

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
BIBLIOTECA UNIVERSITÁRIA**

Fernando Correia

**CONDIÇÕES NECESSÁRIAS E SUFICIENTES PARA A
REALIZAÇÃO DE UM CONJUNTO DE DISTÂNCIAS
ATRAVÉS DE DETERMINANTES DE
CAYLEY-MENGER**

Florianópolis

2016

Fernando Correia

**CONDIÇÕES NECESSÁRIAS E SUFICIENTES PARA A
REALIZAÇÃO DE UM CONJUNTO DE DISTÂNCIAS
ATRAVÉS DE DETERMINANTES DE
CAYLEY-MENGER**

Dissertação submetida ao Programa de Mestrado Profissional em Matemática para a obtenção do Grau de Mestre em Matemática com área de concentração PROFMAT - UFSC associado ao Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional (PROFMAT).

Orientador: Prof. Dr. Douglas Soares Gonçalves

Florianópolis

2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Correia, Fernando

Condições necessárias e suficientes para a realização de um conjunto de distâncias através de determinantes de Cayley-Menger. / Fernando Correia ; orientador, Douglas Gonçalves - Florianópolis, SC, 2016.
61 p.

Dissertação (mestrado profissional) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas. Programa de Pós-Graduação em Matemática.

Inclui referências

1. Matemática. 2. Geometria de Distâncias. 3. Determinante de Cayley-Menger. I. Gonçalves, Douglas. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós Graduação em Matemática. III. Título.

Esta Dissertação foi julgada aprovada para obtenção do título de Mestre em Matemática e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Matemática.

Florianópolis, 29 de abril de 2016

Prof. Dr. Celso Melchiades Doria
Universidade Federal de Santa Catarina
Coordenador do curso

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Douglas Soares Gonçalves
Universidade Federal de Santa Catarina
(Orientador)

Prof. Dr. Juliano de Bem Francisco
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Dr. Leonardo Koller Sacht
Universidade Federal de Santa Catarina

Profa. Dra. Maria Inez Cardoso Gonçalves
Universidade Federal de Santa Catarina

Este trabalho é dedicado aos meus colegas de classe, aos meus professores do curso e à minha família.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer ao professor Douglas Gonçalves que me guiou pela Geometria de Distâncias com paciência e conhecimento. Também agradeço aos demais professores por tornar a experiência do mestrado tão boa quanto foi nesses dois anos. Aos colegas de classe pelo companheirismo nos estudos. À minha família por sempre me apoiar nessa carreira que escolhi. E, por fim, à minha namorada que todos os dias me acompanhou e auxiliou nessa jornada.

RESUMO

A Geometria de Distâncias é o estudo da geometria Euclidiana baseada nas distâncias entre determinados objetos. Esse ramo da matemática tem apresentado diversas aplicações que abrangem as áreas da robótica, geometria molecular, redes de comunicações, entre outras. O problema de Geometria de Distância consiste em determinar o posicionamento dos objetos no espaço euclidiano conhecidas somente algumas distâncias entre pares de objetos. Neste trabalho estudamos conceitos essenciais nesta área, como grafos, matriz de distâncias e o determinante de Cayley-Menger. Resolvemos alguns problemas simples por construção geométrica e apresentamos o teorema que determina as condições necessárias e suficientes para a realização de um conjunto completo de distâncias. O principal objetivo desse trabalho é demonstrar este teorema de forma detalhada.

Palavras-chave: Geometria de distâncias. Determinante. Cayley-Menger.

ABSTRACT

Distance Geometry is the study of Euclidean geometry based on the distances between certain objects. This branch of mathematics has presented several applications covering some areas like robotics, molecular geometry, communication networks and many others. The fundamental problem in distance geometry is the one of determining the position of some objects at the Euclidean space knowing only a few pairwise distances. We study essential concepts in this area, such as graphs, distance matrix and the Cayley-Menger's determinant. We conducted experiments of embeddings by geometric construction and present the theorem that states the necessary and sufficient conditions for the realization of a complete set of distances. The aim of this work is to present a detailed proof of such theorem.

Keywords: Distance geometry. Determinant. Cayley-Menger.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Exemplo de grafo com três vértices.	25
Figura 2	Exemplos de grafos com vértices e arestas.	25
Figura 3	Exemplo de grafo com um laço.	25
Figura 4	Exemplo de grafo ponderado.	26
Figura 5	Exemplo de envoltório convexo em \mathbb{R}^2	28
Figura 6	Exemplos de k -simplex.	29
Figura 7	Exemplo de duas realizações de 1-simplex dada uma distância.	33
Figura 8	PGD sem solução.	34
Figura 9	PGD com duas soluções.	35
Figura 10	PGD com solução única.	35
Figura 11	Determinação do vértice 2.	39
Figura 12	Determinação do vértice 3.	40
Figura 13	Possíveis realizações de um 4-clique.	40
Figura 14	Determinação do vértice 4.	41
Figura 15	Possíveis realizações de um 4-clique.	41

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Inversões dos números 1, 2 e 3.	21
Tabela 2	k -simplex e seus elementos.	30

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	CONCEITOS PRELIMINARES	21
2.1	DETERMINANTE E PROPRIEDADES	21
2.2	NOÇÕES DE GRAFOS	24
2.3	O PROBLEMA DE GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS ...	27
2.4	COMBINAÇÃO AFIM E COMBINAÇÃO CONVEXA ..	27
2.5	K-SIMPLEX	29
2.6	MATRIZ DE DISTÂNCIAS E DETERMINANTE DE CAYLEY-MENGER	30
3	REALIZAÇÕES DE UM $(K + 1)$-CLIQUE	33
3.1	2-CLIQUE	33
3.2	3-CLIQUE	34
3.3	4-CLIQUE	39
4	CONDIÇÃO NECESSÁRIA E SUFICIENTE PARA A REALIZAÇÃO DE UM CONJUNTO COM- PLETO DE DISTÂNCIAS	45
4.1	CONDIÇÃO NECESSÁRIA E SUFICIENTE PARA A REALIZAÇÃO DE UM $(N+1)$ -CLIQUE	50
4.2	APLICAÇÕES	55
5	CONCLUSÃO	59
	REFERÊNCIAS	61

1 INTRODUÇÃO

A Geometria de Distâncias (GD) é o ramo da matemática que estuda a geometria euclidiana tendo como foco principal as distâncias ao invés de pontos, linhas e superfícies. Os gregos já iniciavam estudos nessa área quando Heron de Alexandria deduziu o cálculo da área de um triângulo a partir das medidas de seus lados.

Arthur Cayley deu uma importante contribuição para a GD ao publicar em 1841 a relação das distâncias entre cinco pontos no espaço. (LIBERTI; LAVOR, 2015)

Em 1928, Karl Menger propôs uma axiomática para espaços métricos usando conceitos de distâncias e, através dos estudos de Cayley, generalizou o resultado de Heron para calcular o volume de um k -simplex arbitrário conhecendo a medida de suas arestas. Mas foi somente em 1953 que a GD se tornou uma nova área de conhecimento através dos resultados de Leonard Blumenthal (BLUMENTHAL, 1953).

Desde então muitas aplicações utilizam-se da GD, dentre elas, a determinação da posição das estrelas na Astronomia, a determinação das estruturas de moléculas de proteínas utilizando dados da ressonância magnética nuclear na Bioquímica, o dimensionamento e posicionamento de braços de robôs na Robótica, entre muitos outros (LAVOR; LIBERTI, 2014).

Todas essas ciências se confrontam com o mesmo tipo de problema quando se trata de GD. O problema fundamental da GD é determinar as coordenadas de um conjunto de pontos em um dado espaço Euclidiano conhecendo-se apenas as distâncias entre alguns pares de pontos. (LAVOR; LIBERTI, 2014)

Este trabalho tem como foco estudar as condições para existência de soluções do problema de geometria de distâncias, onde todas as distâncias entre pares de pontos são conhecidas.

O capítulo 2 trará as definições de alguns conceitos básicos a respeito de grafos, definição de simplex, o determinante de Cayley-Menger (o principal conceito a ser estudado neste trabalho) e a definição formal do problema de geometria de distâncias. No capítulo 3 estudaremos algumas realizações de um $(k + 1)$ -clique através do determinante de Cayley-Menger, trazendo alguns exemplos para auxiliar na compreensão destes casos. A formalização do teorema que fornece condições necessárias e suficientes para a existência da solução de um problema de geometria de distâncias segue no capítulo 4, assim como a sua demonstração e alguns exemplos de aplicação. Por fim, fazemos

as considerações finais no último capítulo, enfatizando as contribuições deste trabalho para sociedade acadêmica.

2 CONCEITOS PRELIMINARES

Ao longo deste trabalho serão utilizadas as noções básicas da Teoria de Conjuntos e Matrizes (principalmente determinante de uma matriz e suas propriedades). Outros conceitos que também serão necessários para enunciar o problema de geometria de distâncias, como grafos e k -simplex, serão apresentados no final neste capítulo.

2.1 DETERMINANTE E PROPRIEDADES

As definições que seguem nesta seção tem como referência (BOLDRINI et al., 1980).

Definição 2.1. *Dada uma permutação dos inteiros $1, 2, \dots, n$, existe uma **inversão** quando um inteiro precede outro menor que ele.*

Para exemplificar, considere as permutações dos números 1, 2 e 3 e a quantidade de inversões para cada permutação possível.

Tabela 1 – Inversões dos números 1, 2 e 3.

Permutação	Número de inversões
(1 2 3)	0
(1 3 2)	1
(2 1 3)	1
(2 3 1)	2
(3 1 2)	2
(3 2 1)	3

Definição 2.2. *Seja $A = [a_{ij}]_n$ uma matriz quadrada de ordem n . O **determinante** de A é definido por*

$$\det(A) = \det[a_{ij}]_n = \sum_{\rho} (-1)^J a_{1j_1} a_{2j_2} \dots a_{nj_n},$$

em que $J = J(j_1, \dots, j_n)$ é o número de inversões da permutação (j_1, \dots, j_n) e ρ indica que a soma é estendida a todas as $n!$ permutações de $(1, 2, \dots, n)$.

Também podemos denotar $\det(A)$ por $|A|$.

As propriedades do determinante relevantes ao trabalho são apresentadas a seguir.

Proposição 2.3. *Seja A^T a matriz transposta da matriz quadrada A . Então $|A^T| = |A|$.*

Demonstração. Considere $A = [a_{ij}]$, temos $A^T = [b_{ij}]$, onde $b_{ij} = a_{ji}$. Então, pela definição de determinante, temos

$$\begin{aligned} \det([b_{ij}]) &= \sum_{\rho} (-1)^J b_{1j_1} b_{2j_2} \dots b_{nj_n} \\ &= \sum_{\rho} (-1)^J a_{j_1 1} a_{j_2 2} \dots a_{j_n n} \\ &= \det([a_{ij}]). \end{aligned}$$

Portanto $|A^T| = \det([b_{ij}]) = \det([a_{ij}]) = |A|$. □

Proposição 2.4. *Sejam A e B matrizes quadradas de mesma ordem. Então $|AB| = |A||B|$.*

Demonstração. Em um primeiro caso consideramos que A ou B são singulares. Com isso AB também é uma matriz singular. Neste caso $|AB| = 0$ e, como $|A| = 0$ ou $|B| = 0$, a igualdade se verifica.

No segundo caso considere A e B não singulares. De (BOLDRINI et al., 1980) retiramos dois conceitos importantes para esta parte da demonstração: toda matriz A quadrada não singular é possível de se obter através da multiplicação da matriz de identidade I por matrizes elementares E de mesma ordem (para maiores detalhes sobre matrizes de operações elementares consulte a referência (BOLDRINI et al., 1980)); e $|EA| = |E||A|$ tendo estas matrizes as mesma características citadas anteriormente. Desse modo,

$$\begin{aligned} |AB| &= |E_1 E_2 \dots E_k B| \\ &= |E_1| |E_2 \dots E_k B| \\ &= \vdots \\ &= |E_1| |E_2| \dots |E_k| |B| \\ &= |E_1| |E_2| \dots |E_{k-1} E_k| |B| \\ &= \vdots \\ &= |E_1 E_2 \dots E_k| |B| \\ &= |A| |B|. \end{aligned}$$

Portanto $|AB| = |A||B|$. □

Proposição 2.5. *Se uma linha (ou coluna) de uma matriz quadrada A for multiplicada por um escalar λ , então seu determinante também será multiplicado por λ .*

Demonstração. Inicialmente perceba que no somatório da definição de determinante de uma matriz, em cada termo existe um e apenas um elemento de cada linha; e um e apenas um elemento de cada coluna. Chamemos de A a matriz original e de B a matriz cuja uma linha foi multiplicada por λ . Então ao calcular $|B|$, em cada termo do somatório aparecerá um termo de B daquela linha que foi multiplicada por λ . Colocando λ em evidência obtemos exatamente o somatório para o cálculo de $|A|$. Portanto $|B| = \lambda|A|$. □

Proposição 2.6. *Seja A uma matriz quadrada de ordem n e λ um escalar qualquer. Então $|\lambda A| = \lambda^n |A|$.*

Demonstração. Como visto na demonstração da Proposição 2.5, cada termo do somatório possui um (e apenas um) elemento de cada linha e coluna, assim

$$\begin{aligned} |\lambda A| &= \sum_{\rho} (-1)^J \lambda a_{1j_1} \lambda a_{2j_2} \dots \lambda a_{nj_n} \\ &= \lambda^n \sum_{\rho} (-1)^J a_{1j_1} a_{2j_2} \dots a_{nj_n} \\ &= \lambda^n |A|. \end{aligned}$$

Portanto $|\lambda A| = \lambda^n |A|$. □

Proposição 2.7. *Seja A uma matriz quadrada. A permutação de duas linhas (ou colunas) altera o sinal do determinante da matriz.*

Demonstração. Observando a definição de determinante de uma matriz, vemos que se realizarmos a permutação de duas linhas (ou colunas) da matriz, alteramos a paridade do número de inversões dos índices e, portanto trocamos o sinal dos termos. □

Proposição 2.8. *Substituir uma linha (ou coluna) pela soma da mesma com outra linha (ou coluna) previamente multiplicada por um escalar não altera o valor do determinante da matriz original.*

Demonstração. Usando a definição de determinante e a distributivi-

dade podemos mostrar que

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} + c_{i1} & \dots & b_{in} + c_{in} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} & \dots & b_{in} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{i1} & \dots & c_{in} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Supondo $c_{ij} = \lambda a_{kj}$ onde $\lambda \in \mathbb{R}$, $j = 1, 2, \dots, n$, $k = 1, 2, \dots, n$ e $k \neq i$ temos

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} + \lambda a_{k1} & \dots & b_{in} + \lambda a_{kn} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} & \dots & b_{in} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \lambda a_{k1} & \dots & \lambda a_{kn} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Note que a segunda matriz da soma possui uma linha a qual é múltipla de outra linha, portanto seu determinante será nulo. Com isso

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} + \lambda a_{k1} & \dots & b_{in} + \lambda a_{kn} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{i1} & \dots & b_{in} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix},$$

ou seja, substituir uma linha (ou coluna) pela soma da mesma com outra linha (ou coluna) previamente multiplicada por um escalar não altera o valor do determinante da matriz original. \square

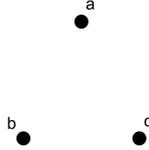
2.2 NOÇÕES DE GRAFOS

As definições que seguem nesta subseção têm como referência (LAVOR; LIBERTI, 2014).

Definição 2.9. *Grafo é um par de conjuntos V e E , onde V é não vazio e E é um conjunto formado por pares não-ordenados dos elementos de V . Um grafo G é denotado por $G(V, E)$.*

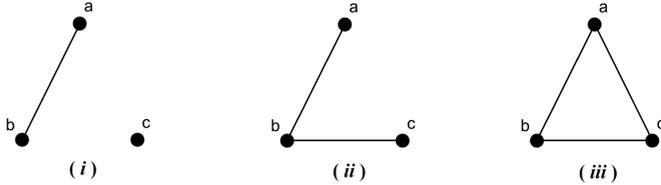
Os elementos de V são chamados de **vértices**. Por exemplo, seja um conjunto $V = \{a, b, c\}$.

Figura 1 – Exemplo de grafo com três vértices.



Os elementos de E são chamados de **arestas**. O conjunto E pode ser formado de diversas maneiras, inclusive pode ser representado pelo conjunto vazio. Denotaremos cada aresta por $\{v, w\}$, onde v e w são vértices do grafo.

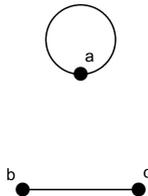
Figura 2 – Exemplos de grafos com vértices e arestas.



Nos exemplos de grafos da Figura 2, em que o conjunto dos vértices é dado por $V = \{a, b, c\}$, temos que o grafo (i) possui o conjunto de arestas dado por $E = \{\{a, b\}\}$, no grafo (ii) por $E = \{\{a, b\}, \{b, c\}\}$ e no grafo (iii) por $E = \{\{a, b\}, \{b, c\}, \{a, c\}\}$.

Note que em nenhum momento foi definido que $v \neq w$ para formar uma aresta. Uma aresta formada por apenas um vértice v , denotada por $\{v, v\}$, é chamada de **laço**, ou ainda, *loop*.

Figura 3 – Exemplo de grafo com um laço.



Definição 2.10. Um grafo é dito **simples** se não possuir laços, ou seja, os vértices de uma aresta são elementos distintos de V .

Exemplos de grafos simples estão ilustrados na Figura 2. No contexto de geometria de distâncias considera-se apenas grafos simples, por razões que ficarão evidentes mais adiante.

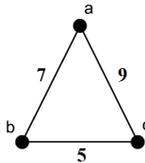
Definição 2.11. Um grafo é **não-orientado** quando, dados $a, b \in V$, temos que $(a, b) = (b, a)$.

Definição 2.12. Um grafo $G = (V, E)$ é dito **conectado**, se não é possível separar um conjunto de seus vértices V em dois subconjuntos A e B , com $A \cap B = \emptyset$ e $V = A \cup B$, de tal maneira que não exista nenhuma aresta $\{a, b\} \in E$, onde $a \in A$ e $b \in B$.

Na Figura 2 apenas o grafo (i) é não conectado e os demais são conectados.

Definição 2.13. Um grafo $G = (V, E)$ é dito **ponderado**, quando é associado um número real a cada aresta deste grafo, ou seja, existe uma função $d : E \rightarrow \mathbb{R}$. Denota-se $G = (V, E, d)$.

Figura 4 – Exemplo de grafo ponderado.



Definição 2.14. Um grafo é dito **completo** se for um grafo simples e todo par de vértices distintos for ligado (conectado) por uma aresta.

O exemplo (iii) da Figura 2 mostra um grafo completo. Os principais problemas em geometria de distâncias não necessariamente são formados por grafos completos. Inclusive grande parte dos estudos de aplicações da geometria de distâncias consiste em métodos que buscam completar as distâncias faltantes. Contudo este trabalho focará no desenvolvimento de resultados sobre grafos completos, onde são conhecidas todas as distâncias.

2.3 O PROBLEMA DE GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS

Definição 2.15. *O problema de geometria de distâncias (PGD) consiste em, dado $k \in \mathbb{Z}_+$ e um grafo simples, conectado, não-orientado e ponderado $G(V, E, d)$ em que $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, encontrar uma função que associa cada vértice a uma posição no espaço \mathbb{R}^k , ou seja, $x : V \rightarrow \mathbb{R}^k$, tal que*

$$\|x_i - x_j\|^2 = d_{ij}^2, \forall \{i, j\} \in E.$$

Uma solução x para o PGD é chamada **realização**. Transformações rígidas sobre uma realização, ou seja, translações e rotações, preservam todas as distâncias.

É importante observar que de acordo com essa definição, não há necessidade de que se conheçam todas as distâncias e que $d_{ab} \in \mathbb{R}_+$ é o peso da aresta entre dois vértices a e b .

Definição 2.16. *Um clique de um grafo $G = (V, E)$ é um subgrafo $G' = (V', E')$, onde $V' \subset V$, $E' \subset E$ e G' é completo.*

Um grafo completo com k vértices é chamado de **k -clique**. O exemplo (iii) da Figura 2 ilustra um 3-clique.

2.4 COMBINAÇÃO AFIM E COMBINAÇÃO CONVEXA

Definição 2.17. *Uma combinação afim é uma combinação linear na qual a soma dos coeficientes é 1, ou seja,*

$$\sum_{i=0}^k a_i p_i \text{ em que } a_i \in \mathbb{R}, p_i \in \mathbb{R}^k \text{ e } \sum_{i=0}^k a_i = 1.$$

Como exemplo podemos tomar os pontos $(1, 0)$, $(0, 1)$ e $(2, -1)$ em \mathbb{R}^2 . Note que o ponto $(2, -1)$ é uma combinação afim de $(1, 0)$ e $(0, 1)$, pois $2(1, 0) + (-1)(0, 1) = (2, -1)$ cuja soma desses coeficientes é 1.

Definição 2.18. *Uma combinação convexa é uma combinação afim tal que os coeficientes são não negativos, ou seja, $a_i \in \mathbb{R}_+$.*

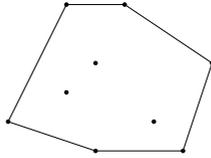
De forma análoga ao exemplo anterior vemos que o ponto $(0.5, 0.5)$ é uma combinação convexa de $(1, 0)$ e $(0, 1)$, pois $0.5(1, 0) + 0.5(0, 1) = (0.5, 0.5)$ em que os coeficientes somam 1 e são positivos.

Definição 2.19. *Seja $B \subset \mathbb{R}^k$. Dizemos que B é um **conjunto convexo** se, para quaisquer $p_1, p_2 \in B$, temos que $p_i = \lambda_1 p_1 + \lambda_2 p_2 \in B$, onde λ_1 e $\lambda_2 \in \mathbb{R}_+$ e $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$.*

Um exemplo de simples visualização de conjunto convexo é uma bola em \mathbb{R}^2 . Qualquer segmento de reta que tenha como extremidades pontos na bola está inteiramente contido na mesma.

Definição 2.20. *O **envoltório convexo** de um conjunto de pontos é o menor conjunto convexo que contém tais pontos.*

Figura 5 – Exemplo de envoltório convexo em \mathbb{R}^2 .



Definição 2.21. *Um conjunto finito de pontos $\{p_0, \dots, p_k\}$ é dito **afimemente independente** se $\sum_{i=0}^k \alpha_i p_i = 0$ com $\sum_{i=0}^k \alpha_i = 0$ implica em $\alpha_i = 0, \forall i \in \{0, \dots, k\}$.*

Os pontos $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ e $(0, 0, 1)$ são exemplos de pontos afimemente independentes em \mathbb{R}^3 .

Proposição 2.22. *Se $\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ é um conjunto de vetores afimemente independente então $\{v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_n - v_0\}$ é um conjunto linearmente independente.*

Demonstração. Sendo $\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ um conjunto de vetores afimemente independente, temos que

$$\sum_i a_i v_i = 0, \text{ com } \sum_i a_i = 0 \text{ implica em } a_i = 0, \text{ para todo } i.$$

Considere o conjunto $\{v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_n - v_0\}$.

Se $\sum_{i=1}^n b_i (v_i - v_0) = 0$, então $\sum_{i=1}^n b_i v_i - (\sum_{i=1}^n b_i) v_0 = 0$.

Chame $a_i = b_i$ para $i = 1, 2, \dots, n$ e $a_0 = -(\sum_i b_i)$. Claramente, $a_0 + \sum_{i=1}^n a_i = 0$, e como $\{v_0, v_1, \dots, v_n\}$ é afimemente independente, então $a_i = b_i = 0$, para $i = 1, \dots, n$ e, portanto, $\{v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_n - v_0\}$ é um conjunto linearmente independente. \square

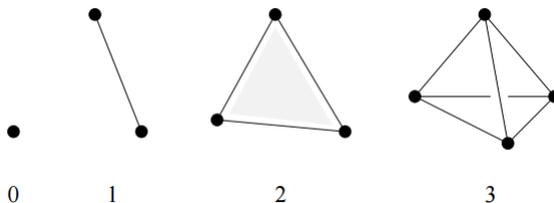
2.5 K-SIMPLEX

Algumas estruturas em espaços de dimensões menores são bastante conhecidas, como por exemplo ponto, reta, triângulo e tetraedro. Estes são alguns exemplos de simplex. Um simplex em um espaço de dimensão k é a estrutura contendo $k + 1$ vértices com algumas características especiais.

Dadas as características anteriores, segue a definição formal de um k -simplex (MUNKRES, 1984).

Definição 2.23. *Um k -simplex é o envoltório convexo de $k+1$ pontos afimemente independentes num espaço euclidiano de dimensão k .*

Figura 6 – Exemplos de k -simplex.



Pela Figura 6 nota-se que um 0-simplex corresponde a um ponto, um 1-simplex em \mathbb{R}^1 é um segmento de reta, um 2-simplex em \mathbb{R}^2 é um triângulo e um 3-simplex em \mathbb{R}^3 é um tetraedro.

Note que um k -simplex é uma realização de um $(k + 1)$ -clique.

Chamando as formas obtidas pelos simplex de faces, ou seja, 0-face o ponto, 1-face o segmento de reta, 2-face o triângulo e assim por diante, tem-se a seguinte tabela.

Pela Tabela 2 podemos perceber que a quantidade de k -faces de um k -simplex seguem um padrão similar ao do triângulo de Pascal se retirarmos deste a primeira coluna de uns. Desta tabela percebemos que há muitas relações existentes em um k -simplex.

Veja ainda que um 3-simplex pode estar inteiramente contido em um plano por exemplo. Na realidade pode acontecer de um k -simplex

Tabela 2 – k -simplex e seus elementos.

\mathbb{R}^n	Nome	0-face	1-face	2-face	3-face	4-face	5-face	Σ
\mathbb{R}^0	0-simplex	1						1
\mathbb{R}^1	1-simplex	2	1					3
\mathbb{R}^2	2-simplex	3	3	1				7
\mathbb{R}^3	3-simplex	4	6	4	1			15
\mathbb{R}^4	4-simplex	5	10	10	5	1		31
\mathbb{R}^5	5-simplex	6	15	20	15	6	1	63

estar inteiramente contido em um espaço de dimensão menor que \mathbb{R}^k . Quando isto ocorre, dizemos que é um caso **degenerado** do k -simplex.

Observaremos mais adiante que um k -simplex é um objeto essencial na análise do problema de geometria de distâncias.

2.6 MATRIZ DE DISTÂNCIAS E DETERMINANTE DE CAYLEY-MENGER

Os conceitos a seguir estão de acordo com (LAVOR; LIBERTI, 2014) e são fundamentais para o estudo do PGD.

Definição 2.24. *Chama-se **matriz de distâncias** uma matriz*

$$D(p_0, \dots, p_n) = [d_{ij}^2]$$

onde $i, j \in \{0, \dots, n\}$ em que cada entrada dessa matriz corresponde ao quadrado da distância entre os pontos i e j .

Assim, segue que

$$D(p_0, \dots, p_n) = \begin{bmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & d_{03}^2 & \dots & d_{0n}^2 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & \dots & d_{1n}^2 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & d_{23}^2 & \dots & d_{2n}^2 \\ d_{03}^2 & d_{13}^2 & d_{23}^2 & 0 & \dots & d_{3n}^2 \\ \vdots & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{0n}^2 & d_{1n}^2 & d_{2n}^2 & d_{3n}^2 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

Note que a distância de um ponto a ele mesmo é nula, logo

$d_{ii} = 0, \forall i : 0, 1, \dots, n$. Como a distância de x_i a x_j é igual a distância de x_j a x_i , temos que $d_{ij} = d_{ji}$. Logo temos que D é uma matriz simétrica.

Definição 2.25. *O determinante de Cayley-Menger é gerado a partir da matriz formada pela última linha e coluna contendo entradas iguais a 1 exceto a última entrada que será 0 e as demais entradas são formadas pela matriz de distâncias $D(p_0, \dots, p_n)$, ou seja,*

$$CM(p_0, \dots, p_n) = \begin{vmatrix} D(p_0, \dots, p_n) & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}^T & 0 \end{vmatrix},$$

em que $\mathbf{1}$ é um vetor coluna de uns.

Este determinante é a principal ferramenta que utilizaremos para determinar a existência de uma solução para o PGD.

No próximo capítulo verificamos, por experimentação, a relação que há entre as realizações de 2, 3 e 4-clique e seus respectivos determinantes de Cayley-Menger.

3 REALIZAÇÕES DE UM $(K + 1)$ -CLIQUE

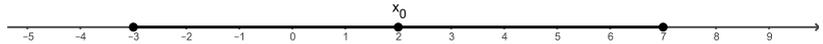
Neste capítulo será feito um estudo sobre as realizações de um $(k + 1)$ -clique em dimensões pequenas, ou seja, em \mathbb{R}^k para $k = 1, 2$ e 3 . Em geral, quando existe, a realização de um $(k + 1)$ -clique gera um k -simplex.

3.1 2-CLIQUE

Dada somente a distância, é trivial concluir que haverá infinitas soluções para o PGD, pois existem infinitas possibilidades de posicionamento de uma distância sobre uma reta. Porém, se fixado um dos pontos, o outro deverá obedecer a igualdade $\|x_0 - x_1\|^2 = d_{01}^2$, podendo haver aí apenas duas soluções distintas.

Por exemplo, seja $d_{01} = 5$ e $x_0 = 2$. Então $\|x_0 - x_1\|^2 = d_{01}^2 \Rightarrow \|2 - x_1\|^2 = 5^2 \Rightarrow x_1 = 7$ ou $x_1 = -3$.

Figura 7 – Exemplo de duas realizações de 1-simplex dada uma distância.



Tomando ainda a distância $d_{01} = 5$, o determinante de Cayley-Menger é dado por

$$CM(p_0, p_1) = \begin{vmatrix} D(p_0, p_1) & \mathbb{1} \\ \mathbb{1}^T & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 5^2 & 1 \\ 5^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 50.$$

Perceba que $CM(p_0, p_1) > 0$. Naturalmente esse resultado já poderia ser esperado pois

$$\begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2d_{01}^2.$$

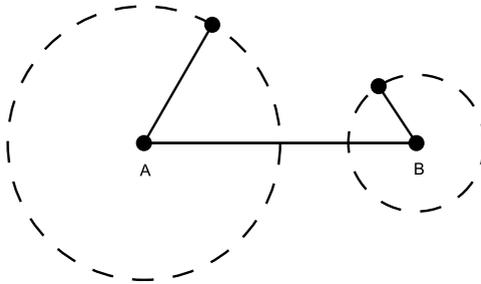
Como $d_{01} \in \mathbb{R}_+$ (pois é uma distância) então $CM(p_0, p_1) > 0$.

Note ainda que se $d_{01} = 0$ temos o caso degenerado em que a realização terá os dois pontos com as mesmas coordenadas e, ainda, $CM(p_0, p_1) = 0$. Portanto temos que $CM(p_0, p_1) \geq 0$.

3.2 3-CLIQUE

Ao contrário do que foi visto para um 2-clique, nem sempre haverá uma realização para um 3-clique em \mathbb{R}^2 . Por exemplo, sejam as três distâncias $d_{AB} = 4$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 1$. A Figura 8 mostra que, fixada a aresta $\{A, B\}$, as circunferências cujos raios tem medidas d_{AC} e d_{BC} não se interceptam e, com isso, não há um ponto C localizado nesse espaço dadas tais condições.

Figura 8 – PGD sem solução.



Neste caso as distâncias dadas não satisfazem a desigualdade triangular.

Proposição 3.1. *Dadas três distâncias d_{ab} , d_{bc} e d_{ac} , haverá uma realização de um 3-clique entre os vértices a , b e c em \mathbb{R}^k se, e somente se, forem satisfeitas as desigualdades triangulares*

$$d_{ab} \leq d_{bc} + d_{ac},$$

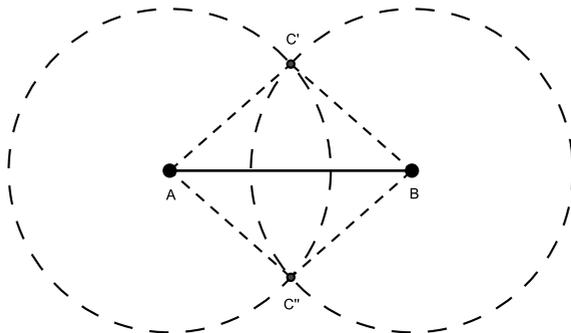
$$d_{bc} \leq d_{ab} + d_{ac},$$

$$d_{ac} \leq d_{ab} + d_{bc}.$$

Alterando os valores das distâncias do exemplo anterior para $d_{AB} = 3$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 2$, pela Proposição 3.1 existe uma realização para um 3-clique. Novamente, fixando a aresta $\{A, B\}$ e traçando as circunferências centradas em A e B de raios d_{AC} e d_{BC} , obtemos dois pontos de intersecção C' e C'' , como mostra a Figura 9. Para cada escolha de um ponto C teremos um conjunto de pontos que será uma

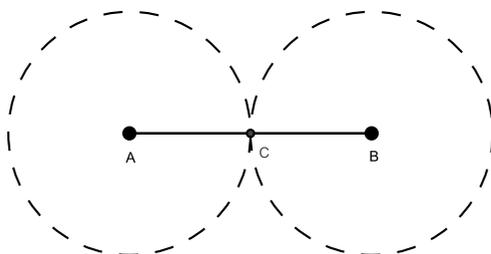
realização deste 3-clique.

Figura 9 – PGD com duas soluções.



Outra situação particular ocorre quando a soma de duas distâncias é igual a terceira, caso que ainda satisfaz normalmente as desigualdades triangulares. Por exemplo, tome as distâncias $d_{AB} = 4$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 2$. Neste caso a Figura 10 mostra que a única solução (a menos de transformações rígidas) será o ponto C localizado sobre a própria aresta $\{A, B\}$.

Figura 10 – PGD com solução única.



Para este caso em que uma das desigualdades triangulares é satisfeita através da própria relação de igualdade, tem-se não só a realização de um 3-clique em \mathbb{R}^2 , mas também na reta.

Outra forma de abordar o PGD é utilizar as relações $\|x_i - x_j\|^2 = d_{ij}^2$ para determinar se um conjunto de distâncias levará ou não a uma realização em um espaço dado. Desta forma, conhecendo todas as

distâncias e fixando dois dos três vértices, é possível montar um sistema de equações onde as coordenadas do terceiro vértice desconhecido serão as incógnitas do sistema.

Tome como exemplo um conjunto de vértices $V = \{a, b, c\}$ em \mathbb{R}^2 e seu devido conjunto de arestas $E = \{\{a, b\}, \{a, c\}, \{b, c\}\}$ com pesos $d_{ab} = 1$, $d_{ac} = 1$ e $d_{bc} = \sqrt{2}$. Fixando $X_a = (0, 0)$ e $X_b = (0, 1)$ temos o sistema

$$\begin{aligned} \|X_c - X_a\| &= d_{ac} \\ \|X_c - X_b\| &= d_{bc}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Elevando as duas igualdades ao quadrado obtemos um sistema não linear

$$\|X_c\|^2 - 2X_c \cdot X_a + \|X_a\|^2 = d_{ac}^2 \tag{3.2}$$

$$\|X_c\|^2 - 2X_c \cdot X_b + \|X_b\|^2 = d_{bc}^2, \tag{3.3}$$

onde $X_i \cdot X_j$ denota o produto escalar.

Subtraindo (3.3) de (3.2) temos

$$2X_c \cdot (X_b - X_a) + \|X_a\|^2 - \|X_b\|^2 = d_{ac}^2 - d_{bc}^2$$

$$2(X_b - X_a) \cdot X_c = d_{ac}^2 - d_{bc}^2 + \|X_b\|^2 - \|X_a\|^2.$$

Considerando $X_c = (x, y)$ segue que

$$2(0, 1) \cdot (x, y) = 1 - 2 + 1 - 0 = 0,$$

isto é, $y = 0$.

Utilizando o valor de y encontrado em (3.1), temos

$$\|X_c - X_a\| = d_{ac}, \text{ ou seja,}$$

$$\sqrt{(x-0)^2 + (0-0)^2} = 1,$$

$$\sqrt{x^2} = 1,$$

$$|x| = 1.$$

Portanto, podemos observar duas soluções para este PGD: a primeira em que $X_c = (1, 0)$ e a segunda $X_c = (-1, 0)$.

Todavia, o foco deste trabalho é determinar se existe uma rea-

lização, conhecidas somente as distâncias, sem prévias condições sobre os vértices.

Dadas as distâncias d_{01} , d_{02} e d_{12} , podemos analisar o PGD através do determinante de Cayley-Menger. Temos inicialmente que a matriz das distâncias será dada como

$$D(p_0, p_1, p_2) = \begin{bmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Com isto, o determinante de Cayley-Menger será dado por

$$\begin{aligned} CM(p_0, p_1, p_2) &= \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \\ &= d_{01}^4 + d_{02}^4 + d_{12}^4 - 2[d_{01}^2 d_{02}^2 + d_{01}^2 d_{12}^2 + d_{02}^2 d_{12}^2] \end{aligned} \quad (3.4)$$

Retomando os dados dos três casos anteriores, é possível observar algumas características com relação ao determinante de Cayley-Menger.

Para o exemplo em que $d_{AB} = 4$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 1$ segue o determinante

$$CM(p_0, p_1, p_2) = \begin{vmatrix} 0 & 4^2 & 2^2 & 1 \\ 4^2 & 0 & 1^2 & 1 \\ 2^2 & 1^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 105 > 0.$$

No outro exemplo em que $d_{AB} = 3$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 2$ segue o determinante

$$CM(p_0, p_1, p_2) = \begin{vmatrix} 0 & 3^2 & 2^2 & 1 \\ 3^2 & 0 & 2^2 & 1 \\ 2^2 & 2^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -63 < 0.$$

Por fim, o exemplo em que $d_{AB} = 4$, $d_{AC} = 2$ e $d_{BC} = 2$ segue o determinante

$$CM(p_0, p_1, p_2) = \begin{vmatrix} 0 & 4^2 & 2^2 & 1 \\ 4^2 & 0 & 2^2 & 1 \\ 2^2 & 2^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0.$$

Analisando os resultados podemos conjecturar que, em \mathbb{R}^2 , o PGD tem solução quando $CM(p_0, p_1, p_2) \leq 0$ e $CM(p_i, p_j) \geq 0$ para $i, j \in \{0, 1, 2\}$ e $i \neq j$ (conforme observado ao fim da seção 3.1), caso contrário não haverá solução.

Para provar a afirmação anterior, será utilizada a Fórmula de Heron. Esta fórmula relaciona a área de um triângulo com as medidas de seus lados e seu semiperímetro.

Teorema 3.2 (Fórmula de Heron). *Seja um triângulo de área $A \geq 0$ cujas medidas dos lados valem a , b e c . Então*

$$A = \sqrt{p(p-a)(p-b)(p-c)},$$

onde p é o semiperímetro, ou seja, $p = \frac{a+b+c}{2}$.

A Fórmula de Heron toma como hipótese a existência de um triângulo de área $A \geq 0$, logo existe uma realização de um 3-clique, em \mathbb{R}^2 caso $A > 0$, ou ainda em \mathbb{R} caso $A = 0$.

Admitindo a existência de um triângulo de vértices 0, 1 e 2 e suas distâncias como d_{01} , d_{02} e d_{12} tem-se pela fórmula de Heron

$$\sqrt{p(p-d_{01})(p-d_{02})(p-d_{12})} \geq 0.$$

Ou seja

$$p(p-d_{01})(p-d_{02})(p-d_{12}) \geq 0.$$

Como $p = \frac{d_{01} + d_{02} + d_{12}}{2}$, segue que

$$\frac{1}{2^4} (d_{01} + d_{02} + d_{12})(-d_{01} + d_{02} + d_{12})(d_{01} - d_{02} + d_{12})(d_{01} + d_{02} - d_{12}) \geq 0$$

$$(d_{01} + d_{02} + d_{12})(-d_{01} + d_{02} + d_{12})(d_{01} - d_{02} + d_{12})(d_{01} + d_{02} - d_{12}) \geq 0$$

$$(-d_{01}^2 + d_{02}^2 + d_{12}^2 + 2d_{02}d_{12})(d_{01}^2 - d_{02}^2 - d_{12}^2 + 2d_{02}d_{12}) \geq 0$$

$$-d_{01}^4 - d_{02}^4 - d_{12}^4 + 2d_{01}^2 d_{02}^2 + 2d_{01}^2 d_{12}^2 + 2d_{02}^2 d_{12}^2 \geq 0,$$

ou ainda,

$$d_{01}^4 + d_{02}^4 + d_{12}^4 - 2[d_{01}^2 d_{02}^2 + d_{01}^2 d_{12}^2 + d_{02}^2 d_{12}^2] \leq 0.$$

Utilizando a Equação (3.4) na desigualdade acima tem-se que

$$CM(p_0, p_1, p_2) \leq 0.$$

Concluimos que se há alguma solução para o PGD em \mathbb{R}^2 , então o determinante de Cayley-Menger formado pelas três distâncias dadas deve ser um valor real não positivo, enquanto que $CM(p_0, p_1)$, $CM(p_0, p_2)$ e $CM(p_1, p_2)$ devem ser positivos.

3.3 4-CLIQUE

O PGD neste caso consiste em, dadas 6 distâncias, encontrar posições dos 4 vértices no espaço de modo que as distâncias Euclidianas entre eles coincidam com as distâncias dadas.

Para entender melhor o problema e suas soluções, será feita a seguir a construção da ideia geométrica passo-a-passo.

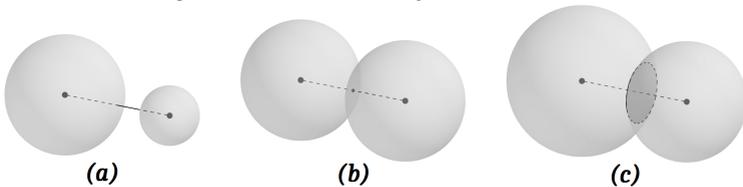
Suponha que sejam conhecidas as distâncias d_{01} , d_{02} , d_{03} , d_{12} , d_{13} , d_{23} .

Inicialmente fixe uma aresta no espaço que possua a distância d_{01} . Logo suas extremidades serão os vértices 0 e 1. Como se trata de apenas uma distância, isto é, um 1-clique, há uma infinidade de possibilidades de seu posicionamento no espaço.

Dos vértices 0 e 1 traçamos as esferas de centros nestes vértices e raios d_{02} e d_{12} respectivamente. Analogamente à realização do 3-clique temos três casos:

- (a) As esferas não se interceptam em nenhum ponto.
- (b) As esferas se interceptam em um único ponto, ou seja, são tangentes.
- (c) As esferas se cruzam tendo uma circunferência como intersecção.

Figura 11 – Determinação do vértice 2.

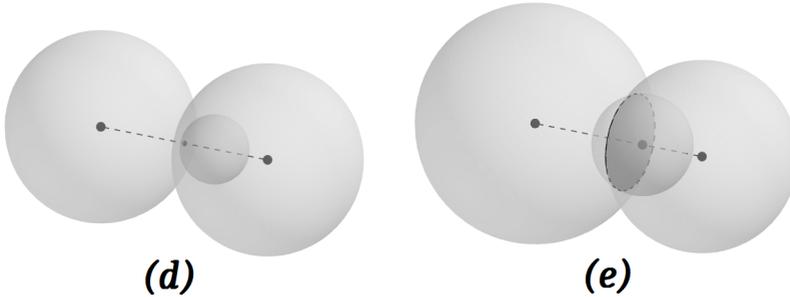


Note que, na Figura 11, o caso (a) não será interessante por falhar na desigualdade triangular, logo ele não gera uma realização para o 4-clique que estamos construindo.

No caso (b), temos os vértices 0, 1 e 2 alinhados sobre a aresta $\{0, 1\}$. Tracemos novas esferas de centros nestes vértices e raios d_{03} , d_{13} e d_{23} .

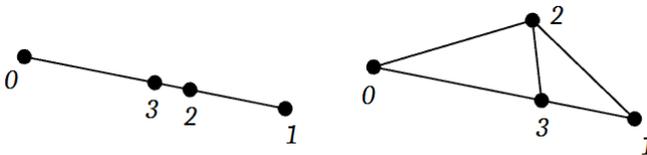
Será possível localizar o vértice 3 somente quando estas três esferas se intersectarem num único ponto ou em infinitos pontos de uma circunferência como mostra a Figura 12.

Figura 12 – Determinação do vértice 3.



Portanto, na Figura 12, tomando o ponto de intersecção do caso (d) e escolhendo um ponto qualquer da circunferência gerada no caso (e), teríamos como realização do 4-clique as seguintes estruturas, respectivamente:

Figura 13 – Possíveis realizações de um 4-clique.

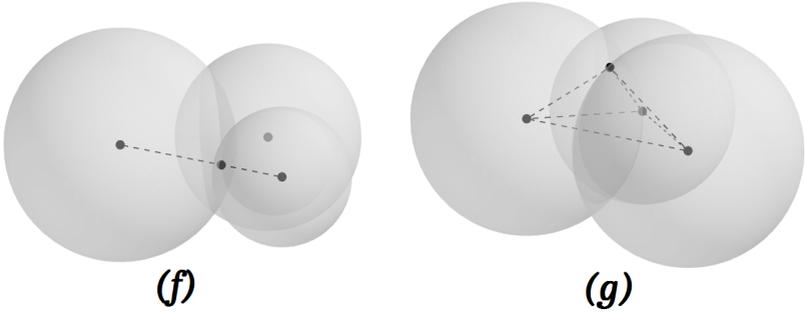


No caso (c), representado na Figura 11, tomando o vértice 2 como um ponto qualquer da circunferência da intersecção das duas esferas, temos que os vértices 0, 1 e 2 estão não alinhados e, portanto, formam um triângulo.

Novamente, tracemos as esferas de centro 0, 1 e 2 e raios d_{03} , d_{13} e d_{23} respectivamente. Haverá posicionamento para o vértice 3 somente quando as esferas se cruzarem num único ponto ou em dois pontos distintos. Perceba pela Figura 14 que para que as esferas se cruzem num único ponto é preciso que duas destas esferas sejam tangentes e a terceira esfera contenha o ponto de tangência: caso (f). E ainda, para

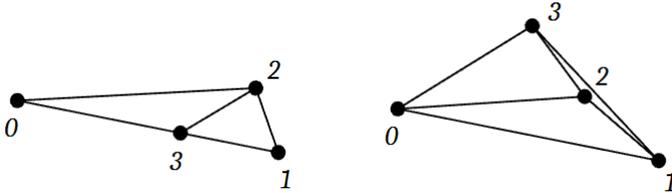
que as esferas se cruzem em dois pontos distintos, as três esferas devem se cruzar não sendo tangentes duas a duas: caso (g).

Figura 14 – Determinação do vértice 4.



Da Figura 14, tomando os pontos gerado no caso (f) e escolhendo um dos dois pontos da intersecção das três esferas do caso (g), temos outras novas estruturas como realização do 4-clique, que podem ser visualizados, respectivamente, na Figura 15.

Figura 15 – Possíveis realizações de um 4-clique.



Perceba que somente no caso (g) obtivemos um 3-simplex não degenerado como a realização do 4-clique.

É importante ressaltar que para que a construção desse 3-simplex seja possível, as distâncias devem obedecer a desigualdade triangular, isto é, todas as faces (2-simplex) que compoem este 3-simplex devem satisfazer a condição vista anteriormente, $CM(p_i, p_j, p_l) \leq 0$.

Note que todas essas condições não são suficientes para determinar se a realização de um 4-clique será um 3-simplex não-degenerado. Por exemplo, na primeira estrutura da Figura 15 temos os pontos satisfazendo as desigualdades triangulares, isto é, todas as faces satisfazem a condição $CM(p_i, p_j, p_l) \leq 0$, mas não foi possível obter um 3-simplex não degenerado sob estas condições.

Contudo, de acordo com (LIBERTI; LAVOR, 2015), Tartaglia deduziu uma fórmula para o cálculo do volume de um tetraedro qualquer.

Teorema 3.3 (Fórmula de Tartaglia). *Considere um tetraedro qualquer de volume $\mathbb{V}^2 > 0$ de vértices 0, 1, 2 e 3 e arestas de medidas d_{01} , d_{02} , d_{03} , d_{12} , d_{13} , d_{23} . Então*

$$\mathbb{V}^2 = \frac{1}{288} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & d_{03}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & d_{23}^2 & 1 \\ d_{03}^2 & d_{13}^2 & d_{23}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Perceba que esta fórmula já considera o determinante de Cayley-Menger em sua essência. Pela expressão temos que, como $\mathbb{V}^2 > 0$,

$$\begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & d_{02}^2 & d_{03}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & d_{12}^2 & d_{13}^2 & 1 \\ d_{02}^2 & d_{12}^2 & 0 & d_{23}^2 & 1 \\ d_{03}^2 & d_{13}^2 & d_{23}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} > 0.$$

$$\Rightarrow CM(p_0, \dots, p_3) > 0.$$

Note que se $\mathbb{V} = 0$, ou seja, quando se trata de um poliedro “achatado” em um plano, tem-se $CM(p_0, \dots, p_3) = 0$. Assim, podemos dizer que se a realização de um 4-clique for um 3-simplex não-degenerado (tetraedro) então $CM(p_0, \dots, p_3) > 0$.

Para exemplificar o resultado acima, tomemos o tetraedro regular de arestas 1. Assim

$$CM(p_0, \dots, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1^2 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 0 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 0 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 1^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 4 > 0.$$

Modificando uma das distâncias para 3 é fácil perceber que a desigualdade triangular falhará para algumas das faces. Em termos de determinante de Cayley-Menger temos que

$$CM(p_0, \dots, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1^2 & 1^2 & 3^2 & 1 \\ 1^2 & 0 & 1^2 & 1^2 & 1 \\ 1^2 & 1^2 & 0 & 1^2 & 1 \\ 3^2 & 1^2 & 1^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -108 < 0.$$

Como já comentado neste capítulo, não basta apenas que

$$CM(p_0, \dots, p_3) > 0$$

para que se obtenha um 3-simplex. Todas as faces deste tetraedro também devem satisfazer a condição $CM(p_i, p_j, p_l) \leq 0$.

Exemplo 3.1 (REZENDE, 2014) Considere o conjunto de seis distâncias entre os pontos 0, 1, 2 e 3 listadas abaixo:

$$\begin{array}{lll} d_{01} = 1 & d_{02} = 1,78 & d_{03} = 2,67582 \\ d_{12} = 0,5 & d_{13} = 1,06066 & d_{23} = 0,25. \end{array}$$

Temos que $CM(p_0, \dots, p_3) = 3,20375 > 0$. Contudo, tomando apenas os pontos 0, 1 e 2 temos que $CM(p_0, p_1, p_2) = 2,68026 > 0$. Perceba que estes três pontos não satisfazem a desigualdade triangular, pois $d_{01} + d_{12} = 1 + 0,5 = 1,5 < 1,78 = d_{02}$.

No próximo capítulo mostraremos que é possível calcular o volume de um k -simplex qualquer utilizando o determinante de Cayley-Menger e, a partir deste resultado, podemos obter condições necessárias e suficientes para a existência de uma solução para o PGD sobre um $(k + 1)$ -clique qualquer.

4 CONDIÇÃO NECESSÁRIA E SUFICIENTE PARA A REALIZAÇÃO DE UM CONJUNTO COMPLETO DE DISTÂNCIAS

No capítulo 3 vimos que o determinante de Cayley-Menger pode ser usado para calcular a área de um triângulo ou ainda o volume de um tetraedro. Para os casos de um k -simplex, onde $k > 3$ também é possível calcular seu volume pela generalização das fórmulas de Heron e Tartaglia.

Para chegar a esta expressão, devemos verificar os seguintes lemas.

Lema 4.1 ((HANSON, 1994)). *Considere um k -simplex em \mathbb{R}^k de vértices x_i , em que $i = 0, \dots, k$ cujas coordenadas x_i^j , $j = 1, \dots, k$, são conhecidas. O volume orientado \mathbb{V} desse k -simplex é dado pela expressão*

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 \end{vmatrix}.$$

Demonstração. Em \mathbb{R}^2 , três pontos não colineares determinam um triângulo cuja área pode ser calculada através dos vetores formados por estes pontos. Sejam estes pontos 0, 1 e 2 com posicionamentos x_0, x_1 e x_2 , respectivamente. A área orientada \mathbb{V}_2 do triângulo determinado pelos vetores coluna $x_1 - x_0$ e $x_2 - x_0$ é calculado por

$$\mathbb{V}_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

Quatro pontos afimemente independentes em \mathbb{R}^3 determinam um tetraedro. Dados os pontos 0, 1, 2 e 3 com posicionamentos x_0, x_1, x_2 e x_3 , respectivamente, de maneira análoga podemos calcular o volume orientado \mathbb{V}_3 deste tetraedro através da expressão

$$\mathbb{V}_3 = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \\ (x_3 - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

A fórmula para o cálculo de um volume orientado \mathbb{V}_n de um n -simplex pode ser intuitivamente entendida como a generalização desta

fórmula para o cálculo do volume de um tetraedro. Uma observação que deve ser feita é quanto ao fator multiplicativo que deverá aparecer na expressão. Perceba que o volume \mathbb{V}_2 é obtido através da metade da área do paralelogramo, assim como o volume \mathbb{V}_3 é obtido por um sexto do volume do paralelepípedo. Estes fatores estão diretamente relacionados com a dimensão do espaço que se encontra a estrutura geométrica. Então, em \mathbb{R}^2 o fator é $\frac{1}{2!}$, em \mathbb{R}^3 , o fator é $\frac{1}{3!}$. Assim, por indução pode-se provar que a expressão do volume \mathbb{V}_k conterà o fator $\frac{1}{k!}$.

Deste modo temos

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_1 - x_0)^T \\ (x_2 - x_0)^T \\ \vdots \\ (x_k - x_0)^T \end{vmatrix}.$$

Perceba que ao adicionarmos a matriz uma primeira linha com as coordenadas de x_0 e, após este procedimento, adicionarmos também uma última coluna cuja primeira entrada é 1 e as demais 0, não modificamos o valor do determinante, logo

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_0)^T & 1 \\ (x_1 - x_0)^T & 0 \\ (x_2 - x_0)^T & 0 \\ \vdots & \\ (x_k - x_0)^T & 0 \end{vmatrix}.$$

Pela Proposição 2.8 da Seção 2.1, podemos reescrever a expressão acima como

$$\mathbb{V}_k = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} (x_0)^T & 1 \\ (x_1)^T & 1 \\ (x_2)^T & 1 \\ \vdots & \\ (x_k)^T & 1 \end{vmatrix}.$$

Portanto concluímos que

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 \end{vmatrix}.$$

□

Lema 4.2 ((HAVEL et al., 1983)). *Considere um k -simplex em \mathbb{R}^k de vértices x_i , $i = 0, 1, \dots, k$. O quadrado do volume deste k -simplex é dado pela expressão*

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k(k!)^2} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Demonstração. Pelo Lema 4.1 temos

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 \end{vmatrix}.$$

Se aumentarmos a matriz do determinante com uma linha e coluna de zeros e um 1 na diagonal não alteraremos o valor do determinante. Logo, temos

$$\mathbb{V} = \frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_0^2 & \dots & x_0^k & 1 & 0 \\ x_1^1 & x_1^2 & \dots & x_1^k & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_k^1 & x_k^2 & \dots & x_k^k & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} := \frac{1}{k!} \det(A). \quad (4.1)$$

Utilizando a Proposição 2.7, permutamos as duas últimas colunas alterando o sinal do determinante anterior. Além disso, pela Proposição 2.3 podemos escrever a expressão (4.1) da seguinte maneira

$$\mathbb{V} = -\frac{1}{k!} \begin{vmatrix} x_0^1 & x_1^1 & \dots & x_k^1 & 0 \\ x_0^2 & x_1^2 & \dots & x_k^2 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_0^k & x_1^k & \dots & x_k^k & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix} := -\frac{1}{k!} \det(B). \quad (4.2)$$

Como ambas matrizes dos determinantes de (4.1) e (4.2) são quadradas de ordem $k+2$, pela Proposição 2.4 temos que $|AB| = |A||B|$, logo

$$\mathbb{V}^2 = -\left(\frac{1}{k!}\right)^2 \begin{vmatrix} x_0 \cdot x_0 & x_0 \cdot x_1 & \dots & x_0 \cdot x_k & 1 \\ x_1 \cdot x_0 & x_1 \cdot x_1 & \dots & x_1 \cdot x_k & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_k \cdot x_0 & x_k \cdot x_1 & \dots & x_k \cdot x_k & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix},$$

em que $x_i \cdot x_j$ é o produto escalar entre estes vetores.

Este produto também pode ser escrito como

$$x_i \cdot x_j = \frac{1}{2} [x_i \cdot x_i + x_j \cdot x_j - d_{ij}^2]. \quad (4.3)$$

Utilizando a Proposição 2.8 fazemos substituições na matriz alterando cada linha de índice i ($i = 0, \dots, k$) pela soma da própria com a última linha previamente multiplicada por $-\frac{1}{2}[x_i \cdot x_i]$ e, também alteramos cada coluna de índice j ($j = 0, \dots, k$) pela soma da própria com a última coluna previamente multiplicada por $-\frac{1}{2}[x_j \cdot x_j]$, eliminando os dois primeiros termos do lado direito de (4.3), sem modificar o valor do determinante. Segue que

$$\mathbb{V}^2 = -\left(\frac{1}{k!}\right)^2 \begin{vmatrix} -\frac{1}{2}d_{00}^2 & -\frac{1}{2}d_{01}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{0k}^2 & 1 \\ -\frac{1}{2}d_{01}^2 & -\frac{1}{2}d_{11}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{2}d_{0k}^2 & -\frac{1}{2}d_{1k}^2 & \dots & -\frac{1}{2}d_{kk}^2 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Para cada coluna, retiramos o fator $-\frac{1}{2}$ de dentro do determi-

nante (vide Proposição 2.6) obtendo:

$$\mathbb{V}^2 = \frac{-1}{(k!)^2} \left(-\frac{1}{2}\right)^{k+1} \begin{vmatrix} d_{00}^2 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & d_{11}^2 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & d_{kk}^2 & 1 \\ -2 & -2 & \dots & -2 & 0 \end{vmatrix}.$$

Pela Proposição 2.5 retiramos o fator -2 da última linha. Segue que

$$\mathbb{V}^2 = (-2) \frac{-1}{2^{k+1}} \frac{(-1)^{k+1}}{(k!)^2} \begin{vmatrix} d_{00}^2 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & d_{11}^2 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & d_{kk}^2 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Portanto, sendo $d_{ii} = 0$ para qualquer $i = 0, \dots, k$, temos como expressão final,

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \dots & d_{0k}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \dots & d_{1k}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{0k}^2 & d_{1k}^2 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

□

Note que esta expressão utiliza o determinante de Caley-Menger, logo podemos reescrever esta mesma como

$$\mathbb{V}^2 = \frac{(-1)^{k+1}}{2^k (k!)^2} CM(p_0, \dots, p_k). \quad (4.4)$$

A seguir enunciaremos o teorema que determina as condições necessárias e suficientes para a realização de um $(n+1)$ -clique em \mathbb{R}^k , para $k \leq n$. Este teorema é o foco desse trabalho e pode ser encontrado em várias referências, porém as discussões a respeito da sua demonstração por vezes não estão completas ou não estão muito claras.

4.1 CONDIÇÃO NECESSÁRIA E SUFICIENTE PARA A REALIZAÇÃO DE UM $(N+1)$ -CLIQUE

Um dos objetivos deste trabalho é apresentar o teorema que determina as condições necessárias e suficientes para a realização de um conjunto completo de distancias e sua demonstração de uma forma mais concisa e transparente, em que a condição necessária é baseada em (HAVEL et al., 1983) e a condição suficiente em (SWANEPOEL, 2004).

Teorema 4.3. *Uma condição necessária e suficiente para que um $(n+1)$ -clique tenha uma realização em \mathbb{R}^k , para $k \leq n$, é que todos os determinantes de Cayley-Menger, não nulos, de $m+1$ pontos tenham sinal dado por $(-1)^{m+1}$ para todo $m = 1, 2, \dots, k$. Além disso, os determinantes de Cayley-Menger com $m+1$ pontos, para $m > k$, devem ser nulos.*

Demonstração. Suponha que exista uma realização do $(n+1)$ -clique no espaço \mathbb{R}^k , para $n \geq k$. Então existe um $(k+1)$ -clique (escolhido a partir do $(n+1)$ -clique) que admite realização em \mathbb{R}^k , ou seja, um k -simplex, degenerado ou não.

Suponha, sem perda de generalidade, que este k -simplex seja não degenerado. Portanto o quadrado do volume deste simplex será positivo, assim como o quadrado do volume de qualquer face que componha este simplex.

Logo para todo $m = 1, 2, \dots, k$, do m -simplex teremos $\mathbb{V}_m^2 > 0$.

Pela expressão (4.4) segue então que,

$$\frac{(-1)^{m+1}}{2^m(m!)^2} CM(p_0, \dots, p_m) > 0,$$

o que implica em

$$(-1)^{m+1} CM(p_0, \dots, p_m) > 0, \quad \text{para } m = 1, 2, \dots, k.$$

Além disso, o volume de um m -simplex degenerado em \mathbb{R}^k para $m > k$ é zero (como observado nas discussões do Teorema 3.3), uma vez que $\{x_0, \dots, x_n\}$ são afimemente independente e, portanto $\{x_1 - x_0, \dots, x_k - x_0\}$ são linearmente independentes em \mathbb{R}^k , implicando que

$$CM(p_0, \dots, p_m) = 0, \quad \forall m > k.$$

Por outro lado, seja $(-1)^{m+1} CM(p_0, \dots, p_m) > 0$ para todo $1 \leq m \leq k$.

Para $m = 1$,

$$CM(p_0, p_1) = \begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 2d_{01}^2 > 0.$$

Como sempre há uma realização dada uma distância entre dois pontos, temos que o resultado é válido para $m = 1$. (veja o exemplo da seção 3.1)

Considere $m < k$. Assumiremos como hipótese de indução que existe uma realização não degenerada de m pontos, isto é, $(-1)^m CM(p_0, \dots, p_{m-1}) > 0$. Assim, temos um $(m-1)$ -simplex não degenerado em que os m pontos são afimemente independentes. Sem perda de generalidade podemos adotar $p_0 \rightarrow \hat{x}(p_0) = \hat{x}_0 = 0$ e $p_i \rightarrow \hat{x}(p_i) = \hat{x}_i$, para $i = 1, \dots, m-1$.

Com isso, os vetores formados por $\hat{x}_i - \hat{x}_0$ serão linearmente independentes, segundo a Proposição 2.22.

Perceba que $\|\hat{x}_i\| = \|\hat{x}_i - 0\| = d_{i0}$ e $\|\hat{x}_i - \hat{x}_j\| = d_{ij}$ para $0 \leq i, j \leq m-1$.

Para mostrar a validade para m , devemos encontrar uma realização de $m+1$ pontos em \mathbb{R}^m . Como \mathbb{R}^{m-1} é isomorfo a um subespaço de \mathbb{R}^m de dimensão $(m-1)$, aumentando os valores $\hat{x}_i \in \mathbb{R}^{m-1}$ com uma coordenada zero, temos uma realização para os m primeiros pontos em \mathbb{R}^m . Agora, resta encontrar $x_m \in \mathbb{R}^m$ tal que

$$\|x_m\| = d_{m0} \tag{4.5}$$

$$\|x_m - x_i\| = d_{mi} \quad , \quad i = 1, \dots, m-1. \tag{4.6}$$

Vamos escrever $x_m = v + \lambda e_m$, onde $v \in \mathbb{R}^m$ em que a última entrada é nula, $\lambda \in \mathbb{R}$ e e_m é o m -ésimo vetor canônico de \mathbb{R}^m , isto é

$$x_m = v + \lambda e_m = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{v} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{0} \\ \lambda \end{bmatrix},$$

em que $\hat{v}, \hat{0} \in \mathbb{R}^{m-1}$.

Vamos mostrar que existem \hat{v} e λ , tais que o sistema de equações (4.5) e (4.6) é satisfeito. Perceba que tal sistema de equações corresponde a intersecção de m esferas em \mathbb{R}^m . Elevando ambos os lados das equações (4.5) e (4.6) ao quadrado, obtemos:

$$\|x_m\|^2 = d_{m0}^2 \quad (4.7)$$

$$\|x_m - x_i\|^2 = d_{mi}^2, \quad i = 1, \dots, m-1 \quad (4.8)$$

Note que o produto interno $v \cdot \lambda e_m$ é nulo, portanto

$$\|x_m\|^2 = \|v + \lambda e_m\|^2 = \|v\|^2 + \lambda^2.$$

Desenvolvendo o quadrado na equação (4.8), temos que

$$\begin{aligned} \|v\|^2 + \lambda^2 &= d_{m0}^2 \\ \|x_m\|^2 - 2x_m \cdot x_i + \|x_i\|^2 &= d_{mi}^2, \quad i = 1, \dots, m-1 \end{aligned}$$

Analisando o produto interno $x_m \cdot x_i$, temos que

$$x_m \cdot x_i = \left(\begin{bmatrix} \hat{v} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{0} \\ \lambda \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} \hat{x}_i \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{v} \cdot \hat{x}_i.$$

Logo, segue o sistema

$$\|v\|^2 + \lambda^2 = d_{m0}^2 \quad (4.9)$$

$$\|v\|^2 + \lambda^2 - 2\hat{v} \cdot \hat{x}_i + \|\hat{x}_i\|^2 = d_{mi}^2, \quad i = 1, \dots, m-1 \quad (4.10)$$

Subtraindo a equação (4.9) de (4.10) obtemos outro sistema.

$$\begin{aligned} \|v\|^2 + \lambda^2 &= d_{m0}^2 \\ -2\hat{v} \cdot \hat{x}_i + \|\hat{x}_i\|^2 &= d_{mi}^2 - d_{m0}^2, \quad i = 1, \dots, m-1 \end{aligned}$$

Usando a notação de matrizes, podemos escrever

$$\left\{ \begin{array}{l} \|v\|^2 + \lambda^2 = d_{m0}^2 \\ \begin{bmatrix} \hat{x}_1^T \\ \vdots \\ \hat{x}_{m-1}^T \end{bmatrix} \hat{v} = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} d_{m1}^2 - d_{m0}^2 - \|\hat{x}_1\|^2 \\ \vdots \\ d_{m,m-1}^2 - d_{m0}^2 - \|\hat{x}_{m-1}\|^2 \end{bmatrix} \end{array} \right.$$

Perceba que a matriz A da equação matricial da forma $A\hat{v} = b$ acima é formada pelas vetores \hat{x}_i transpostos linearmente independentes já discutidos. Logo, essa matriz A é não-singular o que garante a existência e unicidade do vetor \hat{v} da equação.

Encontraremos x_m assim que a equação abaixo for satisfeita

$$\|x_m\|^2 = \|v\|^2 + \lambda^2.$$

Pela equação (4.5) obtemos

$$\lambda^2 = d_{0m}^2 - \|v\|^2.$$

Assim, para garantir a existência de $\lambda \in \mathbb{R}$, resta mostrar que $d_{0m}^2 - \|v\|^2 > 0$. Para isso, calculamos o determinante de Cayley-Menger dos pontos de coordenadas $\hat{x}_0, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{m-1}, \hat{v}$. Note que o conjunto com estas coordenadas formam um m -simplex degenerado em \mathbb{R}^{m-1} , pois \hat{v} é um vetor qualquer de \mathbb{R}^{m-1} que pode ser gerado pelos demais vetores do conjunto (pois são afimemente independentes). Logo, \hat{v} é uma combinação afim dos demais vetores do conjunto e, com isso, o determinante $CM(\hat{x}_0, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{m-1}, \hat{v})$ será igual a zero:

$$\begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \dots & d_{0,m-1}^2 & \|\hat{v}\|^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \dots & d_{1,m-1}^2 & \|\hat{v} - \hat{x}_1\|^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{m-1,0}^2 & d_{m-1,1}^2 & \dots & 0 & \|\hat{v} - \hat{x}_{m-1}\|^2 & 1 \\ \|\hat{v}\|^2 & \|\hat{v} - \hat{x}_{m-1}\|^2 & \dots & \|\hat{v} - \hat{x}_{m-1}\|^2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.11)$$

Da equação (4.6) temos que $\|x_m - x_i\|^2 = d_{mi}^2$ em que $x_m, x_i \in \mathbb{R}^m$. Segue que

$$d_{mi}^2 = \|x_m\|^2 - 2x_m \cdot x_i + \|x_i\|^2, \quad (4.12)$$

ou ainda,

$$d_{mi}^2 = d_{0m}^2 - 2\hat{v} \cdot \hat{x}_i + d_{0i}^2,$$

logo,

$$-2\hat{v} \cdot \hat{x}_i = d_{mi}^2 - d_{0m}^2 - d_{0i}^2. \quad (4.13)$$

Desse modo, quando abrimos uma expressão do tipo $\|\hat{v} - \hat{x}_i\|^2$ presente na penúltima coluna do determinante de Cayley-Menger em (4.11) temos

$$\|\hat{v} - \hat{x}_i\|^2 = \|\hat{v}\|^2 - 2\hat{v} \cdot \hat{x}_i + \|\hat{x}_i\|^2. \quad (4.14)$$

Substituindo (4.13) em (4.14) segue que

$$\begin{aligned} \|\hat{v} - \hat{x}_i\|^2 &= \|\hat{v}\|^2 + d_{mi}^2 - d_{0m}^2 - d_{0i}^2 + d_{0i}^2 \\ &= \|\hat{v}\|^2 + d_{mi}^2 - d_{0m}^2. \end{aligned}$$

Pela Proposição 2.8, usamos a última linha e coluna do determi-

nante de (4.11) para eliminar $\|\hat{v}\|^2 - d_{0m}^2$ obtendo como resultado

$$\begin{vmatrix} 0 & d_{01}^2 & \cdots & d_{0,m-1}^2 & d_{0m}^2 & 1 \\ d_{01}^2 & 0 & \cdots & d_{1,m-1}^2 & d_{1m}^2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{m-1,0}^2 & d_{m-1,1}^2 & \cdots & 0 & d_{m-1,m}^2 & 1 \\ d_{m0}^2 & d_{m1}^2 & \cdots & d_{m,m-1}^2 & -2(\|\hat{v}\|^2 - d_{0m}^2) & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0. \quad (4.15)$$

Note que este determinante é diferente de $CM(p_0, \dots, p_m)$ somente pela penúltima entrada da diagonal principal.

Segue que

$$\begin{aligned} CM(p_0, \dots, p_m) &= CM(p_0, \dots, p_m) - 0 \\ &= CM(p_0, \dots, p_m) - CM(\hat{x}_0, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{m-1}, \hat{v}) \\ &= 2(\|\hat{v}\|^2 - d_{0m}^2)CM(p_0, \dots, p_{m-1}). \end{aligned}$$

O sinal de $CM(p_0, \dots, p_m)$ é dado por $(-1)^{m+1}$, logo temos que o sinal de $2(\|\hat{v}\|^2 - d_{0m}^2)CM(p_0, \dots, p_{m-1})$ é o mesmo. Porém, o sinal de $CM(p_0, \dots, p_{m-1})$ é dado por $(-1)^m$. Logo,

$$d_{0m}^2 - \|\hat{v}\|^2 > 0.$$

Portanto mostramos que existem λ e v tais que $x_m = v + \lambda e_m$ é solução de (4.5) e (4.6). Logo provamos por indução que haverá uma realização de $k+1$ pontos em \mathbb{R}^k se $CM(p_0, \dots, p_m)$ tiver sinal $(-1)^{m+1}$ para todo $m = 1, \dots, k$.

Além disso, para $m > k$, perceba que se $CM(p_0, \dots, p_m) = 0$ então

$$2(\|v\|^2 - d_{0m}^2)CM(p_0, \dots, p_{m-1}) = 0.$$

Assumindo, sem perda de generalidade, que $CM(p_0, \dots, p_{m-1}) \neq 0$, segue que $\|v\|^2 - d_{0m}^2 = 0$, ou seja, $\lambda = 0$.

Desta forma teríamos $x_m = v$. Como $\hat{v} \in \mathbb{R}^{m-1}$, temos que a realização dos $m+1$ pontos acontece em \mathbb{R}^{m-1} . Assim, se $CM(p_0, \dots, p_m) = 0$ para todo $m > k$, teremos que a realização acontece em \mathbb{R}^k .

□

Um resultado extra que podemos obter deste teorema é que o $(n+1)$ -clique é realizável em \mathbb{R}^k , mas não em \mathbb{R}^s , $s < k$, se pelo menos um dos determinantes de $k+1$ pontos é não nulo. (BLUMENTHAL, 1943)

4.2 APLICAÇÕES

Note que este teorema tem como hipótese o conhecimento de todas as distâncias entre os pontos do espaço dado. Porém, em grande parte dos problemas reais em que os conceitos de Geometria de Distâncias são aplicáveis, não são conhecidas todas as distâncias entre esses objetos.

Ainda assim, o Teorema 4.3 pode ter sua validade na resolução de um PGD, sendo usado para estimar distâncias desconhecidas.

Exemplo 4.1 Considere 4 pontos (p_0, p_1, p_2, p_3) em \mathbb{R}^3 tal que

$$d_{01} = 1, \quad d_{02} = \sqrt{2}, \quad d_{03} = 2, \quad d_{12} = 2, \quad d_{13} = \sqrt{2}.$$

Queremos determinar os possíveis valores de d_{23} para que exista uma realização de um 4-clique em \mathbb{R}^3 .

Inicialmente perceba que

$$CM(p_0, p_1, p_2) = CM(p_0, p_1, p_3) = -7 < 0,$$

ou seja, estes dois 3-cliques que compoem o 4-clique satisfazem as hipóteses do Teorema 4.3. Além disso, chamando $d_{23}^2 = x$, temos que $CM(p_0, p_2, p_3) = CM(p_1, p_2, p_3) = x^2 - 12x + 4 < 0$, o que nos fornece como conjunto solução

$$\{x \in \mathbb{R} \mid 6 - 4\sqrt{2} < x < 6 + 4\sqrt{2}\}. \quad (4.16)$$

De acordo com o Teorema 4.3, devemos verificar que $CM(p_0, p_1, p_2, p_3)$ tem o mesmo sinal que $(-1)^{3+1}$, ou seja, $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) > 0$. Segue que

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 2 & 4 & 1 \\ 1 & 0 & 4 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 0 & x & 1 \\ 4 & 2 & x & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = -2x^2 + 30x - 88 \geq 0.$$

Ou seja,

$$4 \leq x \leq 11. \quad (4.17)$$

Tomando a intersecção de (4.16) e (4.17) temos que $4 \leq x \leq 11$. Segue que

$$2 \leq d_{23} \leq \sqrt{11}.$$

Perceba que para $d_{23} = 2$ ou $d_{23} = \sqrt{11}$ obtemos a realização do 4-clique em \mathbb{R}^2 , ou seja, um 3-simplex degenerado, pois $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = 0$ e então, em \mathbb{R}^3 , o volume do 3-simplex é nulo, de acordo com (4.4).

Exemplo 4.2 Considere 5 pontos $(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4)$ em \mathbb{R}^3 e apenas uma distância faltante. Suponha que esta distância é d_{34} , e as demais distâncias dadas por

$$\begin{aligned} d_{01} &= 1, & d_{02} &= 1, & d_{03} &= 1, & d_{04} &= \sqrt{3}, \\ d_{12} &= \sqrt{2}, & d_{13} &= \sqrt{2}, & d_{14} &= \sqrt{2}, & & \\ d_{23} &= \sqrt{2}, & d_{24} &= \sqrt{2}, & d_{34} &= \sqrt{x}. & & \end{aligned}$$

Note que $CM(p_0, p_1, p_2, p_3) = CM(p_0, p_1, p_2, p_4) = 8 > 0$. Além disso

$$\begin{aligned} CM(p_0, p_1, p_2) &= CM(p_0, p_1, p_3) = CM(p_0, p_2, p_3) = \\ &= CM(p_0, p_1, p_4) = -4 < 0. \end{aligned}$$

Também

$$CM(p_1, p_2, p_3) = CM(p_1, p_2, p_4) = -12 < 0$$

e

$$CM(p_0, p_2, p_4) = -8 < 0.$$

Logo, os 4-cliques e 3-cliques de distâncias conhecidas acima satisfazem o teorema.

Veja também que

$$CM(p_0, p_3, p_4) = x^2 - 8x + 4 < 0 \Rightarrow 2(2 - \sqrt{3}) < x < 2(2 + \sqrt{3})$$

$$CM(p_1, p_3, p_4) = CM(p_2, p_3, p_4) = x^2 - 8x < 0 \Rightarrow 0 < x < 8$$

A intersecção desses intervalos resulta em

$$2(2 - \sqrt{3}) < x < 2(2 + \sqrt{3}).$$

Se queremos uma realização do 5-clique em \mathbb{R}^3 , segundo o Teorema 4.3,

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4) = 0,$$

ou seja,

$$CM(p_0, p_1, p_2, p_3, p_4) = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 3 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 0 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 0 & x & 1 \\ 3 & 2 & 2 & x & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = 4x^2 - 32x + 48 = 0.$$

Segue que $x = 2$ ou $x = 6$. Ambas são possíveis soluções pois pertencem ao intervalo encontrado anteriormente. Assim d_{34} admite os valores $\sqrt{2}$ ou $\sqrt{6}$. Este exemplo nos mostra que, sob certas condições, o teorema 4.3 pode ser aplicado para determinar, de forma exata, distâncias faltantes.

5 CONCLUSÃO

Apesar de se mostrar um campo relativamente novo na Matemática, a Geometria de Distâncias apresenta diversas aplicações. Um bom exemplo é dado por (LAVOR; LIBERTI, 2014) a respeito de geometria molecular.

As construções geométricas das realizações de um $(k + 1)$ -clique estudadas no segundo capítulo proporcionaram uma outra visualização do problema de geometria de distâncias. Por vezes precisamos estudar casos em dimensões menores, explorando suas possibilidades e interpretações para melhor entendermos a situação problema. Além disso, esse capítulo serviu como um laboratório experimental associando a construção geométrica e determinantes de Caley-Menger.

Acreditamos que a grande contribuição deste trabalho seja apresentar (e demonstrar) um dos principais teoremas em Geometria de Distâncias de forma clara e sistemática. Recolhemos das referências suas diversas interpretações e compilamos em um único teorema a ideia principal, apresentando sua demonstração de forma detalhada. Destacamos a demonstração da condição suficiente do teorema através da construção geométrica de uma realização, diferentemente de algumas referências.

Graças a sua vasta aplicação em diversos campos, a Geometria de Distâncias tem como grande característica a comunicação entre o desenvolvimento da teoria e a relação com a prática.

Por fim gostaríamos de completar que este trabalho pode ser estendido se estudarmos outros resultados a partir do teorema principal ou então aplicá-lo a métodos de resolução do PGD quando não são conhecidas todas as distâncias.

REFERÊNCIAS

- BLUMENTHAL, L. Some imbedding theorems and characterization problems of distance geometry. **Bulletin of the American Mathematical Society**, v. 49, n. 5, p. 321–338, 1943.
- BLUMENTHAL, L. **Theory and applications of distance geometry**. New York: Oxford, 1953.
- BOLDRINI, J. L.; COSTA, S.; FIGUEREDO, V.; WETZLER, H. G. **Álgebra linear**. São Paulo: Harper & Row do Brasil, 1980.
- HANSON, A. J. Geometry for n-dimensional graphics. **Graphics Gems IV**, p. 149–170, 1994.
- HAVEL, T. F.; KUNTZ, I. D.; CRIPPEN, G. M. The theory and practice of distance geometry. **Bulletin of Mathematical Biology**, Springer, v. 45, n. 5, p. 665–720, 1983.
- LAVOR, C.; LIBERTI, L. Um convite à geometria de distâncias. **Notas em Matemática Aplicada e-ISSN 2236-5915**, SBMAC, v. 71, 2014.
- LIBERTI, L.; LAVOR, C. Six mathematical gems from the history of distance geometry. **International Transactions in Operational Research**, Wiley Online Library, 2015.
- MUNKRES, J. R. **Elements of algebraic topology**. California: Addison-Wesley Reading, 1984.
- REZENDE, G. A. **Explorando a dualidade em geometria de distâncias**. Tese (Doutorado) — Universidade estadual de Campinas, 2014.
- SWANEPOEL, K. J. Equilateral sets in finite-dimensional normed spaces. In: SECRETARIADO DE PUBLICACIONES, UNIVERSIDAD DE SEVILLA, SEVILLA. **Seminar of Mathematical Analysis**. Sevilla, 2004. v. 71, p. 195–237.