

# 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 das 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  $\lambda_a$  é o coeficiente de auto-correlação fora de fase de pico e  $\lambda_c$  é o coeficiente de correlação cruzada de pico. Estes  $\lambda$ 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. Detecção e classificação de formas geométricas utilizando representações em Espaço Conforme

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

**Resumo:** Considere o seguinte problema: Dado um conjunto de  $m$  pontos  $\mathcal{Q} = \{Q_i \in \mathbb{R}^n; i \in \{1, \dots, m\}\}$ , sendo escolhida uma quantidade  $0 < p \leq m$  e definido um conjunto de objetos  $\mathcal{O} = \{\text{retas, hiperplanos, hiperesferas e hipercírculos}\}$  queremos decidir qual objeto de  $\mathcal{O}$  se aproxima ao máximo de algum subconjunto de  $\mathcal{Q}$  com  $p$  elementos.

O ingrediente essencial deste tipo de problema é a determinação de distâncias mínimas entre um objeto geométrico e algum conjunto de pontos do  $\mathbb{R}^n$  a ser determinado.

Uma vez que os objetos do conjunto  $\mathcal{O}$  são representados de uma forma simplificada quando consideramos suas imersões em Espaços Conforme, mostraremos nesta palestra que o problema proposto pode

ser resolvido utilizando um método direto baseado na determinação de autovalores de um conveniente operador linear.

Como consequência, teremos um método capaz de detectar um objeto inserido num conjunto de pontos do  $\mathbb{R}^n$  e, ao mesmo tempo, classificá-lo de acordo com a definição do conjunto  $\mathcal{O}$ .

2 <sup>a</sup> Sessão / <i>Moderação</i> : Douglas Gonçalves
--------------------------------------------------------------

## 1. 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

## 2. 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.

### 3. Alguns apontamentos sobre a resolução de DMDGPs via Quatérnios

Felipe Fidalgo<sup>1</sup> e Emerson Vitor Castelani<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Matemática - Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)/Blumenau

<sup>2</sup>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.