

Proposta de Minissimpósio – CNMAC 2025

Geometria de Distâncias e Aplicações

Organizers:

- Carlile Lavor, PhD (chair)
Full Professor, CNPq PQ – 1B
Department of Applied Mathematics
Institute of Mathematics, Statistics and Scientific Computation
University of Campinas
- Douglas Soares Gonçalves, PhD
Associate Professor, CNPq PQ – 2
Department of Mathematics (Florianópolis)
Federal University of Santa Catarina
- Felipe Delfini Caetano Fidalgo, PhD
Assistant Professor
Department of Mathematics (Blumenau)
Federal University of Santa Catarina

1 Descrição do Tema

A Geometria de Distâncias (GD) é o estudo da geometria cujo conceito primitivo principal é a noção de distância, em vez de pontos e linhas, por exemplo, que são os pilares das abordagens clássicas.

Em 1928, Karl Menger (1902–1985) caracterizou vários conceitos, como congruência e convexidade, em termos de distâncias. Esses resultados foram posteriormente complementados por Leonhard Blumenthal em 1953, em um livro que essencialmente inaugurou a Geometria de Distâncias como um subcampo da Matemática.

Após um período sem registros significativos na literatura, o biofísico Gordon Crippen começou, a partir de 1977, a usar os resultados da Geometria de Distâncias em problemas de conformação de proteínas, alcançando grande sucesso no desenvolvimento de métodos matemático-computacionais. Esse fato impulsionou essa área a se tornar predominantemente associada à Matemática Computacional e suas aplicações.

Nas últimas décadas, essa área tem atraído pesquisadores de outros ramos da Matemática Aplicada e da Ciência da Computação, cujo interesse reside no que se chama de Problema da Geometria de Distâncias: *dada*

uma lista de distâncias entre pares de objetos, localizar esses objetos em um espaço geométrico de forma que as distâncias entre os pares coincidam com as da lista.

Esse problema encontra várias aplicações relevantes, como Localização de Redes de Sensores, Determinação de Nanoestruturas e Estruturas de Proteínas, Escalonamento Multidimensional, Realização de Grafos, Aprendizado de Máquina e Aprendizado Profundo, entre outras.

Essas aplicações têm fortalecido a interface da Geometria de Distâncias com outras áreas do conhecimento, como Bioinformática, Robótica, Computação e Ciência de Dados, além de sua interação com subcampos da matemática, como Álgebra Geométrica, Otimização, Teoria dos Grafos e Pesquisa Operacional.

Como uma aplicação pioneira importante, o estudo de aplicações moleculares tem destaques e inovações sempre contextualizadas, como é o caso do AlphaFold que permite inserir a GD em uma abordagem que utilizam Aprendizado de Máquina.

2 Breve Histórico e Objetivos

Nesse contexto, o objetivo desta proposta de minissimpósio é reunir pesquisadores seniores e juniores em Geometria de Distâncias e áreas relacionadas de modo a contribuir para o desenvolvimento da área por meio da troca de experiências e resultados recentes de pesquisa, além de orientar para trabalhos futuros.

Ele já foi realizado dentro do CNMAC em cinco outras edições (2018, 2019, 2021, 2023 e 2024). Particularmente, na edição de 2024 em Porto de Galinhas/PE, houve participação recorde, com muitas perguntas e demonstração de interesse no tema e em colaborações.

O incentivo para a realização anual desse minissimpósio está alinhado ao objetivo de consolidar a área de pesquisa, uma vez que, a cada ano, novos pesquisadores com novas ideias teóricas e aplicações se somam à comunidade, alcançando grande sucesso.

Isso enfatiza o compromisso dos organizadores em estabelecer firmemente essa área de pesquisa no país, promovendo a formação de novos pesquisadores e incentivando a participação de mulheres na pesquisa em Matemática Aplicada e Computacional, metas que nossa sociedade (SBMAC) busca alcançar.

3 Programa Preliminar

Primeira Sessão

1. O Problema da Árvore de Steiner Euclidiana em \mathbb{R}^n

Nelson Maculan Filho

Professor Emérito, CNPq PQ – 1A

Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, COPPE

Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Abstract: Dados p pontos no \mathbb{R}^n , chamados de pontos terminais, o Problema da Árvore de Steiner Euclidiana (ESTP - do inglês, Euclidean Steiner Tree Problem) consiste em encontrar a árvore mais curta que os conecta, utilizando ou não pontos extras, chamados de pontos de Steiner. Esse é um problema de otimização combinatória bastante conhecido e da classe NP-difícil. Apresentaremos modelos matemáticos de otimização e heurísticas.

2. Avanços Recentes no Unassigned Vector Geometry Problem

Douglas Soares Gonçalves

Professor Associado, CNPq PQ – 2

Departamento de Matemática, Florianópolis

Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Abstract: O unassigned Vector Geometry Problem (uVGP) – termo introduzido por Billinge et al. em *Annals of Operations Research* (2018) 271:161–203 – consiste em determinar a posição x_i de objetos a partir de uma lista não rotulada de vetores v_ℓ tal que $x_i - x_j = v_\ell$. Cada vetor v_ℓ representa a diferença entre posições desconhecidas de tais objetos, mas não sabemos a qual par de objetos o vetor diferença está associado. Assim, além das posições x_i, x_j , temos que simultaneamente encontrar uma associação entre os pares (i, j) de objetos e os índices ℓ dos vetores diferença. Nesta palestra iremos rever propostas recentes da literatura e discutir uma nova abordagem baseada em otimização contínua.

3. Sobre a resolução do problema de geometria de distâncias molecular com incertezas via modelos contínuos

Leonardo Delarmelina Secchin

Professor Associado, CNPq PQ – 2

Departamento de Matemática Aplicada (São Mateus)

Universidade Federal do Espírito Santo (UFES)

Abstract: A reconstrução de estruturas de proteínas 3D a partir de dados de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) apresenta desafios significativos devido às incertezas nas medições das distâncias entre

átomos dentro de uma molécula de proteína. Discutimos a aplicação de estratégias advindas da otimização contínua, superando as limitações de métodos anteriores que assumem irrealisticamente que todas as distâncias interatômicas são conhecidas exatamente, ou que os intervalos de incerteza são exageradamente pequenos. O objetivo da pesquisa é desenvolver métodos computacionais capazes de reconstruir a estrutura 3D de proteínas reais, utilizando-se de modelos mais fidedignos possíveis das condições experimentais dos dados de RMN.

Este é um trabalho em conjunto com a pesquisadora e doutoranda Mariana Rosa (UNICAMP).

4. Geometria de Distâncias e Aprendizado de Máquina: uma interface

Emerson V. Castelani
Departamento de Matemática
Universidade Estadual de Maringá (UEM)

Abstract: Ao analisar as estruturas tridimensionais do repositório de proteínas wwPDB, fomos motivados à seguinte questão: será possível ensinar a máquina a tomar decisões para a resolução de um Problema de Geometria de Distâncias Moleculares a partir do que já se conhece? Este trabalho tem o intuito de trazer um caminho que nos parece promissor.

Este é um trabalho em conjunto com os pesquisadores Carlile Lavor (UNICAMP), Emerson Vitor Castelani (UEM), Felipe Alfredo Nack (Bunge Brasil) e Guilherme Philippi (UFSC).

Segunda Sessão

1. An Angular Branch-and-Prune Algorithm for the Interval Discretizable Distance Geometry Problem

Wagner da Rocha
Universidade de Campinas (UNICAMP)

Abstract: One of the key applications of Distance Geometry is determining protein structures using data from Nuclear Magnetic Resonance (NMR). This challenge is known as the Molecular Distance Geometry Problem (MDGP). By taking advantage of specific atomic ordering in protein molecules, the Discretizable Distance Geometry Problem (DDGP) can be defined and solved recursively with a combinatorial algorithm called the Branch-and-Prune (BP). To address the uncertainties in NMR data, the interval BP (iBP) algorithm was developed, which works by sampling values within given distance constraint intervals to account for these variations. In this work, we present the interval Angular Branch-and-Prune (iABP) algorithm for the DDGP, a novel approach that converts interval distance constraints into angular intervals, further refined using pruning distance constraints and then sampled. We provide a detailed mathematical explanation of the iABP algorithm, its implementation, and computational experiments showing it performs better than the iBP algorithm in the reconstruction of protein structures described by a set of distance constraints.

Joint work with Carlile Lavor (UNICAMP), Leo Liberti (LIX, École Polytechnique de Paris) and Thérèse Malliavin (LPCT, Université de Lorraine).

2. Geometria de Distâncias na Esfera

Emerson Dutra
Instituto Federal do Mato Grosso (IFMT)
Universidade de Campinas(UNICAMP)

Abstract: O Problema de Geometria de Distâncias (PGD) consiste em dado um conjunto de distâncias responder se existe uma realização em algum \mathbb{R}^K , para algum inteiro $K > 0$, de modo que a distância euclidiana entre dois pares de pontos neste espaço coincida com as distâncias do conjunto inicialmente dado. Mas, e se o espaço de realização fosse uma esfera? Esta palestra consiste em apresentar de forma introdutória o Problema de Geometria de Distâncias na Esfera (PGDE) e tratar um pouco sobre o problema da pesquisa de doutorado.

3. Um modelo oculto de Markov autoregressivo para o Branch and Prune

Fausto Marques Pinheiro Junior
Universidade de Campinas(UNICAMP)

Abstract: O algoritmo Branch and Prune aborda o problema discretizável de geometria de distâncias moleculares explorando a estrutura de árvore binária do espaço de soluções por meio de uma busca em profundidade. Duas limitações desta abordagem são a sua serialidade e a ausência de um critério de preferência entre os vértices que serão explorados em cada iteração. Para sanar essas limitações, propomos a incorporação de modelos probabilísticos gráficos no Branch and Prune, dado que essa classe de modelos apresenta alta modularidade e capacidade de tratar com diferentes fontes de incerteza. Em específico, vamos apresentar um caso particular na forma do modelo oculto de Markov autoregressivo que incorpora informações sobre a sequência de aminoácidos e a geometria dos planos peptídicos para auxiliar na exploração probabilística do espaço de soluções. Discutiremos algumas propriedades deste tipo de modelo, o seu ajuste com os dados do Protein Data Bank, a sua integração no Branch and Prune, e alguns resultados preliminares obtidos na pesquisa. Por fim, arguiremos pela viabilidade de extensões deste tipo de modelo para abordar o problema discretizável de geometria de distâncias com distâncias intervalares.

4. Sessão de Problemas Abertos

Esta é uma sessão que tem sido proposta nas últimas edições deste Minissimpósio, inspirada em um workshop que aconteceu no Fields Institute, Toronto, Canadá. A ideia principal é que pesquisadores seniores e juniores apresentem ideias sem solução completa, conjecturas, problemas encontrados, etc, de modo que possam ser introduzidos a tais temas para engajarem-se em colaborações futuras.