

Geometria de Distâncias

Guilherme Philippi

30 de abril de 2020

Sumário

1	Geometria de Distâncias Euclidianas	1
1.1	Como tudo Começou	1
1.2	O Problema Fundamental	3
	Referências	4
A	Métricas	5

1 Geometria de Distâncias Euclidianas

Apresenta-se nesta seção uma introdução a *Geometria de Distâncias Euclidianas*. O nome “Geometria de Distâncias” diz respeito ao conceito desta geometria basear-se em distâncias ao invés de pontos. A palavra “Euclidiana” é importante para caracterizar as arestas — elementos fundamentais associados as distâncias — como segmentos, sem restringir seus ângulos de incidência [1].

1.1 Como tudo Começou

Por volta de 300 AC, Euclides de Alexandria organizou o conhecimento de sua época acerca da Geometria em uma obra composta por treze volumes, onde construiu, a partir de um pequeno conjunto de axiomas fortemente baseado nos conceitos de pontos e linhas, a chamada *Geometria Euclidiana* [2]. Em contraponto a visão original de Euclides, os primeiros conceitos geométricos usando *apenas distâncias* costumam estar associados aos trabalhos de Heron de Alexandria (10 a 80 DC) [1], com o desenvolvimento de um teorema que leva seu nome, como segue:

Teorema de Heron: Sejam s o *semiperímetro* de um triângulo (se p é o perímetro, $s = \frac{p}{2}$) e a , b e c os comprimentos dos três lados deste triângulo. Então, a área A do triângulo é

$$A = \sqrt{s(s-a)(s-b)(s-c)}. \quad (\text{Fórmula de Heron})$$

Pode-se dizer que esse foi o nascimento da Geometria de Distâncias (GD).

Algumas centenas de anos depois, em 1841, Arthur Cayley (1821 a 1895) generalizou a Fórmula de Heron através da construção de um determinante que calcula o conteúdo (volume n -dimensional) de um *simplex*¹ em qualquer dimensão [3]. Um século depois, em 1928, o matemático austríaco Karl Menger (1902 a 1985) re-organizou as ideias de Cayley e trabalhou em uma construção axiomática da geometria através de distâncias [4] — donde a alteração no nome do determinante de Cayley para como é conhecido hoje: “*Determinante de Cayley-Menger*”.

Definição: Sejam A_0, A_1, \dots, A_n $n+1$ pontos que definem os vértices de um n -simplex em um espaço euclidiano K -dimensional, onde $n \leq K$, e seja d_{ij} a distância entre os vértices A_i e A_j , onde $0 \leq i < j \leq n$. Então, o conteúdo v_n desse n -simplex é

$$v_n^2 = \frac{(-1)^{n+1}}{(n!)^2 2^n} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & \dots & d_{0n}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & \dots & d_{1n}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & \dots & d_{2n}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0n}^2 & d_{1n}^2 & d_{2n}^2 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (\text{Determinante de Cayley-Menger})$$

Mas foi só com Leonard Blumenthal (1901 a 1984) que, em 1953, o termo Geometria de Distâncias foi cunhado — com a publicação de seu livro “*Theory and Applications of Distance Geometry*” [5]. Blumenthal dedicou sua vida de trabalho para clarificar, organizar e traduzir as obras originais em alemão [1]. Ele acreditava que o problema mais importante nesta área era o “*Problema de Subconjunto*” (ou *Subset Problem*, originalmente), que consistia em encontrar condições necessárias e suficientes a fim de decidir quando uma matriz simétrica era, de fato, uma *matriz de distâncias*² [6]. Uma restrição desse problema à métrica euclidiana chama-se *Problema de Matrizes de Distâncias Euclidianas* (ou EDMP, do inglês *Euclidean Distance Matrix Problem*), como segue definida:

Problema de Matrizes de Distâncias Euclidianas: Determinar se, para uma dada matriz quadrada $D_{n \times n} = (d_{ij})$, existe um inteiro K e um conjunto $\{p_1, \dots, p_n\}$ de pontos em \mathbb{R}^K tal que $d_{ij} = \|p_i - p_j\|$ para todo $i, j \leq n$.

Condições necessárias e suficientes para que uma matriz seja, de fato, uma matriz de distância euclidiana são dados em [7]. Para isso, apresenta-se um teorema onde se utiliza o Determinante de Cayley-Menger na criação de duas condições afirmando que, afim de $D_{n \times n}$ ser uma matriz de distâncias euclidianas, deve haver um K -simplex S de referência com conteúdo $v_K \neq 0$ em \mathbb{R}^K e que todos os $(K+1)$ -simplex e $(K+2)$ -simplex contendo S como uma das faces devem estar contidos em \mathbb{R}^K [6].

Blumenthal percebeu a importância em se respeitar as restrições métricas estabelecidas pelas matrizes de distâncias.

¹Um simplex é uma generalização do conceito de triângulo a outras dimensões, i.e.: O 0 -simplex é um ponto, 1 -simplex é um segmento de reta, 2 -simplex é um triângulo e o 3 -simplex é um tetraedro.

²Seja o par (\mathcal{X}, d) um *espaço métrico* (vide Apêndice A), onde $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_n\}$. Uma *matriz de distância sobre \mathcal{X}* é uma matriz quadrada $D_{n \times n} = (d_{uv})$ onde, para todo $u, v \leq n$, temos $d_{uv} = d(x_u, x_v)$ [6].

Quando temos como dado um conjunto de distâncias entre pares de pontos, a geometria das distâncias pode dar uma dica para encontrar um conjunto de coordenadas correto para pontos no espaço Euclidiano tridimensional, satisfazendo as restrições de distâncias dadas.

(Blumenthal, 1953, [5])

Pode-se dizer que resolver o Problema de Matrizes de Distâncias Euclidianas está intimamente relacionado com descobrir as coordenadas dos pontos que definem suas distâncias. Perceba que este é um problema inverso, onde o “problema direto” correspondente é calcular distâncias associadas a pares de pontos dados. Note que este estudo tem enorme aplicabilidade [6].

Adiante, em 1979, Yemini (atualmente professor emérito de Ciência da Computação na Universidade de Columbia) foi o primeiro a flexibilizar a definição do EDMP ao considerar um conjunto de distâncias esparso [8, 6] — i.e., que não se tem todas as distâncias dadas a priori. Com isso, introduziu-se o que se chamou de *Problema Posição - Localização*, onde deseja-se calcular a localização de todos os objetos imersos em um espaço geográfico [8].

Assim, foi possível re-formular o problema fundamental de Geometria de Distâncias, o qual pode ser caracterizado de forma mais moderna pela utilização da Teoria de Grafos [6].

1.2 O Problema Fundamental

Uma *realização* é uma função que mapeia um conjunto de vértices de um grafo G para um espaço euclidiano de alguma dimensão dada [1].

Problema de Geometria de Distâncias (DGP): Dados um grafo simples, ponderado e conectado $G = (V, E, d)$ e um inteiro $K > 0$, encontre uma realização $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ tal que:

$$\forall \{u, v\} \in E, \quad \|x(u) - x(v)\| = d(u, v). \quad (1)$$

Desde que uma realização seja encontrada, também dá-se a ela o nome de *solução* do DGP.

Referências

- [1] Leo Liberti and Carlile Lavor. *Euclidean Distance Geometry*. Springer, 2017.
- [2] Irineu Bicudo et al. *Os elementos*. Unesp, 2009.
- [3] Arthur Cayley. A theorem in the geometry of position. *Cambridge Mathematical Journal*, 2:267–271, 1841.
- [4] Karl Menger. Untersuchungen über allgemeine metrik. *Mathematische Annalen*, 100(1):75–163, 1928.
- [5] Leonard M Blumenthal. Theory and applications of distance geometry. 1953.
- [6] Leo Liberti, Carlile Lavor, Nelson Maculan, and Antonio Mucherino. Euclidean distance geometry and applications. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 56(1):3–69, February 2014.
- [7] Manfred J Sippl and Harold A Scheraga. Cayley-menger coordinates. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 83(8):2283–2287, 1986.
- [8] Yechiam Yemini. Some theoretical aspects of position-location problems. In *20th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (sfcs 1979)*, pages 1–8. IEEE, 1979.
- [9] Yechiam Yemini. The positioning problem-a draft of an intermediate summary. Technical report, UNIVERSITY OF SOUTHERN CALIFORNIA MARINA DEL REY INFORMATION SCIENCES INST, 1978.

A Métricas

Como esse texto utiliza fortemente o conceito de distância, é necessário e bem vindo que se gaste algum espaço para uma construção formal dessa ideia. A noção de distância está relacionada com o conceito de *métrica*, como segue.

Seja \mathcal{X} um espaço vetorial K -dimensional sobre \mathbb{R} . *Métrica* é uma função de dois argumentos que mapeia pares ordenados de elementos em \mathcal{X} para um número real não negativo. Precisamente, para todo x, y e $z \in \mathcal{X}$, uma função $d(\cdot, \cdot) : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbf{R}$ é uma métrica se satisfaz os seguintes axiomas:

1. $d(x, y) = 0$ se, e somente se, $x = y$;
2. $d(x, y) = d(y, x)$;
3. $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$;
4. $d(x, y) \geq 0$

Nesse trabalho, quando não é especificado qual métrica se está usando, fica implícita a utilização da *Métrica Euclidiana*, definida em função da *Norma Euclidiana*:

$$\forall x, y \in \mathcal{X}, d(x, y) = \|x - y\|_2 = \sqrt{\langle x - y, x - y \rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^K (x_i - y_i)^2}. \quad (\text{Norma Euclidiana})$$

O par (\mathcal{X}, d) é chamado *espaço métrico*. A noção de métrica não depende de espaços vetoriais, donde pode ser facilmente generalizada fazendo \mathcal{X} um conjunto qualquer.