

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Matemática, Estatística
e Computação Científica

Rodrigo Labiak

Resumo do seminário CAta do dia 23/08.

**CAMPINAS
2019**

Geometria de Distâncias e o Problema do Loop Fechado

O problema principal da Geometria de Distâncias é determinar as posições de um conjunto de pontos, considerando conhecidas apenas algumas distâncias entre estes. A definição formal do Problema de Geometria de Distâncias.

Definição 1. *Problema de Geometria de Distâncias (PGD).* Dado um inteiro positivo K e um grafo simples ponderado e não direcionado $G = (V, E, d)$, onde $d : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, encontre uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ tal que

$$\forall \{u, v\} \in E \quad \|x_u - x_v\| = d_{uv}. \quad (1)$$

Uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ é dita uma realização. Dizemos que uma realização é válida se esta satisfaz a equação acima.

Entretanto, estamos interessados em uma versão “discreta” do problema, onde o espaço de busca é finito.

Definição 2. *Problema Discretizável de Geometria de Distâncias (PDGD₃):* Considere um grafo $G = (V, E, d)$ de um PGD, com $K = 3$ e uma ordem em V , denotada por v_1, \dots, v_n , tal que:

- existe uma realização válida para v_1, v_2, v_3 ,
- para todo v_i , $i = 4, \dots, n$, existem no mínimo três vértices antecessores a_i, b_i, c_i com $\{\{a_i, v_i\}, \{b_i, v_i\}, \{c_i, v_i\}\} \subseteq E$ satisfazendo

$$d_{a_i b_i} + d_{b_i c_i} > d_{a_i c_i}.$$

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

$$\forall \{v_i, v_j\} \in E, \quad \|x_{v_i} - x_{v_j}\| = d_{v_i v_j}.$$

Apresentaremos o Problema do Loop fechado e . Resumidamente o problema consiste em encontrar estruturas de um segmentos em uma molécula que sejam geometricamente consistentes com toda a estrutura da molécula. A aplicação que merece destaque deste problema é em modelagem por homologia, onde é necessário modelar segmentos de inserções ou exclusões quando o restante da estrutura da molécula é bem conhecido.

Por fim, vamos propor uma abordagem do Problema do Loop Fechado como um Problema de Geometria de Distâncias e os avanços que obtemos com está abordagem.

Referências

- [1] Coutsias, Evangelos A., et al. "A kinematic view of loop closure." *Journal of computational chemistry* 25.4 (2004): 510-528.
- [2] Liberti, Leo, et al. "Euclidean Distance Geometry and applications." *Siam Review* 56.1 (2014): 3-69.