X_i^2 \tilde{R}_i$ ou aplicamos $\tilde{R}_i X_i^2 R_i$, com λ_i , pois o efeito será o mesmo. A rotação, neste caso, ocorrerá no sentido oposto ao observado no primeiro arco.

A figura (5.26) abaixo retrata, como exemplo, a situação do 5º átomo de uma cadeia que na qual se dispõe de uma distância intervalar entre o 2º e o 5º átomos, que determinam os arcos \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{252} , bem como a distância de poda, entre os 1º e 5º átomos, que determinam os arcos \mathcal{A}_{151} e \mathcal{A}_{152} . Como resultado, o arco \mathcal{A}_{252} foi eliminado por não atender à distância de poda e o arco possível ficou reduzido ao $\mathcal{A}_{151} = \mathcal{A}_{251} \cap \mathcal{A}_{151}$.

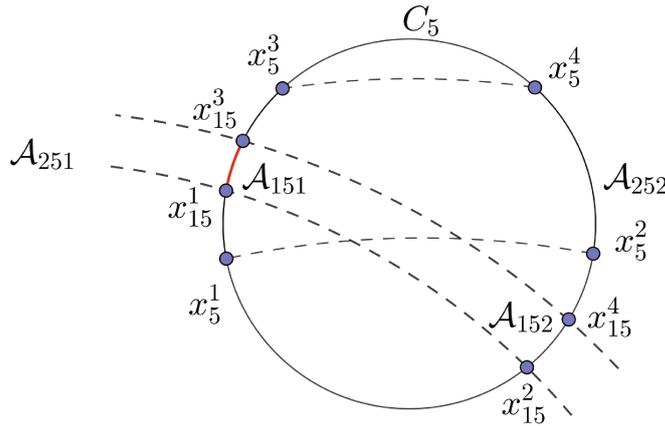


Figura 5.26: Exemplo de um quinto átomo, com distâncias de poda.

5.4.10 Obtenção do ângulo correspondente a um ponto X

Para determinarmos qual ângulo aplicado a um rotor R_i corresponde a um ponto X em um arco devemos proceder como se segue:

Seja X um ponto na circunferência e seja P o ponto inicial do arco, o que sofrerá a ação do rotor (por exemplo, $P = X_i^1$). Queremos determinar que ângulo λ , registrado em R , retornará o ponto X .

Consideremos o rotor

$$R(\lambda) = \cos\left(\frac{\lambda}{2}\right) - \text{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) Z,$$

onde Z é o bivector do plano de rotação ($Z = Z^*$, assim escrito para simplificar a notação). Então,

$$X = R(\lambda)P\tilde{R}(\lambda).$$

Sejam $c = \cos\left(\frac{\lambda}{2}\right)$ e $s = \text{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right)$. Então:

$$X = R(\lambda)P\tilde{R}(\lambda) = (c - sZ)P(c + sZ) \Rightarrow$$

$$X = c^2P + cs(PZ - ZP) - s^2ZPZ.$$

Analisando a expressão $PZ - ZP$, podemos concluir que:

- i) $PZ - ZP = P \cdot Z - Z \lfloor P$, tendo em vista que:
 $PZ - ZP = P \cdot Z + P \wedge Z - (Z \lfloor P + Z \wedge P) = (P \cdot Z - Z \lfloor P) + (P \wedge Z - Z \wedge P) = P \cdot Z - Z \lfloor P$,
 pois, sendo P um vetor e Z , um bivector, temos $P \wedge Z = Z \wedge P$, conforme vimos em 3.1.7.
- ii) $P \cdot Z - Z \lfloor P = 2(P \cdot Z)$, pois, aqui, observamos que $P \cdot Z = P \rfloor Z$ e, em respeito à relação 2.2.4, temos $Z \lfloor P = (-1)^{1(2+1)} P \rfloor Z \Rightarrow Z \lfloor P = -P \rfloor Z \Rightarrow Z \lfloor P = -P \cdot Z$.
- iii) Podemos, então, pelas considerações i) e ii) acima escrever:

$$PZ - ZP = P \cdot Z - Z \lfloor P = P \cdot Z - (-P \rfloor Z) = P \cdot Z + P \cdot Z = 2(P \cdot Z).$$

Com isto, podemos reescrever a equação acima como:

$$X = c^2P + 2cs(P \cdot Z) - s^2ZPZ. \quad (5.4.13)$$

Se $c = 0$, ou seja, $\cos\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0$, então $\lambda = \pi$. Considerando $c \neq 0$, e fazendo $t = \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right)$, teremos:

$$\frac{X}{c^2} = P + 2t(P \cdot Z) - t^2ZPZ.$$

Agora, fazendo o produto interno pelo próprio X , lembrando que $X \cdot X = 0$, pois X está no cone nulo, teremos:

$$-[X \cdot (ZPZ)]t^2 + 2[X \cdot (P \cdot Z)]t + X \cdot P = 0, \quad (5.4.14)$$

expressão que é uma equação do segundo grau em t , que pode nos fornecer até dois valores para $t = \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right)$.

Resolvendo $\frac{\lambda}{2} = \operatorname{arctg}(t)$, devemos ter $-\frac{\pi}{2} < \frac{\lambda}{2} < \frac{\pi}{2} \Rightarrow -\pi < \lambda < \pi$, ou seja, temos os valores de λ para obter todos os pontos da circunferência, exceto $\lambda = \pi$, que já ficara de fora, pela restrição que impusemos acima, para $\cos\left(\frac{\lambda}{2}\right) \neq 0$.

Se as raízes de 5.4.14 forem imaginárias, a solução é vazia ou $\lambda = \pi$, que deve ser testado em $RP\tilde{R}$. Se forem duas raízes iguais, o λ assim obtido será o valor procurado. Se obtivermos dois valores, λ_1 e λ_2 , devemos testá-los em $RP\tilde{R}$ e ver qual dos dois valores fornece X , e teremos o valor buscado.

Devemos ressaltar, ainda, que na equação 5.4.14 o termo $X \cdot (P \cdot Z)$ só será igual a 0 quando $X = P$, ou seja, para $\lambda = 0$, pois $X \cdot (P \cdot Z) = (X \wedge P) \cdot Z$ [14]. Como consequência, para $\lambda \neq 0$ teremos sempre valores não simétricos para $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right)$ e, portanto, valores não simétricos para λ assim obtidos.

Podemos obter outra equação útil na procura e determinação de λ . Basta, para isto, efetuarmos o produto interno de ambos os lados da equação 5.4.13 por P :

$$X = c^2P + 2cs(P \cdot Z) - s^2ZPZ \Rightarrow P \cdot X = c^2(P \cdot P) + 2cs[P \cdot (P \cdot Z)] - s^2[P \cdot (ZPZ)] \Rightarrow P \cdot X = -s^2[P \cdot (ZPZ)] \Rightarrow$$

$$\operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -\frac{P \cdot X}{P \cdot (ZPZ)}. \quad (5.4.15)$$

Esta equação fornece, por exemplo: $\operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = k^2$, $k \in [-1, 1]$, de onde $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm k \Rightarrow \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = k$ ou $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -k$. Resolvendo, vamos ter: $\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \operatorname{arcsenk}$ ou $\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \operatorname{arcsen}(-k)$, com $-\frac{\pi}{2} \leq \frac{\lambda}{2} \leq \frac{\pi}{2} \Rightarrow -\pi \leq \lambda \leq \pi$.

Como a função seno é ímpar teremos dois valores simétricos como solução, dos quais apenas um será o que resolve $X = RP\tilde{R}$.

Comparando as soluções das equações 5.4.14 e 5.4.15, a solução comum é a procurada. Logo, o ângulo λ que fornecerá X é a solução do sistema:

$$\begin{cases} -[X \cdot (ZPZ)] \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) + 2[X \cdot (P \cdot Z)] \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) + X \cdot P = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -\frac{P \cdot X}{P \cdot (ZPZ)} \end{cases} \quad (5.4.16)$$

Observação Na equação 5.4.14, se usarmos $\tilde{R}PR$ com o rotor com sinal negativo, ou o rotor com sinal positivo em $RP\tilde{R}$, deveremos usar a expressão $-2[X \cdot (P \cdot Z)] \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right)$.

Situações diversas com uma distância de poda

Nas figuras de 5.27 a 5.32 abaixo podemos observar situações possíveis das interseções ou não de arcos de distância de poda com um arco previamente marcado. Considerando $[0, \phi]$ o arco previamente marcado pela distância intervalar $d_{i-3,i}$, os ângulos λ_1 e λ_1' , marcados pela distância de poda são calculados pelo sistema 5.4.16. A situação é análoga ao outro arco marcado por $d_{i-3,i}$.

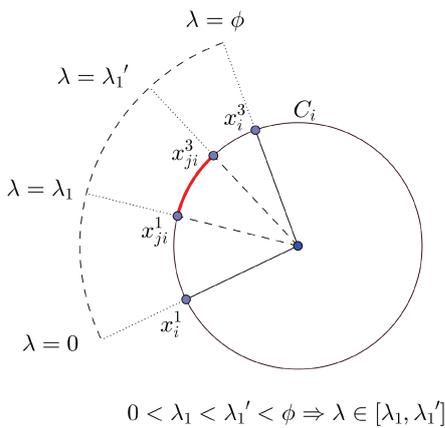


Figura 5.27: Situação 01

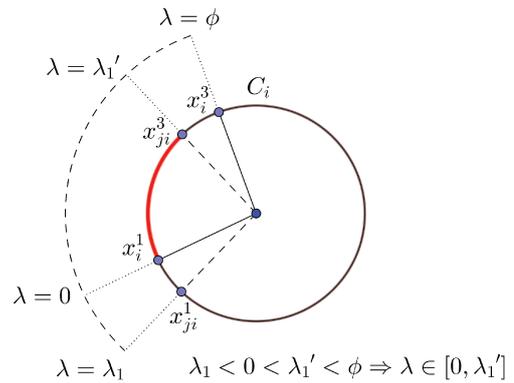


Figura 5.28: Situação 02

Como resultado temos a interseção dos arcos, que é o novo intervalo que o ângulo do rotor pode assumir para que as distâncias sejam atendidas. Caso não haja interseção, todo o arco é eliminado, por não atender à distância de poda. Como podemos observar, nas figuras de 5.27 a 5.32, existe uma redução do arco nas situações 1, 2 e 3, uma eliminação do arco original em 4 e 5 pois o arco original não atende à distância de poda, e nenhum efeito sobre o arco original na situação 6.

2) O caso do átomo i , com duas distâncias de poda:

Se houver duas distâncias de poda teremos que estudar, inicialmente, a relação entre o arco original (\mathcal{A}_0) e o arco de uma das distâncias de poda, digamos \mathcal{P}_1 , e então concluir:

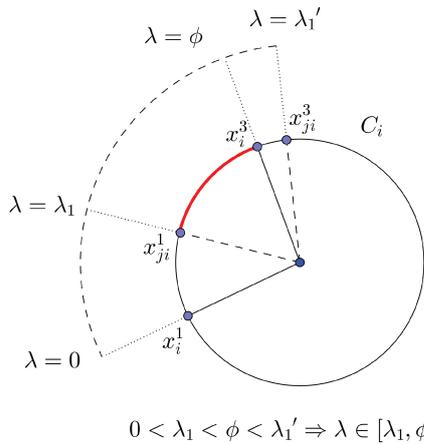


Figura 5.29: Situação 03

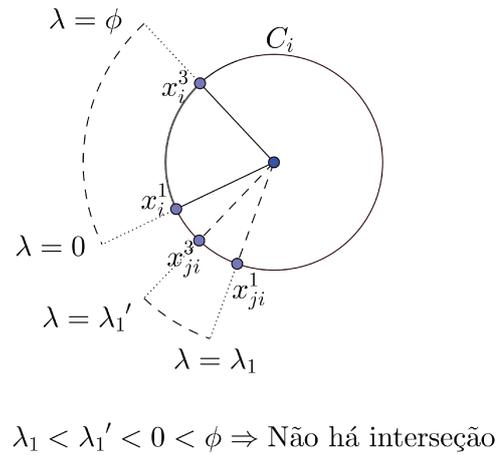


Figura 5.30: Situação 04

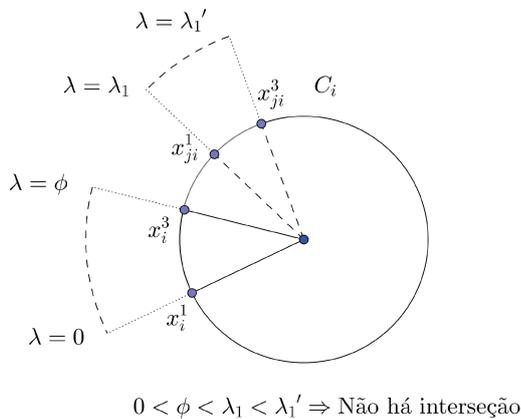


Figura 5.31: Situação 05

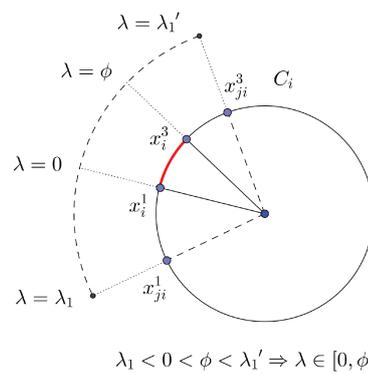


Figura 5.32: Situação 06

- a. Se não houver interseção entre \mathcal{A}_0 e \mathcal{P}_1 , o arco original \mathcal{A}_0 é eliminado por não atender à distância de poda.
- b. Se houver interseção entre \mathcal{A}_0 e \mathcal{P}_1 passaremos a considerar o novo arco, que é a interseção destes dois, ou seja, passaremos a considerar $\mathcal{A}_1 = \mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1$.
 - i. Se não houver interseção entre \mathcal{A}_1 e \mathcal{P}_2 , da segunda distância de poda, o arco \mathcal{A}_1 é eliminado, e em consequência o arco original \mathcal{A}_0 é eliminado por não atender à segunda distância de poda.
 - ii. Se houver interseção entre \mathcal{A}_1 e \mathcal{P}_2 , passaremos a considerar o novo arco, que é a interseção destes dois, ou seja, passaremos a considerar $\mathcal{A}_2 = \mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2$ e \mathcal{A}_2 será o arco onde o átomo poderá ser encontrado.

Como são muitas as possibilidades faremos ilustração de duas. Na primeira há uma redução do arco inicial, e na outra há a eliminação do mesmo. Vejamos um exemplo para cada possibilidade:

- Há interseção:

- Testamos, inicialmente, se existe interseção entre \mathcal{A}_0 , arco inicial, e \mathcal{P}_1 , primeiro arco de poda, e verificamos que existe: $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$. Vide figura 5.33.
- Em seguida, verificamos se existe interseção entre \mathcal{A}_1 e o arco \mathcal{P}_2 , da segunda distância de poda, e constatamos que existe $\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \mathcal{A}_2$. Logo, o arco resultante será \mathcal{A}_2 . Vide figura 5.34:

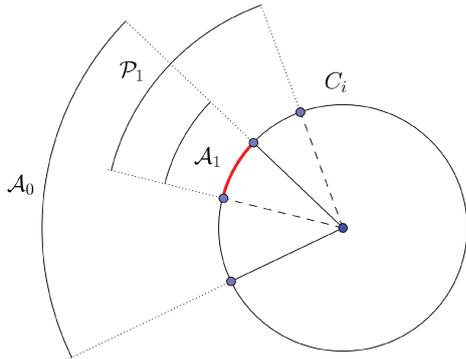


Figura 5.33: $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$

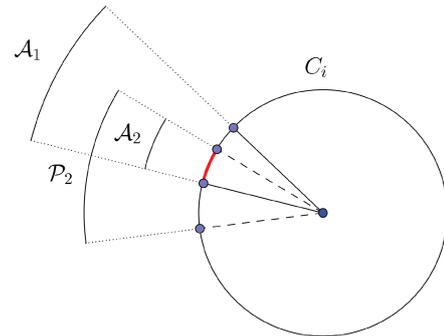


Figura 5.34: $\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \mathcal{A}_2$

- Não há interseção:

- Testamos, inicialmente, se existe interseção entre \mathcal{A}_0 , arco inicial, e \mathcal{P}_1 , primeiro arco de poda, e verificamos que existe: $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$. Vide figura 5.35. Claro que se não houvesse interseção nessa primeira comparação, o arco \mathcal{A}_0 seria eliminado já nesta fase.
- Em seguida, verificamos se existe interseção entre \mathcal{A}_1 e o arco \mathcal{P}_2 , da segunda distância de poda, e constatamos que não existe, ou seja, $\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \emptyset$. Logo, o arco \mathcal{A}_0 deve ser eliminado. Vide figura 5.36:

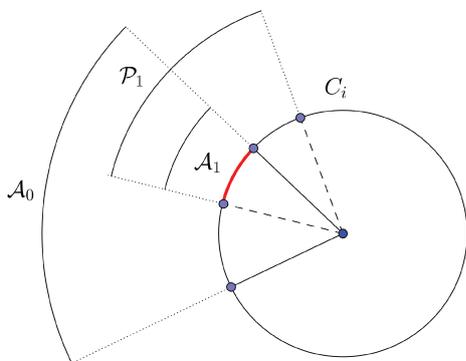


Figura 5.35: $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 = \mathcal{A}_1$

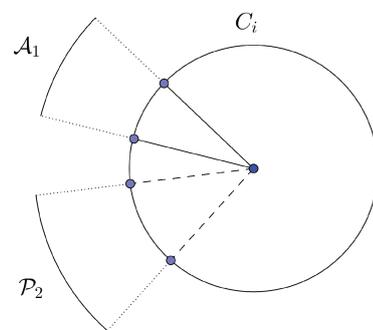


Figura 5.36: $\mathcal{A}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \emptyset$

Concluimos que, se não houver interseção entre todos os arcos, inicial e os de poda, o arco \mathcal{A}_0 é eliminado. Se houver interseção entre estes eles, a interseção obtida é o arco reduzido, onde o átomo pode ser encontrado.

3) O caso do átomo i , com n distâncias de poda:

No caso de haver n distâncias de poda podemos raciocinar como sendo uma generalização dos casos anteriores, ou seja: se não houver interseção entre o arco original, \mathcal{A}_0 , e todos os arcos gerados pelas distâncias de poda, $\mathcal{P}_1 \cdots \mathcal{P}_n$, o arco original deve ser eliminado. Caso haja interseção entre todos os arcos, o átomo será localizado justamente nesta interseção, ou seja em:

$$\mathcal{A}_n = \mathcal{A}_0 \cap \mathcal{P}_1 \cdots \cap \mathcal{P}_n.$$

Método para verificar existência de interseção de arcos:

Se considerarmos os arcos como sendo:

$$\mathcal{A}_0 \in [\lambda_0, \lambda'_0], \mathcal{P}_1 \in [\lambda_1, \lambda'_1], \dots, \mathcal{P}_n \in [\lambda_n, \lambda'_n],$$

haverá interseção entre eles se: $\max(\lambda_j) \leq \min(\lambda'_j)$, para $j = 0 \dots n$ e não haverá interseção entre eles, caso contrário. Tendo em vista isto, propomos o algoritmo a seguir.

5.4.11 Algoritmo para redução ou eliminação de arco:

Entrada: Valores de ângulos maiores e menores de $\mathcal{A}_0, \mathcal{P}_1 \dots \mathcal{P}_n$.

Saída: Arco reduzido \mathcal{A}_n , fornecido pelos seus ângulos delimitantes, λ_L e λ_U , ou eliminação do arco \mathcal{A}_0 .

(1) % Inicializar as variáveis.

- Crie uma matriz ARCOS $(n + 1, 2)$, em que cada linha possui os ângulos de $\mathcal{A}_0, \mathcal{P}_1 \dots \mathcal{P}_n$, sendo a primeira coluna com o menor ângulo e a segunda, com o maior ângulo de cada arco.

(2) Faz a comparação dos ângulos, maior e menor, de todos os arcos.

- $\lambda_L = \max(\text{ARCOS}(:, 1))$ % Acha o maior valor entre todos os menores ângulos de cada arco e lhe atribui o nome λ_L .
- $\lambda_U = \min(\text{ARCOS}(:, 2))$ % Acha o menor valor entre todos os maiores ângulos de cada arco e lhe atribui o nome λ_U .

(3) Verifica se há interseção entre os arcos e finaliza o algoritmo.

- Se $\lambda_L \leq \lambda_U$, então $\mathcal{A}_n = [\lambda_L, \lambda_U]$, FIM.
- Senão: \mathcal{A}_0 é eliminado. FIM.

Capítulo 6

Exemplo de Aplicação

6.1 Introdução

As contribuições desta tese são teóricas. Entretanto, apresentamos neste capítulo um exemplo prático do que foi tratado ao longo do trabalho. Trata-se do caso hipotético de uma pequena molécula, de sete átomos, na qual as distâncias são estipuladas dentro dos limites em que ocorrem na realidade.

6.2 Considerações Iniciais

Seguindo as condições do PDGDM, os três primeiros átomos estão fixados nas posições, em \mathbb{R}^3 :

- $\mathbf{x}_1 = (0, 0, 0)$;
- $\mathbf{x}_2 = (-1, 0, 0)$;
- $\mathbf{x}_3 = (-3/2, \sqrt{3}/2, 0)$.

Neste exemplo fictício, as distâncias estabelecidas entre os átomos são as constantes da tabela de dupla entrada abaixo:

	1	2	3	4	5	6	7
1	*	1	$\sqrt{3}$	2.15	[2.45,2.55]	*	[4.15,4.22]
2	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.2, 2.6]	*	[3.95,4.03]
3	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.4, 2.6]	[3.12,3.28]
4	2.15	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.2,2.4]
5	[2.45,2.55]	[2.2, 2.6]	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$
6	*	*	[2.4, 2.6]	$\sqrt{3}$	1	*	1
7	[4.15,4.22]	[3.95,4.03]	[3.12,3.28]	[2.2,2.4]	$\sqrt{3}$	1	*

(6.2.1)

Analisando as distâncias disponíveis na tabela podemos verificar que as distâncias $d_{1,5}$, $d_{1,7}$, $d_{2,5}$, $d_{2,7}$, $d_{3,6}$, $d_{3,7}$ e $d_{4,7}$ são intervalares e as demais, precisas. As distâncias $d_{1,5}$, $d_{1,7}$, $d_{2,7}$ e $d_{3,7}$ são de poda

6.3 Solução com Álgebra Geométrica Conforme

Podemos utilizar, para efetuar os cálculos, o software CLUCalc, que é adequado para a Álgebra Geométrica Conforme. No livro [33], encontramos as instruções para a utilização do referido programa. É possível, também, utilizar o software Mathematica, lançando mão do pacote CGA5Package, apresentado em [21], que foi desenvolvido pelos autores para estudos de origami, mas que se presta para nosso propósito.

Usaremos para este fim as fórmulas já citadas anteriormente, em especial:

- Ponto: $p = \mathbf{e}_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2\mathbf{e}_\infty \in \mathbb{R}^{n+1,1}$, (4.4.6);
- Esfera: $S^* = c - \frac{1}{2}\mathbf{r}^2\mathbf{e}_\infty$, (4.4.9);
- Circunferência obtida por interseção de duas esferas: $C^* = S_1^* \wedge S_2^*$, (4.4.12);
- Par de pontos: $Pp^* = S_1^* \wedge S_2^* \wedge S_3^*$, 4.4.13, para determinação do par de pontos e $P_\pm = \frac{Pp \pm \sqrt{Pp \cdot Pp}}{-\mathbf{e}_\infty \cdot Pp}$, 4.4.15, para a “extração” de cada ponto.

Observação: A fim de facilitar a notação, e considerando que as esferas, neste exemplo, serão tomadas com os seus duais, omitiremos os asteriscos nas escritas.

6.3.1 Comandos do Mathematica/CGA5Package

Apresentamos abaixo alguns comandos do Mathematica utilizados no pacote CGA5Package, que vão interessar para que os resultados adiante sejam obtidos:

- Para definir um ponto $p = (x_1, x_2, x_3)$: $p = \text{Pnt}[\{x_1, x_2, x_3\}]$.
- Esfera S com centro no ponto c e raio r : $s = c - 0.5 * r * r * w[\{\infty\}]$.
- Para obter-se a circunferência C , interseção das esferas S_1 e S_2 : $C = \text{OuterProduct}[S_1, S_2]$.
- Para obter-se um par de pontos Pp , interseção das esferas S_1, S_2 e S_3 : $Pp = \text{OuterProduct}[S_1, S_2, S_3]$.
- Para “retirar-se” um ponto P , do par de pontos Pp , utilizamos:
 $q = \text{CGAProduct}[\text{Dual}[Pp] - \text{CGANorm}[Pp]w[\{\}], \text{CGAInverse}[\text{InnerProduct}[-w[\{\infty\}], \text{Dual}[Pp]]]]$.
 Para o outro ponto, basta trocar o sinal “-” no numerador pelo sinal “+”.
- Para a expressão de um rotor R , rotacionando de um ângulo θ , utilizando a reta z como eixo: $R = \text{Expand}[\text{Cos}[\theta/2] + (\text{Dual}[z]/\text{CGANorm}[\text{Dual}[z]]) * \text{Sin}[\theta/2]]$
- Para obter-se o reverso \tilde{R} do rotor R , fazemos: $TR = \text{Reversion}[R]$.
- Para determinar-se um ponto $X = Rq\tilde{R}$, fazemos: $X = \text{CGAProduct}[R, q, TR]$

6.3.2 Posicionamento do quarto átomo

A fim de determinar a posição $\mathbf{x}_4 \in \mathbb{R}^3$, utilizando a Álgebra Geométrica Conforme, devemos:

1. Determinar a esfera $S_{2,4}$ cujo centro está em $X_2 = \mathbf{e}_0 - \mathbf{e}_1 + 0.5\mathbf{e}_\infty$ e cujo raio é igual a $d_{2,4} = \sqrt{3}$, que obtivemos na tabela de distâncias. Temos, então que $S_{2,4} = \mathbf{e}_0 - \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_\infty$.
2. Determinar a esfera $S_{3,4}$ cujo centro encontra-se em $X_3 = \mathbf{e}_0 - 1.5\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2 + 1.5\mathbf{e}_\infty$, cujo raio é $d_{3,4} = 1$. Temos, então que $S_{3,4} = \mathbf{e}_0 - 1.5\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_\infty$.
3. Determinar a circunferência C_4 , interseção das esferas $S_{2,4}$ e $S_{3,4}$, onde X_4 será encontrado. Temos, portanto, $C_4 = S_{2,4} \wedge S_{3,4}$, ou seja:
 $C_4 = -0.5\mathbf{e}_{01} + 0.866\mathbf{e}_{02} + 2\mathbf{e}_{0\infty} - 0.866\mathbf{e}_{12} - 2.5\mathbf{e}_{1\infty} + 0.866\mathbf{e}_{2\infty}$.

4. Como a distância $d_{1,4} = 2.15$ é precisa, concluímos que a interseção da esfera $S_{1,4} = \mathbf{e}_0 - 2.311\mathbf{e}_\infty$ com a circunferência C_4 dar-se-á em dois pontos. A interseção da esfera com a circunferência é obtida fazendo-se:

$Pp14 = S_{1,4} \wedge C_4 = -0.866\mathbf{e}_{012} - 1.344\mathbf{e}_{01\infty} - 1.135\mathbf{e}_{02\infty} + 2.002\mathbf{e}_{12\infty}$. Agora, utilizando

$$X = \frac{Pp \mp \sqrt{Pp^2}}{-\mathbf{e}_\infty \cdot Pp} \text{ em } Pp14, \text{ obteremos (vide figura 6.1):}$$

$$X_4^1 = \mathbf{e}_0 - 1.311\mathbf{e}_1 + 1.552\mathbf{e}_2 + 0.702\mathbf{e}_3 + 2.311\mathbf{e}_\infty, \text{ e}$$

$$X_4^2 = \mathbf{e}_0 - 1.311\mathbf{e}_1 + 1.552\mathbf{e}_2 - 0.702\mathbf{e}_3 + 2.311\mathbf{e}_\infty.$$

5. Como não há distância de poda podemos escolher qualquer uma dessas posições. Escolhamos, por exemplo, X_4^1 . O quarto átomo será, portanto:

$$\mathbf{x}_4 = (-1.311, 1.552, 0.702).$$

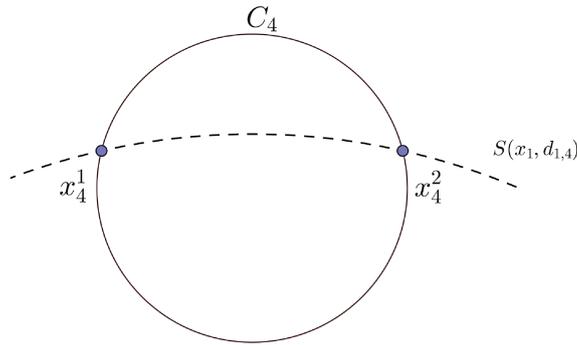


Figura 6.1: Posições em C_4 . Opção por X_4^1 .

6.3.3 Posicionamento do quinto átomo

Devemos considerar, para determinarmos a posição do quinto átomo, que a distância $d_{2,5}$ é intervalar, indicando a existência de dois arcos de busca, onde o ponto pode ser localizado. Além disso, está disponível a distância intervalar $d_{1,5}$, de poda, que servirá para ratificar ou retificar posições dentro da árvore de busca.

1. Começamos por considerar as esferas $S_{3,5}$ e $S_{4,5}$, tendo em vista que o quinto átomo está sobre a intersecção de ambas.
 - A esfera $S_{3,5} = \mathbf{e}_0 - 1.5\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2 + 2.10^{-16}\mathbf{e}_\infty$ (o termo de \mathbf{e}_∞ ser praticamente nulo significa que a origem está muito próxima da superfície da esfera) tem seu centro sobre o ponto X_3 , e o raio é dado pela distância entre X_3 e X_5 , que é exata, ou seja, $d_{3,5} = \sqrt{3}$. A esfera $S_{4,5} = \mathbf{e}_0 - 1.31\mathbf{e}_1 + 1.55\mathbf{e}_2 + 0.702\mathbf{e}_3 + 1.81\mathbf{e}_\infty$ tem o seu centro sobre X_4 e raio $d_{4,5} = 1$.
 - O ponto estará localizado sobre a circunferência: $C_5 = S_{3,5} \wedge S_{4,5}$.
2. Os arcos em C_5 são determinados pelas interseções desta com as esferas com centro em x_2 . Como a distância $d_{2,5} \in [2.2, 2.6]$, a esfera $\underline{S}_{2,5}$, de raio 2.2 e $\overline{S}_{2,5}$, de raio 2.6 são as limitantes. Para a menor distância, $\underline{d}_{2,5} = 2.2$ temos o par de pontos $\underline{Pp}_{2,5} = \underline{S}_{2,5} \wedge S_{3,5} \wedge S_{4,5}$. Calculando temos o valor:

$$\underline{Pp}_{2,5} = -0.507\mathbf{e}_{012} + 0.351\mathbf{e}_{013} - 1.268\mathbf{e}_{01\infty} + 0.608\mathbf{e}_{023} + 0.251\mathbf{e}_{02\infty} - 1.349\mathbf{e}_{03\infty} - 0.608\mathbf{e}_{123} + 0.722\mathbf{e}_{12\infty} + 2.023\mathbf{e}_{13\infty} - 1.168\mathbf{e}_{23\infty}.$$
3. Tendo o par de pontos $\underline{Pp}_{2,5}$ extraímos os pontos:

$$X_5^1 = \mathbf{e}_0 - 0.409\mathbf{e}_1 + 1.981\mathbf{e}_2 + 0.753\mathbf{e}_3 + 2.329\mathbf{e}_\infty, \text{ e}$$

$$X_5^2 = \mathbf{e}_0 - 1.502\mathbf{e}_1 + 1.350\mathbf{e}_2 + 1.663\mathbf{e}_3 + 3.422\mathbf{e}_\infty.$$
4. Para a maior distância, $\overline{d}_{2,5} = 2.6$, temos o par de pontos $\overline{Pp}_{2,5} = \overline{S}_{2,5} \wedge S_{3,5} \wedge S_{4,5}$. Calculando temos o valor:

$$\overline{Pp}_{2,5} = -0.507\mathbf{e}_{012} - 0.351\mathbf{e}_{013} - 1.449\mathbf{e}_{01\infty} + 0.608\mathbf{e}_{023} - 0.408\mathbf{e}_{02\infty} - 2.023\mathbf{e}_{03\infty} - 0.608\mathbf{e}_{123} + 1.867\mathbf{e}_{12\infty} + 3.034\mathbf{e}_{13\infty} - 1.752\mathbf{e}_{23\infty}.$$

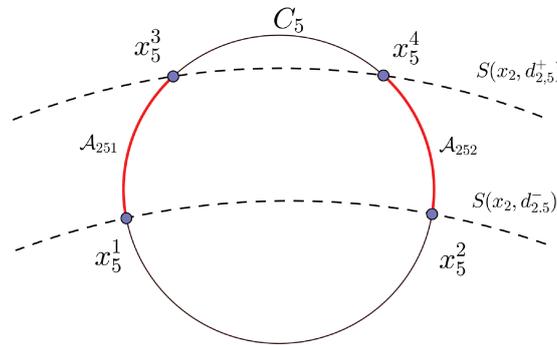


Figura 6.2: Arcos em C_5 .

5. Tendo o par de pontos $\overline{Pp}_{2,5}$ extraímos os pontos:

$$X_5^3 = \mathbf{e}_0 - 1.386\mathbf{e}_1 + 2.525\mathbf{e}_2 + 0.484\mathbf{e}_3 + 4.266\mathbf{e}_\infty, \text{ e}$$

$$X_5^4 = \mathbf{e}_0 - 2.046\mathbf{e}_1 + 2.144\mathbf{e}_2 + 1.033\mathbf{e}_3 + 4.926\mathbf{e}_\infty.$$

Temos, com os pontos X_5^1 e X_5^3 , o arco \mathcal{A}_{251} e com os pontos X_5^2 e X_5^4 , o arco \mathcal{A}_{252} , perfeitamente determinados (fig 6.2).

6. Ângulo ϕ_5 : Devemos, agora, achar o ângulo ϕ_5 , que delimita os arcos. Isto será feito indiretamente, calculando-se inicialmente o ângulo inscrito, $\frac{\phi_5}{2}$, utilizando para isto o produto interno entre os vetores $\mathbf{u}_5 = X_5^1\vec{X}_5^2$ e $\mathbf{v}_5 = X_5^1\vec{X}_5^4$. Temos, com isso, o valor $\phi_5 = 1.453$ radianos.

7. Eixo Z_5 : O eixo que servirá para o rotor será dado pela expressão $X_3 \wedge X_4 \wedge \mathbf{e}_\infty$, já que passa pela posição dos dois átomos anteriores. Temos, portanto:

$$Z_5 = 0.189\mathbf{e}_{01\infty} + 0.686\mathbf{e}_{02\infty} + 0.702\mathbf{e}_{03\infty} - 1.193\mathbf{e}_{12\infty} - 1.054\mathbf{e}_{13\infty} + 0.608\mathbf{e}_{23\infty}, \text{ e}$$

$$Z_5^* = -0.702\mathbf{e}_{12} + 0,686\mathbf{e}_{13} - 0.608\mathbf{e}_{1\infty} - 0,189\mathbf{e}_{23} - 1.054\mathbf{e}_{2\infty} + 1.193\mathbf{e}_{3\infty}.$$

8. Rotor R_5 : Devemos, inicialmente, testar o sinal do Rotor. Fazendo:

$$R_5 = \cos\left(\frac{\lambda_5}{2}\right) - Z_5^* \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda_5}{2}\right)$$

em X_5^1 , com $\lambda = 1.453$ em $R_5 X_5^1 \tilde{R}_5$ encontraremos o ponto

$$X = \mathbf{e}_0 - 0.858\mathbf{e}_1 + 1.29\mathbf{e}_2 + 1.55\mathbf{e}_3 + 2.4\mathbf{e}_\infty \neq X_5^3.$$

Se fizermos

$$R_5 = \cos\left(\frac{\lambda_5}{2}\right) + Z_5^* \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda_5}{2}\right)$$

na mesma operação, acharemos o ponto X_5^3 . Então adotaremos o sinal positivo para o rotor. Para o arco $X_5^2 X_5^4$ podemos fazer $R_5 X_5^2 \tilde{R}_5$, com $-\lambda$ ou $\tilde{R}_5 X_5^2 R_5$, com λ . Por exemplo, usando $\lambda = 1.453$ em $\tilde{R}_5 X_5^2 R_5$ vamos obter o ponto X_5^4 , como era de se esperar.

9. A distância $d_{1,5}$ é de poda e, portanto, deve ser utilizada para testar os arcos que dispomos e verificar que partes deles podem ser realmente utilizados no posicionamento do quinto átomo. Para isto, devemos fazer a interseção da esfera $S(X_1, \underline{d}_{1,5})$ com C_5 e da esfera $S(X_1, \bar{d}_{1,5})$ com C_5 :

(a) Interseção: $\underline{Pp}_{1,5} = S(X_1, \underline{d}_{1,5}) \wedge C_5 = -1.193\mathbf{e}_{012} - 1.053\mathbf{e}_{013} - 3.283\mathbf{e}_{01\infty} + 0.608\mathbf{e}_{023} - 0.491\mathbf{e}_{02\infty} - 2.108\mathbf{e}_{03\infty} + 3.580\mathbf{e}_{12\infty} + 3.162\mathbf{e}_{13\infty} - 1.826\mathbf{e}_{23\infty}$, da qual se tiram os pontos:

$$X_{15}^1 = \mathbf{e}_0 - 0.673\mathbf{e}_1 + 2.299\mathbf{e}_2 + 0.513\mathbf{e}_3 + 3.001\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{15}^2 = \mathbf{e}_0 - 1.260\mathbf{e}_1 + 1.283\mathbf{e}_2 + 1.664\mathbf{e}_3 + 3.001\mathbf{e}_\infty.$$

(b) Interseção: $\overline{Pp}_{1,5} = S(X_1, \bar{d}_{1,5}) \wedge C_5 = -1.193\mathbf{e}_{012} - 1.054\mathbf{e}_{013} - 3.330\mathbf{e}_{01\infty} + 0.608\mathbf{e}_{023} - 0.663\mathbf{e}_{02\infty} - 2.284\mathbf{e}_{03\infty} + 3.879\mathbf{e}_{12\infty} + 3.425\mathbf{e}_{13\infty} - 1.978\mathbf{e}_{23\infty}$, da qual se tiram os pontos:

$$X_{15}^3 = \mathbf{e}_0 - 0.795\mathbf{e}_1 + 2.379\mathbf{e}_2 + 0.470\mathbf{e}_3 + 3.251\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{15}^4 = \mathbf{e}_0 - 1.407\mathbf{e}_1 + 1.317\mathbf{e}_2 + 1.670\mathbf{e}_3 + 3.251\mathbf{e}_\infty.$$

Os pontos X_{15}^1 e X_{15}^3 determinam, em C_5 , o arco \mathcal{A}_{151} e os pontos X_{15}^2 e X_{15}^4 , o arco \mathcal{A}_{152} . Precisamos, agora, verificar a intersecção entre estes arcos e os arcos \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{252} . Onde houver intersecção, o quinto átomo pode ser localizado. Caso contrário, temos que eliminar a(s) região(s) onde esta não ocorre.

10. Para verificarmos se há intersecção entre os arcos, vamos testar inicialmente se existe alguma entre os arcos \mathcal{A}_{251} e \mathcal{A}_{151} . Para isto devemos ver qual ângulo λ deve compor o rotor R_5 para localmos o ponto X_{15}^1 e, depois, qual ângulo λ deve compor o rotor R_5 para localmos o ponto X_{15}^3 . Feito isto, poderemos verificar se há ou não intersecção entre tais arcos.

- De posse do sistema 5.4.16 e fazendo $X = X_{15}^1$, $Z = Z_5^*$ e $P = X_{15}^1$, obtemos os seguintes resultados: $-[X \cdot (ZPZ)] = -1.39$, $-2[X \cdot (P \cdot Z)] = 0.796$ (estamos usando o rotor com o sinal positivo), $X \cdot P = -0.114$ e $-(P \cdot X)/[P \cdot (ZPZ)] = 0.0762$. Com isto, montamos o sistema:

$$\begin{cases} -1.39 \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) + 0.796 \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.114 = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.0796. \end{cases} \quad (6.3.1)$$

- Na primeira equação do sistema obtemos $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.2863 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = 0.2788 \Rightarrow \lambda = 0.558$ (aqui consideramos $\Delta \rightarrow 0$).

- Na segunda equação obtivemos $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm 0.276 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = \pm 0.276 \Rightarrow \lambda = \pm 0.559$.

- Então, utilizando o valor de $\lambda = 0.559$, solução do sistema, realmente vamos obter o ponto X_{15}^1 na operação $R_5 X_5^1 \tilde{R}_5$, confirmando o resultado.

- Para verificar qual o valor do ângulo que fornecerá o ponto X_{15}^3 , façamos, no sistema 5.4.16: $X = X_{15}^3$, $Z = Z_5^*$ e $P = X_5^1$, e obteremos o sistema:

$$\begin{cases} -1.31 \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) + \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.193 = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.129. \end{cases} \quad (6.3.2)$$

- Na primeira equação do sistema obtemos $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.3817 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = 0.3646 \Rightarrow \lambda = 0.7293$ (aqui consideramos $\Delta \rightarrow 0$).

- Na segunda equação obtivemos $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm 0.3592 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = \pm 0.3674 \Rightarrow \lambda = \pm 0.7347$.

- Então, utilizando o valor de $\lambda = 0.734$, solução do sistema, realmente vamos obter o ponto X_{15}^3 na operação $R_5 X_5^1 \tilde{R}_5$, confirmando o resultado.

- Concluimos que para “percorrer” o arco \mathcal{A}_{151} utilizando o sistema 5.4.16, devemos ter $0.559 \leq \lambda_5 \leq 0.734$, o que significa haver intersecção entre \mathcal{A}_{151} e \mathcal{A}_{251} , que é delimitado por $0 \leq \lambda_5 \leq 1.453$. A intersecção, neste caso, é o próprio arco \mathcal{A}_{151} . Utilizando o nosso algoritmo, teríamos: $\mathcal{A}_0 \in [0, 1.453]$ e $\mathcal{P}_1 \in [0.559, 0.734]$ e então $\lambda_L = 0.559 < \lambda_U = 0.734$ e, portanto, $\mathcal{A}_1 = [0.559, 0.734] = \mathcal{A}_{151}$. Vide figura 6.3.

11. Devemos, agora, verificar se existe intersecção entre os arcos \mathcal{A}_{252} e \mathcal{A}_{152} . Para isto devemos ver qual ângulo λ deve compor o rotor R_5 para locarmos o ponto X_{15}^2 e, depois, qual ângulo λ deve compor o rotor R_5 para locarmos o ponto X_{15}^4 . Feito isto, poderemos verificar se há ou não intersecção entre tais arcos.

- Aqui utilizaremos a forma $\tilde{R}X_5^2R$. De posse do sistema 5.4.16 e fazendo $X = X_{15}^2$, $Z = Z_5^*$ e $P = X_5^2$, obtemos os seguintes resultados: $-[X \cdot (ZPZ)] = -1.47$, $2[X \cdot (P \cdot Z)] = -0.429$ (estamos usando o rotor com o sinal positivo), $X \cdot P = -0.0314$ e $-(P \cdot X)/[P \cdot (ZPZ)] = 0.0209$. Com isto, montamos o sistema:

$$\begin{cases} -1.47 \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.429 \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.0314 = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.0209. \end{cases} \quad (6.3.3)$$

- Na primeira equação do sistema obtemos $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -0.1459 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = -0.1449 \Rightarrow \lambda = -0.2898$ (aqui consideramos $\Delta \rightarrow 0$).

- Na segunda equação obtivemos $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm 0.1446 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = \pm 0.1451 \Rightarrow \lambda = \pm 0.29$.
 - Então, utilizando o valor de $\lambda = -0.29$, solução do sistema, realmente vamos obter o ponto X_{15}^2 na operação $\tilde{R}_5 X_5^1 R_5$, confirmando o resultado.

- Para verificar qual o valor do ângulo que fornecerá o ponto X_{15}^4 , façamos, no sistema 5.4.16: $X = X_{15}^4$, $Z = Z_5^*$ e $P = X_5^1$, e obteremos o sistema:

$$\begin{cases} -1.49 \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.174 \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.00504 = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.00336. \end{cases} \quad (6.3.4)$$

- Na primeira equação do sistema obtemos $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -0.0636$ e $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -0.0532$ obtendo os ângulos $\lambda_1 = -0.127$ e $\lambda_2 = -0.1063$, respectivamente.

- Na segunda equação obtivemos $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm 0.058 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = \pm 0.058 \Rightarrow \lambda = \pm 0.1160$.
 - Então, utilizando o valor de $\lambda = -0.11$, solução do sistema, realmente vamos obter o ponto X_{15}^4 na operação $\tilde{R}_5 X_5^1 R_5$, confirmando o resultado.

- Concluimos que para “percorrer” o arco \mathcal{A}_{152} utilizando 5.4.16, devemos ter $-0.29 \leq \lambda_5 \leq -0.11$, o que significa não haver intersecção entre \mathcal{A}_{152} e \mathcal{A}_{252} , que é delimitado por $0 \leq \lambda_5 \leq 1.453$. Utilizando o nosso algoritmo, teríamos: $\mathcal{A}_0 \in [0, 1.453]$ e $\mathcal{P}_1 \in [-0.29, -0.11]$ e então $\lambda_L = 0 > \lambda_U = -0.11$ significando não haver intersecção, portanto $\mathcal{A}_0 = \mathcal{A}_{252}$ deve ser eliminado.

12. A figura 6.3 retrata a situação de intersecção entre os arcos em C_5 . Concluimos que o ponto X_5 deve ser localizado dentro do arco \mathcal{A}_{151} , por ser esta a região em C_5 que atende simultaneamente às distâncias $d_{2,5}$ e $d_{1,5}$. Entre outras palavras, devemos adotar $0.559 \leq \lambda_5 \leq 0.734$

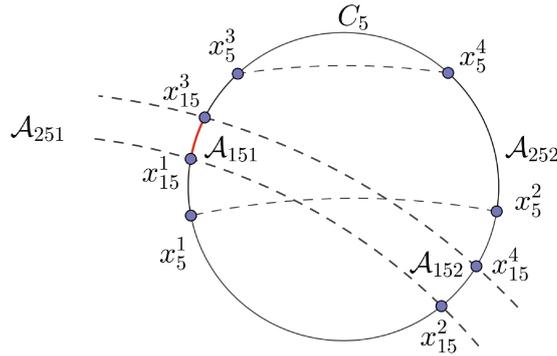


Figura 6.3: Interseção de arcos em C_5 .

13. Escolhendo $\lambda_5 = 0.64$, e aplicando $x = R_5 X_5^1 \tilde{R}_5$, teremos:
 $X_5 = \mathbf{e}_0 - 0.728\mathbf{e}_1 + 2.337\mathbf{e}_2 + 0.491\mathbf{e}_3 + 3.115\mathbf{e}_\infty$, ou seja, $\mathbf{x}_5 = (-0.728, 2.337, 0.491)$.
 Este ponto atende às distâncias $d_{2,5}$ e $d_{1,5}$. Com efeito, para este ponto teremos:
 $d_{2,5} = 2.403 \in [2.2, 2.6]$ e $d_{1,5} = 2.496 \in [2.45, 2.55]$.

6.3.4 Posicionamento do sexto átomo

Para a escolha deste ponto vamos utilizar o método que foi visto em 5.4.10, 5.4.11 e 5.4.12, ou seja, vamos considerar que o quinto átomo ocupa uma posição que pode ser mudada, utilizando o rotor R_5 , ou seja, uma posição móvel.

1. Começamos por considerar as esferas $S_{4,6}$ e $S_{5,6}$, tendo em vista que o sexto átomo está sobre a intersecção de ambas.
 - A esfera $S_{4,6}$ tem seu centro sobre o ponto X_4 e o raio é dado pela distância entre X_4 e X_6 , que é exata, ou seja, $d_{4,6} = \sqrt{3}$. O ponto X_4 não está sujeito à ação de rotor. Temos, portanto, $S_{4,6} = \mathbf{e}_0 - 1.311\mathbf{e}_1 + 1.552\mathbf{e}_2 + 0.702\mathbf{e}_3 + 0.811\mathbf{e}_\infty$.
 - Consideremos a esfera $S_{5,6}$ inicialmente centrada em X_5^1 . Logo, teremos: $S_{5,6} = \mathbf{e}_0 - 0.409\mathbf{e}_1 + 1.980\mathbf{e}_2 + 0.753\mathbf{e}_3 + 1.829\mathbf{e}_\infty$.
 - A intersecção das esferas $S_{4,6}$ e $S_{5,6}$ determina a circunferência $C_6 = S_{4,6} \wedge S_{5,6}$, onde o sexto átomo será encontrado, na posição X_6 .
2. A distância entre os terceiro e sexto átomos é intervalar. Neste exemplo temos $d_{3,6} \in [2.4, 2.6]$. Considerando as esferas com centro em X_3 com raios $\underline{d}_{3,6}$ e $\overline{d}_{3,6}$ teremos respectivamente as esferas $\underline{S}_{3,6}$ e $\overline{S}_{3,6}$. Temos, portanto:
 - $\underline{S}_{3,6} = \mathbf{e}_0 - 1.5\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2 - 1.38\mathbf{e}_\infty$ e $\overline{S}_{3,6} = \mathbf{e}_0 - 1.5\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2 - 1.88\mathbf{e}_\infty$
3. A intersecção das esferas $\underline{S}_{3,6}$ e $\overline{S}_{3,6}$ com a circunferência C_6 geram dois pares de pontos, $\underline{Pp}_{3,6}$ e $\overline{Pp}_{3,6}$, respectivamente. Estes pontos determinam os arcos, sobre C_6 , onde X_6 está localizado. Por exemplo, tomando o par de pontos $\underline{Pp}_{3,6} = \underline{S}_{3,6} \wedge S_{4,6} \wedge S_{5,6}$, teremos:
 $\underline{Pp}_{3,6} = -0.538\mathbf{e}_{012} - 0.624\mathbf{e}_{013} - 1.784\mathbf{e}_{01\infty} - 0.266\mathbf{e}_{023} - 0.240\mathbf{e}_{02\infty} + 0.604\mathbf{e}_{03\infty} + 0.939\mathbf{e}_{123} + 2.649\mathbf{e}_{12\infty} - 0.044\mathbf{e}_{13\infty} + 0.89\mathbf{e}_{23\infty}$.

4. Do par de pontos $\underline{Pp}_{3,6}$ podemos extraímos os pontos
 $X_6^1 = \mathbf{e}_0 - 0.266\mathbf{e}_1 + 2.89\mathbf{e}_2 + 0.366\mathbf{e}_3 + 4.28\mathbf{e}_\infty$ e $X_6^2 = \mathbf{e}_0 + 0.259\mathbf{e}_1 + 1.66\mathbf{e}_2 + 1.43\mathbf{e}_3 + 2.43\mathbf{e}_\infty$.
 Já do par de pontos $\overline{Pp}_{3,6}$ podemos extraímos os pontos
 $X_6^3 = \mathbf{e}_0 - 0.323\mathbf{e}_1 + 2.93\mathbf{e}_2 + 1.06\mathbf{e}_3 + 4.9\mathbf{e}_\infty$ e $X_6^4 = \mathbf{e}_0 - 0.034\mathbf{e}_1 + 2.25\mathbf{e}_2 + 1.64\mathbf{e}_3 + 3.88\mathbf{e}_\infty$.
5. A posição local de X_6 vai depender da rotação sofrida dentro do arco em C_6 e provocada por $R_6 = \cos\left(\frac{\lambda_6}{2}\right) + Z_6^* \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda_6}{2}\right)$, onde $Z_6 = R_5(X_4 \wedge X_5 \wedge \mathbf{e}_\infty)\tilde{R}_5$ e z_6^* é o seu dual. Para definir o sinal do rotor foi efetuado o teste. Temos, portanto:
 $Z_6^* = 0.251\mathbf{e}_{12} + 0.965\mathbf{e}_{13} + 1.067\mathbf{e}_{1\infty} - 0.071\mathbf{e}_{23} + 0.279\mathbf{e}_{2\infty} + 1.376\mathbf{e}_{3\infty}$.
6. Determinamos, então, a posição de X_6 como: $X_6(\lambda_5, \lambda_6) = R_6 R_5 X_6^1 \tilde{R}_5 \tilde{R}_6$. Para este exemplo devemos ter $0 \leq \lambda_6 \leq \phi_6 = 0.823$, que é obtido de forma análoga ao que vimos para a obtenção de ϕ_5 . Tomando o valor $\lambda_6 = 0.0$ e mantendo o que tínhamos antes, $\lambda_5 = 0.64$, vamos obter o ponto:
 $X_6(0.64, 0.0) = \mathbf{e}_0 - 1.14\mathbf{e}_1 + 3.22\mathbf{e}_2 + 0.27\mathbf{e}_3 + 5.8\mathbf{e}_\infty$, ou seja, $\mathbf{x}_6 = (-1.14, 3.22, 0.27)$.

6.3.5 Posicionamento do sétimo átomo.

Devemos considerar, para determinarmos a posição do sétimo átomo, que a distância $d_{4,7}$ é intervalar, sugerindo a existência de dois arcos de busca em C_7 , onde o ponto pode ser localizado. Além disso, estão disponíveis as distâncias $d_{1,7}$, $d_{2,7}$ e $d_{3,7}$, de poda, que servirão para ratificar ou retificar posições dentro dos arcos de busca. Vamos considerar, agora, que os pontos anteriores ao sétimos já estão “realizados”, ou seja, estão em pontos já fixados.

1. Começamos por considerar as esferas $S_{5,7}$ e $S_{6,7}$, tendo em vista que o sétimo átomo está sobre a intersecção de ambas.
 - A esfera $S_{5,7}$ tem seu centro sobre o ponto X_5 , e o raio é dado pela distância entre X_5 e X_7 , que é exata, ou seja, $d_{5,7} = \sqrt{3}$. A esfera $S_{6,7}$ tem o seu centro sobre X_6 e raio $d_{6,7} = 1$.
 - O ponto estará localizado sobre a circunferência: $C_7 = S_{5,7} \wedge S_{6,7}$.
2. Os arcos em C_7 são determinados pelas interseções desta com as esferas com centro em X_4 . Como a distância $d_{4,7} \in [2.2, 2.4]$, a esfera $\underline{S}_{4,7}$, de raio 2.2 e $\overline{S}_{4,7}$, de raio 2.4 são as limitantes. Para a menor distância, $\underline{d}_{4,7} = 2.2$ temos o par de pontos $\underline{Pp}_{4,7} = \underline{S}_{4,7} \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$.
3. Tendo o par de pontos $\underline{Pp}_{4,7}$ extraímos os pontos:
 $X_7^1 = \mathbf{e}_0 - 1.68\mathbf{e}_1 + 3.71\mathbf{e}_2 + 0.955\mathbf{e}_3 + 8.74\mathbf{e}_\infty$, e
 $X_7^2 = \mathbf{e}_0 - 1.71\mathbf{e}_1 + 3.32\mathbf{e}_2 - 0.549\mathbf{e}_3 + 7.11\mathbf{e}_\infty$.
4. Para a maior distância, $\overline{d}_{4,7} = 2.4$, temos o par de pontos $\overline{Pp}_{4,7} = \overline{S}_{4,7} \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$.
5. Tendo o par de pontos $\overline{Pp}_{4,7}$ extraímos os pontos:
 $X_7^3 = \mathbf{e}_0 - 1.2\mathbf{e}_1 + 3.93\mathbf{e}_2 + 0.967\mathbf{e}_3 + 8.93\mathbf{e}_\infty$, e
 $X_7^4 = \mathbf{e}_0 - 1.22\mathbf{e}_1 + 3.51\mathbf{e}_2 - 0.683\mathbf{e}_3 + 7.14\mathbf{e}_\infty$.

Temos, com os pontos X_7^1 e X_7^3 , o arco \mathcal{A}_{471} e com os pontos X_7^2 e X_7^4 , o arco \mathcal{A}_{472} , perfeitamente determinados.

6. Ângulo ϕ_7 : Devemos, agora, achar o ângulo ϕ_7 , que delimita os arcos. Isto será feito indiretamente, calculando-se inicialmente o ângulo inscrito, $\frac{\phi_7}{2}$, utilizando para isto o produto interno entre os vetores $\mathbf{u}_7 = X_7^1 \vec{X}_7^2$ e $\mathbf{v}_7 = X_7^1 \vec{X}_7^4$. Temos, com isso, o valor $\phi_7 = 0.63$ radianos.
7. Eixo Z_7 : O eixo que servirá para o rotor será dado pela expressão $X_5 \wedge X_6 \wedge \mathbf{e}_\infty$, já que passa pela posição dos dois átomos anteriores. Temos, portanto:
 $Z_7^* = +0.221\mathbf{e}_{12} + 0.883\mathbf{e}_{13} + 0.95\mathbf{e}_{1\infty} + 0.412\mathbf{e}_{23} + 0.363\mathbf{e}_{2\infty} - 0.32\mathbf{e}_{3\infty}$.
8. Realizando o teste do rotor semelhante ao que fizemos para a determinação do rotor do quinto átomo, chegamos à conclusão que Rotor R_7 deverá, também, ter o sinal positivo. Portanto, o rotor R_7 é expresso como

$$R_7 = \cos\left(\frac{\lambda_7}{2}\right) + Z_7^* \operatorname{sen}\left(\frac{\lambda_7}{2}\right)$$

e vai agir a partir de qualquer dos pontos dos arcos. Podemos, por exemplo, fazer $R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$, para o arco \mathcal{A}_{471} ou $\tilde{R}_7 X_7^2 R_7$ para o arco \mathcal{A}_{472} ¹. O ângulo λ_7 , $0 \leq \lambda_7 \leq 0.63$, é quem vai definir a amplitude da rotação, a partir dos pontos X_7^1 ou X_7^2 , respectivamente. Se tomarmos $\lambda_7 = 0$, por exemplo, e fizermos $x = R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$ teremos $x = X_7^1$, e se fizermos $x = R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$ com $\lambda_7 = 0.63$, obteremos $X = X_7^3$, como era de se esperar.

9. **Primeira distância de poda:** A distância $d_{1,7} \in [4.15, 4.22]$ é de poda e devemos verificar em que pontos as esferas $S(X_1, \underline{d}_{1,7})$ e $S(X_1, \bar{d}_{1,7})$ interceptam a circunferência $C_7 = S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, onde deve estar o sétimo átomo.

- (a) Da interseção $\underline{P}p_{1,7} = S(X_1, \underline{d}_{1,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, se tiram os pontos:

$$X_{17}^1 = \mathbf{e}_0 - 1.82\mathbf{e}_1 + 3.62\mathbf{e}_2 + 0.884\mathbf{e}_3 + 8.61\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{17}^2 = \mathbf{e}_0 - 0.659\mathbf{e}_1 + 4.07\mathbf{e}_2 + 0.493\mathbf{e}_3 + 8.61\mathbf{e}_\infty.$$

- (b) Da Interseção: $\overline{P}p_{1,7} = S(X_1, \bar{d}_{1,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, se tiram os pontos:

$$X_{17}^3 = \mathbf{e}_0 - 1.35\mathbf{e}_1 + 3.87\mathbf{e}_2 + 0.999\mathbf{e}_3 + 8.9\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{17}^4 = \mathbf{e}_0 - 1.02\mathbf{e}_1 + 4\mathbf{e}_2 + 0.887\mathbf{e}_3 + 8.9\mathbf{e}_\infty.$$

Os pontos X_{17}^1 e X_{17}^3 determinam, em C_7 , o arco \mathcal{A}_{171} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos -0.2 e 0.42 radianos, ou seja, o arco \mathcal{A}_{171} é obtido pelo intervalo angular $[-0.2, 0.42]$, aplicando em $X = R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$. Logo, temos:

$$\mathcal{P}_1 \in [-0.2, 0.42] \tag{6.3.5}$$

Por exemplo, para achar o ponto X_{17}^1 o sistema correspondente é:

$$\begin{cases} -1.48 \operatorname{tg}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.299 \operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) - 0.0151 = 0 \\ \operatorname{sen}^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) = 0.0101. \end{cases} \tag{6.3.6}$$

¹Poderíamos utilizar, também, $R_7 X_7^2 \tilde{R}_7$, utilizando $-\lambda$.

- Na primeira equação do sistema obtemos $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -0.102$ e $\operatorname{tg}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = -0.100$ obtendo os ângulos $\lambda_1 = -0.2033$ e $\lambda_2 = -0.1993$, respectivamente.
- Na segunda equação obtivemos $\operatorname{sen}\left(\frac{\lambda}{2}\right) = \pm 0.1005 \Rightarrow \frac{\lambda}{2} = \pm 0.1007 \Rightarrow \lambda = \pm 0.2013$.
- Então, utilizando o valor de $\lambda = -0.2$, solução do sistema, realmente vamos obter o ponto X_{17}^1 na operação $R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$, confirmando o resultado.

Os pontos X_{17}^2 e X_{17}^4 determinam o arco \mathcal{A}_{172} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos 2.55 e 3.19 radianos respectivamente, ou seja, o arco \mathcal{A}_{172} é obtido pelo intervalo angular $[2.55, 3.19]$, aplicando em $X = \tilde{R}_7 X_7^2 R_7$. Aqui, como não existe intersecção entre o arco $\mathcal{A}_{172} \in [2.55, 3.19]$ e o arco $\mathcal{A}_{472} \in [0, 0.63]$, este já pode ser eliminado por não atender à primeira distância de poda.

10. **Segunda distância de poda:** A distância $d_{2,7} \in [3.95, 4.03]$ é de poda e devemos verificar em que pontos as esferas $S(X_2, \underline{d}_{2,7})$ e $S(X_2, \bar{d}_{2,7})$ interceptam a circunferência $C_7 = S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, onde deve estar o sétimo átomo.

- (a) Da interseção $\underline{P}p_{2,7} = S(X_2, \underline{d}_{2,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, tiram-se os pontos:

$$X_{27}^1 = \mathbf{e}_0 - 1.53\mathbf{e}_1 + 3.79\mathbf{e}_2 + 0.995\mathbf{e}_3 + 8.83\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{27}^2 = \mathbf{e}_0 - 0.599\mathbf{e}_1 + 3.93\mathbf{e}_2 - 0.188\mathbf{e}_3 + 7.9\mathbf{e}_\infty.$$

- (b) Da Interseção: $\bar{P}p_{2,7} = S(X_2, \bar{d}_{2,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, são tirados os pontos:

$$X_{27}^3 = \mathbf{e}_0 - 1.3\mathbf{e}_1 + 3.89\mathbf{e}_2 + 0.991\mathbf{e}_3 + 8.92\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{27}^4 = \mathbf{e}_0 - 0.558\mathbf{e}_1 + 4.01\mathbf{e}_2 + 0.0694\mathbf{e}_3 + 8.18\mathbf{e}_\infty.$$

Os pontos X_{27}^1 e X_{27}^3 determinam, em C_7 , o arco \mathcal{A}_{271} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos 0.2 e 0.5 radianos, ou seja, o arco \mathcal{A}_{271} é obtido pelo intervalo angular $[0.2, 0.5]$, aplicando em $X = R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$. Logo, temos:

$$\mathcal{P}_2 \in [0.2, 0.5] \tag{6.3.7}$$

Os pontos X_{27}^2 e X_{27}^4 determinam o arco \mathcal{A}_{272} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos 1.72 e 2.04 radianos respectivamente, ou seja, o arco \mathcal{A}_{272} é obtido pelo intervalo angular $[1.72, 2.04]$, aplicando em $X = \tilde{R}_7 X_7^2 R_7$. Aqui não há intersecção entre os arcos $\mathcal{A}_{272} \in [1.72, 2.04]$ e o arco $\mathcal{A}_{472} \in [0, 0.63]$, ratificando a eliminação do arco \mathcal{A}_{472} .

11. **Terceira distância de poda:** A distância $d_{3,7} \in [3.12, 3.28]$ é de poda e devemos verificar em que pontos as esferas $S(X_3, \underline{d}_{3,7})$ e $S(X_3, \bar{d}_{3,7})$ interceptam a circunferência $C_7 = S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, onde deve estar o sétimo átomo.

- (a) Da interseção $\underline{P}p_{3,7} = S(X_3, \underline{d}_{3,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, se tiram os pontos:

$$X_{37}^1 = \mathbf{e}_0 - 1.46\mathbf{e}_1 + 3.82\mathbf{e}_2 + 1\mathbf{e}_3 + 8.87\mathbf{e}_\infty \text{ e}$$

$$X_{37}^2 = \mathbf{e}_0 - 0.672\mathbf{e}_1 + 3.85\mathbf{e}_2 - 0.349\mathbf{e}_3 + 7.71\mathbf{e}_\infty.$$

(b) Da Interseção: $\overline{Pp}_{3,7} = S(X_3, \overline{d}_{3,7}) \wedge S_{5,7} \wedge S_{6,7}$, se tiram os pontos:

$$\begin{aligned} X_{37}^3 &= \mathbf{e}_0 - 1.05\mathbf{e}_1 + 3.99\mathbf{e}_2 + 0.906\mathbf{e}_3 + 8.91\mathbf{e}_\infty \text{ e} \\ X_{37}^4 &= \mathbf{e}_0 - 0.558\mathbf{e}_1 + 4.01\mathbf{e}_2 + 0.0694\mathbf{e}_3 + 8.19\mathbf{e}_\infty. \end{aligned}$$

Os pontos X_{37}^1 e X_{37}^3 determinam, em C_7 , o arco \mathcal{A}_{371} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos 0.3 e 0.82 radianos respectivamente, ou seja, o arco \mathcal{A}_{371} é obtido pelo intervalo angular $[0.3, 0.82]$, aplicando em $X = R_7 X_7^1 \tilde{R}_7$. Logo, temos:

$$\mathcal{P}_3 \in [0.3, 0.82] \quad (6.3.8)$$

Os pontos X_{37}^2 e X_{37}^4 , determinam o arco \mathcal{A}_{372} . Utilizando as coordenadas destes pontos assim obtidos, e utilizando a o sistema 5.4.16, chegamos aos ângulos 1.50 e 2.04 radianos respectivamente, ou seja, o arco \mathcal{A}_{372} é obtido pelo intervalo angular $[1.50, 2.04]$, aplicando em $X = \tilde{R}_7 X_7^2 R_7$. Aqui não há interseção entre os arcos $\mathcal{A}_{372} \in [1.50, 2.04]$ e o arco $\mathcal{A}_{472} \in [0, 0.63]$, corroborando o que já havia sido visto anteriormente.

12. **Redução do arco:** Vimos que o arco \mathcal{A}_{472} foi eliminado. Entretanto o arco $\mathcal{A}_{471} \in [0, 0.63]$ tem interseção com $P_1 \in [-0.2, 0.42]$, $P_2 \in [0.2, 0.5]$ e $P_3 \in [0.3, 0.82]$, ressaltando que os valores menor e maior dos arcos podem ser obtidos no sistema 5.4.16. Agora, para saber se há interseção entres os arcos e, caso haja, qual a redução que deve ser obedecida, recorreremos ao nosso algoritmo. Comparando os valores menores de cada arco, 0, -0.2 , 0.2 e 0.3, concluímos que o maior deles é $\lambda_L = 0.3$. Agora, comparando os valores maiores de cada arco, 0.63, 0.42, 0.5 e 0.82, concluímos que o menor deles é $\lambda_U = 0.42$. Como $\lambda_L < \lambda_U$, concluímos que há interseção entre todos os arcos e que para obtermos a posição do sétimo arco devemos adotar um ângulo que esteja no intervalo $\mathcal{A}_3 = [\lambda_L, \lambda_U] = [0.3, 0.42]$.
13. **Escolha do sétimo ponto** Devemos escolher o ponto onde locar o sétimo ponto atribuindo um valor para $\lambda \in [0.3, 0.42]$ e aplicando em 5.4.16. Se escolhermos, por exemplo, $\lambda = 0.4$, obteremos o ponto $X_7 = \mathbf{e}_0 - 1.38\mathbf{e}_1 + 3.86\mathbf{e}_2 + 1\mathbf{e}_3 + 8.9\mathbf{e}_\infty$, ou seja, $\mathbf{x}_7 = (-1.38, 3.86, 1) \in \mathbb{R}^3$.

Coordenadas dos pontos

Finalmente, as coordenadas dos pontos localizados foram:

- $\mathbf{x}_1 = (0, 0, 0)$;
- $\mathbf{x}_2 = (-1, 0, 0)$;
- $\mathbf{x}_3 = (-1.5, 0.866, 0)$;
- $\mathbf{x}_4 = (-1.311, 1.552, 0.702)$;
- $\mathbf{x}_5 = (-0.728, 2.337, 0.491)$;
- $\mathbf{x}_6 = (-1.14, 3.22, 0.27)$; e

- $\mathbf{x}_7 = (-1.38, 3.86, 1)$.

Tomados os pontos acima, podemos verificar que as distâncias entre eles são:

	1	2	3	4	5	6	7
1	*	1	$\sqrt{3}$	2.15	2.5	3.43	4.22
2	1	*	1	$\sqrt{3}$	2.4	3.23	4
3	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	2.4	3.16
4	2.15	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	2.33
5	2.5	2.4	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$
6	3.43	3.23	2.4	$\sqrt{3}$	1	*	1
7	4.22	4	3.16	2.33	$\sqrt{3}$	1	*

Estes pontos atendem a todas distâncias da tabela 6.2.1, que rerepresentamos abaixo, para comparação:

	1	2	3	4	5	6	7
1	*	1	$\sqrt{3}$	2.15	[2.45,2.55]	*	[4.15,4.22]
2	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.2, 2.6]	*	[3.95,4.03]
3	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.4, 2.6]	[3.12,3.28]
4	2.15	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$	[2.2,2.4]
5	[2.45,2.55]	[2.2, 2.6]	$\sqrt{3}$	1	*	1	$\sqrt{3}$
6	*	*	[2.4, 2.6]	$\sqrt{3}$	1	*	1
7	[4.15,4.22]	[3.95,4.03]	[3.12,3.28]	[2.2,2.4]	$\sqrt{3}$	1	*

6.3.6 Considerações Finais

Procuramos apresentar um exemplo numérico abrangente, dentro do que foi apresentado, e nele pudemos observar:

- 1) Os três primeiros átomos já “realizados”, atendendo às exigências do PDGDM.
- 2) A distância $d_{1,4}$, por ser precisa, deixa exatamente dois pontos possíveis para o quarto átomo, dos quais se pode escolher um.
- 3) O quinto átomo dispõe de arcos em C_5 , pois $d_{2,5}$ é intervalar. Possui também uma distância de poda. Como os quatro átomos anteriores a ele estão fixados em suas posições, usamos o método aqui apresentado: sistema de equações 5.4.16 e algoritmo.
- 4) O sexto átomo possui uma átomo anterior móvel - o quinto - e então apresentamos o método de solução utilizando associação de rotores e eixo móvel, apresentado no artigo [3], e que utiliza as fórmulas 5.4.11 e 5.4.12.
- 5) O sétimo átomo possui três distâncias de poda. Para resolver, consideramos que todos os átomos anteriores já estão em posições fixadas, ou seja, já estão “realizados”, e então utilizamos o sistema de equações 5.4.16 e algoritmo.

Resolver distâncias de poda, estando os átomos anteriores móveis, é um desafio para o futuro.

Capítulo 7

Conclusão

Para o Problema Discretizável de Geometria de Distâncias Moleculares, PDGDM, existe um método combinatório, chamado Branch-and-Prune (BP), que resolve o problema baseado em uma ordem nos vértice do grafo do PDGDM e na interseção de esferas com centros definidos pelas posições de vértices anteriores (calculados pelo BP) e raios dados pelas distâncias que ligam esses vértices àquele cuja posição deve ser calculada.

Nas instâncias do PDGDM relacionadas à determinação de estruturas de proteínas, algumas das distâncias são fornecidas por experimentos de Ressonância Magnética Nuclear, RMN, o que implica que valores precisos (assumidos nas hipóteses do PDGDM) devem ser substituídos por intervalos de números reais. A fim de manter a abordagem discreta deste caso, a estratégia clássica precisa considerar amostras nos intervalos de distâncias. Entretanto, dependendo do número de amostras, nenhuma solução é encontrada ou o espaço de busca aumenta exponencialmente.

Neste trabalho, mostramos como a Álgebra Geométrica Conforme pode representar o espaço de busca do problema, incluindo distâncias intervalares, sem a necessidade do processo de amostragem, evitando as desvantagem decorrentes: aumento exponencial do espaço de busca e possível perda da solução. O método apresentado descreve todos os pontos de um arco de maneira contínua, garantindo que uma solução seja encontrada.

Além disso, também investigamos como essa nova ferramenta pode ajudar a fase de poda do algoritmo BP, a fim de gerar soluções para o problema. Este processo permite que uma parte de um arco que seja não factível de englobar uma solução seja eliminada ou mesmo todo um arco seja eliminado na busca de soluções para o problema.

Como principal extensão deste trabalho, destacamos o estudo da Álgebra Geométrica Conforme para também descrever soluções do PDGDM quando os centros das esferas associadas não estão fixos. Com pontos móveis, são geradas expressões com as quais ainda não conseguimos lidar de forma adequada e eficiente.

Referências Bibliográficas

- [1] ALVES, R., DE SOUZA, C., AND LAVOR, C. Advances on the geometric algebra approach to the discretizable molecular distance geometry problem (dmdgp). In *Proceedings of the 33rd Computer Graphics International* (2016), ACM, pp. 85–88.
- [2] ALVES, R., AND LAVOR, C. Geometric algebra to model uncertainties in the discretizable molecular distance geometry problem. *Advances in Applied Clifford Algebras* 27, 1 (2017), 439–452.
- [3] ALVES, R., LAVOR, C., SOUZA, C., AND SOUZA, M. Clifford algebra and discretizable distance geometry. *Mathematical Methods in the Applied Sciences* (2017).
- [4] BAYRO-CORROCHANO, E., AND FALCÓN, L. E. Geometric algebra of points, lines, planes and spheres for computer vision and robotics. *Robotica* 23 (2005), 755–770.
- [5] BILLINGE, S., DUXBURY, P., GONÇALVES, D., LAVOR, C., AND MUCHERINO, A. Assigned and unassigned distance geometry: applications to biological molecules and nanostructures. 337–376.
- [6] BLUMENTHAL, L. M. *Theory and applications of distance geometry*. Chelsea New York, 1970.
- [7] BOLDRINI, J. L., COSTA, S. I., FIGUEREDO, V., AND WETZLER, H. G. *Álgebra linear*. São Paulo: Harper & Row, 1980.
- [8] CAMARGO, I. D., AND BOULOS, P. Geometria analítica: um tratamento vetorial. 3ª edição. *Renovada e ampliada—São Paulo: Prentice Hall* (2005).
- [9] CASSIOLI, A., GÜNLÜK, O., LAVOR, C., AND LIBERTI, L. Discretization vertex orders in distance geometry. *Discrete Applied Mathematics* 197 (2015), 27–41.
- [10] CROWE, M. J. A history of vector analysis. *University of Louisville* (2002).
- [11] DE CAMARGO, V. S. *Álgebra Geométrica Conforme e Geometria das Distâncias*. Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas, IMECC - Campinas, 2015.
- [12] DE OLIVEIRA ALVES, R. S. *Álgebra de Clifford Aplicada ao Cálculo de Estruturas Moleculares*. Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas, IMECC - Campinas, 2013.
- [13] DORAN, C., AND LASENBY, A. *Geometric Algebra for Physicists*. Cambridge University Press, 2003.

- [14] DORST, L., FONTIJNE, D., AND MANN, S. *Geometric Algebra for Computer Science*. Morgan Kaufmann Burlington, 2010.
- [15] FALCON, L., AND BAYRO-CORROCHANO, E. Design of algorithms of robot vision using conformal geometric algebra. *International Mathematical Forum* (01 2007).
- [16] FERNANDES, L. A. F., LAVOR, C., AND DE OLIVEIRA NETO, M. M. *Álgebra Geométrica e Aplicações*. São Carlos, SP: SBMAC, 2017.
- [17] FONTIJNE, D. *Efficient Implementation of Geometric Algebra*. Amsterdam: Elsevier. Morgan Kaufmann Publishers, 2007.
- [18] HAMILTON, W. R. On quaternions; or on a new system of imaginaries in algebra: To the editors of the philosophical magazine and journal. *Philosophical Magazine Series 3* 25, 169 (1844), 489–495.
- [19] HESTENES, D. *New foundations for classical mechanics*, vol. 15. Springer Science & Business Media, 2012.
- [20] KANATANI, K. *Understanding geometric algebra: Hamilton, Grassmann, and Clifford for computer vision and graphics*. CRC Press, 2015.
- [21] KONDO, M., MATSUO, T., MIZOGUCHI, Y., AND OCHIAI, H. A mathematica module for conformal geometric algebra and origami folding. In *SCSS (2016)*, pp. 68–80.
- [22] LAVOR, C., ALVES, R., FIGUEIREDO, W., PETRAGLIA, A., AND MACULAN, N. Clifford algebra and the discretizable molecular distance geometry problem. *Advances in Applied Clifford Algebras* 25, 4 (2015), 925–942.
- [23] LAVOR, C., AND LIBERTI, L. Um convite à geometria de distâncias. *SBMAC, Notas em Matemática Aplicada* 71 (2014).
- [24] LAVOR, C., LIBERTI, L., MACULAN, N., AND MUCHERINO, A. The discretizable molecular distance geometry problem. *Computational Optimization and Applications* 52, 1 (2012), 115–146.
- [25] LAVOR, C., MACULAN, N., SOUZA, M., AND ALVES, R. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular*. Rio de Janeiro: IMPA, 2017.
- [26] LIBERTI, L., LAVOR, C., AND MACULAN, N. A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem. *International Transactions in Operational Research* 15, 1 (2008), 1–17.
- [27] LIBERTI, L., LAVOR, C., MACULAN, N., AND MUCHERINO, A. Euclidean distance geometry and applications. *Siam Review* 56, 1 (2014), 3–69.
- [28] LOUNESTO, P. *Clifford algebras and spinors*, vol. 286. Cambridge university press, 2001.
- [29] MACDONALD, A. A survey of geometric algebra and geometric calculus. *Advances in Applied Clifford Algebras* 27, 1 (2017), 853–891.

- [30] MENGER, K. Untersuchungen über allgemeine metrik. *Mathematische Annalen* 100, 1 (1928), 75–163.
- [31] MILLER, R. A. *Geometric Algebra: An Introduction with Applications in Euclidean and Conformal Geometry*. San Jose State University, 2013.
- [32] MUCHERINO, A., LAVOR, C., LIBERTI, L., AND MACULAN, N. *Distance geometry: theory, methods, and applications*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [33] PERWASS, C., EDELSBRUNNER, H., KOBELT, L., AND POLTHIER, K. *Geometric Algebra with Applications in Engineering*, vol. 20. Springer, 2009.
- [34] RODRIGUES JR, W., AND OLIVEIRA, E. C. *The Many Faces of Maxwell, Dirac and Einstein Equations*. Heidelberg: Springer, 2007.
- [35] STEWART, J. *Cálculo-Vol. II. 8a edição*. São Paulo: Cengage Learning, 2017.
- [36] VAZ, J. A Álgebra Geométrica do Espaço Euclideano e a Teoria de Pauli. *Revista Brasileira de Ensino de Física* 19 (1997), 234–259.
- [37] VAZ, J. A Álgebra Geométrica do Espaço-tempo e a Teoria da Relatividade. *Revista Brasileira de Ensino de Física* 22 (2000).
- [38] VAZ, J., AND DA ROCHA, R. Algebras de Clifford e Espinores. *São Paulo: Editora Livraria da Física da USP* (2012).
- [39] VINCE, J. *Geometric algebra for computer graphics*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [40] WUTHRICH, K. Protein structure determination in solution by nuclear magnetic resonance spectroscopy. *The Journal of Biological Chemistry* 265 (1990), 22059–22062.