



GERMANO ABUD DE REZENDE

EXPLORANDO A DUALIDADE EM GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS

CAMPINAS
2014



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística
e Computação Científica

GERMANO ABUD DE REZENDE

EXPLORANDO A DUALIDADE EM GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS

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

Orientador: Carlile Campos Lavor

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO GERMANO ABUD DE REZENDE, E ORIENTADA PELO PROF. DR. CARLILE CAMPOS LAHOR.

Assinatura do Orientador

CAMPINAS
2014

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

R339e Rezende, Germano Abud de, 1977-
Explorando a dualidade em geometria de distâncias / Germano Abud de
Rezende. – Campinas, SP : [s.n.], 2014.

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

1. Geometria de distâncias. 2. Estrutura molecular. 3. Distância euclidiana. 4.
Algoritmos branch-and-prune. I. Lavor, Carlile Campos, 1968-. II. Universidade
Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação
Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Exploring the duality on distance geometry

Palavras-chave em inglês:

Distance geometry

Molecular structure

Euclidean distance

Branch-and-prune algorithms

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Carlile Campos Lavor [Orientador]

José Mario Martínez Pérez

Carlos Tomei

Weldon Alexandre Lodwick

Antonio Mucherino

Data de defesa: 28-08-2014

Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Tese de Doutorado defendida em 28 de agosto de 2014 e aprovada

Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



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



Prof(a). Dr(a). JOSÉ MARIO MARTÍNEZ PÉREZ



Prof(a). Dr(a). CARLOS TOMEI



Prof(a). Dr(a). WELDON ALEXANDRE LODWICK



Prof(a). Dr(a). ANTONIO MUCHERINO

Abstract

Distance Geometry is the study of geometry based on the concept of distance. It is useful in many applications where the input data consists of an incomplete set of distances, and the output is a set of points in some Euclidean space which realizes the given distances.

In the Distance Geometry Problem (**DGP**), it is given an integer $K > 0$ and a simple undirected weighted graph $G = (V, E, d)$, whose edges are weighted by a non-negative function d . We want to determine if there is a (realization) function that associates the vertices of V with coordinates of the K -dimensional Euclidean space satisfying all distance constraints given by d .

A DGP_K (with K fixed) is closely related to another type of problem, which treats the possible completions of a certain Euclidean distance matrix. In some sense, this is the “dual” of the first problem. We explore this duality in order to improve the Branch-and-Prune method applied to a discrete version of the DGP_K .

Keywords: distance geometry, molecular structure, Euclidean distance matrix, Branch-and-Prune.

Resumo

A geometria de distâncias é o estudo da geometria baseado no conceito de distância. Ela é útil em várias aplicações, onde os dados de entrada consistem de um conjunto incompleto de distâncias, e a saída é um conjunto de pontos no espaço euclidiano, que realiza as distâncias dadas.

No Problema de Geometria de Distâncias (**DGP**), é dado um inteiro $K > 0$ e um grafo simples, não direcionado, $G = (V, E, d)$, cujas arestas são ponderadas por uma função não negativa d . Queremos determinar se existe uma função (realização) que leva os vértices de V em coordenadas no espaço euclidiano K -dimensional, satisfazendo todas as restrições de distâncias dadas por d .

Um DGP_K (com K fixado) está fortemente relacionado a um outro tipo de problema, que trata dos possíveis completamentos de uma certa matriz de distâncias euclidianas. Este último pode ser visto, em um certo sentido, como o “dual do primeiro problema”. Neste trabalho, exploramos essa dualidade com a finalidade de propor melhorias no método Branch-and-Prune aplicado a uma versão discreta do DGP_K .

Palavras-chave: geometria de distâncias, estrutura molecular, matriz de distâncias euclidianas, Branch-and-Prune.

Sumário

Dedicatória	xi
Agradecimentos	xv
1 Introdução	1
1.1 O Problema de Geometria de Distâncias	1
1.1.1 O Número de Soluções do DGP	2
1.1.2 A Complexidade do DGP	3
1.1.3 Discretizando o Problema	4
1.2 O Problema de Geometria de Distâncias Moleculares (MDGP)	6
1.2.1 Intersecção de Esferas e Probabilidade	7
1.2.2 O Problema de Geometria de Distâncias Moleculares Discretizável	10
1.2.3 O DMDGP e o Algoritmo Branch-And-Prune	14
2 O EDMCP	23
2.1 Determinantes de Cayler-Menger	23
2.1.1 O significado de $D(i, j)$	24
2.1.2 O significado de $D(i_1, \dots, i_n)$	25
2.1.3 O significado de $D(i_1, i_2; j_1, j_2)$	27
2.1.4 O significado de $D(i_1, i_2, i_3; j_1, j_2, j_3)$	27
2.2 Condições necessárias e suficientes, para que uma matriz completa D seja uma matriz de distâncias euclidianas	28
2.3 Aplicações ao EDMCP ₃	29
3 Explorando a Dualidade	35
3.1 O EDMCP _K e o DGP _K	35
3.1.1 O EDMCP ₃ e o DMDGP	36
3.1.2 Instâncias que Ocorrem com Probabilidade 0	37
3.1.3 O Número de Soluções do ^K DMDGP via Matriz de Distâncias	39
3.1.4 O Número de Soluções do ^K DMDGP via Teoria de Grupos	45
3.2 O BP Dual	49
3.2.1 Determinantes de Cayley-Menger e um Método “Dual” para o ² DMDGP	50
3.3 Bilateração e o ² DMDGP	57

3.3.1	Dois triângulos com uma aresta em comum	59
3.3.2	Bilaterações Sucessivas Aplicadas ao ${}^2\text{DMDGP}$	60
3.3.3	Bilateração e proposta de um BP modificado para o ${}^2\text{DMDGP}$	65
3.4	Trilateração e o ${}^3\text{DMDGP}$	67
3.4.1	Trilaterações Sucessivas Aplicadas ao ${}^3\text{DMDGP}$	68
3.4.2	Trilateração e proposta de um BP modificado para o ${}^3\text{DMDGP}$	71
4	Uma aplicação em robótica: matrizes trilateráveis e o DDGP_3.	75
4.1	O Problema de Geometria de Distâncias Discretizável	75
4.2	Matrizes Trilateráveis e o DDGP_3	76
4.3	Trabalhando com o exemplo dado em [21]: PUMA 560 Robot	77
5	Conclusão	81
5.1	Contribuições da Tese	81
5.1.1	Artigos em preparação	82
5.1.2	Trabalhos futuros	82
	Referências	83
I	Licença	85
I.1	Sobre a licença dessa obra	85

*Aos meus filhos Caio e Luca,
e minha esposa Cassiana,
que permaneceram ao meu lado
durante toda a jornada.*

“To succeed, planning alone is insufficient.
One must improvise as well.”
- Isaac Asimov, Foundation.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais Nadir e Célia, a quem devo todas as minhas conquistas.

Ao prof. Carlile, meu reconhecimento pela oportunidade de realizar este trabalho ao lado de alguém que preza por qualidade e eficiência, sempre com muito respeito e amizade. Levarei seus ensinamentos e conselhos por toda a vida.

Agradeço ao grande amigo Jorge pelas várias horas de conversas e conselhos, pela parceria e confiança.

Agradeço aos amigos do “Lab”, em especial a Ana, Bruno, Campello, Cecília, Chris, Cláudio, Deborah, Felipão, João, Julianna, Luciano, Rafa e Valter que tornam o trabalho mais divertido!

Aos eternos amigos Daniel, Edward e Vinícius que, apesar da distância, estiveram sempre presentes!

Aos professores e funcionários do IMECC, que direta ou indiretamente contribuíram de alguma forma, meu reconhecimento e gratidão, em especial aos professores Aurélio, Márcia, Eduardo, Laecio. Agradeço à prof^a Sandra Augusta pela recomendação.

Quero agradecer ao Ranieri e a todos que, de alguma forma, auxiliaram na criação do modelo de tese (em Latex) do IMECC.

Agradeço ainda à Faculdade de Matemática da UFU, por permitir o afastamento pelo tempo necessário, e a CAPES pelo apoio financeiro.

Lista de Ilustrações

1.1	O vértice w pode ser posicionado em qualquer ponto sobre o círculo (em vermelho).	2
1.2	Adicionando a aresta $\{u, w\}$, temos apenas duas posições factíveis.	3
1.3	Grafo com um número finito de realizações incongruentes no plano.	6
1.4	Intersecção de três esferas em \mathbb{R}^3	7
1.5	Um K -simplex para $K = 2$ e $K = 3$, respectivamente.	8
1.6	Uma realização (parcial) para a 3-clique inicial.	10
1.7	As duas posições para z geram valores distintos para d_{uz} (em vermelho).	10
1.8	Ângulo de torção, ângulos de ligação e comprimentos de ligação.	11
1.9	Posições possíveis para o i -ésimo átomo.	12
1.10	Possibilidades para a realização do vértice 4 em \mathbb{R}^2	14
1.11	Árvore de busca do BP, se fixamos posições para os 4 primeiros vértices.	17
1.12	A primeira poda ocorre no nível 5.	17
1.13	A segunda poda ocorre no nível 6.	18
1.14	No total, obtemos 2 soluções.	18
1.15	Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(1,1)}$	19
1.16	Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(1,2)}$	20
1.17	Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(2,1)}$. A partir de $v_6^{(2,2)}$ duas novas possibilidades para v_7 são calculadas e uma delas é a solução do problema.	21
2.1	Ângulo ϕ entre os planos determinados por P_1, P_2, P_3 e Q_1, Q_2, Q_3	28
2.2	Uma quase-clique sobre 4 vértices admite duas realizações incongruentes no plano.	32
2.3	Uma quase-clique sobre 5 vértices admite duas realizações incongruentes no espaço.	32
3.1	Reta mediatriz do segmento que une os pontos x_5^1 e x_5^2 , correspondentes às realizações x^1 e x^2 do quinto vértice.	38
3.2	Caminhos (em vermelho) que dão origem aos pontos x_5^1 e x_5^2 (realizações distintas do quinto vértice). Desconsideramos o ramo de soluções simétricas.	38
3.3	Possíveis complementos para a matriz parcial B	43
3.4	A ação da reflexão R_x^v em \mathbb{R}^K	46
3.5	Reflexão por ϱ^y e depois por ϱ^x é equivalente a refletir por ϱ^x e, depois, por $\varrho^{\varrho^x y}$ (a reflexão de ϱ^y por ϱ^x).	47

3.6	Pontos no plano e vetores posição no sistema de coordenadas dado.	57
3.7	Dois triângulos com uma aresta em comum.	59
3.8	Uma Instância com 7 vértices, onde d_{17} é informação de poda.	60
3.9	Pares iguais de possibilidades (em verde e vermelho) para d_{15} , se consideramos ambos os sinais em Z_{413}	61
3.10	Soluções (parciais) obtidas, a cada nível, pelo BP	64
3.11	Soluções (parciais) obtidas pelo BP , com uso de bilaterações.	65
3.12	Determinando a distância entre p_4 e p_5 , a partir de suas distâncias a p_1, p_2, p_3	67
3.13	A cada nível, temos apenas soluções parciais do problema. Não armazenamos realizações inactíveis.	72

Lista de Abreviaturas e Siglas

DGP Distance Geometry Problem

^{*K*}**DDGP** *K*-Discretizable Distance Geometry Problem

^{*K*}**DMDGP** *K*-Discretizable Molecular Distance Geometry Problem

DMDGP Discretizable Molecular Distance Geometry Problem

MDGP Molecular Distance Geometry Problem

DVOP Discrete Vertex Ordering Problem

BP Branch-And-Prune Algorithm

EDMCP Euclidean Distance Matrix Completion Problem

EDMCP_{*K*} Euclidean Distance Matrix Completion Problem in dimension *K*

Capítulo 1

Introdução

A Geometria de Distâncias é o estudo da Geometria, baseada no conceito de distância. Ela é útil em várias aplicações, onde os dados de entrada consistem de um conjunto incompleto de distâncias e a saída é um conjunto de pontos em um dado espaço geométrico, que realiza as distâncias dadas. Uma aplicação muito importante está relacionada ao cálculo de estruturas 3D de proteínas (conformação molecular), que trataremos neste trabalho [16].

1.1 O Problema de Geometria de Distâncias

Menger caracterizou vários conceitos geométricos (congruência, convexidade, etc.) em termos de distâncias. Os resultados de Menger e o trabalho apresentado posteriormente por Blumenthal [3] deram origem a um ramo de estudo denominado Geometria de Distâncias. O principal problema dessa área de pesquisa pode ser assim enunciado:

Problema de Geometria de Distâncias (DGP¹): Dado um natural $K > 0$ e um grafo simples não direcionado $G = (V, E)$, cujas arestas são ponderadas por uma função $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, determine se existe uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ tal que

$$\forall \{u, v\} \in E, \|x(u) - x(v)\| = d(\{u, v\}). \quad (1.1.1)$$

Algumas vezes, usaremos x_v para indicar $x(v)$ e d_{uv} ou $d(u, v)$ para indicar $d(\{u, v\})$. Além disso, a norma $\|\cdot\|$ indica sempre a norma euclidiana, exceto se explicitamos o contrário. A função x satisfazendo (1.1.1) é dita ser uma realização de G em \mathbb{R}^K . Se H é um subgrafo de G , e \bar{x} é uma realização de H , então \bar{x} é uma realização parcial de G . Se G é um grafo, seu conjunto de vértices será indicado por $V(G)$ e seu conjunto de arestas por $E(G)$. Quando não houver possibilidade de confusão, escreveremos simplesmente $G = (V, E, d)$.

Duas realizações x e y de um grafo G são ditas *congruentes*, se

$$\|x(u) - x(v)\| = \|y(u) - y(v)\|, \forall u, v \in V. \quad (1.1.2)$$

¹Do inglês: Distance Geometry Problem

O interesse pelo DGP está relacionado à riqueza de suas aplicações (conformação molecular, redes de sensores sem fio, visualização de dados, robótica, entre outros), bem como à beleza da teoria matemática envolvida. Nosso trabalho foi motivado por problemas relacionados ao cálculo de estruturas de proteínas, utilizando dados de Ressonância Magnética Nuclear (NMR²). Dois pioneiros nesta aplicação são Crippen e Havel [6].

Na definição do DGP, se fixamos K , nos referimos ao problema como DGP_K , para enfatizar que procuramos por realizações em \mathbb{R}^K . Uma subclasse importante de problemas é o *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares* (MDGP^3), que é simplesmente um DGP_3 , isto é, um DGP para o qual fixamos $K = 3$.

1.1.1 O Número de Soluções do DGP

Vamos considerar um DGP com $K = 2$, $V = \{u, v, w\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{v, w\}\}$. Suponha ainda que $d_{uv} = 1$ e $d_{vw} = \frac{1}{2}$. Podemos perceber (veja a Figura 1.1) que, fixadas posições para u e v existem infinitas possibilidades para posicionarmos o vértice w .

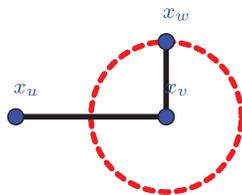


Figura 1.1: O vértice w pode ser posicionado em qualquer ponto sobre o círculo (em vermelho).

Vamos agora, no exemplo anterior, acrescentar a hipótese de que $\{u, w\} \in E$ e $d_{u,w} = \frac{\sqrt{5}}{2}$. Observe que existem exatamente duas posições sobre o círculo para as quais w satisfaz $d_{u,w} = \frac{\sqrt{5}}{2}$. Fixadas posições para u e v , a restrição $d_{vw} = \frac{1}{2}$ nos diz que x_w está sobre o círculo de centro x_v e raio $d_{vw} = \frac{1}{2}$, enquanto que a restrição $d_{u,w} = \frac{\sqrt{5}}{2}$ nos diz que x_w está sobre o círculo de centro em x_u e raio $d_{u,w} = \frac{\sqrt{5}}{2}$. Veja a Figura 1.2.

Como as duas posições possíveis para w geram realizações congruentes (todas as distâncias estão fixadas), percebemos que o DGP tem solução única, a menos de realizações congruentes.

Considere agora acrescentar um vértice z conectado a u e v , de forma que $d_{vz} = 1$ e $d_{uz} = 5$. Neste caso, o problema não tem solução, já que a desigualdade triangular $d_{uz} \leq d_{uv} + d_{vz}$ não é satisfeita.

Assim, percebemos que o conjunto solução de um DGP pode ser vazio, finito ou infinito não enumerável. O caso infinito enumerável não ocorre e este resultado pode ser encontrado em [2].

²Do inglês: Nuclear Magnetic Resonance

³Do inglês: Molecular Distance Geometry Problem

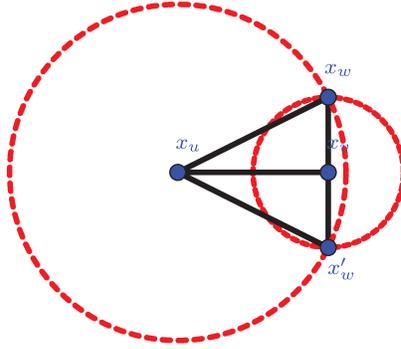


Figura 1.2: Adicionando a aresta $\{u, w\}$, temos apenas duas posições factíveis.

1.1.2 A Complexidade do DGP

Vamos considerar um DGP cujo grafo associado é completo. Por exemplo, $K = 1$, $V = \{u, v, w\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{u, w\}, \{v, w\}\}$. Suponha ainda que $d_{uv} = d_{vw} = 1$ e $d_{uw} = 2$. Fixando $x_u = 0$ e $x_v = 1$, temos $\|x_w - x_u\| = 2$ e $\|x_w - x_v\| = 1$. Elevando ao quadrado obtemos:

$$\begin{aligned} x_w^2 - 2x_w x_u + x_u^2 &= 4 \\ x_w^2 - 2x_w x_v + x_v^2 &= 1. \end{aligned}$$

Subtraindo as expressões, obtemos:

$$\begin{aligned} -2x_w x_u + x_u^2 + 2x_w x_v - x_v^2 &= 3 \Rightarrow 2x_w(x_v - x_u) = x_v^2 - x_u^2 + 3 \\ &\Rightarrow 2x_w(1 - 0) = 1^2 - 0^2 + 3 \Rightarrow x_w = 2. \end{aligned}$$

O procedimento acima pode ser generalizado para \mathbb{R}^K . Por exemplo, para $K = 2$, $V = \{u, v, w, z\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{u, w\}, \{u, z\}, \{v, w\}, \{v, z\}, \{w, z\}\}$, se fixamos posições para u, v e w que satisfazem as restrições de distâncias entre estes três vértices, obtemos o seguinte sistema quadrático para posicionar z :

$$\begin{aligned} \|x_z - x_u\| &= d_{uz} \\ \|x_z - x_v\| &= d_{vz} \\ \|x_z - x_w\| &= d_{wz}. \end{aligned}$$

Elevando ao quadrado e subtraindo a primeira equação das demais obtemos:

$$\begin{aligned} 2(x_v - x_u)x_z &= \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{vz}^2 \\ 2(x_w - x_u)x_z &= \|x_w\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{wz}^2, \end{aligned}$$

ou seja, temos um sistema linear da forma $Ax = b$. Observe que se exigirmos, por exemplo, que x_u, x_v e x_w sejam não colineares, a matriz A será invertível e teremos uma única solução $x^* = A^{-1}b$.

Admitindo-se que as matrizes associadas a um DGP cujo grafo é completo são invertíveis, o problema tem uma única solução que pode ser obtida com um custo computacional proporcional a $|V|$. Dizemos, então, que o problema pode ser resolvido em tempo linear [7].

Este exemplo não reflete a maioria das aplicações, onde faltam distâncias (o grafo associado não é completo). Um resultado conhecido na literatura é que o DGP é um problema NP-completo para $K = 1$ e NP-difícil para $K \geq 2$. Isto significa que resolver um DGP pode exigir um custo proporcional a $2^{|V|}$ [16]. Observamos ainda que o grafo não precisa ser completo para que o DGP tenha solução única.

1.1.3 Discretizando o Problema

Vimos que o DGP pode ser descrito por um sistema quadrático, mas a maneira clássica de abordar o problema é representá-lo como um problema de otimização contínua [16]. Para exemplificar, vamos considerar um DGP com $K = 2$, $V = \{u, v, w\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{v, w\}\}$. O sistema quadrático associado é [9]:

$$\begin{aligned}(x_{u1} - x_{v1})^2 + (x_{u2} - x_{v2})^2 - d_{uv}^2 &= 0 \\ (x_{v1} - x_{w1})^2 + (x_{v2} - x_{w2})^2 - d_{vw}^2 &= 0.\end{aligned}$$

Definindo $f : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$\begin{aligned}f(x_{u1}, x_{u2}, x_{v1}, x_{v2}, x_{w1}, x_{w2}) &= \left((x_{u1} - x_{v1})^2 + (x_{u2} - x_{v2})^2 - d_{uv}^2 \right)^2 \\ &\quad + \left((x_{v1} - x_{w1})^2 + (x_{v2} - x_{w2})^2 - d_{vw}^2 \right)^2,\end{aligned}$$

percebemos que a solução do DGP pode ser encontrada resolvendo-se o problema

$$\min_{x \in \mathbb{R}^6} f(x).$$

A grande dificuldade desta abordagem é que existe uma grande quantidade de mínimos locais e desejamos encontrar o mínimo global. Além disto, a quantidade de mínimos locais cresce exponencialmente com o número de vértices do problema associado [16].

Supondo que um DGP admite solução, sabemos que o conjunto solução é finito ou infinito não enumerável. No caso finito, podemos pensar em novos métodos para encontrar a solução do problema. Mas que tipo de condições seriam suficientes para garantir que o conjunto solução é finito?

Vamos considerar um DGP com $K = 3$, $V = \{u, v, w, z\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{u, w\}, \{u, z\}, \{v, w\}, \{v, z\}, \{w, z\}\}$. Fixando posições em \mathbb{R}^3 para u, v e w , as possíveis posições para z satisfazem o sistema quadrático [9]:

$$\begin{aligned}\|x_z - x_u\|^2 &= d_{uz}^2 \\ \|x_z - x_v\|^2 &= d_{vz}^2 \\ \|x_z - x_w\|^2 &= d_{wz}^2.\end{aligned}$$

Ou de modo equivalente:

$$\begin{aligned} 2(x_v - x_u) \cdot x_z &= \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{vz}^2 \\ 2(x_w - x_u) \cdot x_z &= \|x_w\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{wz}^2. \end{aligned}$$

Em coordenadas, temos:

$$\begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} & x_{v3} - x_{u3} \\ x_{w1} - x_{u1} & x_{w2} - x_{u2} & x_{w3} - x_{u3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{z1} \\ x_{z2} \\ x_{z3} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{vz}^2 \\ \|x_w\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{wz}^2 \end{bmatrix}.$$

E assim, se a submatriz $\begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{w1} - x_{u1} & x_{w2} - x_{u2} \end{bmatrix}$ for invertível, obtemos [9]:

$$\begin{bmatrix} x_{z1} \\ x_{z2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{w1} - x_{u1} & x_{w2} - x_{u2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{vz}^2 \\ \|x_w\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{uz}^2 - d_{wz}^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{w1} - x_{u1} & x_{w2} - x_{u2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{w3} - x_{u3} \end{bmatrix} [x_{z3}],$$

Portanto, o sistema acima tem a forma $\begin{bmatrix} x_{z1} \\ x_{z2} \end{bmatrix} = A - B [x_{z3}]$ e o seu conjunto solução representa uma reta no espaço (para cada valor de $x_{z3} \in \mathbb{R}$, obtemos valores para x_{z1} e x_{z2}).

Finalmente, para encontrar a solução do DGP, devemos substituir a solução do sistema acima em uma das equações do sistema quadrático original, por exemplo, $\|x_z - x_u\|^2 = d_{uz}^2$. Esta última equação representa uma esfera centrada em x_u e com raio d_{uz} . Assim, temos três possibilidades para a solução do DGP:

- Conjunto vazio (a reta não intersecta a esfera),
- Um ponto (a reta tangencia a esfera),
- Dois pontos (a reta é secante à esfera).

Chamamos a atenção para o fato de que, a partir da discussão acima, podemos considerar as hipóteses abaixo para garantir a finitude do conjunto solução:

- Para cada vértice z a ser realizado em \mathbb{R}^3 , devem existir três vizinhos u, v, w que já foram realizados, de forma a obtermos um sistema quadrático com três equações, na variável $x_z \in \mathbb{R}^3$.
- Para que o sistema tenha no máximo duas soluções, a matriz do sistema linear, obtido subtraindo-se uma equação das outras duas, deve ter posto completo. Para isto, basta que u, v, w sejam não colineares.

Observe ainda que as observações acima valem para \mathbb{R}^K , onde para realizarmos um vértice z em \mathbb{R}^3 devem existir K vizinhos que já foram realizados. A primeira condição acima está relacionada ao conceito de ordem no conjunto de vértices V do grafo $G = (V, E, d)$ do DGP. Assim, para $K = 3$, se existir uma ordem em V tal que os 3 primeiros vértices induzem uma clique (grafo completo) e para cada vértice, a partir da quarta posição existem (pelo menos) 3 vizinhos anteriores, podemos garantir que o conjunto solução é finito (supondo a hipótese sobre não colinearidade satisfeita). O problema de determinar se tal ordem existe é chamado de DVOP (Discretizable Vertex Ordering Problem) e pode ser resolvido em tempo polinomial, usando a ideia de se ordenar os vértices seguintes considerando o maior número possível de arestas aos antecessores [11].

A existência de uma ordem, como definido acima, é uma condição suficiente, mas não é necessária. Sabe-se que o grafo da Figura 1.3 tem um número finito de realizações e não possui tal ordem sobre V .

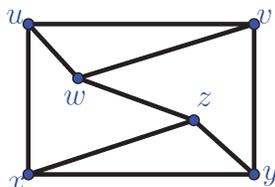


Figura 1.3: Grafo com um número finito de realizações incongruentes no plano.

1.2 O Problema de Geometria de Distâncias Moleculares (MDGP)

A relação entre moléculas e grafos é provavelmente a mais profunda existente entre química e matemática discreta. As moléculas foram inicialmente identificadas por fórmulas atômicas (como H_2O), que indicam as quantidades relativas de átomos em cada molécula. Quando os químicos começaram a compreender que alguns compostos com a mesma fórmula atômica têm diferentes propriedades físicas, procuraram a resposta na forma como as mesmas quantidades de átomos foram ligados uns aos outros, através de ligações químicas. Exibir este tipo de informação necessária requer mais do que uma fórmula atômica e, portanto, diversas maneiras de representar moléculas utilizando diagramas foram inventadas de forma independente. Aquela ainda mais utilizada atualmente, consiste em um conjunto de símbolos de átomos ligados por segmentos.

A função das moléculas reside em sua composição química e arranjo tridimensional no espaço (também chamado de estrutura ou de conformação). Experiências de NMR (Nuclear Magnetic Resonance) podem ser usadas para se determinar um conjunto de certas distâncias euclidianas entre átomos numa molécula [10]. Estas, por sua vez, podem ser usadas para determinar a sua estrutura, isto é, as posições relativas dos átomos em \mathbb{R}^3 . O Problema de Geometria de Distâncias Moleculares (MDGP)[16], fornece um modelo para este problema inverso: V modela o conjunto de átomos, E o conjunto de pares de átomos para os quais a distância está disponível, e a função

$d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ atribui valores de distância para cada par de átomos, de modo que $G = (V, E, d)$ é o grafo da molécula. Supondo que os dados de entrada estão corretos, o conjunto X de soluções (realizações incongruentes) do MDGP associado a G contém todas realizações que são compatíveis com as distâncias observadas.

Diferentes formulações e métodos para o MDGP podem ser encontradas em [10]. Em [12], os autores propoem um algoritmo baseado numa formulação discreta para o MDGP com distâncias exatas. Eles observam que a estrutura particular das proteínas torna possível a formulação discreta. Eles formalizam isto, introduzindo a subclasse de problemas conhecida como DMDGP (Discretizable Molecular Distance Geometry Problem), que será o objeto central de nosso estudo.

1.2.1 Intersecção de Esferas e Probabilidade

Denotaremos por \mathbf{K}_n uma clique sobre n vértices, isto é, um subconjunto $S \subset V(G)$, com $|S| = n$, tal que o subgrafo induzido $G[S]$ é completo. Seja $S^{K-1}(c, r)$ a esfera de centro c e raio r em \mathbb{R}^K . A intersecção de K esferas em \mathbb{R}^K pode conter zero, um, dois ou um número não enumerável de pontos [5]. Seja $\mathcal{U}^- = \{x_1, \dots, x_K\} \subset \mathbb{R}^K$ e r_1, \dots, r_K números reais positivos. Considere $P = \bigcap_{i \leq K} S^{K-1}(x_i, r_i)$ a intersecção de K esferas centradas em x_i com raio r_i , $i = 1, \dots, K$. Se $P \neq \emptyset$ e a dimensão do subespaço afim gerado por \mathcal{U}^- for menor do que $K - 1$, então $|P|$ é não enumerável [11]. Caso contrário, isto é, se a dimensão do subespaço afim gerado por \mathcal{U}^- for igual a $K - 1$, então $|P| \in \{0, 1, 2\}$ [11]. Um simplex é uma generalização da noção de triângulo

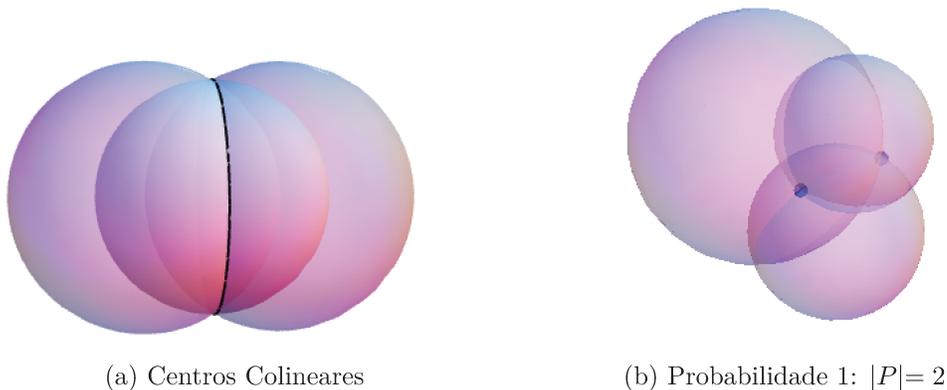


Figura 1.4: Intersecção de três esferas em \mathbb{R}^3 .

ou tetraedro para dimensão arbitrária. Assim, um K -simplex é um politopo K -dimensional que é a casca convexa de seus $K + 1$ vértices. Formalmente, suponha $K + 1$ pontos $v_0, v_1, v_2, \dots, v_k$ em \mathbb{R}^n que determinam um subespaço afim K -dimensional (significa que $v_1 - v_0, \dots, v_k - v_0$ são linearmente independentes). O K -simplex determinado por estes pontos é o subconjunto

$$\left\{ \alpha_0 v_0 + \dots + \alpha_K v_K : \alpha_j \geq 0, 0 \leq j \leq K, \sum_{j=0}^K \alpha_K = 1 \right\} \subset \mathbb{R}^n.$$

A figura a seguir ilustra os casos $K = 2$ e $K = 3$: Vamos denotar por $\Delta_K(V)$ o (hiper) volume

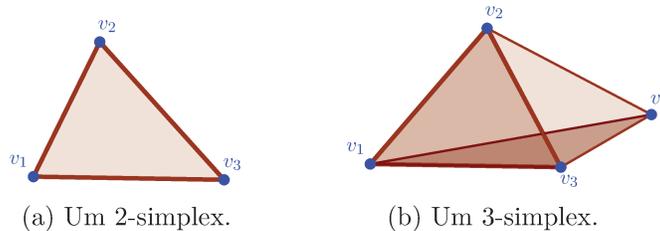


Figura 1.5: Um K -simplex para $K = 2$ e $K = 3$, respectivamente.

em \mathbb{R}^K , do simplex com vértices num dado conjunto V . Agora, vamos assumir que o espaço afim gerado por \mathcal{U}^- tem dimensão $K - 1$ (caso contrário P é não enumerável) e seja $x_{K+1} \in P$ (aqui consideramos os raios $c_i = d_{i,K+1}$). Seja ainda $\mathcal{U} = \mathcal{U}^- \cup \{x_{K+1}\}$. \mathcal{U} induz uma $(K + 1)$ -clique em G (subgrafo completo sobre $K + 1$ vértices) e, se a desigualdade $\Delta_K(\mathcal{U}, d) \geq 0$ falha, então a clique não pode ser realizada em \mathbb{R}^K . Neste caso, temos $P = \emptyset$. Mais ainda, se $\Delta_K(\mathcal{U}, d) = 0$, o simplex tem K -volume nulo e $|P| = 1$. Se $\Delta_K(\mathcal{U}, d) > 0$, o simplex tem K -volume positivo e $|P| = 2$, de acordo com [5].

Qualquer realização $x = (x_1, \dots, x_n)$, no conjunto de todas as realizações incongruentes de um grafo ponderado G , em \mathbb{R}^K , está contida em uma bola \mathbb{B} , centrada em x_1 , com raio $R = \sum_{i=1}^{n-1} \max_i \|x_i - x_{i+1}\|$. Assim, o conjunto de todas as realizações de um dado grafo, é limitado, digamos $X \subset \mathbb{B}'$, onde a bola $\mathbb{B}' \subset \mathbb{R}^{Kn}$ é induzida por $\mathbb{B} \subset \mathbb{R}^K$.

Vamos considerar o caso em que $G = \mathbf{K}_{K+1}$, isto é, G é uma $(K + 1)$ -clique. Considere a distribuição de probabilidade uniforme em \mathbb{B}' . A probabilidade de que uma dada realização em \mathbb{B}' pertença a qualquer subconjunto com medida de Lebesgue nula, é zero. Como ambos os subconjuntos $\{x \in \mathbb{R}^{K^2} : \text{CM}(\mathcal{U}^-) = 0\}$ e $\{x \in \mathbb{R}^{K^2} : \Delta_K(\mathcal{U}, d) = 0\}$ são subvariedades propriamente contidas em \mathbb{R}^{K^2} , elas têm medida de Lebesgue nula; conseqüentemente, também as suas restrições a \mathbb{B}' . Assim, a probabilidade de ocorrer $|P| = 1$ ou P incontável para uma dada realização $x \in \mathbb{B}'$ é zero.

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

Este resultado será importante mais adiante, no cálculo do número de possibilidades para a posição de um vértice $z \in V$, de um DGP, em \mathbb{R}^K , a partir do posicionamento de K vizinhos antecessores.

Ordem

À primeira vista, realizações de grafos ponderados em espaços euclidianos parecem envolver sempre uma busca contínua. Algumas propriedades adicionais do grafo podem oferecer certas vantagens e mais eficiência na busca. Rigidez, por exemplo, garante que o número de realizações, é finito e, então, a busca se torna combinatorial. Entretanto, tal propriedade é muito difícil de ser verificada *a priori* [11].

Existem duas classes importantes de problemas para as quais existe uma ordem que torna possível discretizar o problema: o **DDGP** e o K **DMDGP**.

Problema de Geometria de Distâncias Discretizável (DDGP⁴): Considere um grafo simples, ponderado, não-direcionado $G = (V, E, d)$, um inteiro $K > 0$, e uma ordem ρ em V tal que:

- para cada vértice v com $\rho(v) > K$, o conjunto $N(v) \cap \gamma(v)$ de predecessores adjacentes tem pelo menos K elementos, onde $N(v) = \{u \in V : \{u, v\} \in E\}$ é o conjunto de vértices adjacentes a v , e $\gamma(v) = \gamma(<, v) = \{u \in V : \rho(u) < \rho(v)\}$ é o conjunto de vértices predecessores de v ;
- para cada vértice v com $\rho(v) > K$, $N(v) \cap \gamma(v)$ contém um subconjunto U_v , com exatamente K elementos, tais que U_v é uma K -clique em G e o K -simplex determinado por $G[U_v]$ tem K -volume positivo.

Uma realização parcial \bar{x} , dos primeiros K vértices, também é dada. Pergunta-se: é possível estender \bar{x} para uma realização de G ?

O DDGP com K fixado é denotado por DDGP_K . Para simplificar a notação, identificaremos cada vértice $v \in V$ com seu (único) representante $\rho(v)$ na ordem dada. Assim, dados $u, v \in V$, escreveremos $u - v$ com significado $\rho(u) - \rho(v)$, e $v > K$ para $\rho(v) > K$.

Observe que, para $K = 3$, a segunda condição na definição acima significa que cada vértice $z > 3$ tem três vizinhos predecessores, que induzem uma 3-clique, e cuja realização são pontos não colineares (3-volume positivo). Além disto, observe que se $\{u, v, w\}$ são tais vizinhos de z , então as possíveis posições para z pertencem a intersecção das esferas centradas em x_u, x_v e x_w , e raios d_{uz}, d_{vz} e d_{wz} , respectivamente. De acordo com a seção anterior, fixadas posições para u, v, w , temos duas possíveis posições (com probabilidade 1) para z . Assim, se todo vértice z , com $z > 3$ tem exatamente 3 predecessores adjacentes, satisfazendo as restrições da definição do problema, o conjunto solução tem cardinalidade exatamente 2^{n-4} (as duas posições para o quarto vértice geram realizações congruentes, já que os quatro primeiros vértices induzem uma 4-clique). Se existem pelo menos 3 predecessores adjacentes, satisfazendo as restrições da definição do problema, o conjunto solução tem cardinalidade, no máximo, 2^{n-4} já que ambas, ou pelo menos uma posição para z poderá ser infactível com respeito a certos valores de distâncias adicionais.

Exemplo 1.2.1. Para exemplificar a observação acima, vamos resolver geometricamente um DDGP_2 , com $V = \{u, v, w, z\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{u, w\}, \{v, w\}, \{v, z\}, \{w, z\}\}$.

Inicialmente, posicionamos u e v . Existem duas posições para w que correspondem a intersecção dos círculos centrados em x_u e x_v , com raios d_{uw} e d_{vw} , respectivamente. Tais posições geram realizações congruentes, já que o conjunto de distâncias é o mesmo e, assim, consideramos apenas uma delas. Veja a Figura 1.6.

Existem duas posições para z que correspondem à intersecção dos círculos centrados em x_v e x_w , com raios d_{vz} e d_{wz} , respectivamente. Tais posições geram realizações incongruentes, já que as distâncias até x_u são distintas. Veja a Figura 1.7.

Portanto, o problema tem duas soluções (realizações incongruentes).

⁴Do inglês: Discretizable Distance Geometry Problem

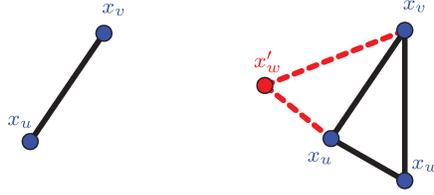


Figura 1.6: Uma realização (parcial) para a 3-clique inicial.

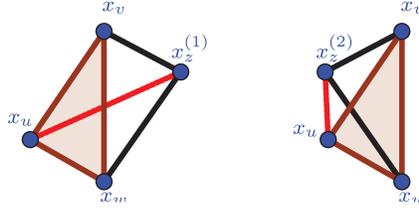


Figura 1.7: As duas posições para z geram valores distintos para d_{uz} (em vermelho).

1.2.2 O Problema de Geometria de Distâncias Moleculares Discretizável

No *K-Problema de Geometria de Distâncias Molecular Discretizável* (K DMDGP), existe uma ordem sobre V tal que quaisquer $(K + 1)$ vértices consecutivos induzem uma clique em G . A diferença entre o K DMDGP e o K DDGP é que, no K DMDGP, U_v deve ser constituído dos K predecessores imediatos de v . Assim, por exemplo, as arestas de discretização podem ser descritas como $E_D = \{\{u, v\} \in E : |u - v| \leq K\}$ e $x(U_v) = \{x_{v-K}, \dots, x_{v-1}\}$. Tal problema surgiu de um interesse prático em conformação molecular. Neste trabalho, nosso foco será o K DMDGP para $K \in \{2, 3\}$ e, por este motivo, vamos (re)defini-lo formalmente para $K = 3$:

Problema de Geometria de Distâncias Moleculares Discretizável (DMDGP): Dado um grafo $G = (V, E, d)$, $|V| = n$, tal que existe uma ordem

$$\rho : V \rightarrow \{1, \dots, n\}, \quad (1.2.1)$$

sobre V satisfazendo:

- (i) E contém todos os 4-cliques de vértices consecutivos: $\forall i \in \{4, \dots, n\}, \forall j, k \in \{i - 3, \dots, i\} \Rightarrow (\{j, k\}) \in E$;
- (ii) as seguintes desigualdades triangulares são satisfeitas: $d_{i-1, i+1} < d_{i-1, i} + d_{i, i+1}, \forall i \in \{2, \dots, n - 1\}$.

Perguntamos: existe uma realização $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $\|x_u - x_v\| = d_{uv}$ para cada $\{u, v\} \in E$?

As distâncias $d_{i-1, i}$, estão associadas aos *comprimentos de ligação*, para $i \in \{2, \dots, n\}$, e os ângulos $\theta_{i-2, i}$ entre os vértices v_{i-2}, v_{i-1}, v_i estão associados aos *ângulos de ligação*, para $i \in \{3, \dots, n\}$.

Vamos particionar E em dois conjuntos E_D e E_P tais que $E_D = \{\{i, j\} \in E : |i - j| \leq 3\}$ e $E_P = E \setminus E_D$.

Observe que, na prática, o item (i) exige que comprimentos e ângulos de ligação, assim como as distâncias entre vértices separados por três arestas consecutivas, sejam conhecidas. As distâncias entre vértices separados por duas arestas consecutivas podem ser facilmente calculadas a partir dos comprimentos e ângulos de ligação (lei dos cossenos). O item (ii) nos diz que nenhum ângulo de ligação pode ser múltiplo de π . A exigência (i) é aplicável a várias proteínas, já que a NMR determina os valores de distâncias entre átomos que estão próximos. A exigência (ii) também é aplicável às proteínas, visto que, a probabilidade de uma proteína possuir ângulo de ligação exatamente π (três átomos colineares) é zero [12].

Dada uma instância de um DGP, determinar se ela é um DMDGP envolve encontrar uma ordem sobre os vértices, satisfazendo (i) e (ii). Por outro lado, (ii) é satisfeita com probabilidade 1 quando d é uma função de distâncias, já que o conjunto de triplas de valores que não satisfazem (ii) tem medida de Lebesgue nula no conjunto de todas as triplas.

Vamos então considerar uma molécula com n átomos, comprimentos de ligação $d_{i-1,i}, i = 2, \dots, n$, ângulos de ligação $\theta_{i-2,i}, i = 3, \dots, n$ e, adicionalmente, ângulos de torção ou *diédrais*: $\omega_{i-3,i}, i = 4, \dots, n$, que são os ângulos entre as normais dos planos definidos pelos átomos $i-3, i-2, i-1$ e $i-2, i-1, i$. Veja a figura (1.8).

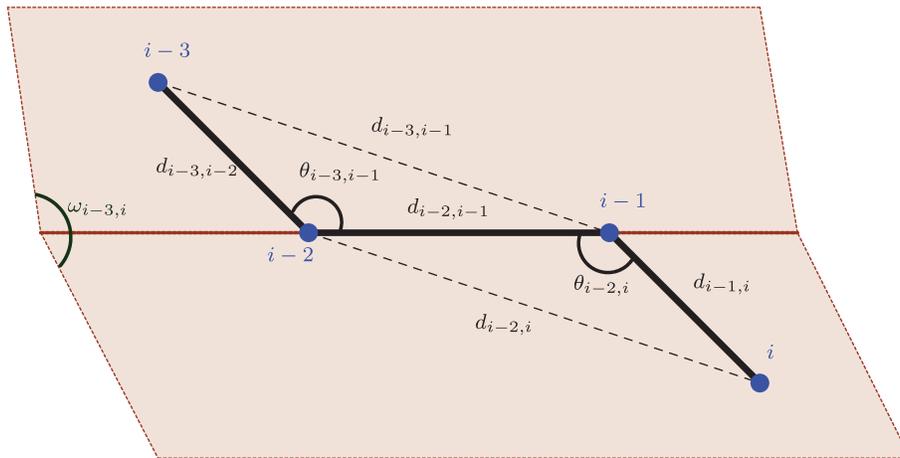


Figura 1.8: Ângulo de torção, ângulos de ligação e comprimentos de ligação.

Observe que podemos fixar a posição dos três primeiros átomos, e o quarto átomo fica determinado pelo ângulo de torção $\omega_{1,4}$. O quinto átomo, fica determinado pelos ângulos de torção $\omega_{1,4}$ e $\omega_{2,5}$, e assim por diante.

A intuição geométrica por trás da formulação discreta é que o i -ésimo átomo pertence à intersecção de três esferas centradas nos átomos $i-3, i-2, i-1$, e com raios $d_{i-3,i}, d_{i-2,i}, d_{i-1,i}$. Devido às hipóteses (i) e (ii), com probabilidade 1, tal intersecção contém exatamente dois pontos. Veja a Figura (1.9).

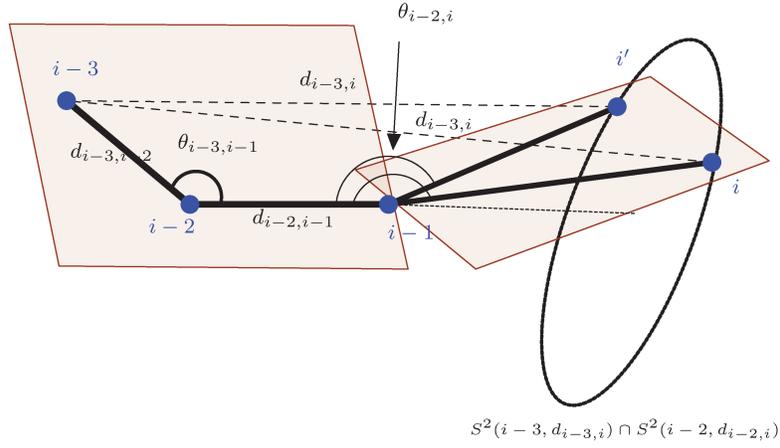


Figura 1.9: Posições possíveis para o i -ésimo átomo.

Assim, podemos expressar a posição do i -ésimo átomo em termos de seus três imediatos predecessores. Logo, temos 2^{n-3} possibilidades para a molécula e se procuramos por realizações incongruentes, fixamos também a posição para o quarto átomo, obtendo 2^{n-4} possibilidades para a molécula. É claro que se conhecemos valores adicionais de distâncias (átomos i e $i-k$ com $k \geq 4$), ou seja, $E_P \neq \emptyset$, algumas possíveis realizações serão infactíveis para estes valores.

Vamos supor agora que conhecemos todos os comprimentos e ângulos de ligação, além dos ângulos de torção, de uma molécula com n átomos. As fórmulas abaixo (veja [12]) nos dizem como determinar coordenadas cartesianas $\mathbf{x}(i) = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ de cada átomo i na molécula (ou seja, uma realização em \mathbb{R}^3):

$$\begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ 1 \end{bmatrix} = B_1 B_2 B_3 \cdots B_i \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, i \in \{4, \dots, n\},$$

onde as matrizes B_i são definidas do seguinte modo:

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & -d_{12} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_3 = \begin{bmatrix} -\cos \theta_{13} & -\sin \theta_{13} & 0 & -d_{23} \cos \theta_{13} \\ \sin \theta_{13} & -\cos \theta_{13} & 0 & d_{23} \sin \theta_{13} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$B_i = \begin{bmatrix} -\cos \theta_{i-2,i} & -\sin \theta_{i-2,i} & 0 & -d_{i-1,i} \cos \theta_{i-2,i} \\ \sin \theta_{i-2,i} \cos \omega_{i-3,i} & -\cos \theta_{i-2,i} \cos \omega_{i-3,i} & -\sin \omega_{i-3,i} & d_{i-1,i} \sin \theta_{i-2,i} \cos \omega_{i-3,i} \\ \sin \theta_{i-2,i} \sin \omega_{i-3,i} & -\cos \theta_{i-2,i} \sin \omega_{i-3,i} & \cos \omega_{i-3,i} & d_{i-1,i} \sin \theta_{i-2,i} \sin \omega_{i-3,i} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.2.2)$$

Assim, as coordenadas cartesianas para todos os átomos na molécula são completamente determinadas por $\cos \omega_{i-3,i}$ e $\sin \omega_{i-3,i}$, para $i = 4, \dots, n$.

Teorema 1.2.2. ([10]) Dada uma instância $G = (V, E, d)$ de um DMDGP, o número de realizações incongruentes $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tais que $\|x_u - x_v\| = d_{uv}$ para cada $\{u, v\} \in E$ é finito.

Demonstração. Provaremos por indução sobre o número de átomos. Para uma molécula com 4 átomos, fixamos os três primeiros átomos:

$$x_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x_2 = \begin{bmatrix} -d_{12} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x_3 = \begin{bmatrix} -d_{12} + d_{2,3} \cos \theta_{13} \\ d_{23} \sin \theta_{13} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Como o valor d_{14} é conhecido, podemos obter o valor de $\cos \omega_{14}$ (veja [10]), e assim, $\sin \omega_{14}$ pode assumir dois valores: $\pm \sqrt{1 - \cos^2 \omega_{14}}$. Consequentemente, por (1.2.2), obtemos no máximo duas possibilidades para o quarto átomo:

$$x_4 = \begin{bmatrix} -d_{12} + d_{23} \cos \theta_{13} - d_{34} \cos \theta_{13} \cos \theta_{24} + d_{34} \sin \theta_{13} \sin \theta_{24} \cos \omega_{14} \\ d_{23} \sin \theta_{13} - d_{34} \sin \theta_{13} \cos \theta_{24} - d_{34} \cos \theta_{13} \sin \theta_{24} \cos \omega_{14} \\ d_{34} \sin \theta_{24} (\sqrt{1 - \cos^2 \omega_{14}}) \end{bmatrix},$$

$$x'_4 = \begin{bmatrix} -d_{12} + d_{23} \cos \theta_{13} - d_{34} \cos \theta_{13} \cos \theta_{24} + d_{34} \sin \theta_{13} \sin \theta_{24} \cos \omega_{14} \\ d_{23} \sin \theta_{13} - d_{34} \sin \theta_{13} \cos \theta_{24} - d_{34} \cos \theta_{13} \sin \theta_{24} \cos \omega_{14} \\ d_{34} \sin \theta_{24} (-\sqrt{1 - \cos^2 \omega_{14}}) \end{bmatrix}.$$

Tais posições para o quarto átomo estão associadas a realizações congruentes já que todas as distâncias entre os 4 primeiros átomos são conhecidas. Logo, podemos escolher uma, dentre as duas possibilidades x_4 e x'_4 . Finalmente, supomos que para $n \geq 4$ átomos, temos um número finito de realizações que solucionam a instância do DMDGP. Adicionando mais um átomo na molécula, é possível determinar o valor de $\cos \omega_{n-2,n+1}$ pela lei dos cossenos e, para cada realização parcial dos primeiros n átomos, podemos obter no máximo duas posições para o átomo $n + 1$, usando a matriz B_{n+1} . \square

Corolário 1.2.3. ([10]) Para uma instância do DMDGP com $n \geq 4$ átomos existem, no máximo, 2^{n-4} possíveis realizações incongruentes.

Demonstração. Já sabemos que existem no máximo duas posições para o quarto átomo, e tais posições geram realizações congruentes. Escolhida uma posição pra o quarto átomo, esta posição gera no máximo duas posições para o quinto átomo (a partir da matriz B_5), ou seja, temos no máximo $2^1 = 2$ posições para o quinto átomo. Prosseguimos desta maneira, de forma que para cada átomo seguinte, temos no máximo o dobro do número de posições factíveis para o átomo anterior. Assim, para o n -ésimo átomo, teremos no máximo 2^{n-4} possíveis posições e cada posição está associada a uma realização da instância dada. \square

Observação 1.2.4. O DDGP é uma subclasse de problemas do DGP que tem conjunto solução finito, mas pode ser demonstrado que continua sendo NP-difícil [18]. Encontrar uma ordem para o DMDGP, diferentemente do DDGP (polinomial), é um problema NP-difícil [4], mas dependendo da

aplicação, a ordem pode ser obtida a partir das características do problema (estrutura de proteínas) [12]. Queremos destacar que a hipótese sobre os K vértices anteriores é o “mínimo” que podemos exigir para garantir a finitude do conjunto solução, apesar desta condição ser apenas suficiente. Este valor também está no “limite” para atingir a polinomialidade, já que se exigirmos $(K + 1)$ vértices anteriores ocorrem podas em todos os níveis (proporcional a $|V|$).

1.2.3 O DMDGP e o Algoritmo Branch-And-Prune

Vimos que dada uma clique, podemos determinar uma realização utilizando as matrizes B_i (1.2.2). Além disto, se uma realização parcial dos 4 primeiros vértices é dada, adicionando-se mais um vértice, é possível determinar o valor de $\cos \omega_{i-2,i+1}$, $i \geq 5$, e obter no máximo duas posições para o átomo $i + 1$, usando a matriz B_{i+1} (1.2.2).

Agora, apresentaremos um algoritmo combinatorial (apresentado em [12]) para o DMDGP que determina todas as soluções para tais instâncias.

Seja X o conjunto de todas as realizações incongruentes em \mathbb{R}^3 , para um dado grafo ponderado $G = (V, E, d)$ de um DMDGP. Assumindo que $X \neq \emptyset$, todo $x \in X$ é solução de

$$\forall \{u, v\} \in E \quad \|x_u - x_v\|^2 = d_{uv}^2. \quad (1.2.3)$$

Vimos que $|X|$ é finita. Ou seja, uma busca combinatorial é mais indicada do que a contínua. Tais resultados são válidos em um contexto um pouco mais geral: realizações em \mathbb{R}^K . Ilustraremos o caso $K = 2$, por este elucidar muito bem a situação geométrica. Consideramos $V = \{1, 2, 3, 4\}$ (veja a Figura 1.10).

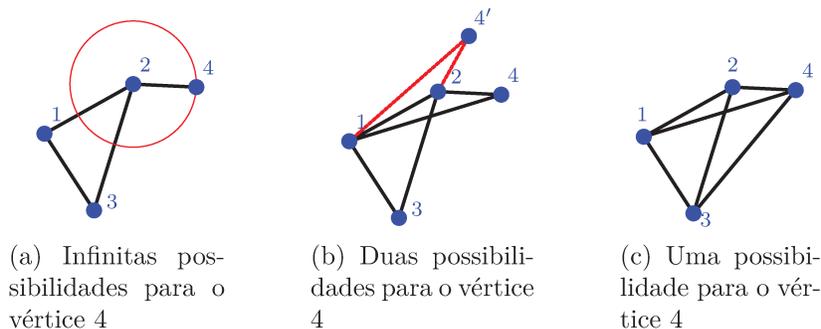


Figura 1.10: Possibilidades para a realização do vértice 4 em \mathbb{R}^2 .

À esquerda, temos $E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}\}$ e existe uma quantidade não enumerável de posições para o vértice 4. No centro, adicionamos a aresta $\{1, 4\}$, e temos exatamente duas possíveis posições para o vértice 4. À direita, adicionamos agora a aresta $\{3, 4\}$, e temos uma única possibilidade.

Assim, se usamos uma única distância (d_{24}) para realizar x_4 , temos incontáveis soluções, mas se usamos duas $(d_{14}$ e $d_{24})$ ou três $(d_{14}$, d_{24} e $d_{34})$, teremos um número finito de soluções.

Observe que para o K DMDGP, temos uma situação típica da figura (b): na ordem dada, temos duas realizações possíveis para um vértice v , para cada realização dos vértices anteriores, já que conhecemos K distâncias do vértice v aos seus predecessores imediatos. Portanto, assumindo uma realização \bar{x} dos primeiros $K + 1$ vértices como parte dos dados de entrada, teremos duas possíveis posições para x_{K+2} , quatro para x_{K+3} e assim por diante, de forma que $|X| = 2^{n-K-1}$. A situação fica mais interessante quando temos arestas adicionais em E , isto é, se conhecemos valores extras de distâncias além daqueles exigidos no DMDGP. Tais valores podem, eventualmente, tornar x_v^0 ou x_v^1 infactível. O número de soluções, para tais casos, é uma de nossas contribuições e será tratado no próximo capítulo.

De acordo com as observações acima, uma maneira natural de explorar a situação é efetuar uma busca binária, que “ramifica” no vértice $v \geq 5$, ao computar as possibilidades x_v^0 e x_v^1 e, quando possível, “poda” um ramo x_v^l , $l \in \{0, 1\}$ se existe uma aresta adicional $\{u, v\}$, cujo peso d_{uv} é incompatível com a posição x_v^l . Este método é conhecido como *Branch-and-Prune* [12].

O Branch-and-Prune (BP)

Considere uma instância do DMDGP. A cada passo do **BP**, podemos localizar o i -ésimo átomo em duas posições x_i e x'_i . Entretanto, alguma ou ambas as posições podem ser infactíveis, com respeito a certas restrições sobre as distâncias. A busca se ramifica em todas as posições atômicas que são factíveis com relação a todas as restrições e, se uma posição não é factível, ocorre a poda. Tais verificações de factibilidade, em cada passo, serão chamadas *testes de poda*⁵.

O teste de poda de Factibilidade Direta das Distâncias (DDF⁶) é feito do seguinte modo: para todos os pares de distâncias $\{i, j\} \in E_P = E \setminus E_D$ (onde $E_D = \{\{i, j\} \in E : |i - j| \leq 3\}$), checamos se $||x_j - x_i| - d_{ij}| < \epsilon$, onde $\epsilon > 0$ é uma tolerância dada. Se a inequação não é satisfeita, então podamos o respectivo nó da árvore de busca. Apesar deste teste ser bem simples, ele funciona muito bem. Uma importante propriedade do **BP** é que, mesmo no pior caso, onde temos complexidade exponencial (mas na prática polinomial, visto que, em geral, existem várias informações de poda) ele encontrará *todas* as soluções de uma instância dada.

Estrutura do Algoritmo

Seja T um grafo representando uma árvore de busca de um DMDGP. T é inicializado com os nós $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$ (sem ramificações), pois os primeiros três átomos podem ser fixados em posições factíveis x_1, x_2, x_3 e o quarto átomo x_4 pode ser fixado em qualquer das suas duas posições factíveis (simétricas em relação ao plano determinado pelos outros três). Para cada nó da árvore, no nível i , armazenamos:

- a posição $x_i \in \mathbb{R}^3$ do i -ésimo átomo;
- o produto acumulado $Q_i = \prod_{j=1}^i B_j$ das matrizes de torção (definidas em (1.2.2));
- um apontador para o nó pai (gerador) $P(i)$;

⁵No inglês: pruning tests

⁶Do inglês: Direct Distance Factibility

- apontadores para os subnós $L(i), R(i)$.

Observe que a estrutura de arestas do grafo T é codificada pelos operadores P, L, R definidos em cada nó. O procedimento recursivo no nível $i - 1$ é dado no algoritmo abaixo. Seja $y = (0, 0, 0, 1)^T$, $\epsilon > 0$ a tolerância dada e v um nó no nível $i - 1$ na árvore de busca T .

Algoritmo 1 BP[12]

```

1: BranchAndPrune( $T, v, i$ )
2: if  $i \leq n - 1$  then                                     ▷ computando as possibilidades para o  $i$ -ésimo átomo
3:   calculamos as matrizes de torção  $B_i$  and  $B'_i$ 
4:   recuperamos a matriz de torção acumulada  $Q_{i-1}$  do nó pai  $P(v)$ ;
5:   computamos  $Q_i = Q_{i-1}B_i$ ,  $Q'_i = Q_{i-1}B'_i$  e  $x_i, x'_i$  a partir de  $Q_i y, Q'_i y$ ;
6:   sejam  $\lambda = 1, \rho = 1$ ;
7:   if  $x_i$  é factível then                                   ▷ testes de poda
8:     crie um nó  $z$ , armazene  $Q_i$  e  $x_i$  em  $z$ , faça  $P(z) = v$  e  $L(v) = z$ ;
9:      $T \leftarrow T \cup \{z\}$ ;
10:    BranchAndPrune( $T, z, i + 1$ );
11:   else
12:      $L(v) = \text{Pruned}$ ;
13:   end if
14:   if  $x'_i$  é factível then
15:     crie um nó  $z'$ , armazene  $Q_i$  e  $x_i$  em  $z'$ , faça  $P(z) = v$  e  $R(v) = z'$ ;
16:      $T \leftarrow T \cup \{z'\}$ ;
17:     BranchAndPrune( $T, z', i + 1$ );
18:   else
19:      $R(v) = \text{Pruned}$ ;
20:   end if
21: else
22:   posição  $n$  atingida: uma solução foi encontrada.
23: end if

```

O algoritmo acima pode ser encontrado em [12] e leva em consideração as duas posições para o quarto vértice, ou seja, o número de soluções encontrado será o dobro do número de realizações incongruentes.

No passo 7 do algoritmo acima, outros testes de poda podem ser usados. Em [12], os autores consideram um teste que leva em conta um limitante superior $D(i, k)$, para a distância $\|x_i - x_k\|$, para todas as soluções $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ que são realizações factíveis do DMDGP: suponha que $h < i < k$ e $\{h, k\} \in E$. Se $D(i, k) < \|x_h - x_i\| - d_{hk}$, para toda realização factível $x : V \rightarrow \mathbb{R}^3$, então o nó associado à posição atômica x_i pode ser podado.

Exemplo 1.2.5. Vejamos um exemplo de uma árvore de busca associada a uma instância com $n = 7$ vértices, de um DMDGP ($K = 3$). Assim, vamos supor que, além das distâncias exigidas na definição do DMDGP (distâncias entre 4 vértices consecutivos), conhecemos os valores de d_{15} e d_{26} . Logo, as distâncias desconhecidas serão d_{16}, d_{17}, d_{27} e d_{37} . A priori, temos a seguinte árvore de busca (Figura 1.11):

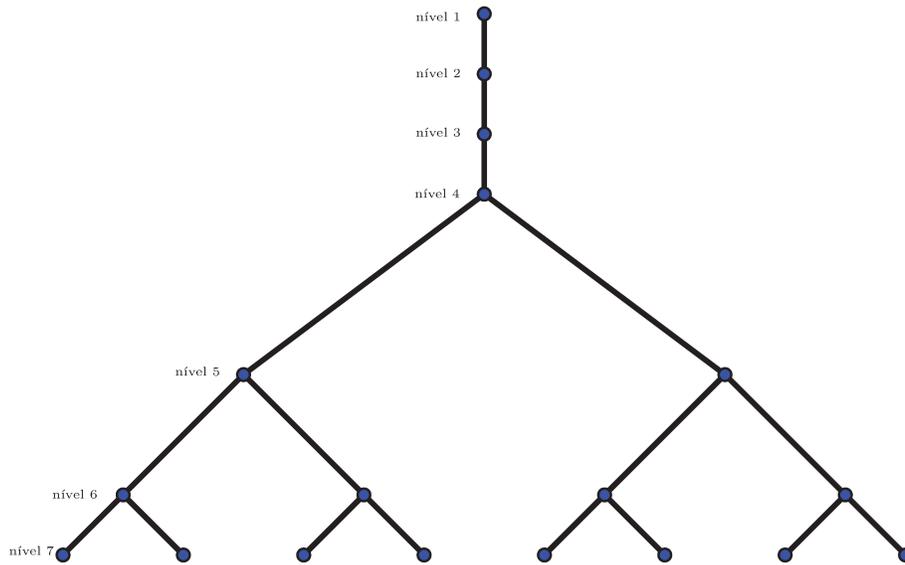


Figura 1.11: Árvore de busca do BP, se fixamos posições para os 4 primeiros vértices.

Vamos agora analisar o efeito das informações de poda: $E_P = \{\{1, 5\}, \{2, 6\}\}$. Como a distância d_{15} é conhecida, apenas uma, dentre as duas possíveis posições para o quinto vértice, será factível. Veja a Figura 1.12.

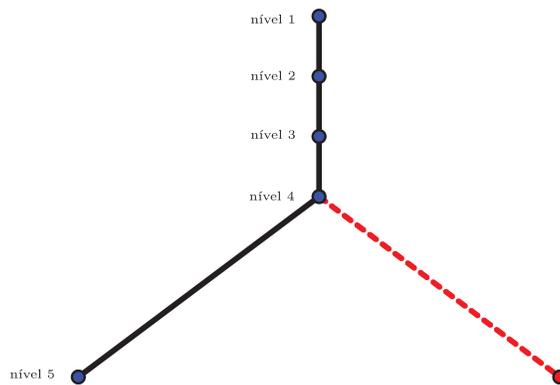


Figura 1.12: A primeira poda ocorre no nível 5.

Como a distância d_{26} é conhecida, ocorre mais uma poda no nível 6. Veja a figura 1.13.

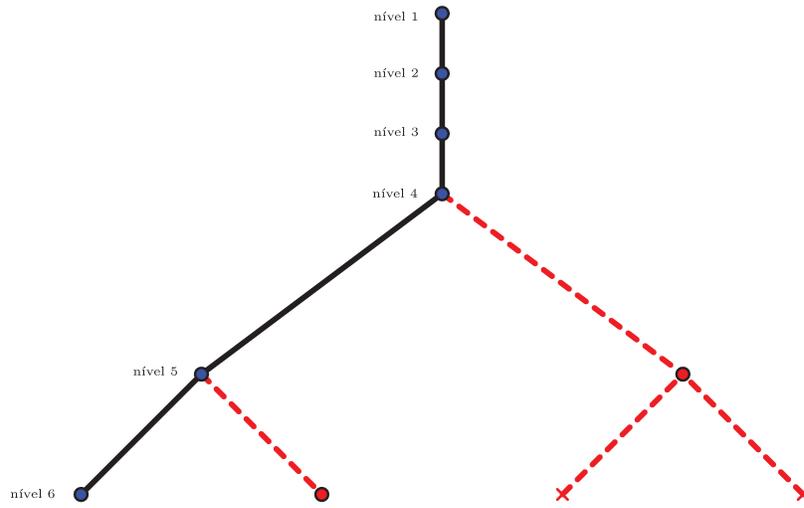


Figura 1.13: A segunda poda ocorre no nível 6.

Finalmente, nenhuma informação adicional é dada, e portanto, obtemos para cada posição factível no nível 6, duas posições factíveis no nível 7. Veja a figura 1.14.

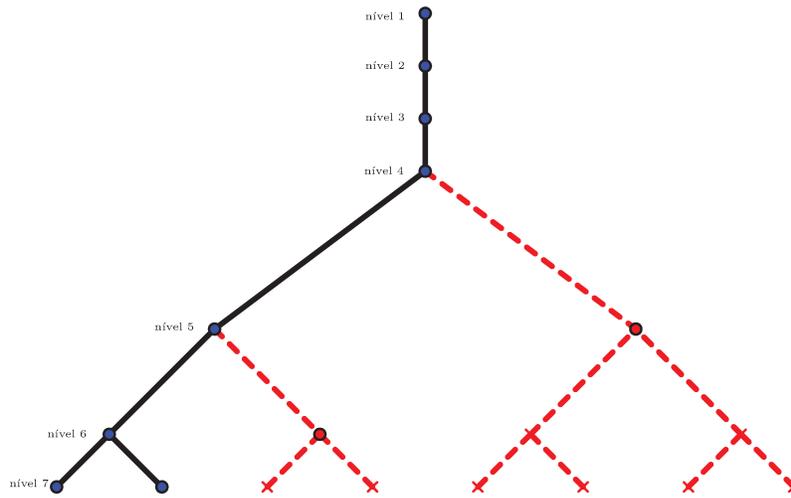


Figura 1.14: No total, obtemos 2 soluções.

Observação 1.2.6. Vale destacar que o **BP** faz uma busca “em profundidade” na árvore de possibilidades até que ocorram as “podas”. Assim, por exemplo, se $d_{1,n}$ é a única informação conhecida, do nível 5 até o nível n , o **BP** escolhe uma posição (dentre as duas possibilidades) para cada v_k , $4 \leq k \leq n$ e segue acumulando o produto das matrizes de torção (1.2.2) associadas até verificar a sua factibilidade no nível n (valor de $d_{1,n}$). Caso esta sequência de escolhas gere uma posição infactível para v_n , o **BP** faz um “bracktracking” na árvore de busca até que soluções factíveis sejam encontradas. Isto diminui consideravelmente o uso de memória, pois o armazenamento de todos os possíveis produtos matriciais (1.2.2) a cada nível até que ocorra a poda seria inviável.

Para ilustrar, vamos considerar um exemplo ($K = 3$) com $|V| = 7$ e $E_P = \{\{v_1, v_7\}\}$. Fixando uma posição para o quarto vértice, a árvore de busca (completa) tem 8 ramos e a poda ocorre apenas no último nível (nível 8) do **BP**.

No nível 5, ocorre a primeira ramificação, correspondente às duas possibilidades de posições para v_5 . O **BP** armazena os produtos das cinco matrizes de torção (1.2.2) que geram as posições $v_5^{(1)}$ e $v_5^{(2)}$. Uma dentre as duas possibilidades é escolhida, digamos $v_5^{(1)}$, e o método segue para o próximo nível.

No nível 6, ocorre uma nova bifurcação a partir de $v_5^{(1)}$, correspondente às duas possibilidades de posições para v_6 . O **BP** armazena os produtos das seis matrizes de torção que geram as posições $v_6^{(1,1)}$ e $v_6^{(1,2)}$. Uma dentre as duas possibilidades é escolhida, digamos $v_6^{(1,1)}$, e o método segue para o próximo nível.

No nível 7, ocorre uma nova bifurcação a partir de $v_6^{(1,1)}$, correspondente às duas possibilidades de posições para v_7 . O **BP** verifica se alguma das posições é factível, com relação ao valor conhecido de d_{17} . Suponhamos que ambas são infactíveis. O **BP** “apaga” os produtos matriciais que deram

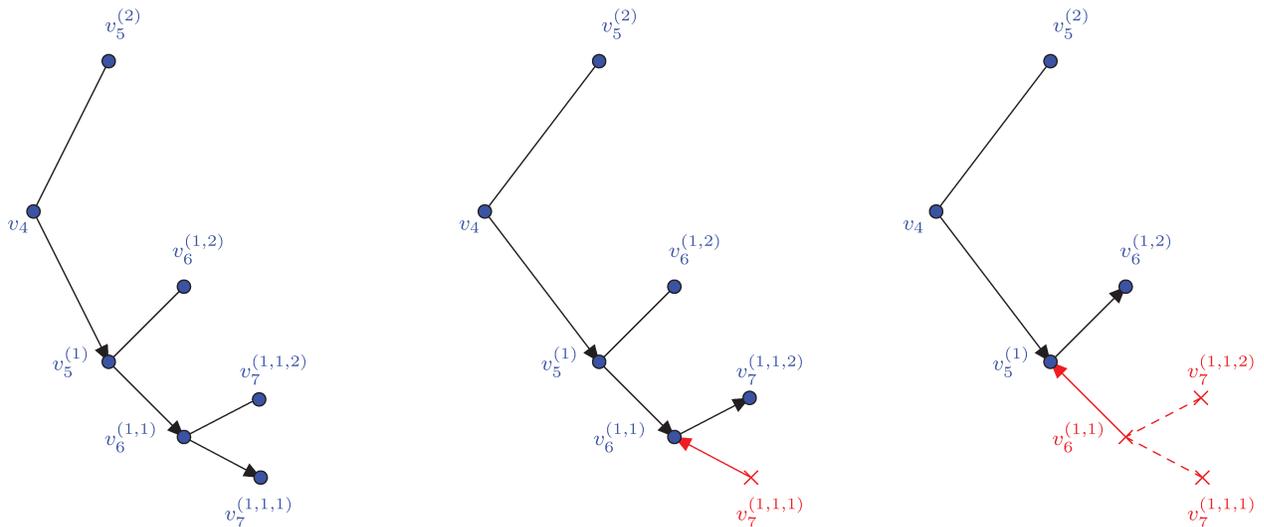


Figura 1.15: Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(1,1)}$.

origem a estas posições e retorna a posição (armazenada) $v_6^{(1,2)}$ (veja a Figura 1.15). Só então o

algoritmo calcula mais duas possibilidades de posições para v_7 , correspondentes a mais dois produtos matriciais. Suponhamos novamente que ambas são infactíveis.

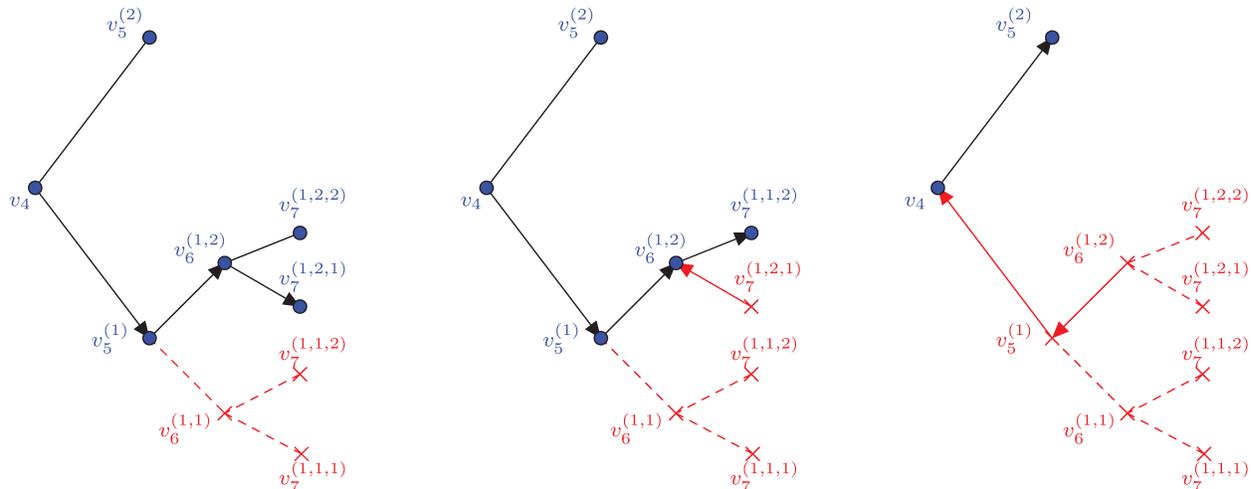


Figura 1.16: Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(1,2)}$.

O **BP** apaga os produtos matriciais que deram origem a estas posições e retorna a posição (armazenada) $v_5^{(2)}$ (veja a Figura 1.16).

A partir desta posição, determina mais duas possibilidades de posições para v_6 , digamos $v_6^{(2,1)}$ e $v_6^{(2,2)}$. Uma dentre as duas possibilidades é escolhida, digamos $v_6^{(2,1)}$, e o método segue para o próximo nível. No nível 7 ocorre uma nova bifurcação, a partir de $v_6^{(2,1)}$ correspondente às duas possibilidades de posições para v_7 . O **BP** verifica se alguma das posições é factível, com relação ao valor conhecido de d_{17} . Suponhamos que ambas são infactíveis. O **BP** apaga os produtos matriciais que deram origem a estas posições e retorna a posição (armazenada) $v_6^{(2,2)}$. O algoritmo calcula mais duas possibilidades de posições para v_7 , e uma delas é a solução do problema (veja a Figura 1.17).

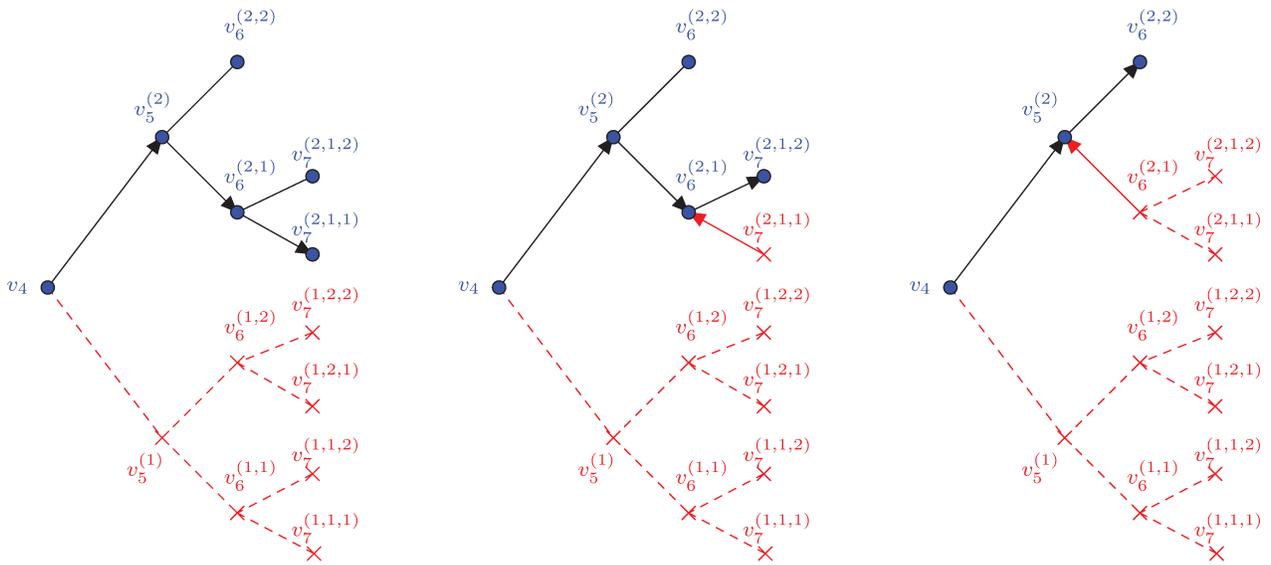


Figura 1.17: Backtracking após infactibilidade para as duas posições de v_7 geradas a partir de $v_6^{(2,1)}$. A partir de $v_6^{(2,2)}$ duas novas possibilidades para v_7 são calculadas e uma delas é a solução do problema.

Observe que existe uma “economia” de memória quando fazemos o “backtracking” descrito acima, já que os produtos matriciais que geram soluções infactíveis são “apagados” antes de uma nova busca.

Capítulo 2

O EDMCP

Um DGP_K (com K fixado) está fortemente relacionado a um outro tipo de problema, que trata dos possíveis completamentos de uma certa matriz de distâncias euclidianas. Neste capítulo, apresentaremos alguns resultados da literatura relacionados a este tipo de problema. Além disto, introduziremos os determinantes de Cayley-Menger, que terão um papel importante no próximo capítulo.

Uma matriz simétrica $A = [a_{ij}]$ de ordem n , com $a_{ij} > 0, i \neq j$ e $a_{ii} = 0$, é dita ser uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^K se existe um conjunto de n vetores $\{x_1, \dots, x_n\}$ em \mathbb{R}^K tais que $\|x_i - x_j\| = a_{ij}, \forall (i, j)$.

No EDMCP¹ (Problema de completamento de matrizes de distâncias euclidianas [8]), é dada uma matriz parcial de distâncias (isto é, certas entradas são desconhecidas) A , e desejamos obter como solução um par (\bar{A}, K) , onde \bar{A} é um completamento simétrico de A , $K \in \mathbb{N}$, tais que:

- (a) \bar{A} é uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^K e
- (b) K é o menor valor possível.

Uma variante do EDMCP é o EDMCP $_K$, onde K é um dado inicial e desejamos obter (se possível) os completamentos possíveis \bar{A} satisfazendo a condição (a) acima.

Dada uma instância $G = (V, E, d)$ de um K DMDGP, podemos associar a ela uma matriz parcial de distâncias $D = [d_{ij}]$, onde $d_{ij} = d(\{v_i, v_j\}), \forall \{v_i, v_j\} \in E$. Tal relação será explorada no próximo capítulo.

2.1 Determinantes de Cayley-Menger

Considera-se que a geometria de distâncias surgiu em 1928, quando Menger [17] caracterizou vários conceitos geométricos usando distâncias. Posteriormente, com os resultados de Blumenthal [3] o tema se tornou, de fato, uma nova área de pesquisa. Naquela época, o principal problema era encontrar condições necessárias e suficientes para decidir se uma dada matriz D era uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^K para algum K . Observe que, neste caso, todas as distâncias são

¹Do inglês: *Euclidean Distance Matrix Completion Problem*

consideradas conhecidas. A primeira menção explícita ao EDMCP (veja definição acima), onde nem todas as distâncias são conhecidas, foi dada por Yemini [25] em 1978. Nesta seção apresentaremos alguns resultados de Blumenthal [3] e ilustraremos algumas propriedades geométricas dos bideterminantes de Cayley-Menger.

Definimos o *bideterminante de Cayley-Menger* associado às sequências de pontos P_{i_1}, \dots, P_{i_n} e P_{j_1}, \dots, P_{j_n} , em algum espaço euclidiano, por

$$\text{CM}(i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & d_{i_1, j_1}^2 & \cdots & d_{i_1, j_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d_{i_n, j_1}^2 & \cdots & d_{i_n, j_n}^2 \end{vmatrix}, \quad (2.1.1)$$

onde $d_{i,j}^2 = \|P_i - P_j\|^2$. Quando as sequências de pontos são as mesmas, escrevemos simplesmente $\text{CM}(i_1, \dots, i_n)$ e nos referimos a este determinante como o *determinante de Cayley-Menger* associado ao subconjunto de pontos P_{i_1}, \dots, P_{i_n} . Assim, temos:

$$\text{CM}(i_1, \dots, i_n) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & d_{i_1, i_1}^2 & \cdots & d_{i_1, i_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d_{i_n, i_1}^2 & \cdots & d_{i_n, i_n}^2 \end{vmatrix}. \quad (2.1.2)$$

Observação 2.1.1. Devido ao significado geométrico, alguns autores, nas definições (1) e (2) acima, acrescentam o fator $\frac{(-1)^n}{2^{n-1}}$. Para fazer uso deste artifício e evitar confusões futuras, definimos:

$$D(i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n) = \frac{(-1)^n}{2^{n-1}} \text{CM}(i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n); \quad (2.1.3)$$

$$D(i_1, \dots, i_n) = \frac{(-1)^n}{2^{n-1}} \text{CM}(i_1, \dots, i_n); \quad (2.1.4)$$

e quando utilizarmos a notação D iremos dizer bideterminante (determinante) de Cayley-Menger *com sinal*.

2.1.1 O significado de $D(i, j)$

Agora, vamos nos familiarizar com os determinantes de Cayley-Menger. Inicialmente, observe que para um par de pontos $\{P_1, P_2\}$, em algum espaço euclidiano, vale:

$$D(1, 2) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{12}^2 \\ 1 & d_{21}^2 & 0 \end{vmatrix} = d_{12}^2.$$

Logo, $D(i, j)$ é igual ao quadrado da distância entre os pontos P_i e P_j .

2.1.2 O significado de $D(i_1, \dots, i_n)$

Para três ou mais pontos, vamos considerar o simplex Δ com vértices em P_1, \dots, P_{k+1} ($K \geq 2$) e $P_i = (x_{i1}, \dots, x_{ik}) \in \mathbb{R}^k$, $1 \leq i \leq (k+1)$. Inicialmente, note que o volume do simplex Δ , sobre $k+1$ pontos, em \mathbb{R}^k , é dado por ([3]):

$$\text{vol}(\Delta) = \frac{1}{k!} \det \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1,k} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2,k} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{k+1,1} & x_{k+1,2} & \dots & x_{k+1,k} & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.1.5)$$

Agora, defina as seguintes matrizes:

$$A = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{k+1,1} & x_{k+1,2} & \dots & x_{k+1,k} & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & 0 \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{k+1,1} & x_{k+1,2} & \dots & x_{k+1,k} & 0 \end{bmatrix}.$$

Observe que $\det(B) = 0$ e, por (2.1.5), $\det(A) = k! \text{vol}(\Delta)$. Por outro lado,

$$\det(A) = \det \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & 1 \\ x_{21} - x_{11} & x_{22} - x_{12} & \dots & x_{2k} - x_{1k} & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{k+1,1} - x_{11} & x_{k+1,2} - x_{12} & \dots & x_{k+1,k} - x_{1k} & 0 \end{bmatrix} = k! \text{vol}(\Delta).$$

Denote por p_k o vetor posição do ponto P_k . Como

$$A \cdot A^T = (\langle p_i, p_j \rangle + 1)_{1 \leq i, j \leq (k+1)} \quad \text{e} \quad B \cdot B^T = (\langle p_i, p_j \rangle)_{1 \leq i, j \leq (k+1)},$$

obtemos que

$$\begin{aligned} \det(A \cdot A^T) &= \det \begin{bmatrix} \langle p_1, p_1 \rangle + 1 & \langle p_1, p_2 \rangle + 1 & \dots & \langle p_1, p_{k+1} \rangle + 1 & 0 \\ \langle p_2, p_1 \rangle + 1 & \langle p_2, p_2 \rangle + 1 & \dots & \langle p_2, p_{k+1} \rangle + 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \langle p_{k+1}, p_1 \rangle + 1 & \langle p_{k+1}, p_2 \rangle + 1 & \dots & \langle p_{k+1}, p_{k+1} \rangle + 1 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix} = \\ &= -\det \begin{bmatrix} \langle p_1, p_1 \rangle & \langle p_1, p_2 \rangle & \dots & \langle p_1, p_{k+1} \rangle & 1 \\ \langle p_2, p_1 \rangle & \langle p_2, p_2 \rangle & \dots & \langle p_2, p_{k+1} \rangle & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \langle p_{k+1}, p_1 \rangle & \langle p_{k+1}, p_2 \rangle & \dots & \langle p_{k+1}, p_{k+1} \rangle & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & -1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Agora, $\det(\langle p_i, p_j \rangle) = \det(B \cdot B^T) = \det^2(B) = 0$, e assim, no último determinante acima, na posição $(k+2, k+2)$, podemos substituir “-1” por “0” e o valor do determinante será o mesmo. Denotando por M a matriz obtida após esta substituição, isto é,

$$M = \begin{bmatrix} \langle p_1, p_1 \rangle & \langle p_1, p_2 \rangle & \dots & \langle p_1, p_{k+1} \rangle & 1 \\ \langle p_2, p_1 \rangle & \langle p_2, p_2 \rangle & \dots & \langle p_2, p_{k+1} \rangle & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \langle p_{k+1}, p_1 \rangle & \langle p_{k+1}, p_2 \rangle & \dots & \langle p_{k+1}, p_{k+1} \rangle & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

temos então que $\det(M) = -\det(A \cdot A^T) = -(k!)^2 \text{vol}^2(\Delta)$.

Vamos considerar agora, o determinante de Cayley-Menger com sinal, associado ao simplex Δ :

$$\text{CM}(1, 2, \dots, k+1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & \dots & d_{1,k+1}^2 \\ 1 & d_{21}^2 & 0 & d_{23}^2 & \dots & d_{2,k+1}^2 \\ 1 & d_{31}^2 & d_{32}^2 & 0 & \dots & d_{3,k+1}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d_{k+1,1}^2 & d_{k+1,2}^2 & \dots & d_{k+1,k+1}^2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Considerando que $d_{ij}^2 = \langle p_i, p_i \rangle - 2 \langle p_i, p_j \rangle + \langle p_j, p_j \rangle$ e usando operações elementares sobre linhas e colunas, obtemos:

$$\begin{aligned} \text{CM}(1, 2, \dots, k+1) &= \det \begin{bmatrix} -2 \langle p_1, p_1 \rangle & -2 \langle p_1, p_2 \rangle & \dots & -2 \langle p_1, p_{k+1} \rangle & 1 \\ -2 \langle p_2, p_1 \rangle & -2 \langle p_2, p_2 \rangle & \dots & -2 \langle p_2, p_{k+1} \rangle & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -2 \langle p_{k+1}, p_1 \rangle & -2 \langle p_{k+1}, p_2 \rangle & \dots & -2 \langle p_{k+1}, p_{k+1} \rangle & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} = \\ &= (-2)^k \det(M) = (-2)^k \left(-(k!)^2 \text{vol}^2(\Delta) \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{CM}(1, 2, \dots, k+1) = (-1)^{k+1} 2^k (k!)^2 \text{vol}^2(\Delta).$$

Portanto,

$$\text{vol}^2(\Delta) = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} \text{CM}(1, 2, \dots, k+1) = \frac{1}{(k!)^2} \text{D}(1, 2, \dots, k+1).$$

Segue então que, dado um inteiro positivo k , o determinante $\text{D}(1, 2, \dots, k+1)$ é proporcional ao quadrado do k -volume do simplex definido por $k+1$ pontos.

2.1.3 O significado de $D(i_1, i_2; j_1, j_2)$

Vamos agora entender o significado dos bideterminantes de Cayley-Menger. Consideremos inicialmente três pontos $\{P_1, P_2, P_3\}$ em algum espaço euclidiano. Temos:

$$D(1, 2; 1, 3) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{13}^2 \\ 1 & d_{21}^2 & d_{23}^2 \end{vmatrix} = \frac{1}{2}(d_{13}^2 + d_{21}^2 - d_{23}^2)$$

$$\Rightarrow D(1, 2; 1, 3) = (P_2 - P_1) \cdot (P_3 - P_1),$$

onde a última igualdade segue da lei dos cossenos.

Assim, o bideterminante $D(i, j; i, k)$ é igual ao produto interno entre os vetores $(P_j - P_i)$ e $(P_k - P_i)$. De modo análogo, prova-se que $D(i_1, i_2; j_1, j_2)$ é igual ao produto interno entre os vetores $(P_{i_2} - P_{i_1})$ e $(P_{j_2} - P_{j_1})$.

2.1.4 O significado de $D(i_1, i_2, i_3; j_1, j_2, j_3)$

Consideremos agora os pontos $\{P_{i_1}, P_{i_2}, P_{i_3}\}$ e $\{Q_{j_1}, Q_{j_2}, Q_{j_3}\}$ em algum espaço euclidiano. Temos:

$$D(i_1, i_2, i_3; j_1, j_2, j_3) = -\frac{1}{4} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & d_{i_1, j_1} & d_{i_1, j_2}^2 & d_{i_1, j_3}^2 \\ 1 & d_{i_2, j_1} & d_{i_2, j_2}^2 & d_{i_2, j_3}^2 \\ 1 & d_{i_3, j_1} & d_{i_3, j_2}^2 & d_{i_3, j_3}^2 \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow D(i_1, i_2, i_3; j_1, j_2, j_3) = [(P_1 - P_3) \times (P_2 - P_3)] \cdot [(Q_1 - Q_3) \times (Q_2 - Q_3)].$$

Se consideramos o caso em que $P_1 = Q_1$ e $P_3 = Q_3$, podemos expressar o cosseno do ângulo entre os planos determinados por P_1, P_2, P_3 e Q_1, Q_2, Q_3 usando a fórmula acima. Temos, então:

$$D(i_1, i_2, i_3; j_1, j_2, j_3) = 4A_1 A_2 \cos \phi,$$

onde $A_1 = \frac{1}{2}|(P_1 - P_3) \times (P_2 - P_3)|$ é a área do triângulo com vértices em P_1, P_2, P_3 e $A_2 = \frac{1}{2}|(Q_1 - Q_3) \times (Q_2 - Q_3)|$ é a área do triângulo com vértices em Q_1, Q_2, Q_3 . Veja a Figura 2.1.

Assim, podemos escrever

$$\cos(\phi) = \frac{D(P_1, P_2, P_3; Q_1, Q_2, Q_3)}{\sqrt{D(P_1, P_2, P_3)}\sqrt{D(Q_1, Q_2, Q_3)}}$$

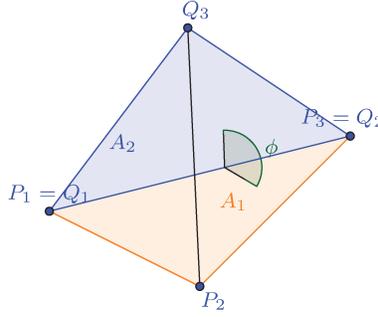


Figura 2.1: Ângulo ϕ entre os planos determinados por P_1, P_2, P_3 e Q_1, Q_2, Q_3 .

2.2 Condições necessárias e suficientes, para que uma matriz completa D seja uma matriz de distâncias euclidianas

Como dito anteriormente, durante um certo tempo, o principal problema em Geometria de Distâncias era encontrar condições necessárias e suficientes para decidir se uma dada matriz D era uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^K para algum K . Nesta seção, apresentaremos alguns resultados neste sentido, descritos em [3].

Teorema 2.2.1. [3] Uma condição necessária e suficiente para que a matriz

$$D = \begin{bmatrix} 0 & d_{12} & \cdots & d_{1,n+1} \\ d_{21} & 0 & \cdots & d_{2,n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ d_{n+1,1} & d_{n+1,2} & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

definida sobre $n+1$ pontos $\{P_1, \dots, P_{n+1}\}$, seja uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^n é que, para todo $k = 2, \dots, n+1$, o sinal de $\text{CM}(1, \dots, k)$ seja $(-1)^k$, ou seja, $(-1)^k \text{CM}(1, \dots, k) \geq 0$.

Pode parecer que a condição $(-1)^{n+1} \text{CM}(1, \dots, n+1) \geq 0$ já é suficiente para garantir que D seja uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^n , entretanto, isto não é verdade. Por exemplo, a matriz

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1.78 & 2.67582 \\ 1 & 0 & 0.5 & 1.06066 \\ 1.78 & 0.5 & 0 & 0.25 \\ 2.67582 & 1.06066 & 0.25 & 0 \end{bmatrix}$$

satisfaz $\text{CM}(1, 2, 3, 4) = 3.20375 > 0$. Mas $\text{CM}(1, 2, 3) = 2.68026 > 0$ e, pelo Teorema anterior, ela não é uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^3 . De fato, observe que, supondo que D representa um 3-simplex sobre 4 vértices, ao considerarmos a face com vértices P_1, P_2, P_3 , a desigualdade triangular não é satisfeita, pois $d_{12} + d_{23} = 1 + 0.5 = 1.5 < 2.67582 = d_{13}$, o que é um absurdo.

Vamos considerar agora um conjunto com $n+2$ pontos. Se esse conjunto pode ser imerso em \mathbb{R}^n , então seu $(n+1)$ -volume deve ser nulo, e temos o seguinte resultado:

Teorema 2.2.2. [3] Se uma matriz de distâncias sobre k pontos $\{P_1, \dots, P_k\}$ está em \mathbb{R}^n (o Teorema 2.2.1 está satisfeito), então uma condição necessária e suficiente para que a matriz sobre os $k + 1$ pontos $\{P_1, \dots, P_k; P_{k+1}\}$ esteja em \mathbb{R}^n é que $\text{CM}(1, \dots, k, k + 1) = 0$.

Analogamente, em \mathbb{R}^n , o $(n + 1)$ e $(n + 2)$ -volumes sobre $n + 3$ pontos devem se anular. Assim, temos o seguinte teorema:

Teorema 2.2.3. [3] Se uma matriz de distâncias sobre $n + 1$ pontos $\{P_1, \dots, P_{n+1}\}$ está em \mathbb{R}^n (o Teorema 2.2.1 está satisfeito), então uma condição necessária e suficiente para que a matriz sobre os $n + 3$ pontos $\{P_1, \dots, P_{n+1}; P_{n+2}, P_{n+3}\}$ esteja em \mathbb{R}^n é que:

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, n + 2) = 0,$$

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, n + 3) = 0,$$

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, n + 2, n + 3) = 0.$$

Combinando os teoremas acima, obtemos um teorema “global” para imersão de m pontos em \mathbb{R}^n :

Teorema 2.2.4. [3] Uma matriz de distâncias D sobre $h + 1$ pontos $\mathbf{P} = \{P_1, \dots, P_{h+1}\}$ está em \mathbb{R}^n se, e somente se,

- i) existe uma submatriz R sobre $n + 1$ pontos $\{P_1, \dots, P_{n+1}\} \subset \mathbf{P}$ tal que, para todo $k = 2, \dots, n + 1$, o sinal de $\text{CM}(1, \dots, k)$ é igual a $(-1)^k$;
- ii) para todo par $P_i, P_j \in \mathbf{P}$, $(i, j = n + 2, \dots, h + 1)$, temos:

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, i) = 0,$$

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, j) = 0,$$

$$\text{CM}(1, \dots, n + 1, i, j) = 0.$$

2.3 Aplicações ao EDMCP₃

Nesta seção, iremos sempre supor que a condição (i) do Teorema 2.2.4 é satisfeita, pois estamos interessados em aplicar os resultados da seção 2.2 em matrizes parciais associadas à instâncias do K DMDGP. Em tais instâncias, uma realização válida em \mathbb{R}^K , para os K primeiros vértices é dada, e as respectivas desigualdades triangulares estritas são satisfeitas. Além disto, estamos tratando de instâncias onde o conjunto solução é não-vazio.

Nas condições acima, seja uma matriz parcial de distâncias $D = [d_{ij}]$ de um EDMCP₃, tal que a distância d_{15} é desconhecida. Analisaremos o número de possibilidades para d_{15} . Para isto, necessitamos do seguinte lema:

Lema 2.3.1. (Teorema de Jacobi [22]) Sejam $A = [a_{ij}]_1^n$ uma matriz quadrada, $(\text{adj}A)^T = [A_{ij}]_1^n$, $1 \leq p < n$ e $\sigma : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$ uma permutação arbitrária, digamos $\sigma = \begin{bmatrix} i_1 & \cdots & i_n \\ j_1 & \cdots & j_n \end{bmatrix}$ (significa que $\sigma(i_r) = j_r$, $r = 1, \dots, n$). Então,

$$\begin{vmatrix} A_{i_1 j_1} & \cdots & A_{i_1 j_p} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ A_{i_p j_1} & \cdots & A_{i_p j_p} \end{vmatrix} = (-1)^\sigma \begin{vmatrix} a_{i_{p+1}, j_{p+1}} & \cdots & a_{i_{p+1}, j_n} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{i_n, j_{p+1}} & \cdots & a_{i_n, j_n} \end{vmatrix} \cdot |A|^{p-1}.$$

Observe que, pelo lema anterior, considerando-se as linhas 2 e $n+1$, e as colunas 2 e $n+1$ de $\text{CM}(D) = \text{CM}(1, 2, \dots, n+1)$, e denotando por CM_i^j o determinante obtido de $\text{CM}(D)$ ao eliminarmos a linha i e a coluna j , obtemos que:

$$\begin{vmatrix} \text{CM}_2^2 & \text{CM}_2^{n+1} \\ \text{CM}_{n+1}^2 & \text{CM}_{n+1}^{n+1} \end{vmatrix} = (-1)^0 \text{CM}_{2, n+1}^{2, n+1} \cdot (\text{CM}(D))^{2-1} = \text{CM}_{2, n+1}^{2, n+1} \cdot \text{CM}(D),$$

onde $\text{CM}_{2, n+1}^{2, n+1}$ significa que eliminamos as linhas 2, $n+1$ e as colunas 2, $n+1$. Observe ainda que, neste caso, $\sigma = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & n+1 \\ 1 & \cdots & n+1 \end{bmatrix}$, ou seja, $\sigma(j) = j, \forall j$.

Proposição 2.3.2. [16] Considere a matriz parcial D abaixo, associada a uma instância de um DMDGP, tal que a entrada $\delta = d_{15}^2$ é desconhecida:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & d_{14}^2 & \delta & \\ d_{21}^2 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & d_{25}^2 & \\ d_{31}^2 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & d_{35}^2 & \\ d_{41}^2 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 & d_{45}^2 & \\ \delta & d_{52}^2 & d_{53}^2 & d_{54}^2 & 0 & \end{bmatrix}.$$

A equação quadrática $\text{CM}(D, \delta) = 0$ (os valores de δ que anulam $\text{CM}(D)$) tem solução real se, e somente se, D é uma matriz de distâncias euclidianas em \mathbb{R}^3 . Neste caso, ela tem duas soluções distintas δ^1, δ^2 , que são dois valores válidos para a distância desconhecida d_{15}^2 .

Demonstração. (adaptada de [20]) Se a equação tem solução real, por definição, D é uma matriz de distâncias euclidianas. Suponha agora que

$$\text{CM}(D, \delta) = \det \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & d_{14}^2 & \delta \\ 1 & d_{21}^2 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & d_{25}^2 \\ 1 & d_{31}^2 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & d_{35}^2 \\ 1 & d_{41}^2 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 & d_{45}^2 \\ 1 & \delta & d_{52}^2 & d_{53}^2 & d_{54}^2 & 0 \end{bmatrix} = 0,$$

onde $\delta = \|p_1 - p_5\|^2 = d_{15}^2$. Seja CM_i^j o determinante obtido de $\text{CM}(D, \delta)$ ao eliminarmos a linha i e a coluna j . Aplicando o Lema 2.3.1, obtemos:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \text{CM}_2^2 & \text{CM}_2^6 \\ \text{CM}_6^2 & \text{CM}_6^6 \end{vmatrix} &= \text{CM}(D, \delta) \cdot \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 \\ 1 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 \end{vmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \text{CM}_2^2 \text{CM}_6^6 - \text{CM}_2^6 \text{CM}_6^2 &= \text{CM}(D, \delta) \cdot V, \quad \text{onde } V = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 \\ 1 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Observe que V é proporcional ao quadrado do volume do 2-simplex determinado por $\{p_2, p_3, p_4\}$, e portanto, $V \neq 0$ (neste caso, $V < 0$), se supomos que os pontos não são colineares (tal hipótese está satisfeita no DMDGP). Assim, a equação $\text{CM}(D, \delta) = 0$ pode ser reescrita como:

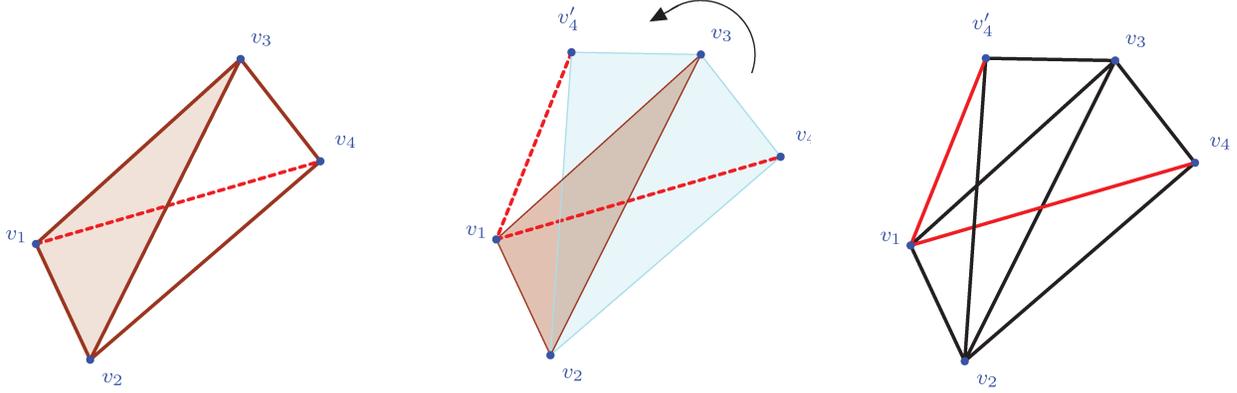
$$\begin{aligned} 0 = \text{CM}(D, \delta) &= \frac{\text{CM}_2^2 \text{CM}_6^6 - \text{CM}_2^6 \text{CM}_6^2}{V} \Leftrightarrow \text{CM}_2^2 \text{CM}_6^6 = \text{CM}_2^6 \text{CM}_6^2 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \text{CM}_2^2 \text{CM}_6^6 = (\text{CM}_2^6)^2, \end{aligned}$$

onde usamos que $\text{CM}_2^6 = \text{CM}_6^2$ (simetria). Assumindo que a base triangular determinada por $\{p_2, p_3, p_4\}$ é não degenerada, obtemos que

$$\text{CM}_2^6 = \pm \sqrt{\text{CM}_2^2 \text{CM}_6^6},$$

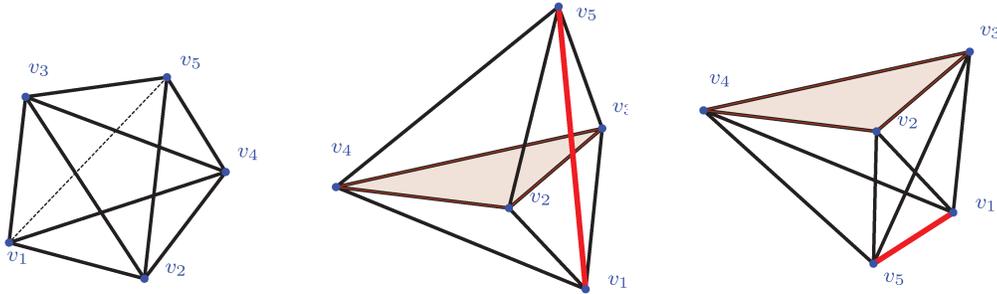
onde o termo dentro da raiz é positivo. Como o lado esquerdo da equação acima é linear em $\delta = \|p_1 - p_5\|_2^2$, obtemos dois valores distintos para δ . \square

Observação 2.3.3. O resultado acima continua válido se considerarmos a realização em \mathbb{R}^K de uma quase-clique (uma clique com uma aresta faltante) sobre $K + 2$ vértices de um ${}^K\text{DMDGP}$. Enfatizamos a dependência do número de vértices em relação ao espaço euclidiano \mathbb{R}^K , isto é, para uma quase-clique sobre $K + r$ vértices, $r \geq 3$, o resultado não é válido (e tal caso será tratado mais adiante). É essencial que tenhamos $r = 2$. No caso $K = 3$, cada possibilidade para a distância desconhecida dá origem a duas realizações em \mathbb{R}^3 . Ilustramos os casos $K = 2$ e $K = 3$ nas Figuras 2.2 e 2.3, respectivamente.



(a) Uma quase-clique sobre 4 vértices. A princípio, sabemos que podemos realizar os 4 vértices no espaço. (b) Se exigimos 3-volume nulo, imagine que v_4 pode se mover, “preso” a v_2 e v_3 . (c) Obtemos duas posições de modo a obter 3-volume nulo (realização em \mathbb{R}^2), que correspondem aos dois possíveis valores de d_{15} .

Figura 2.2: Uma quase-clique sobre 4 vértices admite duas realizações incongruentes no plano.



(a) Uma quase-clique sobre 5 vértices. (b) Uma realização em \mathbb{R}^3 para um dado valor de comprimento (em vermelho) de aresta factível. (c) Uma realização para o outro valor de comprimento (em vermelho) de aresta factível.

Figura 2.3: Uma quase-clique sobre 5 vértices admite duas realizações incongruentes no espaço.

Proposição 2.3.4. [20] Considere agora uma matriz parcial de distâncias $D = [d_{ij}]$ associada a uma instância de um DMDGP, tal que apenas a distância d_{16} é desconhecida:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & ? \\ d_{21} & 0 & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & 0 & d_{34} & d_{35} & d_{36} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & 0 & d_{45} & d_{46} \\ d_{51} & d_{52} & d_{53} & d_{54} & 0 & d_{56} \\ ? & d_{62} & d_{63} & d_{64} & d_{65} & 0 \end{bmatrix}.$$

Façamos $\delta = d_{16}^2$. Então, a equação quadrática $\text{CM}(D, \delta) = 0$ tem uma única solução real, que é o único valor válido para a distância desconhecida d_{16} .

Demonstração. Procedendo como na proposição anterior, temos a realização de uma clique sobre 6 vértices em \mathbb{R}^3 e, assim, $\text{CM}(D, \delta) = 0$. Aplicando o Lema 2.3.1, obtemos:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \text{CM}_2^2 & \text{CM}_2^7 \\ \text{CM}_7^2 & \text{CM}_7^7 \end{vmatrix} &= \text{CM}(D, \delta) \cdot \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & d_{25} \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & d_{35} \\ 1 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 & d_{45} \\ 1 & d_{52} & d_{53} & d_{54} & 0 \end{vmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \text{CM}_2^2 \text{CM}_7^7 - \text{CM}_2^7 \text{CM}_7^2 &= \text{CM}(D, \delta) \cdot V, \quad \text{onde } V = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & d_{25} \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & d_{35} \\ 1 & d_{42}^2 & d_{43}^2 & 0 & d_{45} \\ 1 & d_{52} & d_{53} & d_{54} & 0 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Observe que V é proporcional ao quadrado do volume do 3-simplex determinado por $\{v_2, v_3, v_4, v_5\}$ e, portanto, $V > 0$, supondo que os pontos não são coplanares. Por outro lado, $\text{CM}_2^2 = 0 = \text{CM}_7^7$, pois são proporcionais a quadrados de volumes em \mathbb{R}^4 . Assim, a equação $\text{CM}(D, \delta) = 0$ pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} 0 = \text{CM}(D, \delta) &= \frac{\text{CM}_2^2 \text{CM}_7^7 - \text{CM}_2^7 \text{CM}_7^2}{V} \Leftrightarrow \text{CM}_2^7 \text{CM}_7^2 = 0 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow (\text{CM}_2^7)^2 = 0, \end{aligned}$$

onde usamos que $\text{CM}_2^7 = \text{CM}_7^2$ (simetria). Assumindo que o tetraedro determinado por $\{v_2, v_3, v_4, v_5\}$ é não degenerado, obtemos:

$$\text{CM}_2^7 = 0,$$

onde o lado esquerdo da equação acima é linear em $\delta = \|v_1 - v_6\|_2^2$. Portanto, temos um único valor real para δ . \square

A proposição acima também é válida se considerarmos uma matriz de distâncias em dimensão $n \geq 6$, conforme demonstramos abaixo:

Proposição 2.3.5. [20] Considere uma matriz parcial de distâncias $D = [d_{ij}]$ associada a uma instância de um DMDGP, tal que apenas a distância d_{1n} é desconhecida. Façamos $\delta = d_{1n}^2$. Então, a equação quadrática $\text{CM}(D, \delta) = 0$ tem uma única solução real, que é o único valor válido para a distância desconhecida d_{1n} .

Demonstração. Já provamos o resultado para $n = 6$. Vamos supor $n > 6$. Temos um n -simplex ($n > 6$) em \mathbb{R}^3 e, assim, $\text{CM}(D, \delta) = 0$. Aplicando o Lema 2.3.1, obtemos:

$$\begin{vmatrix} \text{CM}_2^2 & \text{CM}_2^{n+1} \\ \text{CM}_{n+1}^2 & \text{CM}_{n+1}^{n+1} \end{vmatrix} = \text{CM}(D, \delta) \cdot \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & \cdots & d_{2,n-1} \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & \cdots & d_{3,n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & d_{n-1,2} & d_{n-1,3} & d_{n-1,4} & \cdots & 0 \end{vmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \text{CM}_2^2 \text{CM}_{n+1}^{n+1} - \text{CM}_2^{n+1} \text{CM}_{n+1}^2 = \text{CM}(D, \delta) \cdot V,$$

$$\text{onde } V = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & d_{23}^2 & d_{24}^2 & \cdots & d_{2,n-1} \\ 1 & d_{32}^2 & 0 & d_{34}^2 & \cdots & d_{3,n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & d_{n-1,2} & d_{n-1,3} & d_{n-1,4} & \cdots & 0 \end{vmatrix}.$$

Observe que V é proporcional ao quadrado do volume do $(n-3)$ -simplex determinado por $\{v_2, v_3, \dots, v_{n-1}\}$ e, portanto, $V = 0$ quando $n > 6$ (o simplex se realiza em \mathbb{R}^3). Por outro lado, $\text{CM}_2^2 = 0 = \text{CM}_{n+1}^{n+1}$, pois são proporcionais a quadrados de volumes em \mathbb{R}^{n-2} . Assim, obtemos:

$$0 = \text{CM}_2^{n+1} \text{CM}_{n+1}^2 \Leftrightarrow (\text{CM}_2^{n+1})^2 = 0,$$

onde usamos a simetria. Portanto,

$$\text{CM}_2^{n+1} = 0,$$

onde o lado esquerdo da equação acima é linear em $\delta = \|v_1 - v_n\|_2^2$. Logo, temos um único valor real para δ . \square

Observação 2.3.6. A proposição anterior também é válida se considerarmos a realização em \mathbb{R}^K de uma quase-clique (uma clique com uma aresta faltante) sobre $K + r$ vértices, com $r \geq 3$. Enfatizamos a dependência do número de vértices ($K + r$, onde $r \geq 3$) em relação a dimensão K do espaço euclidiano \mathbb{R}^K .

Capítulo 3

Explorando a Dualidade

Um DGP_K (com K fixado) está fortemente relacionado a um outro tipo de problema, que trata dos possíveis completamentos de uma certa matriz de distâncias euclidianas. Este último pode ser visto como o “*dual*” do primeiro problema. Neste capítulo, entenderemos o significado desta dualidade e estabeleceremos a relação que existe entre os dois problemas. Além disto, um método modificado para o ${}^K\text{DMDGP}$ ($K \in \{2, 3\}$) será apresentado.

3.1 O EDMCP_K e o DGP_K

O EDMCP_K está fortemente conectado ao DGP_K : se x é uma realização de G , então a matriz parcial A pode ser completada em tempo polinomial, e se \bar{A} é um completamento válido de A , então o grafo correspondente é uma clique e sua realização em \mathbb{R}^K pode ser encontrada em tempo polinomial [7]. Assim, obtemos uma correspondência entre as soluções do DGP_K e as soluções do EDMCP_K associado.

De fato, uma matriz simétrica parcial $A = (a_{uv})$, com diagonal principal nula e entradas desconhecidas indexadas pelo conjunto \bar{E} de pares não ordenados de índices $\{u, v\}$, codifica um grafo simples, não-direcionado, ponderado $G = (V, E, a)$, onde V é o conjunto de índices das linhas/colunas de A , E é o complemento de \bar{E} com relação ao conjunto de todos os pares não ordenados de V , e a função peso a leva $\{u, v\}$ em a_{uv} .

Reciprocamente, um grafo simples, não-direcionado, ponderado, $G = (V, E, a)$ pode ser codificado em uma matriz simétrica parcial A , com diagonal nula, onde cada entrada de A é a_{uv} para todos $\{u, v\}$ em E , e as demais entradas são desconhecidas.

Formalmente, temos dois operadores: $\mathcal{M}(G) = A$ para um grafo G e sua matriz parcial correspondente A , e $\mathcal{G}(A) = G$ para uma matriz parcial A e seu grafo correspondente G . É fácil perceber que $\mathcal{M} \circ \mathcal{G} = \mathcal{G} \circ \mathcal{M} = \mathcal{I}$, onde \mathcal{I} é o operador identidade. Assim, os grafos ponderados e as matrizes simétricas parciais são “duais” um do outro através das aplicações \mathcal{M} e \mathcal{G} [13]. Para ilustrar esta relação, vamos considerar os seguintes exemplos:

Exemplo 3.1.1. Seja $G = (V, E, a)$ um grafo simples, não direcionado, onde $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$, $E = \{\{v_1, v_2\}, \{v_1, v_3\}, \{v_2, v_3\}\}$, $a : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ dada por $a(v_i, v_j) = a(\{v_i, v_j\}) = |i - j|$. Neste caso,

obtemos a seguinte matriz para G :

$$\mathcal{M}(G) = A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & ? \\ 1 & 0 & 1 & ? \\ 2 & 1 & 0 & ? \\ ? & ? & ? & 0 \end{bmatrix}.$$

Reciprocamente, $\mathcal{G}(A) = G = (V, E, a)$, onde V, E, a são definidos como acima.

Exemplo 3.1.2. Seja B a matriz simétrica (com diagonal nula) :

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

Neste caso, o grafo simples associado é tal que: $\bar{E} = \{\{1, 4\}\}$, $E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{3, 4\}\}$, $V = \{1, 2, 3, 4\}$, $a : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ é dada por $a(\{v_i, v_j\}) = B(i, j)$ e assim $\mathcal{G}(A) = G = (V, E, a)$. Reciprocamente, $\mathcal{M}(G) = B$ onde B é a matriz simétrica parcial acima.

3.1.1 O EDMCP₃ e o DMDGP

A partir das definições feitas anteriormente, percebemos que o DMDGP está fortemente conectado a um EDMCP₃: cada instância $G = (V, E, d)$ do DMDGP pode ser transformada em tempo linear em uma instância de um EDMCP₃. Assim, dada uma instância do DMDGP, consideramos a ordem $\rho : V \rightarrow \{1, \dots, n\}$, como em (1.2.1), e definimos a *forma padrão* da matriz parcial de distâncias euclidianas D do EDMCP₃ associado, como sendo a matriz parcial $D = [d_{ij}]$, tal que d_{ij} é a distância do vértice $i = \rho(u)$ ao vértice $j = \rho(v)$. Tal forma padrão garante que todos os elementos do conjunto $\{d_{ij} : |i - j| \leq 3\}$ são conhecidos. Assim, a forma padrão de uma matriz parcial do EDMCP₃ associado a um DMDGP tal que apenas as distâncias necessárias pela definição do DMDGP (quatro vértices consecutivos induzem uma clique) são conhecidas é a seguinte:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & d_{12} & d_{13} & d_{14} & ? & \cdots & ? & ? & ? \\ & 0 & d_{23} & d_{24} & d_{25} & ? & \cdots & ? & ? \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & d_{i,i+1} & d_{i,i+2} & d_{i,i+3} & \cdots & ? \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & & & 0 & d_{n-3,n-2} & d_{n-3,n-1} & d_{n-3,n} \\ & & & & & & 0 & d_{n-2,n-1} & d_{n-2,n} \\ & & & & & & & 0 & d_{n-1,n} \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

onde omitimos os elementos abaixo da diagonal principal por se tratar de uma matriz simétrica.

3.1.2 Instâncias que Ocorrem com Probabilidade 0

Lembramos que, neste trabalho, o conjunto solução X de um DMDGP contém apenas realizações incongruentes (veja a definição 1.1.2). Logo, cada completamento da matriz de distâncias incompleta D do EDMCP $_K$ associado corresponde a uma única solução em X .

Na próxima seção, enunciaremos alguns resultados sobre contagem do número de soluções de um K DMDGP, que valem com probabilidade 1. Por este motivo, apresentaremos aqui um resultado sobre instâncias que ocorrem com probabilidade 0. Tal resultado será muito útil na contagem do número de soluções do K DMDGP. Inicialmente, consideremos o seguinte exemplo:

Exemplo 3.1.3. Seja D a matriz parcial de distâncias euclidianas associada a um 2 DMDGP:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0,9064 & 3,7423 & ? & ? \\ & 0 & 4,4045 & 2,9601 & ? \\ & & 0 & 6,5520 & 7,3379 \\ & & & 0 & 1,3171 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

As matrizes D_1 e D_2 abaixo são dois completamentos (distintos) possíveis de D , tais que $D_1(1, 5) = D_2(1, 5)$:

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0,9064 & 3,7423 & 3,0289 & 4,1082 \\ & 0 & 4,4045 & 2,9601 & 4,1962 \\ & & 0 & 6,5520 & 7,3379 \\ & & & 0 & 1,3171 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}, \quad D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0,9064 & 3,7423 & 3,8374 & 4,1082 \\ & 0 & 4,4045 & 2,9601 & 3,2079 \\ & & 0 & 6,5520 & 7,3379 \\ & & & 0 & 1,3171 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Observe que a reta mediatriz do segmento que une os pontos x_5^1 e x_5^2 contém os pontos x_1 e x_3 . Entretanto, apenas as distâncias aos dois vértices anteriores (e suas posições) são necessárias para se determinar a posição de x_5 . Assim, x_1 tem probabilidade 0 de pertencer a esta reta, já que a reta tem medida de Lebesgue nula em \mathbb{R}^2 . A Figura (3.1) ilustra a situação: à esquerda, temos uma realização em \mathbb{R}^2 e, à direita, a reta mediatriz do segmento que une os pontos x_5^1 e x_5^2 .

Iremos formalizar este resultado. Consideremos uma instância do K DMDGP com n pontos. Sabemos que, pelas hipóteses do K DMDGP, para qualquer vértice i , com $i > K$, conhecemos as distâncias até seus K predecessores imediatos e, além disso, todas as distâncias entre esses vértices são conhecidas. Ou seja, na ordem definida pelo K DMDGP, temos que todas as distâncias no conjunto $\{d_{ij} : |i - j| \leq K\}$ são conhecidas. Dado um vértice j , com $j > K + 1$, e duas realizações distintas x_j^1 e x_j^2 deste vértice, considere o hiperplano π mediador do segmento $\overline{x_j^1 x_j^2}$, isto é, o hiperplano que corta ortogonalmente este segmento no ponto médio. Sejam G_1 e G_2 os caminhos (na árvore de possibilidades) que dão origem aos vértices cujas realizações são x_j^1 e x_j^2 . No exemplo anterior, com $K = 2$ e $j = 5$, os caminhos estão ilustrados na Figura (3.2).

Teorema 3.1.4. Dado um vértice j , com $j > K + 1$, e duas realizações distintas x_j^1 e x_j^2 deste vértice, sejam π o hiperplano mediador do segmento $\overline{x_j^1 x_j^2}$ e G_1, G_2 os caminhos (na árvore de possibilidades) que dão origem aos vértices cujas realizações são x_j^1 e x_j^2 . Então, a probabilidade de que a realização x_i de um vértice $i \in G_1 \cap G_2$, com $i < j - K$, pertença a π é zero. Em outras palavras, a realização de qualquer vértice na intersecção dos caminhos que originam x_j^1 e x_j^2 , exceto os K predecessores de j , tem probabilidade 0 de pertencer a π .

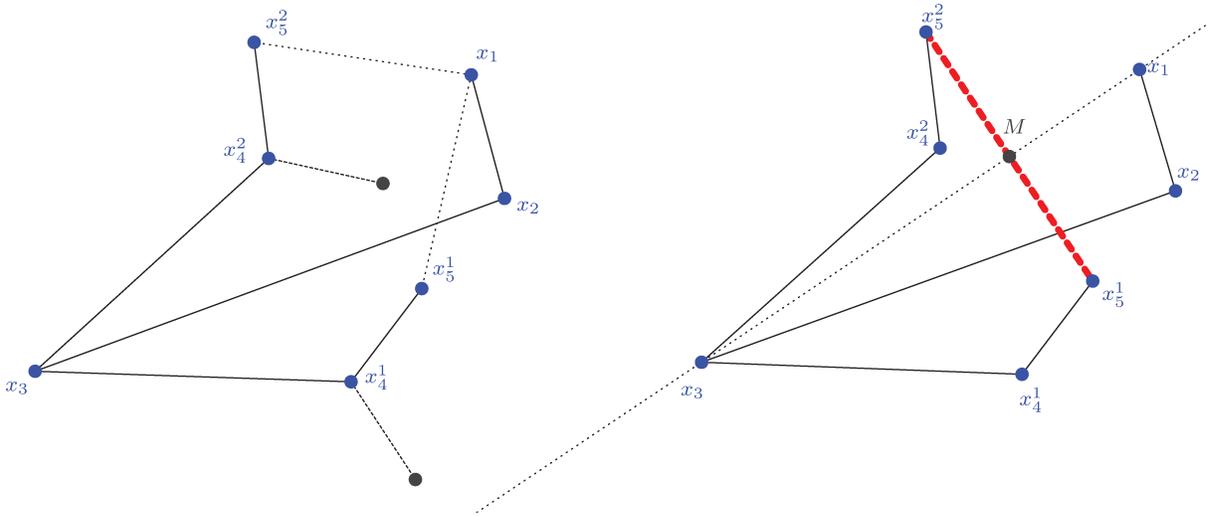


Figura 3.1: Retra mediatriz do segmento que une os pontos x_5^1 e x_5^2 , correspondentes às realizações x^1 e x^2 do quinto vértice.

Demonstração. De fato, basta observar que π é um subespaço afim próprio de \mathbb{R}^K e, assim, tem medida de Lebesgue nula em \mathbb{R}^K . Logo, a probabilidade de que um ponto x qualquer em \mathbb{R}^K pertença a π é zero. Agora, para determinar as posições x_j^1 e x_j^2 do vértice j , usamos apenas as informações conhecidas (distâncias e posições) dos seus K predecessores. Portanto, qualquer representação de algum predecessor nos níveis $j - (K + 1), \dots, 2, 1$ tem probabilidade 0 de pertencer a π . \square

Corolário 3.1.5. Considere uma instância do K DMDGP com $n > K + 2$ pontos, tal que a distância d_{1n} do primeiro ao último vértice é desconhecida e tal que existe mais de um completamento para a matriz parcial de distâncias euclidianas $D = [d_{ij}]$. Então, com probabilidade 1, cada conjunto de valores possíveis para as distâncias desconhecidas $\{d_{ij} : (i, j) \neq (1, n)\}$ gera valores (possíveis)

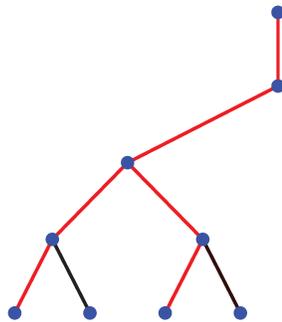


Figura 3.2: Caminhos (em vermelho) que dão origem aos pontos x_5^1 e x_5^2 (realizações distintas do quinto vértice). Desconsideramos o ramo de soluções simétricas.

distintos para d_{1n} . Ou seja, com probabilidade 1, não existem complementamentos distintos D_1 e D_2 de D tais que $D_1(1, n) = D_2(1, n)$.

Demonstração. Caso fosse possível, então teríamos duas realizações (posições) distintas x_n^1 e x_n^2 para o vértice n . Se considerarmos o hiperplano π mediador do segmento $\overline{x_n^1 x_n^2}$, teríamos que $x_1^1 = x_1^2$ (o primeiro ponto está fixado na origem) e, como $D_1(1, n) = D_2(1, n)$, segue que $x_1^1 = x_1^2 \in \pi$, o que só ocorre com probabilidade 0. \square

Para exemplificar a utilidade do resultado acima, vamos considerar uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$ com $n = 5$ vértices e $E_P = \emptyset$. A matriz de distâncias associada tem a forma:

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

onde \bullet indica valores de distâncias conhecidos, e omitimos as entradas abaixo da diagonal por se tratar de uma matriz simétrica. A equação de Cayley-Menger $\text{CM}(1, 2, 3, 4) = 0$ retorna dois valores distintos para a entrada d_{14} . Analogamente, a equação $\text{CM}(2, 3, 4, 5) = 0$ retorna dois valores distintos para a entrada d_{25} . Logo temos quatro possibilidades para o par (d_{14}, d_{25}) . Consideremos agora a equação de Cayley-Menger sobre 5 vértices $\text{CM}(1, 2, 3, 4, 5) = 0$. Tal equação retorna um único valor para d_{15} para cada possibilidade para o par (d_{14}, d_{25}) . Logo temos quatro possibilidades para d_{15} e cada possibilidade está associada a um único par (d_{14}, d_{25}) . Podemos garantir que estes quatro valores possíveis para d_{15} são distintos? De acordo com o corolário acima, eles são distintos com probabilidade 1.

3.1.3 O Número de Soluções do ${}^K\text{DMDGP}$ via Matriz de Distâncias

Nesta seção, apresentaremos um resultado sobre o número de soluções de uma instância $G = (V, E, d)$ de um ${}^K\text{DMDGP}$ e a contagem será feita a partir da matriz parcial do EDMCP_K associado (veja Seção 3.1). Se $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ é o conjunto de todas as soluções $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ incongruentes (1.1.2), iremos determinar a cardinalidade de X a partir da matriz parcial D do EDMCP_K associado.

Conhecer a cardinalidade de X é importante por, no mínimo, três motivos [15]:

1. Em aplicações relacionadas à proteínas, o conjunto X é de interesse para bioquímicos que irão avaliar cada solução de acordo com critérios químicos. Os dados experimentais podem conter erros que, por sua vez, influenciam no número de soluções.
2. A classe de grafos unicamente realizáveis (isto é, aqueles para os quais $|X| = 1$) é interessante porque, em várias aplicações do DGP (como localização de sensores wireless), saber quando certas distâncias são suficientes para o grafo ter uma única realização é de fundamental importância.

3. Conhecendo-se o número de completamentos para a matriz parcial D , podemos utilizar este valor como um critério de parada para o algoritmo Branch-and-Prune e, eventualmente, reduzir a “árvore de busca”.

Seja $D = [d_{ij}]$ a matriz parcial do EDMCP $_K$ associado a um K DMDGP dado. Devido à simetria, consideramos apenas $i \leq j$, para $i, j = 1, \dots, n$.

Definição 3.1.6. Definimos a k -ésima diagonal (ou simplesmente k -diagonal) como o conjunto de elementos $D(i, j)$ de D que satisfazem $j - i = k$, para $k = 0, \dots, n - 1$.

Definição 3.1.7. Chamaremos de (i, j) -submatriz principal de D a submatriz $\hat{D}_{i,j}$, de ordem $j - i + 1$, dada por $(d_{rs})_{r,s=i}^j$, ou seja, constituída pelas linhas $i \leq r \leq j$ e colunas $i \leq s \leq j$ de D . Abaixo, uma matriz D e, em destaque, uma (i, j) -submatriz principal de D :

$$D = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & d_{1,i+1} & \cdots & d_{1j} & \cdots & d_{1n} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ & & \boxed{0} & d_{i,i+1} & \cdots & d_{ij} & \cdots & d_{in} \\ & & & 0 & & \vdots & & \vdots \\ & & & & \ddots & d_{j-1,j} & \cdots & d_{j-1,n} \\ & & & & & 0 & \cdots & d_{jn} \\ & & & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Nesta seção, iremos sempre considerar instâncias que ocorrem com probabilidade 1, ou seja, para cada entrada desconhecida na $(K + 1)$ -diagonal, temos dois possíveis valores (raízes das equações quadráticas $CM(i, \dots, i + (K + 1)) = 0, i = 1, \dots, n - (K + 1)$) e valores distintos para a $(K + 1)$ -diagonal geram valores distintos para a k -diagonal ($k \geq (K + 2)$).

Em [12], os autores provaram que, se a última distância d_{1n} é conhecida, existe um único completamento para a matriz incompleta D associada.

Aqui, daremos uma demonstração, bem mais simples, a partir da matriz parcial do EDMCP $_K$ associado. Vamos considerar os seguintes exemplos ilustrativos com $K = 3$:

Exemplo 3.1.8. Considere uma instância do DMDGP, com 8 vértices, cuja matriz parcial de distâncias associada (na forma padrão) é:

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

onde \bullet indica as distâncias conhecidas.

Para cada equação $CM(i, i + 1, i + 2, i + 3, i + 4) = 0, i = 1, \dots, 4$, associada às $(i, i + 4)$ -submatrizes principais, obtemos duas possibilidades distintas para o elemento $d_{i,i+4}$ na 4-diagonal, $i = 1, \dots, 4$, conforme indicado (em vermelho) abaixo:

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & ? & ? & ? \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Considere agora uma posição qualquer $d_{i,i+5}, i = 1, 2, 3$, na 5-diagonal. Cada $(i, i + 5)$ -submatriz principal contém duas entradas da 4-diagonal e, ao todo, temos 4 combinações de possibilidades para estas duas posições. Assim, para cada $(i, i + 5)$ -submatriz principal (de ordem 6), a equação de Cayley-Menger associada retorna um valor para $d_{i,i+5}$. Tais valores são distintos com probabilidade 1. Logo, temos 4 valores distintos possíveis para cada posição na 5-diagonal, conforme indicado abaixo:

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & 4 & ? & ? \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & 4 & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & 4 \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Observe que, escolhido um valor de distância para um elemento na 5-diagonal, os dois elementos da 4-diagonal que deram origem a este valor ficam determinados (e vice-versa). Assim, ao considerarmos uma $(i, i + 6)$ -submatriz principal, esta contém três entradas da 4-diagonal e, ao todo, temos 8 combinações de possibilidades para estas três posições. Escolhida uma destas combinações de possibilidades, os elementos da 5 diagonal desta submatriz estão determinados e a equação de Cayley-Menger associada retorna um valor para $d_{i,i+6}$.

Procedendo desta maneira para as 6, 7-diagonais e usando a Proposição 2.3.5, obtemos, via

princípio multiplicativo, as seguintes possibilidades (distintas) para cada entrada desconhecida:

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2^1 & 2^2 & 2^3 & 2^4 \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2^1 & 2^2 & 2^3 \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2^1 & 2^2 \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2^1 \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Observe agora que, fixados (escolhidos) os elementos da 4-diagonal, os demais ficam determinados, de acordo com o processo acima. Sendo assim, o total de complementos distintos (com probabilidade 1) é igual a 16. Cada matriz completa está associada a uma única realização possível em \mathbb{R}^3 . Assim, o total de realizações para a instância, cuja matriz associada é a matriz A acima, é $16 = 2^4$. Isto era esperado, de acordo com a árvore de possibilidades para um DMDGP com $E_P = \emptyset$, descrita no Capítulo 1.

Exemplo 3.1.9. Vamos considerar agora uma instância do DMDGP com 8 vértices, cuja matriz parcial de distâncias é:

$$B = \left[\begin{array}{cccccc|c} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & \bullet & ? \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{array} \right].$$

Observe que conhecemos a entrada $(1, 7)$ da matriz B . Logo, só teremos uma possibilidade para as entradas $(1, 5), (3, 7)$ (a entrada $(2, 6)$ já está fixada). De fato, de acordo com a análise feita no exemplo anterior aplicada à $(1, 7)$ -submatriz principal, o número de possibilidades para a entrada $(1, 7)$ é o produto das possibilidades para cada elemento do conjunto $\{(1, 5), (2, 6), (3, 7)\}$, como destacado abaixo:

$$\hat{B}_{1,7} = \left[\begin{array}{cccccc|c} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & \bullet & ? \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{array} \right].$$

Continuando o raciocínio, como o conjunto de entradas $\{(1, 5), (2, 6), (3, 7)\}$ está unicamente determinado, obtemos (via equação de Cayley-Menger) uma única possibilidade para as entradas $(1, 6)$ e $(2, 7)$.

Para a entrada $(4, 8)$, obtemos duas possibilidades distintas, a saber: as raízes da equação de Cayley-Menger associada à $(4, 8)$ -submatriz principal. Conseqüentemente, via princípio multiplicativo, temos também duas possibilidades para cada entrada restante na oitava coluna. Resumindo, obtemos as seguintes possibilidades para o completamento de B (em vermelho):

$$B = \begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 1 & 1 & \bullet & 2^1 \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & 1 & 2^1 \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 1 & 2^1 \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2^1 \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Portanto, temos 2 completamentos distintos para B e, conseqüentemente, duas realizações incongruentes em \mathbb{R}^3 .

Para a matriz parcial B acima, a Figura 3.3 ilustra o processo de determinar os possíveis completamentos/realizações.

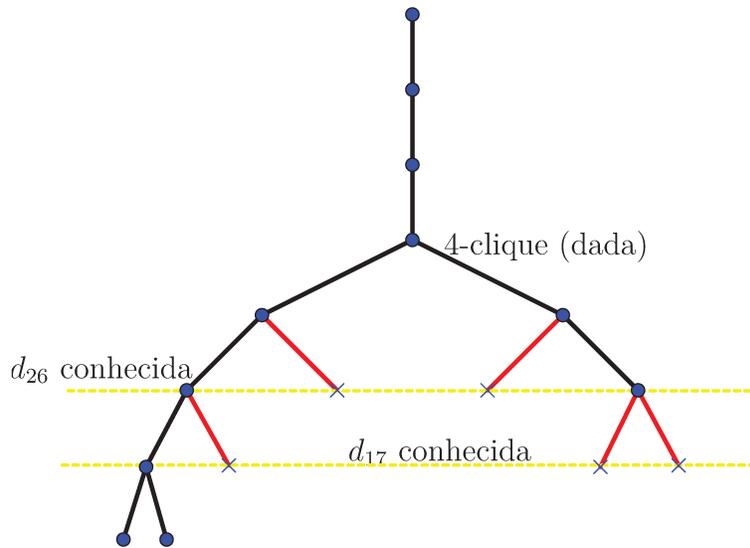


Figura 3.3: Possíveis completamentos para a matriz parcial B .

A primeira poda ocorre no nível 6, já que a distância d_{26} é conhecida. A árvore então ramifica e ocorre uma nova poda no nível 7, já que também conhecemos d_{17} . Observe que d_{17} torna a estrutura rígida (um único completamento) de v_1 até v_7 . Finalmente, mais duas possibilidades para v_8 . Logo obtemos 2 completamentos distintos de B .

O resultado abaixo generaliza as idéias acima e será de fundamental importância nas próximas seções.

Teorema 3.1.10. Dada uma instância de um K DMDGP, $G = (V, E, d)$, com $|V| = n$, considere a matriz parcial D do EDMCP $_K$ associado, dada de acordo com a ordem em V que garante que todas as distâncias d_{ij} , com $|i - j| \leq K$, são conhecidas (a matriz $D = [d_{ij}]$ está na forma padrão). Assim, com probabilidade 1, temos que:

1. Se o valor de uma entrada d_{ij} , com $|i - j| \geq K + 2$, é conhecido, então existe apenas um completamento para a (i, j) -submatriz principal $\hat{D}_{i,j}$.
2. Existem no máximo 2 possíveis valores reais distintos para cada entrada desconhecida $d_{\ell, \ell + (K+1)}$, $\ell = 1, \dots, n - (K + 1)$, na $(K + 1)$ -diagonal da matriz incompleta $D = [d_{ij}]$. Mais ainda, existirá exatamente um valor possível para uma certa entrada desconhecida $d_{\ell, \ell + (K+1)}$ se, e somente se, existir uma entrada conhecida d_{ij} com $i \leq \ell < \ell + (K + 1) \leq j$.
3. Se uma (i, j) -submatriz principal $\hat{D}_{i,j}$ é tal que todas as distâncias na $(K + 1)$ -diagonal são conhecidas, então existe um único completamento possível para $\hat{D}_{i,j}$.
4. O número de possibilidades distintas para uma entrada desconhecida d_{ij} de D , com $|i - j| \geq K + 2$, é igual ao produto do número de possibilidades para cada elemento da $(K + 1)$ -diagonal da submatriz principal $\hat{D}_{i,j}$.

Demonstração. 1. Considere uma submatriz principal $\hat{D}_{i,j}$ de D , com $|i - j| \geq K + 2$, tal que a entrada d_{ij} é conhecida. Suponha que existem pelo menos dois completamentos distintos de $\hat{D}_{i,j}$. Pelo Teorema 3.1.5, tal situação tem probabilidade 0 de ocorrer. Assim, com probabilidade 1 existe um único completamento para $\hat{D}_{i,j}$.

2. Segue da Observação 2.3.3 aplicada a cada $(i, i + (K + 1))$ -submatriz principal de D , com $i = 1, \dots, n - (K + 1)$, que existem duas soluções para cada equação de Cayley-Menger associada. Logo, no máximo dois valores possíveis para cada entrada na $(K + 1)$ -diagonal. Obviamente, se um destes valores para uma certa entrada na $(K + 1)$ -diagonal não é factível, então existe alguma informação de poda d_{ij} , com $i \leq \ell < \ell + (K + 1) \leq j$. Reciprocamente, se existe uma entrada conhecida d_{ij} com $i \leq \ell < \ell + (K + 1) \leq j$, então pelo item anterior aplicado à submatriz $\hat{D}_{i,j}$, temos que para os possíveis valores de entradas na $(K + 1)$ -diagonal de $\hat{D}_{i,j}$, exatamente um será factível, já que existe um único completamento para $\hat{D}_{i,j}$.
3. Usaremos indução sobre a ordem da submatriz $\hat{D}_{i,j}$. Suponha $|i - j| = m$, com $m \geq (K + 1)$. Para $m = K + 1$, temos uma clique e a matriz D já está completa. Suponha que para um certo $m \geq (K + 1)$, o resultado é válido. Agora considere $|i - j| = m + 1$. Pela hipótese de indução, a $(i, j - 1)$ -submatriz principal de $\hat{D}_{i,j}$, tem um único completamento. Analogamente, a $(i + 1, j)$ -submatriz principal de $\hat{D}_{i,j}$, tem um único completamento. Assim, após determinarmos os (únicos) completamentos parciais destas submatrizes, o único elemento de $\hat{D}_{i,j}$ que ainda não está determinado é $d_{i,j}$. Mas, pela Observação 2.3.6, a equação de Cayley-Menger associada retorna um único valor para $d_{i,j}$. Portanto, $\hat{D}_{i,j}$ tem um único completamento.

4. Segue imediatamente do item anterior, já que escolhida uma combinação de possibilidades para os elementos na $(K + 1)$ -diagonal, obtemos um único completamento de $\hat{D}_{i,j}$. Logo, um único valor de d_{ij} . Pelo Corolário 3.1.5, os valores possíveis são distintos com probabilidade 1. Portanto, o número de possibilidades distintas para a distância d_{ij} é igual ao produto do número de possibilidades para cada elemento da $(K + 1)$ -diagonal de $\hat{D}_{i,j}$. \square

Corolário 3.1.11. Dada uma instância de um K DMDGP, $G = (V, E, d)$, com $|V| = n$, seja $D = [d_{ij}]$ a matriz do EDMCP $_K$ associado. Então, o número de completamentos distintos para D (número de soluções do EDMCP $_K$ associado), com probabilidade 1, é igual ao número λ de possibilidades distintas para a distância d_{1n} . Consequentemente, o número de soluções do K DMDGP dado, com probabilidade 1, é igual a λ . Além disto, λ é sempre uma potência de 2.

Demonstração. Pelo item (4) do teorema acima, cada combinação de possibilidades para a $(K + 1)$ -diagonal gera uma única solução do EDMCP $_K$ e um único valor para d_{1n} . Além disto, com probabilidade 1, tais valores são distintos. Logo, o número de completamentos distintos para D , com probabilidade 1, é igual ao número de possibilidades distintas para a entrada d_{1n} . Este número é sempre uma potência de dois, já que para cada entrada na $(K + 1)$ -diagonal, apenas uma ou duas possibilidades serão factíveis. Finalmente, cada matriz completa do EDMCP $_K$ está associada a uma única realização em \mathbb{R}^K da clique correspondente. \square

3.1.4 O Número de Soluções do K DMDGP via Teoria de Grupos

Esta seção foge um pouco do objetivo principal deste trabalho, que é o tratamento “dual” do DMDGP. Entretanto, optamos por incluir este tópico de forma a possibilitar um comparativo entre os dois métodos de contagem. Enfatizamos que o resultado apresentado aqui só foi enunciado e demonstrado após os resultados da seção anterior, usando apenas a matriz de distâncias. Este é um resultado de nossa co-autoria e pode ser encontrado em [15].

Dada uma instância (V, E, d) de um K DMDGP, seja $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ o conjunto de todas as soluções $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ encontradas pelo **BP**. Iremos determinar a cardinalidade de X .

No que se segue, iremos particionar o conjunto de arestas E em dois subconjuntos: as arestas de discretização $E_D = \{\{v, v - j\} : j \in \{1, \dots, K\}\}$ (mínimo de informações necessárias) e as arestas de poda $E_P = E \setminus E_D$ (informações adicionais). Suponha ainda $|V| = n$ e $|E| = m$. Para simplificar a notação, usaremos v para indicar $\rho(v)$ (a posição de v na ordem dada).

Reflexões Parciais

Dada qualquer realização $x \in X$ e $v \in V$, com $v > K + 1$, seja R_x^v a reflexão pelo hiperplano determinado por x_{v-K}, \dots, x_{v-1} , onde x_v denota as coordenadas de v em \mathbb{R}^K , pela realização x . Para qualquer $v > K + 1$ definimos, em X , o *operador reflexão parcial* com respeito à x :

$$g_v(x) = (x_1, \dots, x_{v-1}, R_x^v(x_v), R_x^v(x_{v+1}), \dots, R_x^v(x_n)) \quad (3.1.1)$$

Observe que g_v age sobre uma realização x , refletindo todos os vetores de ordem posterior a v , onde $v > K + 1$. Veja a Figura 3.4:

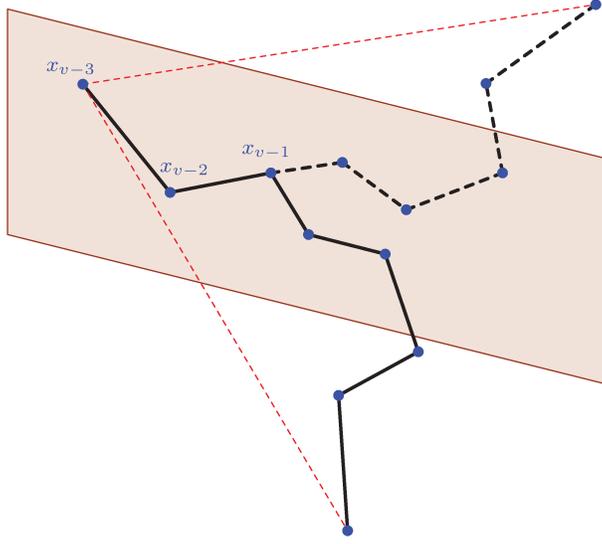


Figura 3.4: A ação da reflexão R_x^v em \mathbb{R}^K

Definiremos agora, o produto $g_u g_v = g_u \circ g_v$, para quaisquer $v > u > K + 1$ e $x \in X$. Mais precisamente:

$$\begin{aligned} g_u g_v(x) &= g_u(g_v(x)) = g_u(x_1, \dots, x_{v-1}, R_x^v(x_v), \dots, R_x^v(x_n)) = \\ &= (x_1, \dots, x_{u-1}, R_x^u(x_u), \dots, R_x^u(x_{v-1}), R_{g_v(x)}^u(x_v), \dots, R_{g_v(x)}^u(x_n)). \end{aligned}$$

Note que a ação do operador à esquerda g_u , depois da posição $v > u$, não aplica R_x^u às componentes do argumento, mas sim $R_{g_v(x)}^u$.

No caso em que $u > v > K + 1$ temos:

$$\begin{aligned} g_u g_v(x) &= g_u(g_v(x)) = g_u(x_1, \dots, x_{v-1}, R_x^v(x_v), \dots, R_x^v(x_n)) = \\ &= (x_1, \dots, x_{v-1}, R_x^v(x_v), \dots, R_x^v(x_{u-1}), R_{g_v(x)}^u(x_u), \dots, R_{g_v(x)}^u(x_n)). \end{aligned}$$

Note que a ação do operador à esquerda g_u , depois da posição $u > v$, não aplica R_x^u às componentes do argumento, mas sim $R_{g_v(x)}^u$.

Dado um vetor, não nulo, $y \in \mathbb{R}^K$, seja ϱ^y a reflexão pelo hiperplano passando pela origem e normal a y . Observe que, se y é normal ao hiperplano definido por x_{v-K}, \dots, x_{v-1} , então $\varrho^y = R_x^v$.

Lema 3.1.12. [14] Sejam $x \neq y \in \mathbb{R}^K$ e $z \in \mathbb{R}^K$ tais que z não pertence aos hiperplanos passando pela origem e normais a x ou y . Então $\varrho^x \varrho^y z = \varrho^{\varrho^x y} \varrho^x z$.

Demonstração. A Figura a seguir fornece um esboço da prova para $K = 2$.

Considerando a reflexão $\varrho^{\varrho^x y}$ da aplicação ϱ^y por ϱ^x , temos que $\|z - \varrho^y z\| = \|\varrho^x z - \varrho^{\varrho^x y} \varrho^x z\|$. Pela reflexão por ϱ^x temos $\|O - z\| = \|O - \varrho^x z\|$ e $\|O - \varrho^y z\| = \|O - \varrho^x \varrho^y z\|$. Pela reflexão por ϱ^y temos $\|O - z\| = \|O - \varrho^y z\|$. Pela reflexão por $\varrho^{\varrho^x y}$ temos $\|O - \varrho^x z\| = \|O - \varrho^{\varrho^x y} \varrho^x z\|$. Assim,

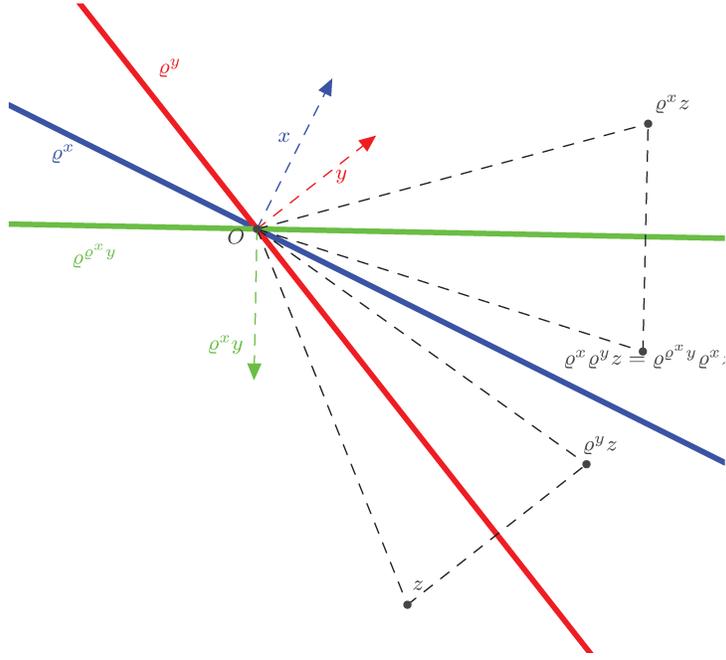


Figura 3.5: Reflexão por ϱ^y e depois por ϱ^x é equivalente a refletir por ϱ^x e, depois, por $\varrho^{\varrho^x y}$ (a reflexão de ϱ^y por ϱ^x).

os triângulos $\Delta(z, O, \varrho^y z)$ e $\Delta(\varrho^x z, O, \varrho^{\varrho^x y} \varrho^x z)$ são congruentes, pois possuem lados congruentes. Além disto, a reflexão de $\Delta(z, O, \varrho^y z)$ por ϱ^x , nos mostra que $\Delta(z, O, \varrho^y z)$ e $\Delta(\varrho^x z, O, \varrho^x \varrho^y z)$ são congruentes. Portanto, $\varrho^{\varrho^x y} \varrho^x z = \varrho^x \varrho^y z$. \square

Lema 3.1.13. [14] O produto acima é comutativo, isto é, $g_u g_v = g_v g_u, \forall u, v > K + 1$.

Demonstração. Assuma, sem perda de generalidade, que $v > u$. Assim,

$$\begin{aligned}
 g_u(g_v(x)) &= g_u(x_1, \dots, x_{v-1}, R_x^v(x_v), \dots, R_x^v(x_n)) = \\
 &= (x_1, \dots, x_{u-1}, R_{g_v(x)}^u(x_u), \dots, R_{g_v(x)}^u(x_{v-1}), R_{g_v(x)}^u R_x^v(x_v), \dots, R_{g_v(x)}^u R_x^v(x_n)) = \\
 &= (x_1, \dots, x_{u-1}, R_x^u(x_u), \dots, R_x^u(x_{v-1}), R_{g_u(x)}^v R_x^u(x_v), \dots, R_{g_u(x)}^v R_x^u(x_n)) = \\
 &= g_v(x_1, \dots, x_{u-1}, R_x^u(x_u), \dots, R_x^u(x_n)) = g_v g_u(x),
 \end{aligned}$$

onde $R_{g_v(x)}^u R_x^v(x_w) = R_{g_u(x)}^v R_x^u(x_w)$ para cada $w \geq v$, de acordo com o Lema anterior. \square

O Grupo de Discretização

Considere o grafo $G_D = (V, E_D, d)$ e seja X_D o conjunto de realizações de G_D . Como não existem arestas de poda, a árvore de busca do **BP** é completa e temos $|X_D| = 2^{n-K-1}$, com probabilidade 1. As arestas de discretização, determinam soluções de forma que, no nível ℓ temos $2^{\ell-K-1}$ posições possíveis para o vértice v na posição ℓ .

Definimos o *grupo de discretização* $\mathcal{G}_D = \langle \Gamma_D \rangle$ gerado pelos operadores $\Gamma_D = \{g_v : v > K + 1\}$.

Corolário 3.1.14. [14] Com probabilidade 1, \mathcal{G}_D é um grupo abeliano, isomorfo a C_2^{n-K-1} (produto cartesiano de $n - K - 1$ cópias do grupo cíclico de ordem 2).

Observe que, para quaisquer $x, x' \in X$, existe $g \in \mathcal{G}_D$ tal que $x' = g(x)$ e logo, a ação de \mathcal{G}_D em X é transitiva. Além disto, pelo Teorema 2 em [14], o conjunto de distâncias associadas às arestas de discretização, é invariante com respeito a \mathcal{G}_D .

O Grupo de Poda

Considere uma aresta de poda $\{u, v\} \in E_P$. Pelo Teorema 2 em [14], com probabilidade 1, para todo $v > K + 1$ e $u < v - K$ existe um conjunto de números reais positivos H^{uv} , com $|H^{uv}| = 2^{v-u-K}$ tal que, para todo $x \in X$, temos $\|x_v - x_u\| = d_{uv} \in H^{uv}$. Além disto, $d_{uv} = \|x_u - x_v\| \neq \|g_w(x)_u - g_w(x)_v\|$ para todo $w \in \{u + K + 1, \dots, v\}$.

Assim, definimos o *grupo de poda* $\mathcal{G}_P = \langle \Gamma_P \rangle$, gerado por $\Gamma_P = \{g_w : w > K + 1 \wedge \forall \{u, v\} \in E_P (w \notin \{u + K + 1, \dots, v\})\}$

Por definição, $\mathcal{G}_P \leq \mathcal{G}_D$, e as distâncias associadas a arestas de poda, são invariantes com respeito a \mathcal{G}_P .

Observe ainda que, apenas vértices w que não pertencem ao conjunto $\{u + K + 1, \dots, v\}$, para toda aresta de poda $\{u, v\} \in E_P$, dão origem a operadores de reflexão parcial que geram \mathcal{G}_P .

Teorema 3.1.15. [14] A ação de \mathcal{G}_P em X é transitiva, com probabilidade 1.

Demonstração. Sejam $x, y \in X$. Iremos mostrar que existe $g \in \mathcal{G}_P$, tal que $y = g(x)$, com probabilidade 1. Como a ação de \mathcal{G}_D em X é transitiva, existe $g \in \mathcal{G}_D$ com $y = g(x)$. Suponha agora, que $g \notin \mathcal{G}_P$, assim, existe uma aresta de poda $\{u, v\} \in E_P$ e $\ell \in \mathbb{N}$, tal que $g = \prod_{h=1}^{\ell} g_{v_h}$, para algum conjunto de vértices $\{v_1, \dots, v_{\ell} > K + 1\}$ incluindo pelo menos um vértice $w \in \{u + K + 1, \dots, v\}$. Pelo Teorema 2 em [14], isto implica que $d_{uv} = \|x_u - x_v\| \neq \|g_w(x)_u - g_w(x)_v\|$, com probabilidade 1. Se o conjunto $Q = \{v_1, \dots, v_{\ell}\} \cap \{u + K + 1, \dots, v\}$ tem cardinalidade 1, então g_w é a única componente de g que não fixa d_{uv} , e assim $y = g(x) \notin X$, contradição. Por outro lado, temos probabilidade 0 de que outro $z \in Q \setminus \{w\}$ nos leve a $\|x_u - x_v\| = \|g_z g_w(x)_u - g_z g_w(x)_v\|$, com $\|g_w(x)_u - g_w(x)_v\| \neq \|x_u - x_v\| \neq \|g_z(x)_u - g_z(x)_v\|$. Por indução, isto cobre qualquer cardinalidade de Q . Assim, $g \in \mathcal{G}_P$ e o resultado é válido. \square

Teorema 3.1.16. [15] Com probabilidade 1, temos que $|X| = 2^{|\Gamma_P|}$.

Demonstração. Temos que $\mathcal{G}_D \cong C_2^{n-K-1}$, e daí $|\mathcal{G}_D| = 2^{n-K-1}$. Como $\mathcal{G}_P \leq \mathcal{G}_D$, segue que $|\mathcal{G}_P|$ divide $|\mathcal{G}_D|$. Por outro lado, $|\mathcal{G}_P| = 2^{|\Gamma_P|}$. A ação de \mathcal{G}_P em X tem apenas uma órbita, isto é, $\mathcal{G}_P x = X$ para todo $x \in X$. Mas todo operador de reflexão parcial é idempotente ($g_v^2 = 1$) e logo, $g_v^{-1} = g_v$, para todo $v > K + 1$. Assim, se $gx = g'x$, para $g, g' \in \mathcal{G}_P$ e $x \in X$, então $(g')^{-1}gx = x \Rightarrow (g')gx = x \Rightarrow g'g = 1$ e, portanto, $g = g'$. Assim, $|\mathcal{G}_P x| = |\mathcal{G}_P|$.

Portanto, para todo $x \in X$, $|X| = |\mathcal{G}_P x| = |\mathcal{G}_P| = 2^{|\Gamma_P|}$. \square

Exemplo 3.1.17. Para exemplificar os resultados desta seção, vamos considerar uma instância $G = (V, E, d)$ de um DMDGP com $V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$ e $E_P = \{\{2, 6\}, \{1, 7\}\}$.

Temos

$$\Gamma_D = \{g_v : v > 4\} = \{g_5, g_6, g_7, g_8\}, \quad (3.1.2)$$

e como as únicas arestas de poda são $\{2, 6\}$ e $\{1, 7\}$, obtemos

$$\Gamma_P = \{g_w : w > 4 \wedge \forall \{u, v\} \in E_P(w \notin \{u + 4, \dots, v\})\} = \quad (3.1.3)$$

$$= \{g_w : w > 4 \wedge (w \notin \{5, 6, 7\})\} = \{g_8\}. \quad (3.1.4)$$

Portanto $|X| = 2^{|\Gamma_P|} = 2^1 = 2$. Na seção anterior, obtivemos 2 complementamentos distintos para a matriz incompleta de distâncias B , no Exemplo 3.1.9. Logo, este resultado está de acordo.

Exemplo 3.1.18. Consideremos agora uma instância de um DMDGP com $V = \{1, 2, \dots, n\}$, tal que a única aresta de poda é $\{1, n\}$. De acordo com a seção anterior, existe um único complementamento para a matriz incompleta de distâncias e, portanto, $|X| = 1$. Vamos agora, determinar $|X|$ usando o Teorema 3.1.16.

Temos

$$\Gamma_P = \{g_w : w > 4 \wedge \forall \{u, v\} \in E_P(w \notin \{u + 4, \dots, v\})\} = \quad (3.1.5)$$

$$= \{g_w : w > 4 \wedge (w \notin \{5, \dots, n\})\} = \emptyset \Rightarrow |X| = 2^0 = 1. \quad (3.1.6)$$

3.2 O BP Dual

Como dito anteriormente, cada instância $G = (V, E)$ de um DGP_K (com K fixo) pode ser transformada em tempo linear em uma instância de um $EDMCP_K$ e vice versa, considerando-se a matriz de adjacência ponderada de G , onde pares de vértices $\{u, v\} \notin E$ correspondem às entradas desconhecidas da matriz.

Em [13], os autores exploram a possibilidade de um método “dual”. Eles observam que grafos ponderados e matrizes parciais simétricas são “duais” um do outro. Enquanto no primal procuramos por realizações do grafo, no dual procuramos por complementamentos de matrizes parciais de forma que realizações e complementamentos de matrizes de distâncias também são duais um do outro.

Assim, podemos pensar em um Branch and Prune dual. Enquanto o BP (primal) decide sobre pontos $x_v \in \mathbb{R}^K$ que realizam o vértice v , o BP dual decide sobre distâncias desconhecidas δ associadas a v . Em cada iteração, existem no máximo duas escolhas para x_v , assim como existem, no máximo, duas escolhas para δ . Já sabemos que apenas uma escolha de x_v será factível se v é adjacente a mais do que K predecessores e o mesmo ocorre para δ . Nenhuma escolha para x_v é possível no caso em que a realização parcial não pode ser estendida para uma realização total do grafo, assim como nenhuma escolha de δ é possível quando a matriz parcial atual não pode ser completada para uma matriz de distâncias euclidianas. Assim, vetores (pontos em \mathbb{R}^K) e valores de distâncias são duais um do outro. A mesma ordem dos vértices pode ser usada no primal e dual.

Suponha dada uma instância de um K DDGP, $G = (V, E)$, e uma realização parcial \bar{x} do subgrafo $G[[K]]$ de G induzido pelo conjunto $[K]$ dos primeiros K vértices. A ordem em V garante que o

vértice na posição $K + 1$ tem K predecessores adjacentes, logo ele é adjacente a todos os vértices $v \in [K]$. Assim, $G[[K + 1]]$ é uma $(K + 1)$ -clique. Considere agora o vértice de posição $K + 2$: a ordem em V garante pelo menos K predecessores adjacentes. Se existirem $K + 1$ predecessores adjacentes, então $G[[K + 2]]$ é uma clique, caso contrário, $G[[K + 2]]$ é um quase-clique sobre $K + 2$ vértices com uma aresta $\{u, K + 2\}$ faltante para algum $u \in [K + 1]$. Podemos, então, usar o determinante de Cayley-Menger para computar os dois possíveis valores para $d_{u, K+2}$. Este procedimento pode ser generalizado para vértices quaisquer em $V \setminus [K]$ e define assim um algoritmo que:

- ramifica quando uma distância pode assumir dois valores distintos;
- continua para o próximo vértice quando o subgrafo induzido pelos $K + 2$ vértices atuais é uma clique;
- poda os ramos quando a matriz parcial de distâncias sobre os atuais $K + 2$ vértices não admite completamento euclidiano.

Em [13], é apresentado um algoritmo para o BP dual.

Chamamos a atenção para o fato de que novas estratégias podem ser incorporadas ao **BP dual**. Se existe uma informação de “poda futura” d_{ij} , na linha i , podemos “antecipá-la” diminuindo a árvore de busca. Tal procedimento será descrito na próxima seção.

3.2.1 Determinantes de Cayley-Menger e um Método “Dual” para o 2 DMDGP

De acordo com a Observação 2.3.3, dada uma quase-clique induzida pelos vértices $\{v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3}, v_{i_4}\}$ (onde a aresta que falta é $\{v_{i_1}, v_{i_4}\}$), a equação $\text{CM}(i_1, i_2, i_3, i_4) = 0$, onde

$$\text{CM}(i_1, i_2, i_3, i_4) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & d_{i_1, i_2}^2 & d_{i_1, i_3}^2 & d_{i_1, i_4}^2 \\ 1 & d_{i_2, i_1}^2 & 0 & d_{i_2, i_3}^2 & d_{i_2, i_4}^2 \\ 1 & d_{i_3, i_1}^2 & d_{i_3, i_2}^2 & 0 & d_{i_3, i_4}^2 \\ 1 & d_{i_4, i_1}^2 & d_{i_4, i_2}^2 & d_{i_4, i_3}^2 & 0 \end{vmatrix}, \quad (3.2.1)$$

tem como solução os dois possíveis valores para d_{i_1, i_4}^2 .

Vamos adotar uma estratégia (como na seção anterior) mais geral, para instâncias do 2 DMDGP, de forma a determinar todos os completamentos de uma matriz parcial D associada a uma instância de um 2 DMDGP. O método que descreveremos será dito “dual” (de acordo com as observações feitas na Seção 3.2), porque ao longo do algoritmo iremos determinar as distâncias desconhecidas usando apenas valores de distâncias dados, independentemente das posições dos vértices associados a este subconjunto de distâncias (realização parcial). Inicialmente, vamos considerar um exemplo.

Exemplo 3.2.1. Considere uma instância de um 2 DMDGP, com $|V| = 9$, tal que a única informações de poda é $d_{19} = \|v_1 - v_9\|$. De acordo com o Teorema 3.1.16, existe uma única realização ou, equivalentemente, um único completamento para a matriz parcial de distâncias D :

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

No nível k ($1 \leq k \leq 8$), o **BP** determina realizações parciais para os k primeiros vértices, e no último nível ($k = 9$) efetua a poda, eliminando as soluções infactíveis com o valor de distância d_{19} , dentre as 64 possibilidades de realizações incongruentes.

Vamos agora usar determinantes de Cayley-Menger para antecipar a poda do nível 9. Encontraremos a (única) solução (complemento) do EDMCP₂ associado:

- i) Temos uma 3-clique inicial associada ao subconjunto de vértices $\{v_1, v_2, v_3\}$. Considerando a sequência de quase-cliques e equações correspondentes na tabela abaixo, obtemos as seguintes possibilidades para os valores de d_{1k} , $4 \leq k \leq 8$:

Vértices	Equação	Distância calculada	Possibilidades
$\{v_1, v_2, v_3, v_4\}$	$\text{CM}(1, 2, 3, 4) = 0$	d_{14}	2
$\{v_1, v_3, v_4, v_5\}$	$\text{CM}(1, 3, 4, 5) = 0$	d_{15}	4
$\{v_1, v_4, v_5, v_6\}$	$\text{CM}(1, 4, 5, 6) = 0$	d_{16}	8
$\{v_1, v_5, v_6, v_7\}$	$\text{CM}(1, 5, 6, 7) = 0$	d_{17}	16
$\{v_1, v_6, v_7, v_8\}$	$\text{CM}(1, 6, 7, 8) = 0$	d_{18}	32

Observe ainda que escolhido um valor para d_{18} (dentre as 32 possibilidades), os valores correspondentes de d_{14} , d_{15} , d_{16} e d_{17} ficam determinados.

Após os cálculos acima, encontramos 32 possibilidades para a 4-clique correspondente aos vértices $\{v_1, v_7, v_8, v_9\}$, e pelo Teorema 3.1.10, apenas uma destas possibilidades deve satisfazer a equação $\text{CM}(1, 7, 8, 9) = 0$. Assim, após no máximo 32 testes, determinamos qual complemento parcial é factível e, conseqüentemente, os valores para $\{d_{14}, d_{15}, d_{16}, d_{17}, d_{18}\}$ ficam determinados.

- ii) A partir daqui, para cada $k \geq 2$, iremos completar a coluna $k+3$, da matriz parcal D utilizando os valores determinados em níveis anteriores. Assim, vamos determinar d_{25} . A equação $\text{CM}(2, 3, 4, 5) = 0$ determina duas possibilidades para d_{25} e, pelo Teorema 3.1.10, apenas uma delas satisfaz $\text{CM}(1, 2, 4, 5) = 0$. Logo, com mais um teste, determinamos qual é o valor correto de d_{25} .

- iii) Para $k = 3$, equação $\text{CM}(3, 4, 5, 6) = 0$ determina duas possibilidades para d_{36} e pelo Teorema 3.1.10 apenas uma delas satisfaz $\text{CM}(1, 3, 5, 6) = 0$. Com mais um teste, determinamos qual é o valor correto de d_{36} . Agora, a equação $\text{CM}(2, 3, 4, 6) = 0$ determina duas possibilidades para d_{26} e apenas uma delas satisfaz $\text{CM}(1, 2, 4, 6) = 0$. Logo, com mais um teste determinamos qual é o valor correto de d_{26} .
- iv) Para $k = 4$, são calculadas duas possibilidades para d_{47} a partir da equação $\text{CM}(4, 5, 6, 7) = 0$ e apenas o valor correto satisfaz $\text{CM}(1, 4, 6, 7) = 0$. Com a equação $\text{CM}(3, 5, 6, 7) = 0$, encontramos duas possibilidades para d_{37} e apenas o valor correto satisfaz $\text{CM}(1, 3, 6, 7) = 0$. Finalmente, a equação $\text{CM}(2, 5, 6, 7) = 0$ determina duas possibilidades para d_{27} e apenas o valor correto satisfaz $\text{CM}(1, 2, 6, 7) = 0$.
- v) Para $k = 5$ e $k = 6$, as seguintes equações determinam os valores de distâncias ainda desconhecidos:

Equação	Distâncias calculadas	Teste de Poda
$\text{CM}(5, 6, 7, 8) = 0$	d_{58}	$\text{CM}(1, 5, 7, 8) = 0$
$\text{CM}(4, 6, 7, 8) = 0$	d_{48}	$\text{CM}(1, 4, 7, 8) = 0$
$\text{CM}(3, 6, 7, 8) = 0$	d_{38}	$\text{CM}(1, 3, 7, 8) = 0$
$\text{CM}(2, 6, 7, 8) = 0$	d_{28}	$\text{CM}(1, 2, 7, 8) = 0$
$\text{CM}(6, 7, 8, 9) = 0$	d_{69}	$\text{CM}(1, 6, 8, 9) = 0$
$\text{CM}(5, 7, 8, 9) = 0$	d_{59}	$\text{CM}(1, 5, 8, 9) = 0$
$\text{CM}(4, 7, 8, 9) = 0$	d_{49}	$\text{CM}(1, 4, 8, 9) = 0$
$\text{CM}(3, 7, 8, 9) = 0$	d_{39}	$\text{CM}(1, 3, 8, 9) = 0$
$\text{CM}(2, 7, 8, 9) = 0$	d_{29}	$\text{CM}(1, 2, 8, 9) = 0$

Abaixo, apresentamos a sequência de completamentos parciais correspondentes às etapas descritas neste exemplo:

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? & ? & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & 2 & 4 & 8 & 16 & 32 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & ? & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & ? \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \\
\begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & & & 0 & \bullet & ? & ? \\ & & & & & & 0 & \bullet & ? \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & & 0 \end{bmatrix} .$$

Observe que o método apresentado acima tem uma diferença em relação ao **BP**: a cada nível do **BP**, as duas possibilidades para posição (realização) de um vértice v_k , $k \geq 4$, são calculadas utilizando-se apenas valores de distâncias dados, isto é, os valores associados à clique $\{v_{k-2}, v_{k-1}, v_k\}$. No método descrito neste exemplo, observe que isto é verdade apenas para os valores de distâncias na 3-diagonal de D , já que a equação associada é da forma $\text{CM}(k-3, k-2, k-1, k) = 0$, $4 \leq k \leq n$. A partir da 4-diagonal, a equação utilizada envolve distâncias que foram calculadas em passos anteriores e, portanto, pode haver acúmulo de erros numéricos.

Vamos generalizar o procedimento do exemplo anterior.

Teorema 3.2.2. Considere uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$, com $n \geq 5$ vértices, tal que $E_P = \{v_1, v_n\}$. As seguintes sequências de equações de Cayley-Menger permitem determinar os valores corretos de d_{ij} , $3 \leq |i-j| \leq n-1$, $(i, j) \neq (1, n)$:

$$\begin{aligned}
d_{1j}, 4 \leq j \leq n-1 : \quad & \text{CM}(1, 2, 3, 4) = 0 \rightarrow \text{CM}(1, 3, 4, 5) = 0 \rightarrow \cdots \rightarrow \text{CM}(1, n-2, n-1, n) = 0. \\
d_{ij}, 5 \leq j \leq n, 2 \leq i \leq j-3 : \quad & \text{CM}(i, j-2, j-1, j) = 0 \rightarrow \text{CM}(1, i, j-1, j) = 0.
\end{aligned}$$

Demonstração. Para $n = 5$ vértices, temos a sequência $\text{CM}(1, 2, 3, 4) = 0 \rightarrow \text{CM}(1, 3, 4, 5) = 0$ permite determinar o valor de d_{15} . A gora, a sequência $\text{CM}(2, 3, 4, 5) = 0 \rightarrow \text{CM}(1, 2, 4, 5) = 0$ permite determinar o valor de d_{25} pois a última equação está definida sobre uma 4-quase-clique (d_{15} já foi determinada).

Para $n \geq 6$ vértices, se $i = 1$ e $4 \leq j \leq n-1$, a sequência de equações

$$\text{CM}(1, 2, 3, 4) = 0 \rightarrow \text{CM}(1, 3, 4, 5) = 0 \rightarrow \cdots \rightarrow \text{CM}(1, n-3, n-2, n-1) = 0$$

determina todas as possibilidades de valores para $(d_{14}, d_{15}, \dots, d_{1,n-1})$ na primeira linha da matriz de distâncias D e, escolhido um valor de distância nesta sequência, os valores anteriores ficam unicamente determinados. A equação $\text{CM}(1, n-2, n-1, n) = 0$ está associada a 2^{n-3} cliques sobre 4 vértices. Logo, após (no máximo) 2^{n-3} testes, determinamos os valores corretos de $(d_{1,n-2}, d_{1,n-1}, d_{1,n})$ e, conseqüentemente, de toda a primeira linha de D .

Agora, sejam $5 \leq j \leq n$ e $2 \leq i \leq j-3$. Para $j=5$ o subconjunto de vértices $\{v_i, v_{j-2}, v_{j-1}, v_j\} = \{v_2, v_3, v_4, v_5\}$ induz uma 4-quase-clique, onde falta a aresta $\{v_2, v_5\}$. Assim, a equação $\text{CM}(2, 3, 4, 5) = 0$ determina duas possibilidades para d_{25} . Agora, a equação $\text{CM}(1, i, j-1, j) = \text{CM}(1, 2, 4, 5) = 0$ está associada a duas 4-cliques (correspondentes aos dois possíveis valores de d_{25}) já que o valor de d_{14} já está determinado. Assim, apenas a clique associada ao valor correto de d_{25} satisfaz esta equação. Suponhamos que no nível $j-1 \geq 4$ já determinamos todas as distâncias associadas aos vértices $\{v_1, \dots, v_{j-1}\}$. Vamos completar as distâncias associadas aos vértices $\{v_1, \dots, v_{j-1}, v_j\}$.

O subconjunto $\{v_i, v_{j-2}, v_{j-1}, v_j\}$ induz uma 4-quase-clique, onde falta a aresta $\{v_i, v_j\}$, já que os valores $\{d_{i,j-2}, d_{i,j-1}\}$ foram determinados no nível anterior. Assim, a equação $\text{CM}(i, j-2, j-1, j) = 0$ determina duas possibilidades para d_{ij} . Agora, a equação $\text{CM}(1, i, j-1, j) = 0$ está associada a duas 4-cliques (correspondentes aos dois valores de d_{ij}) já que os valores $\{d_{1,i}, d_{1,j-1}, d_{1,j}\}$ já estão determinados. Assim, apenas a clique associada ao valor correto de d_{ij} satisfaz esta equação. \square

Agora, dada uma matriz incompleta D de um EDMCP_2 associado a uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$, se d_{ij} , $|i-j| \geq 5$ é uma informação de poda, podemos aplicar a sequência de equações dada no Teorema 3.2.2, do nível $i+3$ até o nível $j-1$, para obter a única solução parcial do subproblema associado aos vértices $\{v_i, \dots, v_j\}$. Obviamente, pode não ser necessário aplicar toda a sequência de equações, se as posições de certos v_k , $i \leq k \leq j-2$, já foram determinadas por sequências em níveis anteriores (definidas por outras informações de poda). Numa tentativa de utilizar o mínimo possível de valores calculados anteriormente, iniciaremos os completamentos parciais nas (i, j) -submatrizes principais de menor ordem, ou seja, associadas à informações de poda mais “próximas” da diagonal. Assim, para cada (i, j) tal que $\{v_i, v_j\} \in E_P$, definiremos a terna $(|i-j|, i, j)$ e a ordem dos completamentos parciais, dada pela ordem lexicográfica no conjunto $\{(|i-j|, i, j) : \{v_i, v_j\} \in E_P\}$.

Exemplo 3.2.3. Considere uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$, com $|V|=10$, tal que as únicas informações de poda são d_{28} e d_{49} . De acordo com o Teorema 3.1.10, existem 4 completamentos distintos para a matriz incompleta de distâncias D :

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

Vamos agora usar o Teorema 3.2.2 para determinar tais completamentos. A tabela abaixo mostra a sequência de vértices cujas equações de Cayley-Menger foram resolvidas (ou testadas) para se determinar a distância desconhecida e o número de possibilidades encontradas no final da sequência:

Distâncias	Sequência de vértices	Possibilidades
(d_{47}, d_{48})	$(4, 5, 6, 7) \rightarrow (4, 6, 7, 8) \rightarrow (4, 7, 8, 9)$	1
d_{58}	$(5, 6, 7, 8) \rightarrow (4, 5, 7, 8)$	1
d_{69}	$(6, 7, 8, 9) \rightarrow (4, 6, 8, 9)$	1
d_{59}	$(5, 7, 8, 9) \rightarrow (4, 5, 8, 9)$	1
(d_{25}, d_{26}, d_{27})	$(2, 3, 4, 5) \rightarrow (2, 4, 5, 6) \rightarrow (2, 5, 6, 7) \rightarrow (2, 6, 7, 8)$	1
d_{36}	$(3, 4, 5, 6) \rightarrow (2, 3, 5, 6)$	1
d_{37}	$(3, 5, 6, 7) \rightarrow (2, 3, 6, 7)$	1
d_{38}	$(3, 6, 7, 8) \rightarrow (2, 3, 7, 8)$	1

Até aqui, determinamos todos os completamentos parciais cuja solução (parcial) é única. Vamos agora determinar as demais entradas d_{ij} de D em ordem crescente em j e decrescente em i (por colunas, de baixo para cima):

Distâncias	Sequência de vértices	Possibilidades
d_{14}	$(1, 2, 3, 4)$	2
d_{15}	$(1, 3, 4, 5) \rightarrow (1, 2, 3, 5)$	2
d_{16}	$(1, 4, 5, 6) \rightarrow (1, 2, 3, 6)$	2
d_{17}	$(1, 5, 6, 7) \rightarrow (1, 2, 3, 7)$	2
d_{18}	$(1, 6, 7, 8) \rightarrow (1, 2, 3, 8)$	2
d_{39}	$(3, 7, 8, 9) \rightarrow (3, 4, 8, 9)$	1
d_{29}	$(2, 7, 8, 9) \rightarrow (2, 3, 8, 9)$	1

Neste momento, chamamos a atenção para os seguintes fatos:

- Cada equação de Cayley-Menger aplicada a uma 4-quase-clique H tem sempre duas soluções reais distintas, com probabilidade 1. Tais soluções correspondem as duas possíveis realizações de H no plano (veja a Obs. 2.3.3).

- No cálculo das duas possibilidades para d_{1k} , $5 \leq k \leq 8$, na tabela anterior, a escolha dos vértices não é arbitrária. Cada equação da forma $\text{CM}(1, k-2, k-1, k)$ retorna quatro valores para d_{1k} em função dos valores encontrados para $d_{1,k-1}$ no passo anterior. Assim, ao efetuarmos as podas, os valores factíveis de d_{1k} ficam relacionados aos valores factíveis de $d_{1,j}$, com $4 \leq j \leq (k-1)$. Por exemplo, a equação $\text{CM}(1, 3, 4, 5) = 0$ retorna quatro valores para d_{15} , dois para cada valor de d_{14} . Logo, temos quatro possibilidades para o par (d_{14}, d_{15}) que correspondem as 4 realizações das quase-cliques com vértices em $\{v_1, v_3, v_4, v_5\}$. Agora, a equação $\text{CM}(1, 2, 3, 5) = 0$ admite apenas duas soluções reais e logo, apenas dois valores de d_{15} satisfazem esta equação, correspondendo a dois pares (d_{14}, d_{15}) . Pelo Teorema 3.1.10, a $(1, 5)$ -submatriz principal admite apenas dois complementos, e assim os dois pares encontrados completam a $(1, 5)$ -submatriz principal. O mesmo raciocínio é aplicado as demais distâncias na primeira linha.
- No cálculo das duas possibilidades para d_{29} e d_{39} na tabela anterior, a primeira equação retorna duas possibilidades para cada distância e apenas o valor correto satisfaz a segunda equação. Pelo Teorema 3.1.10, as submatrizes principais associadas admitem apenas um complemento, e logo, os valores encontrados são as soluções para o complemento parcial.

Vamos continuar o completamento de D , de acordo com as observações acima:

d_{19}	$(1, 7, 8, 9) \rightarrow (1, 2, 3, 9)$	2
$d_{7,10}$	$(7, 8, 9, 10)$	2
$d_{6,10}$	$(6, 7, 8, 10) \rightarrow (6, 8, 9, 10)$	2
$d_{5,10}$	$(5, 6, 9, 10) \rightarrow (5, 8, 9, 10)$	2
$d_{4,10}$	$(4, 5, 9, 10) \rightarrow (4, 8, 9, 10)$	2
$d_{3,10}$	$(3, 4, 9, 10) \rightarrow (3, 8, 9, 10)$	2
$d_{2,10}$	$(2, 3, 9, 10) \rightarrow (2, 8, 9, 10)$	2
$d_{1,10}$	$(1, 2, 9, 10) \rightarrow (1, 8, 9, 10)$	4

Observe que na última linha da tabela, aplicamos duas equações. A primeira equação $\text{CM}(1, 2, 9, 10) = 0$ está associada a 4 quase-cliques, correspondentes aos dois valores de d_{19} e aos dois valores de $d_{2,10}$. Assim, tal equação retorna 8 possibilidades para d_{10} , e cada possibilidade está associada a uma única possibilidade para o par $(d_{19}, d_{2,10})$. Agora, pelo Teorema 3.1.10, apenas 4 valores para $d_{1,10}$ satisfazem a equação $\text{CM}(1, 8, 9, 10) = 0$. Determinamos os 4 valores factíveis de d_{10} , que correspondem a 4 pares $(d_{19}, d_{2,10})$, e tais pares estão em correspondência biunívoca com as valores anteriores na primeira linha de D .

Assim, temos um método do tipo “dual” para o $^2\text{DMDGP}$. Aumentando a ordem dos determinantes de Cayley-Menger obtemos, de maneira análoga, um método “dual” para o $^3\text{DMDGP}$.

3.3 Bilateração e o $^2\text{DMDGP}$

Nesta seção, apresentaremos uma formulação que nos permitirá colocar uma distância d_{ij} , que corresponde a uma “poda futura” na linha i , em função da distância d_{ik} , para cada $i+3 \leq k \leq j-1$.

Vamos denotar por p_i o vetor posição de um ponto P_i (em algum espaço euclidiano), e por $p_{i,j}$ o vetor $\overrightarrow{P_i P_j}$. Seja

$$D(i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n) = 2 \left(\frac{-1}{2} \right)^n \begin{vmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & d_{i_1, j_1}^2 & \dots & d_{i_1, j_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d_{i_n, j_1}^2 & \dots & d_{i_n, j_n}^2 \end{vmatrix} \quad (3.3.1)$$

o *bideterminante de Cayley-Menger* das sequências de pontos P_{i_1}, \dots, P_{i_n} e P_{j_1}, \dots, P_{j_n} , onde $d_{i_k, j_\ell} = \|p_{j_\ell} - p_{i_k}\|$. Quando as sequências de pontos são as mesmas, $D(i_1, \dots, i_n)$ denota o *determinante de Cayley-Menger* da sequência de pontos P_{i_1}, \dots, P_{i_n} [24, 23].

Lembramos algumas propriedades dos determinantes de Cayley-Menger (apresentadas no capítulo anterior) que serão úteis nesta seção:

- O valor absoluto de $D(i_1, \dots, i_n)$ é igual a $(n-1)!$ vezes o quadrado do hipervolume do simplex gerado pelos pontos P_{i_1}, \dots, P_{i_n} em \mathbb{R}^{n-1} .
- $D(i_1, i_2; j_1, j_2)$ é equivalente ao produto interno entre os vetores p_{i_1, i_2} e p_{j_1, j_2} .
- $D(i, j)$ é o quadrado da distância entre P_i e P_j .

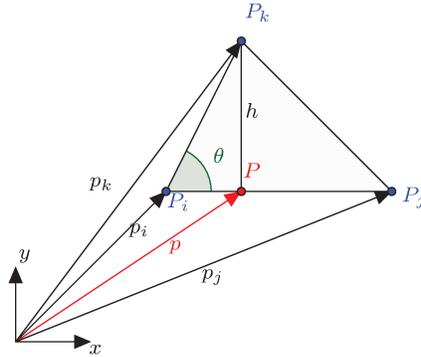


Figura 3.6: Pontos no plano e vetores posição no sistema de coordenadas dado.

A *bilateração* [24, 23] consiste em encontrar a posição relativa de um ponto P_k , dadas as suas distâncias a dois outros pontos P_i e P_j , cujas posições são conhecidas. De acordo com a Figura 3.6, temos que o vetor posição da projeção ortogonal de P_k sobre $\overline{P_i P_j}$ pode ser expresso como:

$$p = p_i + \sqrt{\frac{D(i, k)}{D(i, j)}} \cos \theta p_{i, j} = p_i + \frac{D(i, j; i, k)}{D(i, j)} p_{i, j}. \quad (3.3.2)$$

Temos ainda

$$p_k = p \pm \frac{\sqrt{D(i, j, k)}}{D(i, j)} Sp_{i, j}, \text{ onde } S = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.3)$$

e o sinal \pm ocorre devido às duas posições possíveis para P_k , em relação à reta determinada por P_i e P_j . Substituindo (3.3.2) em (3.3.3), obtemos:

$$p_{i, k} = \frac{D(i, j; i, k)}{D(i, j)} p_{i, j} \pm \frac{\sqrt{D(i, j, k)}}{D(i, j)} Sp_{i, j} = \frac{1}{D(i, j)} \left(D(i, j; i, k) \pm \sqrt{D(i, j, k)} S \right) p_{i, j}. \quad (3.3.4)$$

A equação (3.3.4) pode ser reescrita como:

$$p_{i, k} = Z_{i, j, k} p_{i, j}, \text{ onde } Z_{i, j, k} = \frac{1}{D(i, j)} \begin{pmatrix} D(i, j; i, k) & \mp \sqrt{D(i, j, k)} \\ \pm \sqrt{D(i, j, k)} & D(i, j; i, k) \end{pmatrix}, \quad (3.3.5)$$

onde $Z_{i, j, k}$ é dita *matriz de bilateração*. Podemos colocar $Z_{i, j, k}$ em função apenas das distâncias entre os pontos P_i, P_j, P_k :

$$Z_{i, j, k} = \frac{1}{2D(i, j)} \begin{pmatrix} D(i, j) + D(i, k) - D(j, k) & -4A_{i, j, k} \\ 4A_{i, j, k} & D(i, j) + D(i, k) - D(j, k) \end{pmatrix}, \quad (3.3.6)$$

onde $A_{i, j, k} = \pm \frac{1}{4} \sqrt{(D(i, j) + D(i, k) + D(j, k))^2 - 2(D(i, j)^2 + D(i, k)^2 + D(j, k)^2)}$.

As matrizes de bilateração têm propriedades interessantes [23]. Seja I a matriz identidade de ordem 2. Temos 6 fórmulas de bilateração possíveis no triângulo com vértices em P_i, P_j, P_k :

$$p_{i, k} = Z_{i, j, k} p_{i, j} \quad (3.3.7)$$

$$p_{i, j, k} = Z_{j, i, k} p_{j, i} \quad (3.3.8)$$

$$p_{i, j} = Z_{i, k, j} p_{i, k} \quad (3.3.9)$$

$$p_{k, i} = Z_{k, j, i} p_{k, j} \quad (3.3.10)$$

$$p_{k, j} = Z_{k, i, j} p_{k, i} \quad (3.3.11)$$

$$p_{j, i} = Z_{j, k, i} p_{j, k}. \quad (3.3.12)$$

A partir das equações acima, podemos obter as seguintes propriedades [23]:

1. $Z_{i, j, k} = I - Z_{j, i, k}$,
2. $Z_{i, j, k} Z_{i, k, j} = I$,
3. $Z_{i, j, k} = -Z_{k, j, i} Z_{j, i, k}$.

Matrizes de bilateração são matrizes onde as linhas (ou colunas) são vetores ortogonais de mesma norma. Para matrizes A, B deste tipo, que chamaremos matrizes perpendiculares [23], valem as propriedades:

1. $A + B$ e AB são perpendiculares. Além disto, $AB = BA$;
2. $AA^T = A^T A = \det(A)I$, onde A^T é a transposta de A e I a matriz identidade;
3. se $v = Aw$ então

$$\|v\|^2 = \det(A)\|w\|^2. \quad (3.3.13)$$

3.3.1 Dois triângulos com uma aresta em comum

Vamos considerar agora dois triângulos com uma aresta em comum, como na Figura 3.7:

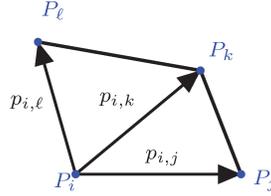


Figura 3.7: Dois triângulos com uma aresta em comum.

Observe que, aplicando duas bilaterações consecutivas, podemos obter $p_{i,l}$ em termos de $p_{i,j}$:

$$p_{i,l} = Z_{i,k,l} p_{i,k} = Z_{i,k,l} Z_{i,j,k} p_{i,j}. \quad (3.3.14)$$

De fato, qualquer vetor definido por dois pontos no conjunto $\{P_i, P_j, P_k, P_l\}$ pode ser expresso em função de $p_{i,j}$, por matrizes de bilateração. Por exemplo:

$$p_{j,l} = p_{i,l} - p_{i,j} = (Z_{i,k,l} Z_{i,j,k} - I) p_{i,j},$$

e pela propriedade 3.3.13, obtemos:

$$d_{j,l}^2 = \det(Z_{i,k,l} Z_{i,j,k} - I) d_{i,j}^2.$$

Podemos generalizar este procedimento para uma “faixa” de triângulos tal que dois triângulos consecutivos compartilham uma aresta. Este é o caso típico de um grafo que representa um ${}^2\text{DMDGP}$.

Observe na Figura 3.8 que, fazendo $p_{17} = p_{14} + p_{45} + p_{56} + p_{67}$, podemos aplicar bilaterações sucessivas para escrever p_{17} em função apenas de p_{14} e de valores de distâncias conhecidos, isto é, matrizes $Z_{i,j,k}$ que envolvem apenas arestas de discretização e d_{14} . Tal procedimento será descrito na próxima seção.

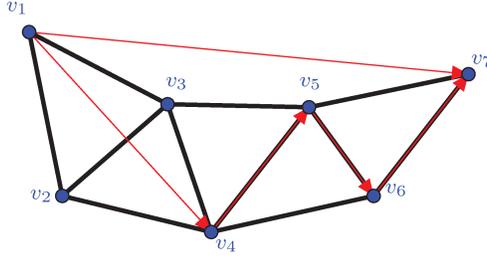


Figura 3.8: Uma Instância com 7 vértices, onde d_{17} é informação de poda.

3.3.2 Bilaterações Sucessivas Aplicadas ao ${}^2\text{DMDGP}$

Vamos considerar instâncias com $5 \leq n$ vértices, onde a **única informação de poda** é $d_{1,n}$, isto é, a distância do primeiro ao último vértice. Pelo teorema sobre o número de soluções, existe apenas um completamento possível para a matriz parcial $D = [d_{ij}]$. Fixamos posições para os vértices v_1, v_2, v_3 e, no nível k ($k \geq 4$), o **BP** encontra duas possíveis posições para o vértice v_k (para cada posição possível para o vértice anterior), que geram dois valores distintos para distância desconhecida $d_{k-3,k}$. Só ocorrerá poda no último nível, após 2^{n-3} ramificações na árvore de busca.

Nosso objetivo é incorporar a bilateração ao **BP** para obter podas em todos os níveis, isto é, no nível k temos uma “parte” da única solução do problema [1]. No que se segue, escreveremos triângulo ijk para indicar o triângulo com vértices em v_i, v_j, v_k . Para exemplificar o procedimento que adotaremos, vamos considerar vários casos:

Caso $n = 5$: Inicialmente, o **BP** considera as posições para os três primeiros vértices e, no nível 4, encontra duas posições possíveis para v_4 , que correspondem a dois possíveis valores para a distância desconhecida d_{14} . Fazendo

$$p_{15} = p_{14} + p_{45} = p_{14} + (Z_{435}Z_{413})p_{41} = (I - Z_{435}Z_{413})p_{14},$$

temos que

$$d_{15}^2 = \det(I - Z_{435}Z_{413})d_{14}^2. \quad (3.3.15)$$

Esta última equação depende apenas das distâncias conhecidas e de d_{14} . Pelo Teorema (3.1.10), apenas o valor correto para d_{14} satisfaz (3.3.15). Com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{14} e efetuamos a poda.

No próximo nível, o **BP** encontra a solução.

Observação 3.3.1. Enfatizamos que na definição da matriz $Z_{i,j,k}$, em (3.3.5), temos duas possibilidades de sinal mas, no cálculo do determinante em (3.3.15), temos 2 possibilidades (distintas) apenas, pois podemos fixar o sinal na primeira matriz de bilateração Z_{413} pois, caso contrário, geramos pares de possibilidades iguais para d_{15} . De fato, observe que o sinal em Z_{413} pode ser interpretado como as duas possibilidades de localização para P_1 com relação à reta que passa por P_3 e P_4 . Analogamente, o sinal em Z_{435} pode ser interpretado como as duas possibilidades de localização para P_5 com relação à reta que passa por P_3 e P_4 . Os segmentos P_1P_5 e $P'_1P'_5$ têm o mesmo comprimento. O mesmo ocorre para $P_1P'_5$ e P'_1P_5 . Quando escolhemos o sinal em Z_{413} , estamos escolhendo uma das posições P_1 ou P'_1 , e os dois possíveis valores distintos para d_{15} são obtidos. Veja a Figura 3.9.

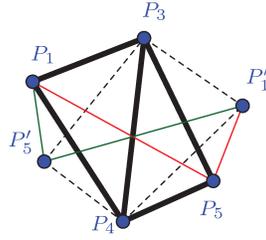


Figura 3.9: Pares iguais de possibilidades (em verde e vermelho) para d_{15} , se consideramos ambos os sinais em Z_{413} .

Caso $n = 6$: Inicialmente, o **BP** considera as posições para os três primeiros vértices e, no nível 4, encontra duas possíveis posições para v_4 , que correspondem aos dois possíveis valores para a distância desconhecida d_{14} . Fazendo

$$\begin{aligned} p_{16} &= p_{14} + p_{45} + p_{56} = p_{14} + (Z_{435}Z_{413})p_{41} + (Z_{546}Z_{435}Z_{413})p_{41} = \\ &= (I - Z_{435}Z_{413} + Z_{546}Z_{435}Z_{413})p_{14}, \end{aligned}$$

temos que

$$d_{16}^2 = \det(I - Z_{435}Z_{413} + Z_{546}Z_{435}Z_{413})d_{14}^2. \quad (3.3.16)$$

Esta última equação depende apenas das distâncias conhecidas e de d_{14} . Pelo Teorema (3.1.10) acima, apenas o valor correto para d_{14} satisfaz (3.3.16). Com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{14} e efetuamos a poda. No cálculo do determinante em (3.3.16), temos 4 possibilidades (distintas) apenas, pois podemos fixar o sinal na primeira matriz de bilateração.

No próximo nível, o **BP** calcula duas posições possíveis para v_5 que correspondem a dois valores possíveis para d_{15} . Repetimos o procedimento anterior e obtemos

$$d_{16}^2 = \det(I + Z_{546}Z_{514})d_{15}^2.$$

Apenas um dentre os dois valores possíveis para d_{15} satisfaz esta equação. Assim, com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{15} e efetuamos a poda. No cálculo do determinante

acima, temos duas possibilidades (distintas) apenas, pois podemos fixar o sinal na primeira matriz de bilateração.

No próximo nível, o **BP** encontra a solução.

Caso $n = 7$: Inicialmente, o **BP** considera as posições para os três primeiros vértices e, no nível 4, encontra dois possíveis valores para a distância desconhecida d_{14} . Fazendo

$$\begin{aligned} p_{17} = p_{14} + p_{45} + p_{56} + p_{67} &= p_{14} + (Z_{435}Z_{413})p_{41} + (Z_{546}Z_{435}Z_{413})p_{41} + (Z_{657}Z_{546}Z_{435}Z_{413})p_{41} = \\ &= (I - Z_{435}Z_{413} + Z_{546}Z_{435}Z_{413} - Z_{657}Z_{546}Z_{435}Z_{413})p_{14}, \end{aligned}$$

temos que

$$d_{17}^2 = \det(I + (-I + (I - Z_{657})Z_{546})Z_{435}Z_{413})d_{14}^2. \quad (3.3.17)$$

Esta última equação depende apenas das distâncias conhecidas e de d_{14} . Pelo Teorema (3.1.10) acima, apenas o valor correto para d_{14} satisfaz (3.3.17). Com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{14} e efetuamos a poda. Enfatizamos que na definição da matriz $Z_{i,j,k}$ em (3.3.5) temos duas possibilidades de sinal mas no cálculo do determinante em (3.3.17), temos 8 possibilidades (distintas) apenas, pois podemos fixar o sinal na primeira matriz de bilateração.

No próximo nível, o **BP** calcula duas posições possíveis para v_5 que correspondem a duas possibilidades para d_{15} . Repetimos o procedimento anterior e obtemos

$$d_{17}^2 = \det(I + (-I + Z_{657})Z_{546}Z_{514})d_{15}^2.$$

Apenas um dentre os dois valores possíveis para d_{15} satisfaz esta equação. Assim, com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{15} e efetuamos a poda. Novamente, temos 4 possibilidades (distintas) apenas no cálculo do determinante, pois podemos fixar o sinal na primeira matriz de bilateração.

No nível 6, o **BP** encontra duas possibilidades para a posição de v_6 que correspondem a duas possibilidades para d_{16} . Aplicando a bilateração, obtemos

$$d_{17}^2 = \det(-I + Z_{657}Z_{615})d_{16}^2,$$

e apenas um dentre os dois valores possíveis para d_{16} satisfaz esta equação. Assim, com apenas uma substituição, encontramos o valor correto de d_{16} e efetuamos a poda.

No próximo nível, o **BP** encontra a solução.

Caso Geral:

Para $n \geq 5$, o **BP** considera as posições para os três primeiros vértices e no nível k ($4 \leq k \leq n - 1$) calcula duas possibilidades para a posição de v_k , que correspondem as possibilidades para as distâncias que faltam $\{d_{ik} : 1 \leq i \leq k - 3\}$. Escolhemos uma possibilidade para a distância d_{1k} , de v_k ao primeiro vértice, e aplicamos bilaterações sucessivas:

$$d_{1n}^2 = \det(I + (-I + (\cdots + ((-1)^{n-k+1}(I - Z_{n-1,n-2,n})) \cdots) Z_{k+1,k,k+2}) Z_{k,k-1,k+1} Z_{k,1,k-1}) d_{1k}^2. \quad (3.3.18)$$

No nível k , a equação acima envolve apenas distâncias conhecidas (e aquelas obtidas nos níveis anteriores) e a incógnita d_{1k} . Após o teste na equação (3.3.18), encontramos o valor correto para esta distância. Neste nível, o **BP** calculou as duas posições possíveis para v_k que correspondem a duas $(k - 3)$ -uplas de possibilidades para a coluna k : $(d_{1k}, \dots, d_{k-3,k})$. Desta forma, os demais valores desconhecidos na coluna k de D ficam unicamente determinados (Teorema 3.1.10), a partir do valor correto de d_{1k} .

Dada uma matriz parcial de distâncias euclidianas $D = [d_{ij}]$ associada a um ${}^2\text{DMDGP}$, podemos usar a bilateração para reduzir a árvore de busca do **BP**. Se uma certa distância $d_{ij}, |i - j| \geq 5$, é uma informação de poda, tal que não existem informações adicionais nas colunas intermediárias $i < k < j$, então a partir do nível $i + 4$ aplicamos a equação (3.3.18) para “antecipar” a poda que só ocorreria no nível j . Desta forma, ocorrem podas em todos os níveis intermediários $i < k < j$ e, no nível j , temos apenas soluções factíveis.

Exemplo 3.3.2. Considere uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$, com $|V| = 10$, tal que as únicas informações de poda são d_{28} e d_{49} . De acordo com o Teorema 3.1.16, existem 4 realizações incongruentes ou, equivalentemente, 4 complementos distintos para a matriz parcial de distâncias D :

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

Vamos analisar o desempenho do **BP**, desconsiderando o ramo de soluções simétricas:

- i) até o nível 7 não existe poda, e a árvore de busca do **BP** está associada a 16 realizações parciais;
- ii) no nível 8, temos 32 possíveis realizações parciais, e o **BP** elimina as infactíveis com relação a d_{28} , restando apenas duas realizações parciais;
- iii) no nível 9, temos 4 possíveis realizações parciais, das quais apenas duas são factíveis;
- iv) no último nível, as 4 realizações obtidas são factíveis e, portanto, soluções do problema.

A Figura 3.10 ilustra o processo.

Vamos agora usar a bilateração para antecipar a poda do nível 8.

- i) até o nível 4, existem duas possíveis realizações parciais.

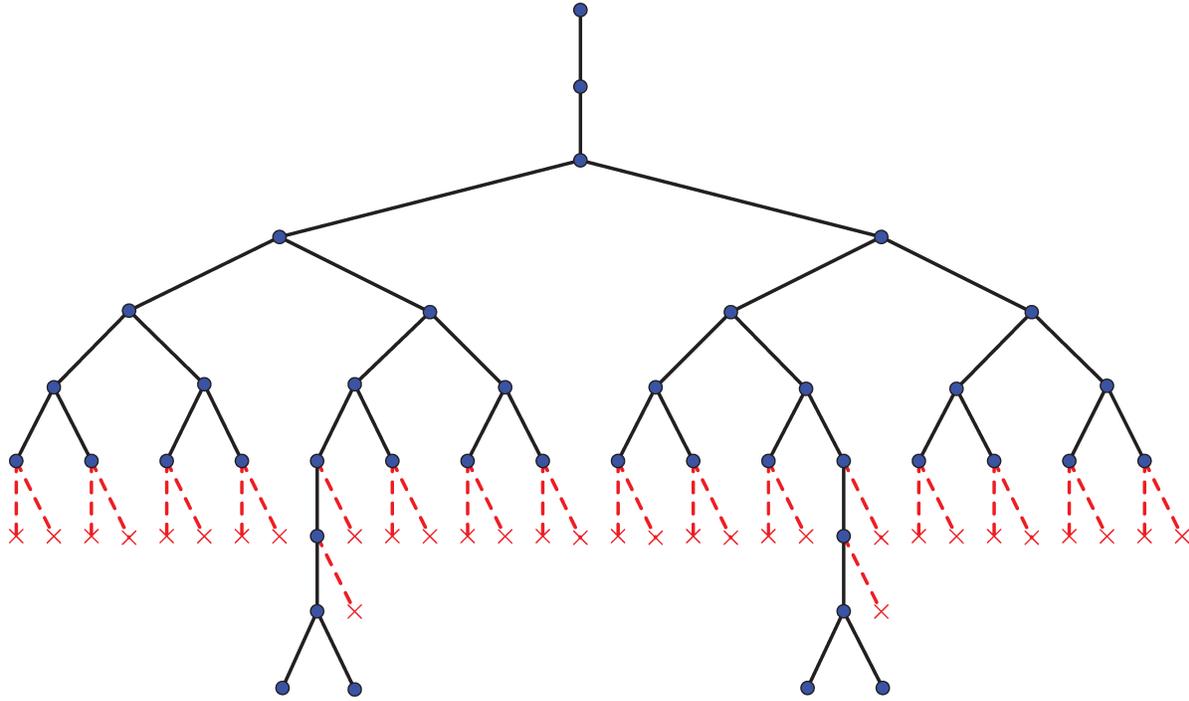


Figura 3.10: Soluções (parciais) obtidas, a cada nível, pelo **BP**.

- ii) no nível 5, a árvore se ramifica para 4 possíveis realizações parciais, correspondentes aos dois possíveis valores para d_{25} . A fórmula $d_{28}^2 = \det(I + (-I + (I - Z_{768}) Z_{657}) Z_{546} Z_{524}) d_{25}^2$ é aplicada para determinar o valor correto e efetua-se a poda, restando apenas duas possíveis realizações parciais.
- iii) no nível 6, existem 4 possíveis realizações parciais, que correspondem aos dois possíveis valores para d_{26} . A fórmula $d_{28}^2 = \det(-I + (I - Z_{768}) Z_{657} Z_{625}) d_{26}^2$ é aplicada para determinar o valor correto e efetua-se a poda, restando apenas duas possíveis realizações parciais. Observe que o produto $(I - Z_{768}) Z_{657}$ já foi calculado no nível anterior e que a distância d_{25} (aparece em Z_{625}) já foi determinada no nível anterior.
- iv) no nível 7, existem 4 possíveis realizações parciais que correspondem aos dois possíveis valores para d_{27} . A fórmula $d_{28}^2 = \det((I - Z_{768}) Z_{726}) d_{27}^2$ é aplicada para determinar o valor correto e efetua-se a poda, restando apenas duas possíveis realizações parciais. Novamente, observe que devemos calcular o valor de d_{26} (que aparece em Z_{726}) a partir da posição correta de v_6 , determinada no nível anterior. A partir daqui, o **BP** segue normalmente até obter as 4 soluções.

Observe que, neste exemplo, não foi necessário antecipar a poda correspondente a d_{49} (a Figura 3.11 ilustra o novo processo). Com a bilateração, não armazenamos soluções ineficazes a cada nível do **BP**.

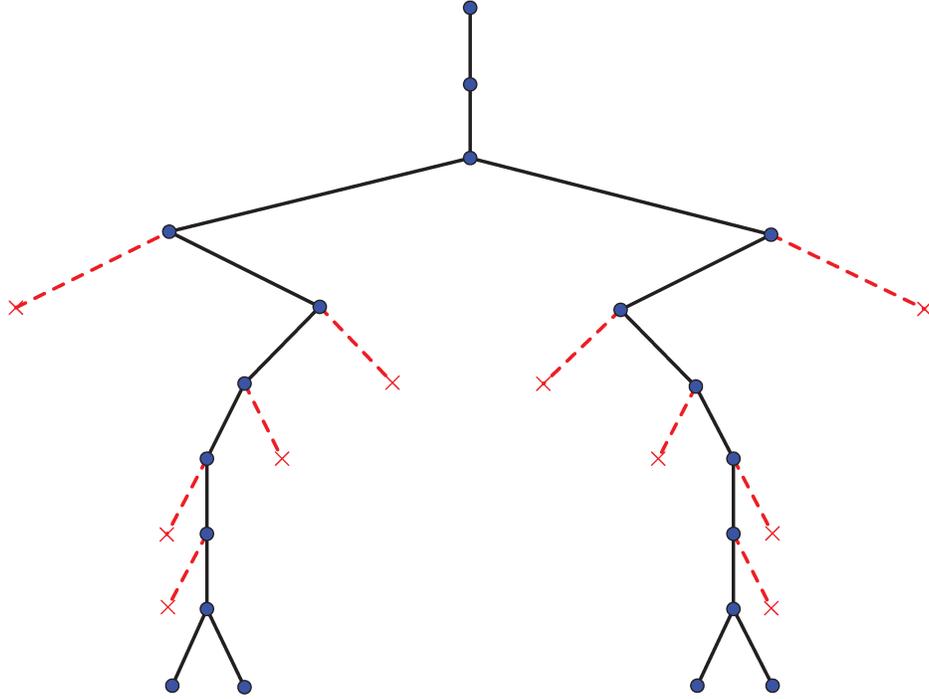


Figura 3.11: Soluções (parciais) obtidas pelo **BP**, com uso de bilaterações.

3.3.3 Bilateração e proposta de um BP modificado para o ${}^2\text{DMDGP}$

Se incorporamos as bilaterações sucessivas ao **BP** para antecipar informações de poda (como na seção anterior), temos um método modificado. O **BP** inicia o processo até obter as duas primeiras realizações parciais (nível 3). A cada nível i , se existir uma informação de poda futura d_{ij} na linha i , aplicamos as bilaterações sucessivas do nível $i + 3$ até o nível $j - 1$. Eventualmente, pode ocorrer que iniciamos as bilaterações no nível $i + k$, com $3 < k < j - i - 1$, quando bilaterações já foram aplicadas em níveis anteriores. A equação de bilateração que determina o valor correto de d_{ik} , $4 \leq k \leq (j - 1)$, $|i - k| \geq 3$, a partir do valor conhecido de d_{ij} , $|i - j| \geq 4$ é a seguinte:

$$d_{ij}^2 = \det (I + (-I + (\cdots + ((-1)^{j-k+1}(I - Z_{j-1,j-2,j})) \cdots) Z_{k+1,k,k+2}) Z_{k,k-1,k+1} Z_{k,i,k-1}) d_{ik}^2. \quad (3.3.19)$$

Exemplo 3.3.3. Considere uma instância de um ${}^2\text{DMDGP}$, com $|V|= 10$, tal que as únicas

informações de poda são d_{16} e d_{28} . A matriz incompleta D é a seguinte:

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

Vamos aplicar o nosso método modificado (**mBP**), fixando a posição dos três primeiros vértices:

- i) o **mBP** realiza os três primeiros vértices.
- ii) nos níveis 4 e 5, o **mBP** usa a bilateração com o valor de distância conhecido d_{16} para determinar os valores corretos de d_{14} e de d_{15} , respectivamente, efetuando as podas (posições infactíveis para v_4 e v_5).
- iii) no nível 6, é obtida exatamente uma realização parcial para os seis primeiros vértices. Assim, é possível obter o seguinte completamento parcial correspondente (em vermelho as entradas que foram determinadas):

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

- iv) no nível 7, observe que já conhecemos as posições (e conseqüentemente as distâncias) associadas aos vértices $\{v_2, v_3, v_4, v_5, v_6\}$, e assim, aplicamos a fórmula $d_{28}^2 = \det((I - Z_{768}) Z_{726}) d_{27}^2$ para determinar qual é o valor correto de d_{27} . Conseqüentemente, determinamos a posição factível para v_7 (dentre as duas possibilidades) e efetuamos a poda.
- v) o método segue normalmente até obter as 4 soluções (realizações incongruentes).

3.4 Trilateração e o ${}^3\text{DMDGP}$

Utilizando as mesmas notações da seção anterior, a *trilateração* nos permite localizar um ponto no espaço, a partir de suas distâncias a outros três pontos conhecidos. Se p_1, p_2 e p_3 são os vetores posição dos pontos conhecidos, e p_4 o vetor posição do ponto desconhecido, temos [21]:

$$p_4 = p_1 + \frac{1}{D(1, 2, 3)} \left(-D(1, 2, 3; 1, 3, 4) \cdot (p_2 - p_1) + D(1, 2, 3; 1, 2, 4) \cdot (p_3 - p_1) + \pm \sqrt{D(1, 2, 3, 4)} ((p_2 - p_1) \times (p_3 - p_1)) \right), \quad (3.4.1)$$

onde $D(i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n)$ é o bideterminante de Cayley-Menger (3.3.1) e $D(i_1, \dots, i_n)$ o determinante de Cayley-Menger.

Suponha agora que queremos determinar as distâncias entre dois pontos desconhecidos p_4 e p_5 , a partir de suas distâncias a outros três pontos conhecidos p_1, p_2, p_3 , aplicando trilaterações (Figura 3.12).

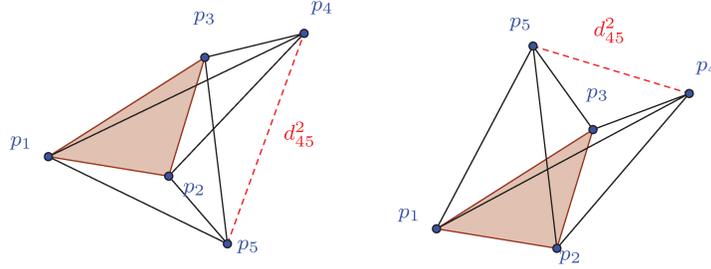


Figura 3.12: Determinando a distância entre p_4 e p_5 , a partir de suas distâncias a p_1, p_2, p_3 .

Assim, uma expressão para $D(4, 5) = d_{45}^2 = \|p_5 - p_4\|^2$, em termos das distâncias conhecidas, pode ser obtida substituindo-se as expressões para p_4 e p_5 obtidas de (3.4.1):

$$\begin{aligned} p_5 - p_4 &= \frac{1}{D(1, 2, 3)} \left((D(1, 2, 3; 1, 3, 4) - D(1, 2, 3; 1, 3, 5)) \cdot (p_2 - p_1) + \right. \\ &\quad \left. + (D(1, 2, 3; 1, 2, 4) - D(1, 2, 3; 1, 2, 5)) \cdot (p_3 - p_1) + \right. \\ &\quad \left. \pm (\sqrt{D(1, 2, 3, 5)} \mp \sqrt{D(1, 2, 3, 4)}) ((p_2 - p_1) \times (p_3 - p_1)) \right) \\ \Rightarrow D(4, 5) &= \frac{a^2 D(1, 2) + b^2 D(1, 3) + 2ab D(1, 2; 1, 3)}{D^2(1, 2, 3)} + \frac{c}{D(1, 2, 3)}, \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= D(1, 2, 3; 1, 3, 5) - D(1, 2, 3; 1, 3, 4) \\ b &= D(1, 2, 3; 1, 2, 4) - D(1, 2, 3; 1, 2, 5) \\ c &= D(1, 2, 3, 4) + D(1, 2, 3, 5) \pm 2\sqrt{D(1, 2, 3, 4)D(1, 2, 3, 5)}. \end{aligned}$$

Temos que duas soluções são possíveis (Figura 3.12), correspondendo aos dois possíveis sinais da raiz quadrada na expressão para c .

Observe ainda que, quando $D(1, 2, 3) = 0$, isto é, p_1, p_2, p_3 são colineares, o valor $D(4, 5)$ não está definido. Se $D(1, 2, 3, 4)D(1, 2, 3, 5) = 0$, ou seja, p_4 ou p_5 está no plano determinado por p_1, p_2, p_3 , temos uma única possibilidade para $D(4, 5)$. Se $D(1, 2, 3, 4) < 0$ ou $D(1, 2, 3, 5) < 0$, então o problema é inconsistente, ou seja, um dos tetraedros não pode ser realizado com os valores de distâncias dados. Em uma instância de um **DMDGP**, tais possibilidades têm probabilidade 0 de ocorrer (veja Seção 1.2.1 ou [16]).

3.4.1 Trilaterações Sucessivas Aplicadas ao ${}^3\text{DMDGP}$

Vamos considerar instâncias com $6 \leq n$ vértices, onde a **única informação de poda** é $d_{1,n}$. Pelo teorema sobre o número de soluções, existe apenas um completamento possível para a matriz parcial $D = [d_{ij}]$. Fixando os vértices v_1, v_2, v_3, v_4 temos que, no nível k ($k \geq 5$), o **BP** encontra duas possíveis posições para o vértice v_k , que correspondem a dois valores distintos para a distância desconhecida $d_{k-4,k}$. Só ocorrerá poda no último nível, após 2^{n-4} ramificações na árvore de busca.

Como na seção anterior, desejamos incorporar a trilateração ao **BP** para obter podas em todos os níveis, isto é, no nível k temos uma “parte” da única solução do problema.

Definiremos a *equação de trilateração*, associada a 5-quase-clique induzida por $\{v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3}, v_{i_4}, v_{i_5}\}$ (onde a aresta que falta é $\{v_{i_4}, v_{i_5}\}$), como:

$$\tau(i_1, i_2, i_3, i_4, i_5) = D(i_4, i_5) - \left(\frac{a^2 D(i_1, i_2) + b^2 D(i_1, i_3) + 2ab D(i_1, i_2; i_1, i_3)}{D^2(i_1, i_2, i_3)} + \frac{c}{D(i_1, i_2, i_3)} \right) = 0, \quad (3.4.3)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_3, i_5) - D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_3, i_4) \\ b &= D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_2, i_4) - D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_2, i_5) \\ c &= D(i_1, i_2, i_3, i_4) + D(i_1, i_2, i_3, i_5) \pm 2\sqrt{D(i_1, i_2, i_3, i_4)D(i_1, i_2, i_3, i_5)}. \end{aligned}$$

Em instâncias de um **DMDGP**, para cada 5-quase-clique dada, a equação (3.4.3) acima tem duas soluções distintas (com probabilidade 1), como vimos na Seção (1.2.1).

Exemplo 3.4.1. Considere uma instância de um **DMDGP**, com $V = \{v_1, \dots, v_8\}$ e $E_P = \{v_1, v_8\}$.

No nível 4, o **BP** encontra uma realização parcial para $\{v_1, \dots, v_4\}$ e, no nível 5, obtemos duas possíveis posições para v_5 , que correspondem a dois possíveis valores para $D(1, 5)$. Desejamos antecipar a poda correspondente ao valor conhecido $D(1, 8)$.

A equação de trilateração (3.4.3), $\tau(3, 4, 5, 1, 6) = 0$, para cada valor de $D(1, 5)$, retorna dois valores possíveis para $D(1, 6)$. Assim, obtemos 4 possíveis valores para $D(1, 6)$. Para cada um destes valores, a equação $\tau(4, 5, 6, 1, 7) = 0$ retorna dois valores para $D(1, 7)$, gerando 8 possibilidades para $D(1, 7)$.

Considere agora, a equação $\tau(5, 6, 7, 1, 8) = 0$. Temos 8 possíveis 5-cliques, correspondentes aos 8 possíveis valores de $D(1, 7)$. Observe que escolhido um valor para $D(1, 7)$, os valores anteriores $D(1, 5)$ e $D(1, 6)$ ficam unicamente determinados. Pelo Teorema 3.1.10, exatamente uma terna $(D(1, 5), D(1, 6), D(1, 7))$ satisfaz a equação $\tau(5, 6, 7, 1, 8) = 0$. Assim, após (no máximo) 14 testes, determinamos qual é o par correto. Não é necessário aplicar 16 testes, pois sabemos que exatamente uma possibilidade será factível e cada possibilidade está associada a 2 testes na última equação de trilateração.

Efetuamos a poda na posição infactível de v_5 e os (únicos) valores de $D(1, 5), D(1, 6), D(1, 7)$ ficam determinados.

Considerando a matriz de distâncias do **EDMCP** associado, temos o seguinte complemento parcial:

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet & 2 & 4 & 8 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Ocorre a poda na posição infactível para v_5 e no nível 6, o **BP** encontra duas possíveis posições para v_6 . Como já determinamos o valor correto para $D(1, 6)$, efetuamos a poda na posição infactível de v_6 . Assim, obtemos uma realização parcial dos 6 primeiros vértices, que corresponde a um único complemento parcial de D :

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

No nível 7, o **BP** encontra duas possíveis posições para v_7 . Como já determinamos o valor correto de $D(1, 7)$, ocorre mais uma poda. A realização parcial dos 7 primeiros vértices corresponde a um único complemento parcial de D :

$$\begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & \bullet \\ & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & ? \\ & & & & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & & 0 & \bullet & \bullet \\ & & & & & & 0 & \bullet \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

No nível 8, o **BP** encontra a (única) solução do problema.

Observe que determinar a sequência correta de valores de distâncias na primeira linha de D envolve, no máximo, $2^4 - 2$ testes na equação de trilateração. O número de ramos na árvore de busca do **BP**, se prosseguimos até o nível 8 sem aplicar trilaterações é exatamente 2^4 . Aplicando a trilateração, não armazenamos soluções infactíveis, de forma que no nível K ($1 \leq K \leq 8$), temos exatamente a (única) solução parcial do problema.

Exemplo 3.4.2. Vamos considerar uma instância com $n = 11$ vértices, $E_P = \{v_1, v_{11}\}$, e analisar a sequência de trilaterações que determina os valores corretos de d_{1k} , $5 \leq k \leq 10$, no nível 5 do **BP**.

Vértices	Equação	Distância calculada	Possibilidades
$\{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\}$	BP	d_{15}	2
$\{v_1, v_3, v_4, v_5, v_6\}$	$\tau(3, 4, 5, 1, 6) = 0$	d_{16}	4
$\{v_1, v_4, v_5, v_6, v_7\}$	$\tau(4, 5, 6, 1, 7) = 0$	d_{17}	8
$\{v_1, v_5, v_6, v_7, v_8\}$	$\tau(5, 6, 7, 1, 8) = 0$	d_{18}	16
$\{v_1, v_6, v_7, v_8, v_9\}$	$\tau(6, 7, 8, 1, 9) = 0$	d_{19}	32
$\{v_1, v_7, v_8, v_9, v_{10}\}$	$\tau(7, 8, 9, 1, 10) = 0$	$d_{1,10}$	64
$\{v_1, v_8, v_9, v_{10}, v_{11}\}$	$\tau(8, 9, 10, 1, 11) = 0$	$(d_{15}, d_{16}, d_{17}, d_{18}, d_{1,9}, d_{1,10})$	1 (max 2^7 testes)

Vamos generalizar o procedimento acima para instâncias com $n \geq 6$ vértices e $E_P = \{1, n\}$.

Teorema 3.4.3. Considere uma instância com $n \geq 6$ vértices, tal que $E_P = \{v_1, v_n\}$. Suponha que o **BP** determinou as duas posições para v_5 , que geram dois valores distintos para $D(1, 5)$. A seguinte sequência de equações de trilaterações permitem determinar os valores corretos de $D(1, k)$, $5 \leq k \leq n - 1$ e, conseqüentemente, as posições corretas de v_5, \dots, v_{n-1} :

$$(1, 3, 4, 5, 6) \rightarrow (1, 4, 5, 6, 7) \rightarrow \dots \rightarrow (1, n - 3, n - 2, n - 1, n).$$

Demonstração. Para $n = 6$, temos apenas o termo $(1, 3, 4, 5, 6)$ da sequência. Observe que este termo está associado a duas possíveis 5-cliques, que correspondem aos dois possíveis valores para $D(1, 5)$ obtidos a partir das duas posições para v_5 encontradas pelo **BP**. Apenas uma dentre essas duas possibilidades satisfaz a equação $\tau(3, 4, 5, 1, 6) = 0$. Assim, após no máximo 4 testes, determinamos o valor correto de $D(1, 5)$ e ocorre a poda na posição infactível de v_5 .

Para $n > 6$, observe que o primeiro termo da sequência acima está associado a duas possibilidades de 5-cliques. Além disto, cada termo da sequência está associado ao dobro de possibilidades de 5-cliques do termo anterior. Assim, o último termo $(1, n-3, n-2, n-1, n)$, está associado a 2^{n-5} cliques e após, no máximo, 2^{n-4} testes na equação $\tau(n-3, n-2, n-1, 1, n) = 0$, determinamos os valores corretos de $(D(1, n-3), D(1, n-2), D(1, n-1))$. O valor correto de $D(1, n-3)$ determina unicamente os valores anteriores $D(1, k)$, $5 \leq k \leq (n-4)$. \square

Observação 3.4.4. Vale observar que podemos realizar o backtracking na sequência de trilaterações (na primeira linha) como descrito na Observação 1.2.6, de modo a economizar memória.

3.4.2 Trilateração e proposta de um BP modificado para o ³DMDGP

Dada uma instância de um DMDGP, se d_{ij} , $|i-j| \geq 5$, é uma informação de poda, podemos aplicar o Teorema 3.4.3, do nível $i+4$ até o nível $j-1$, para “antecipar” a poda, obtendo a única solução parcial do subproblema associado aos vértices $\{v_i, \dots, v_j\}$. Obviamente, pode não ser necessário aplicar toda a sequência de trilaterações, se as posições de certos v_k , $i \leq k \leq j-2$, já foram determinadas por trilaterações em níveis anteriores (definidas por outras informações de poda).

Exemplo 3.4.5. Considere uma instância de um DMDGP, com $|V|=12$, tal que as únicas informações de poda são $d_{2,9}$ e $d_{4,11}$. De acordo com o Teorema 3.1.10, existem 4 realizações incongruentes ou, equivalentemente, 4 complementos distintos para a matriz parcial de distâncias D :

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

Vamos agora antecipar a poda do nível 9. Fixamos as posições de $\{v_1, v_2, v_3, v_4\}$:

- i) no nível 5, o **BP** calcula 2 posições para v_5 que geram dois valores distintos para d_{15} .
- ii) no nível 6, na árvore de busca, temos 4 posições para v_6 associadas a dois possíveis valores para d_{26} . Aplicamos a sequência de trilaterações dada pelo Teorema 3.4.3 à submatriz correspondente aos vértices $\{v_2, \dots, v_9\}$. No final da sequência, os valores $\{d_{26}, d_{27}, d_{28}\}$ ficam determinados e podemos efetuar a poda nas posições ineficazes de v_6 .

- iii) no nível 7, existem 4 possíveis posições para v_7 , associadas a dois possíveis valores para d_{27} . Este valor foi determinado no nível anterior e efetuamos a poda nas posições ineficazes de v_7 .
- iv) no nível 8, existem 4 possíveis posições para v_8 , que correspondem a dois possíveis valores para d_{28} . Este valor já foi determinado e efetuamos a poda nas posições ineficazes de v_8 .
- iv) no nível 9, ocorre a poda correspondente ao valor de d_{29} .
- v) no nível 10, observe que já conhecemos as posições corretas de v_8 e v_9 e logo, podemos determinar d_{48} e d_{49} . Assim, a equação de trilateração $\tau(8, 9, 10, 4, 11) = 0$ determina qual dentre os dois possíveis valores para $d_{4,10}$ é o correto. O **BP** efetua a poda nas posições ineficazes de v_{10} .
- vi) no nível 11, ocorre a poda correspondente ao valor de $d_{4,11}$ e, no nível 12, o **BP** encontra as 4 soluções (incongruentes) do problema.

Abaixo, temos a árvore de busca associada ao método descrito neste exemplo.

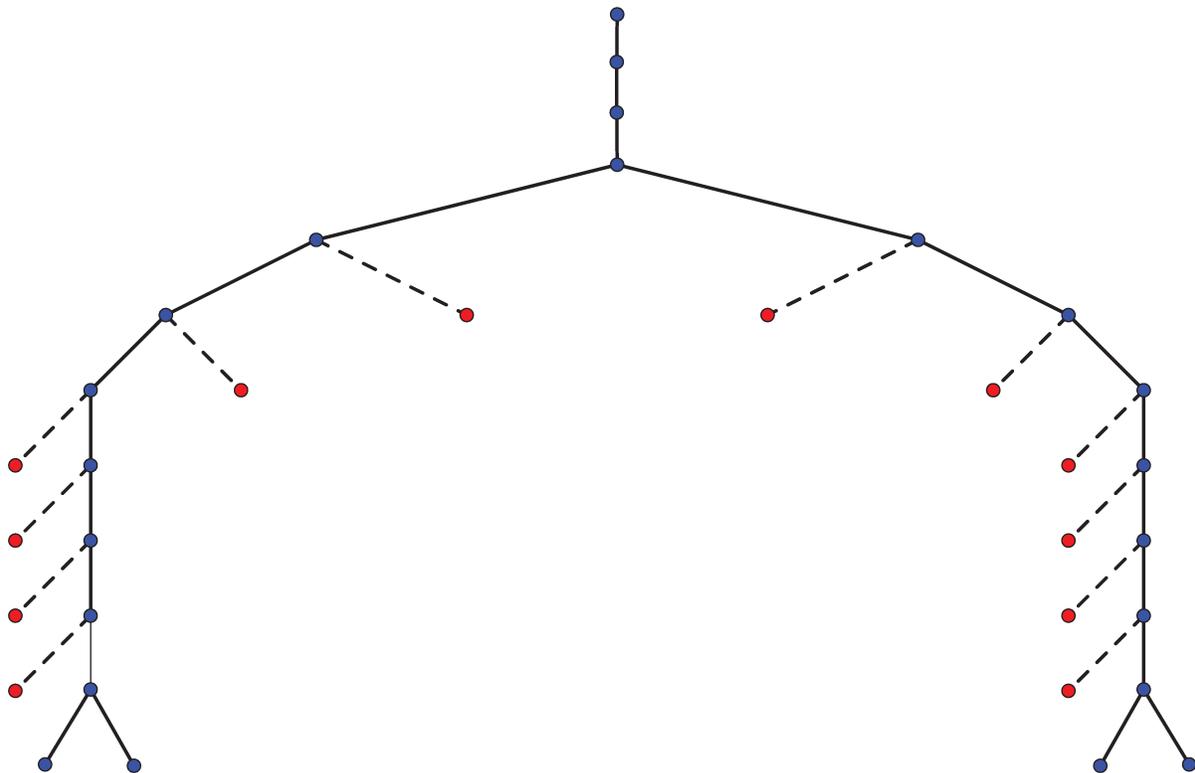


Figura 3.13: A cada nível, temos apenas soluções parciais do problema. Não armazenamos realizações ineficazes.

Exemplo 3.4.6. Vamos considerar agora uma instância tal que $|V|=13$ e as únicas informações de poda são $d_{1,13}$, $d_{3,9}$ e $d_{5,12}$. De acordo com o Teorema 3.1.10, existe uma única solução. Temos, então

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

Vamos repetir o procedimento do exemplo anterior, antecipando primeiramente a poda correspondente a $d_{1,13}$. Temos $m=6$ e, no nível 5 do **BP**, completamos a primeira linha de D até a oitava coluna, obtendo 2^4 possibilidades para a sequência $\{d_{15}, d_{16}, d_{17}, d_{18}\}$. Analogamente, obtemos, via trilaterações, 2^4 possibilidades para a sequência $\{d_{9,13}, d_{8,13}, d_{7,13}, d_{6,13}\}$ na última coluna. Após (no máximo) 2^8 testes, determinamos as sequências corretas. O método segue adiante, de forma que cada elemento $d_{1,k}$, com $9 \leq k \leq 12$, pode ser determinado no nível k do **BP**, a partir das duas possíveis posições para v_k (encontradas pelo **BP**) e a equação de trilateração associada.

Observe agora que as informações $d_{3,9}$ e $d_{5,12}$ podem ser usadas para diminuir a quantidade de possibilidades e testes a partir no nível 7. De modo geral, ordenaremos tais informações via ordem lexicográfica sobre o conjunto $Abs \times E_P = \{(|i-j|, i, j) : (i, j) \in E_P\}$ e, se $d_{k,\ell} \in E_P$ é uma informação de poda no nível k , faremos os completamentos parciais (via trilaterações) associados a (k, ℓ) -submatriz principal, de acordo com a ordem no subconjunto $\{(|i-j|, i, j) : k \leq i, j \leq \ell\} \subset Abs \times E_P$. Ou seja, iniciamos os completamentos pelas submatrizes principais associadas aos elementos mais próximos da diagonal principal.

Neste exemplo, temos $Abs \times E_P = \{(6, 3, 9), (7, 5, 12), (12, 1, 13)\}$. No nível 7 do **BP**, determinamos os valores corretos de $d_{3,7}$ e $d_{3,8}$ (4 possibilidades para o par), como no Teorema 3.4.3. Nos níveis 10 e 11, determinamos os valores corretos de $d_{5,10}$ e $d_{5,11}$ (4 possibilidades para o par). Desta forma, temos podas do nível 7 ao nível 12, com um número menor de operações do que o

primeiro procedimento adotado (completamento da primeira linha):

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

Temos assim um método modificado, também para o ³DMDGP.

Capítulo 4

Uma aplicação em robótica: matrizes trilateráveis e o DDGP₃.

4.1 O Problema de Geometria de Distâncias Discretizável

Em [11], os autores definem o DDGP_K. Denotando por $\delta(v)$ o conjunto de vizinhos de v , $\gamma(v) = \{u \in V : u < v\}$ o conjunto de predecessores de v na ordem $<$, e $G[U]$ o subgrafo de G induzido por $U \subset V$ temos:

K-Problema de Geometria de Distâncias Discretizável (DDGP_K): Dado um grafo simples, não direcionado, $G = (V, E)$, uma função peso $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, um inteiro positivo $K > 0$, uma ordem total $<$ em V tais que

$$\forall v \in V (v > K \rightarrow |\delta(v) \cap \gamma(v)| \geq K) \quad (4.1.1)$$

$$\forall v \in V \exists U_v \subseteq \delta(v) \cap \gamma(v) : G[U_v] \simeq \mathbf{K}_K \wedge \Delta_{K-1}(U_v) > 0, \quad (4.1.2)$$

e uma imersão parcial $\bar{x} : V_0 = \{v \in V : \rho(v) \leq K\} \rightarrow \mathbb{R}^K$ válida em $G[V_0]$, determinar quando existe uma extensão válida $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ de \bar{x} .

A expressão $\Delta_{K-1}(U_v)$ denota o volume do $(K-1)$ -simplex, sobre K pontos, determinado por U_v (as posições dos vértices de U_v) em \mathbb{R}^{K-1} e \mathbf{K}_K denota uma K -clique.

Observação 4.1.1. Uma observação importante [11] sobre a restrição $G[U_v] \simeq \mathbf{K}_K$ é a seguinte: devido ao fato do **BP** ser um método iterativo por natureza, ele localiza o vértice v em \mathbb{R}^K depois de ter localizado os seus predecessores. Assim, mesmo que $G[U_v]$ não seja, a priori, uma K -clique, no momento de localizar v , tal condição já está satisfeita, e as desigualdades estritas em (4.1.2) podem ser verificadas para U_v . Em outras palavras, do ponto de vista prático, a condição $G[U_v] \simeq \mathbf{K}_K$ pode ser substituída pela condição menos restritiva $|U_v| \geq K$. Além disto, os autores em [11] observam que, na prática, qualquer instância de um DDGP irá satisfazer as desigualdades em (4.1.2) com probabilidade 1, o que nos permite ignorar também tais restrições.

A diferença entre o DDGP₃ e o DMDGP é que, no DDGP₃, os vizinhos de v não são (necessariamente) os predecessores imediatos. Portanto, o **BP** também pode ser aplicado ao DDGP para se determinar o conjunto de todas as realizações incongruentes de uma dada instância.

4.2 Matrizes Trilateráveis e o DDGP₃

Conforme descrito na seção 3.4, podemos utilizar a fórmula de trilateração

$$D(i_4, i_5) = \frac{a^2 D(i_1, i_2) + b^2 D(i_1, i_3) + 2ab D(i_1, i_2; i_1, i_3)}{D^2(i_1, i_2, i_3)} + \frac{c}{D(i_1, i_2, i_3)}, \quad (4.2.1)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_3, i_5) - D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_3, i_4); \\ b &= D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_2, i_4) - D(i_1, i_2, i_3; i_1, i_2, i_5); \\ c &= D(i_1, i_2, i_3, i_4) + D(i_1, i_2, i_3, i_5) \pm 2\sqrt{D(i_1, i_2, i_3, i_4)D(i_1, i_2, i_3, i_5)}; \end{aligned}$$

para determinar os dois possíveis valores (distintos, com probabilidade 1) para a distância desconhecida d_{i_4, i_5} associada a a quase-clique $(i_1, i_2, i_3, i_4, i_5)$.

Em [21], a seguinte definição é dada: uma matriz (parcial) de distâncias euclidianas é trilaterável se, e somente se, as distâncias desconhecidas podem ser determinadas usando-se a fórmula (4.2.1) repetidamente. Além disto, os autores estabelecem uma correspondência entre famílias de “trilaterable in-parallel and serial robots” e matrizes trilateráveis, e mostram que robôs trilateráveis (cuja matriz de distâncias associada é trilaterável) constituem os mais populares disponíveis comercialmente.

De acordo com as definições acima, obtemos o seguinte resultado:

Teorema 4.2.1. Se uma matriz de distâncias D é trilaterável, então ela é a matriz de um DDGP₃ e o **BP** pode ser aplicado para obter todos os possíveis completamentos de D e suas respectivas realizações.

Demonstração. Suponha que D é associada ao grafo $G = (V, E)$, com $|V| = n \geq 5$. Usaremos indução sobre n . Basta verificar que a condição (4.1.1) da definição do DDGP se verifica.

Para $n = 5$, segue da hipótese que G necessariamente é uma quase-clique (exatamente uma aresta faltante) sobre 5 vértices e logo satisfaz (4.1.1) da definição do DDGP₃.

Suponha que a afirmação é verdadeira para um certo $n \geq 5$ e, seja $G = (V, E)$, com $|V| = n + 1$, cuja matriz de distâncias associada D é trilaterável. Por hipótese, deve existir uma quase-clique inicial H sobre 5 vértices. Seja $\{v, w\}$ a (única) aresta que falta em $E(H)$. Retire de V o vértice $v \in V(H)$, extremidade da aresta faltante. Considere \hat{D} a matriz de distâncias associada ao subgrafo $G[V - \{v\}]$. Temos duas possibilidades:

1. \hat{D} é trilaterável. Como $G[V - \{v\}]$ tem n vértices, segue da hipótese de indução que \hat{D} é a matriz de um DDGP₃. Acrescentando v por último na ordem obtida em $G[V - \{v\}]$, temos que v tem pelo menos 3 vizinhos predecessores e, portanto, D é a matriz de um DDGP₃.
2. \hat{D} não é trilaterável. Neste caso, considere o maior subconjunto de vértices $V_0 \subset (V - \{v\})$ contendo $H - \{v\}$ que pode ser completado para uma clique, via trilaterações sucessivas (observe que $|V_0| \geq 4$, pois $(H - \{v\}) \subset V_0$) e seja ρ_0 a ordem (sobre V_0) em que isto ocorre.

Faça $U = (V - \{v\}) - V_0$. Temos que nenhum vértice $u \in U$ pode ter 3 vizinhos em V_0 , caso contrário, poderíamos aplicar trilaterações sucessivas e completar as distâncias faltantes entre u e os vértices de V_0 . Acrescente o vértice v depois do último vértice de V_0 . Como v tem pelo menos 3 vizinhos em V_0 , podemos aplicar mais trilaterações sucessivas de forma que $V_1 = V_0 \cup \{v\}$ se torne uma clique. Agora, observe que, por hipótese, D é trilaterável. Assim, as distâncias que faltam entre os vértices de U e de V_1 podem ser calculadas por trilaterações sucessivas. Logo, deve existir um vértice em U que tem 3 vizinhos em V_1 ou as distâncias desconhecidas entre tal vértice e os vértices de V_0 não poderiam ser calculadas. Coloque tal vértice por último na ordem definida sobre V_1 e chame o novo conjunto de V_2 . Novamente, algum vértice em $U - V_2$ tem pelo menos 3 vizinhos em V_2 para que as distâncias desconhecidas entre tal vértice e os vértices de V_0 sejam calculadas. Coloque tal vértice por último na ordem definida sobre V_2 e chame o novo conjunto de V_3 . Procedemos assim, até que $U = \emptyset$ e obtemos uma ordem ρ em V , a partir da ordem ρ_0 em V_0 , tal que todo vértice tem pelo menos 3 vizinhos predecessores. Portanto, D é matriz de um DDGP₃.

□

4.3 Trabalhando com o exemplo dado em [21]: PUMA 560 Robot

Para exemplificar o método proposto em [21], os autores consideram a seguinte matriz parcial de distâncias D , associada ao manipulador PUMA 560:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 101.05 & D_{1,3} & D_{1,4} & 1.314 & 1 & D_{1,7} & 1.877 \\ & 0 & 97.077 & D_{2,3} & D_{2,4} & 100.05 & 100.05 & 97.264 \\ & & 0 & 1.186 & D_{3,5} & D_{3,6} & 0.023 & 0.186 \\ & & & 0 & 2 & D_{4,6} & D_{4,7} & 1 \\ & & & & 0 & 0.596 & D_{5,7} & 1 \\ & & & & & 0 & 0.186 & 0.318 \\ & & & & & & 0 & 0.209 \\ & & & & & & & 0 \end{pmatrix},$$

onde $D(i, j) = \|p_i - p_j\|^2 = d_{ij}^2$ indica distâncias desconhecidas e omitimos as entradas abaixo da diagonal principal, por se tratar de uma matriz simétrica. Posteriormente, os autores aplicam trilaterações sucessivas para obter todos os complementos de D . A seguinte sequência de trilaterações é aplicada [21]:

base triangular	distância	possibilidades
(2, 6, 8) →	(1, 7)	→ 2
(1, 6, 8) →	(2, 5)	→ 2
(2, 7, 8) →	(3, 6)	→ 2
(2, 6, 7) →	(1, 3)	→ 4
(2, 6, 8) →	(3, 5)	→ 8
(1, 2, 6) →	(5, 7)	→ 8
(3, 5, 8) →	(1, 4)	→ 16
(3, 5, 8) →	(2, 4)	→ 16
(3, 5, 8) →	(4, 6)	→ 16
(3, 5, 8) →	(4, 7)	→ 16

Após o último passo da sequência de trilaterações, são obtidas 2^{10} possíveis matrizes completas, das quais verifica-se que apenas 16 matrizes são, de fato, matrizes euclidianas. Posteriormente, determina-se as 32 realizações em \mathbb{R}^3 , que correspondem a estas matrizes de distâncias euclidianas completas (aqui, cada matriz completa corresponde a duas realizações, uma simétrica com relação a outra, pelo plano que contém os três primeiros vértices).

Note que, se reordenarmos as linhas e as colunas de D pelo vetor permutação $p = (1, 2, 6, 8, 7, 5, 3, 4)$, obtemos a seguinte matriz, que denotaremos por D , sem perda de generalidade:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 101.05 & 1 & 1.877 & D_{1,7} & 1.314 & D_{1,3} & D_{1,4} \\ & 0 & 100.05 & 97.264 & 100.05 & D_{2,5} & 97.077 & D_{2,4} \\ & & 0 & 0.318 & 0.186 & 0.596 & D_{6,3} & D_{6,4} \\ & & & 0 & 0.209 & 1 & 0.186 & 1 \\ & & & & 0 & D_{7,5} & 0.023 & D_{7,4} \\ & & & & & 0 & D_{5,3} & 2 \\ & & & & & & 0 & 1.186 \\ & & & & & & & 0 \end{pmatrix}.$$

Nessa nova ordem, podemos verificar que a matriz D atende as condições de um DDGP₃, conforme a observação 4.1.1. Sendo assim, podemos aplicar o **BP** para encontrar todas as realizações válidas da matriz parcial D .

Neste caso, as vantagens do **BP** em relação ao método utilizado (trilaterações) são:

1. no nível K do algoritmo, as realizações parciais obtidas correspondem apenas a completamentos parciais de D que já são (sub)matrizes euclidianas;
2. no nível K do algoritmo, temos todas as possíveis realizações parciais dos K primeiros vértices, visto que não existem valores adicionais de distâncias (poda) já que, na ordem apresentada, cada vértice tem exatamente 3 vizinhos anteriores;
3. no final do algoritmo, todas as soluções são factíveis e correspondem a todas as possíveis realizações em \mathbb{R}^3 do conjunto de pontos cuja matriz parcial de distâncias foi dada.

Vamos comparar, passo a passo, o método de trilateração utilizado em [21], que denotaremos por **TM** (Trilateration Method), com o **BP** aplicado à matriz parcial D acima:

- Até o nível 4, o **BP** encontra as duas realizações da 4-clique inicial (1, 2, 6, 8).
- No nível 5, o **BP** encontra quatro possíveis posições para o vértice 7 que correspondem a dois valores distintos para a distância d_{17} e quatro realizações parciais para os vértices (1, 2, 6, 8, 7).

Até aqui, estes são os mesmos valores encontrados no passo 1 do **TM**, que geram os mesmos dois completamentos parciais para a submatriz correspondente aos vértices (1, 2, 6, 8, 7).

- No nível 6, o **BP** encontra quatro possíveis posições para o vértice 5, a partir da quase-clique (1, 2, 6, 8, 5), que correspondem a dois valores distintos para a distância d_{25} . Cada par de possibilidades $\{(1, 7), (2, 5)\}$ corresponde a uma quase-clique (1, 2, 6, 8, 7, 5) e gera uma única possibilidade para d_{75} (as possibilidades são distintas com probabilidade um). Assim, no nível 6, o **BP** encontra 8 realizações parciais para os vértices (1, 2, 6, 8, 7, 5), que correspondem a 4 completamentos da submatriz correspondente a estes vértices.

Os valores para d_{25} são os mesmos valores encontrados no passo 2 do **TM**. Entretanto, observe que tais valores geram 8 possibilidades para d_{57} (passo 6 do **TM**), que correspondem a 8 completamentos parciais para a submatriz correspondente aos vértices (1, 2, 6, 8, 7, 5). Isto ocorreu porque, no **TM**, para calcular d_{57} , usamos apenas as informações de distâncias associadas a quase-clique (1, 2, 6, 7, 5), enquanto que no **BP**, usamos todas as distâncias na quase-clique (1, 2, 6, 8, 7, 5). As possibilidades para d_{57} obtidos pelo **BP** já são “compatíveis” com todos os valores de distâncias até os vértices anteriores. Desta forma, cada completamento parcial de uma submatriz de D , obtido pelo **BP**, já é uma (sub)matriz de distâncias euclidianas, sendo redundante uma verificação a posteriori e reduzindo o número de possibilidades a cada passo do algoritmo. De fato, no passo K , o número de possibilidades é exatamente o número de (sub)matrizes euclidianas $K \times K$, associadas aos K primeiros vértices que satisfazem as restrições (todas as distâncias conhecidas entre os K primeiros vértices).

Nos próximos níveis, a análise é análoga e a tabela abaixo resume o número de completamentos parciais e realizações obtidas a cada passo do **BP**:

subconjunto de vértices		completamentos parciais de D		realizações
(1, 2, 6, 8)	→	1	→	2
(1, 2, 6, 8, 7)	→	2	→	4
(1, 2, 6, 8, 7, 5)	→	4	→	8
(1, 2, 6, 8, 7, 5, 3)	→	8	→	16
(1, 2, 6, 8, 7, 5, 3, 4)	→	16	→	32

Chamamos novamente a atenção para o fato de que o **BP** encontrou todas as 32 soluções do problema (que correspondem a 16 completamentos matriciais), sem armazenar soluções que viriam a se tornar “infactíveis” como no método apresentado em [21] (que encontrou 1024 possíveis completamentos matriciais).

Capítulo 5

Conclusão

5.1 Contribuições da Tese

Nossa primeira contribuição aparece no trabalho sobre o número de soluções do K DMDGP [15]. Conhecer a cardinalidade do conjunto solução de uma dada instância do DMDGP associada ao cálculo da estrutura 3D de proteínas é importante, pois tal informação está ligada à “qualidade” dos dados experimentais de RMN. Também é útil em outras aplicações do DGP para saber quando certas distâncias são suficientes para o grafo ter uma única realização. Ainda, se conhecemos o número de soluções de uma dada instância e desejamos obter todas as soluções, podemos utilizar este valor como um critério de parada para o algoritmo **BP**, reduzindo a árvore de busca associada.

Na seção 3.2.1, mostramos como adotar uma estratégia para o **BP dual**, visando diminuir o número total de determinantes de Cayley-Menger, via antecipação de podas, quando existem informações de podas “futuras”.

Na seção 3.3.2, mostramos como as idéias apresentadas em [24] podem ser aplicadas a instâncias do 2 DMDGP e, na seção 3.3.3, descrevemos como um método modificado pode ser obtido. Este método consiste em antecipar certas informações de poda no decorrer do **BP**, diminuindo a árvore de busca e, conseqüentemente, o cálculo dos produtos acumulados das matrizes de torção utilizadas no **BP**. Em particular, para instâncias onde a única informação de poda é a distância do primeiro ao último vértice, o método tem a vantagem de, a cada nível do **BP**, armazenar apenas soluções parciais factíveis.

Na seção 3.4.1, mostramos como a equação de trilateração apresentada em [21] pode ser aplicada a instâncias do 3 DMDGP e, na seção 3.4.2, descrevemos como um método modificado pode ser obtido. Tal método tem as mesmas vantagens do método apresentado para o 2 DMDGP, usando as bilaterações sucessivas.

No último capítulo, apresentamos um exemplo de aplicação do **BP** em um problema de robótica, após incluir tal classe de problemas na classe DDGP, cujas instâncias também podem ser resolvidas pelo **BP**.

5.1.1 Artigos em preparação

No momento, temos três trabalhos em andamento:

1. No trabalho intitulado “Exploring the duality in Distance Geometry”, apresentamos os resultados desta tese, incluindo testes computacionais. Este trabalho tem como autores G. Abud e C. Lavor.
2. No trabalho intitulado “On the number of solutions of DDGP_K instances”, generalizamos o resultado sobre o número de soluções para instâncias do ^KDMDGP para instâncias do DDGP_K e analisamos a existência de simetrias nas soluções do problema. Este trabalho tem como autores J. Alencar, G. Abud, C. Lavor e L. Liberti.
3. No trabalho intitulado “The **BP**-algorithm to Solve the Inverse/Direct Kinematics of Trilaterable Parallel and Serial Manipulators”, estabelecemos uma correspondência entre as matrizes trilateráveis que modelam uma classe importante de problemas de robótica e instâncias do DDGP₃. Mostramos que uma versão modificada do **BP** pode ser aplicada de maneira mais eficiente que o método proposto na literatura. Este trabalho tem como autores G. Abud, C. Lavor, N. Rojas e F. Thomas.

5.1.2 Trabalhos futuros

Num futuro próximo, desejamos ainda:

1. Associar o BP modificado, descrito neste trabalho, ao método de múltiplas realizações [19].
2. Verificar a possibilidade de aplicar a idéia de “antecipação de podas”, apresentada neste trabalho, em instâncias que consideram distâncias intervalares.
3. Estudar problemas de Geometria de Distâncias utilizando outras métricas.

Referências

- [1] G. Abud, J. Alencar e C. Lavor. “Bilateração e Geometria de Distâncias”. Em: *Anais do CNMAC 2014*. 2014.
- [2] J. Benedetti e J.-J. Risler. *Real Algebraic and Semi-algebraic Sets*. Hermann–Paris, 1990.
- [3] L. Blumenthal. *Theory and Applications of Distance Geometry*. Oxford University Press–Oxford, 1953.
- [4] A. Cassioli, O. Gunluk, C. Lavor e L. Liberti. “Discretization Vertex Orders in Distance Geometry”. Em: *IBM Research Report RC25434* (2013).
- [5] I. Coope. “Reliable computation of the points of intersection of n spheres in \mathbb{R}^n ”. Em: *Australian and New Zealand Industrial and Applied Mathematics Journal* 42 (2000), pp. C461–C477.
- [6] G. Crippen e T. Havel. *Distance Geometry and Molecular Conformation*. Wiley–New York, 1988.
- [7] Q. Dong e Z. Wu. “A linear-time algorithm for solving the molecular distance geometry problem with exact inter-atomic distances”. Em: *Journal of Global Optimization* 22 (2002), pp. 365–375.
- [8] M. Laurent. *Matrix Completion Problems*. In: C. Floudas, P. Pardalos (eds.) *Encyclopedia of Optimization*. Springer–New York, 2009.
- [9] C. Lavor e L. Liberti. *Um Convite à Geometria de Distâncias (Notas em Matemática Aplicada v. 71)*. SBMAC, 2014.
- [10] C. Lavor, L. Liberti e N. Maculan. “Molecular Distance Geometry Problem”. Em: *Encyclopedia of Optimization*. Springer, 2009, pp. 2304–2311.
- [11] C. Lavor, J. Lee, A. John, L. Liberti, A. Mucherino e M. Sviridenko. “Discretization orders for distance geometry problems”. Em: *Optimization Letters* 6 (2012), pp. 783–796.
- [12] C. Lavor, L. Liberti, N. Maculan e A. Mucherino. “The discretizable molecular distance geometry problem”. Em: *Computational Optimization and Applications* 52 (2012), pp. 115–146.
- [13] L. Liberti e C. Lavor. “On a relationship between graph realizability and distance matrix completion”. Em: *Optimization Theory, Decision Making, and Operations Research Applications*. Springer, 2013, pp. 39–48.

- [14] L. Liberti, C. Lavor e A. Mucherino. “The Discretizable Molecular Distance Geometry Problem is Easier on Proteins”. Em: *Distance Geometry: Theory, Methods and Applications*. Springer, 2013.
- [15] L. Liberti, C. Lavor, J. Alencar e G. Abud. “Counting the number of solutions of K-DMDGP instances”. Em: *Lecture Notes in Computer Science* 8085 (2013), pp. 224–230.
- [16] L. Liberti, C. Lavor, N. Maculan e A. Mucherino. “Euclidean distance geometry and applications”. Em: *SIAM Review* 56 (2014), pp. 3–69.
- [17] K. Menger. “Untersuchungen über allgemeine Metrik”. Em: *Mathematische Annalen* 100 (1928), pp. 75–163.
- [18] A. Mucherino, C. Lavor e L. Liberti. “The discretizable distance geometry problem”. Em: *Optimization Letters* 6 (2012), pp. 1671–1686.
- [19] P. Nucci, L. Nogueira e C. Lavor. “Solving the discretizable molecular distance geometry problem by multiple realization trees”. Em: *Distance Geometry: Theory, Methods and Applications*. Springer, 2013.
- [20] J. Porta, L. Ros e F. Thomas. “Inverse kinematics by distance matrix completion”. Em: *Proceedings of the 12th International Workshop on Computational Kinematics*. 2005, pp. 1–9.
- [21] J. M. Porta, L. Ros e F. Thomas. “On the Trilaterable Six-Degree-of-Freedom Parallel and Serial Manipulators”. Em: *Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Robotics and Automation*. 2005.
- [22] V. V. Prasolov. *Problems and theorems in linear algebra*. Vol. 134. Translations of Mathematical Monographs. AMS, 1994.
- [23] N. Rojas. “Distance-based formulations for the position analysis of kinematics chains”. Tese de doutorado. Universitat Politècnica de Catalunya, 2012.
- [24] N. Rojas e F. Thomas. “The Forward Kinematics of 3-R \underline{P} R Planar Robots: A Review and a Distance-Based Formulation”. Em: *IEEE Transactions on Robotics* 27 (2011), pp. 143–150.
- [25] Y. Yemini. “The positioning problem — a draft of an intermediate summary”. Em: *Proceedings of the Conference on Distributed Sensor Networks* (1978), pp. 137–145.

Anexo I

Licença

Copyright (c) 2014 de Germano Abud de Rezende.

Exceto quando indicado o contrário, esta obra está licenciada sob a licença Creative Commons Atribuição-CompartilhaIgual 3.0 Não Adaptada. Para ver uma cópia desta licença, visite <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.



A marca e o logotipo da UNICAMP são propriedade da Universidade Estadual de Campinas. Maiores informações sobre encontram-se disponíveis em <http://www.unicamp.br/unicamp/a-unicamp/logotipo/normas%20oficiais-para-uso-do-logotipo>.

I.1 Sobre a licença dessa obra

A licença Creative Commons Atribuição-CompartilhaIgual 3.0 Não Adaptada utilizada nessa obra diz que:

1. Você tem a liberdade de:

- Compartilhar — copiar, distribuir e transmitir a obra;
- Remixar — criar obras derivadas;
- fazer uso comercial da obra.

2. Sob as seguintes condições:

- Atribuição — Você deve creditar a obra da forma especificada pelo autor ou licenciante (mas não de maneira que sugira que estes concedem qualquer aval a você ou ao seu uso da obra).
- Compartilhamento pela mesma licença — Se você alterar, transformar ou criar em cima desta obra, você poderá distribuir a obra resultante apenas sob a mesma licença, ou sob uma licença similar à presente.