

# Geometria de Distâncias

Guilherme Philippi

30 de abril de 2020

## Sumário

<b>1</b>	<b>Geometria de Distâncias Euclidianas</b>	<b>1</b>
1.1	Como tudo Começou . . . . .	1
1.2	O Problema Fundamental . . . . .	3
1.3	Sobre os Diferentes Problemas em GD . . . . .	4
1.3.1	Conformações Moleculares . . . . .	4
1.3.2	Localização de Sensores . . . . .	5
1.3.3	Movimentos em Cinemática Inversa . . . . .	5
	<b>Referências</b>	<b>6</b>
<b>A</b>	<b>Métricas</b>	<b>8</b>
<b>B</b>	<b>Lei dos Cos e Ângulos Entre dois Vetores no <math>\mathbb{R}^3</math></b>	<b>8</b>

## 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*<sup>1</sup> 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*<sup>2</sup> [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.

<sup>1</sup>Um 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.

<sup>2</sup>Seja 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. Por simplicidade — claramente um abuso de notação —, pode-se escrever  $x_u$  e  $d_{uv}$  no lugar de  $x(u)$  e  $d(u, v)$ , respectivamente.

A principal diferença desta definição para o EDMP está acerca de que uma matriz de distância essencialmente representa um *grafo ponderado completo*. Em contraponto, o DGP não empoe qualquer estrutura em  $G^3$ , seguindo o conceito de matriz esparsa estabelecido por Yemini.

Por fim, na equação 1, utiliza-se a norma euclidiana  $\|\cdot\|$  como métrica (ver Apêndice A), donde pode-se reescrever esta equação como

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

---

<sup>3</sup>A menos, é claro, no que diz respeito a seus vértices estarem conectados. Porém, caso  $G$  não seja conectado, então ele consiste de um conjunto de diferentes subgrafos conectados, donde, a fim de solucionar o DGP, pode-se realizar cada subgrafo separadamente [1].

Como a definição de métrica garante a positividade das distâncias, pode-se esconder a raiz quadrada na equação acima, i.e.

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

## 1.3 Sobre os Diferentes Problemas em GD

Em 2014, Leo Liberti *et al.* publicaram um ótimo compendio sobre a *Geometria de Distâncias Euclidianas e suas Aplicações* [6] e, em particular, desenvolveram um estudo taxonômico muito interessante sobre os problemas clássicos da área. No que se segue, devido a grande quantidade de siglas e variações dentro de GD, apresenta-se parte desse estudo, visando organizar os conceitos.

As principais aplicações em GD são no *calculo de estruturas moleculares* [9], na *localização de sensores em rede sem fio* (*Wireless Sensor Network Localization*, ou WSNL) [10], em *cinemática inversa* (*Inverse Kinematic*, ou IK) [11] e em *escalamento multidimensional* (*Multidimensional Scaling*, ou MDS) [12].

### 1.3.1 Conformações Moleculares

Existe uma relação muito forte com a forma geométrica das moléculas e suas funções em organismos vivos [13]. Projetar drogas para curar uma doença específica se trata basicamente de conhecer o que uma certa proteína pode fazer em um organismo [1]. Proteínas se ligam em outras moléculas através do equilíbrio de forças agindo entre elas<sup>4</sup>, por tanto, suas ligações dependem do seu formato.

Proteínas são constituídas por um grande conjunto de átomos e, alguns pares destes, trocam ligações químicas — sabe-se quais são esses átomos através de experimentos de cristalografia [15]. Então, se os átomos de uma molécula forem rotulados da forma  $1, 3, 4, \dots, n$ , então é possível inferir:

- O conjunto de ligações  $\{u, v\}$ , onde  $u, v$  são átomos em  $\{1, \dots, n\}$ ;
- A distância entre  $u$  e  $v$  (para cara par ligado);
- O ângulo interno  $\theta_v$  definido por duas ligações  $\{u, v\}$  e  $\{v, w\}$ , com um átomo  $v$  em comum. (veja o Apêndice B)

Além desses dados, também é possível obter informações a partir de experimentos mais sofisticados, como a *Ressonância Magnética Nuclear* (RMN). Neste experimento é escolhida uma faixa de radiofrequência para bombardear uma amostra que está imersa em um campo magnético bastante intenso. Dependendo da radiofrequência utilizada (costuma-se usar a do hidrogênio), alguns núcleos atômicos irão absorver energia e outros não. Caso atinja-se uma frequência exata de ressonância dentro destes núcleos atômicos, é possível medir essa ressonância como um sinal de radiofrequência enviado dos núcleos atômicos — para calcular distâncias entre átomos próximos, com distâncias menores que 5Å.

---

<sup>4</sup>Ou seja, o equilíbrio da energia potencial das moléculas, proporcional, principalmente, as variações nos comprimentos das ligações covalentes, as variações nos ângulos entre duas ligações covalentes consecutivas, as rotações sobre as ligações covalentes e as interações de van der Waals e interações eletrostáticas entre átomos [14].

De posse dessas informações, deseja-se realizar (localizar) todos os átomos da molécula. Esse problema, com todas as informações moleculares disponíveis, denomina-se *Estrutura Proteica a partir de Dados Brutos* (*Protein Structure from Raw Data*, ou PSRD)

Em particular, como as coordenadas atômicas pertencem ao  $\mathbb{R}^3$ , há uma particularização do DGP para o caso molecular, chamado *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares* (*Molecular DGP*, ou MDGP). Trata-se do DGP com  $K = 3$  fixo.

### 1.3.2 Localização de Sensores

O *Problema de Localização de Sensores em Rede sem Fio* (ou *WSNL Problem*) surge quando é necessário localizar um conjunto de objetos equipados com sensores eletrônicos capazes de medir distâncias entre si, geograficamente distribuídos, usando apenas medidas de distâncias entre pares destes objetos [10].

Por exemplo, *smartphones* com WIFI ativo podem criar uma rede conhecida por *Rede Ad-Hoc*, *i.e.*, eles conseguem criar uma rede para comunicar-se entre si, de forma *peer-to-peer*, sem a necessidade de uma torre central — cada aparelho funciona como uma pequena torre, de forma que a distância entre os aparelhos não pode ser excessiva. Dessa forma, os *smartphones* podem estimar a distância  $r$  de emparelhamento das suas conexões ao medir, por exemplo, qual a potência de transmissão do sinal, uma vez que sabe-se que a potência  $P$  de uma transmissão eletromagnética cai da forma

$$P = \frac{X}{r^n}, \quad (3)$$

onde  $X$  e  $n$  são constantes e dependem muito das condições do experimento, sendo obtidas experimentalmente [16].

Em essência, um problema do tipo WSNL segue a mesma definição do DGP, porém, com um subconjunto  $A \subset V$  de vértices (chamados *âncoras*), onde os elementos de  $A$  tem uma posição em  $\mathbb{R}^k$  dada a priori — isso é feito pois, normalmente, interessa saber a posição relativa de um objeto a outro, como é o caso do Sistema de Posicionamento Global, onde temos os satélites como âncoras e desejamos saber a posição dos aparelhos GPS em relação aos satélites.

Por motivos práticos — semelhantes ao caso molecular — as variações de interesse desse problema tem o  $K$  fixo em  $K = 2$  ou  $K = 3$ .

### 1.3.3 Movimentos em Cinemática Inversa

Muito utilizada em robótica e animação computadorizada, a cinemática inversa cerne sobre mecanismos e seus movimentos rígidos, onde restringe-se os movimentos de forma a preservar a geometria do sistema. Sem o auxílio computacional e matemático a manipulação de mecanismos com muitos graus de liberdade pode ser inviável. Imagine a manipulação manual de mil vértices organizados em sequência, como uma haste, para simular algum comportamento em uma animação. Com o auxílio da GD, um animador pode apenas configurar a posição final de um pequeno grupo de vértices (como os da extremidade da aresta, por exemplo) e um algoritmo de cinemática inversa é capaz de verificar se aquela posição é ou não viável e, se viável, qual a realização de todo o conjunto de vértices em razão da posição configurada [11].

## 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] Gordon M Crippen, Timothy F Havel, et al. *Distance geometry and molecular conformation*, volume 74. Research Studies Press Taunton, 1988.
- [10] Yechiam Yemini. The positioning problem-a draft of an intermediate summary. Technical report, UNIVERSITY OF SOUTHERN CALIFORNIA MARINA DEL REY INFORMATION SCIENCES INST, 1978.
- [11] Deepak Tolani, Ambarish Goswami, and Norman I Badler. Real-time inverse kinematics techniques for anthropomorphic limbs. *Graphical models*, 62(5):353–388, 2000.
- [12] Jan de Leeuw and Willem Heiser. 13 theory of multidimensional scaling. *Handbook of statistics*, 2:285–316, 1982.
- [13] David L Nelson and Michael M Cox. *Lehninger principles of biochemistry*. W.H.Freeman and Company, 2013.
- [14] CC Lavor. *Uma abordagem determinística para minimização global da energia potencial de moléculas*. PhD thesis, PhD thesis, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2001.
- [15] GN Ramachandran, AS Kolaskar, C Ramakrishnan, and V Sasisekharan. The mean geometry of the peptide unit from crystal structure data. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Protein Structure*, 359(2):298–302, 1974.
- [16] Andreas Savvides, Chih-Chieh Han, and Mani B Strivastava. Dynamic fine-grained localization in ad-hoc networks of sensors. In *Proceedings of the 7th annual international conference on Mobile computing and networking*, pages 166–179. ACM, 2001.

- [17] Alfredo Steinbruch and Paulo Winterle. *Geometria Analítica*. Makron Books, São Paulo, SP, 2a edition, 1987.

## 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  $d(\cdot, \cdot) : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  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.

## B Lei dos Cos e Ângulos Entre dois Vetores no $\mathbb{R}^3$

A lei dos cossenos é uma propriedade trigonométrica válida para qualquer triângulo, permitindo encontrar o valor de um dos seus lados conhecendo apenas os outros lados e um ângulo. Porém, aqui utilizaremos a ideia reversa, onde, nesse caso, saberemos os lados e queremos descobrir os ângulos.

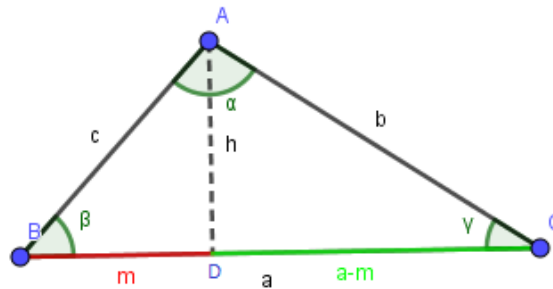


Figura 1: Triângulo para ilustrar a lei dos cossenos.



- **Demonstração Leis dos Cossenos:**

Dado um triângulo qualquer, traça-se uma altura relativa ao lado  $a$ . Aplicando o *Teorema de Pitágoras* no  $\triangle ABD$ :

$$c^2 = m^2 + h^2 \rightarrow h^2 = c^2 - m^2 \quad (4)$$

Aplicando novamente *Pitágoras*, porém, em  $\triangle ADC$ , obtemos:

$$b^2 = h^2 + (a - m)^2 \quad (5)$$

Substituindo na equação 5 o valor de  $h^2$  obtido em 4:

$$b^2 = c^2 - m^2 + a^2 - 2am + m^2$$

$$b^2 = c^2 + a^2 - 2am$$

Analisando a Figura 1, pode-se perceber que  $\frac{m}{c} = \cos \beta$ , então:

$$b^2 = c^2 + a^2 - 2ac \cos \beta$$

Analogamente, obtém-se:

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \gamma$$

$$a^2 = b^2 + c^2 - 2bc \cos \alpha$$

Note também que se o argumento dos cossenos for  $\frac{\pi}{2}$  recaímos no Teorema de Pitágoras. ■

- **Ângulos Entre 2 Vetores:**

Sejam dois vetores  $\vec{u}$  e  $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ , representados na Figura 2

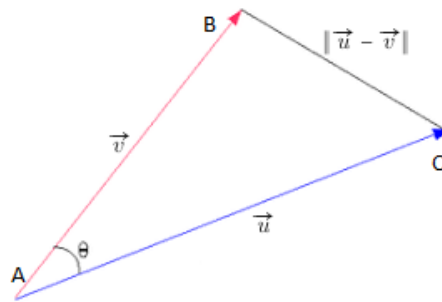


Figura 2: Diferença entre vetores  $u$  e  $v$

Para encontrarmos o ângulo  $\theta$  utilizaremos a lei dos cossenos aplicada a  $\triangle ABC$ :

$$\|\vec{u} - \vec{v}\|^2 = \|\vec{u}\|^2 + \|\vec{v}\|^2 - 2\|\vec{u}\|\|\vec{v}\|\cos \theta \quad (6)$$

Utilizando a definição do produto escalar [17]

$$\|\vec{u} - \vec{v}\|^2 = \|\vec{u}\|^2 + \|\vec{v}\|^2 - 2\vec{u} \cdot \vec{v} \quad (7)$$

Comparando a equação 6 com a 7, obtemos trivialmente

$$\|\vec{u}\|^2 + \|\vec{v}\|^2 - 2\|\vec{u}\|\|\vec{v}\|\cos\theta = \|\vec{u}\|^2 + \|\vec{v}\|^2 - 2\vec{u}\cdot\vec{v}$$

$$\vec{u}\cdot\vec{v} = \|\vec{u}\|\|\vec{v}\|\cos\theta$$

Logo,

$$\cos\theta = \frac{\vec{u}\cdot\vec{v}}{\|\vec{u}\|\|\vec{v}\|}$$

■