Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n. 1, 2025.

Trabalho apresentado no XLIII CNMAC, Centro de Convenções do Armação Resort - Porto de Galinhas - PE, 2024

Busca Pelas Simetrias do DDGP via Grafos $K-$incidentes

Gabriel de Freitas Pinheiro[1], Carlile Lavor[2]
UNICAMP, Campinas, SP

O Problema de Geometria de Distâncias (**DGP**) consiste em determinar se existe uma realização de um grafo $G = (V, E, d)$ simples, conexo e ponderado, em algum espaço $\mathbb{R}^K$, onde $K > 1$, de forma que as distâncias entre as realizações de pares de vértices u e v coincidam com o peso d_{uv} da aresta $\{u, v\}$. Na Definição 0.1 formalizamos esse conceito que segue diretamente de [2].

Definição 0.1. *Dado um grafo simples, não direcionado e ponderado, $G = (V, E, d)$, e um inteiro positivo K, encontre uma função $x : V \to \mathbb{R}^K$ tal que*

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

A função x é chamada de realização de G. Iremos considerar, na maioria dos casos, $K = 2$ ou $K = 3$, mas os resultados podem ser estendidos para um K qualquer. Uma subclasse desse problema é conhecida por **DDGP** (DGP discretizável), onde, adicionando uma ordem conveniente aos vértices do grafo (ver [2]), o problema pode ser discretizado e resolvido por meio de um algoritmo conhecido como Branch and Prune (BP) [4], cujo espaço de busca pode ser representado por uma árvore binária.

Em vista do que definimos até agora, o intuito deste trabalho é apresentar os grafos de K-discretização e de K-incidência para o DDGP, com a finalidade de tentar explorar o número de soluções deste problema, bem como as suas simetrias.

Assim, considere $K > 0$ e $G = (V, E, d)$ uma instância de um DGP. Denotaremos por $N(v)$ o conjunto dos vértices adjacentes a $v \in V$. As definições seguintes advêm de [1].

Definição 0.2. *O grafo de $K-$discretização $\mathcal{G} = (V_{\mathcal{G}}, E_{\mathcal{G}})$ de G é um grafo simples, não-direcionado, tal que para todo $v \in V$, o vértice $\boldsymbol{v} \in V_{\mathcal{G}}$ é o conjunto $N(v) \cup \{v\}$ e, $\{\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\} \in E_{\mathcal{G}}$ se, e somente se, $|\boldsymbol{u} \cap \boldsymbol{v}| \geq K$.*

Note que o grafo de $K-$discretização não depende da escolha de uma ordem, assim, ele está definido para um DGP. E mais, por definição, a cardinalidade de $V_{\mathcal{G}}$ é a mesma de V.

Considere $\underline{\mathbf{u}}_i = \mathbf{u}_i \cap \{u_j \in V;\ j \leq i\}$, note que este conjunto contém todos os vértices adjacentes a $u_i \in V$ que podem ser usados como vértices de referência. Assim, para podermos aplicar o BP precisamos encontrar um subconjunto $\hat{\mathbf{u}}_i$ de $\underline{\mathbf{u}}_i$ que contenha os K vértices utilizados como referência. A Figura 1 mostra uma ilustração gráfica destes conjuntos.

[1]freitasgabriel688@gmail.com
[2]clavor@unicamp.br

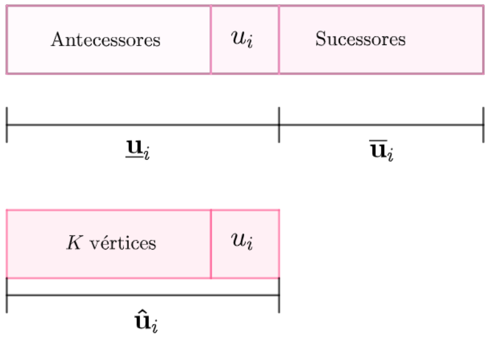

Figura 1: Representação dos conjuntos $\underline{\mathbf{u}}_i$ e $\hat{\mathbf{u}}_i$. Fonte: Autor

Definição 0.3. *Dado um inteiro $K > 0$ e $G = (V, E, d)$ uma instância de um DDGP, o grafo de $K-$incidência $\mathcal{I} = (V_{\mathcal{I}}, E_{\mathcal{I}})$ de G é um subgrafo de $\mathcal{G}$ tal que $V_{\mathcal{I}} = \{\hat{\mathbf{u}}_i : i = K+1, \cdots, |r|\}$, onde r é a ordem dada pelo DDGP e, $\{\hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j\} \in E_{\mathcal{I}}$ se, e somente se, $|\hat{\mathbf{u}}_i \cap \hat{\mathbf{u}}_j| = K$.*

Observe que o grafo de $K-$incidência depende da ordem dada em G, logo, não temos unicidade. Porém, as propriedades que nos interessa independem da ordem escolhida.

Note que em [3] os autores determinam a cardinalidade do conjunto de soluções de um DMDGP através das simetrias do problema, onde este é uma subclasse do DDGP. Saber de antemão o número de soluções de um problema é uma ferramente útil na hora resolvê-lo. Assim, nosso intuito com este trabalho é obter informações sobre as simetrias do DDGP, bem como tentar determinar seu número de soluções por meio do uso dos grafos $K-$incidentes. Para isso, estamos trabalhando com certos tipos de grafos do DDGP e $K = 3$, com o intuito de encontrar um resultado particular e, após, tentar generalizar as simetrias dessa subclasse do DGP e, consequentemente, seu conjunto solução.

Agradecimentos

Agradeço ao CNPq por bolsa de doutorado.

Referências

[1] G. Abud, C. Alencar, C. Lavor e A. Mucherino. "The K-discretization and $K-$incident graphs for discretizable Distance Geometry". Em: **Optimization Letters** (2018). DOI: `https://doi.org/10.1007/s11590-018-1294-2`.

[2] C. Lavor. **Um Convite à Geometria de Distâncias**. São Carlos, SP: SBMAC, 2014. ISBN: 78-85-8215-050-4.

[3] L. Liberti, C. Lavor, J. Alencar e G. Abud. "Counting the number of solutions of ^{K}DMDGP instances". Em: **Geometric Science of Information** (2013), pp. 224–230. DOI: `https://doi.org/10.1007/978-3-642-40020-9_23`.

[4] L. Liberti, C. Lavor e N. Maculan. "A branch-and-prune algorithm for the molecular distance geometry problem". Em: **International Transactions in Operational Research** (2008), pp. 1–17.

