

Minissimpósio MS05 do CNMAC 2023

Geometria de Distâncias

Organizadores:

- Douglas Soares Gonçalves
Departamento de Matemática (Florianópolis)
Universidade Federal de Santa Catarina
- Felipe Delfini Caetano Fidalgo
Departamento de Matemática (Blumenau)
Universidade Federal de Santa Catarina

1 Resumo

A Geometria de Distâncias é o estudo da geometria tendo como conceito base a distância, ao invés de pontos e retas. Em 1928, Menger caracterizou diversos conceitos, como congruência e convexidade, em termos de distâncias. Tais resultados foram posteriormente completados por Blumenthal (1953), originando a subárea da matemática conhecida como Geometria de Distâncias.

Nas últimas décadas a área tem atraído pesquisadores de outros ramos da matemática aplicada com interesse em um problema fundamental em Geometria de Distâncias: dada uma lista de distâncias entre pares de objetos, localizar tais objetos em um espaço Euclidiano de modo que suas distâncias Euclidianas coincidam com aquelas da lista. Tal problema encontra diversas aplicações relevantes como localização em rede de sensores, determinação de nanoestruturas e estruturas proteicas, escalamento multidimensional, realização de grafos, dentre outras.

Estas aplicações fortaleceram a interface da Geometria de Distâncias com outras áreas do conhecimento como Bioinformática, Robótica, Computação e Ciência de Dados, e sua interação com subáreas da matemática como Álgebra geométrica, Otimização, Teoria de Grafos e Pesquisa Operacional. Neste contexto, este minissimpósio tem o objetivo de reunir pesquisadores em Geometria de Distâncias e áreas correlatas, que possam contribuir ao desenvolvimento destas através da troca de experiência e resultados de pesquisa recentes.

2 Programação

O minissimpósio consistirá de duas sessões (slots) com quatro palestrantes cada, seguindo a organização abaixo.

1. Obtenção de códigos ópticos ortogonais via otimização

Luiz Leduino de Salles Neto
Instituto de Ciência e Tecnologia/S. J. dos Campos
Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP)

Resumo: Um código óptico ortogonal (OOC) é uma família de sequências de 0 e 1 de comprimento N , peso w , identificadas pela notação $(N, w, \lambda_a, \lambda_c)$, onde λ_a é o coeficiente de auto-correlação fora de fase de pico e λ_c é o coeficiente de correlação cruzada de pico. Estes λ s precisam satisfazer determinadas condições que podem ser vistas como relações de distância geométrica. A obtenção de OOCs é importante para otimização de redes de internet, especialmente as que utilizam a tecnologia OCDMA. Na literatura existem métodos algébricos e heurísticos para obtenção de OOCs. Neste trabalho apresentamos modelos matemáticos de otimização para obtenção de OOCs inspirados por abordagens que recentemente propusemos para resolução de problemas de geometria de distâncias.

2. Recuperação de matrizes de distâncias Euclidianas usando Gradiente Projetado

Tacildo de S. Araújo
Departamento Acadêmico de Educação e Formação de Professores
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Amazonas (IFAM)

Resumo: Discutiremos a aplicação de um método de Gradiente Projetado (GP) para recuperação de matrizes de posto reduzido e conhecido a priori, como é o caso de matrizes de distâncias Euclidianas (EDM). Mais especificamente, aplicaremos um GP a um problema de otimização com restrição de posto que modela o problema de completamento e analisaremos a convergência do método sob certa condição. Apresentaremos resultados numéricos preliminares sobre o completamento de EDMs.

3. Improving the performance of Adaptive Filters and Neural Networks with Geometric Algebra

Wilder Bezerra Lopes
Chief Machine Learning Architect at Graphstax and Founder at Ogarantia

Resumo: Geometric-algebra computation allows for efficient parameterization of geometric transformations. We are going to explore how this can be used to increase the performance of computer-vision algorithms, particularly those based on neural networks and adaptive filters. Additionally, we will discuss real-life use cases where the adoption of the geometric-algebra formalism resulted in an increased system performance.

4. Alguns apontamentos sobre a resolução de DMDGPs via Quatérnios

Emerson Vitor Castelani
Departamento de Matemática
Universidade Estadual de Maringá (UEM)

Resumo: Problemas de Geometria de Distâncias Molecular Discretizados são resolvidos de forma consolidada através de algoritmos de busca em profundidade do tipo *Branch-and-Prune*. O cerne das propostas mais conhecidas fazem uso de matrizes de rotações implementadas de forma acumulativa e otimizada. Contudo, algumas alternativas à esta estratégia podem ser utilizadas. Em particular, a troca do uso de matrizes por quatérnios representa um tratamento viável que confere algumas vantagens computacionais. Neste sentido, iremos apresentar nesta palestra alguns aspectos numéricos de uma proposta baseada em quatérnios que confere alguns avanços em termos de desempenho e gerenciamento de memória. Para consolidar os resultados obtidos, destacaremos ainda a apresentação de um conjunto de dados extraídos do *Protein Data Bank* que são reestruturados através de uma estratégia chamada *Hand-Craft Order*. Tal conjunto de dados inaugura algumas possibilidades interessantes de aplicação que também serão reportadas.

2ª Sessão / Moderação: Douglas Gonçalves
--

1. Alocação de canais, caminhos mínimos dinâmicos em redes móveis e desafios em geometria de distâncias

Rosiane de Freitas
Instituto de Computação
Universidade Federal do Amazonas (UFAM)

Resumo: Nesta palestra, lidamos com colorações especiais de grafos e combinatória poliédrica para formulações MILP, para melhor resolver problemas de atribuição de canais em redes sem fio móveis artificiais/do mundo real. Consideramos problemas de coloração de grafos envolvendo restrições de distância como arestas ponderadas. Alguns problemas de coloração de grafos mais gerais foram propostos na literatura que constituem modelos para aplicações reais, como atribuição de canais em redes sem fio móveis. Hale (1980) propôs o problema de coloração generalizada (GCP) onde, para cada aresta, a diferença absoluta entre as cores atribuídas a cada vértice não deve estar em um determinado conjunto proibido, problema que mais tarde foi denominado T-coloring. Além disso, o problema de coloração da largura de banda (BCP) é um caso especial de coloração T em que a diferença absoluta entre as cores atribuídas a cada vértice deve ser maior ou igual a um determinado valor (Malaguti e Toth, 2010; Lai e Lu, 2013; Dias et al., 2017), e o problema de coloração com restrições de cores adjacentes (COLRAC, GEOM), onde existe um grafo de restrição para o qual cores adjacentes nele não podem ser atribuídas a vértices adjacentes (Trick et al, 2002, Akihiro e outros, 2002). Em nossa pesquisa, propusemos modelagem teórica baseada na geometria de distâncias e definimos uma hierarquia de problemas de coloração que

chamamos de problemas de coloração de grafos de distância (DeFreitas et al., 2019). Assim, os vértices do grafo são imersos na reta real e a coloração é tratada como uma atribuição de inteiros positivos aos vértices, enquanto as distâncias correspondem a segmentos de reta, onde o objetivo é encontrar uma interseção factível. Propusemos formulações de programação inteira mista e de programação por restrição e mostramos condições de viabilidade e otimalidade para alguns problemas (Dias et al., 2021). Também propomos métodos de enumeração implícita para alguns dos problemas de otimização baseados em algoritmos branch-and-prune propostos para DGPs na literatura. Um estudo combinatório poliédrico foi conduzido para definir um politopo de distância e desigualdades indutoras de facetas (Dias et al. 2018). Propomos novas variações de problemas de coloração de vértices em grafos, envolvendo um novo modelo teórico em geometria de distância (GD) para problemas de coloração de vértices com restrições generalizadas de adjacência, promovendo a correlação entre teoria de grafos e campos de GD. Damos também uma caracterização e prova formal de casos polinomiais para classes especiais de grafos, uma vez que o problema geral principal é NP-completo. Também desenvolvemos tecnologias para coleta de dados, localização de antenas, throughput de rede, caminhos mínimos dinâmicos com garantia de conectividade, navegação e exploração de tecnologias modernas de telecomunicações digitais, incluindo 5G, em um projeto de P&D de inovação tecnológica com uma grande empresa multinacional de telecomunicações.

Nota: Esta palestra é uma homenagem aos 80 anos de Nelson Maculan e Jayme Szwarcfiter, renomados pesquisadores brasileiros. Será apresentado um resumo dos resultados obtidos em conjunto com esses pesquisadores e Bruno Dias (Brasil), Javier Marengo (Argentina) e Philippe Michelon (França), bem como alguns resultados obtidos no projeto de P&D de Otimização de Desempenho de Software (SWPERFI) UFAM-MOTOROLA.

2. A Machine Learning application on the DMDGP

Michael Souza
Departamento de Estatística e Matemática Aplicada
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Resumo: The fundamental problem in Distance Geometry (DG) is to find three-dimensional structures compatible with prefixed Euclidean matrices. The Discretisable Molecular Distance Geometry Problem (DMDGP) is a variation of this fundamental problem and its search space can be represented by a binary tree. This simplified search space has many symmetry properties that have been studied over the past decade. In this article, we will present preliminary results from the application of machine learning techniques for the DMDGP in instances related to the determination of protein structures

3. A mathematical optimization method to learn distance metrics for clustering with minimal data transformation

Daniel Aloise
Computer and Software Engineering Department
Polytechnique Montreal

Resumo: Distance metric learning algorithms aim to learn how to measure similarities between data objects in a metric space. In the context of clustering, metric learning typically relies on side-information provided by experts, most commonly expressed in the form of pairwise constraints. In this setting, algorithms for metric learning execute data transformations that bring pairs of data points involved in must-link constraints close together, whereas pairs of points involved in cannot-link constraints are moved away from each other. One caveat to such methods is that they can considerably change the original data distribution properties. With that in mind, we propose a Lagrangian-based approach to assist distance metric learning algorithms for clustering. Our method is developed to identify the least impactful transformations to the original data space, while still learning a more suitable metric space for grouping the data using the provided side information. Our results demonstrate that the proposed methodology is able to achieve a competitive clustering performance with respect to truth classification. Furthermore, the method is able to provide more accurate views of the transformed datasets, which can lead to more reliable clustering interpretations.

4. A álgebra geométrica conforme como alternativa em problemas de dinâmica molecular

Jesus Marcos Camargo
Universidade Federal da Integração Latinoamericana

Resumo: Representar estruturas moleculares usando conceitos geométricos é uma tarefa não trivial que vem sendo pesquisada ao longo da história. Como alternativas para a representação e o estudo dessas estruturas, foram desenvolvidos diferentes sistemas de coordenadas, cabendo destacar os principais: sistema de coordenadas cartesianas e sistema de coordenadas conformes. Embora cada sistema apresente características e finalidades próprias, de maneira geral eles são inter-relacionados. O estudo das correlações entre estes dois sistemas gerou alguns métodos de conversão que foram incorporados em problemas de dinâmica molecular, como o cálculo de funções de energia potencial molecular e score de acoplamentos em ligações com proteínas. Tendo isso em vista, apresentamos um novo sistema de representação para moléculas. Usando a álgebra geométrica conforme, estabelecemos as chamadas coordenadas conformes. Este novo sistema incorpora o sistema de coordenadas cartesianas e fornece um conjunto de equações adequadas para diferentes problemas de dinâmica molecular, que exigiriam o uso de diferentes métodos, se tratado por meio das convencionais coordenadas cartesianas.