

UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE
CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica

MARCELO SANTOS CARIELO

INTERSEÇÃO DE ESFERAS E ÁLGEBRA GEOMÉTRICA

Campinas

2019

Marcelo Santos Carielo

INTERSEÇÃO DE ESFERAS E ÁLGEBRA GEOMÉTRICA

Tese apresentada ao Instituto de Matemática,
Estatística e Computação Científica da Uni-
versidade Estadual de Campinas como parte
dos requisitos exigidos para a obtenção do
título de Doutor em Matemática Aplicada.

Orientadora: Solange da Fonseca Rutz

Coorientadores: Carlile Campos Lavor e Leandro Augusto Frata Fernandes

Este exemplar corresponde à versão fi-
nal da Tese defendida pelo aluno Mar-
celo Santos Carielo e orientada pela
Profa. Dra. Solange da Fonseca Rutz.

Campinas

2019

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

C191i Carielo, Marcelo Santos, 1983-
Interseção de esferas e álgebra geométrica / Marcelo Santos Carielo. –
Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Solange da Fonseca Rutz.
Coorientadores: Carlile Campos Lavor e Leandro Augusto Frata Fernandes.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Interseção de esferas. 2. Álgebra geométrica. 3. Geometria de
distâncias. 4. Estrutura molecular. I. Rutz, Solange da Fonseca. II. Lavor,
Carlile Campos, 1968-. III. Fernandes, Leandro Augusto Frata. IV.
Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica. V. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Intersection of spheres and geometric algebra

Palavras-chave em inglês:

Sphere intersection

Geometric algebra

Distance geometry

Molecular structure

Área de concentração: Matemática Aplicada

Titulação: Doutor em Matemática Aplicada

Banca examinadora:

Carlile Campos Lavor [Coorientador]

João Frederico da Costa Azevedo Meyer

Rafael Santos de Oliveira Alves

Ricardo Antonio Mosna

Luiz Leduino de Salles Neto

Data de defesa: 18-06-2019

Programa de Pós-Graduação: Matemática Aplicada

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-0580-3956>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/3993815216278219>

**Tese de Doutorado defendida em 18 de junho de 2019 e aprovada
pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.**

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

Prof(a). Dr(a). RICARDO ANTONIO MOSNA

Prof(a). Dr(a). JOÃO FREDERICO DA COSTA AZEVEDO MEYER

Prof(a). Dr(a). LUIZ LEDUINO DE SALLES NETO

Prof(a). Dr(a). RAFAEL SANTOS DE OLIVEIRA ALVES

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

Ao meu pai (in memoriam).

Agradecimentos

A tod@s que acompanharam de maneira positiva a jornada deste trabalho, pelas inúmeras discussões que sempre me ajudaram de forma direta ou indireta.

Ao Prof. Carlile Lavor, Profa. Solange Rutz, Prof. Leandro Fernandes e Prof. Peter Antonelli, pelas orientações, coorientações e valiosas contribuições em todas etapas deste trabalho. Agradeço pela oportunidade de terem me aceito para trabalhar em conjunto, explorando diferentes áreas. Sempre serei grato pela amizade, cordialidade em todos os momentos e levarei esta fase de minha vida tendo vocês como exemplo motivador tanto do lado profissional como de ser humano.

À minha irmã, por toda dedicação, apoio e acompanhar essa travessia de forma tão enriquecedora.

À Passarica, pelo amor, companhia e força em toda trajetória vivenciada nos últimos anos.

Aos meus filhos, por existirem e serem uma fonte pura de inspiração.

Ao Pardeco, por sempre oferecer todo apoio e bondade.

Aos meus avós (*in memoriam*), por terem ajudado em vários momentos e servirem como exemplos de vida.

Aos Profs. das disciplinas de doutorado, por incentivarem de forma tão cativante a busca pelo conhecimento e suas aplicações ao mundo prático.

Aos funcionários do IMECC e da UNICAMP, pela excelência no trabalho de construir (e manter) um ambiente tão instigante no plano científico, social e humano.

Ao órgão de fomento brasileiro CNPq (140805/2017-6) pelo apoio financeiro que foi crucial durante a realização deste trabalho.

Ao meu pai (*in memoriam*), por tudo que plantou, colheu e compartilhou com sabedoria, bondade e bom humor durante sua passagem por essa vida. Lembrarei sempre com carinho e gratidão deste paizão.

Aos Profs. que participaram da banca, pelas valiosas correções, sugestões e comentários.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

O problema de interseção de esferas aparece em diferentes aplicações da geometria de distâncias. Esferas cujos raios são intervalares têm especial interesse quando os dados provêm de experimentos físicos, onde há incertezas nas medições. Utilizando a álgebra geométrica conforme, desenvolvemos uma maneira eficiente de realizar a interseção entre esferas e cascas esféricas. Comparamos os resultados obtidos com a abordagem clássica, baseada na álgebra linear, e fizemos experimentos computacionais para validar a abordagem proposta.

Palavras-chave: Interseção de esferas, álgebra geométrica, geometria de distâncias, estruturas moleculares.

Abstract

The problem of intersecting spheres appears in different applications of distance geometry. Spheres whose rays are intervals are of special interest when the data comes from physical experiments, where there are uncertainties in the measurements. Using the conformal geometric algebra, we have developed an efficient way of performing the intersection between shells and spherical shells. We compared the results obtained with the classical approach, based on linear algebra, and performed computational experiments to validate the proposed approach.

Keywords: Sphere intersection, geometric algebra, distance geometry, molecular structure.

Lista de ilustrações

1	Exemplo de proteína no PDB: ID 2IQH, Influenza A [1].	17
2	Algumas informações sobre uma molécula de proteína [2].	18
3	Possibilidades para os centros das esferas.	20
4	Ilustração de uma das etapas do algoritmo BP [3].	24
5	Ilustração de uma das etapas do algoritmo <i>i</i> BP [4].	24
6	Exemplo do produto exterior gerando subespaços orientados [5].	28
7	Representação de objetos Euclidianos no espaço conforme.	35
8	Alguns versores.	37
9	Testes com o CLUCalc para um rotor.	40
10	Saída do CLUCalc para testes com o rotor.	41
11	Testes com o CLUCalc	41
12	Configurações para a interseção dos <i>blades</i> a e B	48
13	Interseção entre esferas no \mathbb{R}^3	65
14	Testes com o CLUCalc para uma casca esférica.	67
15	Interseção do círculo com uma casca esférica no \mathbb{R}^3	69
16	Implementação utilizada para gerar esferas.	71
17	Gráficos dos resultados obtidos com a abordagem clássica.	71
18	Implementação do caso 3 da abordagem clássica.	72
19	Implementação da abordagem via AGC para o problema com esferas.	73
20	Gráficos dos resultados obtidos na abordagem via AGC.	73
21	Testes com a abordagem clássica para $m = 10$ esferas no \mathbb{R}^{10}	74
22	Testes com a abordagem via AGC para $m = 10$ esferas no \mathbb{R}^{10}	74
23	Testes com o algoritmo BP e o BP via AGC, para $n = 10, \dots, 100$	75
24	Implementação do BP via AGC.	76
25	Implementação para gerar esferas e uma casca esférica.	77
26	Implementação da abordagem clássica com uma casca esférica (parte 1).	78
27	Implementação da abordagem clássica com uma casca esférica (parte 2).	79
28	Configurações para a interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.	79
29	Testes com a interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.	80
30	Obtendo a solução com auxílio do CLUCalc	81
31	Interseção de 2 esferas e 1 casca esférica resultando em um par de arcos.	81
32	Saída dos testes com o CLUCalc	82
33	Ilustração da interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.	83
34	Testes em 5D para interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.	84
35	Diagrama com as cascas esféricas auxiliares.	86
36	Testes das expressões para o par de arcos.	89

37	Interseção com duas cascas esféricas via AGC.	90
38	Interseção com a primeira casca esférica via AGC.	90
39	Resultados obtidos com o CLUCalc.	91
40	Arcos s_1 e s_2 via cascas esféricas auxiliares.	91
41	Etapas para se obter a solução.	92
42	Esquema de árvore i BP envolvendo poda (1).	94
43	Esquema de árvore i BP envolvendo poda (2).	95
44	Esquema de árvore i BP envolvendo poda (3).	95
45	Reduzindo o intervalo associado a $d_{2,5}$	98
46	Etapas para se obter a solução.	99
47	Arcos factíveis para a solução \mathbf{x}_5	100
48	Reduzindo o intervalo associado a $d_{3,6}$	102
49	Reduzindo o intervalo associado a $d_{5,8}$	103
50	Soluções fixadas e as solução obtidas para os centros fixados.	104
51	Soluções obtidas.	104
52	Soluções conhecidas e as soluções obtidas para o centro \mathbf{x}_4 móvel. . . .	105
53	Soluções obtidas variando o centro \mathbf{x}_i , para $i = 4, 5, 6, 7$	106

Sumário

	Introdução	13
1	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
1.1	Algumas definições matemáticas	15
1.2	Aplicação no problema de geometria molecular	16
1.3	Aplicações envolvendo espaços nD	21
1.4	Distâncias com incertezas no cálculo de estruturas moleculares	23
2	ÁLGEBRA GEOMÉTRICA CONFORME (AGC)	26
2.1	Definições preliminares	26
2.2	O espaço conforme	30
2.3	Elementos do espaço conforme	30
2.4	Representação de esferas como vetores	34
2.5	Geometria no espaço conforme	36
2.6	Esferas como vetores tangentes	42
2.7	O par de pontos	42
2.8	Interseção e união com a AGC	45
3	O PROBLEMA NA ABORDAGEM CLÁSSICA	49
3.1	Primeiro método - centros L.I.	49
3.2	Segundo método - centros A.I.	50
3.3	Terceiro método - caso geral	52
3.4	Interseção de esferas e uma casca esférica	55
4	O PROBLEMA USANDO A AGC	60
4.1	Sobre o sinal do raio de uma $(n-k)$ -esfera	60
4.2	Esferas com centros L.I.	60
4.3	Esferas com centros A.I.	62
4.4	Esferas com centros quaisquer	63
4.5	Interseção de esferas e uma casca esférica via AGC	65
4.6	Cenários para a interseção com uma casca esférica	68
4.7	Testes computacionais	69
4.8	Testes com o algoritmo BP via AGC	75
4.9	Testes envolvendo uma casca esférica	76

5	INTERSEÇÃO ENTRE ESFERAS E CASCAS ESFÉRICAS VIA AGC	85
5.1	Interseção de esferas e duas cascas esféricas	85
5.2	Cascas esféricas auxiliares	86
5.3	Obtendo um par de arcos explicitamente	88
5.4	Testes computacionais	89
5.5	Utilizando a abordagem via AGC em aplicações	93
5.6	Testes computacionais em um problema de aplicação	97
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	108
6.1	Contribuições	108
6.2	Sobre algumas dificuldades encontradas	109
6.3	Próximos passos	109
	REFERÊNCIAS	111
	Anexos	114

Introdução

O problema de interseção de esferas aparece em diversas aplicações [6, 3, 7, 8, 9]. Alguns modelos matemáticos formulados em tais contextos consideram esferas tanto em espaços tridimensionais (3D) quanto em espaços de dimensão n (nD), sendo que os raios podem ser escalares fixos ou intervalos reais. A posição relativa entre os centros, a dimensão das esferas e do espaço subjacente onde se encontram podem variar de acordo com a formulação do problema. Comumente, o problema da interseção de esferas considerando raios fixos é abordado com ferramentas baseadas na álgebra linear e teoria de matrizes [10, 11, 12, 9]. Quando os raios das esferas são intervalares, surgem as cascas esféricas e o novo problema é a busca de uma maneira adequada para se realizar a interseção entre esferas e cascas esféricas. Destacamos que em tal problema há um interesse especial em métodos que possam ser implementados e validados computacionalmente. Extensões de abordagens convencionais, baseadas em álgebra linear, são levadas a limitações consideráveis quando há esferas intervalares, inviabilizando generalizações principalmente com respeito a aspectos computacionais. Por exemplo, desconhecemos na literatura uma maneira adequada para se realizar a interseção entre p esferas e q cascas esféricas em um espaço nD , onde p , q e n são números inteiros positivos quaisquer fixados. Problemas como esses são de grande interesse do ponto de vista de aplicações, pois considerar esferas com raios intervalares é uma maneira de se incorporar aos modelos dados de entrada com as incertezas presentes em medidas experimentais. Uma discussão sobre o assunto pode ser encontrada em [4, 7].

Ideia Central

Este trabalho investiga o problema de interseção entre esferas e cascas esféricas em espaços nD através da *álgebra geométrica conforme* (AGC) [13, 14, 5, 15], propondo uma abordagem que se estenda de forma natural ao se acrescentar várias cascas esféricas. Os Capítulos 1 e 2 apresentam as noções básicas para introduzir os problemas vistos nos demais capítulos. Na literatura, o estudo da interseção entre esferas via AGC é comumente apresentado para espaços 3D.

A abordagem usual via AGC para levar em conta as cascas esféricas faz uso dos rotores [16], enquanto que a abordagem proposta neste trabalho é baseada na parametrização pelo raio. Essa nova escolha para resolver o problema tem facilitado a busca de generalizações de conceitos já conhecidos em 3D. Os resultados obtidos com a abordagem proposta foram comparados com os conhecidos na literatura [10, 11, 17, 3, 4]. No Capítulo 3, é sumarizado alguns resultados da abordagem baseada em álgebra linear utilizados para as comparações. O Capítulo 4 mostra os resultados de experimentos onde

se compara ambas abordagens: a clássica e a que foi desenvolvida via AGC.

Problemas de aplicação foram explorados no contexto do cálculo de estruturas moleculares [17, 4, 3, 7, 9]. A fim de validar a abordagem proposta, realizamos inúmeros experimentos computacionais implementando os resultados teóricos no *Mathematica* [18] em conjunto com o pacote *clifford.m* [19], e também no *CLUCalc* [20]. A abordagem desenvolvida mostrou-se promissora para tratar as incertezas experimentais. Testes computacionais levando em conta as aplicações foram realizados com sucesso, validando diferentes aspectos da tese proposta. Nos Capítulos 5 e 6 há detalhes com respeito a tais questões e sobre as vantagens e potenciais aplicações deste trabalho.

Resultados

Com auxílio da AGC, propomos uma forma eficiente para obter a interseção entre esferas e cascas esféricas em espaços nD . A tese deste trabalho é a seguinte:

As soluções obtidas para o problema de interseção de esferas em espaços nD pela abordagem proposta via AGC são equivalentes às abordagens convencionais, baseadas em álgebra linear. Além disso, possuem vantagens quando o problema leva em conta esferas com raios intervalares. A principal vantagem é permitir o acréscimo de várias cascas esféricas ao problema inicial de forma natural, possibilitando a implementação e validação dos resultados através de experimentos computacionais.

Muitos problemas que apareceram ao longo deste trabalho são de interesse tanto do ponto vista teórico como computacional. Assim, questões relacionadas aos avanços em termos da capacidade em simulações computacionais estão intimamente ligadas a continuidade das pesquisas de caráter teórico. Um exemplo é saber até que ponto um resultado teórico utilizando a AGC, ou a abordagem clássica, poderia ser implementado de forma que, de posse de dados experimentais de entrada, possamos ter tanto um modelo como uma implementação que resolva o problema real da forma mais eficiente possível. Ao longo de todo trabalho, este aspecto da pesquisa se mostra determinante e tem um papel fundamental na construção dos resultados propostos. Enquanto a abordagem clássica se mostra inviável para lidar com problemas envolvendo mais do que uma casca esférica, tanto do ponto de vista teórico quanto computacional, a abordagem desenvolvida neste trabalho levou a resultados positivos em tais situações. Uma maneira de dar continuidade às pesquisas aqui iniciadas é estender os resultados computacionais a uma quantidade arbitrária de cascas esféricas em espaços nD e explorar em detalhes as aplicações envolvendo o cálculo de estruturas 3D moleculares.

1 Fundamentação teórica

Neste capítulo veremos as definições básicas associadas ao problema de interseção de esferas e algumas de suas aplicações. Apresentaremos de forma resumida certas noções subjacentes ao problema do cálculo de estruturas 3D moleculares. Veremos também aplicações envolvendo espaços nD .

1.1 Algumas definições matemáticas

A fim de fixar notação, vejamos algumas definições e nomenclaturas que usaremos ao longo deste trabalho.

Dizemos que um subconjunto H do \mathbb{R}^n é um *subespaço afim* (ou *variedade afim*) se $H \neq \emptyset$ e se $\lambda \mathbf{x} + (1 - \lambda)\mathbf{y} \in H$ para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in H$ e $\lambda \in \mathbb{R}$. Dado um espaço afim H dizemos que $T_{-\mathbf{a}}(H) = H_0$ é o *subespaço vetorial associado a H* , sendo que $\mathbf{a} \in H$ e $T_{-\mathbf{a}} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é definida por $T_{-\mathbf{a}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{a}$. A *dimensão do subespaço afim H* é definida como sendo a dimensão do espaço vetorial H_0 . Ressaltamos que todo subespaço vetorial é um subespaço afim. Por outro lado, um subespaço afim nem sempre é um subespaço vetorial.

Dizemos que o conjunto $S(\mathbf{a}, r) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \|\mathbf{x} - \mathbf{a}\| = r\}$ é uma *esfera* de centro $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ e raio $r \in \mathbb{R}_+^1$. Às vezes, denominamos $S(\mathbf{a}, r)$ de *n -esfera* do \mathbb{R}^n .

Definimos uma *k -esfera* no \mathbb{R}^n de centro $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ e raio $r \in \mathbb{R}_+$ como sendo o conjunto $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \sum_{j=1}^k (\mathbf{x}_{i_j} - \mathbf{c}_{i_j})^2 = r^2, k \leq n\}$. Uma *k -esfera* no \mathbb{R}^n , para $k \leq n$, é uma esfera contida em um subespaço afim de dimensão k .

De forma geral, para obter a interseção de m esferas no \mathbb{R}^n temos que resolver o seguinte sistema,

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| = d_i, \quad (1.1)$$

onde $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ e $d_i \in \mathbb{R}_+$, denotam o centro e raio da esfera i , para $i = 1, \dots, m$. De fato, para cada i fixado, a solução da equação (1.1) é uma esfera no \mathbb{R}^n . Ao longo deste trabalho, denotamos a norma-2 por $\|\cdot\|$.

Em [10] é apresentado um método para se obter a interseção de n esferas no \mathbb{R}^n supondo certas restrições com respeito aos centros das esferas. Já em [11], temos uma generalização de tal abordagem. Em ambos os casos se faz uso da álgebra linear, levando em conta estratégias eficazes para se resolver sistemas lineares associados a (1.1), através da fatoração LU e da decomposição QR [21, 22].

¹ Definimos \mathbb{R}_+ como $\mathbb{R}_+ = \{\alpha \in \mathbb{R} : \alpha \geq 0\}$.

Dado um espaço vetorial W , dizemos que o conjunto de vetores $V = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$, com cada $\mathbf{v}_i \in W$, para $i = 1, \dots, p$, é *linearmente independente* (L.I.) quando temos $\sum_{i=1}^p \alpha_i \mathbf{v}_i = 0$ se, e somente se, $\alpha_1 = \dots = \alpha_p = 0$. Quando V não é L.I., dizemos que V é *linearmente dependente* (L.D.).

Dado um espaço vetorial W , dizemos que o conjunto de vetores $V = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$, com cada $\mathbf{v}_i \in W$, para $i = 1, \dots, p$, é *afim independente* (A.I.) quando $\sum_{i=1}^p \alpha_i \mathbf{v}_i = 0$ e $\sum_{i=1}^p \alpha_i = 0$ se, e somente se, $\alpha_1 = \dots = \alpha_p = 0$.

Dado um conjunto de pontos $\mathcal{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_p\} \subseteq \mathbb{R}^n$, definimos o *invólucro afim* de \mathcal{A} por

$$\text{aff}(\mathcal{A}) = \left\{ \sum_{i=1}^k \alpha_i \mathbf{a}_i : \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, \mathbf{a}_i \in \mathcal{A}, \alpha_i \in \mathbb{R}, k \leq p \right\}.$$

Ou seja, $\text{aff}(\mathcal{A})$ é a interseção de todos os subespaços afins que contêm \mathcal{A} , *i.e.*, o menor subespaço afim que contém \mathcal{A} .

Outro resultado usado com frequência ao longo deste trabalho é que um conjunto $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{p-1}, \mathbf{x}_p\} \subseteq \mathbb{R}^n$ é A.I. se, e somente se, $\{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_p, \dots, \mathbf{x}_{p-1} - \mathbf{x}_p\}$ é L.I.

1.2 Aplicação no problema de geometria molecular

O PDB (do inglês, *Protein Data Bank*) [1] é uma base de dados de estruturas moleculares 3D de proteínas. Esta base possui inúmeras informações catalogadas sobre tais moléculas, sendo uma fonte bastante utilizada por pesquisadores da área.

Comumente, para se obter informações microscópicas sobre moléculas são realizados experimentos através de uma das duas técnicas: raios X; ou ressonância magnética nuclear (RMN). Uma característica da primeira técnica é que esta fornece a estrutura 3D de alguns tipos de moléculas, mas necessita a cristalografia. O processo de cristalografia é bastante complexo e requer a desidratação da molécula. Embora experimentos de RMN não necessitem da cristalografia, estes fornecem distâncias apenas entre pares de átomos separados por não mais do que 6 Å [7, 23]. Dependendo das características químicas da molécula de interesse, uma das técnicas pode ser mais vantajosa do que a outra. Ressaltamos que há moléculas em que informações determinantes podem ser perdidas caso esta sofra desidratação. No PDB temos dados de problemas reais vindos tanto de experimentos de RMN quanto de raio X para moléculas de proteínas. Neste trabalho levaremos em conta os dados provenientes dos experimentos de RMN.

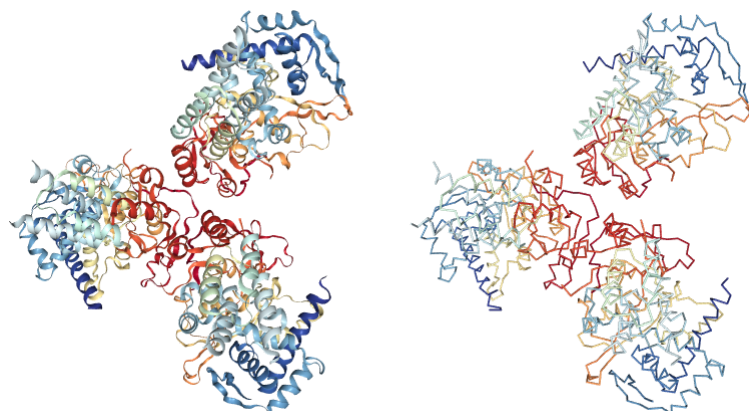


Figura 1 – Exemplo de proteína no PDB: ID 2IQH, Influenza A [1].

Uma característica das moléculas de proteína é que sua função está intimamente relacionada com sua conformação geométrica. Tendo algumas distâncias entre pares de átomos de uma molécula, obtidas por experimentos de RMN, o problema consiste em determinar a estrutura 3D correspondente às distâncias disponíveis. Esse problema tem sido estudado com bastante eficiência através da abordagem apresentada em [23, 9]. Dados experimentais de RMN são esparsos e com ruídos [7]. Ou seja, as distâncias fornecidas pelas técnicas dos experimentos de RMN como dados de entrada são poucas se comparado ao número total de átomos a serem determinados. Além disso, as poucas distâncias disponíveis como entrada possuem incertezas. Isso traz dificuldades consideráveis ao problema inicial [4]. Notemos que o problema de determinar a estrutura 3D de uma proteína envolve diferentes áreas do conhecimento, entre elas: química, matemática, computação e biologia.

Há inúmeras possibilidades para formulação do problema matemático de se determinar a estrutura de moléculas a partir da situação real, assim como em outros processos de modelagem. Ao longo deste trabalho, vamos explorar os problemas associados ao conhecido *Problema de Geometria de Distâncias Moleculares* (PGDM). Estaremos nos referindo a tal problema na versão em inglês, *i.e.*, como *Molecular Distance Geometry Problem*, ou simplesmente MDGP [3]. Este problema é uma das mais relevantes aplicações da geometria de distâncias [6, 9].

Alguns aspectos qualitativos e quantitativos das proteínas. Derivada do grego *proteis* (primeiro, primitivo), a *proteína* é conhecida como a "molécula da vida". Isto condiz com o fato de praticamente todos organismos vivos possuírem tais moléculas. As proteínas são macromoléculas formadas por cadeias de aminoácidos, sendo estes conectados a seus vizinhos pelas *ligações peptídicas*. Um total de vinte aminoácidos se combinam para formar as proteínas conhecidas. Cada aminoácido tem uma estrutura fundamental, diferenciando-se um dos outros apenas por suas cadeias laterais. As informações aqui apresentadas para proteínas podem ser encontradas maior detalhes em [2, 1, 23, 7].

A fim de ilustrar alguns aspectos quantitativos a serem levados em conta na

tentativa de se construir um modelo matemático para encontrar a estrutura molecular a partir de alguns dados conhecidos *a priori*, destacamos que uma proteína pode conter milhares de moléculas de aminoácidos. Na prática uma molécula de proteína costuma ter mais do que 10 mil átomos.

Um aspecto importante para distinguir as proteínas uma das outras é sua conformação geométrica. Dessa maneira, mesmo que duas proteínas possuam os mesmos átomos e mesma quantidade de ligações peptídicas, podem ter funções diferentes, pois sua funcionalidade está intimamente associada a sua geometria, *i.e.*, a sua estrutura geométrica espacial 3D. Diante das inúmeras possibilidades envolvidas na busca de determinar a conformação de uma proteína, percebemos que esse problema é um tanto amplo e complexo. É comum se referir a esse problema como *cálculo de estruturas moleculares*.

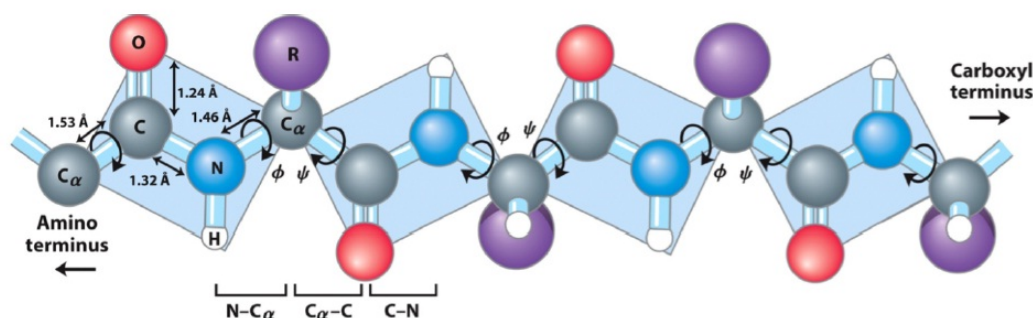


Figura 2 – Algumas informações sobre uma molécula de proteína [2].

O *backbone* da proteína. Na Figura 1 vemos partes da estrutura de uma molécula de proteína. Notemos que certas partes são enoveladas e outras são mais esticadas. A fim de tornar mais rigorosa a análise de problemas de aplicação é comum considerarmos certas hipóteses. Uma hipótese assumida ao longo deste trabalho é que estamos lidando somente com os átomos da *cadeia principal*, o conhecido *backbone*. O *backbone* de uma proteína é formado pela sequência dos átomos $N-C_{\alpha}-C$ que se repetem ao longo de toda molécula. A imagem à direita na Figura 1 ilustra o *backbone* de uma proteína catalogada no PDB [1] e identificada por 2IQH. Já a Figura 2 ilustra parte do *backbone* com alguns átomos das cadeias laterais. Uma vez determinado o *backbone*, é possível obter outros átomos na molécula de proteína através de suas propriedades químicas. Ainda nesse sentido, analisando as características de uma molécula, é possível saber de antemão as distâncias entre alguns dos seus pares de átomos, além de certos ângulos com interesse especial. Mais detalhes podem ser encontrados em [23, 7].

Sobre experimentos computacionais. Quando construímos instâncias para testar um modelo proposto, muitas vezes estamos lidando com o *backbone*. Embora isso pareça uma limitação, as instâncias geradas englobam várias características das moléculas de proteínas.

Por exemplo, há partes da molécula que são mais rígidas se comparado a outras partes. Em geral, tal parte está associada a ligação peptídica, que leva ao conhecido *plano peptídico*. As Figuras 1 e 2 ilustram essas características.

Na prática as moléculas de proteína estão inseridas em um meio físico, onde inúmeros fatores influenciam a posição de seus átomos. Sendo assim, questões envolvendo a temperatura e energia naturalmente contribuem na conformação molecular. Ao longo deste trabalho, não investigaremos esses fatores. Maiores detalhes sobre tais questões podem ser encontrados em [7]. O problema que temos em vista neste trabalho é o MDGP e suas variações levando em conta o efeito dos erros de medidas experimentais.

Modelando o problema de geometria molecular. A fim de apresentarmos os principais problemas que vamos abordar via AGC, nos concentremos no problema do cálculo da estrutura 3D de uma molécula, a partir de algumas distâncias conhecidas entre alguns de seus pares de átomos [23, 9, 7]. Em [9] há informações sobre o problema de interseção de esferas em que se investiga aspectos como a área e o volume resultante das interseções no contexto de modelagem molecular. Aqui focaremos nos aspectos descritos a seguir.

Em uma primeira abordagem assumimos que todas as distâncias disponíveis são precisas, *i.e.*, não possuem erro experimental associado. Sob tal condição, é possível resolver o problema pelo método exato conhecido como algoritmo *Branch and Prune* (BP) [17]. O passo central do algoritmo BP é realizar a interseção de três esferas. O processo de *poda* ocorre quando há distâncias extras, além das três usuais, no nível analisado. Matematicamente, a interseção de três esferas $S_i(\mathbf{a}_i, r_i)$ no \mathbb{R}^3 de centros \mathbf{a}_i e raios r_i , para $i = 1, 2, 3$, é o conjunto dos pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ satisfazendo o seguinte sistema de equações não-lineares:

$$\begin{cases} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_1\| = r_1, \\ \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_2\| = r_2, \\ \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_3\| = r_3. \end{cases}$$

Sob condições adequadas [3], o resultado da interseção de três esferas é dois pontos. Este resultado ocorre na maioria das aplicações e está associado à posição dos centros e aos raios das esferas. Neste trabalho assumiremos que os centros das esferas podem ser L.I., A.I. ou quaisquer.

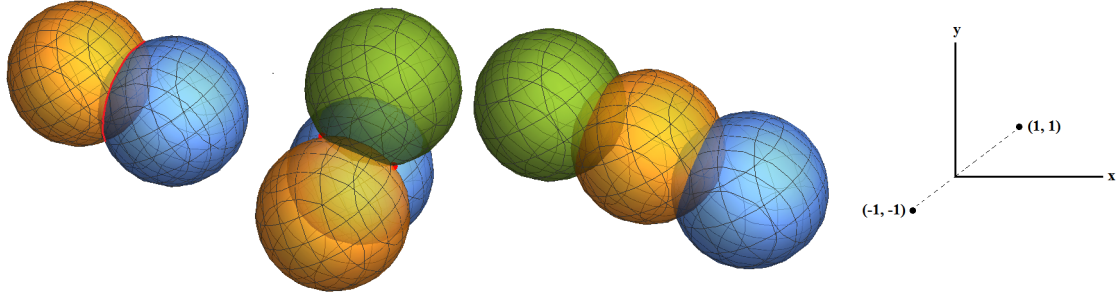


Figura 3 – Possibilidades para os centros das esferas.

Na figura acima vemos que a posição dos centros das esferas é de grande importância para investigarmos as possíveis soluções do problema de interseção de esferas. A direita, no plano cartesiano, temos um contra-exemplo de um conjunto que é A.I., mas não é L.I.

Os dados de entrada do nosso problema de geometria molecular é um conjunto de átomos V e um conjunto de distâncias $\{d_{i,j}\}$ entre alguns dos átomos. Como as informações rotulam a quais átomos correspondem às distâncias, temos um conjunto de arestas E que informam os pares de átomos correspondentes às distâncias $d_{i,j}$. Matematicamente, a função distância é definida por $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, sendo $d(v_i, v_j) = d_{i,j}$. Dessa maneira, os dados de entrada podem ser representados por um grafo $G = (V, E, d)$. Usaremos a notação $\mathbf{x}(v_i) = \mathbf{x}_i$ para denotar a realização de um vértice no \mathbb{R}^3 e $d_{i,j}$ para $d(v_i, v_j)$, *i.e.*, para distância entre o par de vértices (átomos) v_i e v_j . Essa *realização* de um vértice corresponde a suas coordenadas retangulares no \mathbb{R}^3 . Por exemplo, afirmar que foi obtida uma *realização* \mathbf{x} para o vértice v_i , equivale a ter definido a função $\mathbf{x} : v_i \mapsto \mathbf{x}(v_i) = (x_i^1, x_i^2, x_i^3) = \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^3$. Uma realização como esta também é chamada de *realização válida*, ou *realização parcial*.

Definição (MDGP). *Dado um grafo simples $G = (V, E, d)$, conectado e ponderado nas arestas por $d : E \rightarrow (0, \infty)$, encontre uma função $\mathbf{x} : V \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que, para todo $\{v_i, v_j\} \in E$,*

$$\|\mathbf{x}(v_i) - \mathbf{x}(v_j)\| = d_{i,j}.$$

Em geral, abordagens tradicionais de otimização são inviáveis para resolver o MDGP, pois estamos diante de um problema inverso de otimização global não-linear, onde o número de mínimos locais aumenta exponencialmente em função do número de vértices $|V| = n$. Destacamos que este é um problema NP-difícil [24]. Dessa maneira, é esperado nos depararmos com diversas dificuldades. Uma delas é que procuramos por mínimos globais e temos uma grande quantidade de mínimos locais. Isso dificulta consideravelmente utilizarmos métodos tradicionais de otimização [25].

Consideremos a tentativa de resolver o problema usando o *método de Newton* [25]. Como este método fornece uma solução local, poderíamos tentar usá-lo iterativamente para obter as várias soluções locais, que são mínimos locais. Em seguida teríamos que procurar por mínimos globais. Para uma molécula com $|V| = 10$ átomos, nosso espaço

de busca é o \mathbb{R}^{30} , o que dificulta a procura por todos os mínimos locais. Sob tal abordagem, para encontrar uma solução utilizando os computadores disponíveis na atualidade seríamos levados a um tempo de processamento muito grande, mais do que algumas décadas. Como a solução do MDGP é um mínimo global, pode ser inviável partir por essa abordagem. Na prática, as moléculas de proteína chegam a ter mais do que 10 mil átomos. Portanto, há a necessidade de novas ferramentas para tratar esse problema.

Abordagem combinatória. De posse de uma ordem sobre os vértices do MDGP, é possível discretizar o problema obtendo o DMDGP, *Discretizable Molecular Distance Geometry Problem* [3]. Para este novo problema podemos aplicar o algoritmo BP [17] para encontrar todas as soluções do problema.

Definição (DMDGP). *Considere o grafo $G = (V, E, d)$ de um MDGP e uma ordem em V , denotada por v_1, \dots, v_n , tal que*

(i) *existe uma realização válida para v_1, v_2, v_3 ;*

(ii) *para todo v_i , onde $i = 4, \dots, n$, existem três vértices imediatamente anteriores $v_{i-3}, v_{i-2}, v_{i-1}$, com $\{\{v_{i-3}, v_i\}, \{v_{i-2}, v_i\}, \{v_{i-1}, v_i\}\} \subseteq E$, satisfazendo*

$$d(v_{i-3}, v_{i-2}) + d(v_{i-2}, v_{i-1}) > d(v_{i-3}, v_{i-1}).$$

Encontre uma função $\mathbf{x}: V \rightarrow \mathbb{R}^3$, tal que

$$\|\mathbf{x}(v_i) - \mathbf{x}(v_j)\| = d_{i,j},$$

para todo $\{v_i, v_j\} \in E$.

Tendo obtido uma ordem sob os vértices no MDGP, é possível explorar de forma eficiente o grafo associado, atribuindo uma estrutura adequada ao espaço de busca. No entanto, encontrar uma ordem para o MDGP não é trivial. Pelo contrário, também é um problema NP-difícil. Sendo assim, embora de posse de uma ordem sobre os átomos a resolução do problema seja simplificada, há um alto custo computacional para se encontrar essa ordem [23, 9, 3].

1.3 Aplicações envolvendo espaços nD

O Problema da Matriz de Distâncias Euclidianas (PMDE). De posse de uma matriz simétrica D de ordem $n \times n$ cuja diagonal principal seja nula, o PMDE consiste em saber se existem pontos $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \subseteq \mathbb{R}^K$, para algum número inteiro $K > 0$, satisfazendo

$$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| = D(i, j), \quad (1.2)$$

para todo $i, j = 1, \dots, n$, onde $D(i, j)$ denota a entrada (i, j) da matriz D . Neste problema, além de não conhecermos a posição dos vértices no espaço Euclidiano \mathbb{R}^K , não conhecemos a dimensão K do espaço onde procuramos a realização do grafo associado aos dados de entrada. No caso de termos como entrada todos elementos da matriz D , conforme (1.2), podemos resolver o problema através da estratégia mostrada em [26], onde se usa a abordagem clássica, *i.e.*, baseada em álgebra linear, para realizar a interseção de n esferas no \mathbb{R}^n . Neste caso, a matriz D é denominada *matriz de distâncias Euclidianas*. Já para o caso de dispormos de apenas algumas das entradas de D , uma tentativa é seguir [11] para obter a interseção de m esferas no \mathbb{R}^n . Nesse caso mais geral, podem surgir erros numéricos que trazem limitações na busca de uma solução. Este novo problema é conhecido como *problema de completamento da matriz de distâncias Euclidianas*. Detalhes sobre tais problemas podem ser encontrados em [26, 11, 12].

Problemas de Escalamento Multidimensional (MDS). Técnicas de MDS (do inglês, *multidimensional scaling*) têm sido usadas para se visualizar conjunto de dados. Comumente, os dados de entrada para problemas envolvendo MDS são medidas de proximidade entre pares de objetos, mais especificamente, medidas de *dissimilaridade* entre pares de objetos. Os dados de entrada em tal contexto muitas vezes estão em espaços de dimensão muito alta, o que impossibilita extrair-se informações tratando os dados no espaço de origem. Nesse sentido, o problema consiste em representar os pontos correspondentes aos dados de entrada em um espaço de baixa dimensão de forma que as informações iniciais continuem presentes na nova representação. Obter uma visualização dos dados em baixa dimensão viabiliza a possibilidade de analisarmos informações presentes no conjunto de dados de entrada de maneira adequada.

Como exemplo, digamos que os objetos i e j possuam n *atributos* que desejamos analisar. Tais atributos podem ser o preço, a durabilidade, a funcionalidade, entre outras características. Os dados de entrada do problema podem ser representados como uma matriz $D = [\delta_{ij}]$ de ordem $n \times n$, onde δ_{ij} denota a medida de dissimilaridade entre i e j , sendo interpretada como a distância entre i e j . O valor de δ_{ij} é uma quantidade empírica associada aos objetos i e j . O problema consiste em encontrar o conjunto $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^m \subseteq \mathbb{R}^n$ solução de

$$\min \left\{ \left(\delta_{ij} - \sum_{i,j} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \right)^2 \right\}. \quad (1.3)$$

Notemos que na expressão acima as quantidades $\mathbf{x}_i = (x_{i_1}, \dots, x_{i_n})$ e $\mathbf{x}_j = (x_{j_1}, \dots, x_{j_n})$ são estimadas a partir dos dados de entrada do problema, *i.e.*, da dissimilaridade dada por δ_{ij} . Os valores x_{i_k} e x_{j_k} , isto é, a coordenada k de \mathbf{x}_i e \mathbf{x}_j , respectivamente, denotam a quantidade do atributo k que os objetos i e j possuem. Tendo uma solução para este problema, podemos visualizar os atributos relacionados entre cada par de objetos disponíveis, além de investigar diferentes aspectos do conjunto de dados em questão. Encontrar $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^m \subseteq \mathbb{R}^n$, equivale a obter uma representação em baixa dimensão para o

problema. Esta é obtida por uma realização do grafo associado ao problema de distância determinado pela matriz D , sendo que não conhecemos a dimensão do espaço onde procuramos tal realização, mas sabemos as medidas de dissimilaridades δ_{ij} entre os vértices. Dependendo das particularidades dos dados de entrada correspondentes às dissimilaridades, devemos reformular a função objetivo em (1.3). Em [8] é possível encontrar mais detalhes sobre o assunto.

1.4 Distâncias com incertezas no cálculo de estruturas moleculares

Acrescentando uma casca esférica ao problema inicial. Encontrar a solução da interseção entre m esferas e uma casca esférica no \mathbb{R}^n equivale a resolver:

$$\begin{cases} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| = d_i, & i = 1, \dots, m, \\ \underline{d}_{m+1} \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_{m+1}\| \leq \bar{d}_{m+1}, \end{cases} \quad (1.4)$$

onde a segunda equação representa a casca esférica que acrescentamos ao problema inicial (1.1). Uma maneira eficiente de modelar as incertezas presentes em dados experimentais é por meio de cascas esféricas. Nos Capítulos 4 e 5 veremos que o método apresentado via AGC para interseção de esferas no caso 3D pode ser estendido para lidarmos com mais do que uma casca esférica, enquanto que a abordagem convencional se torna inviável para esse caso.

O efeito das incertezas experimentais. Em um primeiro momento, as análises aqui feitas levam em conta que as distâncias disponíveis não possuem incertezas. Em uma próxima etapa, desejamos incorporar em nosso modelo matemático o efeito das incertezas presentes nas medidas vindas dos experimentos de RMN. Na prática é comum haver um erro associado às medidas de distâncias experimentais, visto que o aparelho usado na captura dos dados tem suas limitações físicas. Uma maneira de considerar incertezas nas distâncias disponíveis, usadas como dados de entrada do DMDGP, é assumindo que algumas delas pertençam a certos intervalos, tendo assim uma cota superior e uma inferior. Neste caso, podemos representar as incertezas supondo que as distâncias $d_{i-3,i}$ pertençam ao intervalo $[d_{i-3,i} - \delta, d_{i-3,i} + \delta]$, onde δ é um número real positivo. Lembremos que algumas distâncias podem ser determinadas *a priori* através da análise das propriedades químicas da molécula. Sendo assim, podemos assumir que as distâncias $d_{i-2,i}$ e $d_{i-1,i}$ são precisas (sem erros de medição), enquanto que $d_{i-3,i}$ é intervalar, *i.e.*, imprecisa (com erros de medição). Tal hipótese é adequada para o problema real e tem se verificado ao longo das pesquisas na área [4, 23, 9].

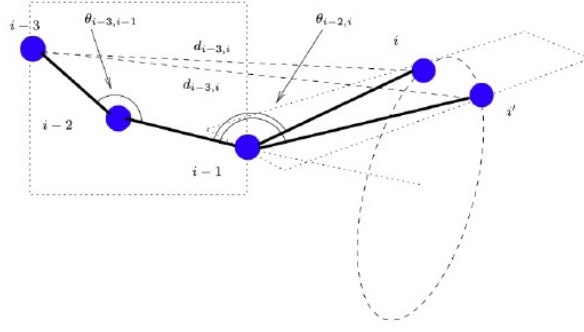


Figura 4 – Ilustração de uma das etapas do algoritmo BP [3].

Ressaltamos que cada iteração do BP feita para obter a realização parcial do vértice v_i equivale, geometricamente, à interseção de três esferas no \mathbb{R}^3 . Isso fornece como solução dois pontos no \mathbb{R}^3 , *i.e.*, temos duas possibilidades para cada realização parcial de v_i . Enquanto a Figura 4 ilustra a discretização no caso em que as distâncias envolvidas não possuem erros, a figura abaixo mostra o efeito de se levar em conta as incertezas experimentais. Assumindo $d_{i-3,i}$ intervalar, agora a cada tentativa de realizar um vértice v_i temos o problema de encontrar a interseção entre duas esferas e uma casca esférica no \mathbb{R}^3 , conforme vemos na Figura 5. Logo, ao invés de termos dois pontos como resultado da interseção, *i.e.*, duas possibilidades para a posição de v_i , passamos a ter dois arcos. Ou seja, temos dois intervalos de possibilidades para a posição do átomo v_i , quando nosso problema incorpora incertezas.

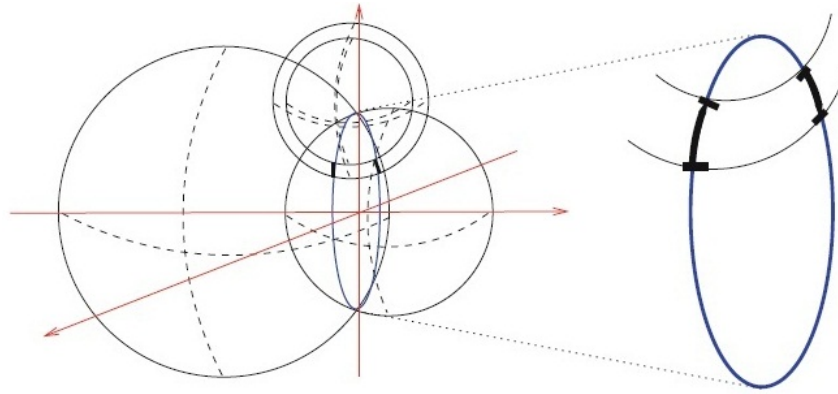


Figura 5 – Ilustração de uma das etapas do algoritmo iBP [4].

No caso de assumirmos a possibilidade de distâncias intervalares nos dados de entrada, podemos usar uma nova versão do BP para tratar este novo problema. A saber, o algoritmo *iBP* (do inglês, *interval Branch and Prune*) [4]. O algoritmo *iBP* é uma extensão do BP, e permite lidar com as distâncias imprecisas. De forma geral, o *iBP* busca resolver o problema da perda de discretização da árvore BP através de uma amostragem adequada dos intervalos de possibilidades, permitindo a descida na árvore. Porém, em tal abordagem, entre outros fatores, a propagação de erros a cada iteração pode tornar o

problema inviável. Além disso, não temos uma garantia de que a amostragem escolhida sempre é adequada para assegurar que uma solução seja encontrada conforme se desce nos níveis da árvore i BP. Mesmo sob sucessivos refinamentos na amostragem, não conseguimos condições para assegurar que uma solução seja sempre encontrada.

Uma proposta para lidar com o problema de assumir $d_{i-3,i}$ intervalar, é usar o algoritmo i BP em conjunto com a AGC [23, 16]. Com isso, é possível evitar o processo de amostragem e garantir a descida na árvore do BP sem tornar o problema inviável, garantindo uma classe de soluções para tal problema. Essa abordagem vem sendo explorada recentemente sob diferentes pontos de vista. Uma generalização possível em tal abordagem é a busca de incorporar distâncias imprecisas não somente em $d_{i-3,i}$, mas em outras distâncias de entrada do problema.

2 Álgebra geométrica conforme (AGC)

Seguindo [23, 13, 14, 5, 27, 28, 29, 15], vejamos alguns elementos da álgebra geométrica conforme (AGC) bastante úteis para lidar com aplicações da geometria de distâncias. Nos próximos capítulos usaremos as definições e conceitos aqui apresentados. Embora alguns resultados sejam usuais na literatura, outros foram derivados de forma a se adequarem ao problema de interseção de esferas.

2.1 Definições preliminares

Um espaço vetorial V sobre o corpo de escalares \mathbb{R} é uma *álgebra* se está definida sobre seus elementos $x, y, \in V$ uma operação de *multiplicação*, denotada por xy , satisfazendo:

- (i) $\alpha(xy) = (\alpha x)y = x(\alpha y)$ (associatividade de escalares),
- (ii) $(xy)z = x(yz)$ (associatividade),
- (iii) $(x + y)z = xz + yz$ (distributividade),

para todo $x, y, z \in V$ e $\alpha \in \mathbb{R}$. Se a multiplicação é comutativa, *i.e.*, se $xy = yx$ para todo $x, y \in V$, então dizemos que a álgebra é *comutativa*. Se V tem dimensão n quando considerado como espaço vetorial, dizemos que a álgebra tem dimensão n .

Observações. O corpo de escalares \mathbb{R} na definição acima poderia ser outro, como por exemplo, o conjunto dos números complexos \mathbb{C} . No entanto, neste trabalho lidamos apenas com o caso de escalares em \mathbb{R} . Como de costume, denotaremos por e_i , para $i = 1, \dots, n$, os elementos da base canônica do espaço Euclidiano \mathbb{R}^n .

A *álgebra de Grassmann* no \mathbb{R}^n é a álgebra gerada por $1, e_1, \dots, e_n$ e operação de multiplicação \wedge que é associativa, distributiva e verifica o seguinte:

$$\begin{aligned} e_i \wedge e_i &= 0, \\ e_i \wedge e_j &= -e_j \wedge e_i, \end{aligned}$$

onde $i, j = 1, \dots, n$. Esta álgebra é um espaço vetorial com respeito a soma e multiplicação por escalar, cuja dimensão é 2^n . O produto denotado por \wedge é denominado *produto exterior*, ou *produto de Grassmann*¹.

¹ Há livros em que se faz distinção entre a álgebra de Grassmann e a álgebra exterior, mas neste trabalho assumimos que ambas são sinônimos. Mais detalhes sobre essa questão podem ser encontrados em [30].

A álgebra de Clifford no \mathbb{R}^n é a álgebra gerada por $1, e_1, \dots, e_n$ e operação de multiplicação denotada pela justaposição que é associativa, distributiva e satisfaz:

$$\begin{aligned} e_i^2 &= 1, \\ e_i e_j &= -e_j e_i, \end{aligned}$$

onde $i, j = 1, \dots, n$. Este produto é conhecido como *produto geométrico* ou *produto de Clifford*. Esta álgebra é um espaço vetorial de dimensão 2^n , com respeito a soma e multiplicação por escalar.

O espaço vetorial associado à álgebra de Clifford no \mathbb{R}^n pode ser visto como um espaço multivetorial $\bigwedge \mathbb{R}^n$ definido por

$$\bigwedge \mathbb{R}^n = \bigwedge^0 \mathbb{R}^n \oplus \bigwedge^1 \mathbb{R}^n \oplus \dots \oplus \bigwedge^n \mathbb{R}^n, \quad (2.1)$$

onde cada parte $\bigwedge^k \mathbb{R}^n$ em (2.1) tem dimensão $\binom{n}{k}$, sendo que as combinações lineares de k vetores de $\{e_i\}_{i=1}^n$ definem uma base para esta parte. Por exemplo, uma base para $\bigwedge^2 \mathbb{R}^3$ é dada por $\{e_1 e_2, e_1 e_3, e_2 e_3\}$.

Os elementos de $\bigwedge \mathbb{R}^n$ são os conhecidos *multivetores*. Um multivetor $\xi \in \bigwedge \mathbb{R}^n$ é formado pela combinação linear de k -vetores de grau $k = 0$ a $k = n$. Podemos escrever isso como

$$\xi = \alpha_0 \langle \xi \rangle_0 + \alpha_1 \langle \xi \rangle_1 + \dots + \alpha_n \langle \xi \rangle_n = \sum_{k=0}^n \alpha_k \langle \xi \rangle_k, \quad (2.2)$$

onde $\alpha_k \in \mathbb{R}$ e $\langle \xi \rangle_k$ indica o k -vetor que faz parte de ξ . A dimensão de $\bigwedge \mathbb{R}^n$ é a soma das dimensões de cada uma de suas partes $\bigwedge^k \mathbb{R}^n$, sendo $k = 0, 1, \dots, n$. Portanto, $\bigwedge \mathbb{R}^n$ tem dimensão igual a $\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} = 2^n$.

Definimos *blades* como sendo os multivetores que podem ser fatorados através do produto exterior de 1-vetores. Os *blades* são obtidos em termos da base do espaço multivetorial (2.1). Ressaltamos que nem todo k -vetor é um k -blade. Os k -vetores são combinações lineares dos k -blades de base, sendo que alguns não podem ser fatorados usando o produto exterior. Por exemplo, o bivector $e_1 \wedge e_2 + e_3 \wedge e_4$ não é um *blade*. Já $e_1 \wedge e_2 + e_2 \wedge e_4 = (e_1 - e_4) \wedge e_2$ é um *blade*.

Vejam alguns exemplos de elementos de $\bigwedge \mathbb{R}^n$. O *blade* de grau zero $\xi = 1$ pertence a $\bigwedge^0 \mathbb{R}^n$, i.e., é um *escalar*. Como $\xi = e_3 \in \bigwedge^1 \mathbb{R}^n$, então $\xi = e_3$ é um vetor que pertence ao *espaço vetorial* $\bigwedge^1 \mathbb{R}^n$. Já $\xi = e_2 \wedge e_3 \in \bigwedge^2 \mathbb{R}^n$ é um *blade* de grau dois. $\bigwedge^2 \mathbb{R}^n$ é um espaço *bivetorial*, ou seja, formado por *bivetores*. O k -vetor $\xi = e_1 \wedge e_2 \wedge \dots \wedge e_k \in \bigwedge^k \mathbb{R}^n$ é um *blade* de grau k . Ressaltamos que cada espaço $\bigwedge^k \mathbb{R}^n$ contém todos k -vetores do espaço multivetorial $\bigwedge \mathbb{R}^n$.

Representando subespaços por *blades*. A partir do produto exterior, é possível interpretarmos *blades* como sendo subespaços vetoriais. Isso permite realizarmos operações entre dois subespaços através de operações da AGC de forma direta. O conceito de *blade* generaliza o conceito de subespaços, pois, além de fornecer informações sobre o subespaço vetorial, é capaz de codificar a noção de orientação e magnitude do objeto geométrico o qual representa. Por exemplo, $e_1 \wedge e_2$ denota um plano orientado de acordo com a regra da mão direita. Já que e_1 e e_2 estão associados a subespaços de dimensão 1, *i.e.*, retas cujo vetor suporte são tais vetores, então o subespaço obtido com o produto exterior entre estes tem dimensão 2. A posição relativa entre estes vetores está relacionada à informação disponível sobre a sua orientação.

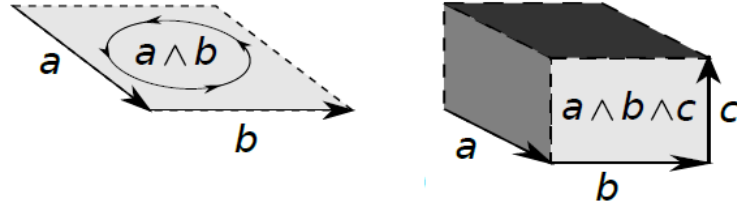


Figura 6 – Exemplo do produto exterior gerando subespaços orientados [5].

Na figura acima, o bivetor $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ gera um plano orientado, enquanto o trivetor $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$ gera um paralelepípedo orientado.

Como veremos adiante, através de relações de dualidade, podemos realizar a interseção entre subespaços utilizando o produto exterior. Quando analisamos a interseção de subespaços, a orientação dos subespaços envolvidos é indispensável. Por exemplo, se temos dois planos no \mathbb{R}^3 passando pela origem e ambos não são paralelos, a interseção entre estes fornece uma reta como resultado. Por outro lado, se tais planos forem paralelos o resultado é um plano. Isso mostra que a interseção está intimamente ligada à orientação dos objetos a serem intersectados.

Produto exterior a partir do produto geométrico. O produto geométrico é definido de forma a generalizar as propriedades do produto exterior. Nesse sentido, é desejável que tal produto codifique de forma compacta a noção de orientação e outras características geométricas fundamentais. De fato, o produto geométrico é bastante geral, permitindo que através dele possamos recuperar o produto exterior \wedge e, até mesmo, definir novos produtos. Uma maneira de recuperar o produto exterior entre dois *blades* $\xi_1 \in \bigwedge^k \mathbb{R}^n$ e $\xi_2 \in \bigwedge^l \mathbb{R}^n$ através do produto geométrico é por

$$\xi_1 \wedge \xi_2 = \begin{cases} \langle \xi_1 \xi_2 \rangle_{k+l}, & \text{se } k+l \leq n, \\ 0, & \text{se } k+l > n. \end{cases} \quad (2.3)$$

Ou seja, podemos obter $\xi_1 \wedge \xi_2$ se realizarmos o produto geométrico entre ξ_1 e ξ_2 e, após isso, extrairmos o grau $k + l$ do *blade* obtido. Ressaltamos que a *extração do grau* $\langle \rangle_k$ tem custo computacional escalar, pois basta analisarmos no *blade* resultante² qual de suas componentes correspondem à dimensão do *blade* esperado. Esse processo se resume em percorrer cada uma das componentes, análogo ao que fizemos em (2.2).

Produtos internos. Seguindo a mesma estratégia usada para definirmos o produto exterior em (2.3), definimos o *produto interno* entre $\xi_1 \in \bigwedge^k \mathbb{R}^n$ e $\xi_2 \in \bigwedge^l \mathbb{R}^n$ por

$$\xi_1 \cdot \xi_2 = \begin{cases} \langle \xi_1 \xi_2 \rangle_{l-k}, & \text{para } k < l, \\ \langle \xi_1 \xi_2 \rangle_0, & \text{para } k = l, \\ \langle \xi_1 \xi_2 \rangle_{k-l}, & \text{para } k > l. \end{cases} \quad (2.4)$$

Cada caso envolvendo k e l na definição acima leva a uma interpretação geométrica. Se $l > k$, o produto interno $\xi_1 \cdot \xi_2$ indica que estamos realizando uma *contração à esquerda* de ξ_1 e ξ_2 . Isto equivale a retirar de ξ_2 a parte que seja mais parecida com ξ_1 . O resultado é um *blade* de grau $l - k$ que está contido em ξ_2 e é perpendicular a ξ_1 . A contração à esquerda costuma ser denotada por $\xi_1 \rfloor \xi_2$. De forma análoga, temos a *contração à direita*, denotada por $\xi_1 \lceil \xi_2$, quando $k > l$. Já quando $k = l$, obtemos como resultado um escalar. Ressaltamos que (2.4) ou seus subcasos aqui mencionados são produtos internos não-Euclidianos. Adiante veremos mais detalhes sobre este aspecto. Outra característica em (2.4) é que se $k > l$, então $\langle \xi_1 \xi_2 \rangle_{l-k} = \xi_1 \rfloor \xi_2 = 0$, indicando que o resultado não existe. Ou seja, a contração à esquerda se anula, pois estaremos retirando de ξ_2 , via contração, um subespaço de dimensão maior do que a deste. Uma análise semelhante a esta vale para os demais casos em (2.4), indicando a não existência do resultado obtido na operação.

A equação fundamental da AGC. De posse do produto geométrico, definimos o *produto exterior* e o *produto interno* entre dois *blades* de grau 1, denotados por a e b ,

$$\begin{aligned} a \cdot b &= \frac{1}{2} (ab + ba), \\ a \wedge b &= \frac{1}{2} (ab - ba). \end{aligned}$$

Das identidades acima segue a *equação fundamental* da AGC:

$$ab = a \cdot b + a \wedge b. \quad (2.5)$$

A identidade (2.5) pode ser generalizada para lidar com *blades* de grau k arbitrário. Além disso, as definições para o produto exterior, interno e geométrico podem ser definidas para multivetores. Em ambas generalizações, os resultados se baseiam na

² Em anexo, temos a demonstração de que este produto exterior entre dois *blades* resulta em um *blade*.

expressão (2.2) e no fato que tais produtos são bilineares. Como a princípio, ao longo deste trabalho, não estaremos lidando com multivetores de grau misto, mas sim com *blades*, as definições vistas fornecem o embasamento necessário para nosso trabalho. Caso surjam situações específicas que fujam dos elementos apresentados, buscaremos introduzir os pré-requisitos necessários.

2.2 O espaço conforme

Dizemos que $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é o espaço vetorial constituído por uma parte Euclideana e uma conforme, denotadas, respectivamente, por \mathbb{R}^n e $\mathbb{R}^{1,1}$. A parte Euclideana tem base $\{e_1, \dots, e_n\}$, enquanto a parte conforme tem base $\{e_0, e_\infty\}$, de forma que

$$e_i e_j + e_j e_i = 2\delta_{ij}, \quad (2.6)$$

$$e_0 e_\infty + e_\infty e_0 = -2, \quad (2.7)$$

$$e_0 e_i = -e_i e_0, \quad (2.8)$$

$$e_\infty e_i = -e_i e_\infty, \quad (2.9)$$

$$e_0^2 = e_\infty^2 = 0, \quad (2.10)$$

onde $i, j = 1, \dots, n$. Denominamos $\{e_0, e_\infty\}$ de *base nula*. A base nula é caracterizada pelas propriedades (2.7) a (2.10) acima. Em particular, as duas últimas justificam o termo "nula". O fato de (2.10) ocorrer mostra que o produto interno (2.4) é não-Euclidiano. Isto porque $e_0^2 = e_0 \cdot e_0 = 0$, sendo $e_0 \neq 0$.

Em [28] se mostra que $\mathbb{R}^{n+1,1}$ admite a seguinte decomposição:

$$\mathbb{R}^{n+1,1} = \mathbb{R}^n \oplus \mathbb{R}^{1,1}.$$

Esta decomposição indica uma imersão do espaço Euclidiano \mathbb{R}^n no espaço conforme $\mathbb{R}^{n+1,1}$. Sendo assim, os elementos no espaço conforme $\mathbb{R}^{n+1,1}$ podem ser expressos em termos da base ortogonal $\{e_0, e_1, \dots, e_n, e_\infty\}$. Agora a relação de ortogonalidade passa a ser em termos do produto interno (2.4). Destacamos que, no caso de estarmos lidando apenas com elementos Euclidianos, *i.e.*, vetores do \mathbb{R}^n , o produto interno aqui definido atua da mesma maneira que o produto interno canônico Euclidiano.

2.3 Elementos do espaço conforme

Os pontos p em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ satisfazem as duas condições:

$$a) \quad p \cdot e_\infty = -1, \quad (2.11)$$

$$b) \quad p^2 = 0. \quad (2.12)$$

As equações em a) e b) equivalem a termos uma forma padrão para representar os pontos $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i e_i \in \mathbb{R}^n$, onde $\alpha_i \in \mathbb{R}$, no espaço conforme $\mathbb{R}^{n+1,1}$, pois estas asseguram que

$$p = e_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|^2 e_\infty. \quad (2.13)$$

A expressão (2.13) é conhecida como representação *primal* em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ do ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Assumiremos que esta é a representação padrão dos pontos no espaço conforme.

A *distância Euclideana* entre os pontos p e q em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é definida por

$$d_E(p, q) = \sqrt{2 |p \cdot q|}. \quad (2.14)$$

Propriedades do produto interno (2.4). Dado dois pontos p e q em $\mathbb{R}^{n+1,1}$, representações de \mathbf{p} e \mathbf{q} do \mathbb{R}^n , o produto interno entre estes pode ser expresso por

$$p \cdot q = -\frac{1}{2} \|\mathbf{q} - \mathbf{p}\|^2. \quad (2.15)$$

A identidade acima mostra que o produto interno na AGC é proporcional ao quadrado da distância entre os pontos, com um fator negativo. Isso está associado ao fato do produto interno ser não-Euclideano, pois no caso Euclideano a distância entre dois pontos sempre é não-negativa.

O produto interno verifica as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} e_i \cdot e_j &= \delta_{ij}, \\ e_0 \cdot e_i &= 0, \quad e_\infty \cdot e_i = 0, \\ e_0^2 &= e_\infty^2 = 0, \\ e_0 \cdot e_\infty &= -1, \end{aligned}$$

onde $i, j = 1, \dots, n$ e e_i^2 denota $e_i e_i = e_i \cdot e_i$.

Definições envolvendo *k-blades* em espaços nD . Quando lidamos com *k-blades* em espaços nD , *i.e.*, de dimensão n , as manipulações algébricas estão intimamente ligadas com as dimensões e graus envolvidos. Por exemplo, na definição de produto interno, lidamos diretamente com o grau dos *blades* envolvidos. Além disso, ao definirmos o dual de um *blade* é preciso tomarmos cuidado com a dimensão dos subespaços envolvidos. Nas definições a seguir veremos como este aspecto aparece na AGC. Em particular, quando definimos as operações de *join* e *meet* é preciso uma atenção especial ao subespaço subjacente ao problema.

O *reverso* \tilde{V} de um *blade* V de grau k é definido por

$$\tilde{V} = (-1)^{\frac{k(k-1)}{2}} V. \quad (2.16)$$

O efeito do reverso é de inverter a ordem de um *blade* no seguinte sentido. Digamos que o k -*blade* V é fatorado da seguinte maneira

$$V = v_1 \wedge \cdots \wedge v_k.$$

Então,

$$\tilde{V} = (-1)^{\frac{k(k-1)}{2}} v_1 \wedge \cdots \wedge v_k = v_k \wedge \cdots \wedge v_1.$$

Notemos que

$$(\tilde{\tilde{V}}) = V.$$

Outra operação bastante usual nas manipulações algébricas é a involução do grau. A *involução do grau* \hat{V} de um *blade* V de grau k é definida por

$$\hat{V} = (-1)^k V. \quad (2.17)$$

De posse da involução do grau podemos escrever uma generalização das identidades envolvendo a equação fundamental da AGC (2.5) para o caso de termos um 1-*blade* e um k -*blade* denotados por a e B , respectivamente:

$$\begin{aligned} a \cdot B &= \frac{1}{2} (aB - \hat{B}a), \\ a \wedge B &= \frac{1}{2} (aB + \hat{B}a), \end{aligned}$$

e

$$aB = a \cdot B + a \wedge B.$$

Definimos a *inversa* de um *blade* V como

$$V^{-1} = \frac{\tilde{V}}{\|V\|^2} = \frac{\tilde{V}}{V \cdot \tilde{V}}. \quad (2.18)$$

Aqui usamos a definição de *norma reversa ao quadrado* $\|V\|^2 = V \cdot \tilde{V}$. Na definição de inversa de um *blade* assumimos que $\|V\| \neq 0$. Se $\|V\| = 0$, dizemos que o *blade* V não tem inversa.

O *dual* de um *blade* V em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é definido por

$$V^* = \frac{V}{I} = V I^{-1} = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} V I,$$

onde I é o *pseudoescalar* do $\mathbb{R}^{n+1,1}$, definido por

$$I = e_0 e_1 \cdots e_n e_\infty = e_0 \wedge e_1 \wedge \cdots \wedge e_n \wedge e_\infty.$$

A noção de dualidade na AGC é análoga à de complemento ortogonal conhecida da álgebra linear, no sentido de que dado um espaço vetorial U de dimensão n e um subespaço vetorial W de U , com dimensão k , então o dual de W é um subespaço de U ortogonal a

W , cuja dimensão é $n - k$. Além disso, na AGC o conceito de dualidade também codifica a magnitude e orientação do subespaço dual. Esta característica permite que as manipulações algébricas entre os *blades* sempre estejam bem definidas. Quando lidarmos com a interseção de esferas, veremos como é importante saber a orientação e magnitude dos subespaços obtidos ao longo das sucessivas interseções.

Outra característica do conceito de dualidade no modelo conforme é que podemos optar por trabalhar com os elementos da AGC representados na forma direta ou na forma dual, de acordo com a necessidade do nosso problema. Para obter a expressão Euclideana do *blade* V na forma dual, devemos encontrar todos os pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, representados por $p \in \mathbb{R}^{n+1,1}$, tais que

$$p \cdot V = 0. \quad (2.19)$$

Já quando V estiver na forma direta, usamos

$$p \wedge V = 0. \quad (2.20)$$

Ao longo deste trabalho vamos lidar na maioria das vezes com a representação dual dos objetos Euclidianos no espaço conforme. A escolha de uma representação adequada permite tratar o problema sob pontos de vista diferentes de forma eficiente.

Na AGC é possível alterarmos da representação dual para a primal através da operação de desdualização. A *desdualização* de um *blade* V em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é definida por

$$V^{-*} = V I,$$

onde I é o pseudoescalar do $\mathbb{R}^{n+1,1}$.

Relações de dualidade. Enquanto o produto exterior independe da métrica, os produtos internos aqui definidos são métricos. Dependendo da operação que estamos realizando, escolhemos uma métrica Euclideana para defini-los, de forma que possamos sempre fixar uma base ortogonal a fim de simplificar os cálculos e implementações computacionais. Por exemplo, quando definimos a contração à esquerda, podemos assumir que a métrica subjacente seja a Euclideana e que estamos de posse de uma base ortonormal visto que, no caso Euclideano, através do processo de Gram-Schmidt, é possível obtermos tal base no caso de subespaços de dimensão finita (vide Anexos).

Como o produto exterior entre duas esferas duais distintas³ fornece a representação dual do resultado da interseção entre estas, optamos preferencialmente pela representação dual para lidar com as esferas. Tal escolha facilitou a interpretação geométrica ao lidarmos com a interseção. No entanto, em algumas definições, como por exemplo a

³ Adiante, veremos diferentes possibilidades para realizar a interseção de esferas. No caso geral, pode ser que o produto exterior quando aplicado na forma usual, deixe de fornecer a interseção.

do par de pontos, a notação primal se mostra mais adequada para entender a geometria do problema. A AGC fornece uma maneira de relacionar os produtos métricos e não-métricos em termos das representações dual e primal. As expressões abaixo mostram relações de dualidade que facilitam a interpretação dos conceitos que usaremos nos Capítulos 4 e 5.

Para todos os *blades* A e B , temos as seguintes relações:

$$\begin{aligned}(A \wedge B)^* &= A \cdot (B^*), \\ (A \cdot B)^* &= A \wedge (B^*).\end{aligned}$$

Temos também relações de dualidade envolvendo a contração à esquerda \rfloor :

$$\begin{aligned}(A \wedge B) \rfloor C &= A \rfloor (B \rfloor C), \\ (A \rfloor B) \rfloor C &= A \wedge (B \rfloor C) \quad (\text{válida quando } A \subseteq C),\end{aligned}$$

para quaisquer *blades* A, B e C .

Independência linear via produto exterior. Podemos usar o produto exterior para estabelecer se um conjunto de vetores é L.I. ou não: o conjunto de vetores $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$ é L.I. se, e somente se, $\mathbf{v}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{v}_p \neq 0$. A demonstração deste resultado está nos Anexos.

2.4 Representação de esferas como vetores

Uma esfera do \mathbb{R}^n de raio r e centro \mathbf{c} tem representação dual em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ dada por

$$\sigma = c - \frac{r^2}{2} e_\infty, \quad (2.21)$$

onde

$$c = e_0 + \mathbf{c} + \frac{1}{2} \|\mathbf{c}\|^2 e_\infty.$$

De fato, (2.21) é a representação dual da esfera no \mathbb{R}^n , pois para todo ponto p em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ (2.13), temos

$$\begin{aligned}0 &= p \cdot \sigma = p \cdot c - \frac{r^2}{2} p \cdot e_\infty \\ &= p \cdot \left(e_0 + \mathbf{c} + \frac{\|\mathbf{c}\|^2}{2} e_\infty \right) - \frac{r^2}{2} e_0 \cdot e_\infty \\ &= \frac{\|\mathbf{x}\|^2}{2} e_\infty \cdot e_0 + \mathbf{x} \cdot \mathbf{c} + \frac{\|\mathbf{c}\|^2}{2} e_0 \cdot e_\infty + \frac{r^2}{2} \\ &= -\frac{1}{2} \left(\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{c}\|^2 - 2 \mathbf{x} \cdot \mathbf{c} \right) + \frac{r^2}{2} \\ &= -\frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2 + \frac{r^2}{2},\end{aligned}$$

onde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Portanto, pela expressão acima, obtemos

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2 = r^2. \quad (2.22)$$

Esta é a equação de uma esfera no \mathbb{R}^n de raio r e centro \mathbf{c} . Notemos que quando $r = 0$, a equação acima se reduz a um ponto. Se $r < 0$, não temos solução real para (2.22), pois $\mathbf{x} \notin \mathbb{R}^n$. Em [14] este caso é denominado *esfera imaginária*. Aqui nos concentraremos ao caso real, *i.e.*, quando $r \geq 0$.

A esfera acima, (2.21), é definida de forma que seu raio r seja tal que

$$r^2 = \frac{\sigma^2}{(\sigma \cdot e_\infty)^2} = -\frac{\sigma \hat{\sigma}}{(e_\infty \cdot \sigma)^2}, \quad (2.23)$$

onde $\hat{\sigma}$ indica a involução do grau de σ , conforme (2.17). Além disso, seu centro c pode ser obtido através de

$$c = \frac{r^2}{2} e_\infty - \frac{\sigma}{\sigma \cdot e_\infty}.$$

Sob a forma padrão (2.21), as expressões acima para o raio e centro da esfera se reduzem a

$$r^2 = \sigma^2, \quad c = \sigma + \frac{r^2}{2} e_\infty.$$

De posse da representação dual de uma k -esfera em $\mathbb{R}^{n+1,1}$, denotada por σ (2.21), a esfera definida por

$$\sigma_n = -\frac{\sigma}{e_\infty \cdot \sigma},$$

é a menor esfera que contém σ . Ressaltamos que o raio e centro de σ_n são iguais aos de σ . Embora $e_\infty \cdot \sigma$ não seja necessariamente igual a -1 para o caso geral, temos que

$$e_\infty \cdot \sigma_n = -1.$$

Logo, σ_n satisfaz a condição (2.11).

Objeto	Representação
ponto	$p = e_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2} \ \mathbf{x}\ ^2 e_\infty$
plano	$\pi = \mathbf{n} + d e_\infty$
reta	$\pi_1 \wedge \pi_2$
esfera	$\sigma = c - \frac{r^2}{2} e_\infty$
círculo	$\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2$
par de pontos	$p_p = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \sigma_3$

Figura 7 – Representação de objetos Euclidianos no espaço conforme.

Combinação linear em $\mathbb{R}^{n+1,1}$. O resultado da combinação linear de dois pontos p e q em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ dada por

$$\alpha p + \beta q, \quad (2.24)$$

onde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, pode não resultar em um ponto, mas sim em uma esfera. Podemos verificar esse fato com auxílio das propriedades (2.11) e (2.12). Como

$$(\alpha p + \beta q)^2 = \alpha^2 p^2 + \beta^2 q^2 + 2\alpha\beta(p \cdot q) = 2\alpha\beta(p \cdot q),$$

então

$$\frac{(\alpha p + \beta q)^2}{[e_\infty \cdot (\alpha p + \beta q)]^2} = \frac{2\alpha\beta(p \cdot q)}{(\alpha + \beta)^2} = 2\alpha\beta(p \cdot q) = -\alpha\beta \|\mathbf{q} - \mathbf{p}\|^2,$$

se $\alpha + \beta = 1$. Portanto, de acordo com (2.23), a combinação linear (2.24) com $\alpha + \beta = 1$, é uma esfera cujo raio r satisfaz

$$r^2 = -\alpha\beta d_E^2(p, q),$$

sendo $d_E(p, q)$ definida por (2.14).

Embora (2.24) possa não resultar em um ponto, é possível escolhermos valores para os parâmetros α e β de forma que o resultado seja um ponto. Uma maneira de obtermos pontos como resultados da combinação linear é tratando os pontos envolvidos como *flat*, *i.e.*, sendo obtidos como resultado da interseção entre uma reta e um plano. Algebricamente, isto significa tomar uma combinação linear da seguinte maneira

$$\alpha p \wedge e_\infty + \beta q \wedge e_\infty.$$

No modelo conforme temos a distinção entre pontos *flat* e pontos *finitos*, visto que a maioria dos objetos na AGC estão intimamente relacionados com o aspecto geométrico. O ponto usual que definimos em (2.13), um ponto finito, é interpretado como uma esfera de raio nulo.

A interpretação geométrica de alguns conceitos quando vistos no espaço conforme podem ter significados diferentes dos conhecidos para o espaço Euclideano. No entanto, na AGC podemos lidar com as expressões de forma bastante próxima das construções geométricas usuais. Com a AGC a interpretação geométrica das operações aparece embutida nas manipulações algébricas de forma bastante natural.

2.5 Geometria no espaço conforme

Na geometria é comum o estudo de certas transformações definidas entre duas superfícies. De particular interesse é o estudo daquelas que preservam certas quantidades, das quais destacamos algumas [31]: *conforme*, a qual preserva ângulos; *isométrica*, a qual preserva distâncias e ângulos; *equiárea*, a qual preserva área.

Neste trabalho, as transformações mapeiam esferas em esferas sendo que o ângulo feito pelos planos tangentes nos pontos de interseção são preservados. Portanto, aqui, as transformações pertencem ao *grupo das transformações conforme*. No atual contexto, as transformações conforme podem ser definidas por *versores*, de forma que a reflexão é uma transformação básica, e a translação e rotação são obtidas pela composição de reflexões. Detalhes de como tais construções são feitas podem ser encontrados em [13, 14, 15].

Definimos um *versor* como sendo os multivetores que podem ser fatorados como o produto geométrico de 1-vetores não-nulos. Assim, um versor \mathcal{V} é definido por

$$\mathcal{V} = \mathbf{v}_k \mathbf{v}_{k-1} \cdots \mathbf{v}_1,$$

onde cada \mathbf{v}_i é um vetor em $\bigwedge^1 \mathbb{R}^n$. Dizemos que o versor acima é um k -versor, pois é o produto geométrico de k vetores.

A inversa de um versor é dada por

$$\mathcal{V}^{-1} = \mathbf{v}_1^{-1} \mathbf{v}_2^{-1} \cdots \mathbf{v}_k^{-1}.$$

Em geral, um versor pode não ser um *blade*. Detalhes sobre a relação entre *blades* e versores podem ser encontrados em [15, 14].

Na Figura 8 temos os versores mais usados ao longo dos nossos estudos.

Funcionalidade	Expressão
refletir	$\pi = \mathbf{n} + d e_\infty$
transladar	$\mathcal{T}_{\mathbf{b}} = 1 - \frac{1}{2} \mathbf{b} e_\infty$
rotacionar	$R = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) B$

Figura 8 – Alguns versores.

Um versor \mathcal{V} atua como uma transformação conforme sobre $\xi \in \mathbb{R}^{n+1,1}$ da seguinte maneira

$$\xi \mapsto (-1)^{\nu\epsilon} \mathcal{V} \xi \mathcal{V}^{-1}, \quad (2.25)$$

onde $\nu = \text{grau}(\mathcal{V})$ e $\epsilon = \text{grau}(\xi)$. Computacionalmente, obter o grau de um versor ou de um *blade* é análogo, pois basta verificar os elementos não nulos da base em que estes estão expressos.

O versor para rotação. Com o uso dos versores podemos representar de forma condensada operações usuais do \mathbb{R}^3 . Tendo definido um plano de rotação gerado pelos vetores

unitários \mathbf{a} e \mathbf{b} , e um ângulo θ tal que $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$, obtemos o *rotor* R no $\mathbb{R}^{3,0}$ por

$$R = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)B, \quad (2.26)$$

onde

$$B = \frac{\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}}{\sin(\theta)},$$

para $\sin(\theta) \neq 0$. Já no $\mathbb{R}^{4,1}$, o bivetor B em (2.26) é definido por

$$B = \frac{\pi_1 \wedge \pi_2}{\|\pi_1 \wedge \pi_2\|},$$

onde π_i , para $i = 1, 2$, denota a representação dual do plano cartesiano no espaço conforme. A Figura 8 mostra a expressão para π_i .

Análogo a (2.26), de forma geral, o rotor definido por \mathbf{a} e \mathbf{b} em termos do produto geométrico é dado por $R = \mathbf{ba}$. O rotor R tem o papel de rotacionar um elemento com respeito ao plano orientado determinado pelo bivetor B . De fato, na definição (2.26) a parte escalar diz respeito ao quanto será rotacionado, enquanto a parte bivetorial informa a maneira que é feita a rotação.

Essa forma de descrever uma rotação em um espaço 3D possui vantagens, se comparado com as tradicionais, principalmente com respeito as implementações computacionais. Nessa nova versão condensada, podemos generalizar diferentes conceitos e realizar deduções algébricas com maior nível de abstração, concentrando os esforços dedutivos não apenas em termos algébricos mas também em aspectos geométricos. Como já mencionamos, a inversão de um rotor é trivial. A saber, o inverso do rotor R (2.26), é dado por

$$R = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)B.$$

Ou seja, obtemos o inverso de R apenas mudando um sinal em sua expressão.

Na tabela abaixo temos exemplos da representação de alguns objetos Euclidianos no espaço conforme.

O versor para translação. Na álgebra linear uma translação $T_{\mathbf{b}}$ definida por

$$T_{\mathbf{b}}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (2.27)$$

atua de forma que, geometricamente, \mathbf{x} é transladado por \mathbf{b} para $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{b}$. Na AGC obtemos \mathbf{x}' por meio de

$$x' = \mathcal{T}_{\mathbf{b}} x \mathcal{T}_{\mathbf{b}}^{-1}, \quad (2.28)$$

onde x e x' denotam, respectivamente, a representação no espaço conforme de \mathbf{x} e \mathbf{x}' e

$$\mathcal{T}_{\mathbf{b}} = 1 - \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty} \quad (2.29)$$

representa a translação por $\mathbf{b} = \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 + \alpha_3 e_3$, com $\alpha_i \in \mathbb{R}$. Sob esta nova abordagem, a translação é vista como sendo uma rotação ao longo de um eixo separado por uma distância infinita. Ou de forma alternativa, como reflexões consecutivas por planos paralelos. Notemos que, no lado direito da definição de translação (2.29), estamos manipulando algebricamente da mesma maneira tanto elementos do espaço conforme, como do espaço Euclidiano. De fato, este aspecto é uma das vantagens de usarmos a AGC em diferentes contextos. Por exemplo, vimos a definição da translação no espaço conforme (2.29) tendo em mente a translação no espaço Euclidiano (2.27). Caso quiséssemos transladar uma esfera, em vez de um vetor, não poderíamos aplicar a expressão (2.27) diretamente. Já na AGC a translação é generalizada de forma natural, no seguinte sentido. Para transladarmos uma esfera basta substituímos o elemento x em (2.28) pela expressão de tal esfera no espaço conforme, *i.e.*, por σ definida por (2.21). Essa facilidade vale para outras operações como rotação e reflexão, e também para outros objetos como ponto, plano e reta. A equação (2.25) codifica todos estes casos, sendo que \mathcal{V} denota a operação atuando sobre o objeto ξ , definido de acordo com a Figura 7.

Um resultado interessante é que a translação $\mathcal{T}_{\mathbf{b}} = 1 - \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty}$ é tal que sua inversa é $\mathcal{T}_{\mathbf{b}}^{-1} = 1 + \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty}$. De fato, pelas propriedades (2.9) e (2.10), temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\mathbf{b}} \mathcal{T}_{\mathbf{b}}^{-1} &= \left(1 - \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty}\right) \left(1 + \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty}\right) \\ &= 1 + \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty} - \frac{1}{2} \mathbf{b} e_{\infty} - \frac{1}{4} \mathbf{b} e_{\infty} \mathbf{b} e_{\infty} \\ &= 1 + \frac{1}{4} \mathbf{b} e_{\infty} e_{\infty} \mathbf{b} \\ &= 1. \end{aligned}$$

Analogamente, mostramos que $\mathcal{T}_{\mathbf{b}}^{-1} \mathcal{T}_{\mathbf{b}} = 1$. Ou seja, para obtermos a inversa de $\mathcal{T}_{\mathbf{b}}$ basta mudarmos um sinal. Podemos verificar que o mesmo vale para os demais versores da Figura 8.

Representando isometrias por operações ortogonais. É conhecido que na álgebra linear [32] não é possível representar a composição de translação, rotação e reflexão por meio de uma matriz, visto que a translação não é uma transformação linear. Por outro lado, com a AGC isto é possível.

Dizer que uma transformação conforme definida pelo versor \mathcal{V} é uma isometria equivale a dizer que

$$(\mathcal{V} \xi_1 \mathcal{V}^{-1}) \cdot (\mathcal{V} \xi_2 \mathcal{V}^{-1}) = \xi_1 \cdot \xi_2,$$

para todo $\xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^{n+1,1}$.

Teorema. *A transformação conforme definida pelo versor \mathcal{V} é uma isometria se, e somente se,*

$$\mathcal{V}e_\infty\mathcal{V}^{-1} = e_\infty.$$

Usando o teorema acima em conjunto com as definições da Figura 8 temos o seguinte resultado:

Proposição. *Uma transformação conforme é uma isometria se, e somente se, é uma composição de translação, rotação e reflexão.*

A demonstração destes resultados segue de expandir as definições envolvidas e testar todos casos possíveis. Detalhes podem ser encontrados em [13].

Com respeito ao MDGP, os resultados acima são de especial interesse, pois buscamos determinar a conformação molecular a menos de rotação e translação. As ferramentas aqui vistas da AGC são adequadas para obtermos uma solução que tenha essas características.

Versores com o CLUCalc. Uma conhecida implementação da AGC em espaços 3D é o CLUCalc [20]. Ele possui uma versão do rotor (2.26), de forma que podemos realizar a rotação de objetos 3D utilizando a AGC. Por exemplo, para rotacionarmos o ponto $P = e_3$ do \mathbb{R}^3 em um ângulo $\theta = \frac{\pi}{2}$ rad com respeito ao plano gerado por $\{e_1, e_2\} \subseteq \mathbb{R}^3$, definimos o rotor

$$R = \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) - \text{sen}\left(\frac{\pi}{4}\right)B, \quad (2.30)$$

onde $B = e_1 \wedge e_2$. Então, consideramos a representação de P no espaço conforme, denotada por P_{conf} , de acordo com (2.13). Logo, por (2.25), a representação do ponto rotacionado é

$$P'_{conf} = RP_{conf}R^{-1}.$$

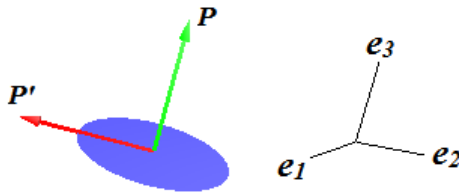


Figura 9 – Testes com o CLUCalc para um rotor.

A figura acima exibe o efeito de um rotor em $\mathbb{R}^{4,1}$ aplicado ao ponto $P = e_3 \in \mathbb{R}^3$. Lembrando que, como o plano orientado associado ao bivector B tem orientação definida pela regra da mão direita, é esperado que o ponto rotacionado seja $P_{Rotac} = -e_2$.

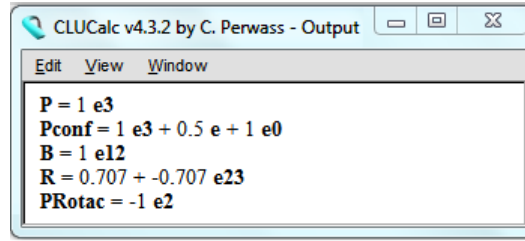


Figura 10 – Saída do CLUCalc para testes com o rotor.

De fato, o resultado da Figura 10 está de acordo com o esperado.

Rotacionando objetos de forma geral. Assim como fizemos para rotacionar o vetor e_3 com respeito ao plano $e_1 \wedge e_2$, podemos rotacionar outros objetos 3D, através de (2.25).

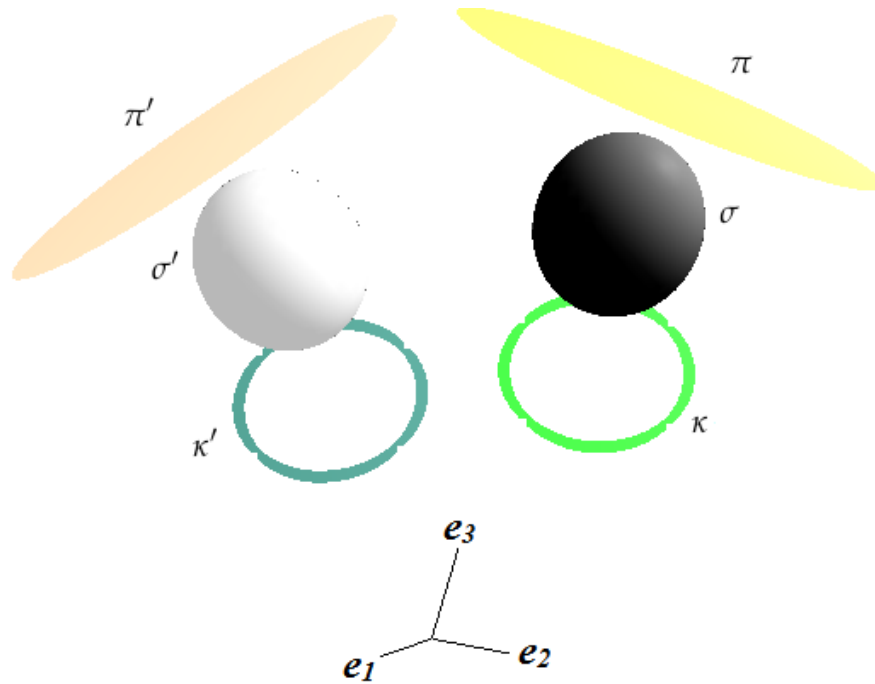


Figura 11 – Testes com o CLUCalc.

Na figura acima temos a rotação, via rotor (2.30), do círculo κ , plano π e esfera σ , definidos conforme a Figura 7. Isso mostra o potencial de generalização da AGC ao tratar todos objetos geométricos como vetores. Essa característica fornece vantagens quando lidamos com o problema da interseção de esferas, pois não precisamos interpretar as esferas como um conjunto de pontos, mas sim como um único objeto matemático. Dessa maneira, para realizar a interseção entre esferas estaremos operando as esferas como se fossem vetores no espaço conforme, e não como se fossem conjuntos de pontos do espaço Euclidiano.

2.6 Esferas como vetores tangentes

Uma forma alternativa de representar em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ uma esfera de centro \mathbf{c} e raio r é através de um ponto p na esfera e seu centro c^4 . Tal representação é dada por

$$\sigma = p \cdot (c \wedge e_\infty). \quad (2.31)$$

Aqui $c \wedge e_\infty$ denota o ponto *flat* determinado pelo centro da esfera, *i.e.*, a interseção de uma reta passando pelo centro da esfera com um plano que contém este centro. De fato, (2.31) é a representação dual de uma esfera, pois

$$\sigma = p \cdot (c \wedge e_\infty) = (p \cdot c)e_\infty - (p \cdot e_\infty)c = -\frac{1}{2} \|\mathbf{p} - \mathbf{c}\|^2 + c,$$

onde usamos (2.11) e (2.15). Por fim, como $\|\mathbf{p} - \mathbf{c}\| = r$, reescrevemos a expressão acima como

$$\sigma = c - \frac{r^2}{2} e_\infty,$$

que é a representação dual da esfera assim como (2.21).

2.7 O par de pontos

No modelo conforme o par de pontos é um objeto primitivo, *i.e.*, pode ser manipulado como um vetor do espaço vetorial $\mathbb{R}^{n+1,1}$. Em [14] é usado o termo em inglês *round* tanto para esferas como para círculos ou par de pontos. Em [5] este aspecto é apresentado na seção sobre *blades* vistos como *circunferências*. É importante notar que no modelo conforme as circunferências englobam as esferas, círculos e par de pontos, possibilitando uma unificação na forma de lidar com estes objetos geométricos. De fato, o que distingue tais objetos na AGC é o raio, o centro e o espaço subjacente usado na definição de cada um destes. Dessa maneira, os *blades* vistos como circunferências, ou *rounds*, são definidos e manipulados algebricamente da mesma maneira.

Um par de pontos no \mathbb{R}^3 , *i.e.*, uma 1-esfera, tem representação primal dada por

$$P_p = p_1 \wedge p_2,$$

onde p_1, p_2 são pontos em $\mathbb{R}^{n+1,1}$. Usaremos a notação p_p para representação dual do par de pontos, *i.e.*, $p_p = P_p^*$.

Podemos obter a representação dual de um par de pontos através de

$$p_p = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \sigma_3, \quad (2.32)$$

⁴ Aqui fica subentendido que $p, c \in \mathbb{R}^{n+1,1}$ sendo que estes são representações primais no modelo conforme do ponto e do centro do círculo em questão. Ressaltamos que, pela notação adotada neste trabalho, para evitar ambiguidades, os elementos escritos em negrito pertencem ao espaço Euclidiano. Quando nos referirmos a um ponto p , fica subentendido que este é a representação primal do ponto $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ e que $p \in \mathbb{R}^{n+1,1}$. O mesmo vale para outros elementos, como por exemplo a esfera σ .

onde σ_i denota a esfera dual definida por (2.21), para $i = 1, 2, 3$. Assumindo que estas esferas são distintas, então a interseção descrita em (2.32) resulta na representação dual de um par de pontos, *i.e.*, em uma 1-esfera.

Além da possibilidade de representar objetos geométricos de forma compacta, uma das vantagens da AGC é permitir manipulá-los algebricamente de uma maneira mais simples, se comparado com a abordagem clássica via álgebra linear. Por exemplo, sob certas condições, o resultado da interseção de n esferas $\{\sigma_i\}_{i=1}^n$ em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ pode ser obtido computando o produto exterior entre tais esferas, e o resultado é um par de pontos dual

$$p_p = \sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n. \quad (2.33)$$

No Capítulo 4 temos a demonstração deste resultado e de (2.32).

A seguinte fórmula extrai os pontos de um par de pontos,

$$p_{1,2} = \frac{\mp p_p^{-*} \pm \sqrt{p_p^{-*} \cdot p_p^{-*}}}{e_\infty \cdot p_p^{-*}} = \frac{\mp P_p \pm \sqrt{P_p \cdot P_p}}{e_\infty \cdot P_p}, \quad (2.34)$$

onde p_p é dado por (2.33) e σ_i é a representação dual da esfera i em $\mathbb{R}^{n+1,1}$, assim como anteriormente. Notemos que, como

$$p_p = P_p^* = (\sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n)^* = (p_1 \wedge p_2)^*,$$

onde p_1 e p_2 são os pontos resultantes de (2.33), então,

$$p_p^{-*} = (\sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n)^{-*} = P_p = p_1 \wedge p_2.$$

Demonstração da fórmula para extrair os pontos de um par de pontos. Desejamos extrair de p_p (2.33) os pontos p_1 e p_2 , obtendo suas expressões de forma explícita através da fórmula (2.34). Na representação primal, o par de pontos é dado por $p_1 \wedge p_2$. Para demonstrar (2.34), vamos substituir $p_p^{-*} = p_1 \wedge p_2$ no lado direito da igualdade e desenvolver os termos envolvidos, obtendo os pontos p_1 e p_2 . Em [16] temos a demonstração deste resultado para o \mathbb{R}^3 , que é análoga à que apresentaremos para o \mathbb{R}^n .

Primeiramente, mostremos o seguinte,

$$\sqrt{p_p^{-*} \cdot p_p^{-*}} = \sqrt{(p_1 \wedge p_2)^2} = p_1 \cdot p_2. \quad (2.35)$$

Usando as propriedades do produto geométrico, temos que

$$\begin{aligned} (p_1 \wedge p_2)^2 &= \left[\frac{1}{2} (p_1 p_2 - p_2 p_1) \right]^2 = \frac{1}{4} (p_1 p_2 p_1 p_2 - p_1 p_2^2 p_1 - p_2 p_1^2 p_2 + p_2 p_1 p_2 p_1) \\ &= \frac{1}{4} (p_1 p_2 p_1 p_2 + p_2 p_1 p_2 p_1) = \frac{1}{4} [p_1 (p_2 p_1 p_2) + (p_2 p_1 p_2) p_1] \\ &= \frac{1}{4} [p_1 \cdot (p_2 p_1 p_2) + p_1 \wedge (p_2 p_1 p_2) + (p_2 p_1 p_2) \cdot p_1 + (p_2 p_1 p_2) \wedge p_1] \\ &= \frac{1}{4} [2p_1 \cdot (p_2 p_1 p_2) + p_1 \wedge (p_2 p_1 p_2) - p_1 \wedge (p_2 p_1 p_2)] = \frac{1}{4} [2p_1 \cdot (p_2 p_1 p_2)] \\ &= \frac{1}{2} [p_1 \cdot (p_2 p_1 p_2)], \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
 p_2 p_1 p_2 &= p_2(p_1 p_2) = p_2(p_1 \cdot p_2 + p_1 \wedge p_2) = p_2(p_1 \cdot p_2) + p_2(p_1 \wedge p_2) \\
 &= p_2(p_1 \cdot p_2) + p_2 \cdot (p_1 \wedge p_2) + p_2 \wedge (p_1 \wedge p_2) \\
 &= p_2(p_1 \cdot p_2) + (p_2 \cdot p_1)p_2 - (p_2 \cdot p_2)p_1 \\
 &= p_2(p_1 \cdot p_2) + (p_2 \cdot p_1)p_2 \\
 &= 2(p_1 \cdot p_2)p_2.
 \end{aligned}$$

Logo,

$$(p_1 \wedge p_2)^2 = p_1 \cdot [(p_1 \cdot p_2)p_2] = (p_1 \cdot p_2)p_1 \cdot p_2 = (p_1 \cdot p_2)^2,$$

mostrando (2.35).

Notemos que

$$\begin{aligned}
 e_\infty \cdot p_p^{-*} &= e_\infty \cdot (p_1 \wedge p_2) = (e_\infty \cdot p_1)p_2 - (e_\infty \cdot p_2)p_1 \\
 &= (e_\infty \cdot e_0)p_2 - (e_\infty \cdot e_0)p_1 \\
 &= p_1 - p_2.
 \end{aligned}$$

Então, usando a definição de inversa (2.18), obtemos

$$\frac{1}{p_1 - p_2} = \frac{p_1 - p_2}{(p_1 - p_2)^2}.$$

Como

$$\begin{aligned}
 (p_1 - p_2)^2 &= (p_1 - p_2)(p_1 - p_2) = p_1^2 - p_1 p_2 - p_2 p_1 + p_2^2 = -(p_1 p_2 + p_2 p_1) \\
 &= -(p_1 \cdot p_2 + p_1 \wedge p_2 + p_2 \cdot p_1 + p_2 \wedge p_1) = -2(p_1 \cdot p_2),
 \end{aligned}$$

então,

$$\frac{1}{e_\infty \cdot p_p^{-*}} = \frac{1}{p_1 - p_2} = -\frac{p_1 - p_2}{2(p_1 \cdot p_2)} = \frac{1}{2} \frac{p_2 - p_1}{p_1 \cdot p_2}. \quad (2.36)$$

Portanto, por (2.36) e (2.35), obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{p_p^{-*} - \sqrt{p_p^{-*} \cdot p_p^{-*}}}{e_\infty \cdot p_p^{-*}} &= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} (p_2 - p_1) (p_1 \wedge p_2 - p_1 \cdot p_2) = \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} (p_1 - p_2) p_2 p_1 \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} (p_1 p_2 p_1 - p_2^2 p_1) = \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} p_1 (p_2 p_1) \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} p_1 (p_2 \cdot p_1 + p_2 \wedge p_1) \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} \left[(p_2 \cdot p_1) p_1 + p_1 (p_2 \wedge p_1) \right] \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} \left[(p_1 \cdot p_2) p_1 + p_1 \cdot (p_2 \wedge p_1) + p_1 \wedge (p_2 \wedge p_1) \right] \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} \left[(p_1 \cdot p_2) p_1 + (p_1 \cdot p_2) p_1 - (p_1 \cdot p_1) p_2 \right] \\
&= \frac{1}{2 p_1 \cdot p_2} \left[(p_1 \cdot p_2) p_1 + (p_1 \cdot p_2) p_1 \right] \\
&= p_1,
\end{aligned}$$

que é o resultado procurado. De forma análoga, obtemos p_2 ,

$$\frac{-p_p^{-*} + \sqrt{p_p^{-*} \cdot p_p^{-*}}}{e_\infty \cdot p_p^{-*}} = p_2.$$

2.8 Interseção e união com a AGC

Vimos que na AGC os subespaços são representados por *blades*. Além disso, os *blades* possuem informações como orientação e magnitude do subespaço que codifica. Já mencionamos que, para realizar a interseção e a união de subespaços, é importante conhecermos a orientação relativa entre os subespaços envolvidos. A AGC possui duas operações, conhecidas como *join* e *meet*, que permitem realizarmos a interseção e união de subespaços de forma eficiente. De fato, estas operações são produtos através dos quais podemos obter as conhecidas operações de interseção e união de subespaços, tanto para os casos comuns, como para casos particulares. Por exemplo, é possível realizarmos a interseção de uma reta contida em um plano, obtendo uma reta como resultado; ou a interseção de uma reta não paralela a um plano, resultando em um ponto. Isto exemplifica casos em que a interseção entre objetos 2D e 1D pode ser tanto objetos 1D como 0D, *i.e.*, escalares. A seguir mostraremos como tal característica da interseção é contemplada pela operação *meet*. Através do *meet* podemos determinar sem ambiguidades o subespaço resultante da interseção.

Construção do *meet* e do *join*. Suponha que desejamos realizar a interseção entre dois subespaços representados pelos *blades* A e B . Denotemos por M a parte comum entre os *blades* A e B . Ou seja,

$$M = A \cap B.$$

Por definição M é um *blade*. Já que M é a interseção entre A e B , este é o maior subespaço que pertence tanto a A quanto a B . Por outro lado, denotemos por J o menor subespaço que contém os subespaços A e B . Logo,

$$J = A \cup B. \quad (2.37)$$

Como A e B são *blades*, estes podem ser fatorados através do produto exterior de forma que

$$A = A' \wedge M, \quad B = M \wedge B',$$

onde A' e B' são as partes de A e B , respectivamente, que não contém M . Sendo assim, podemos escrever (2.37) como

$$J = A' \wedge M \wedge B'.$$

Como A' e B' não contém M , podemos escolher uma base para A' e B' tal que todos seus elementos sejam ortogonais a M . Consequentemente, sob esta base, os elementos de A' e B' são ortogonais a M^{-1} . Com isso, usando as contrações via produto interno (2.4), obtemos

$$A' = A \rfloor M = A \rfloor M^{-1} = (A' \wedge M) \rfloor M^{-1}, \quad (2.38)$$

$$B' = M \rfloor B = M^{-1} \rfloor B = M^{-1} \rfloor (M \wedge B'). \quad (2.39)$$

As identidades acima eliminam ambiguidades que poderiam aparacer caso reescalamos o *blade* M , digamos por um fator μ . Isto é, se multiplicamos M por μ , então, pela definição de *blade*, aparece um fator $1/\mu$ reescalando seu inverso M^{-1} . Ou seja, para todo $\mu \in \mathbb{R}$ não nulo, temos

$$M \mapsto \mu M \quad \implies \quad M^{-1} \mapsto \frac{1}{\mu} M^{-1}.$$

Na definição de *meet* e *join* desejamos que os *blades* M e J obtidos sejam invariantes sob reescalamiento. Para evitar esta ambiguidade usaremos as identidades (2.38) e (2.39). Já que ambas expressões envolvem tanto M como M^{-1} , os fatores μ e $\frac{1}{\mu}$ de possíveis reescalamentos se compensam. Assim, ambas expressões, e também as demais aqui obtidas para *join* e *meet*, são invariantes sob reescalamiento. Além disso, através de tais identidades podemos escrever o *join* como

$$J = A \wedge B' = A \wedge (M^{-1} \rfloor B) \quad \text{ou} \quad J = A' \wedge B = (A \rfloor M^{-1}) \wedge B. \quad (2.40)$$

Usando a identidade $1 = J \cdot J^{-1}$, ficamos com

$$M = (B \rfloor J^{-1}) \rfloor A. \quad (2.41)$$

As equações (2.40) e (2.41) definem as operações de *join* e *meet*. Notemos que ambas estão relacionadas, visto que de posse do *meet* determinamos o *join*, e vice-versa. Na prática, é comum determinarmos primeiramente o *join*. Isso porque, através de uma análise

adequada dos subespaços a serem intersectados, conseguimos obter *a priori* um *blade* que seja proporcional ao subespaço que contém a operação de interseção, *i.e.*, ao *join*. Assim, conseguimos definir o *join*.

Observações. Em [14], há um algoritmo de complexidade $O(n^2)$ para se obter o *join* e *meet* simultaneamente para o problema de interseção de esferas. Embora, em certos problemas, esse algoritmo possa levar a uma complexidade computacional exponencial, na prática é possíveis explorarmos as características específicas do problema e reduzir o seu custo. Em nosso trabalho, uma análise das particularidades da interseção entre esferas permitiu evitarmos o uso do *join*.

Assim como definimos o *meet* para obter a interseção entre dois subespaços, através de relações de dualidade é possível realizarmos a interseção através do *join*. No Capítulo 4, veremos como isso se dá. Aqui optamos por construir o *join* e *meet* seguindo a maneira usual da literatura na área, pois esta permite uma interpretação natural das operações realizadas entre os subespaços. De forma geral, dualizando temos que

$$M^* = (A \cap B)^* = B^* \wedge A^*,$$

onde a dualização de A e B são com respeito ao *join*, *i.e.*, $A^* = AJ^{-1}$ e $B^* = BJ^{-1}$. Isso mostra que, de posse da representação dual de objetos no espaço conforme, a interseção pode se reduzir ao produto exterior, o que é análogo a definição de *join* apresentada inicialmente.

Exemplo da não-linearidade da interseção. Vejamos um exemplo de como obter a interseção entre os *blades* $a = \sum_{i=1}^3 \alpha_i e_i$ e $B = e_1 \wedge e_2$. Geometricamente, os *blades* a e B representam, respectivamente, uma reta e um plano contendo a origem do \mathbb{R}^3 .

A princípio não temos informação sobre a posição relativa entre a e B . No entanto, caso estes subespaços sejam paralelos, então a reta determinada por a deve estar contida no plano B . Ou seja, sob tal configuração, é esperado que o resultado da interseção entre a e B seja uma reta, *i.e.*, um 1-*blade*. Portanto, o resultado da interseção é um subespaço 1D, caso estes sejam paralelos. Logo, o subespaço onde ocorre a interseção deve ser 2D, de forma que o *join* J pode ser escolhido como $J = I_2 = e_1 \wedge e_2$. Assumindo a configuração mencionada, através de (2.41), obtemos a interseção entre a e B :

$$a \cap B = M = (B \rfloor I_2) \rfloor a = \alpha \rfloor a = \alpha \cdot a = \alpha \cdot \mathbf{a} = \alpha \mathbf{a}, \quad (2.42)$$

onde α é o escalar obtido por $\alpha = B \rfloor I_2$.

Agora suponhamos que a e B não sejam paralelos. Então, podemos escolher como *join* J o pseudoescalar $I_3 = e_1 \wedge e_2 \wedge e_3$. Logo, por (2.41),

$$a \cap B = M = (B \rfloor I_3) \rfloor a = B^* \rfloor a = b \rfloor a = b \cdot a = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\| \sin(\theta), \quad (2.43)$$

onde \mathbf{b} é um vetor unitário normal ao plano B .

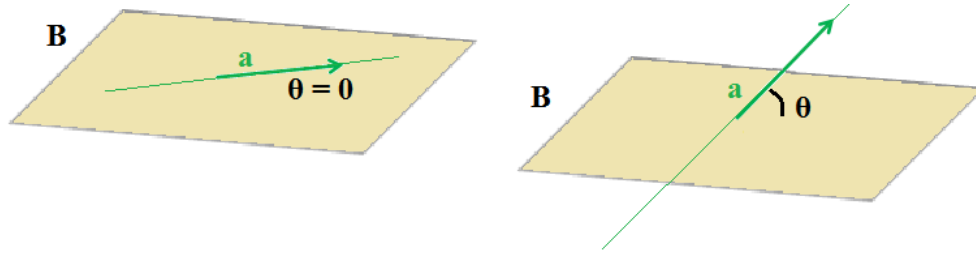


Figura 12 – Configurações para a interseção dos *blades* a e B .

A Figura 12 ilustra os blades a e B envolvidos na interseção.

Observações. Comparando (2.42) e (2.43) percebemos que, caso tivéssemos escolhido um *join* inadequado no caso de a ser paralelo a B , o resultado da interseção seria nulo. Este comportamento do *meet* permite identificarmos quando um 1-blade pertence a um k -blade. De fato, este resultado equivale a (2.20).

3 O problema na abordagem clássica

Na abordagem clássica [10, 11, 9] usamos ferramentas da álgebra linear e de análise de matrizes [22, 21, 32] para obter o resultado da interseção entre esferas no \mathbb{R}^n . Em tal abordagem, ao invés de resolver o sistema não-linear (1.1) de forma direta, obtemos um problema equivalente que é linear. Neste capítulo veremos como se dá o processo de linearização para diferentes configurações dos centros das esferas a serem intersectadas. O efeito de se acrescentar uma casca esférica ao problema também é apresentado [11].

3.1 Primeiro método - centros L.I.

Assim como em (1.1), consideremos n esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i , cujos centros \mathbf{a}_i são L.I., sendo $i = 1, \dots, n$. Para obtermos a interseção destas n esferas temos que resolver o sistema (1.1) com $m = n$. Ou seja, temos que obter os pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, tais que

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2, \quad (3.1)$$

onde $i = 1, \dots, n$. Como $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^n$ é L.I., a matriz cujas colunas são os centros \mathbf{a}_i , *i.e.*,

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \dots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix},$$

é não-singular. Expandindo (3.1), ficamos com

$$\|\mathbf{x}\|^2 - 2\mathbf{x}^t \mathbf{a}_i + \|\mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2.$$

A expressão acima pode ser escrita de forma compacta como

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = \frac{r + b_i}{2},$$

com $r = \|\mathbf{x}\|^2$ e $b_i = \|\mathbf{a}_i\|^2 - d_i^2$, para $i = 1, \dots, n$. Ou ainda,

$$A^t \mathbf{x} = \frac{r\mathbf{e} + \mathbf{b}}{2}, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{e} = [1 \dots 1]$, $\mathbf{b} = [b_1 \dots b_n]$ e A^t denota a transposta da matriz A . Como a matriz A é não-singular, A^t é não-singular com inversa A^{-t} . Logo, por (3.2), obtemos

$$\mathbf{x} = \frac{1}{2} (r\mathbf{u} + \mathbf{v}), \quad (3.3)$$

sendo $\mathbf{u} = A^{-t}\mathbf{e}$ e $\mathbf{v} = A^{-t}\mathbf{b}$, *i.e.*, \mathbf{u} e \mathbf{v} são soluções (únicas) de

$$\begin{cases} A^t \mathbf{u} = \mathbf{e}, \\ A^t \mathbf{v} = \mathbf{b}. \end{cases} \quad (3.4)$$

Usando a definição de r e (3.3), temos que

$$4r = 4\mathbf{x}^t\mathbf{x} = \left(r\mathbf{u} + \mathbf{v}\right)^t \left(r\mathbf{u} + \mathbf{v}\right).$$

Ou seja, r satisfaz

$$\mathbf{u}^t\mathbf{u}r^2 + (2\mathbf{u}^t\mathbf{v} - 4)r + \mathbf{v}^t\mathbf{v} = 0,$$

que é uma equação quadrática em r com raízes dadas por

$$r = \frac{2 - \mathbf{u}^t\mathbf{v} \pm \sqrt{\Delta}}{\mathbf{u}^t\mathbf{u}}, \quad (3.5)$$

onde $\Delta = (2 - \mathbf{u}^t\mathbf{v})^2 - \mathbf{u}^t\mathbf{u}\mathbf{v}^t\mathbf{v}$. Portanto, por (3.5), concluímos que: (i) se $\Delta < 0$, então a solução real é vazia; (ii) se $\Delta \geq 0$, então os pontos da interseção são obtidos computando (3.5) e substituindo em (3.3), *i.e.*,

$$\mathbf{x} = \frac{1}{2} \left[\frac{2 - \mathbf{u}^t\mathbf{v} \pm \sqrt{\Delta}}{\mathbf{u}^t\mathbf{u}} + \mathbf{v} \right].$$

Computacionalmente, os valores de \mathbf{u} e \mathbf{v} em (3.4) são obtidos através da fatoração LU em A^t e usando a definição (3.3). Logo, o custo computacional desse método é $O(n^3)$.

3.2 Segundo método - centros A.I.

Consideremos n esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i , cujos centros \mathbf{a}_i são A.I., onde $i = 1, \dots, n$. Já que nem todo conjunto A.I. é L.I., esse caso generaliza o do primeiro método. De fato, uma maneira de obter um conjunto A.I. a partir de um L.I. é realizando uma translação do segundo. A recíproca também é válida. Logo, o conjunto $\{\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_n, \dots, \mathbf{a}_{n-1} - \mathbf{a}_n\}$, obtido através da translação por $-\mathbf{a}_n$ do conjunto dos n centros \mathbf{a}_i , é L.I. e a matriz $n \times (n - 1)$

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_n, \dots, \mathbf{a}_{n-1} - \mathbf{a}_n \end{bmatrix},$$

possui $n - 1$ colunas L.I. Isto implica em \bar{A} ter posto completo, *i.e.*, $\text{posto}(\bar{A}) = n - 1$. Dessa maneira, se $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ satisfaz (3.1) e os centros \mathbf{a}_i são A.I., após a translação de \mathbf{x} dada por $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{a}_n$, os pontos na solução são tais que

$$\|\bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n)\|^2 = d_i^2, \quad (3.6)$$

para $i = 1, \dots, n$. Em particular, quando $i = n$, obtemos

$$\|\bar{\mathbf{x}}\|^2 = d_n^2. \quad (3.7)$$

Expandindo (3.6), para $i \neq n$, temos que

$$\|\bar{\mathbf{x}}\|^2 - 2\bar{\mathbf{x}}^t(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n) + \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n\|^2 = d_i^2.$$

Então, por (3.7), reescrevemos a expressão acima como

$$d_n^2 - 2\bar{\mathbf{x}}^t(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n) + \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n\|^2 = d_i^2.$$

Ou ainda, por

$$(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n)^t \bar{\mathbf{x}} = -\frac{1}{2} \left(d_i^2 - d_n^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n\|^2 \right),$$

onde $i = 1, \dots, n-1$. Logo, a expressão acima na forma matricial é dada por

$$\bar{A}^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{c}, \quad (3.8)$$

onde $\mathbf{c} = [c_1 \dots c_{n-1}]$, $c_i = -\frac{1}{2} \left(d_i^2 - d_n^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_n\|^2 \right)$ e $i = 1, \dots, n-1$. Como este sistema é subdeterminado e de posto completo, então possui infinitas soluções. No entanto, buscamos soluções de (3.8) que também sejam soluções de (3.6). Para isso consideramos a decomposição QR de \bar{A} ,

$$\bar{A} = QR = Q \begin{bmatrix} \bar{R} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

onde Q é uma matriz ortogonal $n \times n$ e \bar{R} é uma matriz $(n-1) \times (n-1)$ não-singular e triangular superior. Assim, substituindo (3.9) em (3.8), obtemos

$$R^t Q^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{c},$$

o que equivale a resolvermos

$$R^t \mathbf{w} = \mathbf{c}, \quad (3.10)$$

e, em seguida,

$$Q^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{w}. \quad (3.11)$$

Para resolvermos (3.10), definimos

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ z \end{bmatrix}, \quad (3.12)$$

onde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n-1}$ e $z \in \mathbb{R}$. Então, reescrevemos (3.10) como

$$\begin{bmatrix} \bar{R}^t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ z \end{bmatrix} = \mathbf{c}.$$

Ou seja,

$$\bar{R}^t \mathbf{y} = \mathbf{c}.$$

Como \bar{R}^t é não-singular o sistema acima tem solução única. Agora precisamos encontrar os valores de z em (3.12).

Já que $Q^t = Q^{-1}$, usando a definição de $\bar{\mathbf{x}}$ e \mathbf{w} em (3.11), obtemos

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{a}_n = Q\mathbf{w} + \mathbf{a}_n = Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ z \end{bmatrix} + \mathbf{a}_n, \quad (3.13)$$

onde \mathbf{w} é dado por (3.12). Já que \mathbf{x} é tal que

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2,$$

para $i = 1, \dots, n$, em particular, temos

$$\left\| Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ z \end{bmatrix} + \mathbf{a}_n - \mathbf{a}_n \right\|^2 = d_n^2,$$

quando $i = n$. Logo,

$$\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ z \end{bmatrix} \right\|^2 = d_n^2,$$

pois Q é ortogonal e, conseqüentemente, preserva a norma-2. Com isso, obtemos

$$z = \pm\sqrt{\delta}, \quad (3.14)$$

com $\delta = d_n^2 - \|\mathbf{y}\|^2$. Portanto, concluímos que: (i) se $\delta < 0$, a solução é vazia; (ii) se $\delta = 0$, então \mathbf{x} é dado por (3.13) com $z = 0$; e (iii) se $\delta > 0$, então obtemos dois valores de z por (3.14) e as respectivas soluções \mathbf{x} por (3.13).

3.3 Terceiro método - caso geral

Consideremos m esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i e centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$, onde $i = 1, \dots, m$. Nos dois métodos anteriores, a interseção entre as esferas foi uma das três possibilidades: (i) vazia; (ii) um ponto; ou (iii) dois pontos. Agora, além destas possibilidades, a interseção também pode ser uma $(n - k)$ -esfera.

Após transladarmos os m centros $\mathcal{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ por $-\mathbf{a}_m$, obtemos o conjunto $\{\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_m, \dots, \mathbf{a}_{m-1} - \mathbf{a}_m, 0\}$ e definimos $\bar{\mathcal{A}} = \{\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_m, \dots, \mathbf{a}_{m-1} - \mathbf{a}_m\}$. O invólucro afim de \mathcal{A} tem dimensão k , onde $1 \leq k \leq \min\{m - 1, n\}$. Dessa maneira, a matriz $n \times (m - 1)$ cujas colunas são os centros em $\bar{\mathcal{A}}$ dada por

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_m, \dots, \mathbf{a}_{m-1} - \mathbf{a}_m \end{bmatrix}$$

é tal que $\text{posto}(\bar{A}) = k$. Ou seja, \bar{A} pode não ter posto completo. Suponhamos que o ponto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ esteja na interseção das m esferas, *i.e.*, satisfaz (3.1). Então, após a translação de \mathbf{x} por $-\mathbf{a}_m$, temos que $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{a}_m$ está na interseção das esferas,

$$\|\bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m)\|^2 = d_i^2, \quad (3.15)$$

para $i = 1, \dots, m$. Em particular, quando $i = m$,

$$\|\bar{\mathbf{x}}\|^2 = d_m^2. \quad (3.16)$$

Expandindo (3.15), temos que

$$\|\bar{\mathbf{x}}\|^2 - 2\bar{\mathbf{x}}^t(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m) + \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2 = d_i^2.$$

Então, usando (3.16), reescrevemos a expressão acima como

$$(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m)^t \bar{\mathbf{x}} = -\frac{1}{2} \left(d_i^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2 \right),$$

onde $i = 1, \dots, m-1$. Ou ainda, na forma matricial,

$$\bar{A}^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{c}, \quad (3.17)$$

onde $\mathbf{c} = [c_1 \dots c_{m-1}]$ e $c_i = -\frac{1}{2} \left(d_i^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2 \right)$, sendo $i = 1, \dots, m-1$. Como $\text{posto}(\bar{A}) = k$, s.p.g.¹, supomos que as k primeiras colunas de \bar{A} são L.I. Dessa maneira, a decomposição QR de \bar{A} é dada por

$$\bar{A} = QR = Q \begin{bmatrix} \bar{R} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

onde Q é uma matriz ortogonal $n \times n$ e \bar{R} é uma matriz $k \times (m-1)$ de posto completo. Logo, usando a decomposição (3.18) em (3.17), ficamos com

$$R^t Q^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{c}.$$

O problema acima equivale a resolvermos

$$R^t \mathbf{w} = \mathbf{c}, \quad (3.19)$$

e

$$Q^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{w}. \quad (3.20)$$

Seja

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix},$$

onde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$ e $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-k}$. Então, (3.19) pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} \bar{R}^t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} = \mathbf{c}.$$

Daí,

$$\bar{R}^t \mathbf{y} = \mathbf{c}. \quad (3.21)$$

¹ Abreviação de "sem perda de generalidade".

Como \bar{R}^t tem posto completo², o sistema acima tem solução única se \mathbf{c} está na imagem de \bar{R}^t ³. Caso contrário, o sistema (3.19) não tem solução e a interseção entre as m esferas é vazia. Suponhamos que (3.21) tenha solução. Então usando a definição de $\bar{\mathbf{x}}$ e de \mathbf{w} em (3.20), obtemos

$$\mathbf{x} = Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} + \mathbf{a}_m. \quad (3.22)$$

Como procuramos \mathbf{x} tal que

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2,$$

onde $i = 1, \dots, m$, então, para $i = m$, temos

$$\left\| Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} + \mathbf{a}_m - \mathbf{a}_m \right\|^2 = d_m^2.$$

Logo,

$$\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} \right\|^2 = d_m^2, \quad (3.23)$$

pois Q é ortogonal e preserva a norma-2. Notemos que (3.23) é a equação de uma n -esfera no \mathbb{R}^n , com centro na origem e raio d_m . Expandindo (3.23), obtemos

$$\|\mathbf{y}\|^2 + \|\mathbf{z}\|^2 = d_m^2.$$

Dessa maneira,

$$\mathbf{z}_1^2 + \dots + \mathbf{z}_{n-k}^2 = \rho^2, \quad (3.24)$$

onde $\rho^2 = d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2$. Portanto, analisando o lado direito da expressão acima, temos um dos seguintes casos para a solução: (i) se $\rho^2 < 0$, a solução é vazia; (ii) se $\rho^2 = 0$, então

² De fato, a matriz \bar{R}^t é $(m-1) \times k$ e tal que $\text{posto}(\bar{R}^t) = \text{posto}(\bar{R}) = \text{posto}(\bar{A}) = k$. Notemos que, por um lado, $\text{posto}(A) = \text{posto}(QR) \leq \text{posto}(R)$. Por outro, $\text{posto}(R) = \text{posto}(Q^t A) \leq \text{posto}(A)$. Portanto, como R tem k colunas não nulas, isso mostra que $\text{posto}(\bar{A}) = \text{posto}(R) = \text{posto}(\bar{R}^t) = \text{posto}(\bar{R}) = k$.

³ Isto é uma consequência de que a decomposição QR da matriz \bar{A} é dada por

$$\bar{A} = QR = Q \begin{bmatrix} \bar{R} \\ 0 \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} \bar{R}_1 & \bar{R}_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

onde Q é uma matriz $n \times n$ ortogonal, R_1 é uma matriz $k \times k$ não-singular e triangular superior e \bar{R}_2 é uma matriz $k \times (m-1-k)$. Como $\bar{R} = [\bar{R}_1 \ \bar{R}_2]$, então podemos reescrever (3.21) como

$$\begin{bmatrix} \bar{R}_1^t \\ \bar{R}_2^t \end{bmatrix} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{bmatrix},$$

onde $[\mathbf{c}_1 \ \mathbf{c}_2] = \mathbf{c}$, $\mathbf{c}_1 \in \mathbb{R}^k$ e $\mathbf{c}_2 \in \mathbb{R}^{n-k}$. Logo, y será solução se satisfizer o sistema

$$\begin{cases} \bar{R}_1^t y = \mathbf{c}_1, \\ \bar{R}_2^t y = \mathbf{c}_2. \end{cases}$$

De forma equivalente, como \bar{R}_1^t é não-singular, da primeira equação do sistema acima, temos que $\mathbf{y} = \bar{R}_1^{-t} \mathbf{c}_1$ será solução de (3.21) se satisfizer a condição de $\|\bar{R}_2^t \mathbf{y} - \mathbf{c}_2\| = 0$. Neste caso, tal \mathbf{y} é único e pertence a imagem de \bar{R}^t .

$\mathbf{z} = 0$ e \mathbf{x} é dado por (3.22); ou (iii) se $\rho^2 > 0$, obtemos os valores de \mathbf{z} por (3.24) e os respectivos pontos \mathbf{x} na interseção por (3.22). Notemos que, no caso (iii), como $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$, temos a interseção das m esferas com um subespaço de dimensão k , o que resulta em uma $(n - k)$ -esfera do \mathbb{R}^n .

Observação. Em particular, quando $m = n$, então $k = n - 1$, de forma que (iii) se reduz a um par de pontos. De fato, neste caso temos a interseção de n esferas no \mathbb{R}^n cujos centros são A.I., e o problema se reduz ao segundo método visto anteriormente.

3.4 Interseção de esferas e uma casca esférica

Consideremos m esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i e centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$, sendo $i = 1, \dots, m$, e uma casca esférica $\bar{S}_{m+1}(\mathbf{a}_{m+1}, \bar{d}_{m+1}, \underline{d}_{m+1})$ de centro $\mathbf{a}_{m+1} \in \mathbb{R}^n$ e raios $\bar{d}_{m+1}, \underline{d}_{m+1}$ tais que $\bar{d}_{m+1} > \underline{d}_{m+1}$. Como antes, denotemos por k a dimensão de $\text{aff}(\mathcal{A})$, onde $\mathcal{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ e $1 \leq k \leq \min\{m - 1, n\}$. Procuramos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\begin{cases} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2, & i = 1, \dots, m, \\ \underline{d}_{m+1}^2 \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_{m+1}\|^2 \leq \bar{d}_{m+1}^2. \end{cases} \quad (3.25)$$

Baseado na ideia apresentada no terceiro método visto acima, queremos mostrar que a interseção entre as esferas e a casca esférica pode ser: (i) vazia; (ii) um ponto; (iii) uma $(n - k)$ -esfera; ou (iv) a união de $(n - k - 1)$ -esferas.

Temos duas possibilidades para o invólucro afim do conjunto formado por todos os centros, *i.e.*, de $\mathcal{C} = \mathcal{A} \cup \{\mathbf{a}_{m+1}\}$: $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k + 1$; ou $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k$.

Primeiro caso. Suponhamos que $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k + 1$. Então, transladando os centros \mathcal{A} por $-\mathbf{a}_m$, obtemos o conjunto $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_{m-1}, \bar{\mathbf{a}}_m\}$. Como $\dim(\text{aff}(\mathcal{A})) = k$, podemos supor, s.p.g, que o conjunto formado pelos k primeiros elementos e o último elemento de $\bar{\mathcal{A}}$ é L.I. Assim, a matriz

$$\bar{A} = [\bar{\mathbf{a}}_1, \dots, \bar{\mathbf{a}}_m], \quad (3.26)$$

onde $\bar{\mathbf{a}}_i = \mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m$, para $i = 1, \dots, m - 1$, e $\bar{\mathbf{a}}_m = \mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m$, tem posto $k + 1$. Seja E a matriz de permutação que antecipa a coluna $\bar{\mathbf{a}}_m$ de \bar{A} para a posição da coluna $k + 1$, e desloca as colunas $k + 1$ até $m - k - 1$ para as últimas posições. Isto é, E é tal que⁴

$$\bar{A}E = [\bar{A}_{1:k}, \bar{A}_{k+1:m-1}, \bar{\mathbf{a}}_m]E = [\bar{A}_{1:k}, \bar{\mathbf{a}}_m, \bar{A}_{k+1:m-1}].$$

Suponhamos que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ seja um ponto na interseção, ou seja, satisfaz (3.25). Transladando \mathbf{x} por $-\mathbf{a}_m$, obtemos a solução transladada $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{a}_m$ e (3.25) assume a

⁴ A notação para o subíndice em $\bar{A}_{1:k}$ indica que esta matriz é formada pelas colunas 1 a k de \bar{A} .

forma

$$\begin{cases} \|\bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m)\|^2 = d_i^2, & i = 1, \dots, m, \\ \underline{d}_{m+1}^2 \leq \|\bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m)\|^2 \leq \bar{d}_{m+1}^2. \end{cases} \quad (3.27)$$

Logo, para $i = m$,

$$\|\bar{\mathbf{x}}\|^2 = d_m^2. \quad (3.28)$$

Já para $i \neq m$, por (3.27), obtemos

$$\begin{cases} \|\bar{\mathbf{x}}\|^2 - 2\bar{\mathbf{x}}^t(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m) + \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2 = d_i^2, & i = 1, \dots, m-1, \\ \underline{d}_{m+1}^2 \leq \|\bar{\mathbf{x}}\|^2 - 2\bar{\mathbf{x}}^t(\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m) + \|\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m\|^2 \leq \bar{d}_{m+1}^2. \end{cases}$$

Usando (3.28), o sistema acima assume a seguinte forma:

$$\begin{cases} (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m)^t \bar{\mathbf{x}} = -\frac{1}{2}(d_i^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2), & i = 1, \dots, m-1, \\ -\frac{1}{2}(\bar{d}_{m+1}^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m\|^2) \leq (\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m)^t \bar{\mathbf{x}} \leq -\frac{1}{2}(\underline{d}_{m+1}^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m\|^2). \end{cases}$$

Ou ainda,

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{a}}_i^t \bar{\mathbf{x}} = c_i, & i = 1, \dots, m-1, \\ \underline{c}_{m+1} \leq \bar{\mathbf{a}}_m^t \bar{\mathbf{x}} \leq \bar{c}_{m+1}, \end{cases} \quad (3.29)$$

onde $c_i = -\frac{1}{2}(d_i^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m\|^2)$, $\underline{c}_{m+1} = -\frac{1}{2}(\bar{d}_{m+1}^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m\|^2)$, $\bar{c}_{m+1} = -\frac{1}{2}(\underline{d}_{m+1}^2 - d_m^2 - \|\mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m\|^2)$ e $\bar{\mathbf{a}}_i$ é a coluna i da matriz \bar{A} , definida em (3.26).

Computando a decomposição QR de $\bar{A}E$, temos que

$$\bar{A}E = QR = Q \begin{bmatrix} R_1 & \mathbf{r}_{k+1} & R_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} \bar{R}_1 & \bar{\mathbf{r}}_{k+1} & \bar{R}_2 \\ 0 & \bar{r}_{k+1,k+1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.30)$$

onde as matrizes acima são tais que Q é $n \times n$ e ortogonal; $R_1 = [\bar{R}_1^t \ 0]^t$ é $(k+1) \times k$, com \bar{R}_1 sendo $k \times k$ triangular superior de posto completo; $\mathbf{r}_{k+1} = [\bar{\mathbf{r}}_{k+1} \ \bar{r}_{k+1,k+1}]^t \in \mathbb{R}^{k+1}$, onde $\bar{\mathbf{r}}_{k+1} \in \mathbb{R}^k$ e $\bar{r}_{k+1,k+1} \in \mathbb{R}$; $R_2 = [\bar{R}_2^t \ 0]^t$ é $(k+1) \times (m-k-1)$ e \bar{R}_2 é $k \times (m-k-1)$. Todas essas matrizes são determinadas usando as partições obtidas pela decomposição QR de $\bar{A}E$. A última igualdade do lado direito em (3.30) vem do fato de que as colunas $k+2$ a m de $\bar{A}E$ são combinações lineares das k primeiras colunas, não dependendo da coluna $k+1$. Tal característica dos centros das esferas e da casca esférica fornece essa forma especial para a decomposição QR, de forma que a última linha da matriz R_2 seja nula, conforme vemos em (3.30).

Como $E^t = E^{-1}$, então

$$(\bar{A}E)^t = (QR)^t \implies E^t \bar{A}^t = R^t Q^t \implies \bar{A}^t = ER^t Q^t.$$

Logo, pela decomposição (3.30),

$$\bar{A}^t \bar{\mathbf{x}} = E R^t Q^t \bar{\mathbf{x}} = E \begin{bmatrix} \bar{R}_1^t & 0 & 0 \\ \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t & \bar{r}_{k+1,k+1} & 0 \\ \bar{R}_2^t & 0 & 0 \end{bmatrix} Q^t \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{R}_1^t & 0 & 0 \\ \bar{R}_2^t & 0 & 0 \\ \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t & \bar{r}_{k+1,k+1} & 0 \end{bmatrix} Q^t \bar{\mathbf{x}}. \quad (3.31)$$

Usando a seguinte definição,

$$Q^t \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{w} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

onde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$, $y_{k+1} \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-k-1}$, o sistema (3.31) se reduz a

$$\bar{A}^t \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{R}^t & 0 \\ \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t & \bar{r}_{k+1,k+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} + 0^t \mathbf{z},$$

onde $R = [\bar{R}_1 \quad \bar{R}_2]$. Em vista disso, (3.29) pode ser escrito como

$$\begin{cases} \bar{R}^t \mathbf{y} = \mathbf{c}, \\ \underline{c}_{m+1} \leq \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t & \bar{r}_{k+1,k+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} \leq \bar{c}_{m+1}. \end{cases} \quad (3.33)$$

Ou seja,

$$\begin{cases} \bar{R}^t \mathbf{y} = \mathbf{c}, \\ \underline{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y} \leq \bar{r}_{k+1,k+1} y_{k+1} \leq \bar{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y}, \end{cases} \quad (3.34)$$

onde $\mathbf{c} = [c_1 \dots c_{m-1}]^t$ e c_i é definido como anteriormente. Dessa maneira, assumindo que temos $\mathbf{c} \in \text{Im}(\bar{R}^t)$, então existe um único $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$ determinado pela primeira equação de (3.33) de forma que

$$\underline{\beta} \leq y_{k+1} \leq \bar{\beta}, \quad (3.35)$$

onde

$$\underline{\beta} = \frac{\underline{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y}}{\bar{r}_{k+1,k+1}}, \quad \bar{\beta} = \frac{\bar{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y}}{\bar{r}_{k+1,k+1}}, \quad \text{se } \bar{r}_{k+1,k+1} > 0,$$

e

$$\underline{\beta} = \frac{\bar{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y}}{\bar{r}_{k+1,k+1}}, \quad \bar{\beta} = \frac{\underline{c}_{m+1} - \bar{\mathbf{r}}_{k+1}^t \mathbf{y}}{\bar{r}_{k+1,k+1}}, \quad \text{se } \bar{r}_{k+1,k+1} < 0.$$

Notemos pelas expressões acima que os valores de $\underline{\beta}$ e $\bar{\beta}$ em (3.35) dependem do sinal de $\bar{r}_{k+1,k+1}$.

Como Q é ortogonal e $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{a}_m$, então (3.32) implica em

$$\mathbf{x} = Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} + \mathbf{a}_m. \quad (3.36)$$

Já que \mathbf{x} é um ponto na interseção, então satisfaz o seguinte sistema

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2,$$

onde $i = 1, \dots, m$. Logo, para $i = m$,

$$\left\| Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} + \mathbf{a}_m - \mathbf{a}_m \right\|^2 = d_m^2.$$

Usando a ortogonalidade de Q ,

$$\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ y_{k+1} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} \right\|^2 = d_m^2.$$

Dessa maneira, pela definição de norma-2, podemos escrever a expressão acima como

$$\|\mathbf{y}\|^2 + y_{k+1}^2 + \|\mathbf{z}\|^2 = d_m^2.$$

Portanto,

$$\|\mathbf{z}\|^2 = d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2 - y_{k+1}^2. \quad (3.37)$$

A equação acima tem solução real quando o lado direito é maior ou igual a zero. Esta condição equivale a

$$y_{k+1}^2 \leq d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2.$$

Supondo $d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2 \geq 0$, a desigualdade acima pode ser escrita como

$$-\alpha \leq y_{k+1} \leq \alpha,$$

onde $\alpha = \sqrt{d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2}$. Lembremos que anteriormente obtivemos a condição (3.35) para y_{k+1} . Assim, para que a solução exista temos que ter $y_{k+1} \in [\underline{\beta}, \bar{\beta}] \cap [-\alpha, \alpha]$. Logo, se

$$\max\{\underline{\beta}, -\alpha\} \leq y_{k+1} \leq \min\{\bar{\beta}, \alpha\}, \quad (3.38)$$

então a interseção não é vazia. Por outro lado, se $\bar{\beta} < -\alpha$, ou $\underline{\beta} > \alpha$, ou $d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2 < 0$, temos que a interseção é vazia. Portanto, se a primeira equação de (3.34) tiver solução (única), para cada y_{k+1} satisfazendo (3.38), temos uma $(n - k - 1)$ -esfera. Neste caso, a solução obtida usando (3.36) e (3.37) é a união destas $(n - k - 1)$ -esferas, quando $d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2 > 0$ e y_{k+1} pertencer a um intervalo não degenerado. Se temos $d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2 = 0$, então a solução é um ponto.

Segundo caso. Agora assumiremos que $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k$. Logo, $\dim(\bar{A}) = k$, onde a matriz \bar{A} tem a mesma forma que em (3.26). Computando a decomposição QR de \bar{A} , obtemos

$$\bar{A} = QR = Q \begin{bmatrix} \bar{R} & \bar{\mathbf{r}}_m \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

onde Q é $n \times n$ e ortogonal, \bar{R} é $k \times (n-1)$ e tem posto completo. Então, temos que

$$\bar{A}^t \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{R}^t & 0 \\ \bar{\mathbf{r}}_m^t & 0 \end{bmatrix} Q^t \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \bar{R}^t & 0 \\ \bar{\mathbf{r}}_m^t & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix}, \quad (3.39)$$

onde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k$ e $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n-k}$ e

$$Q^t \bar{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix}. \quad (3.40)$$

Usando (3.29), reescrevemos o sistema (3.39) como

$$\begin{cases} \bar{R}^t \mathbf{y} = \mathbf{c}, \\ \underline{c}_{m+1} \leq \bar{\mathbf{r}}_m^t \mathbf{y} \leq \bar{c}_{m+1}. \end{cases} \quad (3.41)$$

Observemos que, como posto de \bar{R}^t é completo, quando existir (única) solução esta deve satisfazer as desigualdades em (3.41). Neste caso, a solução da interseção entre as esferas é obtida de (3.40), sendo dada por

$$\mathbf{x} = Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} + \mathbf{a}_m,$$

onde \mathbf{z} é determinado da seguinte maneira. Sabemos que a solução \mathbf{x} é tal que satisfaz (3.25) e, em particular, para $i = m$,

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_m\|^2 = \left\| Q \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} \right\|^2 = d_m^2.$$

Ou seja,

$$\mathbf{z}_1^2 + \cdots + \mathbf{z}_{n-k}^2 = \rho^2,$$

onde $\rho^2 = d_m^2 - \|\mathbf{y}\|^2$. Portanto, o resultado da interseção depende de ρ^2 , sendo: (i) vazia, se $\rho^2 < 0$; (ii) um ponto, se $\rho^2 = 0$; ou (iii) uma $(n-k)$ -esfera, se $\rho^2 > 0$.

4 O problema usando a AGC

Nesta capítulo veremos como realizar a interseção de esferas no \mathbb{R}^n construindo uma abordagem que estende a já conhecida na literatura de álgebra geométrica conforme (AGC) [13, 14, 5, 15, 27]. Assumiremos que as esferas são distintas, *i.e.*, nenhuma delas possui, ao mesmo tempo, raios e centros iguais entre si.

4.1 Sobre o sinal do raio de uma $(n-k)$ -esfera

Para classificarmos o resultado da interseção entre esferas, podemos analisar o raio da k -esfera obtida como interseção do problema. No entanto, estaremos utilizando um resultado mais simples que é deduzido a seguir.

Para analisarmos o sinal do quadrado do raio de uma $(n-k)$ -esfera do \mathbb{R}^n representada por σ , conforme (2.21), basta analisarmos o sinal de

$$t = \sigma \cdot \tilde{\sigma}. \quad (4.1)$$

De fato, por (2.23), temos que o sinal do raio r da esfera σ é dado por

$$\text{sgn}(r^2) = - \frac{(-1)^k}{(-1)^{\frac{1}{2}(k-1)(k-2)}},$$

pois $\text{grau}(\sigma) = k$ e $\text{grau}(e_\infty \cdot \sigma) = k - 1$. Logo,

$$\text{sgn}(r^2) = (-1)^{1+k} (-1)^{-\frac{1}{2}(k-1)(k-2)} = (-1)^{-\frac{k^2}{2} + \frac{5k}{2}} = (-1)^{\frac{1}{2}k(1-k)} = \text{sgn}(\sigma \cdot \tilde{\sigma}), \quad (4.2)$$

sendo $\text{sgn}(\tilde{\sigma})$ dado de acordo com (2.16). Notemos que, quando σ for um ponto, usando (4.1), obtemos $t = 0$.

Ao longo deste capítulo vamos analisar o sinal de t (4.1) para determinarmos o resultado obtido da interseção entre as esferas.

4.2 Esferas com centros L.I.

Consideremos n esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i , cujos centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ são L.I., sendo $i = 1, \dots, n$. Representemos essas n esferas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ por

$$\sigma_i = a_i - \frac{d_i^2}{2} e_\infty, \quad (4.3)$$

onde $a_i = e_0 + \mathbf{a}_i + \frac{\|\mathbf{a}_i\|^2}{2} e_\infty$, para $i = 1, \dots, n$.

Um caso particular. Antes de obtermos a interseção para o caso geral nD , vejamos o caso em que $n = 3$. A interseção de duas esferas σ_1 e σ_2 , definidas por (4.3), é dada por

$$\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2.$$

Para qualquer $p \in \mathbb{R}^{4,1}$, temos que

$$0 = p \cdot \kappa = p \cdot (\sigma_1 \wedge \sigma_2) = (p \cdot \sigma_1)\sigma_2 - (p \cdot \sigma_2)\sigma_1. \quad (4.4)$$

Como os centros $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^n$ são L.I., então as esferas $\{\sigma_i\}_{i=1}^n$ são L.I. Logo, os coeficientes de (4.4) são nulos, *i.e.*,

$$\begin{cases} p \cdot \sigma_1 = 0, \\ p \cdot \sigma_2 = 0. \end{cases}$$

Usando o mesmo procedimento feito para obter (2.22), reescrevemos o sistema acima como

$$||\mathbf{x} - \mathbf{a}_i||^2 = d_i^2, \quad (4.5)$$

onde $i = 1, 2$. Isto equivale ao conjunto dos pontos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ pertencentes a ambas esferas, ou seja, que definem um círculo no \mathbb{R}^3 . Prosseguindo, realizamos a interseção do círculo κ com a esfera σ_3 através do produto exterior:

$$p_p = \kappa \wedge \sigma_3.$$

O resultado p_p é um par de pontos, pois de

$$0 = p \cdot p_p = p \cdot (\kappa \wedge \sigma_3) = (p \cdot \kappa)\sigma_3 - (p \cdot \sigma_3)\kappa,$$

e, para todo $p \in \mathbb{R}^{4,1}$, temos que

$$\begin{cases} p \cdot \kappa = 0, \\ p \cdot \sigma_3 = 0. \end{cases}$$

Ou ainda,

$$||\mathbf{x} - \mathbf{a}_i||^2 = d_i^2, \quad (4.6)$$

para $i = 1, 2, 3$. Como o sistema acima representa a interseção de três esferas do \mathbb{R}^3 cujos centros são L.I., então o resultado da solução é um par de pontos no \mathbb{R}^3 .

De posse do par de pontos na forma dual, dado por

$$p_p = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \sigma_3,$$

e com auxílio da fórmula (2.34), podemos obter os pontos do resultado da interseção entre três esferas de forma explícita.

Caso geral. Agora vamos mostrar que a interseção das n esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n é dada por

$$\sigma = \sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n, \quad (4.7)$$

onde cada σ_i é definida por (4.3). De fato, dado um ponto $p \in \mathbb{R}^{n+1,1}$, temos que

$$\begin{aligned} 0 &= p \cdot (\sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n) \\ &= (p \cdot \sigma_1) \wedge \sigma_2 \wedge \cdots \wedge \sigma_n - \sigma_1 \wedge (p \cdot \sigma_2) \wedge \cdots \wedge \sigma_n + \cdots \\ &\quad \cdots - (-1)^n \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \cdots \wedge (p \cdot \sigma_n). \end{aligned}$$

Como $\{\sigma_i\}_{i=1}^n$ é L.I., assim como fizemos para obter (4.5) e (4.6), pela expressão acima obtemos

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2, \quad (4.8)$$

para $i = 1, \dots, n$. O sistema (4.8) é o mesmo que aparece no problema com a abordagem clássica (3.1). Dessa maneira, o resultado será o mesmo que antes. Ou seja, (4.7) realiza a interseção entre as n esferas no \mathbb{R}^n .

Tendo obtido σ (4.7), definimos

$$t = \sigma \cdot \tilde{\sigma}. \quad (4.9)$$

Então, de acordo com o que fizemos em (4.2), o sinal de t (4.9) determina a solução. Portanto, a interseção das n esferas no \mathbb{R}^n é uma das possibilidades: (i) vazia, se $t < 0$; (ii) um ponto, se $t = 0$; ou (iii) dois pontos, se $t > 0$.

Quando a solução são os dois pontos, *i.e.*, é dada por (iii), podemos obtê-los explicitamente através da fórmula (2.34), sendo que no lugar de p_p , usamos σ fornecido por (4.7). No caso da solução ser um ponto, (2.34) fornecerá dois pontos iguais.

4.3 Esferas com centros A.I.

Consideremos n esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n de raios d_i e cujos centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$ são A.I., para $i = 1, \dots, n$. A representação dual dessas n esferas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é definida por

$$\sigma_i = a_i - \frac{d_i^2}{2} e_\infty,$$

onde $a_i = e_0 + \mathbf{a}_i + \frac{\|\mathbf{a}_i\|^2}{2} e_\infty$, para $i = 1, \dots, n$.

Como $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^n$ é A.I., então $\{a_i\}_{i=1}^n$ é L.I., implicando em $\{\sigma_i\}_{i=1}^n$ ser L.I. Logo, podemos realizar a interseção entre as n esferas utilizando o produto exterior, assim como fizemos anteriormente. Dessa maneira, a interseção das n esferas no \mathbb{R}^n é dada por

$$\sigma = \sigma_1 \wedge \cdots \wedge \sigma_n. \quad (4.10)$$

Portanto, tendo obtido (4.10), definimos $t = \sigma \cdot \tilde{\sigma}$ tal que a interseção das n esferas no \mathbb{R}^n é uma das possibilidades: (i) vazia, se $t < 0$; (ii) um ponto, se $t = 0$; ou (iii) dois pontos, se $t > 0$.

Novamente, podemos extrair os pontos da solução através da fórmula (2.34), usando σ obtido em (4.10) no lugar de p_p .

Observação. Analisar o sinal de t é mais simples do que analisar o raio da esfera, visto que não precisamos obter este raio explicitamente.

Destacamos que, embora a literatura de AGC trate do problema de interseção de esferas para casos de centros L.I. e A.I., em espaços 3D desconhecemos uma apresentação rigorosa para casos nD .

4.4 Esferas com centros quaisquer

Consideremos m esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n com raios d_i e centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$, para $i = 1, \dots, m$. A representação dual dessas m esferas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é dada por

$$\sigma_i = a_i - \frac{d_i^2}{2} e_\infty,$$

onde $a_i = e_0 + \mathbf{a}_i + \frac{\|\mathbf{a}_i\|^2}{2} e_\infty$ e $i = 1, \dots, m$. Como no terceiro método da abordagem clássica, transladando os centros $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^m$ por $-\mathbf{a}_m$, obtemos $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^m$, onde definimos $\bar{\mathbf{a}}_i = \mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m$, para $i = 1, \dots, m$. Vimos que $\dim(\text{aff}(\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^m)) = k$ e, assim como antes, $1 \leq k \leq \min\{m-1, n\}$. Além disso, podemos supor, s.p.g.¹, que $\{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^k$ é L.I. Como $\{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^k$ é L.I., a representação destes centros em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ também é L.I., i.e., $\{\bar{a}_i\}_{i=1}^k$ é L.I. Logo, as k primeiras esferas do \mathbb{R}^n representadas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ por $\{\bar{\sigma}_i\}_{i=1}^k$ formam um conjunto L.I. e a interseção

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_1 \wedge \dots \wedge \bar{\sigma}_k \quad (4.11)$$

é a representação dual de uma $(n-k)$ -esfera do \mathbb{R}^n . De fato, dado um ponto $p \in \mathbb{R}^{n+1,1}$, temos que

$$\begin{aligned} 0 &= p \cdot \bar{\sigma} = p \cdot (\bar{\sigma}_1 \wedge \dots \wedge \bar{\sigma}_k) \\ &= (p \cdot \bar{\sigma}_1) \wedge \bar{\sigma}_2 \wedge \dots \wedge \bar{\sigma}_k - \bar{\sigma}_1 \wedge (p \cdot \bar{\sigma}_2) \wedge \dots \wedge \bar{\sigma}_k + \dots \\ &\quad \dots - (-1)^k \bar{\sigma}_1 \wedge \bar{\sigma}_2 \wedge \dots \wedge (p \cdot \bar{\sigma}_k). \end{aligned}$$

Como $\{\bar{\sigma}_i\}_{i=1}^k$ é L.I., da expressão acima, temos que

$$p \cdot \bar{\sigma}_i = 0, \quad (4.12)$$

¹ Sem perda de generalidade.

para $i = 1, \dots, k$. Pelo que fizemos em (4.5) e (4.6), o sistema (4.12) equivale a

$$\|\mathbf{x} - \bar{\mathbf{a}}_i\|^2 = d_i^2,$$

com $i = 1, \dots, k$. Ou seja, $\bar{\sigma}$ (4.11) é a representação dual de uma $(n - k)$ -esfera do \mathbb{R}^n em $\mathbb{R}^{n+1,1}$.

Por fim, realizamos a interseção das $m - k$ esferas restantes com a $(n - k)$ -esfera $\bar{\sigma}$ já obtida em (4.11).

Usando o *join* para interseção. Como as $m - k$ esferas restantes não são L.I. nem A.I., para realizarmos a interseção entre estas e $\bar{\sigma}$ (4.11), a princípio, devemos utilizar a operação de *join*, através da dualização de (2.41). Dessa maneira, a interseção é dada por

$$\sigma = \bar{\sigma}_1 \wedge \dots \wedge \bar{\sigma}_k \mathring{\wedge} \bar{\sigma}_{k+1} \dots \mathring{\wedge} \bar{\sigma}_m,$$

onde $\mathring{\wedge}$ denota o *join*. Notemos que o efeito da interseção acima é o de restringir $\bar{\sigma}$ (4.11).

Interseção das $m - k$ esferas restantes sem o *join*. Como o resultado da interseção das k primeiras esferas transladadas é a $(n - k)$ -esfera (4.11), então quando realizarmos a interseção com a próxima esfera, estaremos realizando a interseção entre o k -blade $\bar{\sigma}$ e o 1-blade $\bar{\sigma}_{k+1}$. Logo, temos duas possibilidades para a interseção: ou $\bar{\sigma}_{k+1}$ pertence a $\bar{\sigma}$, ou não pertence. Supondo que a interseção é não vazia, no primeiro caso, a interseção entre $\bar{\sigma}$ e $\bar{\sigma}_{k+1}$ continua sendo $\bar{\sigma}$. Já no segundo caso, a interseção é uma $(n - k - 1)$ -esfera. Assim, realizamos a interseção do resultado obtido com a esfera $\bar{\sigma}_{k+2}$, que é um 1-blade. Ou seja, temos duas possibilidades para a interseção envolvendo $\bar{\sigma}_{k+2}$, conforme a análise feita quando acrescentamos $\bar{\sigma}_{k+1}$. Analisando desta maneira, continuamos o procedimento acrescentando as $m - k$ esferas restantes, até finalizarmos com a esfera $\bar{\sigma}_m$. Escrevemos este processo por

$$\bar{\sigma}^{(r+1)} = \begin{cases} \bar{\sigma}^{(r)}, & \text{se } \bar{\sigma}^{(r)} \wedge \bar{\sigma}_{r+1} = 0, \\ \bar{\sigma}^{(r)} \wedge \bar{\sigma}_{r+1}, & \text{se } \bar{\sigma}^{(r)} \wedge \bar{\sigma}_{r+1} \neq 0, \end{cases} \quad (4.13)$$

onde $r = k, k + 1, \dots, m - 1$ e $\bar{\sigma}^{(k)} = \bar{\sigma}$ (4.11). Sendo assim, através de (4.13), realizamos a interseção de $\bar{\sigma}$ com as $m - k$ esferas restantes, obtendo

$$\sigma = \bar{\sigma}^{(m)}. \quad (4.14)$$

Portanto, após obter σ (4.14), definimos $t = \sigma \cdot \tilde{\sigma}$, e temos as seguintes possibilidades para a interseção das m esferas no \mathbb{R}^n : (i) vazia, se $t < 0$; (ii) um ponto, se $t = 0$; ou (iii) uma $(n - k)$ -esfera, se $t > 0$.

Observações. A operação de *join* é não-linear, de forma que sua implementação computacional é dificultada. Em [33], há um algoritmo $O(n^2)$ para o *join*. A não linearidade do

join está associada ao pseudoescalar do espaço determinado pela interseção (ou união) dos subespaços em que estamos realizando a operação, visto que a cada etapa da interseção entre m esferas, o pseudoescalar da interseção pode mudar. No caso de sabermos *a priori* o pseudoescalar das etapas, o *join* se torna linear.

Na fórmula recursiva (4.13), exploramos o fato de estarmos realizando interseção exclusivamente entre esferas. Com isso foi possível encontrarmos uma forma de obter a interseção evitando o uso do *join*. Esta particularidade permitiu que a interseção entre esferas fosse realizada basicamente através do produto exterior em todos os casos, resultado que estende os já conhecidos na literatura de AGC.

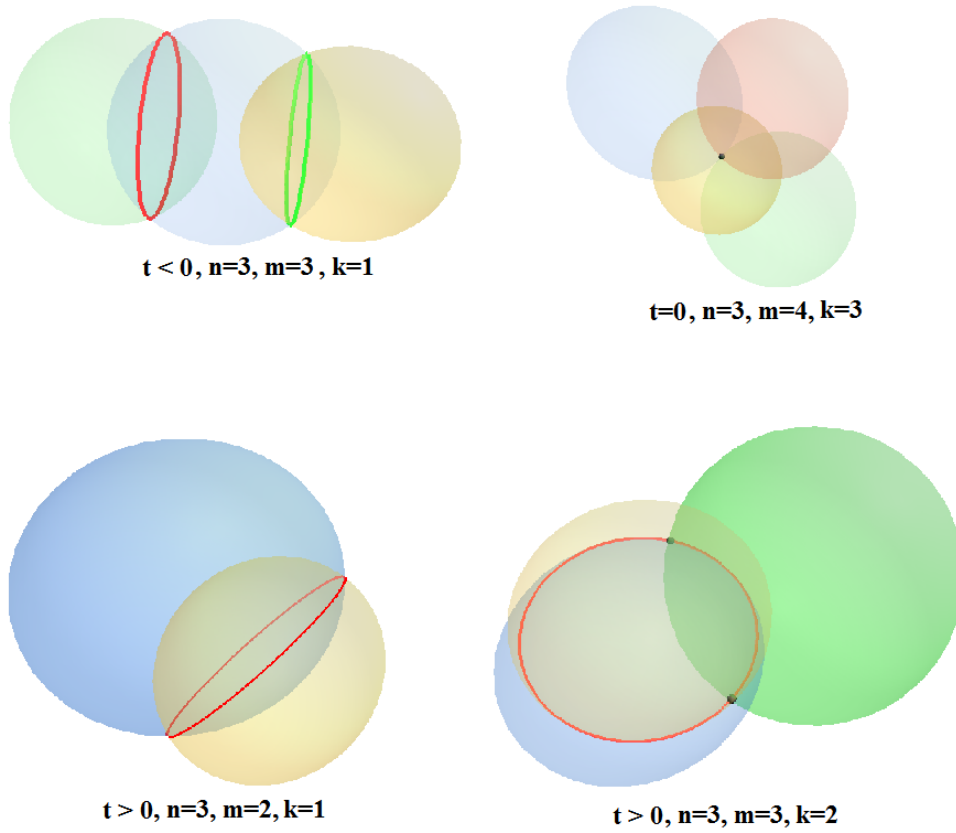


Figura 13 – Interseção entre esferas no \mathbb{R}^3 .

4.5 Interseção de esferas e uma casca esférica via AGC

Consideremos m esferas $S_i(\mathbf{a}_i, d_i)$ no \mathbb{R}^n com raios d_i e centros $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^n$, para $i = 1, \dots, m$ e uma casca esférica \bar{S}_{m+1} de centro $\mathbf{a}_{m+1} \in \mathbb{R}^n$ e raios $\bar{d}_{m+1}, \underline{d}_{m+1}$ tais que $\bar{d}_{m+1} > \underline{d}_{m+1}$. Seja $\dim(\text{aff}(\mathcal{A})) = k$, onde $\mathcal{A} = \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ e $1 \leq k \leq \min\{m-1, n\}$. Procuramos $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\begin{cases} \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 = d_i^2, & i = 1, \dots, m, \\ \underline{d}_{m+1}^2 \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_{m+1}\|^2 \leq \bar{d}_{m+1}^2. \end{cases} \quad (4.15)$$

Usando a AGC, queremos mostrar que a interseção entre as esferas $\{S_i\}_{i=1}^m$ e a casca esférica \bar{S}_{m+1} pode ser: (i) vazia; (ii) um ponto; (iii) uma $(n - k)$ -esfera; ou (iv) a união de $(n - k - 1)$ -esferas.

Consideremos a seguinte representação dual em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ para as esferas $\{S_i\}_{i=1}^m$,

$$\sigma_i = a_i - \frac{d_i^2}{2} e_\infty, \quad (4.16)$$

onde $a_i = e_0 + \mathbf{a}_i + \frac{\|\mathbf{a}_i\|^2}{2} e_\infty$ e $i = 1, \dots, m$. Transladando os centros \mathcal{A} por $-\mathbf{a}_m$, obtemos $\bar{\mathcal{A}} = \{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^m$, com $\bar{\mathbf{a}}_i = \mathbf{a}_i - \mathbf{a}_m$, $i = 1, \dots, m$. Vamos supor, s.p.g., que $\{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^k$ é L.I., onde $k = \dim(\text{aff}(\mathbf{a}_i))$, sendo $1 \leq k \leq \min\{m - 1, n\}$, assim como antes. Já que $\{\bar{\mathbf{a}}_i\}_{i=1}^k$ é L.I., a representação destes centros $\{\bar{a}_i\}_{i=1}^k$ em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ é L.I. Logo, as k esferas do \mathbb{R}^n representadas em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ por $\{\bar{\sigma}_i\}_{i=1}^k$ formam um conjunto L.I. e a interseção é dada por (4.14), sendo: (i) vazia, se $t < 0$; (ii) um ponto, se $t = 0$; ou (iii) uma $(n - k)$ -esfera, se $t > 0$.

Acrescentando uma casca esférica. Assim como na abordagem clássica, temos duas possibilidades para a dimensão do invólucro afim do conjunto formado por todos os centros, *i.e.*, de $\mathcal{C} = \mathcal{A} \cup \{\mathbf{a}_{m+1}\}$.

Primeiro caso. Suponhamos que $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k + 1$. Então, transladando os centros \mathcal{C} por $-\mathbf{a}_m$, definimos o conjunto

$$\bar{\mathcal{C}} = \left\{ \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_m, \dots, \mathbf{a}_{m-1} - \mathbf{a}_m, \mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m \right\}.$$

Como $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k$, podemos supor, s.p.g., que o conjunto formado pelos k primeiros elementos de $\bar{\mathcal{C}}$ e $\{\mathbf{a}_{m+1}\}$ formam um conjunto L.I.

Usando a casca esférica parametrizada pelo raio para obter arcos. Vejamos como obter a interseção entre duas esferas $S_1(\mathbf{a}_1, d_1)$ e $S_2(\mathbf{a}_2, d_2)$ e uma casca esférica $\bar{S}_3(\mathbf{a}_3, \bar{d}_3)$ no \mathbb{R}^3 , onde usamos a mesma notação descrita acima. Suponhamos que os centros $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^3$ sejam L.I. Dessa maneira, a interseção entre as esferas σ_1 e σ_2 (4.16), é o círculo

$$\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2, \quad (4.17)$$

assumindo que $t = \kappa \cdot \tilde{\kappa} > 0$. Então, fazendo a interseção de κ com as cascas interna $\underline{\sigma}_3$ e externa $\bar{\sigma}_3$, definidas como em (4.16), *i.e.*,

$$\underline{\sigma}_3 = a_3 - \frac{d_3^2}{2} e_\infty, \quad \bar{\sigma}_3 = a_3 - \frac{\bar{d}_3^2}{2} e_\infty,$$

obtemos os pares de pontos p_{p_1} e p_{p_2} ,

$$p_{p_1} = \kappa \wedge \underline{\sigma}_3, \quad (4.18)$$

$$p_{p_2} = \kappa \wedge \bar{\sigma}_3. \quad (4.19)$$

Consideremos a casca esférica \bar{S}_3 representada na forma dual por

$$\bar{\sigma}_d = a_3 - \frac{d^2}{2} e_\infty, \quad (4.20)$$

onde $d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3]$ e $a_3 = e_0 + \mathbf{a}_3 + \frac{\|\mathbf{a}_3\|^2}{2} e_\infty \in \mathbb{R}^{4,1}$. Logo, para cada $d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3]$,

$$p_{p_d} = \kappa \wedge \bar{\sigma}_d = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \bar{\sigma}_d,$$

é a representação dual de um par de pontos. Através de (4.18), obtemos

$$p_{p_d} \Big|_{d=\underline{d}_3} = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \bar{\sigma}_d \Big|_{d=\underline{d}_3} = \sigma_1 \wedge \sigma_2 \wedge \bar{\sigma}_3 = p_{p_1}.$$

De forma análoga, usando (4.19),

$$p_{p_d} \Big|_{d=\bar{d}_3} = p_{p_2}.$$

Portanto, a interseção do círculo (4.17) com a casca esférica (4.20) é dada por

$$\{p_{p_d} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_d} = \kappa \wedge \bar{\sigma}_d, d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3]\}. \quad (4.21)$$

O conjunto acima é a união dos pontos que formam os arcos no círculo κ ligando os pares de pontos p_{p_1} e p_{p_2} . Dessa maneira, concluímos que a solução do problema, fornecida por (4.21), é a união de 1-esferas quando $n = 3$ e $k = 1$. Ou seja, é a união de pares de pontos.

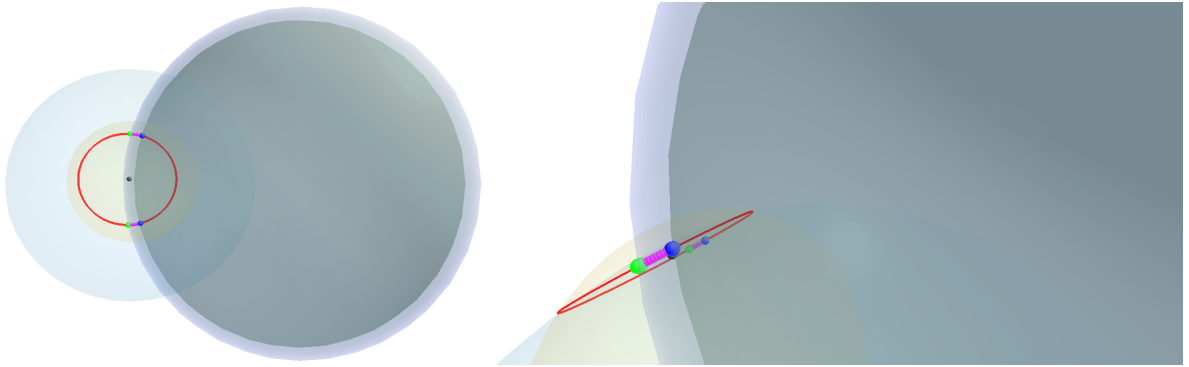


Figura 14 – Testes com o CLUCalc para uma casca esférica.

Usando a parametrização pelo raio para obter a solução no caso geral. Assim como no caso anterior em que $n = 3$, para o caso geral, através de (4.14), inicialmente obtemos a $(n - k)$ -esfera σ resultante da interseção entre as m esferas no \mathbb{R}^n . Em seguida, consideramos a representação dual da casca esférica \bar{S}_{m+1} , cujo centro foi transladado por $-\mathbf{a}_m$, definida por

$$\bar{\sigma}_d = \bar{a}_{m+1} - \frac{d^2}{2} e_\infty, \quad (4.22)$$

onde $d \in U = [\underline{d}_{m+1}, \bar{d}_{m+1}]$ e \bar{a}_{m+1} é a representação em $\mathbb{R}^{n+1,1}$ de $\bar{\mathbf{a}}_{m+1} = \mathbf{a}_{m+1} - \mathbf{a}_m$. Então, para cada $d \in U$, a interseção dada por

$$\tau_d = \sigma \wedge \bar{\sigma}_d \quad (4.23)$$

é a representação dual de uma $(n - k - 1)$ -esfera do \mathbb{R}^n , sempre que $t_d = \tau_d \cdot \tilde{\tau}_d > 0$, para algum $d \in U$. Notemos que, pela construção aqui feita, o sinal de t_d não muda de valor para qualquer d escolhido no intervalo U . Isso assegura que t_d está bem definido e para determinarmos a solução basta testarmos seu sinal para apenas um $d \in U$.

Portanto, usando (4.23) para algum $d \in [\underline{d}_{m+1}, \bar{d}_{m+1}]$, definimos $t_d = \tau_d \cdot \tilde{\tau}_d$ e a solução da interseção entre as m esferas e uma casca esférica no \mathbb{R}^n é: (a) vazia, se $t_d < 0$; (b) um ponto, se $t_d = 0$; ou (c) a união de $(n - k - 1)$ -esferas, se $t_d > 0$. No caso de (c), a solução é dada por

$$\left\{ \tau_d \in \mathbb{R}^{n+1,1} : \tau_d = \sigma \wedge \bar{\sigma}_d, \ d \in [\underline{d}_{m+1}, \bar{d}_{m+1}] \right\}. \quad (4.24)$$

Na expressão acima, como σ e $\bar{\sigma}_d$ são obtidos por (4.14) e (4.22) respectivamente o conjunto (4.24) representa a união de $(n - k - 1)$ -esferas do \mathbb{R}^n . Isso mostra que o resultado obtido está de acordo com o da abordagem clássica. Os casos (a), (b) e (c) encontrados correspondem às possibilidades (i), (ii) e (iv) que são possíveis ocorrer para o problema (4.15).

Segundo caso. Agora vamos assumir que $\dim(\text{aff}(\mathcal{C})) = k$, onde \mathcal{C} é como antes. Logo, por (4.14), realizando a interseção das m esferas do \mathbb{R}^n obtemos σ . Supondo que σ seja uma $(n - k)$ -esfera, escolhemos² um ponto \mathbf{x} em σ e verificamos se este satisfaz a desigualdade em (4.15). Se satisfizer, a solução do problema é σ obtida por (4.14). Caso contrário, a solução é vazia. Portanto, obtemos o item (iii) referente às possíveis soluções de (4.15).

4.6 Cenários para a interseção com uma casca esférica

A figura abaixo mostra algumas possibilidades para o resultado da interseção entre duas esferas e uma casca esférica. Casos degenerados, como esferas de raio zero, não foram considerados, pois estamos interessados em situações que tenham relação com o principal problema de aplicação, descrito no primeiro capítulo. Levando em conta esta observação, podemos desconsiderar os casos onde há pontos resultantes do tangenciamento entre cascas e esferas, visto que são pouco prováveis de ocorrerem na prática. Como, por exemplo, os casos 5, 9 e 13 da Figura 15. Aqui optamos por seguir um cenário que permita ilustrar como algumas dificuldades podem aparecer em problemas de aplicação. No caso de termos um resultado diferente de um par de arcos como a interseção entre duas esferas com uma casca esférica, quando $n = 3$, o procedimento para se obter a solução via AGC ainda continua sendo dado de acordo com o que já foi mostrado.

² Para isso, podemos usar (2.19) ou (2.20).

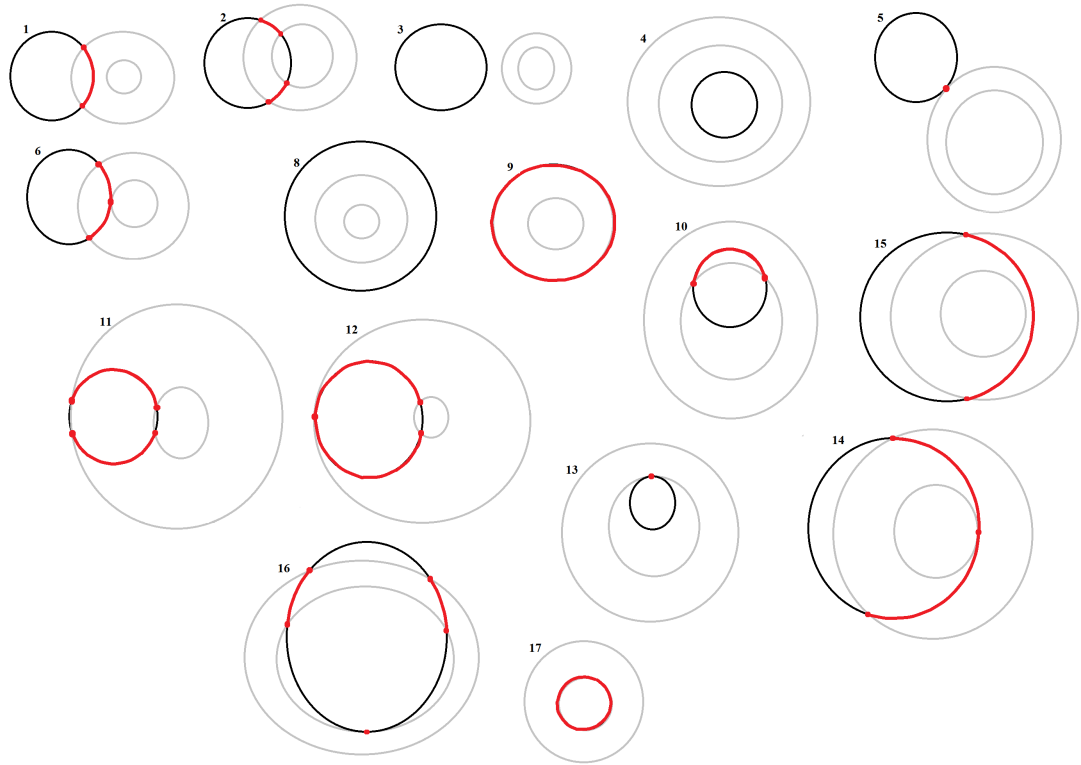


Figura 15 – Interseção do círculo com uma casca esférica no \mathbb{R}^3 .

4.7 Testes computacionais

Embora o problema de interseção de esferas seja formulado por meio de um sistema não-linear, a AGC fornece uma forma bastante eficiente de resolvê-lo. Vimos que para m esferas no \mathbb{R}^n , usando a abordagem da AGC, o problema praticamente se reduz a computar o produto exterior entre estas. Como as operações de reflexão, rotação e translação, ou composição dessas, são transformações ortogonais no espaço conforme, temos uma vantagem em relação a abordagem clássica, pois podemos inverter de maneira trivial todas operações que são realizadas ao longo das manipulações algébricas feitas na busca pela solução do problema. Vimos na Seção 2.5 alguns detalhes sobre esse aspecto.

A fim de validar essa nova abordagem, realizamos testes computacionais com o CLUCalc 4.3 [20] e o Wolfram Mathematica 11.2 [18] munido do pacote de álgebra de Clifford denominado `clifford.m` [19]. O CLUCalc permite um estudo bastante detalhado do espaço $\mathbb{R}^{4,1}$, disponibilizando diversas ferramentas gráficas. No entanto, a versão do CLUCalc usada neste trabalho não incorpora o caso de $n \geq 4$. Para testes envolvendo o caso geral, *i.e.*, o espaço $\mathbb{R}^{n+1,1}$, usamos o `clifford.m`.

Nos experimentos computacionais aqui realizados, analisamos o erro MDE das soluções obtidas. O erro MDE de uma solução $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ é definido por

$$\text{MDE}(\mathbf{x}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{||\mathbf{x} - \mathbf{a}_i|| - d_i}{d_i},$$

onde \mathbf{a}_i e d_i são, respectivamente, o centro e raio da esfera i , sendo $i = 1, \dots, m$. Embora MDE seja a abreviação de *mean distance error* (do inglês), estaremos nos referindo a este erro por *erro MDE*. Quanto menor o erro MDE, melhor a precisão da solução encontrada. Adiante veremos que, embora tenhamos obtido valores baixos de erro MDE para as soluções encontradas, o tempo de execução em alguns casos não foi satisfatório³. Quanto ao tempo de processamento, nos deparamos com algumas dificuldades nos testes feitos com o `clifford.m` para $m = 10$ esferas. No entanto, os testes realizados mostram a validade da abordagem apresentada.

Na busca de termos maior eficiência em nossos experimentos computacionais, um primeiro passo poderia ser o uso, por exemplo, de uma linguagem como o `C++` para as implementações da AGC. Um aspecto a ser levado em conta nas comparações entre as abordagens é o fato de que as operações usadas na abordagem clássica são usuais em softwares como o `Mathematica`. Enquanto a decomposição QR de matrizes já faz parte dos pacotes internos do `Mathematica`, o produto geométrico, ou outras operações do modelo conforme, não faz parte. Dessa maneira, para testarmos a abordagem com a AGC, além da necessidade de termos um algoritmo que resolva nosso problema, é necessário se ter uma implementação eficiente de elementos da AGC na linguagem de programação escolhida.

Outro ponto de caráter computacional que devemos levar em conta é a existência de diferentes algoritmos para se implementar a AGC. Na maioria das vezes, as diferentes implementações exploram características específicas do problema onde se usa a AGC. Ainda não há uma implementação consolidada para o caso geral. Mais detalhes sobre esses aspectos da AGC podem ser encontrados em [14, 15, 34]. Em [33] há algoritmos eficientes que possibilitam implementarmos a abordagem aqui apresentada usando a AGC com uma complexidade computacional igual a da abordagem clássica, baseada na álgebra linear.

Comparação computacional para $m = 3, \dots, 7$. Seguimos [11] para gerarmos m esferas no \mathbb{R}^n cuja dimensão do invólucro afim do conjunto formado pelos centros seja k , onde $1 \leq k \leq \min\{m-1, n\}$. O seguinte módulo gera as esferas a serem usadas como instâncias para testarmos as abordagens vistas.

³ Assumimos como sendo insatisfatório testes computacionais que levaram mais do que 20 minutos para serem concluídos.

```

(* gera matriz n×m de rank k,
cujas colunas são os centros das m esferas;
gera vetor com os respectivos raios *)
geraEsferas[m_, n_, kk_] :=
Module[{A, ii, jj, d, λ, u, v, Amin, Amax, xsol, di},
A = Table[0, {ii, n}, {jj, m}];
d = Table[0, {ii, m}, {jj, 1}];
For[ii = 1, ii ≤ kk, ii++,
SeedRandom[ii];
λ = RandomReal[{0, 10}];
SeedRandom[ii + 1];
u = RandomReal[{0, 1}, n];
SeedRandom[ii + 2];
v = RandomReal[{0, 1}, m];
A = A + λ * Outer[Times, u, v];
];
Amin = Min[A]; Amax = Max[A];
SeedRandom[123];
xsol = RandomReal[{Amin, Amax}, n];
For[ii = 1, ii ≤ m, ii++,
di = Norm[xsol - A[[ ; , ii]]];
d[[ii, 1]] = di;
];
Return[{A, d}];
];

```

Figura 16 – Implementação utilizada para gerar esferas.

Em uma primeira série de comparações, usamos o módulo `geraEsferas[]` e escolhemos arbitrariamente um conjunto de $m = n$ esferas no \mathbb{R}^n com centros L.I. Lembremos que, tanto na abordagem clássica como com a AGC, após uma translação, podemos construir um conjunto L.I. formado por algumas dessas esferas. Esse novo conjunto tem k esferas L.I.

Usando o módulo `InterEsferas[]`, Figura 18, obtivemos os resultados exibidos na figura abaixo.

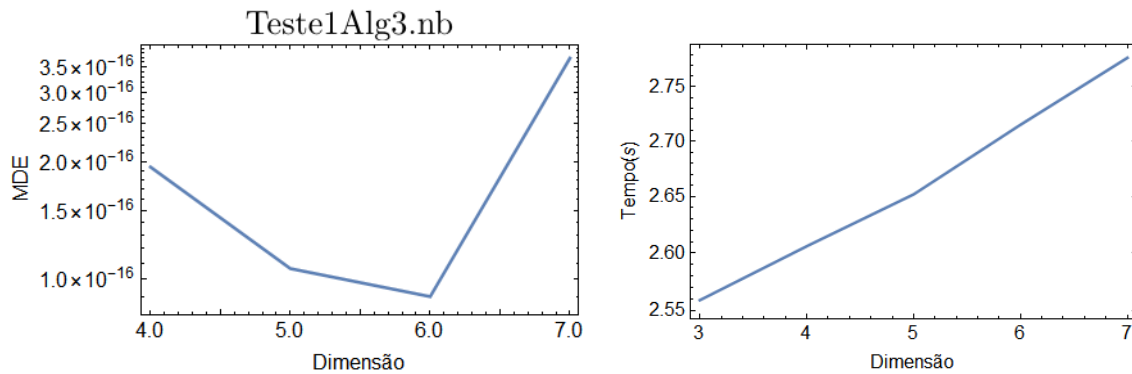


Figura 17 – Gráficos dos resultados obtidos com a abordagem clássica.

```

(* gera as esferas e computa interseção *)
IntersEsferas[m_, n_, kk_] :=
Module[{A, d, Å, ii, jj, Q, R, c, Rhat, Rhat1, c1, Rhat2,
  c2, y, δ, z, w, x1, x2, z1, z2, w1, w2, erro, aux, z0},
  (* testa abordagem clássica *)
  {A, d} = geraEsferas[m, n, kk];
  Å = Table[0, {ii, n}, {jj, m-1}];
  For[jj = 1, jj ≤ m-1, jj++,
    Å[[;;, jj]] = A[[;;, jj]] - A[[;;, m]];
  (* resolve o sistema Åx=c via decomposicao QR de Å *)
  {Q, R} = qrd[Å];
  (* computa vetor c *)
  c = Table[0, {ii, m-1}, {jj, 1}];
  For[ii = 1, ii ≤ m-1, ii++,
    c[[ii, 1]] = (-1/2) * (d[[ii, 1]]^2
      - d[[m, 1]]^2 - Norm[Å[[;;, ii]]]^2);
  ];
  Rhat = R[[1 ;; kk, ;;]];
  Rhat1 = Rhat[[;;, 1 ;; kk]];
  c1 = c[[1 ;; kk, 1]];
  If[kk ≠ m-1,
    Rhat2 = Rhat[[;;, kk+1 ;; m-1]];
    c2 = c[[kk+1 ;; m-1, 1]];
    y = LinearSolve[Transpose[Rhat1], c1];
    If[Norm[Transpose[Rhat2].y - c2] > 10-6,
      Return[{0, 0}];
    ];
    , y = LinearSolve[Transpose[Rhat], c];
  ];
  (* computa argumento da raiz quadrada *)
  δ = d[[m, 1]]^2 - Norm[y]^2;
  If[δ < 0,
    Return[{0, 0}];
  ];
  If[δ == 0,
    z = 0;
    w = AppendTo[w, z];
    x1 = MatrixForm[Q.w + A[[;;, n]]];
    x2 = x1;
    erro = erroMDE[x1, A, d, m];
  ];
  If[δ > 0,
    If[n - kk > 1,
      (* escolhe z em Rn-k tq. z2 = δ2 = dn2 - y2 *)
      SeedRandom[5678];
      aux = RandomReal[{-Sqrt[δ], Sqrt[δ]}, n - kk];
      z0 = Sqrt[δ] / Norm[aux] * aux;
      If[Length[y] == 1,
        w = y[[1, ;;]]; w = y;
      ];
      For[ii = 1, ii ≤ Length[z0], ii++,
        w = AppendTo[w, z0[[ii]]];
      ];
      x1 = Q.w + A[[;;, m]];
      erro = erroMDE[x1, A, d, m];
    ];
    z1 = Sqrt[δ];
    z2 = -Sqrt[δ];
    w1 = y;
    w1 = AppendTo[w1, {z1}];
    w2 = y;
    w2 = AppendTo[w2, {z2}];
    x1 = Q.w1 + A[[;;, m]];
    x2 = Q.w2 + A[[;;, m]];
    erro = erroMDE[x1, A, d, m];
  ];
  ];
  Return[erro];
];

```

Figura 18 – Implementação do caso 3 da abordagem clássica.

Os gráficos da Figura 17 descrevem os resultados das soluções de instâncias geradas para $n, m = 3, \dots, 7$. Notemos que os erros MDE ficaram na ordem de 10^{-16} , indicando a alta precisão das soluções encontradas. Já os tempos de processamento ficaram abaixo de 2.8 s.

Observações. Para assegurarmos que teríamos uma mesma instância a ser resolvida em ambas abordagens, usamos o comando `SeedRandom[]`. Alguns testes para a abordagem da AGC feitos com `clifford.m` tiveram erros numéricos. Este comportamento aparece principalmente quando aumentamos a dimensão do problema.


```

(* interseção usando AGC *)
IntersEsferasAGC[n_, m_, kk_, e0_, einf_] :=
Module[{ε, p, A, d, ii, TEsfemas, r_i, C_i, c_i,
  σ_i, σ, aux, pto1, Ie, pto2, x1, x2, erro},
  ε = 5;
  p = n + 1;
  (* gera m esferas no  $\mathbb{R}^n$  *)
  {A, d} = geraEsferas[m, n, kk];
  (* define esferas no espaço conforme *)
  TEsfemas = {};
  For[ii = 1, ii ≤ m, ii++,
    r_i = d[[ii, 1]];
    C_i = ToBasis[A[[ ; ; , ii]]];
    c_i = e0 + C_i + (0.5 * Norm[ToVector[C_i,
      p + 1]]^2) * einf;
    σ_i = c_i - (0.5 * r_i^2) * einf;
    TEsfemas = AppendTo[TEsfemas, σ_i];
  ];
  (* computa interseção usando produto
  exterior *)
  σ = TEsfemas[[1, ;]];
  For[ii = 2, ii ≤ m, ii++,
    σ = Chop[OuterProduct[σ, TEsfemas[[ii,
      ;]]], 10^(-ε)];];

(* extrai pontos do par de ptos *)
aux = Chop[InnerProduct[einf, Dual[σ, p + 1]],
  10^(-ε)];
pto1 =
Chop[
  -GeometricProduct[
    Sqrt[InnerProduct[Dual[σ, p + 1],
      Dual[σ, p + 1]]] + Dual[σ, p + 1],
    MultivectorInverse[aux]], 10^(-ε)];
Ie = OuterProduct[einf, e0];
pto2 =
Chop[GeometricProduct[
  Sqrt[InnerProduct[Dual[σ, p + 1],
    Dual[σ, p + 1]]] - Dual[σ, p + 1],
  MultivectorInverse[aux]], 10^(-ε)];
x1 = GeometricProduct[OuterProduct[pto1, Ie],
  Ie];
x2 = GeometricProduct[OuterProduct[pto2, Ie],
  Ie];
(* calcula erro da solução encontrada *)
erro = erroMDE[ToVector[x1[[2 ;]]], A, d, m];
Return[erro];

```

Figura 19 – Implementação da abordagem via AGC para o problema com esferas.

Resolvendo via AGC as mesmas instâncias que usamos nos testes descritos na Figura 17, obtivemos os seguintes resultados.

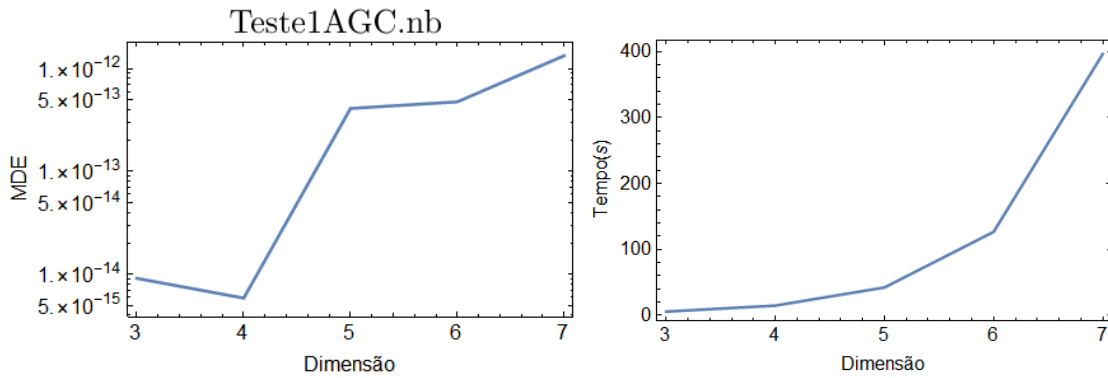


Figura 20 – Gráficos dos resultados obtidos na abordagem via AGC.

Comparando a figura acima com a Figura 17, notamos um ganho da abordagem clássica em relação àquela que usa a AGC quanto ao tempo de processamento. Como os erros MDE da abordagem com a AGC ficaram abaixo de 10^{-12} , consideramos que as soluções encontradas nesta abordagem estão em uma precisão adequada no problema envolvendo esferas. O gráfico da Figura 20 confirma que o método aqui proposto fornece de fato as soluções para o problema em dimensões maiores do que o caso 3D.

Comparação computacional para $m = 10$. Ao longo dos experimentos computacionais, notamos que o `clifford.m` apresentou dificuldades para casos em que $m, n \geq 7$. Algumas vezes ocorria dificuldades com respeito ao arredondamento numérico. Ao invés de zerar certos elementos dos *blades*, o programa estava realizando cálculos com *blades* de grau alto, sendo que alguns dos coeficientes destes estavam próximos de zero. Seria mais vantajoso computacionalmente se os *blades* correspondentes a tais coeficientes não fossem considerados. Manipular tais *blades* contribuíram para que `clifford.m` não encontrasse solução em um tempo satisfatório quando consideramos dimensões mais altas. Buscamos eliminar este inconveniente usando o comando `Chop[]`, obtendo sucesso em vários casos. Essa dificuldade é comum aparecer em implementações da AGC, mas há maneiras de se contornar isto. Uma forma de evitar tal problema é usando a contração à esquerda e à direita sempre que possível. Aqui não detalhamos tais aspectos visto que o pacote `clifford.m` não possui a implementação destas operações.

A fim de ilustrar o comportamento mencionado acima, vejamos o caso particular de uma instância com $m = 10$ esferas no \mathbb{R}^{10} , sendo os centros L.I. Usando a abordagem clássica, obtemos como resultado:

`m = 10, n = 10: media(errores) = 0., tempo(s) = 2.294`

Figura 21 – Testes com a abordagem clássica para $m = 10$ esferas no \mathbb{R}^{10} .

Já a abordagem com a AGC, obtemos:

`m = 10, n = 10: media(errores) = 4.60287×10-9, tempo(s) = 798.882`

Figura 22 – Testes com a abordagem via AGC para $m = 10$ esferas no \mathbb{R}^{10} .

Comparando os resultados da Figura 22 com a 21, notamos um aumento considerável no tempo de execução, de cerca de 2,3 segundos para aproximadamente 13,3 minutos. Por outro lado, o erro MDE ficou em valores baixos. Na abordagem via AGC o erro ficou da ordem de 10^{-9} , enquanto na clássica o erro foi nulo. Como os métodos computacionais para trabalharmos com a AGC são assuntos de pesquisas atuais, não estando tão consolidados como os métodos para álgebra linear, consideramos que os resultados obtidos na abordagem via AGC estão adequados, pois encontrou todas as soluções do problema com uma boa precisão. De fato, utilizando implementações eficientes [33], é possível melhorar cada vez mais a precisão das soluções encontradas pela abordagem aqui vista. Em todos testes realizados para $n \geq 15$ não foi possível resolver as instâncias com o `clifford.m` em um tempo satisfatório.

4.8 Testes com o algoritmo BP via AGC

A fim de verificar a validade do método proposto quando lidamos com a aplicação de determinar a estrutura 3D de uma molécula de proteína, vejamos alguns experimentos levando em conta o algoritmo BP [17]. A versão do BP aqui utilizada foi uma adaptação do BP baseada na abordagem via AGC apresentada neste trabalho para interseção de esferas. De posse de uma implementação do BP para o *Mathematica* [23], utilizamos o pacote `clifford.m` para construirmos a versão via AGC.

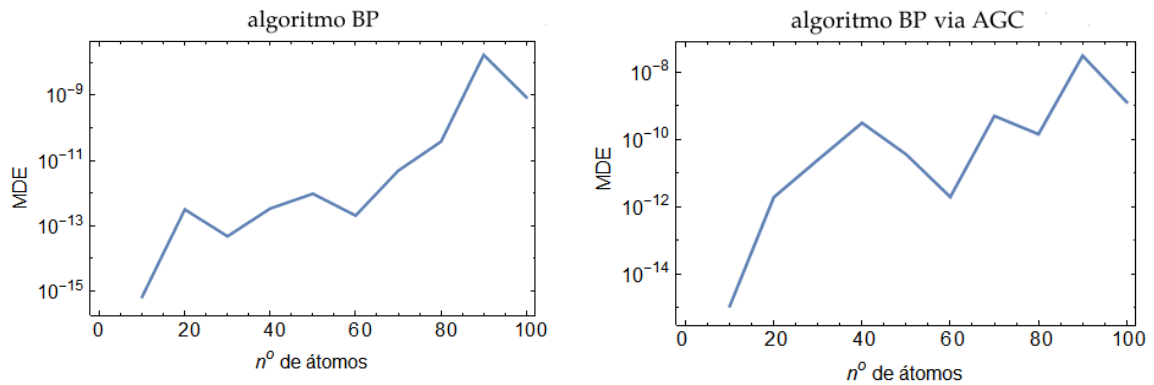


Figura 23 – Testes com o algoritmo BP e o BP via AGC, para $n = 10, \dots, 100$.

A figura acima mostra os resultados obtidos para uma quantidade de átomos variando de 10 à 100, para uma instância artificial gerada no contexto do BP [17, 23]. Vemos que ambas versões, tanto com a AGC quanto a clássica, mantiveram os erros MDE em valores baixos. Isso indica que a qualidade das soluções obtidas estão dentro do esperado. De fato, pelos gráficos inferimos que o BP nesta nova versão via AGC e o BP na versão clássica encontraram soluções equivalentes, visto que em ambas houve um leve aumento no erro MDE conforme aumentamos a quantidade de átomos do problema. Uma das vantagens de usarmos a AGC em conjunto com o BP é de ser possível realizarmos a interseção de esferas de forma mais natural, permitindo generalizar as etapas já presentes no BP clássico. Por exemplo, ao levarmos em conta as cascas esféricas, a etapa de interseção de esferas pode ser alterada para lidar com cascas esféricas, sendo que para tal mudança estendemos de forma natural os resultados descritos neste capítulo.

```

DGBPSolverCGA[G_, nodes_, onesol_ : False,
  verbose_ : False, e0_, einf_] :=
(* Calculate all solutions of the DMDGP
  instance defined by the graph G *)
Module[
  (* local variables *)
  {ii, kk, numberOfAtoms, prune, branch, X, S,
    work, error, tol = 10^(-5)},
  numberOfAtoms = Length[VertexList[G]];
  X = DGBPXinit[G, nodes[[1 ;; 3]]];
  (* init BPTree *)
  branch = Table[0, {ii, numberOfAtoms}];
  branch[[1 ;; 3]] = 1;
  work = Table[0, {ii, numberOfAtoms}];
  work[[1 ;; 3]] = 1;
  (* solutions and branches *)
  S = <|"Points" -> {}, "Branches" -> {}|>;
  kk = 4;
  While[kk > 3,
    work[[kk]]++;
    X[[nodes[[kk]]]] = DGBPGetXCGA[G, X,
      branch[[kk]], nodes, kk, e0, einf];
    error = DGRelativeResidue[G, X, nodes, kk];
    prune = error > tol;

    (* solution found *)
    If[Not[prune] && kk == numberOfAtoms,
      AppendTo[S["Points"], X];
      AppendTo[S["Branches"], branch];
      If[onesol,
        Return[{S, work}]];
      ];
    (* update tree node *)
    prune = prune || kk == Length[branch];
    If[prune && branch[[kk]] == 1,
      While[kk > 3 && branch[[kk]] == 1, kk--];
    ];
    If[prune && branch[[kk]] == 0,
      branch[[kk]] = 1;
      For[ii = kk + 1, ii ≤ Length[branch],
        ii++, branch[[ii]] = 0];
    ];
    If[Not[prune], kk++];
  ];
  If[verbose,
    Return[{S, work}];
  ];

```

Figura 24 – Implementação do BP via AGC.

O códigos acima foram as adaptações no algoritmo BP do pacote DG [23], de forma a incluir a abordagem via AGC. Notemos que as adaptações foram tais que, em vez de usarmos a interseção de esferas na forma usual, implementamos a versão desenvolvida neste capítulo para interseção de esferas via AGC.

4.9 Testes envolvendo uma casca esférica

Vejamos alguns testes computacionais onde comparamos a abordagem clássica e a abordagem via AGC desenvolvida para o problema de interseção entre esferas e uma casca esférica, definido de acordo com (1.4).

Utilizando o módulo `geraEsferas1Casca[]` descrito na figura abaixo, obtemos instâncias com uma quantidade arbitrária de esferas e uma casca esférica, de acordo com o que vimos no Capítulo 3.

```

(* gera matriz n×m de rank k,
cujas colunas são os centros das m esferas e uma
gera vetor com os respectivos raios *)
geraEsferas1Casca[m_, n_, kk_] :=
Module[{A, ii, jj, d, lambda, u, v, MatEsferas,
  Amin, Amax, xstar, di, ccasca, dxcasca, alpha,
  beta, dcascaint, dcascaext},
  A = Table[0, {ii, n}, {jj, m}];
  d = Table[0, {ii, m}, {jj, 1}];
  For[ii = 1, ii ≤ kk, ii++,
    SeedRandom[ii];
    lambda = RandomReal[{0, 10}];
    SeedRandom[ii + 1];
    u = RandomReal[{0, 1}, n];
    SeedRandom[ii + 2];
    v = RandomReal[{0, 1}, m];
    A = A + lambda * Outer[Times, u, v];
  ];
  Amin = Min[A]; Amax = Max[A];
  SeedRandom[123];
  xstar = RandomReal[{Amin, Amax}, n];
  For[ii = 1, ii ≤ m, ii++,
    di = Norm[xstar - A[[;;, ii]]];
    d[[ii, 1]] = di;
  ];
  ccasca = RandomReal[{Amin, Amax}, n];
  dxcasca = Norm[xstar - ccasca];
  SeedRandom[567];
  alpha = RandomReal[{0, 1}];
  SeedRandom[789]; beta = RandomReal[{0, 1}];
  dcascaint = (1 - alpha) * dxcasca;
  dcascaext = (1 + beta) * dxcasca;
  Return[{A, d, ccasca, dcascaint, dcascaext}];
];

```

Figura 25 – Implementação para gerar esferas e uma casca esférica.

Seguindo a abordagem clássica [11], implementamos o seguinte módulo para realizar a interseção entre m esferas e uma casca esférica.

```

(*modulo que gera as esferas e 1 casca esférica
e computa intersecao*)
IntersEsferas1Casca[m_, n_, kk_] :=
Module[{A, d, cc, dcint, dcext, cint, cext,
  bint, bext, Â, ÂE, Abar, ii, jj, Q, R, c, Rhat,
  Rhat1, c1, Rhat2, c2, rhat, y, del, yk1, z, w,
  x1, x2, z1, z2, w1, w2, erro, aux, z0},
{A, d, cc, dcint, dcext} =
  geraEsferas1Casca[m, n, kk];
Abar = Transpose[Append[Transpose[A], cc]];
Â = Table[0, {ii, n}, {jj, m - 1}];
For[jj = 1, jj ≤ m - 1, jj++,
  Â[[;;, jj]] = A[[;;, jj]] - A[[;;, m]];
];
Â = Transpose[Append[Transpose[Â],
  cc - A[[;;, m]]]];
Print[">> Â := [ai - am] = ",
  Style[Chop[MatrixForm[Â], 10-9], Red],
  ", rank(Â) = ", Style[MatrixRank[Â], Red],
  ", k = ", Style[kk, Red]];
(* reordena as colunas de Â,
antecipando a coluna m, denotada por âm *)
(* E =
matriz de permutação
tq. ÂE = [Â1,k Âk+1,m-1 âm]E = [
  Â1,k âm Âk+1,m-1] *)
Abar = Transpose[Append[Transpose[A], cc]];
ÂE = Â[[;;, 1;;, kk]];
ÂE =
  Transpose[Append[Transpose[ÂE], Â[[;;, m]]]];
For[ii = kk + 1, ii ≤ m - 1, ii++,
  ÂE = Transpose[Append[Transpose[ÂE],
    Â[[;;, ii]]]];
];

(* obtém decomposição QR de ÂE *)
{Q, R} = qrd[ÂE];
(* computa vetor c *)
c = Table[0, {ii, m - 1}, {jj, 1}];
(* cm+1 := -1/2 (dm+12 - dm2 - ||am+1 - am||2),
cm+1 := -1/2 (dm+12 - dm2 - ||am+1 - am||2) *)
cint =
  (-1/2) *
  (dcext2 - d[[m, 1]]2 - Norm[Â[[;;, m]]]2);
cext =
  (-1/2) *
  (dcint2 - d[[m, 1]]2 - Norm[Â[[;;, m]]]2);
For[ii = 1, ii ≤ m - 1, ii++,
  c[[ii, 1]] =
    (-1/2) *
    (d[[ii, 1]]2 - d[[m, 1]]2 -
      Norm[Â[[;;, ii]]]2);
];
Rhat1 = R[[1;;, kk, 1;;, kk]];
Rhat2 = R[[1;;, kk, kk + 2;;, m]];
rhat = R[[1;;, kk + 1, kk + 1]];
Rhat = Join[Rhat1, Rhat2, 2];

(* verifica se c pertence a Im(Rt) *)
c1 = c[[1;;, kk, 1]];
If[kk ≠ m - 1,
  c2 = c[[kk + 1;;, m - 1, 1]];
  y = LinearSolve[Transpose[Rhat1], c1];
  If[Norm[Transpose[Rhat2].y - c2] > 10-6,
    Return[{0, 0}];
  ];
  y = LinearSolve[Transpose[Rhat], c];
];

```

Figura 26 – Implementação da abordagem clássica com uma casca esférica (parte 1).

Nas Figuras 26 e 27 vemos que o módulo `IntersEsferas1Casca[]` utiliza elementos da álgebra linear e teoria de matrizes para lidar com a casca esférica do problema (1.4).

```

(* computa argumento da raiz quadrada
obs: agora ||w|| = ||[y y_{k+1} z]||,
antes tínhamos ||w|| = ||[y z]||,
onde Q^T x = w *)
del = d[[m, 1]]^2 - Norm[y]^2;
If[del ≤ 0,
Return[{0, 0}];
];
If[del > 0,
If[rhat[[kk+1]] > 0,
bint = (cint - rhat[[1 ;; kk]].y) /
rhat[[kk+1]];
bext = (cext - rhat[[1 ;; kk]].y) /
rhat[[kk+1]];
Print[">>  $\hat{r}_{k+1,k+1} > 0$ ,  $\underline{b} =$ ",
Style[bint, Red], ",  $\underline{b} =$ ",
Style[bext, Red]];
];
If[rhat[[kk+1]] < 0,
bint = (cext - rhat[[1 ;; kk]].y) /
rhat[[kk+1]];
bext = (cint - rhat[[1 ;; kk]].y) /
rhat[[kk+1]];
If[rhat[[kk+1]] == 0,
Abort[];
];
];

(* escolhe  $y_{k+1}$  no intervalo adequado*)
yk1 = Max[{Max[bint, -Sqrt[del]],
Min[bext, Sqrt[del]]}];
If[n - kk > 1,
(* escolhe z em  $\mathbb{R}^{n-k}$  tq  $z^2 =$ 
del^2 - d_m^2 - y^2 *)
SeedRandom[5678];
aux = RandomReal[{-Sqrt[del - yk1^2],
Sqrt[del - yk1^2]}, n - kk - 1];
If[aux == 0 * aux,
z0 = 0 * aux;
],
z0 = Sqrt[del - yk1^2] / Norm[aux] * aux;
];

If[Length[y] == 1,
w = y[[1, ;;]];
],
aux = RandomReal[{-Sqrt[del - yk1^2],
Sqrt[del - yk1^2]}, n - kk - 1];
If[aux == 0 * aux,
z0 = 0 * aux;
],
z0 = Sqrt[del - yk1^2] / Norm[aux] * aux;
];

If[Length[y] == 1,
w = y[[1, ;;]];
],
w = AppendTo[w, yk1];
For[ii = 1, ii ≤ Length[z0], ii++,
w = AppendTo[w, z0[[ii]]];
];
x1 = Q.w + A[[;;, m]];
erro = erroMDE[x1, A, d, m];
],
z1 = Sqrt[del - yk1^2];
z2 = -Sqrt[del - yk1^2];
w1 = Append[y, yk1];
w1 = AppendTo[w1, {z1}];
w2 = Append[y, yk1];
w2 = AppendTo[w2, {z2}];
x1 = Q.w1 + A[[;;, m]];
x2 = Q.w2 + A[[;;, m]];
erro = erroMDE[x1, A, d, m];
];
];
Return[erro];
];

```

Figura 27 – Implementação da abordagem clássica com uma casca esférica (parte 2).

Testes em espaços 3D. Lembremos que a configuração principal apresentada para o problema de interseção entre duas cascas esféricas e uma casca esférica no \mathbb{R}^3 fornece como resultado um par de arcos.

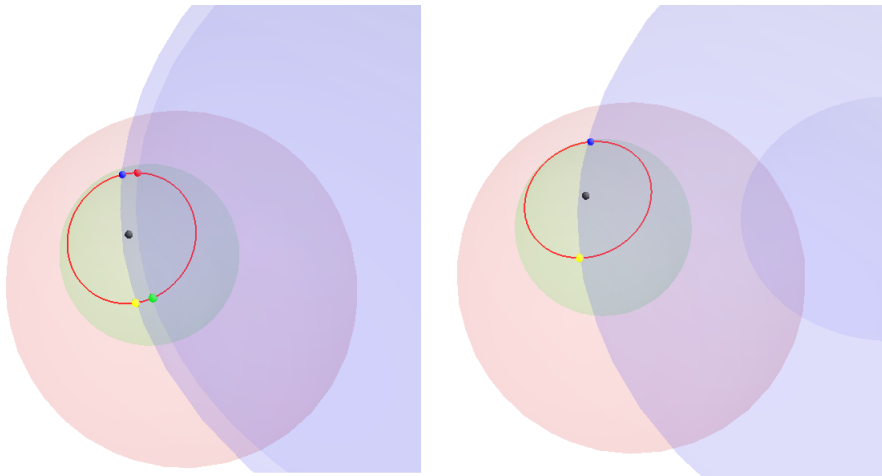


Figura 28 – Configurações para a interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.

No entanto, em muitas aplicações o resultado pode não ser mais um par de arcos e resulte, por exemplo, em apenas um arco. Na Figura 28 vemos estas duas situações. Consideremos o problema onde temos apenas um arco como resultado. Para isso busquemos resolver a seguinte instância tanto pela abordagem clássica, como pela abordagem via AGC.

Sejam S_1, S_2 esferas de centros $\mathbf{a}_1 = (-4, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (-3, -1.1133, 1.3268)$ e raios $d_1 = 3.1102$, $d_2 = 1.3$, e \overline{S}_3 uma a casca esférica de centro $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 0)$ e raio intervalar $d_3 \in [\underline{d}_3, \overline{d}_3] = [1.5, 3.7]$.

Para resolver a instância acima através da abordagem clássica utilizamos o módulo `IntersEsferas1Casca[]` e obtivemos os resultados apresentados na Figura 29.

```

----- início abordagem alg. lin. -----
>> A = [ai] =  $\begin{pmatrix} -4 & -3 \\ 0 & 1.1133 \\ 0 & 1.3268 \end{pmatrix}$ , d =  $\begin{pmatrix} 3.1102 \\ 1.3 \end{pmatrix}$ 
>> ccasca = {0, 0, 0},  $\underline{d}_{casca} = 1.5$ ,  $\overline{d}_{casca} = 3.7$ 
>>  $\tilde{A} = A \cup c_{casca} = \begin{pmatrix} -4 & -3 & 0 \\ 0 & 1.1133 & 0 \\ 0 & 1.3268 & 0 \end{pmatrix}$ 
>> rank(A  $\cup$  ccasca) = 2, rank(A) = 2, k = 1
>>  $\hat{A} := [a_i - a_m] = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ -1.1133 & -1.1133 \\ -1.3268 & -1.3268 \end{pmatrix}$ ,
rank( $\hat{A}$ ) = 2, k = 1
>>  $\hat{A}E = [\hat{A}_{1:k} \hat{A}_{k+1:m-1} \hat{a}_m]E = [\hat{A}_{1:k} \hat{a}_m \hat{A}_{k+1:m-1}]$ 
=  $\begin{pmatrix} -1 & 3 \\ -1.1133 & -1.1133 \\ -1.3268 & -1.3268 \end{pmatrix}$ 
>> Q =  $\begin{pmatrix} -0.50001 & 0.866019 & 0 \\ -0.556661 & -0.321397 & -0.766049 \\ -0.663414 & -0.383033 & 0.642782 \end{pmatrix}$ ,
R =  $\begin{pmatrix} 1.99996 & -0.0000824367 \\ 0 & 3.46408 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 
>>  $\hat{R} = (1.99996)$ , c = [ci] = (-1.99175)
>>  $\hat{R}_1 = (1.99996)$ ,  $\hat{R}_2 = (\{\})$ 
>>  $r_{k+1} = [\hat{r}_{k+1} \hat{r}_{k+1,k+1}]^t = \begin{pmatrix} -0.0000824367 \\ 3.46408 \end{pmatrix}$ ,
 $\hat{r}_{k+1} = (-0.0000824367)$ ,  $\hat{r}_{k+1,k+1} = 3.46408$ 
>>  $d_m^2 - ||y||^2 = 0.698188$ , onde  $y \in \mathbb{R}^k$ , k = 1

>> OBS: Como  $d_m^2 - ||y||^2 \geq 0$ , então para cada
 $y_{k+1} \in [\max\{\underline{b}, -\sqrt{d_m^2 - ||y||^2}\}, \min\{\overline{b}, \sqrt{d_m^2 - ||y||^2}\}]$ 
e para cada valor de  $z \in \mathbb{R}^{n-k-1}$  tq.  $||z||^2 = d_m^2 - ||y||^2 - y_{k+1}^2$ ,
temos um ponto na interseção das m esferas
>>  $\hat{r}_{k+1,k+1} > 0$ ,  $\underline{b} = \{-0.0000474971\}$ ,  $\overline{b} = \{1.65119\}$ 
>>  $y_{k+1} \in [-0.0000474971, 0.835576]$ ,  $y_{k+1*} = 0.835576$ 
>> A solução é a união de uma (n - k - 1) - esferas ou de pontos,
pois  $||z||^2 = d_m^2 - ||y||^2 - y_{k+1}^2 \geq 0$  e  $k < \min\{m-1, n\}$ :

Solução:
{  $x \in \mathbb{R}^n$ :  $x = Q[y \ y_{k+1} \ z]^t + a_m$ , onde  $y = (-0.995898)$ ,
 $a_m = \begin{pmatrix} -3 \\ 1.1133 \\ 1.3268 \end{pmatrix}$ ,  $y_{k+1} \in [-0.0000474971, 0.835576]$ ,
 $z \in \mathbb{R}^{n-k-1}$  tal que  $||z||^2 = 0$ . }
>>  $z_* = \{0.\}$ ,  $||z_*||^2 = 0$ .
>>  $w = \{-0.995898, 0.835576, 0.\}$ 
>> Solução fixada:  $x_* = Q[y \ y_{k+1*} \ z_*]^t + a_m = \begin{pmatrix} -1.77842 \\ 1.39913 \\ 1.66744 \end{pmatrix}$ 
>> Testa solução:
>> Norm[x* - a1] = 3.1102
>> Norm[x* - a2] = 1.3
>> Norm[x* - ccasca] = 2.81081

```

Figura 29 – Testes com a interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.

Notemos que as partições envolvidas na abordagem clássica não trazem os aspectos geométricos do problema. Na Figura 29 vemos que, após utilizarmos a decomposição QR, as etapas que englobam a desigualdade de (1.4) correspondente à casca esférica \overline{S}_3 não trazem nenhum caráter geométrico. Por exemplo, se quiséssemos determinar o raio, ou posição relativa entre os centros nas etapas intermediárias no processo de interseção, não saberíamos dizer olhando para as informações fornecidas pela abordagem clássica, quais valores definem o raio, ou os centros das esferas resultantes nas interseções. De fato, a Figura 29 mostra o forte apelo matricial da abordagem clássica para lidarmos com o problema.

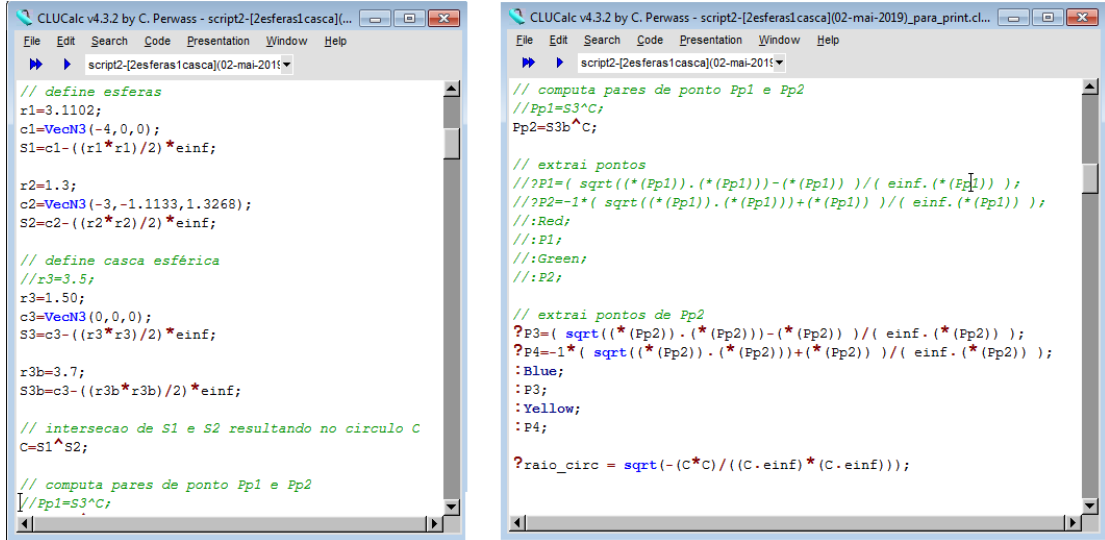


Figura 30 – Obtendo a solução com auxílio do CLUCalc.

Enquanto a abordagem clássica está intimamente ligada às partições das matrizes envolvidas, a abordagem via AGC trata o problema sob um ponto de vista algébrico, mas fornecendo informações do aspecto geométrico das operações realizadas ao longo do processo de resolução do problema.

Para resolver a instância aqui escolhida para o caso 3D pela abordagem via AGC, basta usarmos a expressão (4.21) de forma direta. Os pontos fornecidos pelo conjunto (4.21) são os pontos na interseção entre S_1 , S_2 e \bar{S}_3 . Além disso, podemos reduzir o intervalo $[d_3, \bar{d}_3]$ resolvendo um problema geométrico elementar no seguinte sentido: tendo obtido o resultado κ da interseção entre as esferas S_1 e S_2 , extraímos o centro e o raio utilizando as expressões apresentadas no Capítulo 2. A figura abaixo ilustra como podemos simplificar o problema utilizando sua geometria.

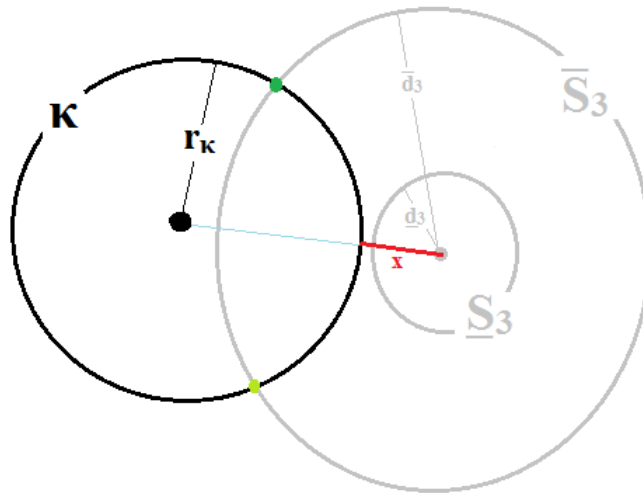


Figura 31 – Interseção de 2 esferas e 1 casca esférica resultando em um par de arcos.

Em seguida, comparamos tais valores com os raios da casca esférica \overline{S}_3 e determinamos um subconjunto de $d_3 \in [\underline{d}_3, \overline{d}_3]$ onde (4.21) fornece pontos no espaço conforme correspondentes a interseção vazia. Como a solução é a união de pontos Euclidianos, essa característica não traz limitações. Mesmo assim, utilizando a AGC, podemos excluir de maneira natural os pontos da solução que levem a uma interseção vazia.

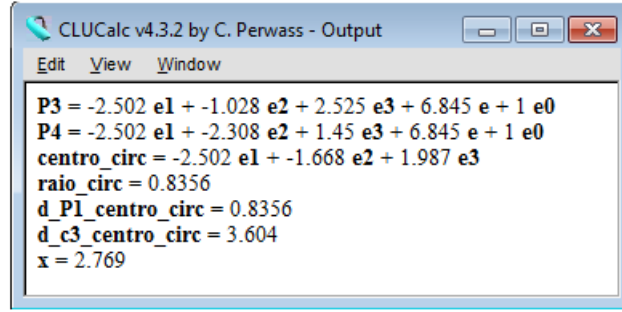


Figura 32 – Saída dos testes com o CLUCalc.

Nesse sentido, com auxílio do CLUCalc, computamos os valores envolvidos reduzindo a solução

$$\{p_{p_d} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_d} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_{d_3}, d_3 \in [1.5, 3.7]\}, \quad (4.25)$$

a seu subconjunto

$$\{p_{p_d} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_d} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_{d_3}, d_3 \in [2.8, 3.7]\}. \quad (4.26)$$

Notemos que, como $[2.8, 3.7] \subseteq [1.5, 3.7]$, a solução (4.26) é uma forma mais compacta de (4.25), visto que excluimos os pontos correspondentes a interseção vazia.

Observações. Enquanto a abordagem clássica forneceu um resultado cujos elementos não possuem apelo geométrico, a solução obtida via AGC forneceu a possibilidade de otimizar o resultado obtido, permitindo lidar com as suas particularidades de forma natural. Por exemplo, a forma compacta da solução via AGC, *i.e.*, (4.26), fornece um conjunto solução cujos elementos descrevem de forma precisa a solução do problema. Ressaltamos que é possível recuperarmos o centro e raio das esferas obtidas em cada etapa do processo de interseção. A figura abaixo ilustra como as informações do conjunto (4.26) asseguram descrevermos de maneira precisa a região da solução cuja interseção é não vazia. De fato, a proximidade geométrica e algébrica da abordagem via AGC permite incorporarmos de forma adequada em nosso modelo as particularidades presentes nos problemas de aplicação.

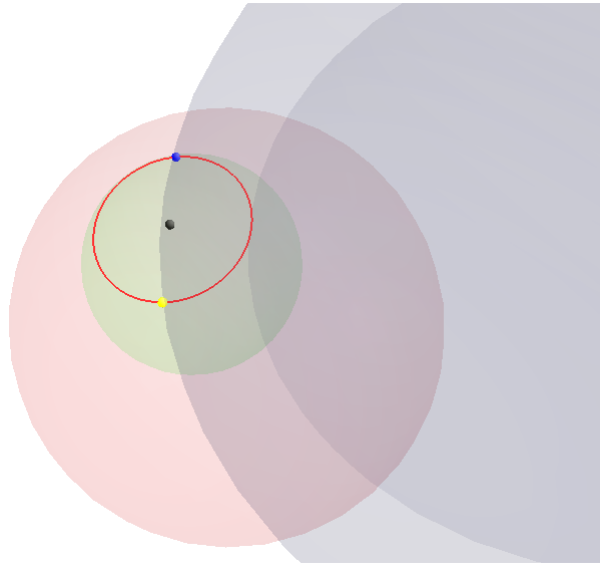


Figura 33 – Ilustração da interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.

Testes para espaços nD . Vimos para o caso 3D que a solução obtida via AGC para nosso problema tem vantagens quanto a abordagem clássica. Basta compararmos as Figuras 29 e 30. Além disso, caso consideremos esferas em espaços nD , as fórmulas do Capítulo 2 continuariam válidas e o caráter geométrico aqui explorado estaria presente. A expressão (4.24) para solução do caso nD possui a mesma forma da expressão usada para o caso 3D, *i.e.*, de (4.21). Isso mostra que se estendermos a instância acima do caso 3D para espaços nD , podemos usar as mesmas fórmulas da AGC, pois a dimensão das esferas e casca esférica não mudariam a forma das expressões utilizadas. Por outro lado, com a abordagem clássica, as partições das matrizes envolvidas mudariam, e esta continuaria a não fornecer característica geométrica alguma do problema.

Incluindo uma segunda casca esférica com a abordagem clássica. Com respeito a incluirmos uma segunda casca esférica, do ponto de vista teórico, as expressões (4.21) e (4.24) se estendem de forma natural. Basta representarmos as cascas esféricas do problema na forma dual e realizarmos a interseção por meio do produto exterior. Por exemplo, no caso de termos 5 esferas e 1 casca esférica no \mathbb{R}^5 , sendo a dimensão do invólucro afim dos centros transladados igual a 4, basta usarmos (4.24) com κ obtido por meio de (4.13). Já para a abordagem clássica, seríamos levados a novas partições das matrizes envolvidas neste caso 5D. Vejamos abaixo os resultados de testes computacionais com a abordagem clássica feitos para tal caso. Para gerar uma instância 5D como a desejada de forma aleatória novamente usamos `geraEsferas1Casca[]`.

```

----- início abordagem alg. lin.-----
>> A = [a1] =  $\begin{pmatrix} 3.90254 & 2.10451 & 5.69087 & 2.71275 & 4.10164 \\ 0.449824 & 0.219446 & 3.03019 & 2.75676 & 0.755368 \\ 2.62402 & 1.64722 & 5.877 & 3.76752 & 3.28186 \\ 2.40872 & 0.647672 & 2.76247 & 1.33933 & 1.71128 \\ 2.69034 & 1.02606 & 6.22112 & 4.50268 & 2.65446 \end{pmatrix}$ , d =  $\begin{pmatrix} 7.5219 \\ 9.09312 \\ 6.69437 \\ 6.58658 \\ 7.43201 \end{pmatrix}$ 
>> ccasca = {3.02048, 0.589379, 2.53396, 2.79919, 4.89321}, dcasca = 4.69128, dcasca = 9.33505
>> Ã = A ∪ ccasca =  $\begin{pmatrix} 3.90254 & 2.10451 & 5.69087 & 2.71275 & 4.10164 & 3.02048 \\ 0.449824 & 0.219446 & 3.03019 & 2.75676 & 0.755368 & 0.589379 \\ 2.62402 & 1.64722 & 5.877 & 3.76752 & 3.28186 & 2.53396 \\ 2.40872 & 0.647672 & 2.76247 & 1.33933 & 1.71128 & 2.79919 \\ 2.69034 & 1.02606 & 6.22112 & 4.50268 & 2.65446 & 4.89321 \end{pmatrix}$ 
>> rank(Ã ∪ ccasca) = 4, rank(A) = 3, k = 3
>> Â := [a1 - am] =  $\begin{pmatrix} -0.199099 & -1.99713 & 1.58923 & -1.38889 & -1.08116 \\ -0.305543 & -0.535922 & 2.27483 & 2.00139 & -0.165989 \\ -0.657837 & -1.63464 & 2.59514 & 0.485663 & -0.747905 \\ 0.697444 & -1.0636 & 1.05119 & -0.371952 & 1.08792 \\ 0.0358738 & -1.6284 & 3.56665 & 1.84822 & 2.23875 \end{pmatrix}$ , rank(Â) = 4, k = 3
>> AÊ = [Â1:k Âk+1:m-1 am]E = [Â1:k am Âk+1:m-1] =  $\begin{pmatrix} -0.199099 & -1.99713 & 1.58923 & -1.08116 & -1.38889 \\ -0.305543 & -0.535922 & 2.27483 & -0.165989 & 2.00139 \\ -0.657837 & -1.63464 & 2.59514 & -0.747905 & 0.485663 \\ 0.697444 & -1.0636 & 1.05119 & 1.08792 & -0.371952 \\ 0.0358738 & -1.6284 & 3.56665 & 2.23875 & 1.84822 \end{pmatrix}$ 
>> Q =  $\begin{pmatrix} -0.193982 & -0.57963 & -0.581359 & -0.146573 & -0.516661 \\ -0.297689 & -0.0924466 & 0.577183 & -0.718872 & -0.230039 \\ -0.640927 & -0.350575 & -0.0527978 & 0.0508498 & 0.678923 \\ 0.679516 & -0.509772 & 0.00772867 & -0.338989 & 0.404248 \\ 0.0349517 & -0.522219 & 0.570994 & 0.58672 & -0.236202 \end{pmatrix}$ 
>> R =  $\begin{pmatrix} 1.02638 & 0.814976 & -1.80981 & 1.556 & -0.825799 \\ 0 & 3.17278 & -4.4397 & -0.819491 & -0.325808 \\ 0 & 0 & 2.29672 & 1.85894 & 2.98942 \\ 0 & 0 & 0 & 1.18449 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 
>> R̂ =  $\begin{pmatrix} 1.02638 & 0.814976 & -1.80981 & 1.556 & -0.825799 \\ 0 & 3.17278 & -4.4397 & -0.819491 & -0.325808 \\ 0 & 0 & 2.29672 & 1.85894 & 2.98942 \\ 0 & 0 & 0 & 1.18449 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 
>> R̂ =  $\begin{pmatrix} 1.02638 & 0.814976 & -1.80981 & -0.825799 \\ 0 & 3.17278 & -4.4397 & -0.325808 \\ 0 & 0 & 2.29672 & 2.98942 \end{pmatrix}$ , c = [c1] =  $\begin{pmatrix} -0.145381 \\ -8.35967 \\ 19.3407 \\ 10.7882 \end{pmatrix}$ 
>> R̂1 =  $\begin{pmatrix} 1.02638 & 0.814976 & -1.80981 \\ 0 & 3.17278 & -4.4397 \\ 0 & 0 & 2.29672 \end{pmatrix}$ , R̂2 =  $\begin{pmatrix} -0.825799 \\ -0.325808 \\ 2.98942 \end{pmatrix}$ 
>> rk+1 = [r̂k+1 f̂k+1,k+1]T =  $\begin{pmatrix} 1.556 \\ -0.819491 \\ 1.85894 \\ 1.18449 \end{pmatrix}$ , f̂k+1 =  $\begin{pmatrix} 1.556 \\ -0.819491 \\ 1.85894 \end{pmatrix}$ ,
f̂k+1,k+1 = 1.18449
>> dm2 - ||y||2 = 37.662, onde y ∈ Rk, k = 3
>> f̂k+1,k+1 > 0, b = -16.8823, b̄ = 10.6127
>> yk+1 ∈ [-6.13694, 6.13694], yk+1 = 6.13694
Solução:
{ x ∈ Rn: x = Q[y yk+1 z]T + am, onde y =  $\begin{pmatrix} -0.141644 \\ -2.59843 \\ 3.28646 \end{pmatrix}$ ,
am =  $\begin{pmatrix} 4.10164 \\ 0.755368 \\ 3.28186 \\ 1.71128 \\ 2.65446 \end{pmatrix}$ , yk+1 ∈ [-6.13694, 6.13694],
z ∈ Rn-k-1 tal que ||z||2 = 0. }
>> z* = {0}, ||z*||2 = 0.
>> w = [-0.141644, -2.59843, 3.28646, 6.13694, 0.}
>> Solução fixada: x* = Q[y yk+1 z*]T + am =  $\begin{pmatrix} 2.82511 \\ -1.47703 \\ 4.42213 \\ 0.884677 \\ 9.48367 \end{pmatrix}$ 
>> Erro de x* = 5.05851 × 10-17
>> Testa solução:
>> Norm[x* - a1] = 7.5219
>> Norm[x* - a2] = 9.09312
>> Norm[x* - ccasca] = 5.71062

```

Figura 34 – Testes em 5D para interseção de 2 esferas e 1 casca esférica.

A figura acima mostra que, como não temos informações geométricas do problema em uma forma natural, fica difícil deduzirmos a partir dos dados de saída quais são o raio e o centro do resultado obtido. Isso impossibilita buscarmos estender tal abordagem de forma adequada para o caso de acrescentarmos uma segunda casca esférica ao problema (1.4). Mesmo no caso 3D não temos uma maneira adequada de estender a abordagem clássica neste sentido. Essa limitação torna inviável tratarmos certos problemas de aplicação em que os aspectos geométricos podem trazer informações importantes, como é o caso do cálculo de estruturas de moléculas. Em tais situações a abordagem com a AGC tem levado a resultados promissores. No próximo capítulo veremos como é possível lidar com o problema via AGC quando acrescentamos uma segunda casca esférica. Vale lembrar que esse caso não é tratado de forma eficiente sob a abordagem clássica.

5 Interseção entre esferas e cascas esféricas via AGC

Neste capítulo investigamos o efeito de se acrescentar uma casca esférica extra ao problema de interseção entre duas esferas e uma casca esférica no \mathbb{R}^3 , caso não tratado pela abordagem clássica. Este problema tem particular importância devido à sua proximidade com as aplicações relacionadas ao DMDGP, quando consideramos as incertezas vindas dos experimentos de RMN. Os testes computacionais realizados mostram o potencial da abordagem proposta com respeito a busca de generalizações para os problemas vistos no Capítulo 1. Ao longo deste capítulo, continuaremos seguindo as notações usadas anteriormente.

5.1 Interseção de esferas e duas cascas esféricas

Consideremos duas esferas $S_1(\mathbf{a}_1, d_1)$ e $S_2(\mathbf{a}_2, d_2)$, e duas cascas esféricas $\overline{S}_3(\mathbf{a}_3, \underline{d}_3, \overline{d}_3)$ e $\overline{S}_4(\mathbf{a}_4, \underline{d}_4, \overline{d}_4)$ no \mathbb{R}^3 . Suponhamos que os centros $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^4$ sejam L.I. Vimos em (4.17) que a interseção de S_1 e S_2 fornece como resultado o círculo κ dado por

$$\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2.$$

Ressaltamos que, de acordo com a Figura 15, dependendo da configuração, poderíamos ter outros resultados para interseção do círculo κ com a casca esférica \overline{S}_3 . Estaremos assumindo que o resultado desta etapa é o par de arcos determinado por (4.21), que denotaremos por ξ_d . A saber,

$$\xi_d = \left\{ p_{p_d} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_d} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_d, d \in [\underline{d}_3, \overline{d}_3] \right\}, \quad (5.1)$$

onde $\overline{\sigma}_d$ é a representação dual da casca esférica \overline{S}_3 , assim como em (4.20).

Consideremos a seguinte representação para a casca esférica \overline{S}_4 ,

$$\overline{\sigma}_r = a_4 - \frac{r^2}{2} e_\infty, \quad (5.2)$$

com $r \in [\underline{d}_4, \overline{d}_4]$ e $a_4 = e_0 + \mathbf{a}_4 + \frac{\|\mathbf{a}_4\|^2}{2} e_\infty$. Então, de acordo com o que fizemos anteriormente, a interseção do círculo κ com a casca $\overline{\sigma}_r$ pode ser: vazia; um ponto; ou o par de arcos dado por

$$\xi_r = \left\{ p_{p_r} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_r} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_r, r \in [\underline{d}_4, \overline{d}_4] \right\}. \quad (5.3)$$

Supondo que o resultado da interseção entre a casca $\overline{\sigma}_r$ com o círculo κ é o par de arcos ξ_r (5.3), desejamos obter a interseção deste com o par de arcos ξ_d (5.1). Portanto,

o resultado procurado é dado por

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \kappa \wedge \underline{\sigma}_d \wedge \underline{\sigma}_r, \ d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3], \ r \in [\underline{d}_4, \bar{d}_4] \right\}. \quad (5.4)$$

Observações. Notemos que a solução acima é uma restrição do par de arcos ξ_d . Ou seja, a solução é um subconjunto de ξ_d . A solução obtida em (5.4) equivale à interseção entre os pares de arcos ξ_d e ξ_r . Além disso, o produto externo em (5.4) realiza a interseção entre as cascas esféricas $\underline{\sigma}_d$ e $\underline{\sigma}_r$ e o círculo κ , de forma que a parte do círculo que não pertença à solução seja desconsiderada.

5.2 Cascas esféricas auxiliares

Vejamos como simplificar a solução obtida em (5.4).

Um resultado conhecido para interseção de dois intervalos reais $[a, b]$ e $[c, d]$ é que:

$$[a, b] \cap [c, d] = [\max\{a, c\}, \min\{b, d\}], \quad (5.5)$$

onde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$. A fim de usar este resultado, vamos obter o par de arcos ξ_d (5.1), através de cascas esféricas auxiliares centradas em um mesmo ponto.

As extremidades do par de arcos ξ_d podem ser obtidas através do uso de matrizes [23], ou pela fórmula (2.34). Logo, por (4.18) e (4.19),

$$\begin{aligned} p_{p_1}^{-*} &= (\kappa \wedge \underline{\sigma}_3)^{-*} = p_1 \wedge p_2, \\ p_{p_2}^{-*} &= (\kappa \wedge \bar{\sigma}_3)^{-*} = p_3 \wedge p_4. \end{aligned}$$

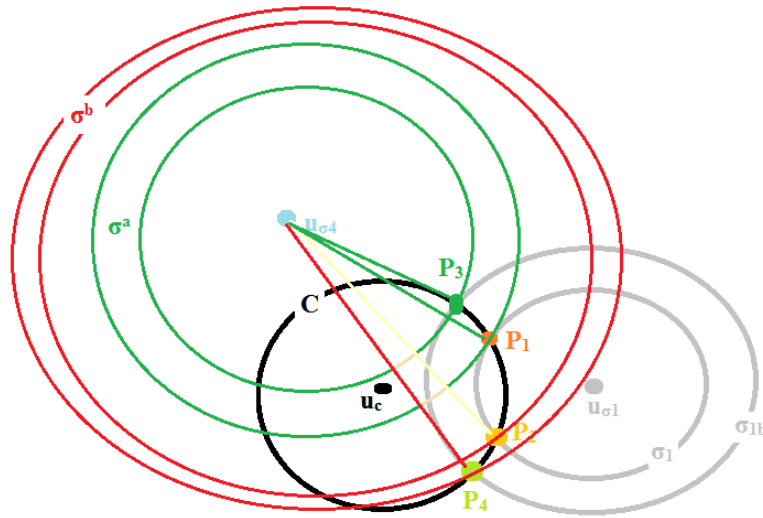


Figura 35 – Diagrama com as cascas esféricas auxiliares.

De posse dos pontos p_1, p_2, p_3 e p_4 ¹ determinamos os raios das cascas esféricas auxiliares $\underline{\sigma}^a$ e $\underline{\sigma}^b$ para a situação descrita no diagrama da Figura 35:

$$\underline{\sigma}^a = a_4 - \frac{r_a^2}{2} e_\infty, \quad \underline{\sigma}^b = a_4 - \frac{r_b^2}{2} e_\infty, \quad (5.6)$$

para $r_a \in [\underline{r}_a, \bar{r}_a]$ e $r_b \in [\underline{r}_b, \bar{r}_b]$, sendo \underline{r}_a e \bar{r}_a definidos como

$$\underline{r}_a^2 = \min_{i=1,3} \left\{ \frac{(\sigma_i^a)^2}{(\sigma_i^a \cdot e_\infty)^2} \right\}, \quad \bar{r}_a^2 = \max_{i=1,3} \left\{ \frac{(\sigma_i^a)^2}{(\sigma_i^a \cdot e_\infty)^2} \right\}, \quad (5.7)$$

onde

$$\sigma_i^a = p_i \cdot (a_4 \wedge e_\infty),$$

para $i = 1, 3$. Os valores de \underline{r}_b e \bar{r}_b são definidos de forma análoga,

$$\underline{r}_b^2 = \min_{i=2,4} \left\{ \frac{(\sigma_i^b)^2}{(\sigma_i^b \cdot e_\infty)^2} \right\}, \quad \bar{r}_b^2 = \max_{i=2,4} \left\{ \frac{(\sigma_i^b)^2}{(\sigma_i^b \cdot e_\infty)^2} \right\}, \quad (5.8)$$

onde

$$\sigma_i^b = p_i \cdot (a_4 \wedge e_\infty),$$

para $i = 2, 4$.

Denominaremos o arco indo de p_1 a p_3 de s_1 e o arco indo de p_2 a p_4 de s_2 ². Como na construção vista não estamos levando em conta a orientação do círculo, então os arcos s_1 e s_2 continuam os mesmos se invertemos as orientações consideradas para s_1 e s_2 , *i.e.*, são conjuntos de pontos iguais. Assim, invertendo a orientação, o arco indo de p_3 a p_1 continua sendo o arco s_1 já definido. O mesmo vale para o arco s_2 .

Obtendo a solução. Tendo definido as cascas auxiliares $\underline{\sigma}^a$ e $\underline{\sigma}^b$, como acima, podemos obter os arcos s_1 e s_2 de ξ_d de forma que, quando acrescentarmos a segunda casca esférica \bar{S}_4 , o problema seja simplificado. Notemos que agora todas as cascas envolvidas nesta etapa estão centradas em \mathbf{a}_4 . Dessa maneira, após obter o par de arcos resultante da interseção das esferas S_1 e S_2 com a casca \bar{S}_3 , dado por ξ_d , construímos as cascas esféricas auxiliares centradas em \mathbf{a}_4 , através das quais obtemos estes arcos. Assim, podemos usar a análise feita em (5.5) para determinar a solução do problema quando acrescentamos a segunda casca esférica \bar{S}_4 .

As cascas auxiliares $\underline{\sigma}^a$ e $\underline{\sigma}^b$ em (5.6) são tais que

$$\begin{aligned} \underline{\sigma}^a \Big|_{r_a=\underline{r}_a} \cap \kappa &= \underline{\sigma}^a \wedge \kappa = p_3 \wedge p_3', \\ \underline{\sigma}^a \Big|_{r_a=\bar{r}_a} \cap \kappa &= \bar{\sigma}^a \wedge \kappa = p_1 \wedge p_1' \end{aligned}$$

¹ Adiante mostraremos como identificar estes pontos algebricamente.

² Adiante veremos como obter os arcos s_1 e s_2 de forma explícita.

e

$$\begin{aligned} \left. \underline{\sigma}^b \right|_{r_b=\underline{r}_b} \cap \kappa &= \underline{\sigma}^b \wedge \kappa = p_2 \wedge p_2', \\ \left. \underline{\sigma}^b \right|_{r_b=\bar{r}_b} \cap \kappa &= \bar{\sigma}^b \wedge \kappa = p_4 \wedge p_4'. \end{aligned}$$

Isso mostra que, embora as cascas esféricas auxiliares gerem os arcos s_1 e s_2 , elas também geram outros arcos que podem não ter relação com a solução do problema, *i.e.*, geram os pontos p_i' . No entanto, como a solução está contida nos arcos s_1 e s_2 que formam ξ_d , o efeito da interseção com a segunda casca esférica será o de restringi-los. Ou seja, a solução será um subconjunto dos arcos s_1 e s_2 já obtidos. Isso garante que a parte que possivelmente não pertença à solução seja ignorada, visto que

$$\underline{\sigma}^a \cap s_1 = s_1, \quad (5.9)$$

$$\underline{\sigma}^b \cap s_1 = s_2. \quad (5.10)$$

Após construir as cascas esféricas auxiliares (5.6), comparamos os raios destas com os raios das cascas interna e externa de \bar{S}_4 , *i.e.*, com $r = \underline{d}_4, \bar{d}_4$. Nesta etapa, temos as seguintes possibilidades: (i) $r < \underline{r}_i$; (ii) $\underline{r}_i \leq r \leq \bar{r}_i$; (iii) $\bar{r}_i < r < \underline{r}_j$; (iv) $\underline{r}_i \leq \underline{d}_4 \leq \bar{r}_i$ e $\underline{r}_j \leq \bar{d}_4 \leq \bar{r}_j$; (v) $r_i > \bar{r}_b$, para $r = \underline{d}_4, \bar{d}_4$, $i, j = a, b$ e $i \neq j$.

Por fim, usando (5.5), determinamos a solução do problema:

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \kappa \wedge \sigma_d \wedge \underline{\sigma}_{r_{ab}}, \quad d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3], \quad r_{ab} \in [\underline{r}_{ab}, \bar{r}_{ab}] \right\}, \quad (5.11)$$

onde $\underline{\sigma}_{r_{ab}} = c_4 - \frac{r_{ab}^2}{2} e_\infty$ e $[\underline{r}_{ab}, \bar{r}_{ab}]$ é obtido de acordo com as possibilidades (i) a (v) acima.

Observações. Pela construção aqui feita, temos que $[\underline{r}_{ab}, \bar{r}_{ab}] \subseteq [\underline{d}_4, \bar{d}_4]$. Ou seja, a solução na forma (5.11) é mais compacta do que (5.4). Isso ocorre porque não realizamos a interseção de ξ_d (5.1) com todos os pontos da segunda casca \bar{S}_4 , associados aos raios correspondentes ao intervalo $[\underline{d}_4, \bar{d}_4]$, pois restringimos os raios de \bar{S}_4 somente aos valores onde a interseção é não vazia. Notamos ainda que a solução é a interseção da casca esférica $\underline{\sigma}_{r_{ab}}$ com o círculo κ , descartando a parte desta interseção que não faz parte de ξ_d , o que foi feito através do produto externo: $\kappa \wedge \sigma_d \wedge \underline{\sigma}_{r_{ab}}$.

5.3 Obtendo um par de arcos explicitamente

Através de (2.34), podemos obter o par de arcos s_1 e s_2 que formam ξ_d (5.1):

$$s_1 = \frac{p_{p_d}^{-*} - \sqrt{p_{p_d}^{-*} \cdot p_{p_d}^{-*}}}{e_\infty \cdot p_p^{-*}}, \quad (5.12)$$

$$s_2 = \frac{-p_{p_d}^{-*} + \sqrt{p_{p_d}^{-*} \cdot p_{p_d}^{-*}}}{e_\infty \cdot p_{p_d}^{-*}}, \quad (5.13)$$

onde $p_{p_d} = \kappa \wedge \bar{\sigma}_d$ e $d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3]$.

Obtendo as extremidades dos arcos em ξ_d . Usando as expressões acima obtemos de forma direta as extremidades dos arcos s_1 e s_2 , já que

$$p_1 = s_1 \Big|_{d=\underline{d}_3}, \quad p_3 = s_1 \Big|_{d=\bar{d}_3},$$

e

$$p_2 = s_2 \Big|_{d=\underline{d}_3}, \quad p_4 = s_2 \Big|_{d=\bar{d}_3}.$$

Nas igualdades acima usamos o fato de que, como consideramos somente os pontos sobre um mesmo arco em (5.12) e (5.13), basta avaliar tais expressões para o valor do parâmetro $d \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3]$ correspondente às extremidades dos arcos para recuperarmos os pontos nas extremidades de s_1 e s_2 .

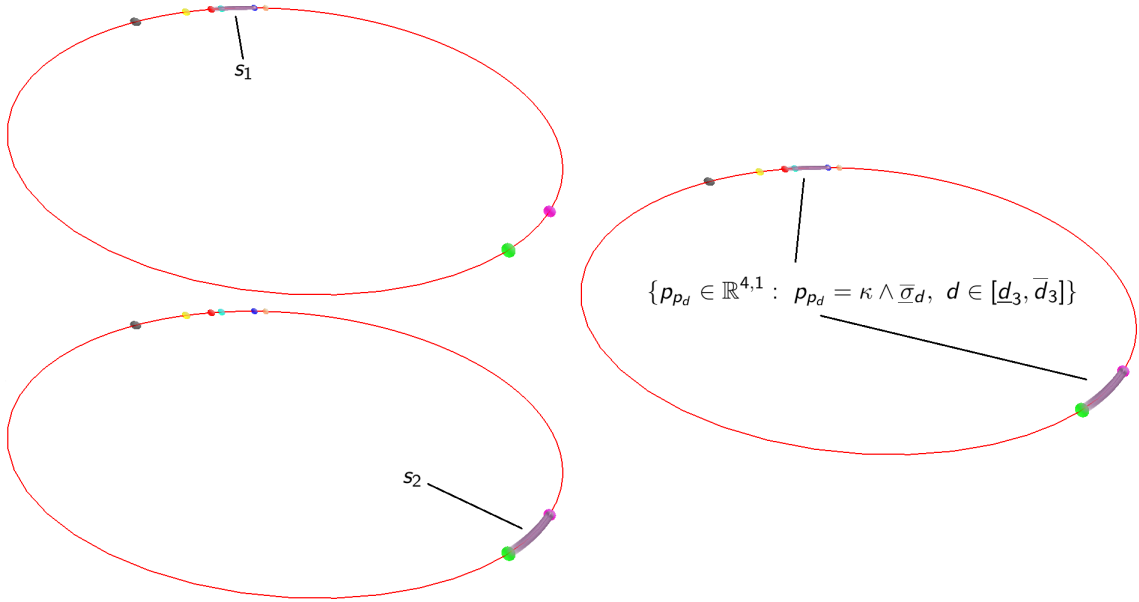


Figura 36 – Testes das expressões para o par de arcos.

5.4 Testes computacionais

A fim de testarmos o que foi apresentado acima, vejamos um problema adaptado de [16], em que a versão original foi resolvida utilizando rotores ³. Consideremos as esferas S_1, S_2 de centros $\mathbf{a}_1 = (-4, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (-3, -1.1133, 1.3268)$ e raios $d_1 = 3.1102$, $d_2 = 1.3$, e as cascas esféricas \bar{S}_3, \bar{S}_4 , de centros $\mathbf{a}_3 = (0, 0, 0)$, $\mathbf{a}_4 = (-1.3720, -1.8260, 3.6596)$ e raios intervalares $d_3 \in [\underline{d}_3, \bar{d}_3] = [3.5, 3.7]$, $d_4 \in [\underline{d}_4, \bar{d}_4] = [1.772, 1.9]$. Lembremos que o caso clássico não trata do problema com uma segunda casca esférica.

³ A única mudança com respeito ao problema original é que alteramos o intervalo $[\underline{d}_4, \bar{d}_4] = [1.772, 1.8]$ para $[\underline{d}_4, \bar{d}_4] = [1.772, 1.9]$, de forma a ilustrar o uso das cascas esféricas auxiliares.

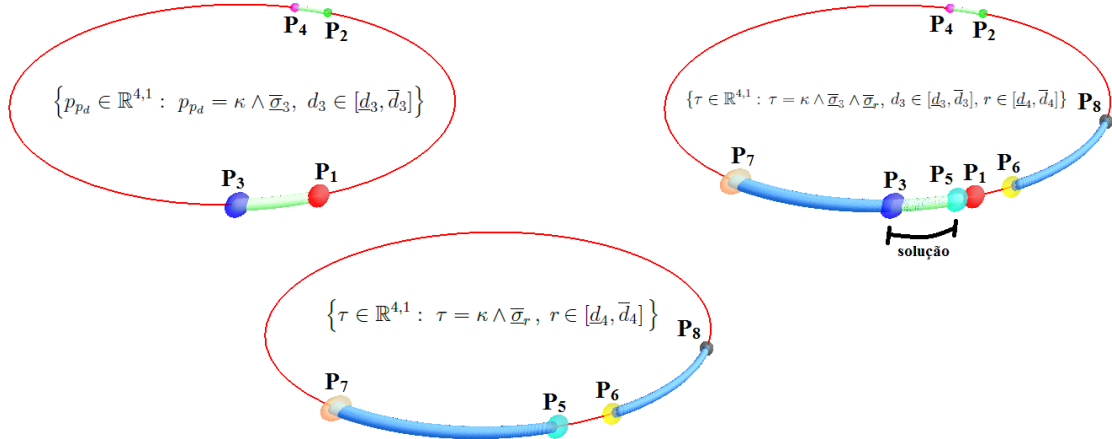


Figura 37 – Interseção com duas cascas esféricas via AGC.

De forma direta, por (5.4), a solução é dada por

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \kappa \wedge \overline{\sigma}_d \wedge \overline{\sigma}_r, d \in [3.5, 3.7], r \in [1.772, 1.9] \right\}, \quad (5.14)$$

onde $\overline{\sigma}_d$ e $\overline{\sigma}_r$ representam, respectivamente, as cascas esféricas \overline{S}_3 e \overline{S}_4 , conforme (5.1) e (5.2), κ representa o círculo $\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2$ e σ_1 e σ_2 são as esferas S_1 e S_2 , assim como antes.

Obtendo a solução via cascas esféricas auxiliares. Com auxílio do CLUCalc [20], obtemos o resultado da interseção entre a casca esférica \overline{S}_3 , representada por $\overline{\sigma}_d$, e o círculo κ , *i.e.*, o par de arcos (5.1). Denominaremos de s_1 e s_2 os arcos que formam (5.4).

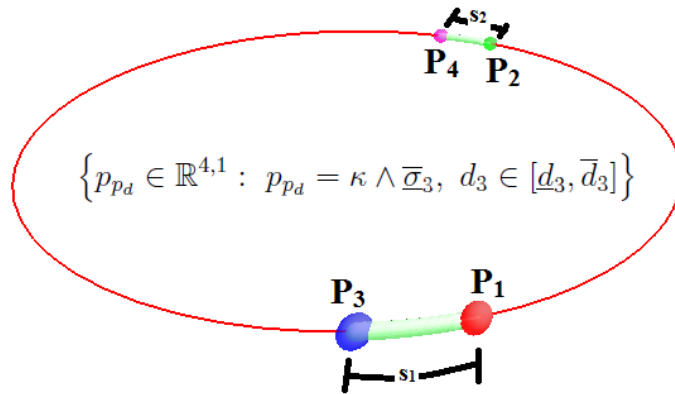
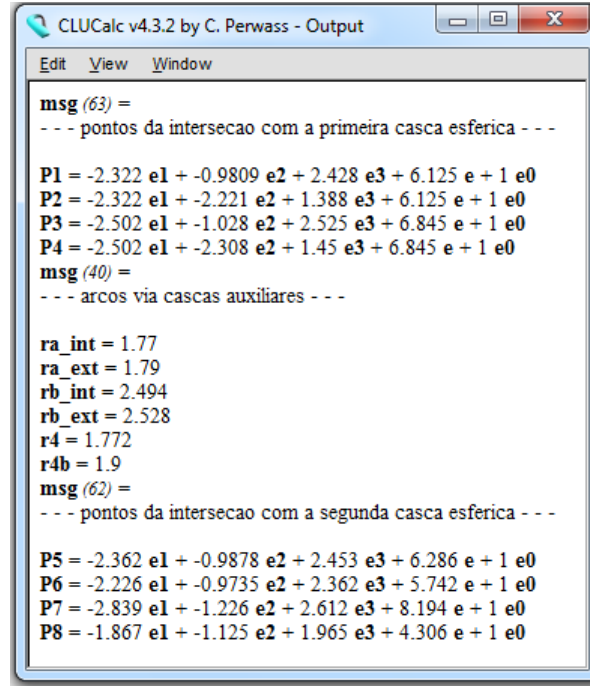


Figura 38 – Interseção com a primeira casca esférica via AGC.

Abaixo temos os resultados de experimentos feitos com o CLUCalc, para os dados de entrada deste exemplo.



```

CLUCalc v4.3.2 by C. Perwass - Output
Edit View Window

msg (63) =
--- pontos da intersecao com a primeira casca esferica ---

P1 = -2.322 e1 + -0.9809 e2 + 2.428 e3 + 6.125 e + 1 e0
P2 = -2.322 e1 + -2.221 e2 + 1.388 e3 + 6.125 e + 1 e0
P3 = -2.502 e1 + -1.028 e2 + 2.525 e3 + 6.845 e + 1 e0
P4 = -2.502 e1 + -2.308 e2 + 1.45 e3 + 6.845 e + 1 e0
msg (40) =
--- arcos via cascas auxiliares ---

ra_int = 1.77
ra_ext = 1.79
rb_int = 2.494
rb_ext = 2.528
r4 = 1.772
r4b = 1.9
msg (62) =
--- pontos da intersecao com a segunda casca esferica ---

P5 = -2.362 e1 + -0.9878 e2 + 2.453 e3 + 6.286 e + 1 e0
P6 = -2.226 e1 + -0.9735 e2 + 2.362 e3 + 5.742 e + 1 e0
P7 = -2.839 e1 + -1.226 e2 + 2.612 e3 + 8.194 e + 1 e0
P8 = -1.867 e1 + -1.125 e2 + 1.965 e3 + 4.306 e + 1 e0

```

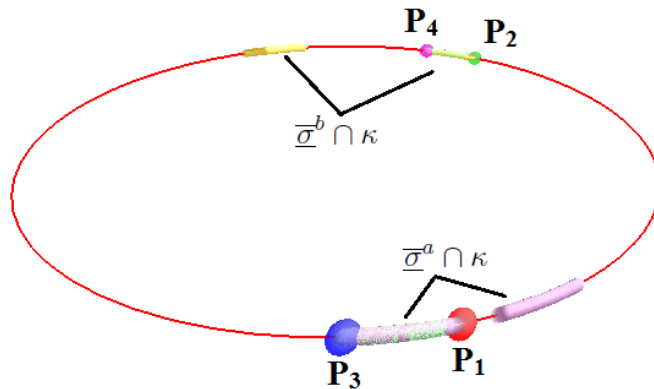
Figura 39 – Resultados obtidos com o CLUCalc.

Usando (5.7) e (5.8) determinamos os raios internos e externos das cascas esféricas auxiliares $\underline{\sigma}^a$ e $\underline{\sigma}^b$. Pelos resultados da Figura 39, neste exemplo, temos que

$$r_a = 1.77, \quad \bar{r}_a = 1.79, \quad (5.15)$$

$$r_b = 2.494, \quad \bar{r}_b = 2.528. \quad (5.16)$$

De posse dos raios internos e externos acima, definimos as cascas esféricas auxiliares $\underline{\sigma}^a$ e $\underline{\sigma}^b$ centradas em \mathbf{a}_4 , conforme (5.6). Com isso obtemos os arcos s_1 e s_2 , que vão de p_1 a p_3 e de p_2 a p_4 , respectivamente.

Figura 40 – Arcos s_1 e s_2 via cascas esféricas auxiliares.

Na figura acima vemos que, embora as cascas auxiliares forneçam os pares de arcos s_1 e s_2 , surge uma parte que pode não pertencer à solução. Adiante, na etapa final da obtenção da solução, as partes indesejadas serão ignoradas por meio da interseção através do produto externo, conforme (5.9) e (5.10). De fato, tendo obtido os par de arcos s_1 e s_2 , o efeito da interseção com a segunda casca esférica é de restringi-los.

Por (5.15), (5.16) e definição da casca esférica \overline{S}_4 representada por $\overline{\sigma}_r$ (5.2), temos que

$$\begin{aligned} \underline{r}_a &\leq \underline{d}_4 \leq \overline{r}_a, \\ \overline{r}_a &< \overline{d}_4 < \underline{r}_b. \end{aligned}$$

Logo, os raios das cascas esféricas auxiliares e de \overline{S}_4 estão de acordo com as condições (ii) e (iii), mencionadas anteriormente. Então, usando (5.5), obtemos o parâmetro que será usado na solução do problema:

$$r_{ab} \in [\max\{\underline{r}_a, \underline{d}_4\}, \min\{\overline{r}_a, \overline{d}_4\}].$$

Ou seja,

$$r_{ab} \in [1.772, 1.79].$$

Portanto, a solução procurada é dada por

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \kappa \wedge \overline{\sigma}_d \wedge \overline{\sigma}_{r_{ab}}, d \in [3.5, 3.7], r_{ab} \in [1.772, 1.79] \right\}, \quad (5.17)$$

onde $\overline{\sigma}_{r_{ab}} = c_4 - \frac{r_{ab}^2}{2} e_\infty$. Comparando (5.17) com a solução obtida anteriormente (5.14), verificamos que $[\underline{r}_{ab}, \overline{r}_{ab}] = [1.772, 1.79] \subseteq [\underline{d}_4, \overline{d}_4] = [1.772, 1.9]$. Computacionalmente, obter a solução (5.17) é mais simples do que (5.14), pois realizamos o produto exterior levando em conta intervalos menores.

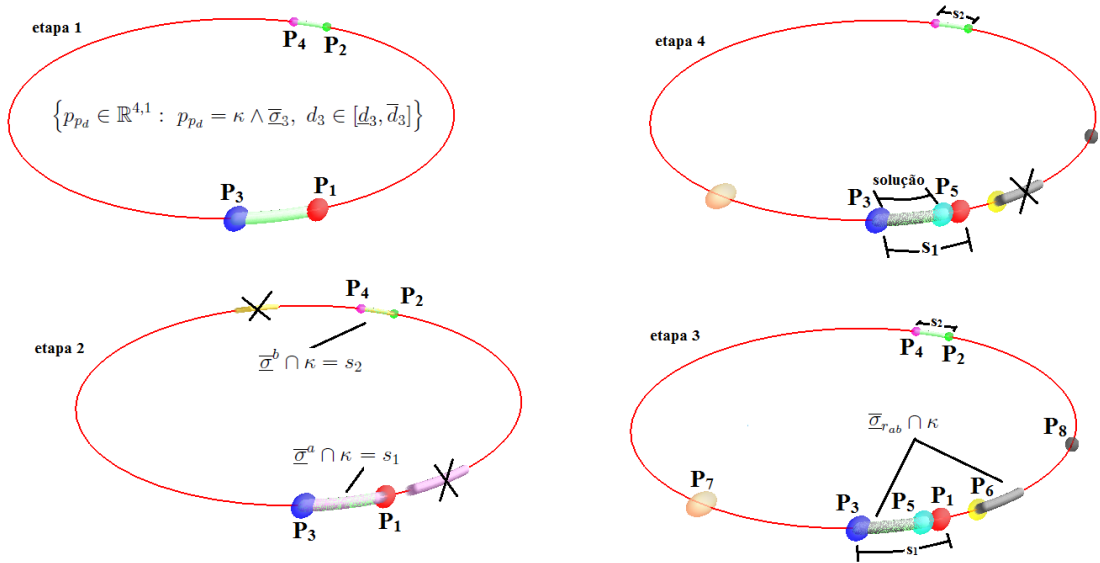


Figura 41 – Etapas para se obter a solução.

Notamos pela figura acima que, para obter a solução do nosso problema, inicialmente realizamos a interseção do círculo κ com a casca \overline{S}_3 , representada por $\overline{\sigma}_d$. Obtemos como resultado desta etapa o par de arcos s_1 e s_2 . Em seguida, construímos as cascas esféricas auxiliares $\overline{\sigma}^a$ e $\overline{\sigma}^b$, de forma que, por meio destas, possamos representar s_1 e s_2 através de cascas centradas em um mesmo ponto. Como dissemos anteriormente, nesta etapa pode surgir, além do par de arcos, uma parte que não faz parte da solução. No entanto, após termos construído a casca $\overline{\sigma}_{r_{ab}}$, como em (5.17), na etapa final não consideramos tal parte no conjunto solução, pois realizamos a interseção desta com os arcos s_1 e s_2 , conforme (5.9) e (5.10). Esse passo é ilustrado na etapa 4 da Figura 41, e corresponde às interseções feitas via produto exterior na solução (5.17).

Observações. No exemplo acima reduzimos o intervalo $[d_4, \overline{d}_4]$ que faz parte da solução (5.4) ao intervalo $[r_{ab}, \overline{r}_{ab}]$. Utilizando a mesma estratégia feita com as cascas auxiliares, poderíamos ter reduzido $[d_3, \overline{d}_3]$ ao invés de $[d_4, \overline{d}_4]$. Neste caso, as cascas esféricas seriam centradas em \mathbf{a}_3 no lugar de \mathbf{a}_4 . Embora possamos reduzir um dos dois intervalos envolvidos na solução, a construção aqui feita não possibilita a redução dos dois intervalos ao mesmo tempo.

5.5 Utilizando a abordagem via AGC em aplicações

Vejamos como realizar a interseção entre duas esferas e duas cascas esféricas no \mathbb{R}^3 utilizando as ideias descritas anteriormente e como este problema pode aparecer na principal aplicação considerada neste trabalho.

Caso geral. A fim de fixar a notação, inicialmente rerepresentaremos algumas definições já vistas. Na busca de simplificar o exemplo de aplicação, agora usamos uma forma mais compacta para as definições usuais.

Denotemos por S_1 e S_2 duas esferas e por \overline{S}_3 e \overline{S}_4 duas cascas esféricas no \mathbb{R}^3 . Estaremos assumindo que o conjunto formado por todos os centros é L.I. Usando a mesma notação vista anteriormente na abordagem via AGC, a interseção do círculo $\kappa = \sigma_1 \wedge \sigma_2$ com a casca \overline{S}_3 é dada por

$$\{p_{p_d} \in \mathbb{R}^{4,1} : p_{p_d} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_3, d_3 \in [d_3, \overline{d}_3]\},$$

onde $\overline{\sigma}_3$ é a representação dual de \overline{S}_3 .

Portanto, a solução da interseção entre as duas esferas e as duas cascas esféricas pode ser expressa por

$$\{\tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \kappa \wedge \overline{\sigma}_3 \wedge \overline{\sigma}_4, d_3 \in [d_3, \overline{d}_3], d_4 \in [d_4, \overline{d}_4]\}, \quad (5.18)$$

onde $\overline{\sigma}_4$ é a representação dual de \overline{S}_4 .

Observações. Através das cascas esféricas auxiliares podemos reduzir $[d_3, \bar{d}_3]$, ou $[d_4, \bar{d}_4]$, a $[r_{ab}, \bar{r}_{ab}]$. Ressaltamos que os pares de arcos solução em (5.18) podem ser obtidos explicitamente, conforme descrito anteriormente.

Realizando a poda no caso de distâncias intervalares. Suponhamos que temos um DMDGP envolvendo cinco átomos, de forma que as posições dos três primeiros são conhecidas, as distâncias $d_{3,4}, d_{2,4}$ são precisas e que $d_{1,4} \in [d_{1,4}, \bar{d}_{1,4}]$. Então, no lugar de um par de pontos como possíveis soluções para o quarto vértice v_4 , temos um par de arcos s_4, s'_4 como realização de v_4 . Denotemos tal posição por \mathbf{x}_4 . Seguindo o algoritmo BP, para cada $\mathbf{x}_4 \in s_4$, se $d_{4,5}$ e $d_{3,5}$ são distâncias precisas e $d_{2,5} \in [d_{2,5}, \bar{d}_{2,5}]$, então temos o par de arcos s_5, s'_5 como realização de v_5 . Agora supondo que temos uma distância extra intervalar $d_{1,5} \in [d_{1,5}, \bar{d}_{1,5}]$, desejamos testar a factibilidade de \mathbf{x}_5 . Escolhemos o arco s_5 como a solução atual no nível cinco, *i.e.*, como \mathbf{x}_5 .

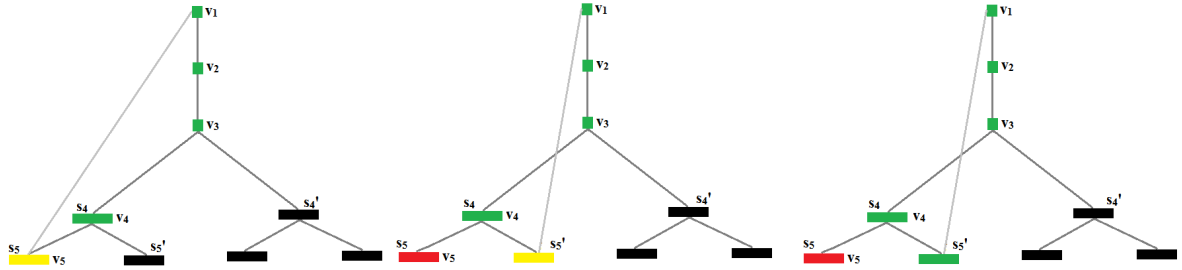
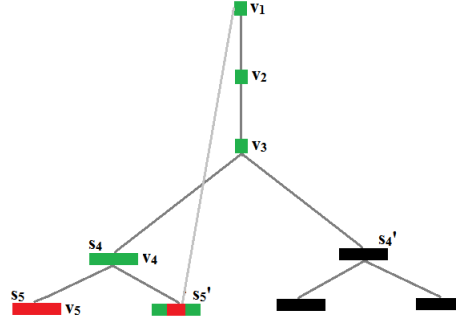


Figura 42 – Esquema de árvore *iBP* envolvendo poda (1).

Devido à existência da distância intervalar $d_{1,5}$ precisamos testar quais pontos do arco s_5 estão contidos na casca esférica $S_a(\mathbf{a}_1, d_{1,5}, \bar{d}_{1,5})$. Vejamos como proceder para realizar tal teste.

Inicialmente, notemos que s_5 é parte do círculo κ , resultante da interseção das esferas $S_b(\mathbf{a}_3, d_{3,5}), S_c(\mathbf{a}_4, d_{4,5})$. Logo, testamos a factibilidade procurando os pontos \mathbf{x}_5 em s_5 tais que $\|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_1\| \in [d_{1,5}, \bar{d}_{1,5}]$. Assim, para obter todos pontos \mathbf{x}_5 em s_5 que são factíveis, após representar o arco s_5 pela casca esférica auxiliar $\bar{\sigma}_{a,b}$ centrada em \mathbf{a}_1 , temos que verificar se ocorrem as condições $d_{1,5} \leq r_{ab}$ e $\bar{r}_{ab} \leq \bar{d}_{1,5}$. Pontos que não satisfazem estas condições são descartados por meio do produto exterior usado para realizar a interseção, assim como antes. A Figura 42 ilustra este procedimento em um caso em que tivemos infactibilidade para todos pontos em s_5 mas factibilidade para todos \mathbf{x}_5 em s'_5 . Já a figura abaixo ilustra um caso em que, sob a configuração das distâncias intervalares envolvidas, as posições factíveis para \mathbf{x}_5 são apenas uma parte do arco s'_5 .

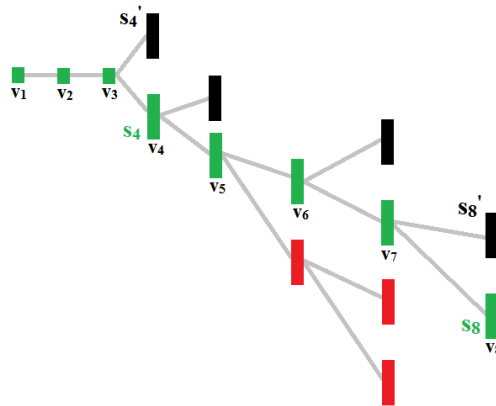
Figura 43 – Esquema de árvore *iBP* envolvendo poda (2).

Dessa maneira, as posições factíveis \mathbf{x}_5 devem satisfazer o seguinte sistema não-linear

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_4\| = d_{4,5}, \\ \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_3\| = d_{3,5}, \\ \underline{d}_{2,5} \leq \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_2\| \leq \bar{d}_{2,5}, \\ \underline{d}_{1,5} \leq \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_1\| \leq \bar{d}_{1,5}, \end{cases}$$

onde $\mathbf{x}_5 = \mathbf{x}_5(\mathbf{x}_4)$ e $\mathbf{x}_4 \in s_4 \cup s_4'$.

Testes envolvendo centros móveis. Suponhamos que desejemos determinar \mathbf{x}_8 , em um DMDGP intervalar tal que $d_{i-1,i}$ e $d_{i-2,i}$ são distâncias precisas e $d_{i-3,i}$ é intervalar, onde $i = 4, \dots, 8$. A Figura 44 ilustra o comportamento da árvore *iBP* em termos dos pares de arcos que surgem a cada passo do algoritmo.

Figura 44 – Esquema de árvore *iBP* envolvendo poda (3).

Logo, desejamos encontrar todos os $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ tais que

$$\begin{cases} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_7\| = d_{7,8}, \\ \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_6\| = d_{6,8}, \\ \underline{d}_{5,8} \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_5\| \leq \bar{d}_{5,8}, \end{cases} \quad (5.19)$$

onde $\mathbf{x}_7 = \mathbf{x}_7(\mathbf{x}_6, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_4)$, $\mathbf{x}_6 = \mathbf{x}_6(\mathbf{x}_5, \mathbf{x}_4)$, $\mathbf{x}_5 = \mathbf{x}_5(\mathbf{x}_4)$ e $\mathbf{x}_4 \in s_4 \cup s'_4$. Portanto, os pontos que satisfazem (5.19) são tais que

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_8(\mathbf{x}_7, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_4) \in s_8 \cup s'_8, \quad (5.20)$$

onde $\mathbf{x}_i \in s_i \cup s'_i$, para $i = 4, 5, 6, 7$.

Isso mostra que a posição \mathbf{x}_8 irá depender dos pontos escolhidos anteriormente nos arcos que obtivemos como solução em cada nível precedente. Como, a partir do quarto nível, temos pares de arcos como possíveis posições, nosso problema deixa de ser discretizável. Com o uso da AGC, podemos descrever os pares de arcos em termos de parâmetros conhecidos *a priori* e tratar o resultado das interseções sem a necessidade do processo de amostragem. Uma forma de incorporar essa característica de forma explícita é analisando a dependência de \mathbf{x}_8 com respeito às posições anteriores, sendo sua posição obtida em termos das distâncias intervalares antecessoras ao oitavo nível. Dessa maneira, podemos representar a solução de (5.19) por

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_8(d_{i-3,i}, d_{i-2,i}, d_{i-1,i}) \in s_8 \cup s'_8,$$

onde $d_{i-1,i}, d_{i-2,i} \in \mathbb{R}_+$ e $d_{i-3,i} \in [\underline{d}_{i-3,i}, \bar{d}_{i-3,i}]$, para $i = 4, 5, 6, 7, 8$. Assim, com auxílio da abordagem via AGC, determinamos \mathbf{x}_8 através de

$$\tau = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{5,8}, \quad (5.21)$$

onde $d_{5,8} \in [\underline{d}_{5,8}, \bar{d}_{5,8}]$, $\sigma_{i,8} = a_i - \frac{d_{i,8}^2}{2} e_\infty$, para $i = 5, 6, 7$, e os centros \mathbf{x}_6 e \mathbf{x}_7 são pontos fixados nos arcos correspondentes ao sexto e sétimo níveis, *i.e.*, $\mathbf{x}_i \in s_i \cup s'_i$, para $i = 6, 7$.

Aresta de poda levando em conta centros móveis. Suponhamos que existe uma distância $d_{i,8}$ para $i < 5$, por exemplo, $d_{4,8} \in [\underline{d}_{4,8}, \bar{d}_{4,8}]$. Então, pode ser que nem todos pontos em (5.21) sejam factíveis. Os pontos factíveis são obtidos por

$$\tau' = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{5,8} \wedge \bar{\sigma}_{4,8},$$

onde $d_{5,8} \in [\underline{d}_{5,8}, \bar{d}_{5,8}]$ e $d_{4,8} \in [\underline{d}_{4,8}, \bar{d}_{4,8}]$.

Observação. Com as cascas auxiliares, podemos reduzir $[\underline{d}_{5,8}, \bar{d}_{5,8}]$ de forma a continuar as próximas iterações do algoritmo BP sem usar o processo de amostragem.

5.6 Testes computacionais em um problema de aplicação

A fim de testar o que foi feito anteriormente, vejamos um exemplo onde temos interseções envolvendo duas cascas esféricas.

Instância considerando distâncias intervalares e um centro móvel. Consideremos um DMDGP intervalar cujos dados de entrada são: $d_{i-1,i} = 1$, $d_{i-2,i} = \sqrt{3}$, para $i = 3, \dots, 8$; $d_{1,4} \in [2.10, 2.20]$; $d_{1,5} \in [2.45, 2.55]$; $d_{2,5} \in [2.20, 2.60]$; $d_{2,6} \in [2.70, 2.90]$; $d_{3,6} \in [2.40, 2.60]$; $d_{4,7} \in [2.10, 2.30]$; $d_{4,8} \in [2.40, 2.50]$ e $d_{5,8} \in [2.20, 2.50]$.

Devido às características do problema, podemos fixar os três primeiros átomos, de forma que

$$\mathbf{x}_1 = [0 \quad 0 \quad 0], \quad \mathbf{x}_2 = [-1 \quad 0 \quad 0], \quad \mathbf{x}_3 = [-1.5 \quad \frac{\sqrt{3}}{2} \quad 0].$$

Quarto átomo. Seguindo o algoritmo BP, o próximo passo é determinar a posição \mathbf{x}_4 , o que equivale a resolver o sistema não-linear

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3\| = d_{3,4}, \\ \|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_2\| = d_{2,4}, \\ \underline{d}_{1,4} \leq \|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_1\| \leq \bar{d}_{1,4}. \end{cases}$$

Usando a AGC, o problema acima se reduz a obter $\tau_4 \in \mathbb{R}^{4,1}$ dado por

$$\tau_4 = \sigma_{3,4} \wedge \sigma_{2,4} \wedge \bar{\sigma}_{1,4}, \quad (5.22)$$

onde $\sigma_{i,4} = c_i - \frac{d_{i,4}^2}{2} e_\infty$, $i = 2, 3$ e $\bar{\sigma}_{1,4} = c_1 - \frac{d_{1,4}^2}{2} e_\infty$, sendo $d_{1,4} \in [2.10, 2.20]$. Utilizando o CLUCalc [20], computamos (5.22) para a casca interna e externa de $\bar{\sigma}_{1,4}$, obtendo as seguintes posições para $\mathbf{x}_4 \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{4_1} &= [-1.21 \quad 1.61 \quad 0.60], & \mathbf{x}_{4_2} &= [-1.21 \quad 1.61 \quad -0.60], \\ \mathbf{x}_{4_{1b}} &= [-1.42 \quad 1.49 \quad 0.78], & \mathbf{x}_{4_{2b}} &= [-1.42 \quad 1.49 \quad -0.78]. \end{aligned}$$

Como não existe $d_{i,4}$ para $i < 1$, todas as posições acima são factíveis. Logo, escolhemos $\mathbf{x}_{4_1} = [-1.21 \quad 1.61 \quad 0.60]$ para \mathbf{x}_4 . Este valor corresponde a escolher $d_{1,4} = \underline{d}_{1,4} = 2.10$ para $\bar{\sigma}_{1,4}$ em (5.22).

Quinto átomo. Agora desejamos encontrar \mathbf{x}_5 , ou seja, devemos resolver

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_4\| = d_{4,5}, \\ \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_3\| = d_{3,5}, \\ \underline{d}_{2,5} \leq \|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_2\| \leq \bar{d}_{2,5}. \end{cases}$$

O problema acima via AGC é dado por

$$\tau_5 = \sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5} \wedge \bar{\sigma}_{2,5}, \quad (5.23)$$

onde $\sigma_{i,5} = c_i - \frac{d_{i,5}^2}{2} e_\infty$, $i = 3, 4$ e $\bar{\sigma}_{2,5} = c_2 - \frac{d_{2,5}^2}{2} e_\infty$, sendo $d_{2,5} \in [2.20, 2.60]$. Logo, \mathbf{x}_5 é o par de arcos (5.23). Já que existe $d_{i,5}$ para $i < 2$, devemos levar em conta essa restrição na solução (5.23). De fato, como $d_{1,5} \in [2.45, 2.55]$, então a solução assume a seguinte forma

$$\tau_5 = \sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5} \wedge \bar{\sigma}_{2,5} \wedge \bar{\sigma}_{1,5}, \quad (5.24)$$

onde $\bar{\sigma}_{1,5} = c_1 - \frac{d_{1,5}^2}{2} e_\infty$. A expressão acima fornece as possíveis posições para \mathbf{x}_5 . A fim de ficar explícito que estamos lidando com um conjunto de posições para \mathbf{x}_5 , podemos reescrever a solução (5.24) como

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5} \wedge \bar{\sigma}_{2,5} \wedge \bar{\sigma}_{1,5}, \quad d_{2,5} \in [2.20, 2.60], \quad d_{1,5} \in [2.45, 2.55] \right\}. \quad (5.25)$$

Usando as cascas auxiliares⁴ podemos reduzir a solução acima a

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5} \wedge \bar{\sigma}_{ab}^{(5)} \wedge \bar{\sigma}_{1,5}, \quad r_{ab}^{(5)} \in [2.39, 2.44], \quad d_{1,5} \in [2.45, 2.55] \right\}, \quad (5.26)$$

de forma que $[r_{ab}^{(5)}, \bar{r}_{ab}^{(5)}] = [2.39, 2.44] \subseteq [d_{2,5}, \bar{d}_{2,5}] = [2.20, 2.60]$.

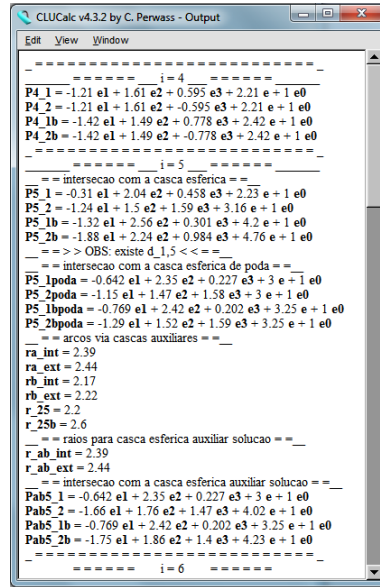


Figura 45 – Reduzindo o intervalo associado a $d_{2,5}$.

⁴ Usamos $\bar{\sigma}_{ab}^{(5)}$ para representar a casca esférica obtida via cascas esféricas auxiliares, sendo

$$\bar{\sigma}_{ab}^{(5)} = c_2 - \frac{r_{ab}^{(5)}}{2} e_\infty,$$

onde $r_{ab}^{(5)} \in [r_{a,b}^{(5)}, \bar{r}_{a,b}^{(5)}]$. A construção de $\bar{\sigma}_{ab}^{(5)}$ é feita de acordo com as condições (i) a (v) já vistas.

Com auxílio do CLUCalc podemos computar as cascas esféricas auxiliares e visualizar o resultado obtido.

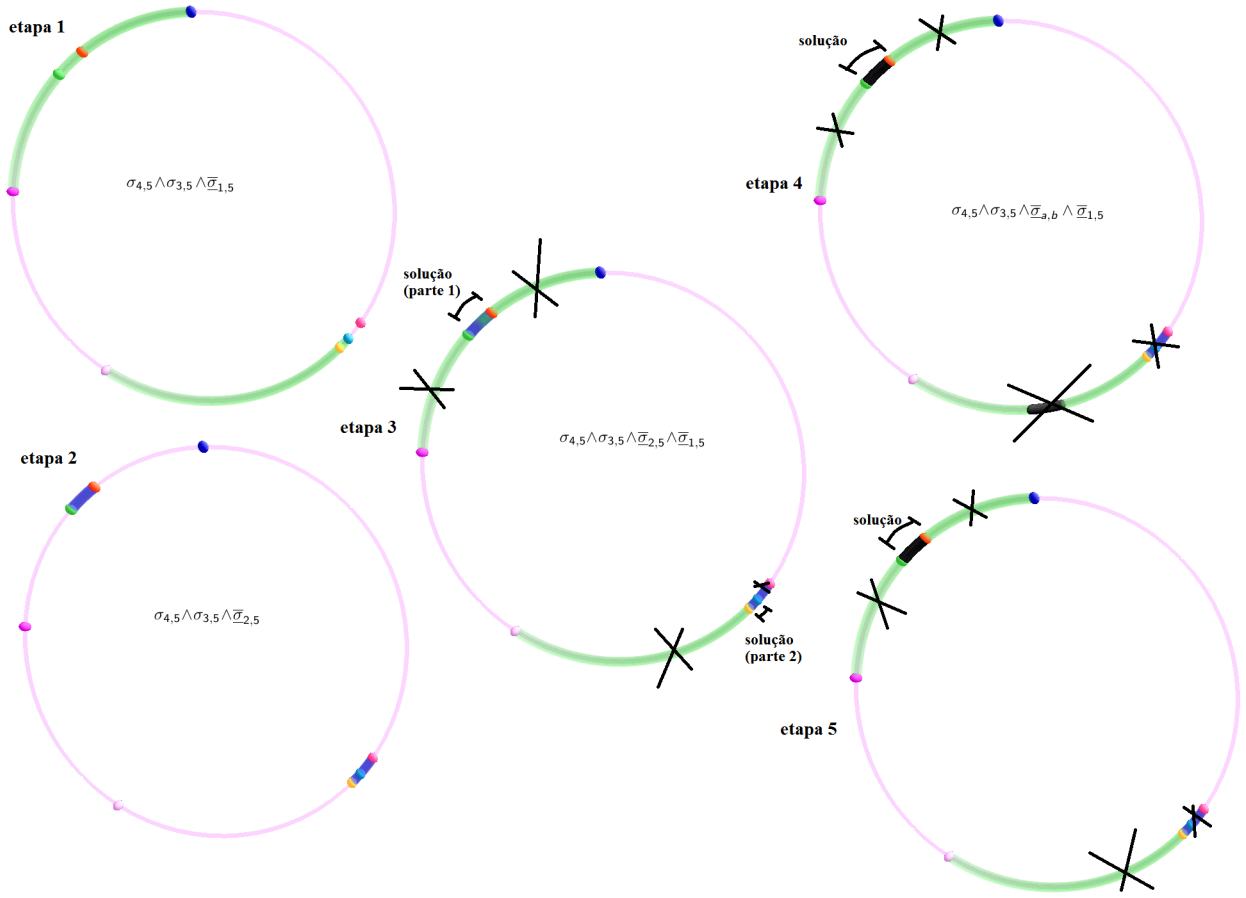


Figura 46 – Etapas para se obter a solução.

A figura acima mostra que a solução dada por (5.26) é a mesma que a obtida via cascas esféricas auxiliares (5.25). Já a Figura 45 mostra os valores obtidos nas etapas para obtenção da solução. Ressaltamos que os valores estão de acordo com o esperado. Na última etapa para determinar a qual parte do par de arcos (5.26) pertence a solução, podemos usar o teste de inclusão descrito em [35], ou então testar as extremidades dos arcos envolvidos, usando o que vimos nas seções anteriores.

Na Figura 45 a variável Pab5_1b corresponde a uma das partes do par de arcos avaliado em $r_{ab} = \bar{r}_{ab}$. Assim como antes, tal par de arcos foi obtido pela interseção do círculo $\kappa = \sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5}$ com a casca esférica $\overline{\sigma}_{ab}^{(5)}$ que determina a solução, conforme (5.26). De fato, com o auxílio do CLUCalc, temos que P5_1bpoda = Pab5_1b, sendo

$$\text{Pab5_1b} = \left(\frac{-p_{pr}^{-*} + \sqrt{p_{pr}^{-*} \cdot p_{pr}^{-*}}}{e_{\infty} \cdot p_{pr}^{-*}} \right) \Bigg|_{r_{ab} = \bar{r}_{ab}}, \quad (5.27)$$

onde $p_{pr} = \kappa \wedge \overline{\sigma}_{ab}^{(5)}$, para $r_{ab} \in [r_{ab}^{(5)}, \bar{r}_{ab}^{(5)}] = [2.39, 2.44]$. Ou seja, dentre as partes do par de arcos gerado da interseção de $\overline{\sigma}_{ab}$ com κ , uma das partes que é factível corresponde

àquela dada por (5.27), sendo que o parâmetro r usado na fórmula para o par de arcos é r_{ab} . Escolhemos essa parte como o arco solução no quinto nível.

Observação sobre $r_{a,b}^{(5)}$. Analisando os dados de saída descritos na Figura 45, notamos que $r_{a,b}^{(5)} \in [2.20, 2.22] \cup [2.39, 2.44] \subseteq [\underline{d}_{2,5}, \bar{d}_{2,5}] = [2.20, 2.60]$. Ou seja, $[r_{a,b}^{(5)}, \bar{r}_{a,b}^{(5)}]$ é a união de dois conjuntos que levam a factibilidade para a posição \mathbf{x}_5 . A fim de continuarmos os próximos passos do algoritmo BP, nesta etapa escolhemos o intervalo $[2.39, 2.44]$ para o raio da casca esférica associada a $r_{a,b}^{(5)}$. Dessa maneira, ao invés de considerarmos todos os pontos associados a $[\underline{d}_{2,5}, \bar{d}_{2,5}] = [2.20, 2.60]$, escolhemos um subconjunto desses que levam a factibilidade. Outra possibilidade nesta etapa é escolhermos $[r_{a,b}^{(5)}, \bar{r}_{a,b}^{(5)}] = [2.20, 2.22]$. Esta escolha também levará a posições factíveis para \mathbf{x}_5 .

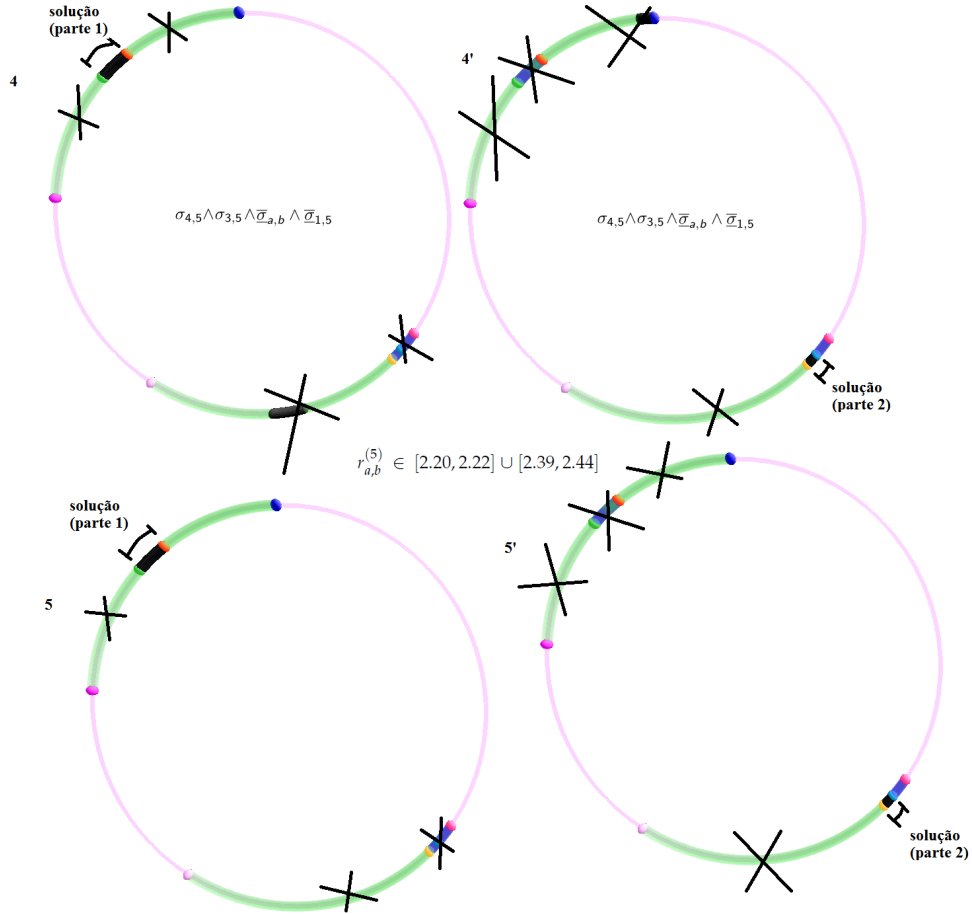


Figura 47 – Arcos factíveis para a solução \mathbf{x}_5 .

Assim como para as possíveis posições de \mathbf{x}_4 (5.22), para \mathbf{x}_5 , encontramos o par de arcos (5.26) como as possíveis posições. A fim de continuarmos a busca no próximo nível da árvore BP, *i.e.*, para determinar \mathbf{x}_6 , devemos escolher uma posição para \mathbf{x}_5 em um dos arcos em (5.26).

Sexto átomo. Dentre as soluções (5.26), fixemos $\mathbf{x}_5 = [-0.77 \quad 2.42 \quad 0.20]$ para posição \mathbf{x}_5 . De acordo com a Figura 45, isto equivale a escolher

$$r_{ab}^{(5)} = \bar{r}_{ab}^{(5)} = 2.44$$

em

$$\sigma_{4,5} \wedge \sigma_{3,5} \wedge \underline{\sigma}_{ab}^{(5)}.$$

Assim como feito anteriormente, para encontrar \mathbf{x}_6 , precisamos resolver

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_6 - \mathbf{x}_5\| = d_{5,6}, \\ \|\mathbf{x}_6 - \mathbf{x}_4\| = d_{4,6}, \\ \underline{d}_{3,6} \leq \|\mathbf{x}_6 - \mathbf{x}_3\| \leq \bar{d}_{3,6}. \end{cases}$$

Ou seja, temos que obter

$$\tau_6 = \sigma_{5,6} \wedge \sigma_{4,6} \wedge \underline{\sigma}_{3,6}, \quad (5.28)$$

onde $\sigma_{i,6} = c_i - \frac{d_{i,6}^2}{2} e_\infty$, para $i = 3, 4, 5$ ⁵. Como existe $d_{2,6} \in [2.70, 2.90]$, então a solução (5.28) passa a ser dada por

$$\tau_6 = \sigma_{5,6} \wedge \sigma_{4,6} \wedge \underline{\sigma}_{3,6} \wedge \underline{\sigma}_{2,6}.$$

A existência da distância extra $d_{2,6}$ leva a uma restrição na solução (5.28). Assim, as possíveis posições \mathbf{x}_6 são dadas pelo conjunto

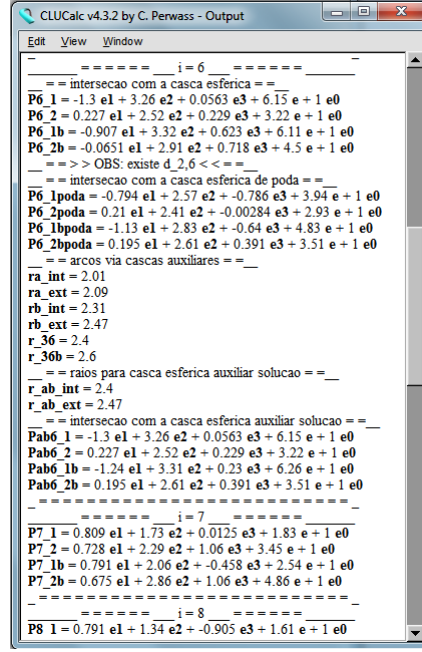
$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{5,6} \wedge \sigma_{4,6} \wedge \underline{\sigma}_{3,6} \wedge \underline{\sigma}_{2,6}, \quad d_{3,6} \in [2.40, 2.60], \quad d_{2,6} \in [2.70, 2.90] \right\}.$$

Usando as cascas auxiliares podemos reduzir a solução acima a

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{5,6} \wedge \sigma_{4,6} \wedge \underline{\sigma}_{ab}^{(6)} \wedge \underline{\sigma}_{2,6}, \quad r_{ab}^{(6)} \in [2.40, 2.47], \quad d_{2,6} \in [2.70, 2.90] \right\}$$

de forma que $[r_{ab}^{(6)}, \bar{r}_{ab}^{(6)}] = [2.40, 2.47] \subseteq [\underline{d}_{3,6}, \bar{d}_{3,6}] = [2.40, 2.60]$.

⁵ A fim de simplificar a notação, assumimos que $\underline{\sigma}_{3,6} = \sigma_{3,6} = c_3 - \frac{d_{2,6}^2}{2} e_\infty$ é a definição da casca esférica $\underline{\sigma}_{3,6}$. Usaremos tal simplificação sempre que necessário.

Figura 48 – Reduzindo o intervalo associado a $d_{3,6}$.

Sétimo átomo. A fim de determinar as possíveis posições no sétimo nível, escolhemos $\mathbf{x}_6 = [-1.24 \quad 3.31 \quad 0.23]$ para posição \mathbf{x}_6 . Pela figura acima, tal valor corresponde a fixar

$$r_{ab}^{(6)} = \bar{r}_{ab}^{(6)} = 2.47$$

em

$$\sigma_{5,6} \wedge \sigma_{4,6} \wedge \underline{\sigma}_{ab}^{(6)}.$$

Tendo escolhido \mathbf{x}_6 , precisamos resolver

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_7 - \mathbf{x}_6\| = d_{6,7}, \\ \|\mathbf{x}_7 - \mathbf{x}_5\| = d_{5,7}, \\ \underline{d}_{4,7} \leq \|\mathbf{x}_7 - \mathbf{x}_4\| \leq \bar{d}_{4,7}, \end{cases}$$

para obter \mathbf{x}_7 . Ou, de forma equivalente, computar

$$\tau_7 = \sigma_{6,7} \wedge \sigma_{5,7} \wedge \bar{\sigma}_{4,7}, \quad (5.29)$$

onde $\sigma_{i,7} = c_i - \frac{d_{i,7}^2}{2} e_\infty$, para $i = 4, 5, 6$. Logo, com a AGC, obtemos as possíveis posições para \mathbf{x}_7 dadas por τ_7 (5.29).

Oitavo átomo. Por fim, fixemos $\mathbf{x}_7 = [-0.81 \quad 1.73 \quad 0.01]$ para \mathbf{x}_7 . Esta posição corresponde a escolhermos

$$d_{4,7} = \underline{d}_{4,7} = 2.10$$

em (5.29).

Assim como antes, \mathbf{x}_8 é solução de

$$\begin{cases} \|\mathbf{x}_8 - \mathbf{x}_7\| = d_{7,8}, \\ \|\mathbf{x}_8 - \mathbf{x}_6\| = d_{6,8}, \\ \underline{d}_{5,8} \leq \|\mathbf{x}_8 - \mathbf{x}_5\| \leq \bar{d}_{5,8}. \end{cases}$$

Usando a AGC, resolver o sistema acima equivale a obter

$$\tau_8 = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{5,8},$$

onde $\sigma_{i,8} = c_i - \frac{d_{i,8}^2}{2} e_\infty$, para $i = 5, 6, 7$. A existência de $d_{4,8} \in [2.40, 2.50]$, implica na solução (5.6) agora ser dada por

$$\tau_8 = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{5,8} \wedge \bar{\sigma}_{4,8}.$$

Ou seja, a distância de poda $d_{4,8}$ restringe a solução (5.6) a um subconjunto deste. Logo, \mathbf{x}_8 é obtido por

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{5,8} \wedge \bar{\sigma}_{4,8}, d_{5,8} \in [2.20, 2.50], d_{4,8} \in [2.40, 2.50] \right\}.$$

Portanto, através das cascas auxiliares, a solução acima se reduz a

$$\left\{ \tau \in \mathbb{R}^{4,1} : \tau = \sigma_{7,8} \wedge \sigma_{6,8} \wedge \bar{\sigma}_{ab}^{(8)} \wedge \bar{\sigma}_{4,8}, r_{ab}^{(8)} \in [2.36, 2.42], d_{4,8} \in [2.40, 2.50] \right\},$$

onde $[r_{ab}^{(8)}, \bar{r}_{ab}^{(8)}] = [2.36, 2.42] \subseteq [\underline{d}_{5,8}, \bar{d}_{5,8}] = [2.20, 2.50]$. A Figura 49 mostra os resultados obtidos computacionalmente no nível oito.

```

CLUCalc v4.3.2 by C. Perwass - Output
Edit View Window
-----
===== i = 8 =====
P8_1 = 0.791 e1 + 1.34 e2 + -0.905 e3 + 1.61 e + 1 e0
P8_2 = 0.79 e1 + 0.921 e2 + 0.595 e3 + 0.913 e + 1 e0
P8_1b = 1.45 e1 + 1.78 e2 + -0.751 e3 + 2.93 e + 1 e0
P8_2b = 1.45 e1 + 1.38 e2 + 0.695 e3 + 2.25 e + 1 e0
msg =>> OBS: existe d_4,8 <<
=====
== intersecao com a casca esferica de poda ==
P8_1poda = 0.678 e1 + 1.23 e2 + -0.844 e3 + 1.35 e + 1 e0
P8_2poda = 1.14 e1 + 1.14 e2 + 0.746 e3 + 1.58 e + 1 e0
P8_1bpoda = 0.778 e1 + 1.32 e2 + -0.899 e3 + 1.58 e + 1 e0
P8_2bpoda = 1.26 e1 + 1.23 e2 + 0.748 e3 + 1.83 e + 1 e0
=====
== arcos via cascas auxiliares ==
ra_int = 2.14
ra_ext = 2.19
rb_int = 2.36
rb_ext = 2.42
r_58 = 2.2
r_58b = 2.5
=====
== raios para casca esferica auxiliar solucao ==
r_ab_int = 2.36
r_ab_ext = 2.42
=====
== intersecao com a casca esferica auxiliar solucao ==
Pab8_1 = 1.14 e1 + 1.6 e2 + -0.92 e3 + 2.36 e + 1 e0
Pab8_2 = 1.14 e1 + 1.14 e2 + 0.746 e3 + 1.58 e + 1 e0
Pab8_1b = 1.26 e1 + 1.68 e2 + -0.877 e3 + 2.59 e + 1 e0
Pab8_2b = 1.26 e1 + 1.23 e2 + 0.748 e3 + 1.83 e + 1 e0
=====

```

Figura 49 – Reduzindo o intervalo associado a $d_{5,8}$.

Observações. Neste exemplo, vimos que através da AGC conseguimos descrever o efeito da poda no caso de termos uma distância extra $d_{k,i}$ para $k < i - 3$.

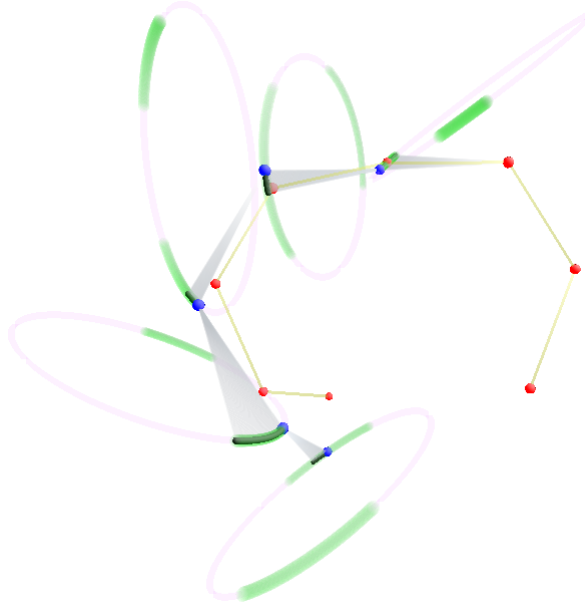


Figura 50 – Soluções fixadas e as solução obtidas para os centros fixados.

Além disso, utilizando as cascas auxiliares, reduzimos as distâncias intervalares $d_{i-3,i}$, quando há uma distância de poda disponível.

Destacamos que, para os testes envolvendo um centro móvel, o efeito da poda não levou a uma perda de factibilidade em níveis posteriores. Por exemplo, para determinar \mathbf{x}_6 , fixamos \mathbf{x}_5 e os resultados obtidos nos níveis $i = 6, 7, 8$ se mantiveram adequados.

A figura abaixo mostra a saída resultante dos experimentos computacionais feitos com o CLUCalc para este exemplo.

```

CLUCalc v4.3.2 by C. Perwass - Output
Edit View Window
----- solucao encontrada -----
x_1 = 0
x_2 = -1 e1
x_3 = -1.5 e1 + 0.866 e2
x_4 = -1.21 e1 + 1.61 e2 + 0.595 e3
x_5 = -0.769 e1 + 2.42 e2 + 0.202 e3
x_6 = 0.227 e1 + 2.52 e2 + 0.229 e3
x_7 = 0.809 e1 + 1.73 e2 + 0.0125 e3
x_8 = 1.14 e1 + 1.14 e2 + 0.746 e3
-----
===== solucao 'exata' =====
x_1 = 0
x_2 = -1 e1
x_3 = -1.5 e1 + 0.866 e2
x_4 = -1.31 e1 + 1.55 e2 + 0.702 e3
x_5 = -0.721 e1 + 2.33 e2 + 0.494 e3
x_6 = 0.119 e1 + 2.48 e2 + 1.02 e3
x_7 = 0.858 e1 + 1.8 e2 + 0.973 e3
x_8 = 0.888 e1 + 1.05 e2 + 1.63 e3

```

Figura 51 – Soluções obtidas.

A solução denominada "exata" na figura acima se refere a conformação molecular correspondente aos valores médios das distância intervalares usadas como entrada da instância a ser resolvida. Neste exemplo as soluções para o problema dependem dos raios das cascas esféricas que surgem ao longo de cada etapa do BP. Basicamente, para gerar os dados de entrada do exemplo visto, alteramos uma instância presente em [23], considerando distâncias intervalares adicionais, sendo estas construídas a partir de uma pequena variação em um conjunto de distâncias precisas. Ressaltamos que, como as soluções encontradas em cada nível no caso intervalar não são pontos, mas arcos, par de arcos, calotas esféricas, entre outras possibilidades, para que testemos se o conjunto solução dos possíveis valores para \mathbf{x}_i , para $i = 1, \dots, 8$, contém de fato os pontos correspondentes a solução "exata" fixada, uma opção é variar as posições encontradas levando em conta todos os valores possíveis para seus parâmetros. Isso equivale a variar os raios das cascas esféricas usadas na obtenção da solução, entre todos os valores para factibilidade de \mathbf{x}_i .

Movendo os centros \mathbf{x}_{i-1} . A fim de englobarmos todas as possibilidades possíveis de solução, devemos considerar o conjunto solução levando em conta a variação de todos os parâmetros envolvidos. Inicialmente, para simplificar, podemos considerar as variações em certos átomos específicos. Por exemplo, suponhamos que desejemos determinar \mathbf{x}_5 . Vimos anteriormente que \mathbf{x}_5 é um elemento do conjunto (5.26). Porém, para solução obtida fixada, conforme a Figura 51, escolhemos um valor de \mathbf{x}_4 em (5.22) e continuamos a descida na árvore *i*BP considerando arcos de possibilidades. Mais especificamente, fixamos um valor para \mathbf{x}_4 dentre as possibilidades dada por (5.22), e buscamos determinar \mathbf{x}_5 . Percebemos pelas Figuras 50 e 51 que o ponto \mathbf{x}_5 , exibido em azul, obtido está próximo da solução fixada inicialmente, em vermelho. No caso de considerarmos o centro \mathbf{x}_4 variando sob todos os valores possíveis para sua posição, *i.e.*, sendo estes determinados por (5.22), obtemos o valor fixado *a priori*, quando geramos a instância. Isso equivale a variarmos \mathbf{x}_5 no arco em preto que surge no nível cinco.

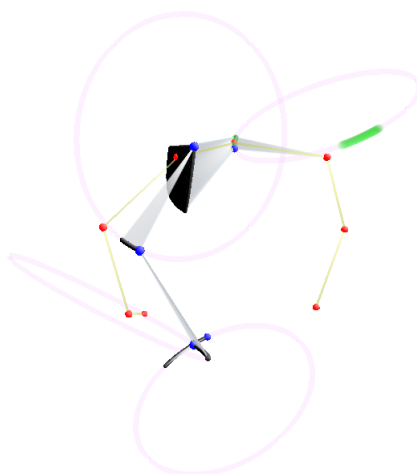


Figura 52 – Soluções conhecidas e as soluções obtidas para o centro \mathbf{x}_4 móvel.

Vemos pela figura acima que ao assumir que o centro \mathbf{x}_4 é móvel, *i.e.*, está variando dentre todos os seus valores possíveis, o efeito sob as possíveis posições para \mathbf{x}_5 é que, em vez de termos um arco, ou par de arcos, como possibilidades para \mathbf{x}_5 , teremos uma calota esférica. Continuando o processo de variar os centros móveis, obtemos parte de uma esfera sólida como as regiões de factibilidade para posição do átomo em questão. Notemos que um dos pontos da calota na Figura 52 é a solução fixada inicialmente para \mathbf{x}_5 , ilustrando que o conjunto solução (5.26) está de acordo com o esperado.

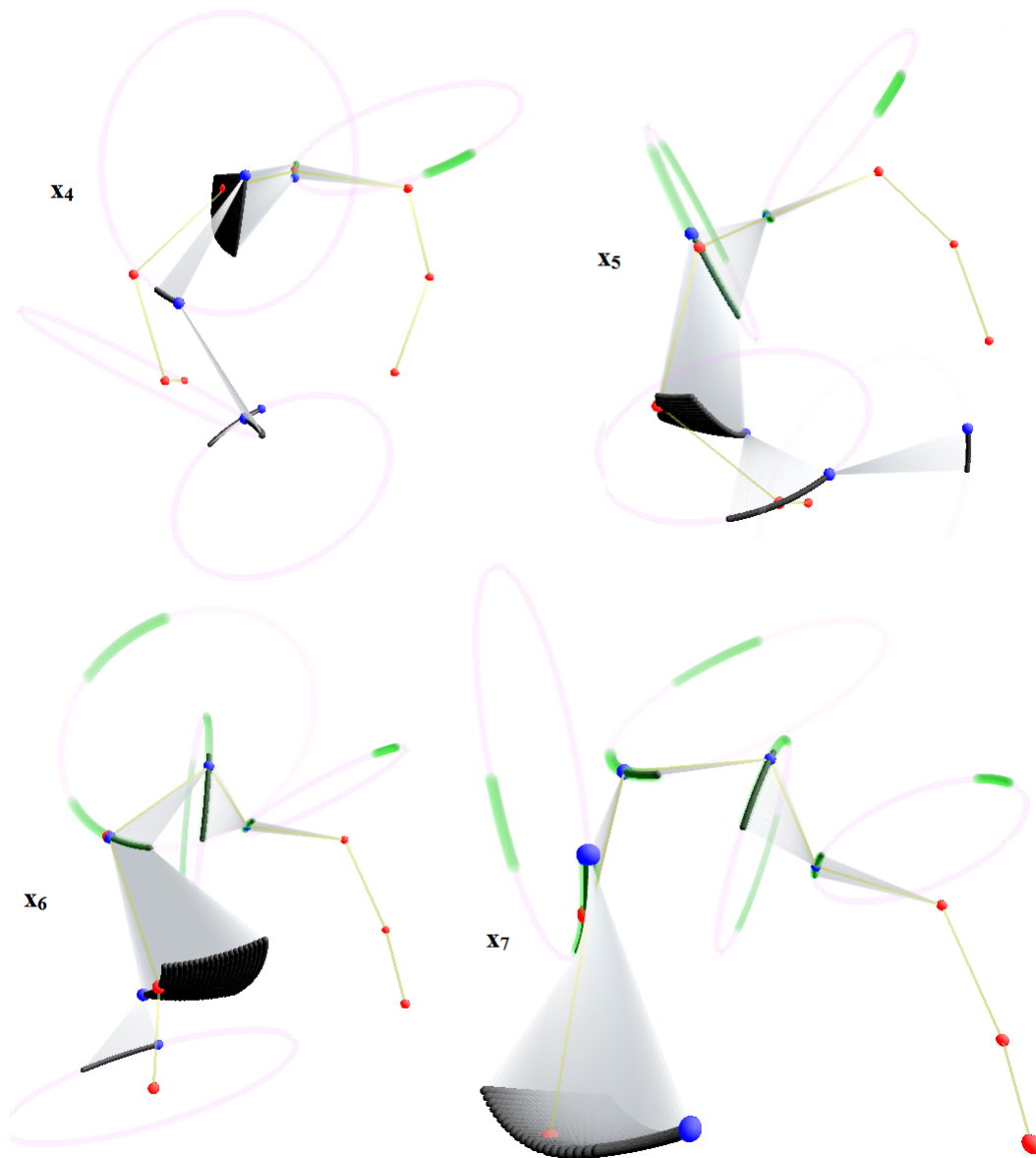


Figura 53 – Soluções obtidas variando o centro \mathbf{x}_i , para $i = 4, 5, 6, 7$.

Observações. A fim de obter todas as posições que formam a solução do problema, podemos usar a estratégia acima para obter um conjunto com maior número de possibilidades, dentre as possíveis. Ou seja, para determinar \mathbf{x}_i , para $i = 5, \dots, 8$, de forma que coincida

com a solução "exata", podemos considerar os centros \mathbf{x}_{i-1} como sendo móveis. Dessa maneira, no lugar de termos apenas um arco de possibilidades para \mathbf{x}_i , teremos uma calota esférica. Dependendo do nível analisado, há a possibilidade de considerar variações não apenas em \mathbf{x}_{i-1} , mas também em \mathbf{x}_{i-2} e \mathbf{x}_{i-3} , sendo que a região gerada pela variação dessas posições, usadas para definir os centros das cascas esféricas, passam a ser mais gerais do que um arco restrito a um círculo, ou uma calota esférica. Este aspecto geométrico é o mesmo que descrevemos inicialmente quando analisamos a expressão (5.20) para \mathbf{x}_8 .

6 Considerações Finais

6.1 Contribuições

Este trabalho apresentou uma nova abordagem via AGC para se obter a interseção de esferas e cascas esféricas. Na literatura comumente se usam rotores. Os resultados obtidos mostraram-se adequados na busca de generalizações a espaços nD de resultados conhecidos em 3D e, também, no caso de aplicações, principalmente em problemas envolvendo cascas esféricas. As simulações feitas para o problema de conformação molecular em espaços 3D, mostraram que a abordagem desenvolvida é promissora e possui potencial para lidar com variações do problema de forma bastante natural. Vimos que, por meio de testes computacionais, há vantagens da AGC comparada com a abordagem clássica, principalmente quando lidamos com as cascas esféricas.

Além disso, obtivemos generalizações para o caso nD de resultados da AGC já conhecidos na literatura para espaços 3D. Por exemplo, simplificações para análise do raio de uma esfera e a interseção de esferas via produto exterior para o caso geral. Também, propusemos expressões com a AGC para descrever objetos de particular interesse quando lidamos com o DMDGP, como a expressão que descreve um par de arcos. Isso trouxe vantagens consideráveis para o algoritmo iBP , ao lidarmos com as incertezas nos dados de entrada. As cascas esféricas auxiliares possibilitaram melhorias computacionais, comparando com os resultados já conhecidos na literatura. Ilustramos isso com um exemplo para o qual a abordagem clássica se tornaria inviável, pois teríamos que lidar com o processo de amostragem ao longo das etapas do algoritmo BP. As construções via AGC deste trabalho foram deduzidas de forma a tratar com esferas de raios intervalares ou precisos. Ressaltamos que, na abordagem clássica, baseada na álgebra linear, isso não ocorre. Os diferentes casos que surgem ao lidarmos com as cascas esféricas tornam as extensões da abordagem clássica praticamente intratáveis para resolver problemas com múltiplas cascas esféricas.

No caso do iBP , apresentamos um exemplo que engloba várias características presentes no DMDGP quando os centros das esferas são móveis, mostrando o potencial de aplicação da abordagem desenvolvida em instâncias mais realistas. O exemplo foi resolvido pela abordagem proposta neste trabalho e ilustra um caso onde a abordagem clássica do iBP encontraria sérias dificuldades. Embora haja versões que incorporem a AGC ao algoritmo BP, desconhecemos até o momento uma implementação que utilize a AGC no BP e permita uma extensão natural ao caso intervalar.

6.2 Sobre algumas dificuldades encontradas

Vejamos algumas dificuldades que surgiram ao longo deste trabalho e como procuramos lidar com elas.

As diferentes configurações possíveis e uma terceira casca esférica. De posse de uma forma eficiente de realizar a interseção entre duas esferas e duas cascas esféricas no \mathbb{R}^3 , desejamos investigar o efeito de acrescentarmos mais uma casca esférica extra ao problema. As diferentes possibilidades nesta etapa estão relacionadas aos cenários descritos na Figura 15. O resultado final depende dos objetos obtidos nas etapas iniciais. Por exemplo, se o resultado da interseção entre duas esferas e uma casca for somente um arco em vez de um par de arcos, ao acrescentarmos uma nova casca teremos novas possibilidades para o resultado desta etapa. Logo, os resultados são semelhantes aos já apresentados no Capítulo 5, porém não são idênticos. A fim de cobrir o maior número possível de cenários associados ao problema real, é necessário realizarmos um estudo minucioso sobre as diferentes possibilidades para interseção entre duas esferas e duas cascas esféricas. Ressaltamos que, embora haja muitas possibilidades para tal interseção envolvendo múltiplas cascas esféricas, as pesquisas aqui realizadas dão indícios de que a abordagem desenvolvida possa ser aplicada aos diferentes casos de forma eficiente.

Duas cascas esféricas em um espaço nD e a fatoração dos *blades*. Enquanto certas generalizações da abordagem proposta no Capítulo 5, visando aplicações em um espaço 3D, mostram indícios de serem promissoras, ao assumirmos espaços nD nos deparamos com dificuldades consideráveis. Isso porque é desejável evitar a decomposição dos *blades* obtidos em cada etapa das interseções. Quando lidamos com espaços nD , a interseção entre duas esferas e duas cascas esféricas, pode resultar em uma união de subespaços que não seja o par de arcos. Para a busca de generalizações como essas é necessária uma pesquisa detalhada sobre os elementos da AGC a se considerar nas construções a serem realizadas. Por exemplo, obter uma nova fórmula para cálculo da distância entre dois pontos no espaço conforme que passe a fornecer a distância entre dois subespaços quaisquer, sendo que essa nova versão possa ser implementada e validada computacionalmente.

6.3 Próximos passos

Como os resultados obtidos se mostraram bastante adequados se comparados à abordagem usual, em que se usa álgebra linear, consideramos que a AGC possui potencial para lidar com os problemas de aplicações aqui vistos. Dentre as possibilidades para dar continuidade ao trabalho, destacamos que em uma próxima oportunidade gostaríamos de explorar os aspectos computacionais tendo uma maior proximidade com dados de entrada vindos de experimentos reais. Tendo realizado uma maior variedade de simulações ligadas

a problemas reais, poderíamos reforçar os aspectos positivos já obtidos e rever as possíveis causas de dificuldades. Pesquisas com esse caráter permitiriam aproximarmos cada vez mais as contribuições aqui feitas nas áreas como a química e biologia.

No aspecto teórico, temos interesse em validar as contribuições em espaços nD para valores de n tão grandes quanto os problemas reais necessitem. Para isso, é necessário investigar tanto aspectos teóricos (o que de certa forma já fizemos tendo como base boa parte da literatura na área disponível até o momento) assim como buscar implementações eficientes. Isso permitiria que os experimentos computacionais a serem realizados não tragam limitações ao que for proposto em caráter teórico. Essas questões estão relacionadas a muitos e variados temas atuais de pesquisa na área de AGC.

A fim de obter uma abordagem onde não seja necessário fatorar os *blades*, devemos pesquisar a resolução de sistemas de desigualdades via AGC. Outro aspecto a explorar nesse sentido, é descrever as cascas esféricas por meio da interpolação utilizando elementos da AGC, e então buscar uma maneira de lidar com as interseções em espaços nD .

Referências

- [1] H. M. Berman, J. Westbrook, Z. Feng, G. Gilliland, T. Bhat, H. Weissig, I. Shindyalov, P. Bourne. The protein data bank. *Nucleic Acid Res.*, 28:235–242, 2000.
- [2] D. Nelson, A. Lehninger, M. Cox. *Lehninger Principles of Biochemistry*. W.H. Freeman, New York, 2008.
- [3] C. Lavor, L. Liberti, N. Maculan, A. Mucherino. The discretizable molecular distance geometry problem. *Computational Optimization and Applications*, 52:115–146, 2012.
- [4] C. Lavor, L. Liberti, A. Mucherino. The interval branch-and-prune algorithm for the discretizable molecular distance geometry problem with inexact distances. *Journal of Global Optimization*, 56:855–871, 2013.
- [5] L. Fernandes, C. Lavor, M. Oliveira. *Álgebra Geométrica e Aplicações*. SBMAC, São Carlos, 2017.
- [6] L. M. Blumenthal. *Theory and applications of distance geometry*. Oxford University Press, Oxford, 1953.
- [7] B. Donald. *Algorithms in Structural Molecular Biology*. MIT Press, Boston, 2011.
- [8] M. L. Davison. *Multidimensional scaling*. John Wiley and Sons, New York, 1983.
- [9] A. Mucherino (Org.), C. Lavor (Org.), L. Liberti (Org.), N. Maculan (Org.). *Distance Geometry: Theory, Methods, and Applications*. Springer, New York, 2013.
- [10] I. Coope. Reliable computation of the points of intersection of n spheres in \mathbb{R}^n . *ANZIAM Journal*, 42:461–477, 2000.
- [11] D. Maioli. *Interseção de Esferas no \mathbb{R}^n e Aplicações*. PhD thesis, IMECC - Universidade Estadual de Campinas, 2017.
- [12] J. Dattorro. *Convex Optimization & Euclidean Distance Geometry*. Meboo Publishing, Palo Alto, 2005.
- [13] K. Kanatani. *Understanding Geometric Algebra: Hamilton, Grassmann, and Clifford for computer vision and graphics*. CRC Press, Boca Raton, 2015.
- [14] L. Dorst, D. Fontijne, S. Mann. *Geometric Algebra for Computer Science: An Object-Oriented Approach to Geometry*. Morgan Kaufmann Series in Computer Graphics, New York, 2007.

-
- [15] C. Perwass. *Geometric algebra with applications in engineering*. Springer, New York, 2009.
- [16] R. Alves. *Álgebra de Clifford Aplicada ao Cálculo de Estruturas Moleculares*. PhD thesis, IMECC - Universidade Estadual de Campinas, 2013.
- [17] L. Liberti, C. Lavor, N. Maculan. A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem. *International Transactions in Operational Research*, 15:1–17, 2008.
- [18] Wolfram Research Inc. Wolfram Mathematica 11.2 (student edition). 2017.
- [19] G. Aragón-Camarasa, G. Aragón-González, J. L. Aragón, M. A. Rodríguez-Andrade. Clifford Algebra with **Mathematica**. *arXiv:0810.2412v1 [mat-ph]*, 2008.
- [20] C. Perwass. CLUCalc v4.3.2. <http://www.clucalc.info>, acessado em 4 ago. 2017.
- [21] C. D. Meyer. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. SIAM, Philadelphia, 2000.
- [22] D. S. Watkins. *Fundamentals of Matrix Computations*. 2ed. John Wiley and Sons, New York, 2002.
- [23] C. Lavor, N. Maculan, M. Souza, R. Alves. *Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular*. IMPA, Rio de Janeiro, 2017.
- [24] J. B. Saxe. Embeddability of graphs in k -space is strongly NP-hard. In *Proceedings of the 17th Allerton Conference in Communication, Control and Computing*, pages 480–489, 1979.
- [25] I. Griva, S. G. Nash, A. Sofer. *Linear and Nonlinear Optimization*. 2ed. SIAM, Philadelphia, 2009.
- [26] J. Alencar, T. Bonates, C. Lavor, L. Liberti. An algorithm for realizing Euclidean distances matrices. *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 50:397–402, 2015.
- [27] D. Hildenbrand. *Foundations of Geometric Algebra Computing*. Springer, Berlin, 2013.
- [28] H. Li, D. Hestenes, A. Rockwood. Computational geometry 2: Generalized coordinates for computational geometry. In *Geometric Computing with Clifford Algebra*, pages 27–59, Heidelberg, 2001. Springer.
- [29] E. Hitzler. Introduction to Clifford’s Geometric Algebra. *SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration*, 4:1–11, 2011.
- [30] J. Vaz Jr., R. da Rocha. *An Introduction to Clifford Algebras and Spinors*. Oxford University Press, New York, 2016.

-
- [31] D. Struik. *Lectures on Classical Differential Geometry*. Dover, New York, 1961.
 - [32] G. Shilov. *Linear Algebra*. Dover, New York, 1971.
 - [33] D. Fontijne. *Efficient implementation of geometric algebra*. PhD thesis, University of Amsterdam, 2007.
 - [34] A. H. Eid. Introducing geometric algebra to geometric computing software developers: A computational thinking approach. *arXiv: 1705.06668v1 [cs.MS]*, 2017.
 - [35] J. Cameron, J. Lasenby. Oriented conformal geometric algebra. *Adv. appl. Clifford alg.*, 18:523–538, 2008.
 - [36] A. Mcdonald. *Linear and Geometric Algebra*. CreateSpace, Charleston, 2011.

Anexos

Teste de independência linear usando a AGC

A seguir temos a demonstração de alguns resultados usados ao longo dos nossos estudos [36].

Teorema. *Seja $\{v_1, \dots, v_p\} \subseteq \mathbb{R}^k$ um conjunto de 1-blades (vetores) L.I. Então, $v_1 \wedge \dots \wedge v_p$ é um blade de grau p .*

Demonstração: Usando o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt em $\{v_1, \dots, v_p\}$ podemos construir o conjunto ortogonal $\{b_1, \dots, b_p\}$, onde

$$\begin{aligned} b_1 &= v_1 \\ b_2 &= v_2 - \frac{v_2 \cdot v_1}{v_1 \cdot v_1} v_1 \\ b_3 &= v_3 - \frac{v_3 \cdot v_1}{v_1 \cdot v_1} v_1 - \frac{v_3 \cdot v_2}{v_2 \cdot v_2} v_2 \\ &\dots \\ b_p &= v_p - \sum_{i=1}^{p-1} \frac{v_p \cdot v_i}{v_i \cdot v_i} v_i. \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} v_1 &= b_1 \\ v_2 &= b_2 + \frac{v_2 \cdot v_1}{v_1 \cdot v_1} v_1 \\ v_3 &= b_3 + \frac{v_3 \cdot v_1}{v_1 \cdot v_1} v_1 + \frac{v_3 \cdot v_2}{v_2 \cdot v_2} v_2 \\ &\dots \\ v_p &= b_p + \sum_{i=1}^{p-1} \frac{v_p \cdot v_i}{v_i \cdot v_i} v_i. \end{aligned}$$

Logo, usando que $v_1 = b_1$ e as expressões acima, temos que

$$v_1 \wedge v_2 = b_1 \wedge \left(b_2 + \frac{v_2 \cdot b_1}{b_1 \cdot b_1} b_1 \right) = b_1 \wedge b_2 + \frac{v_2 \cdot b_1}{b_1 \cdot b_1} b_1 \wedge b_1 = b_1 \wedge b_2,$$

e

$$\begin{aligned} v_1 \wedge v_2 \wedge v_3 &= b_1 \wedge b_2 \left(b_3 + \frac{v_3 \cdot b_1}{b_1 \cdot b_1} b_1 + \frac{v_3 \cdot v_2}{v_2 \cdot v_2} v_2 \right) \\ &= b_1 \wedge b_2 \wedge b_3 - \frac{v_3 \cdot b_1}{b_1 \cdot b_1} b_2 \wedge b_1 \wedge b_1 + \frac{v_3 \cdot v_2}{v_2 \cdot v_2} b_1 \wedge b_2 \wedge v_2 \\ &= b_1 \wedge b_2 \wedge b_3. \end{aligned}$$

Na segunda igualdade acima usamos o fato de que $b_i \wedge b_i = 0$, para $i = 1, 2$. Além disso, usamos que $b_1 \wedge b_2 \wedge v_2 = 0$, pois, como v_2 é da forma $\alpha_1 b_1 + b_2$, onde α_1 é um escalar, então

$$b_1 \wedge b_2 \wedge v_2 = \alpha_1 b_1 \wedge b_2 \wedge b_1 + b_1 \wedge b_2 \wedge b_2 = 0.$$

Seguindo esta construção, temos que

$$v_1 \wedge \cdots \wedge v_p = b_1 \wedge \cdots \wedge b_p.$$

Como o lado direito da igualdade acima é um blade de grau p , isso mostra o teorema. □

Usando o produto exterior temos uma forma direta de testar quando um conjunto de vetores é L.I.:

Corolário. *O conjunto $\{v_1, \dots, v_p\} \subseteq \mathbb{R}^k$ é L.I. se, e somente se, $v_1 \wedge \cdots \wedge v_p \neq 0$.*

Demonstração: Se o conjunto $\{v_1, \dots, v_p\} \subseteq \mathbb{R}^k$ é L.I., pelo Teorema A, $v_1 \wedge \cdots \wedge v_p$ é um p -blade, que por definição é não nulo. Reciprocamente, vamos assumir que temos $v_1 \wedge \cdots \wedge v_p \neq 0$ e supor que $\mathcal{U} = \{v_1, \dots, v_p\}$ é L.D. Como \mathcal{U} é L.D., então existe um índice $j \in \{1, \dots, p\}$ tal que v_j pode ser escrito como a combinação linear dos demais elementos de \mathcal{U} , i.e., como

$$v_j = \sum_{i=1, i \neq j}^p \alpha_i v_i.$$

Então, a expressão

$$v_1 \wedge \cdots \wedge v_j \wedge \cdots \wedge v_p = v_1 \wedge \cdots \wedge \left(\sum_{i=1, i \neq j}^p \alpha_i v_i \right) \wedge \cdots \wedge v_p$$

se anula, contrariando nossa hipótese. Portanto, \mathcal{U} é L.I. □