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

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Álgebra Geométrica Aplicada à Interseção de Esferas e Cascas Esféricas

Laurindo D. S. da Rocha[1]
IMECC/UNICAMP, Campinas, SP e IFSP, Matão, SP
Carlile Lavor[2]
IMECC/UNICAMP, Campinas, SP

A **Geometria de Distâncias** (GD) é uma área de pesquisa que lida com problemas onde a distância é invariante por homeomorfismos. Um dos principais problemas nesta área é o **Problema de Geometria de Distâncias** (PGD) que consiste em determinar a posição de certos pontos no espaço conhecendo-se um subconjunto das distâncias entre eles [9]. Exemplos de aplicações do PGD são vastos na literatura como: determinar a posição de astros celestiais na Astronomia [8], determinar a posição e orientação de objetos em um ambiente virtual na Computação Gráfica, para a navegação de robôs autônomos e movimentos de braços mecânicos na Robótica [10], no Sistema de Posicionamento Global (GPS) e na localização de redes na Ciência da Computação [4].

Outra importante aplicação do PGD é a determinação de estruturas geométricas de moléculas, em especial no que diz respeito às proteínas. **Proteínas** são longas estruturas compostas de aminoácidos e constituem a maior parte (além da água) das células. As proteínas talvez sejam as mais versáteis de todas as biomoléculas [7]. Compostos contendo carbono geralmente existem como **estereoisômeros**, moléculas com as mesmas ligações químicas, mas com estereoquímica (configuração espacial fixa dos átomos) diferente. As interações entre biomoléculas exigem uma estereoquímica específica nas moléculas que interagem [11], o que justifica a importância de se compreender a estrutura espacial das proteínas para compreender suas funções específicas. Este problema é chamado de **Problema de Geometria de Distâncias Moleculares** (PGDM). Algumas das distâncias interatômicas podem ser medidas de maneiras bastante precisas, por exemplo, os comprimentos de ligações covalentes; outras (normalmente menores que $5\overset{\circ}{A}$) podem ser estimadas usando técnicas de **Ressonância Magnética Nuclear** (RMN) [12].

Sob certas condições, quando as distâncias são precisamente conhecidas, podemos interpretar o PGD como uma série de problemas de determinação de pontos na interseção de esferas. Este problema de intersecção de esferas em $\mathbb{R}^n$ foi trabalhado em [3], tendo alguns resultados generalizados, posteriormente, em [9], onde o cálculo da interseção de esferas é baseado na decomposição QR e se descreveu a interseção de uma quantidade qualquer de esferas n-dimensionais cujos centros não são necessariamente afimente independentes. Por outro lado, quando algumas distâncias são imprecisas, temos distâncias representadas por intervalos (**Distância Intervalar**) e surgem as chamadas **cascas esféricas**. Uma **Casca Esférica** é a região delimitada por duas esferas de mesmo centro e raios distintos. Em [6] e [1] é apresentado um novo método para lidar com este último caso, baseado na **Álgebra Geométrica Conforme** (AGC), que permite reduzir os tamanhos desses intervalos. A AGC foi utilizada também em [2] e [5] para estudar a interseção de esferas e uma casca esférica em $\mathbb{R}^n$. O resultado obtido foi o seguinte:

Teorema 0.1. *Sejam m esferas em $\mathbb{R}^n$ com diferentes centros $a_1, ..., a_m \in \mathbb{R}^n$ ($m \geq 2$ e $n \geq 2$) onde o invólucro afim do conjunto $\{a_1, ..., a_m\}$ tem dimensão k, $1 \leq k \leq \min\{m-1, n\}$. Se as*

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

representações conforme associadas às m esferas são $\sigma_1, ..., \sigma_m \in \mathbb{R}^{n+2}$, a intersecção σ dessas esferas é dada por $\sigma = \bigwedge_{i=1}^{m} \sigma_i$, com $t = \sigma \cdot \tilde{\sigma}$ e $\tilde{\sigma} = (-1)^{m(m-1)/2}\sigma$, tal que: 1) Se $t < 0$, então σ é uma $(n-k)$-esfera imaginária representando o conjunto vazio; 2) Se $t = 0$, então σ é um único ponto; 3) Se $t > 0$, então σ é uma $(n-k)$-esfera.

Nosso objetivo é estender este resultado para interseções de m esferas e r cascas esféricas tais que $m + r \leq n + 1$. A vantagem de se utilizar a abordagem da AGC é que esferas e cascas esféricas podem ser manipuladas facilmente mantendo-se a intuição geométrica da solução do problema, mesmo para dimensões maiores do que 3.

Agradecimentos

Este trabalho foi apoiado pelo Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo (IFSP) que concedeu Afastamento Remunerado para Participação em Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu ao autor através da portaria nº 150 de 12 de janeiro de 2021.

Referências

[1] J. M. Camargo. "Geometria de proteínas no espaço conforme". Tese de doutorado. IMECC/ Unicamp, 2021.

[2] M. Carielo. "Interseção de esferas e álgebra geométrica". Tese de doutorado. IMECC/Unicamp, 2019.

[3] I. D. Coope. "Reliable computation of the points of intersection of n spheres in $\mathbb{R}^n$". Em: **ANZIAM Journal** 42 (2000), pp. C461–C477. DOI: 10.21914/anziamj.v42i0.608.

[4] T. Eren et al. "Rigidity, computation, and randomization in network localization". Em: **IEEE INFOCOM 2004** 4 (2004), pp. 2673–2684. DOI: 10.1109/INFCOM.2004.1354686.

[5] C. Lavor, R. Alves e L. A. F. Fernandes. "Linear and geometric algebra approaches for sphere and spherical shell intersections in $\mathbb{R}^n$". Em: **Expert Systems with Applications** 187 (2022), p. 115993. DOI: 10.1016/j.eswa.2021.115993.

[6] C. Lavor et al. "NMR protein structure calculation and sphere intersections". Em: **Computational and Mathematical Biophysics** 8 (2020), pp. 89–101. DOI: 10.1515/cmb-2020-0103.

[7] A. L. Lehninger, D. L. Nelson, M. M. Cox et al. **Lehninger principles of biochemistry**. 4^{th} edition. New York: W.H. Freeman, 2005.

[8] L. Lindegren et al. "The astrometric core solution for the Gaia mission-Overview of models, algorithms, and software implementation". Em: **Astronomy & Astrophysics** 538 (2012), A78. DOI: 10.1051/0004-6361/201117905.

[9] D. Maioli. "Interseção de Esferas no $\mathbb{R}^n$ e Aplicações". Tese de doutorado. IMECC/Unicamp, 2017.

[10] J. Nielsen e B. Roth. "On the kinematic analysis of robotic mechanisms". Em: **The International Journal of Robotics Research** 12 (1999), pp. 1147–1160. DOI: 10.1177/02783649922067771.

[11] D. Whitford. **Proteins: structure and function**. New York: John Wiley & Sons, 2013.

[12] K. Wüthrich. "Protein structure determination in solution by nuclear magnetic resonance spectroscopy". Em: **Science** 4887 (1989), pp. 45–50. DOI: 10.1007/s40314-014-0163-6.

