

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CAMPUS BLUMENAU
LICENCIATURA EM MATEMÁTICA

Pedro Antônio Testoni Junior

Completamento de Matrizes usando Métodos de Projeção

Blumenau
2022

Pedro Antônio Testoni Junior

Completamento de Matrizes usando Métodos de Projeção

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação em Licenciatura em Matemática do Campus Blumenau da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de Licenciado em Matemática.
Orientador: Prof. Luiz Rafael dos Santos, Dr.

Blumenau
2022

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

TESTONI JUNIOR, PEDRO ANTÔNIO
COMPLETAMENTO DE MATRIZES USANDO MÉTODOS DE PROJEÇÕES /
PEDRO ANTÔNIO TESTONI JUNIOR ; orientador, LUIZ RAFAEL DOS
SANTOS, 2022.
74 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Blumenau,
Graduação em Matemática, Blumenau, 2022.

Inclui referências.

1. Matemática. 2. COMPLETAMENTO DE MATRIZES. 3. MÉTODOS
DE PROJEÇÃO. 4. MATRIZES DE DISTÂNCIAS EUCLIDIANAS. I. DOS
SANTOS, LUIZ RAFAEL . II. Universidade Federal de Santa
Catarina. Graduação em Matemática. III. Título.

Pedro Antônio Testoni Junior

Completamento de Matrizes usando Métodos de Projeção

Este Trabalho Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do Título de Licenciado em Matemática e aprovado em sua forma final pelo Curso de Licenciatura em Matemática.

Blumenau, 15 de março de 2022.

Prof. Júlio Faria Corrêa, Dr.
Coordenador(a) do Curso

Banca Examinadora:

Prof. Luiz Rafael dos Santos, Dr.
Orientador
UFSC

Prof. Felipe Delfini Caetano Fidalgo, Dr.
Avaliador
UFSC

Prof. Hugo José Lara Urdaneta, Dr.
Avaliador
UFSC

Este trabalho é dedicado a todos aqueles que desconhecem as
belezas da matemática.

AGRADECIMENTOS

A Deus pela minha vida. À minha família, especialmente meus pais Pedro e Sandra que apoiaram sempre meus estudos. Sem eles isso não seria possível. A meu irmão Caio e minha avó Guima.

A todos os colegas que fizeram parte desses quase 5 anos de graduação, em especial aos colegas de classe Elias, João, Tainá e Vantuir. Elias pelas risadas aleatórias, João pelas estadias, Van pelas horas descontraídas no ônibus e Tainá que me ajudou com as implementações.

A meu orientador Luiz Rafael, por todas as experiências compartilhadas, todo o conhecimento e um exemplo de professor.

Aos professores Felipe e Louise que me convidaram a participar dos projetos de extensão das olimpíadas de matemática.

A todos os professores que participaram e contribuíram com minha formação.

À Universidade Federal de Santa Catarina pela oportunidade.

“Mathematics is the alphabet with which God has written the universe”
(Galileo Galilei)

RESUMO

Neste estudo buscamos encontrar soluções para o problema de completamento de matrizes de distância Euclidianas, utilizando métodos de projeções. As matrizes de distância são muito importantes no estudo de problemas de geometria de distâncias, pois permitem descrever as distâncias entre os pontos como entradas de uma matriz. O completamento de uma matriz é a sua reconstituição a partir de um subconjunto de seus elementos conhecidos. Este também pode ser compreendido como um problema de viabilidade, em que a solução encontra-se na intersecção de conjuntos. Para encontrar a solução deste problema, foram estudados e implementados os seguintes métodos de projeções: o método das projeções alternadas, Douglas-Rachford, reflexões circuncentradas e o método de reflexões circuncentradas centralizado. Estes métodos foram minuciosamente comparados, quando resolvendo o problema de completamento de matrizes, por uma série de experimentos numéricos.

Palavras-chave: Completamento de matrizes; Método de projeções; Matriz de distâncias Euclidianas.

ABSTRACT

In this study we seek to find solutions to the problem of completing Euclidean distance matrices using projection methods. Distance matrices are very important in the study of distance geometry problems, as they allow us to describe the distances between points as entries of a matrix. The completion of a matrix is its reconstruction from a subset of its elements. It can also be seen as a feasibility problem. To find the solution of this feasibility problem, the following projection methods were studied and implemented: the method of alternating projections, Douglas-Rachford method, and the circumcentered-reflections and the centralized circumcentered-reflections methods. Those methods were thoroughly compared, when solving the matrix completing problem, through a series of numerical experiments.

Keywords: Matrix completion; Projection methods; Euclidean distance matrix.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Grafo simples.	14
Figura 2 – Grafo não simples.	15
Figura 3 – Grafo conexo.	15
Figura 4 – Grafo não conexo.	15
Figura 5 – Grafo completo.	16
Figura 6 – Clique do grafo da Fig. 3.	16
Figura 7 – D_1 é um conjunto convexo.	18
Figura 8 – D_2 é um conjunto não convexo.	18
Figura 9 – Circunferência de soluções.	20
Figura 10 – Triângulo equilátero de lado 1.	21
Figura 11 – Infinitude não enumerável de soluções.	21
Figura 12 – Número finito de soluções.	22
Figura 13 – Não existem soluções.	22
Figura 14 – Casos de intersecção da reta e da esfera. Figura retirada de [18].	26
Figura 15 – Iteração do MAP	40
Figura 16 – MAP em retas com ângulo pequeno.	41
Figura 17 – MAP em retas com ângulo grande.	41
Figura 18 – Iteração do DRM.	43
Figura 19 – Calculando as reflexões de x_0	48
Figura 20 – Calculando ao circuncentro.	49
Figura 21 – Centralização do ponto inicial CCRM.	53
Figura 22 – Iteração completa do CCRM.	53
Figura 23 – Pontos que geram as distâncias da matriz $s = 3$. (Figura retirada de [20, p. 19]).	59

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	–	Informações das matrizes parciais para teste completamente.	61
Tabela 2	–	Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 3$	62
Tabela 3	–	Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 4$	62
Tabela 4	–	Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 5$	62
Tabela 5	–	Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 6$	62
Tabela 6	–	Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 7$	63
Tabela 7	–	Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 3$	64
Tabela 8	–	Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 4$	64
Tabela 9	–	Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 5$	64
Tabela 10	–	Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 6$	64
Tabela 11	–	Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 7$	65
Tabela 12	–	Teste CRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$	65
Tabela 13	–	Teste CRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$	66
Tabela 14	–	Teste DRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$	66
Tabela 15	–	Teste DRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$	66
Tabela 16	–	Teste CCRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$	66
Tabela 17	–	Teste CCRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$	67
Tabela 18	–	Teste CRMPC para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$	67
Tabela 19	–	Teste CRMPC para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$	67
Tabela 20	–	Teste MAP para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$	67
Tabela 21	–	Teste MAP para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$	68

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	DEFINIÇÕES	14
2.1	GRAFOS	14
2.2	ÁLGEBRA LINEAR	16
3	PROBLEMA GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS	19
3.1	O QUE É O PGD	19
3.2	COMPLEXIDADE DO PGD	23
3.3	OTIMIZAÇÃO CONTÍNUA E O PGD	27
4	MATRIZES DE DISTÂNCIAS EUCLIDIANAS	29
5	COMPLEMENTO DE MATRIZES	37
6	MÉTODOS BASEADOS EM PROJEÇÕES	39
6.1	MÉTODO DAS PROJEÇÕES ALTERNADAS	39
6.2	DOUGLAS-RACHFORD	42
6.3	REFLEXÕES CIRCUNCENTRADAS	44
6.3.1	CIRCUNCENTRO	44
6.3.2	ALGORITMO	51
6.4	CIRCUNCENTRO CENTRALIZADO OU CCRM	52
7	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS	55
7.1	CONJUNTOS E PROJEÇÕES	55
7.2	GERANDO MATRIZES PARCIAIS	58
7.3	TESTES	59
8	CONCLUSÃO	69
	REFERÊNCIAS	70

1 INTRODUÇÃO

Matrizes de distâncias são ferramentas importantes no estudo do problema de geometria de distâncias (PGD). O PGD consiste em determinar pontos em algum espaço \mathbb{R}^K com base em algumas distâncias conhecidas entre os pontos [18]. Desta forma, podemos descrever as distâncias entre os pontos como entradas de uma matriz. As matrizes de distâncias Euclidianas (EDM, do inglês Euclidean Distance Matrix) descrevem distâncias que satisfazem as propriedades da norma Euclidiana, dentre elas a desigualdade triangular. Para este texto, usaremos o produto interno Euclidiano definido como $\langle x, y \rangle := x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ e a norma Euclidiana induzida que será denotada por $\|\cdot\|$ e definida como $\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$.

Uma matriz M é uma matriz parcial quando conhecemos um subconjunto de suas distâncias. Uma matriz X que completa a matriz M deve conter as mesmas entradas de M e algum valor nas outras entradas. Para as matrizes de distâncias Euclidianas, não podemos completar com quaisquer distâncias, já que essas devem satisfazer as propriedades da norma euclidiana, [13, p. 81]. Este problema possui várias aplicações [1, 19], como a tomografia por ultrassom, a reconstrução de proteínas, a localização de sensores, a calibração da posição de microfones, entre outras.

Buscamos apresentar o problema do completamento de matrizes a partir do problema de geometria de distâncias. Ademais, nesta monografia veremos ser possível descrever tal problema como um problema de viabilidade convexa (CFP, do inglês Convex Feasibility Problem), que consiste em encontrar um ponto em comum a dois (ou mais) conjuntos convexos fechados. Apresentamos e implementamos então métodos para resolver CFPs que se utilizam de projeções (ortogonais) nesses conjuntos. Através uma série de testes, executamos e comparamos o método das projeções alternadas (MAP) [9, 14], e o método de Douglas-Rachford (DRM) [1, 2], com métodos que aceleram MAP e DRM utilizando-se da antiga noção de Circuncentro, os Métodos de Reflexões Circuncentradas (CRM) [5–8].

O objetivo principal deste trabalho consiste em encontrar soluções

para o problema do completamento de matrizes de distâncias Euclidianas utilizando métodos de projeções.

Para tanto, esta dissertação foi organizada da seguinte forma: O capítulo 2 pretende mostrar algumas definições que serão usadas no decorrer do trabalho. No capítulo 3, apresentamos o problema de geometria de distâncias, suas propriedades e algumas soluções. O capítulo 4 busca mostrar as propriedades das matrizes de distâncias, em particular as EDMs, e sua relação com matrizes semi-definidas positivas. No quinto capítulo apresentamos o problema de completamento de matrizes. O sexto capítulo é dedicado a apresentar os métodos de projeção e sua implementação na linguagem `Julia` [10]. O capítulo 7 descreve os conjuntos e os testes feitos com uma análise dos métodos. O capítulo 8 é a conclusão do trabalho.

2 DEFINIÇÕES

Neste capítulo apresentaremos algumas definições e propriedades importantes que serão necessárias no decorrer deste trabalho. As principais referências utilizadas neste capítulo são [3, 16–18, 21, 27].

2.1 GRAFOS

Um grafo é um par $G = (V, E)$ em que V é um conjunto arbitrário e E é um subconjunto de V . Os elementos de V são chamados vértices, já os elementos de E são chamados arestas. O conjunto de vértices é denotado por $V = \{u, v, r, s, \dots\}$ e o conjunto das arestas é denotado por $E = \{\{u, v\}, \{u, s\}, \{v, s\}, \dots\}$.

Seja $G = (V, E)$ um grafo com $u, v \in V$. Dizemos que o grafo G é simples, quando $\{u, v\} \in E \Rightarrow u \neq v$, ou seja, não existem duas arestas entre dois vértices e, não existem arestas que saem e chegam no mesmo vértice (laços); observe a [Figura 1](#). Um exemplo de grafo que não é simples é o da [Figura 2](#), pois existe um laço no vértice u .

Um caminho é uma sequência de vértices, tal que, para cada vértice, existe uma aresta que o conecta com o vértice seguinte. Ou seja, existe uma sequência de arestas, que permitem sair de um vértice v e chegar em um vértice u .

Veja também que na [Figura 1](#), os vértices do grafo são $\{u, v, r\}$ e as arestas são $\{\{u, v\}, \{v, r\}\}$. Neste exemplo existe somente um caminho entre



Figura 1 – Grafo simples.

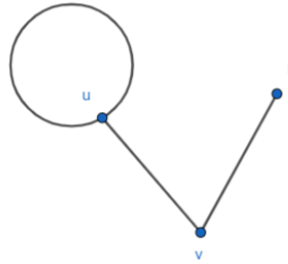


Figura 2 – Grafo não simples.

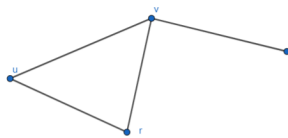


Figura 3 – Grafo conexo.

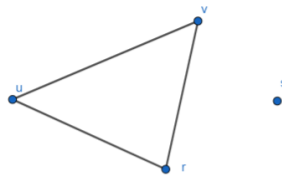


Figura 4 – Grafo não conexo.

os vértices u, r , que seriam as arestas $\{u, v\}$ e $\{v, r\}$.

O grafo G é dito conexo quando existe pelo menos um caminho de um vértice u até um vértice v , como na [Figura 3](#). A [Figura 4](#) é um exemplo de grafo não conexo, pois, não existe caminho do vértice u para o vértice s .

O grafo G é dito completo se para cada par de vértices $u, v \in V$ existe uma aresta $\{u, v\} \in E$. Veja a [Figura 5](#).

Um clique do grafo G , é um grafo $G' = (V', E')$ tal que $V' \subset V$ e $E' \subset E$ com $G' \subset G$ um grafo completo. Um exemplo de clique, pode ser pensado a partir da [Figura 3](#), veja a [Figura 6](#).

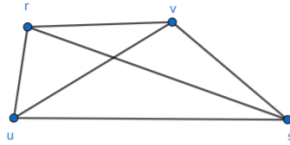


Figura 5 – Grafo completo.

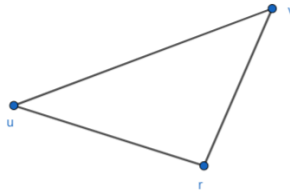


Figura 6 – Clique do grafo da Fig. 3.

Note que na **Figura 3** o grafo $G = (V, E)$ é dado por $u, v, r, s \in V$ e $\{\{u, v\}, \{u, r\}, \{v, r\}, \{v, s\}\} \in E$. Agora veja o seguinte grafo, $G' = (V', E')$, que é dado por $u, v, r \in V'$ e $\{\{u, v\}, \{u, r\}, \{v, r\}\} \in E'$. Note que $G' \subset G$, também podemos afirmar que G' é completo. Portanto, G' é um clique de G .

2.2 ÁLGEBRA LINEAR

Ao decorrer da monografia, estamos interessados no estudo de distâncias de matrizes, mas para compreender precisamente o que seria uma “distância”, precisamos do conceito de *métrica*.

Definição 2.1. Seja X um conjunto não vazio. Dizemos que uma *métrica* em X é uma função $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ que associa cada par de pontos $x, y \in X$ a um número real $d(x, y)$, chamado de distância do ponto x ao ponto y , de tal modo que valem:

- (a) Positividade: $d(x, y) > 0 \Leftrightarrow x \neq y, \forall x, y \in X$ e $d(x, x) = 0, \forall x \in X$;
- (b) Simetria: $d(x, y) = d(y, x), \forall x, y \in X$;
- (c) Desigualdade triangular: $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z), \forall x, y, z \in X$.

Uma métrica d , em poucas palavras, é uma função na qual é possível “distar” dois pontos. Nesse sentido, uma *distância* entre dois pontos $x, y \in X$ é o valor real $d(x, y)$. Em particular, a métrica a ser utilizada no trabalho é a dada através da norma Euclidiana, isto é, $d(x, y) := \|x - y\|$. Como a norma Euclidiana é dada por $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$, daí segue que, $\|x\|^2 = \langle x, x \rangle = x^T x$ e, deste modo, $d(x, y)^2 = \|x - y\|^2 = \|x\|^2 - 2x^T y + \|y\|^2$.

Foge do escopo do trabalho verificar que a norma euclidiana é uma métrica. Caso o leitor esteja interessado em verificar esse resultado, veja [22, Exemplo 6, p. 6].

Podemos munir um certo $X \subseteq \mathbb{R}^n$ qualquer com uma métrica $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaz as propriedades da **Definição 2.1**, resultando no par (X, d) que é denominado *espaço métrico*. A noção de espaço métrico é importante neste trabalho uma vez que estaremos *medindo distâncias* para montar as matrizes de interesse.

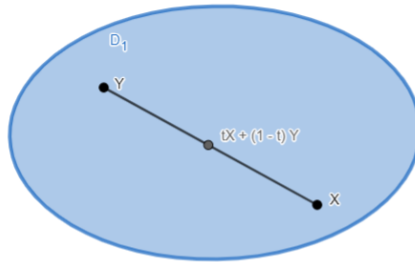
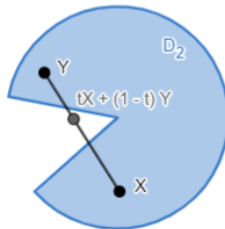
Além da noção de métrica, vamos modelar o problema do completamento de matrizes como um problema de viabilidade convexa (CFP). Para isso precisamos encontrar pontos na intersecção de conjuntos com os métodos de projeção, e logo, as definições a seguir mostram algumas propriedades sobre tais conjuntos, as projeções e reflexões.

Definição 2.2. Um conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$ é convexo se dados dois pontos em S , qualquer segmento de reta que liga estes dois pontos deve estar contido em S , isto é, $v = (1 - t)x + ty \in S, \forall x, y \in S$ e $t \in [0, 1]$.

Para ilustrar o que foi apresentado na definição anterior, as **Figuras 7** e **8** são exemplos de conjuntos convexos e não convexos respectivamente. O \mathbb{R}^n , o conjunto vazio e os conjuntos que contém somente um ponto são trivialmente convexos.

Definição 2.3. O conjunto afim gerado pelos pontos $x, y, z \in \mathbb{R}^n$ é denotado por $\text{aff}\{x, y, z\}$ e definido como:

$$\text{aff}\{x, y, z\} := \{w \in \mathbb{R}^n \mid w = x + \alpha(y - x) + \beta(z - x), \text{ com } \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}.$$

Figura 7 – D_1 é um conjunto convexo.Figura 8 – D_2 é um conjunto não convexo.

Definição 2.4. A projeção (ortogonal) de um ponto $x \in \mathbb{R}^n$ e um conjunto $Y \subset \mathbb{R}^n$, é o ponto mais próximo de x que está contido no conjunto Y . A projeção de x sobre Y será denotada por $P_Y(x)$ e dada pela solução do problema

$$\min \|y - x\|, \forall y \in Y.$$

Definição 2.5. A reflexão do ponto $x \in \mathbb{R}^n$ sobre o conjunto $Y \subset \mathbb{R}^n$ é dada por,

$$R_Y(x) = 2P_Y x - x.$$

3 PROBLEMA GEOMETRIA DE DISTÂNCIAS

3.1 O QUE É O PGD

Neste capítulo, pretende-se apresentar o Problema de geometria de distâncias e algumas soluções. As definições e exemplos foram baseadas em [18]. Para resolver o problema fundamental de geometria de distâncias (PGD), devemos encontrar um conjunto de pontos em um determinado espaço geométrico, tal que algumas das distâncias entre estes pontos são conhecidas. Dependendo da aplicação, os pontos podem estar relacionados a estrelas, pessoas, átomos, entre outros. Cada um desses pontos são representados por um vértice de um grafo G . Caso a aresta seja ponderada, a distância é representada pela aresta que une os dois vértices.

Definição 3.1. Dado $K \in \mathbb{Z}_+$ e um grafo conexo simples $G(V, E)$, em que o tamanho das arestas são determinadas por $d : E \rightarrow (0, \infty)$, queremos encontrar uma função $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$ de tal forma que:

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

Resolver o problema de geometria de distâncias significa que, para cada vértice do grafo G associamos um ponto em \mathbb{R}^K e este ponto satisfaz a equação (1). Ao posicionar os pontos obtidos u e v , devemos obter que $\|x_u - x_v\| = d_{uv}$. Por motivos de notação, usaremos $d(u, v) = d_{uv}$ e $x_u = x_u$.

A função x é chamada realização do grafo G . A realização representa os vértices de G como pontos em algum espaço Euclidiano dado. Quando a função x satisfaz a equação (1), a chamamos realização.

Existem PGD's em que encontrar K é uma parte do problema. Neste trabalho, assumiremos que K e o grafo G são dados do problema.

Será que existe mais de uma solução para um dado PDG? Note que no espaço, ao fazermos rotações e translações, as distâncias não se alteram. Logo existem infinitas soluções para o PGD. Sendo assim, vamos fixar as coordenadas do nosso espaço, tendo como finalidade um sistema que pode ter

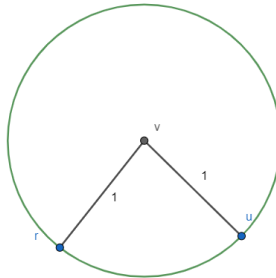


Figura 9 – Circunferência de soluções.

solução finita. Note, entretanto, que não é por que fixamos as coordenadas que o conjunto solução que ele será finito, veja os exemplos a seguir.

Prosseguindo, obtemos para $K = 2$ o seguinte sistema de equações:

$$\sqrt{(x_{u_1} - x_{v_1})^2 + (x_{u_2} - x_{v_2})^2} = d_{uv}, \forall \{u, v\} \in E.$$

Exemplo 3.2. Considere o seguinte PGD. Seja $K = 2$, $V = \{u, v, r\}$, $E = \{\{u, v\}, \{v, r\}\}$ com $d_{uv} = d_{vr} = 1$. Veja que as soluções podem ser dadas por um ponto v no centro de uma circunferência de raio 1, $x^2 + y^2 = 1$, com $u, r \in x^2 + y^2 = 1$, conforme a **Figura 9**. Está disponível uma animação que mostra as possíveis soluções no [Applet do Geogebra](#).

Ainda sobre o exemplo anterior, suponha que o grafo tivesse mais uma aresta, digamos $\{u, r\} \in E$. Além disso, $d_{ur} = 1$. Assim, as soluções podem ser dadas pelos vértices de um triângulo equilátero de lado 1 como na **Figura 10**. Note que as arestas devem obedecer à desigualdade triangular, logo para as arestas, temos

$$d_{ur} \leq d_{uv} + d_{vr}.$$

Veremos o caso geral adiante.

Exemplo 3.3. Considere o seguinte PGD com $K = 2$, $V = \{u, v, r, s\}$, $E = \{\{u, v\}, \{u, r\}, \{v, r\}, \{v, s\}\}$ com $d_{uv} = d_{ur} = d_{vr} = d_{vs} = 1$. Vejamos

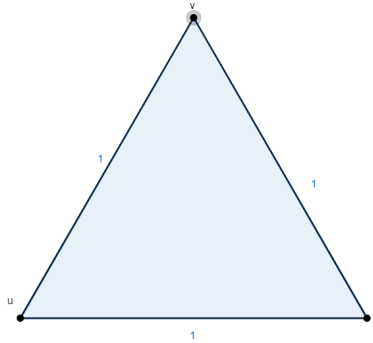


Figura 10 – Triângulo equilátero de lado 1.

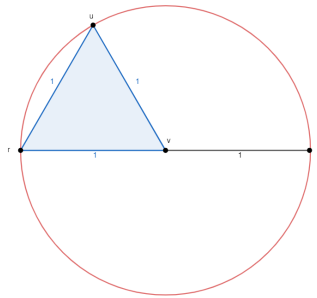


Figura 11 – Infinitude não enumerável de soluções.

quantas soluções existem, para isso, não contaremos as rotações, translações e reflexões.

Veja que os pontos u , v e r formam um triângulo. Porém, a aresta $d_{v,s}$ está livre e logo podemos situá-la em qualquer ponto de uma circunferência de raio 1 e centro em v . Neste caso, obtemos infinitos casos, além de infinito, são não enumeráveis. Assim, s pode estar em qualquer ponto do círculo, como na **Figura 11**. Para compreender melhor as posições que s pode ocupar veja a seguinte animação com um [Applet do Geogebra](#).

Ainda no **Exemplo 3.3**, adicionaremos $\{u, s\} \in E$, com $d_{u,s} = \sqrt{2}$. Para este caso, além do triângulo de vértices u, v, r temos o triângulo de

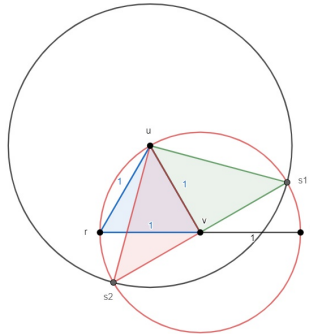


Figura 12 – Número finito de soluções.

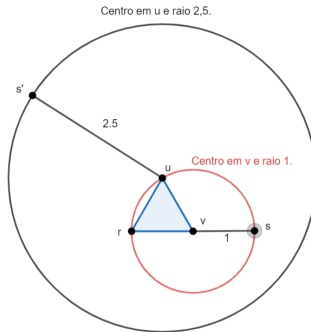


Figura 13 – Não existem soluções.

vértices s, u, v . Ademais, s deve obedecer $d_{s,v} = 1$ e $d_{s,u} = \sqrt{2}$. Logo os possíveis casos, são as intersecções da circunferência centrada em u e raio $\sqrt{2}$ e da circunferência centrada em v com raio 1, veja a **Figura 12**. Note que os pontos u, r e v devem satisfazer a desigualdade triangular, assim como os pontos u, v e a solução, que pode ser dada por s_1 ou s_2 .

Vejamos o que ocorre quando o sistema não obedece à desigualdade triangular. Ainda com o **Exemplo 3.3**, suponha agora que $d_{s,u} = 2.5$. O ponto desejado deve estar na circunferência de raio 1 e centro em v e, ao mesmo tempo, na circunferência centrada em u e raio 2.5. Mas isso é impossível, pois não existem intersecções entre essas circunferências; veja a **Figura 13**.

Os exemplos acima nos ilustram que a desigualdade triangular é de extrema importância para sabermos se o sistema possui ou não solução.

3.2 COMPLEXIDADE DO PGD

Antes de prosseguir, vamos entender um pouco sobre a complexidade do PGD. Para isso, considere o seguinte PGD com $K = 1$, $V = \{u, v, r\}$, $E = \{\{u, v\}, \{u, r\}, \{v, r\}\}$, $d_{uv} = d_{vr} = 1$ e $d_{ur} = 2$. Fixaremos agora $x_u = 0$ e $x_v = 1$ e assim nós temos

$$\|x_r - x_u\| = 2,$$

$$\|x_r - x_v\| = 1.$$

Elevamos ao quadrado as parcelas de ambos lados das equações para obtermos

$$\|x_r - x_u\|^2 = 2^2,$$

$$\|x_r - x_v\|^2 = 1^2.$$

Portanto,

$$x_r^2 - 2x_r x_u + x_u^2 = 4, \tag{2}$$

$$x_r^2 - 2x_r x_v + x_v^2 = 1. \tag{3}$$

Agora, subtraindo a equação (3) de (2) temos

$$\begin{aligned} -2x_r x_u + 2x_r x_v + x_u^2 - x_v^2 &= 3, \\ 2x_r(x_v - x_u) &= x_v^2 - x_u^2 + 3. \end{aligned}$$

Aplicando os valores fixados de x_v e x_u , segue que

$$\begin{aligned} 2x_r(x_v - x_u) &= x_v^2 - x_u^2 + 3, \\ 2x_r(1 - 0) &= (1^2 + 0^2) + 3 \\ x_r &= \frac{4}{2}. \end{aligned}$$

Logo, concluímos que $x_r = 2$. Neste caso, para $K = 1$, é fácil encontrar uma solução, basta somente desenhar o grafo. No entanto, buscamos generalizar o conceito.

Considere agora $K = 2, V = \{u, v, r, s\}$ e

$$E = \{\{u, v\}, \{u, r\}, \{u, s\}, \{v, r\}, \{v, s\}, \{r, s\}\}.$$

Assumiremos que u, v e r estão fixados, ou seja, podemos encontrar as realizações $x_u, x_v, x_r \in \mathbb{R}^2$ de modo que $\|x_u - x_v\| = d_{uv}$, $\|x_u - x_r\| = d_{ur}$ e $\|x_v - x_r\| = d_{vr}$. Dados essas informações, construiremos um sistema quadrático para obter as coordenadas de x_s . Com efeito,

$$\|x_s - x_u\| = d_{us},$$

$$\|x_s - x_v\| = d_{vs},$$

$$\|x_s - x_r\| = d_{rs}.$$

Elevando os dois lados das igualdades ao quadrado e distribuindo os termos, obtemos:

$$\|x_s\|^2 - 2\langle x_s, x_u \rangle + \|x_u\|^2 = d_{us}^2, \quad (4)$$

$$\|x_s\|^2 - 2\langle x_s, x_v \rangle + \|x_v\|^2 = d_{vs}^2, \quad (5)$$

$$\|x_s\|^2 - 2\langle x_s, x_r \rangle + \|x_r\|^2 = d_{rs}^2. \quad (6)$$

Agora subtraindo (4) de (5) e (6), temos

$$2\langle (x_v - x_u), x_s \rangle = \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2, \quad (7)$$

$$2\langle (x_r - x_u), x_s \rangle = \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2. \quad (8)$$

Veja que resolver o sistema acima corresponde a resolver um sistema linear $Ax = b$, com

$$A = 2 \cdot \begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{r1} - x_{u1} & x_{r2} - x_{u2} \end{bmatrix}, \quad (9)$$

$$b = \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix}$$

e

$$x = \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix},$$

ou seja,

$$2 \cdot \begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{r1} - x_{u1} & x_{r2} - x_{u2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix}.$$

Com efeito, quando a matriz A for invertível, existe uma única solução, e esta é dada por

$$\hat{x} = A^{-1}b.$$

Analisando o mesmo exemplo para $K = 3$, obtemos, em princípio, o mesmo conjunto de equações (7) e (8). Daí a matriz resultante não será mais quadrada (2×2), mas será (2×3) e temos o seguinte sistema:

$$2 \begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} & x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r1} - x_{u1} & x_{r2} - x_{u2} & x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \\ x_{s3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix}.$$

Podemos também manipular as equações para obter a seguinte equação:

$$\begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{r1} - x_{u1} & x_{r2} - x_{u2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix} [x_{s3}] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix}.$$

Daí, segue que

$$\begin{bmatrix} x_{v1} - x_{u1} & x_{v2} - x_{u2} \\ x_{r1} - x_{u1} & x_{r2} - x_{u2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix} [x_{s3}].$$

Supondo agora $B = \frac{1}{2}A$ em que A é dado em(9), obtemos:

$$B \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix} [x_{s3}].$$

Caso constatemos a inversibilidade de A (e logo de B), concluímos que a solução é dada por:

$$\begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} B^{-1} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{vs}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{us}^2 - d_{rs}^2 \end{bmatrix} - B^{-1} \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix} [x_{s3}].$$

Para este caso, a solução com $K = 3$ já não é única, pois, para cada valor de x_{s_3} , obtemos um novo valor para x_{s_1} e x_{s_2} . Neste caso, temos que geometricamente a solução é dada pela intersecção de uma esfera e uma reta. A esfera é obtida pela equação $\|x_s - x_u\|^2 = d_{u,s}^2$ e a reta é obtida através da equação paramétrica

$$\begin{bmatrix} x_{s_1} \\ x_{s_2} \end{bmatrix} = \hat{A} - \hat{B}[x_{s_3}],$$

em que

$$\hat{A} = \frac{1}{2}B^{-1} \begin{bmatrix} \|x_v\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{u,v}^2 - d_{v,s}^2 \\ \|x_r\|^2 - \|x_u\|^2 + d_{u,r}^2 - d_{r,s}^2 \end{bmatrix}$$

e

$$\hat{B} = B^{-1} \begin{bmatrix} x_{v3} - x_{u3} \\ x_{r3} - x_{u3} \end{bmatrix}.$$

Na **Figura 14** fazemos a interpretação geométrica da intersecção entre uma esfera e uma reta, que pode nos dar 0, 1 ou 2 pontos como solução.

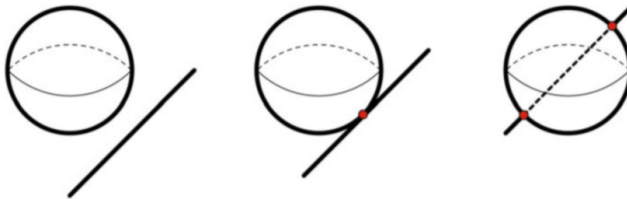


Figura 14 – Casos de intersecção da reta e da esfera. Figura retirada de [18].

Além disso, para verificar a finitude do sistema, precisamos que o sistema obedeça 2 propriedades, sendo elas

- (i) Para encontrar a realização de $s \in V$ em \mathbb{R}^3 , devem existir arestas $\{u, s\}, \{v, s\}, \{r, s\} \in E$ tais que os vértices $u, v, r \in V$ já foram realizados, e assim, o sistema gerado é quadrático com $x_s \in \mathbb{R}^3$ como

única incógnita, dado por

$$\|x_s - x_u\|^2 = d_{us}^2,$$

$$\|x_s - x_v\|^2 = d_{vs}^2,$$

$$\|x_s - x_r\|^2 = d_{rs}^2.$$

- (ii) Para obtermos no máximo, duas soluções, do sistema, a matriz do sistema linear obtido subtraindo uma equação das outras duas deve ter posto completo.

3.3 OTIMIZAÇÃO CONTÍNUA E O PGD

Considere o seguinte PGD restrito ao plano, com $V = \{u, v, s\}$ e $E = \{\{u, v\}, \{v, s\}\}$. O sistema não linear associado é:

$$\|x_u - x_v\| = d_{uv},$$

$$\|x_v - x_s\| = d_{vs}.$$

Elevando ambos lados das equações ao quadrado, temos que

$$(x_{u1} - x_{v1})^2 + (x_{u2} - x_{v2})^2 = d_{uv}^2, \quad (10)$$

$$(x_{v1} - x_{s1})^2 + (x_{v2} - x_{s2})^2 = d_{vs}^2. \quad (11)$$

subtraindo d_{uv}^2 em ambos lados da equação (10) e d_{vs}^2 em ambos lados da equação (11), obtemos

$$(x_{u1} - x_{v1})^2 + (x_{u2} - x_{v2})^2 - d_{uv}^2 = 0,$$

$$(x_{v1} - x_{s1})^2 + (x_{v2} - x_{s2})^2 - d_{vs}^2 = 0.$$

Agora considere a seguinte função, $f : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}$, tal que

$$f(x_{u1}, x_{u2}, x_{v1}, x_{v2}, x_{s1}, x_{s2}) = \left((x_{u1} - x_{v1})^2 + (x_{u2} - x_{v2})^2 - d_{uv}^2 \right)^2 + \left((x_{v1} - x_{s1})^2 + (x_{v2} - x_{s2})^2 - d_{vs}^2 \right)^2.$$

Veja que para encontrar pontos que satisfazem nosso problema, precisamos encontrar

$$\min_{x \in \mathbb{R}^6} f(x)$$

e assim, minimizando a função obtemos uma solução para o nosso problema.

Note que o tamanho do problema depende do número de vértices, logo existe grande dificuldade para encontrar os mínimos da função. A quantidade de mínimos (globais e locais) aumenta exponencialmente em função do número de vértices do nosso problema.

4 MATRIZES DE DISTÂNCIAS EUCLIDIANAS

As matrizes de distância são de suma importância quando estudamos um PGD pois elas nos permitem representarmos as distâncias entre pontos de forma matricial. Este capítulo foi escrito tendo como base as referências [12, 13, 19, 20].

Definição 4.1. Uma matriz simétrica $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz de distâncias se existe um espaço métrico $(X = \{x_1, \dots, x_n\}, d)$, tal que $D_{i,j} = (d_{ij})$, com $d_{ij} = d(x_i, x_j)$ para todo i, j em que $x_i, x_j \in X$.

Note que uma matriz de distâncias tem todos os elementos não negativos e sua diagonal é nula. Matrizes de diagonal nula são conhecidas como matrizes *Hollow*. Denotaremos o espaço das matrizes de distância de ordem n por \mathbb{D}^n .

Definição 4.2. Dizemos que $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma Matriz de Distâncias Euclidiana (EDM) quando existem um $K \in \mathbb{Z}$ e pontos $x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}^K$ com $K < n$, tais que para todo $i, j = 1, 2, \dots, n$, vale

$$d_{ij} = \|p_i - p_j\|^2. \quad (12)$$

Esta definição significa que cada entrada d_{ij} da matriz D corresponde ao tamanho do segmento $[p_i, p_j]$ no plano \mathbb{R}^K . Para o menor valor de K que satisfaz a equação (12), dizemos que \mathbb{R}^K é uma incorporação de D .

Definição 4.3. A matriz $G = P^T P$, em que P é uma matriz formada pelos n vetores-coluna $p_i \in \mathbb{R}^K$ é uma simétrica de produtos internos sendo chamada Matriz de Gram a partir de P . A matriz de Gram G também é dada por

$$G_P = \begin{bmatrix} \langle p_1, p_1 \rangle & \dots & \langle p_1, p_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle p_n, p_1 \rangle & \dots & \langle p_n, p_n \rangle \end{bmatrix}_{n \times n}.$$

Denotaremos o conjunto das matrizes simétricas por \mathbb{S}^n . \mathbb{S}_+^n representará o conjunto das matrizes simétricas semi-definidas positivas. Já conjunto das matrizes definidas positivas será denotado por \mathbb{S}_{++}^n .

Seja $D \in \mathbb{S}^n$ uma matriz de distâncias euclidianas com dimensão de incorporação r . A matriz $P \in \mathbb{R}^{n \times r}$ com linhas $p_1^T, p_2^T, \dots, p_n^T$ que satisfaz a equação (12) é chamada matriz de configuração de D .

A matriz de Gram G_P a partir de P , é a matriz de Gram associada à matriz D .

Note que $\text{posto}(G_P) = r$ e, além disso, $G_P \in \mathbb{S}_+^n$, isto é, G_P uma matriz semi-definida positiva.

Da equação (12), explicitando o produto da norma, temos que

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \|p_i - p_j\|^2 \\ &= p_i^T p_i + p_j^T p_j - 2p_i^T p_j \\ &= \|p_i\|^2 + \|p_j\|^2 - 2p_i^T p_j \\ &= g_{ii} + g_{jj} - 2g_{ij}, \forall i, j = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Podemos ver este resultado de outra maneira: para $D \in \mathbb{D}$, segue que $D_{ij} = \|d_i - d_j\|^2$, assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} D &= \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 - 2p_1^T p_1 + \|p_1\|^2 & \dots & \|p_1\|^2 - 2p_1^T p_n + \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 - 2p_n^T p_1 + \|p_1\|^2 & \dots & \|p_n\|^2 - 2p_n^T p_n + \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 + \|p_1\|^2 & \dots & \|p_1\|^2 + \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 + \|p_1\|^2 & \dots & \|p_n\|^2 + \|p_n\|^2 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} p_1^T p_1 & \dots & p_1^T p_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_n^T p_1 & \dots & p_n^T p_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \dots & \|p_1\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 & \dots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \dots & \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_1\|^2 & \dots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} - 2G_P. \end{aligned}$$

Concluimos que $D = \text{diag}(G_P)e^T + e(\text{diag}(G_P))^T - 2G_P$, em que e é o vetor com todas as componentes iguais a 1 de dimensão apropriada.

Deste modo, definiremos uma transformação linear que nos permitirá a expressar a matriz D a partir da matriz de Gram associada. Definimos então o operador $\mathcal{K} : \mathbb{S}^n \rightarrow \mathbb{S}^n$, tal que:

$$\mathcal{K}(A) := \text{diag}(A)e^T + e(\text{diag}(A))^T - 2A.$$

Daí, segue que

$$D = \mathcal{K}(G_P).$$

Aprendemos a expressar a matriz D a partir da matriz de Gram associada, agora queremos fazer a operação contrária, ou seja, expressar a matriz de Gram a partir da matriz D . Nosso objetivo agora é mostrar que $G_P = -\frac{1}{2}JDJ$, com $J = I - \frac{1}{n}ee^T$.

Seja D a matriz de distâncias Euclidianas para os pontos $\{p_1, \dots, p_n\}$. Então a matriz de Gram associada G_P é dada por $G_P = P^T P$. Logo,

$$\begin{aligned} G_P &= \begin{bmatrix} p_1^T p_1 & \cdots & p_1^T p_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p_n^T p_1 & \cdots & p_n^T p_n \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 + \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 - \|p_1 - p_n\|^2 + \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 - \|p_n - p_1\|^2 + \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 + \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \\ &\quad - \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \|p_1 - p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n - p_1\|^2 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Assumindo

$$B = \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix},$$

temos que,

$$G_P = \frac{1}{2}(B + B^T - D).$$

Note que $G_P = JG_PJ$, e então

$$\begin{aligned} G_P &= \frac{1}{2}J(B + B^T - D)J \\ &= \frac{1}{2}(J(B + B^T)J - JDJ). \end{aligned}$$

Para obtermos o resultado, basta verificar que $J(B + B^T)J = 0$.

Sendo assim,

$$\begin{aligned} J(B + B^T)J &= \left(I - \frac{1}{n}ee^T\right)(B + B^T)\left(I - \frac{1}{n}ee^T\right) \\ &= \left(B + B^T - \frac{1}{n}ee^TB - \frac{1}{n}ee^TB^T\right)\left(I - \frac{1}{n}ee^T\right) \\ &= B + B^T - \frac{1}{n}ee^TB - \frac{1}{n}ee^TB^T - \frac{1}{n}Bee^T - \frac{1}{n}B^Tee^T \\ &\quad + \frac{1}{n^2}ee^TBee^T + \frac{1}{n^2}ee^TB^Tee^T. \end{aligned}$$

Veja que ee^T é a matriz de uns em $\mathbb{R}^{n \times n}$, logo,

$$\begin{aligned}
 ee^T B &= \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_n\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 + \cdots + \|p_n\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 + \cdots + \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_1\|^2 + \cdots + \|p_n\|^2 & \cdots & \|p_1\|^2 + \cdots + \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \|p_1\|^2 & \cdots & \|p_n\|^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\
 &= B^T ee^T.
 \end{aligned}$$

O que mostramos agora é que $ee^T B = B^T ee^T$. Defina $\hat{B} = ee^T B$. Veja que $ee^T \hat{B} = \hat{B} ee^T = n\hat{B}$, da mesma forma que $Bee^T = nB$ e $ee^T B^T = nB^T$. Daí, segue que

$$\begin{aligned}
 J(B + B^T)J &= B + B^T - \frac{1}{n}ee^T B - \frac{1}{n}ee^T B^T \\
 &\quad - \frac{1}{n}Bee^T - \frac{1}{n}B^T ee^T + \frac{1}{n^2}ee^T Bee^T + \frac{1}{n^2}ee^T B^T ee^T \\
 &= B + B^T - \frac{1}{n}\hat{B} - \frac{1}{n}ee^T B^T - \frac{1}{n}Bee^T \\
 &\quad - \frac{1}{n}\hat{B} + \frac{1}{n^2}\hat{B}ee^T + \frac{1}{n^2}ee^T \hat{B} \\
 &= B + B^T - \frac{1}{n}\hat{B} - \frac{1}{n}nB^T - \frac{1}{n}nB \\
 &\quad - \frac{1}{n}\hat{B} + \frac{1}{n^2}n\hat{B} + \frac{1}{n^2}n\hat{B} \\
 &= B + B^T - \frac{2}{n}\hat{B} - B^T - B + \frac{2}{n}\hat{B} \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Portanto, $G_P = \frac{1}{2}(J(B + B^T)J - JDJ) = 0 - \frac{1}{2}JDJ$ e, como queríamos,

$$G_P = -\frac{1}{2}JDJ.$$

A matriz J definida acima é tal que $J \in \mathbb{S}^n$ e, além disso, verifica-se que J é uma matriz de projeção ortogonal no complemento ortogonal de e^\perp , pois, $J^2 = J$.

Seja agora a transformação linear $\mathcal{T} : \mathbb{S}^n \rightarrow \mathbb{S}^n$, com

$$\mathcal{T}(A) := -\frac{1}{2}JAJ. \quad (13)$$

Tal transformação será importante para podermos relacionar matrizes semi-definidas positivas e as matrizes de distâncias Euclidianas.

Para tanto, temos o seguinte resultado, cuja demonstração segue conforme as demonstrações encontradas em [12, 19].

Lema 4.4. $\mathcal{T}(A) = \mathcal{K}(A)^{-1}$ e $\mathcal{K}(A) = \mathcal{T}(A)^{-1}$, ou seja, \mathcal{T} e \mathcal{K} são mutuamente inversas.

Demonstração. Para validar a demonstração, precisamos restringir o domínio de nossas transformações, nesse caso $\mathcal{T}(A)$:

Provaremos primeiramente que $\mathcal{K}(\mathcal{T}(A)) = A$. Seja $A \in \mathbb{D}^n$, então $\mathcal{T}(A) = -\frac{1}{2}JAJ$.

Sabendo que

$$\text{diag}(\mathcal{T}(A)) = \frac{1}{n}Ae - \left(\frac{1}{2n^2}e^T Ae \right) e,$$

temos que

$$\begin{aligned} \text{diag}(\mathcal{T}(A))e^T + e(\text{diag}(\mathcal{T}(A)))^T &= \left(\frac{1}{n}Ae - \left(\frac{1}{2n^2}e^T Ae \right) e \right) e^T \\ &+ e \left(\frac{1}{n}Ae - \left(\frac{1}{2n^2}e^T Ae \right) e \right)^T. \end{aligned}$$

Como $Je = 0$ e $JA = A$, segue

$$\begin{aligned}
 &= A - A \frac{1}{n} ee^T \\
 &= -A \left(I - \frac{1}{n} ee^T \right) + 2A \\
 &= - \left(\left(I - \frac{1}{n} ee^T \right) A \left(I - \frac{1}{n} ee^T \right) \right) + 2A \\
 &= -JAJ + A \\
 &= 2\mathcal{T}(A) + A.
 \end{aligned}$$

Por fim,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}(\mathcal{T}(A)) &= \text{diag}(\mathcal{T}(A))e^T + e(\text{diag}(\mathcal{T}(A)))^T - 2\mathcal{T}(A) \\
 &= 2\mathcal{T}(A) + A - 2\mathcal{T}(A) \\
 &= A.
 \end{aligned}$$

Concluindo que $\mathcal{K}(\mathcal{T}(A)) = A$. Analogamente, prova-se que $\mathcal{T}(\mathcal{K}(A)) = A$. ■

Encerramos este capítulo com o próximo Teorema que é bastante importante visto que faz uma conexão entre as matrizes de distância Euclidianas e as matrizes semi-definidas positivas, através do operador $\mathcal{T}(A)$.

Este teorema foi primeiramente apresentado por Schoenberg [26] em 1935; em paralelo, Young e Householder [28] publicaram um resultado semelhante em 1938. Ambos estabeleceram caracterizações básicas sobre as matrizes de distâncias Euclidianas.

Teorema 4.5 (Schoenberg, Young e Householder). *Seja $D \in \mathbb{S}^n$ uma matriz Hollow, isto é, $\text{diag}(D) = 0$. D é uma matriz de distâncias Euclidianas se, e somente se, $\mathcal{T}(D)$ é semi-definida positiva. Ademais, o posto de $\mathcal{T}(D)$ é a dimensão de incorporação de D .*

Demonstração. Suponha D uma EDM com dimensão de incorporação r . Então $D = \mathcal{K}(G_P)$, tal que G_P é a matriz de Gram associada a D . Além

disso, a matriz G_P é semi-definida positiva, tem posto $r < n$ e tem núcleo diferente do trivial. Logo, para algum $s \in \mathbb{R}^n - \{0\}$, $G_P s = 0$. Pelo [Lema 4.4](#), $\mathcal{T}(D) = \mathcal{T}(\mathcal{K}(G_P)) = G_P$.

Por outro lado, suponha que $G_P = \mathcal{T}(D)$ seja semi-definida positiva tal que G_P tenha posto r e $G_P e = 0$. Lembre que $G_P = P^T P$, sendo $P \in \mathbb{R}^{n \times r}$ uma matriz de posto completo. Daí, segue que $D = \mathcal{K}(\mathcal{T}(D)) = \mathcal{K}(G_P) = \mathcal{K}(P^T P)$. Veja que $\mathcal{K}(P^T P)$ é a matriz de Gram de D , logo, D é gerado pelos pontos p_1, \dots, p_n , tal que p_i é a i -ésima coluna de P . Ou seja, D é EDM gerada por p_i . ■

Assim concluímos que quando $\mathcal{T}(D)$ é semi-definida positiva, temos uma condição suficiente para que D seja EDM.

5 COMPLETAMENTO DE MATRIZES

Seja $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$ uma matriz, chamamos M de matriz parcial se conhecemos somente alguns dos elementos dessa matriz. Denotamos por Ω , o subconjunto desses elementos conhecidos.

Para completar nossa matriz parcial $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$, precisamos de uma matriz $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ em que todos os seus elementos são conhecidos e vale a seguinte propriedade $x_{ij} = m_{ij}$ para todo $(i, j) \in \Omega$. Ou seja, cada entrada conhecida de M , deve ser uma entrada de X . O problema do completamento de matrizes surge a partir de uma matriz parcial, quando queremos encontrar um completamento para ela. Modelando este problema, obtemos:

$$\begin{array}{ll} \text{encontrar} & X \in \mathbb{R}^{m \times n} \\ \text{tal que} & x_{ij} = m_{ij} \text{ para todo } (i, j) \in \Omega \end{array}$$

Veja que Ω não contém todas as posições da matriz M , logo esse problema possui infinitas soluções. Para restringir o número de soluções, precisamos que a matriz X possua alguma característica, ou seja, possua alguma propriedade específica.

Assim, denotaremos por ρ uma propriedade específica de M e C_ρ o conjunto de matrizes que possuem essa mesma propriedade ρ . Precisamos que $C_\rho \neq \emptyset$. Modelando o problema novamente, e tendo como objetivo encontrar um completamento em C_ρ , escrevemos

$$\begin{array}{ll} \text{encontrar} & X \in \mathbb{R}^{m \times n} \\ \text{tal que} & x_{ij} = m_{ij} \text{ para todo } (i, j) \in \Omega. \\ & X \in C_\rho \end{array}$$

Podemos ainda modelar o problema de outra forma. Considere C_1 como o conjunto de todos os completamentos possíveis para M e sua intersecção com os conjuntos C_2, \dots, C_t , os quais representam todas as matrizes que contém a mesma propriedade específica de M . Então estamos com o seguinte problema

$$\text{encontrar } X \in \bigcap_{i=1}^t C_i \subseteq \mathbb{R}^{m \times n}. \quad (14)$$

Veja que $C_\rho = \bigcap_{i=2}^t C_i$. O problema (14) é conhecido como problema de Viabilidade. Caso os conjuntos envolvidos sejam convexos, dizemos que (14) é o problema de Viabilidade Convexa (CFP, do inglês Convex Feasibility Problem).

Exemplo 5.1. Suponha que a propriedade de uma certa matriz seja a seguinte:

$$C_* = \left\{ X \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid X_{ij} \geq 0, \sum_{k=1}^n X_{kj} = 1 \text{ para } i = 1, \dots, m \text{ e } j = 1, \dots, n \right\}.$$

Podemos descrever este conjunto como a intersecção de dois conjuntos que representam as seguintes propriedades:

$$C_2 = \left\{ X \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid X_{ij} \geq 0 \text{ para } i = 1, \dots, m \text{ e } j = 1, \dots, n \right\},$$

$$C_3 = \left\{ X \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid \sum_{i=1}^m X_{ij} = 1 \text{ para } j = 1, \dots, n \right\}.$$

Deste modo, temos que $C_* = C_2 \cap C_3$.

6 MÉTODOS BASEADOS EM PROJEÇÕES

Neste capítulo apresentaremos os métodos utilizados para resolver o completamento de matrizes. Para isto, modelamos o problema do completamento como um problema de Viabilidade Convexa. Dados os conjuntos C_1, \dots, C_m em \mathbb{R}^n , fechados e convexos, com intersecção $C_* = \bigcap_{i=1}^m C_i$ não vazia, resolver o problema consiste em encontrar um ponto $c \in C_*$, isto é, encontrar um ponto na intersecção dos conjuntos C_i 's. Deste modo, para o completamento, a matriz procurada deve estar na intersecção dos conjuntos envolvidos. Os métodos abordados para resolver o CFPs são baseados em projeções.

O teorema a seguir caracteriza a projeção para um conjunto convexo e fechado. A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [17, Teorema 3.2.32].

Teorema 6.1. *Seja $Y \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto convexo e fechado. Então para todo $x \in \mathbb{R}^n$, a projeção $P_Y(x)$ da Definição 2.4, existe e é única. Ademais, $\bar{x} = P_Y(x)$ se, e somente se,*

$$\bar{x} \in Y, \quad \langle x - \bar{x}, y - \bar{x} \rangle \leq 0 \quad \forall y \in Y.$$

Para o caso não convexo, a projeção ainda existe, porém, perdemos a propriedade da unicidade. No caso de um conjunto não fechado, a projeção pode não existir. Alguns dos métodos que apresentaremos utilizam reflexões, porém estas são calculadas a partir de projeções; veja Definição 2.5.

6.1 MÉTODO DAS PROJEÇÕES ALTERNADAS

O método das projeções alternadas (MAP), foi introduzido por Stefan Kaczmarz no ano de 1937 e por esta razão, também é conhecido como método de Kaczmarz. O MAP é considerado a principal ferramenta clássica para resolver problemas de viabilidade convexa. O MAP, assim como o nome sugere, consiste, a partir de um ponto inicial x_0 , fazer projeções alternadas entre os conjuntos envolvidos. Já foi mostrado que o MAP converge (sob

hipóteses bastante fracas) para a intersecção dos conjuntos. Mesmo que não tenham intersecção, o MAP converge para o ponto mais próximo de ambos conjuntos. Para mais exemplos e discussões acerca das diferentes categorias de convergências, indicamos as referências [9, 14].

A Figura 15 nos mostra uma iteração do método MAP considerando dois hiperplanos $U, V \in \mathbb{R}^2$ que se intersectam. O ponto $P_V P_U x^0$ é o ponto obtido com uma iteração do método, em que P_U e P_V são as projeções ortogonais sobre U e V , respectivamente. A cada ponto encontrado, testamos a aproximação, se não estivermos perto o suficiente, repetimos o processo. Um exemplo animado pode ser acessado em [Applet Geogebra MAP](#).

Podemos verificar que, no caso de hiperplanos, a convergência do MAP depende do ângulo formado pela intersecção dos conjuntos. Se o ângulo for grande, as projeções alternadas percorrem distâncias significativas, ao passo que em pequenos ângulos, o ponto obtido pelas projeções é quase o mesmo. Podemos comparar 5 iterações do MAP em retas com diferentes ângulos, conforme Figura 16 e Figura 17.

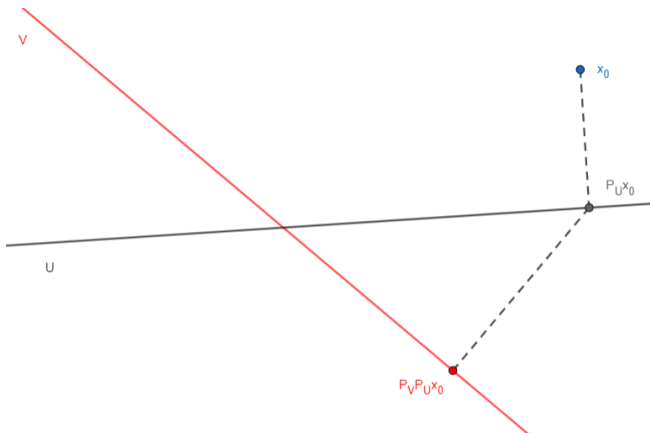


Figura 15 – Iteração do MAP

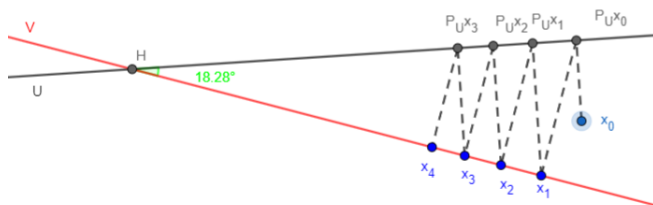


Figura 16 – MAP em retas com ângulo pequeno.

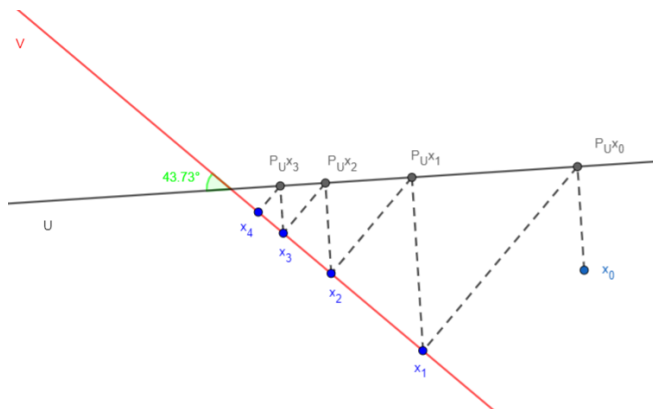


Figura 17 – MAP em retas com ângulo grande.

Algoritmo 1: Método MAP para encontrar $x^* \in U \cap V$

Entrada: $x^0, itmax, \epsilon$

Saída: x^*

- 1 início
 - 2 **para** $k = 0, 1, \dots, itmax$ **faça**
 - 3 $x^{k+1} = P_V P_U x^k;$
 - 4 **fim**
 - 5 **fim**
-

Enunciamos agora o Teorema de Von Neumann que garante a convergência do MAP para quando procuramos a intersecção de dois subespaços

fechados. A demonstração pode ser encontrada em [14, p. 20].

Teorema 6.2 (Von Neumann). *Sejam U e V subespaços fechados de \mathbb{R}^n e $x \in \mathbb{R}^n$, com $U \cap V \neq \emptyset$.*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (P_U P_V)^n(x) = P_{V \cap U}(x)$$

Além disto, $P_{V \cap U}(x)$ é ponto de $U \cap V$ mais próximo de x .

6.2 DOUGLAS-RACHFORD

O método Douglas-Rachford (DRM), foi proposto em 1956 por Douglas e Rachford com intensão de resolver sistemas de equações lineares. Dado $U, V \in \mathbb{R}^n$ o método consiste que a partir de um ponto inicial x_0 façamos as reflexões alternadas nos conjuntos U e V , depois calculamos o ponto médio de x_0 e $R_U R_V x_0$. A [Figura 18](#) representa uma iteração do método. No algoritmo, caso o ponto obtido não seja uma boa aproximação, repetimos o método. Claramente o ponto Y obtido através de uma iteração está mais próximo da solução. Definiremos agora o operador Douglas-Rachford baseado em [16, p. 28].

Definição 6.3. *Seja $U, V \subset \mathbb{R}^n$ conjuntos fechados e convexos. O operador Douglas-Rachford é representado por $\mathcal{D}_{U,V}$, com*

$$\mathcal{D}_{U,V} := P_V(2P_U - I) + I - P_U = \frac{I + R_V R_U}{2}.$$

Um exemplo animado iterativo pode ser acessado em [Applet Geogebra DRM](#). Neste Applet podemos verificar que o DRM também depende do ângulo entre os conjuntos.

Segue o algoritmo do método DRM implementado para os experimentos numéricos do próximo capítulo.

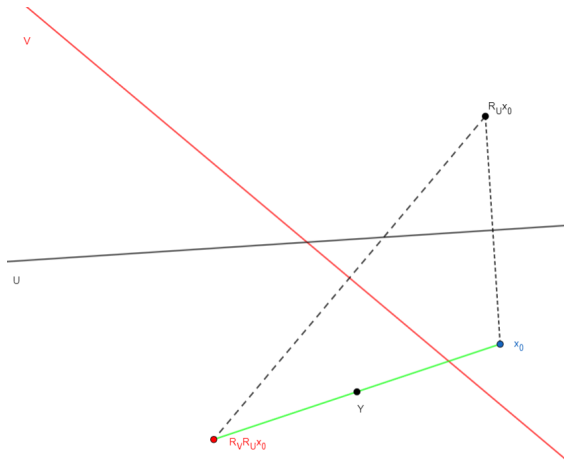


Figura 18 – Iteração do DRM.

Algoritmo 2: Método DRM para encontrar $x^* \in U \cap V$

Entrada: $x^0, itmax, \epsilon$

Saída: x^*

1 **início**

2 **para** $k = 0, 1, \dots, itmax$ **faça**

3 $x^{k+1} = \frac{x^k + R_V R_U x^k}{2}$;

4 **fim**

5 **fim**

O teorema de convergência enunciado a seguir, assim como sua demonstração, podem ser encontrados em [16] e [23, p. 26 - 31]. Caso o leitor se interesse, [1, 2] trazem mais algumas proposições interessantes.

Teorema 6.4. *Sejam $U, V \subseteq \mathbb{R}^n$ fechados e convexos e seja $\mathcal{D}_{U,V}$ o operador de Douglas-Rachford da Definição 6.3. Dado $x_0 \in \mathbb{R}^n$, a sequência $\{x_k\}$ dada por*

$$x_{k+1} = \mathcal{D}_{U,V}(x_k), \text{ para } k \in \mathbb{N}$$

satisfaz somente uma das alternativas a seguir:

(i) se $U \cap V \neq \emptyset$ então $\{x_k\}$ converge para um ponto x^* com $P_U(x^*) \in U \cap V$.

(ii) se $U \cap V = \emptyset$ então $\|x_k\| \rightarrow \infty$, isto é, a sequência diverge.

6.3 REFLEXÕES CIRCUNCENTRADAS

O método das reflexões circuncentradas (circumcentered-reflection ou CRM) é um método iterativo para resolução do problema de viabilidade convexa. CRM foi proposto em 2018 por Behling, Bello-Cruz e Santos [5] como aceleração do método Douglas-Rachford. Todas as propriedades que veremos podem ser encontradas em [4–7]. Antes de mostrar o método, vamos definir o operador circuncentro. Já bem definido, iremos apresentar algumas de suas propriedades e exemplos.

6.3.1 CIRCUNCENTRO

Primeiramente definiremos o circuncentro para três pontos dados, para adiante, generalizá-lo.

Definição 6.5. Seja $x, y, z \in \mathbb{R}^n$. O circuncentro destes três pontos, denotado por $\text{circ}\{x, y, z\} \in \mathbb{R}^n$, é um ponto que satisfaz as seguintes propriedades:

(i) O circuncentro é equidistante dos pontos x, y, z , ou seja,

$$\|x - \text{circ}\{x, y, z\}\| = \|y - \text{circ}\{x, y, z\}\| = \|z - \text{circ}\{x, y, z\}\|.$$

(ii) O circuncentro pertence ao conjunto afim gerado pelos pontos x, y e z , isto é,

$$\text{circ}\{x, y, z\} \in \text{aff}\{x, y, z\},$$

com $\text{aff}\{x, y, z\}$ da [Definição 2.3](#).

Existência, unicidade e o cálculo do circuncentro de três pontos, apresentam algumas variações que depende dos pontos obtidos. Tais variações

são tratadas a seguir. Em particular, vamos tratar aqui de pontos gerados a partir de reflexões sobre dois conjuntos convexos, U, V de \mathbb{R}^n .

Seja $x \in \mathbb{R}^n$. definindo $y := R_U(x)$ e $z := R_V R_U(x)$ temos o subespaço afim gerado pelos vetores x, y e z como $\text{aff}\{x, y, z\}$. Caso a cardinalidade de $\{x, y, z\}$ seja igual a 1, temos que $\text{circ}(x, y, z) = x$. Isto decorre do fato de os três pontos serem coincidentes. Para $|\text{aff}\{x, y, z\}| = 2$, segue que o circuncentro é dado pelo ponto médio dos dois pontos distintos. Supondo que $x \neq z$, segue que $\text{circ}(x, y, z) = \frac{x+z}{2}$. O último caso, quando $|\text{aff}\{x, y, z\}| = 3$, ou seja, três pontos distintos, precisamos de algumas definições. Sendo assim, definimos os vetores $s_U := y - x$ e $s_V := z - x$. O conjunto $\text{aff}\{x, y, z\}$ pode ser escrito como

$$\text{aff}\{x, y, z\} = x + \text{span}\{s_U, s_V\}.$$

Precisamos encontrar $s \in \text{aff}\{x, y, z\}$ de modo que a projeção de s em s_U e s_V seja respectivamente:

$$P_{\text{span}\{s_U\}}(s) = \frac{1}{2}s_U,$$

$$P_{\text{span}\{s_V\}}(s) = \frac{1}{2}s_V.$$

Agora, veja que

$$\begin{cases} \langle s_U, s \rangle = \frac{1}{2}\|s_U\|^2 \\ \langle s_V, s \rangle = \frac{1}{2}\|s_V\|^2 \end{cases}$$

Podemos escrever s como combinação linear de s_U e s_V , logo, temos

$$s = \alpha s_U + \beta s_V.$$

Obtemos assim, o seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} \alpha \|s_U\|^2 + \beta \langle s_U, s_V \rangle = \frac{1}{2} \|s_U\|^2 \\ \alpha \langle s_U, s_V \rangle + \beta \|s_V\|^2 = \frac{1}{2} \|s_V\|^2 \end{cases} \quad (15)$$

A solução desse sistema é dada por:

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\|s_U\|^2 \|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle \|s_V\|^2}{2 \left(\|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle^2 \right)} \\ \beta = \frac{\|s_U\|^2 \|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle \|s_U\|^2}{2 \left(\|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle^2 \right)} \end{cases} \quad (16)$$

Portanto, concluímos que:

$$\text{circ} \{x, y, z\} = x + \alpha s_U + \beta s_V.$$

A próxima proposição se refere a boa definição do circuncentro, a partir das reflexões, quando estão envolvidos um subespaço e um conjunto convexo qualquer. Assim, ao tomarmos as reflexões, podemos sempre calcular o circuncentro. Sua demonstração pode ser encontrada em [6, Lemma 3].

Proposição 6.6. *Sejam $K, U \subset \mathbb{R}^n$, em que K é um conjunto fechado e convexo e U um subespaço afim. Assuma também que $K \cap U \neq \emptyset$. Então, para todo $x \in U$, o circuncentro $C(x) := \text{circ} \{x, R_K(x), R_U R_K(x)\}$ está bem definido e temos que $C(x) \in U$. Além disso, $C(x) = P_{H_x \cap U}(x)$, em que $H_x := \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x - P_K(x))^T (x - P_K(x)) = 0\}$ se $x \notin K$ e $H_x := K$, caso contrário.*

O Exemplo 6.7 mostra o cálculo do circuncentro considerando as reflexões consecutivas sobre dois hiperplanos.

Exemplo 6.7. Seja $U = \{(x, y) \mid x + 3y = 2\}$ e $V = \{(x, y) \mid 2x - 2y = 4\}$, dois hiperplanos dados pelo seguinte sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

A reflexão de x em U é dada por

$$R_U(x) = x - 2 \cdot \left(\frac{\langle (1, 3), x \rangle - 2}{\langle (1, 3), (1, 3) \rangle} \right) \cdot (1, 3).$$

Já a reflexão de x em V é

$$R_V(x) = x - 2 \cdot \left(\frac{\langle (2, -2), x \rangle - 4}{\langle (2, -2), (2, -2) \rangle} \right) \cdot (2, -2).$$

Tome como ponto inicial $x_0 = (6, -2)$. O circuncentro está bem definido a partir das reflexões. Sendo assim, faremos a reflexão em um dos hiperplanos e depois a composição das reflexões.

$$\begin{aligned} R_U(x_0) &= (6, -2) - 2 \cdot \left(\frac{\langle (1, 3), (6, -2) \rangle - 2}{\langle (1, 3), (1, 3) \rangle} \right) \cdot (1, 3) \\ &= (6, -2) - 2 \cdot \frac{-2}{10} \cdot (1, 3) \\ &= (6, -2) - \left(\frac{-4}{10}, \frac{-12}{10} \right) \\ &= \left(\frac{32}{5}, \frac{-4}{5} \right). \end{aligned}$$

Agora faremos a reflexão em relação a V a partir do ponto $R_U(x_0)$. Logo,

$$\begin{aligned} R_V R_U(x_0) &= R_V \left(\frac{32}{5}, \frac{-4}{5} \right) \\ &= \left(\frac{32}{5}, \frac{-4}{5} \right) - 2 \cdot \left(\frac{\langle (2, -2), (\frac{32}{5}, \frac{-4}{5}) \rangle - 4}{\langle (2, -2), (2, -2) \rangle} \right) \cdot (2, -2) \\ &= \left(\frac{32}{5}, \frac{-4}{5} \right) - 2 \cdot \frac{13}{5} \cdot (2, -2) \\ &= \left(\frac{32}{5}, \frac{-4}{5} \right) - \left(\frac{26}{5}, \frac{-26}{5} \right) \\ &= \left(\frac{6}{5}, \frac{22}{5} \right). \end{aligned}$$

Deste modo, achamos 3 pontos distintos $x = (6, -2)$, $y = (\frac{32}{5}, \frac{-4}{5})$ e $z = (\frac{6}{5}, \frac{22}{5})$ que necessitamos para calcular o circuncentro. Veja [Figura 19](#).

Calcularemos os vetores

$$s_U = y - x = \left(\frac{2}{5}, \frac{6}{5} \right)$$

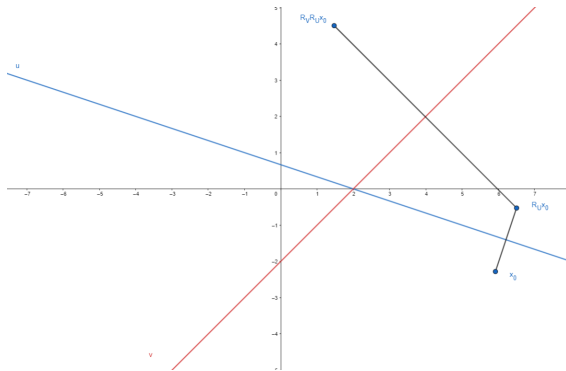


Figura 19 – Calculando as reflexões de x_0 .

e

$$s_V = z - x = \left(\frac{-24}{5}, \frac{32}{5} \right).$$

Agora precisamos resolver o sistema linear obtido em (15), que tem solução em (16). Note que

$$\begin{aligned} \|s_U\|^2 &= \frac{40}{25}, \\ \|s_V\|^2 &= 64, \\ \langle s_U, s_V \rangle &= \frac{144}{25}. \end{aligned}$$

Calculando α e β , temos

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\|s_U\|^2 \|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle \|s_V\|^2}{2 \cdot \left(\|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle^2 \right)} \\ &= \frac{\frac{40}{25} \cdot 64 - \frac{144}{25} \cdot 64}{2 \cdot \left(64 - \frac{20736}{625} \right)} \\ &= \frac{-25}{13} \end{aligned}$$

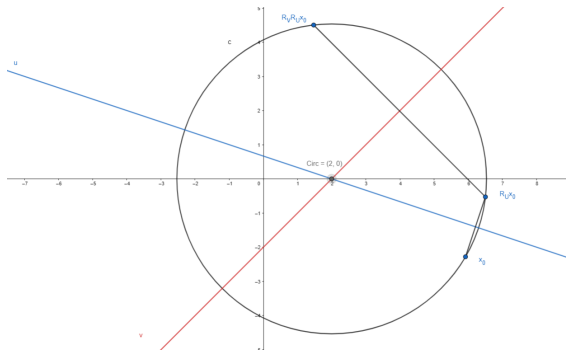


Figura 20 – Calculando ao circuncentro.

e

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\|s_U\|^2 \|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle \|s_U\|^2}{2 \cdot (\|s_V\|^2 - \langle s_U, s_V \rangle^2)} \\ &= \frac{\frac{40}{25} \cdot 64 - \frac{144}{25} \cdot \frac{40}{25}}{2 \cdot (64 - \frac{20736}{625})} \\ &= \frac{35}{52}. \end{aligned}$$

Calcularemos agora o circ $\{x, R_U(x), R_V R_U(x)\}$. Segue que

$$\begin{aligned} C_T &= x + \alpha s_U + \beta s_V \\ &= (6, -2) + \frac{-25}{13} \left(\frac{2}{5}, \frac{6}{5} \right) + \frac{35}{52} \left(\frac{-24}{5}, \frac{32}{5} \right) \\ &= (6, -2) - \left(\frac{50}{65}, \frac{30}{13} \right) + \left(\frac{-42}{13}, \frac{56}{13} \right) \\ &= (2, 0). \end{aligned}$$

O circuncentro $(0, 2)$ é o ponto de intersecção dos hiperplanos U e V . Veja a [Figura 20](#).

Agora veremos o caso em que o circuncentro é obtido a partir de uma coleção finita de conjuntos convexos. Tal conceito foi primeiramente estabelecido em [6] e estendido em [4, 7].

Definição 6.8. Seja $\mathcal{B} := (Y_1, Y_2, \dots, Y_q)$ uma coleção de conjuntos não vazios ordenados, fechados e convexos em \mathbb{R}^n , quando $q \geq 1$ é um inteiro fixado. O circuncentro de \mathcal{B} do ponto $z \in \mathbb{R}^n$ é denotado por $C_{\mathcal{B}}(z)$ e definido por satisfazer as seguintes propriedades:

- (i) A primeira propriedade nos mostra que o circuncentro $C_{\mathcal{B}}(z)$ é equidistante dos pontos $R_{Y_1}(z), \dots, R_{Y_q} \dots R_{Y_2} R_{Y_1}(z)$, ou seja,

$$\|z - C_{\mathcal{B}}(z)\| = \|R_{Y_1}(z) - C_{\mathcal{B}}(z)\| = \dots = \|R_{Y_q} \dots R_{Y_2} R_{Y_1}(z) - C_{\mathcal{B}}(z)\|.$$

- (ii) Já a segunda propriedade nos mostra que o circuncentro pertence ao conjunto afim gerado pelos pontos $\{z, R_{Y_1}(z), \dots, R_{Y_q} \dots R_{Y_2} R_{Y_1}(z)\}$, isto é,

$$C_{\mathcal{B}}(z) \in \text{aff} \{z, R_{Y_1}(z), \dots, R_{Y_q} \dots R_{Y_2} R_{Y_1}(z)\}.$$

Por conveniência, podemos denotar $C_{\mathcal{B}}(z)$ por

$$\text{circ} \{z, R_{Y_1}(z), R_{Y_2} R_{Y_1}(z), \dots, R_{Y_q} \dots R_{Y_2} R_{Y_1}(z)\}.$$

Transcrevemos a seguir o resultado que garante que um circuncentro de q subespaços está bem definido, cuja demonstração pode ser encontrada em [7, Lemma 2].

Proposição 6.9. *Considere uma coleção de subespaços afins dada por $B = (U_1, U_2, \dots, U_q)$ e com interseção $U_B := \bigcap_{i=1}^q U_i$ não vazia. Para qualquer $z \in \mathbb{R}^n$, $C_B(z)$ existe e é único.*

O caso da boa definição do circuncentro para um número finito de conjuntos convexos foi tratado em [4] utilizando-se de uma reformulação devida a Pierra [25] chamada espaço produto. Tal reformulação foge do escopo deste trabalho por isso não será abordada.

Tendo definido o circuncentro, podemos definir o algoritmo CRM, que usa o cálculo do circuncentro. Adiante, veremos algumas de suas propriedades.

6.3.2 ALGORITMO

O algoritmo apresentado em **Algoritmo 3**, será usado para calcular a intersecção de dois conjuntos U e V . Desta forma o circuncentro está bem definido e será calculado a partir dos pontos $x, R_U(x), R_V R_U(x)$. Definimos o operador Circuncentro então como

$$C(x) = \text{circ}\{x, R_U(x), R_V R_U(x)\}.$$

O próximo teorema garante a convergência do método quando estão envolvidos um conjunto convexo fechado e um subespaço afim. A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [4, Theorem 1].

Teorema 6.10. *Sejam $V, U \subset \mathbb{R}^n$, em que V é um conjunto fechado e convexo e U um subespaço afim. Assuma também que $V \cap U \neq \emptyset$ e seja $x \in U$ dado. Então, a sequência gerada pelo método de reflexão circuncentrada, dada por*

$$\{C^k(x)\}_{k \in \mathbb{N}}$$

está bem definida, contida em U e converge para um ponto em $V \cap U$.

Note que o teorema acima garante a convergência do CRM somente se o ponto inicial encontra-se sobre o subespaço afim U . Então, em nossos experimentos utilizamos um passo de projeção inicial, para que o ponto esteja sobre U .

Algoritmo 3: Método CRM para encontrar $x^* \in U \cap V$

Entrada: $x^0, itmax, \epsilon$

Saída: x^*

1 **início**

2 $x^0 = P_U(x^0)$;

3 **para** $k = 0, 1, \dots, itmax$ **faça**

4 $x^{k+1} = \text{circ}(x^k, R_V x^k, R_U R_V x^k)$;

5 **fim**

6 **fim**

Desenvolvemos também um exemplo passo-a-passo sobre o funcionamento do CRM através do seguinte [Applet Geogebra CRM](#). Podemos verificar que o circuncentro não depende do ângulo entre as retas, como o MAP e o DRM.

6.4 CIRCUNCENTRO CENTRALIZADO OU CCRM

O CRM centralizado (CCRM) foi recentemente proposto por Behling, Bello-Cruz, Iusem e Santos [8] em 2021 e suas propriedades podem ser verificadas neste artigo. Esse método utiliza o operador circuncentro assim como o CRM, porém, utilizam-se alguns passos de centralização para o ponto inicial, de modo a garantir a convergência para dois conjuntos convexos quaisquer. Nesta monografia embora não havendo teoria de convergência construída, também vamos utilizar o CCRM para encontrar a intersecção de conjuntos não convexos.

Dado X_0 , o primeiro passo consiste em fazer as projeções alternadas nos conjuntos U e V , assim como feito em [Algoritmo 1](#). A partir do ponto $Z = P_V P_U x^0$, é feita a projeção simultânea em ambos conjuntos. Denotaremos $P_U P_V P_U x^0 = P_U Z = W$. Note que $Z = P_V P_V P_U x^0$. Os pontos obtidos serão usados para obter Y , que será a média das projeções simultâneas, ou seja, $Y = \frac{Z+W}{2}$. Veja a [Figura 21](#). O método das projeções simultâneas usado no CCRM é baseado no método proposto em 1938 pelo matemático italiano Gianfranco Cimmino, algumas propriedades sobre esse método pode ser encontrado em [11].

A partir do ponto Y , são realizadas as reflexões simultâneas e por fim calculamos $\text{circ}(Y, R_U Y, R_V Y)$, conforme a [Figura 22](#). Isso conclui uma iteração completa. Um exemplo dinâmico de CCRM, pode ser encontrado em [Applet Geogebra CCRM](#).

Antes de mostrar o algoritmo, vamos enunciar o teorema de convergência do CCRM. A demonstração pode ser encontrada em [8, Theorem 2.9]. O [Algoritmo 4](#), representa o algoritmo utilizado nos experimentos numéricos.

Teorema 6.11. *Sejam $U, V \subset \mathbb{R}^n$ conjuntos fechados e convexos com*

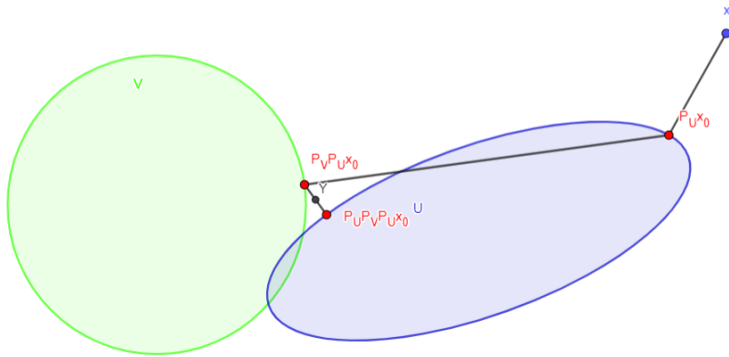


Figura 21 – Centralização do ponto inicial CCRM.

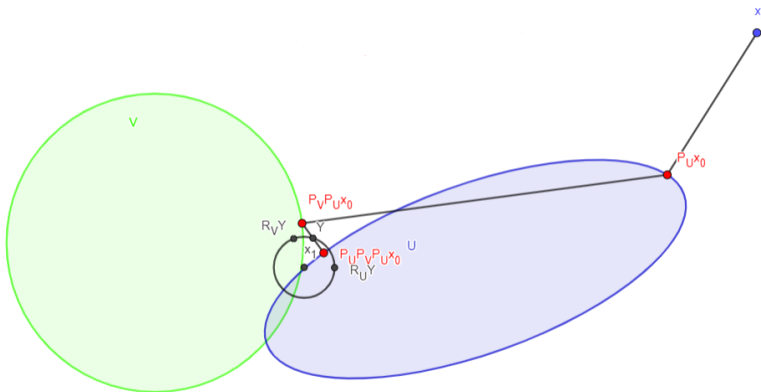


Figura 22 – Iteração completa do CCRM.

$U \cap V \neq \emptyset$. Então, para qualquer ponto inicial $z^0 \in \mathbb{R}^n$, a sequência definida por

$$z^{k+1} := \mathcal{C}(z_C^k) = \text{circ} \{z_C^k, R_U(z_C^k), R_V(z_C^k)\}$$

em que $z_C^k := \frac{P_V P_U(z^k) + P_U P_V P_U(z^k)}{2}$, converge para um ponto de $U \cap V$.

Note que o operador \mathcal{C} computa o circuncentro de reflexões paralelas, diferentemente do CRM em que as reflexões são consecutivas.

Algoritmo 4: Método CCRM para encontrar $x^* \in U \cap V$

Entrada: $x^0, itmax, \epsilon$ **Saída:** x^* 1 **início**2 **para** $k = 0, 1, \dots, itmax$ **faça**3 $Z = P_V P_U x^0;$ 4 $W = P_U Z;$ 5 $Y = \frac{W + Z}{2};$ 6 $x^{k+1} = \text{circ}(Y, R_U Y, R_V Y);$ 7 **fim**8 **fim**

7 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Para os nossos experimentos numéricos, vamos usar a modelagem e aplicar os métodos vistos no capítulo anterior para completar matrizes de distâncias Euclidianas.

7.1 CONJUNTOS E PROJEÇÕES

Como visto no [Capítulo 4](#) existe uma ligação entre matrizes EDMs e matrizes semi-definidas positivas. Começaremos enunciando um resultado baseado no [Teorema 4.5](#) estabelecido por Hayden e Wells [15], que apresenta uma caracterização similar para as matrizes EDMs.

Teorema 7.1. *Sejam $X \in \mathbb{D}^n$ e Q uma matriz de Householder, definida por $Q := I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$, com $v = [1, 1, \dots, 1 + \sqrt{n}] \in \mathbb{R}^n$. Então $X \in \mathbb{D}^n$ é EDM se e somente se o bloco $\hat{X} \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$ definido como*

$$Q(-X)Q = \begin{bmatrix} \hat{X} & x \\ x^T & \delta \end{bmatrix}, \quad (17)$$

é semi-definido positivo. Neste caso, X é irredutivelmente incorporável em \mathbb{R}^r , quando

$$r = \text{posto}(\hat{X}) \leq n - 1.$$

A demonstração deste teorema pode ser encontrada em [15, Theorem 3.3]. Uma consequência deste teorema é a convexidade do conjunto das matrizes de distâncias Euclidianas.

Para o completamento, usaremos os conjuntos C_1 , C_2 e C_2^r definidos a seguir. As informações sobre os conjuntos e suas projeções foram obtidas em [1]. Seja D uma matriz EDM, denotamos por Ω o subconjunto das entradas conhecidas de D .

Primeiramente considere o conjunto convexo

$$C_1 := \{X \in \mathbb{S}^n \mid X \text{ é uma matriz de distância com as entradas } x_{ij} = d_{ij} \forall i, j \in \Omega\}.$$

A projeção de $X \in \mathbb{S}^n$ em C_1 é dada por:

$$P_{C_1}(X) = \begin{cases} 0, & \text{se } i = j \\ d_{ij}, & \text{se } i, j \in \Omega \\ \max(0, x_{ij}), & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Exemplo 7.2. Seja X a matriz inicial e D a matriz parcial, dadas por

$$X = \begin{bmatrix} -1 & 2 & -4 \\ 2 & 4 & 9 \\ -4 & 9 & -6 \end{bmatrix} \text{ e } D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Veja que $\Omega = \{(1, 2), (1, 3)\}$. A projeção de X em C_1 é

$$P_{C_1}X = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 9 \\ 3 & 9 & 0 \end{bmatrix}.$$

Seja agora o conjunto convexo C_2 , definido por

$$C_2 := \{X \in \mathbb{S}^n \mid \hat{X} \in \mathbb{S}_+^{n-1}\},$$

em que \hat{X} é dado na Equação (17). A projeção de uma matriz $X \in \mathbb{S}^n$ em C_2 é dada por

$$P_{C_2}(X) = -Q \begin{bmatrix} \hat{X} & x \\ x^T & \sigma \end{bmatrix} Q,$$

em que $\hat{X} = U\Lambda_+U^T$, a decomposição espectral (ver [27]), e Λ_+ corresponde a matriz dos $n - 1$ maiores autovalores não negativos de X . Deste modo, caso algum autovalor seja negativo, tomamos $\max(\lambda_i, 0)$.

Os conjuntos C_1 e C_2 representam o caso de problema de viabilidade convexa, isto é, X será uma matriz de completamento de distâncias de D se, e somente se,

$$X \in C_1 \cap C_2.$$

Neste caso, se aplicam os métodos apresentados no capítulo anterior.

Em muitos casos práticos, a matriz parcial deve ser completada com uma matriz de posto baixo, menor que n . A reconstrução de proteínas e a localização de sensores são exemplos de problemas com posto baixo. Isso dificulta um pouco as coisas, pois, neste caso, precisamos de um subconjunto de matrizes que estão em C_2 , mas com limitação de posto, digamos r : este conjunto denotado por C_2^r será definido na sequência. Ressaltamos, porém, que tal conjunto C_2^r não é convexo: com efeito, o próximo exemplo mostra que a combinação convexa de matrizes de um certo posto não tem necessariamente o mesmo posto das matrizes envolvidas.

Exemplo 7.3. Seja $S = \{A \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \mid \text{posto}(A) \leq 1\}$. Veja que $S_1, S_2 \in S$, com

$$S_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } S_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Porém, veja que $\forall t \in (0, 1)$, temos que

$$t \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + (1-t) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \notin S,$$

pela [Definição 2.2](#), concluímos que S é não convexo.

Definimos então o conjunto C_2^r como

$$C_2^r := \{X \in \mathbb{S}^n \mid \hat{X} \in \mathbb{S}_+^{n-1}, \text{ com } \text{posto}(\hat{X}) = r\},$$

em que \hat{X} é dado pela Equação (17). A projeção de uma matriz X neste conjunto é dada por

$$P_{C_2^r}^r(X) = -Q \begin{bmatrix} \tilde{X} & x \\ x^T & \omega \end{bmatrix} Q,$$

em que $\tilde{X} := U\Lambda_+^r U^T$ é a decomposição espectral de \hat{X} e Λ_+^r é uma matriz diagonal com os r maiores valores de $\{\max(0, \lambda_1), \max(0, \lambda_2), \dots, \max(0, \lambda_{n-1})\}$, em que $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ são os autovalores de \hat{X} .

Veja que para $r = n - 1$, temos $\text{posto}(\tilde{X}) = n - 1$, ou seja, \tilde{X} tem posto completo e o conjunto C_2^r coincide com C_2 , isto é, torna-se convexo. Quando $r < n - 1$, o conjunto não é convexo.

7.2 GERANDO MATRIZES PARCIAIS

Para gerar as matrizes parciais, vamos utilizar os exemplares propostos por Moré e Wu [24], e nos basearemos nos testes feitos em [23].

Seja $s \in \mathbb{N}$, com $s > 2$. Assim, geramos pontos de \mathbb{R}^3 que são todas as combinações possíveis de $\{0, 1, \dots, s - 1\}$. Desta forma, garantimos que nossa matriz seja uma matriz de distâncias euclidianas. A dimensão da matriz gerada é $\mathbb{R}^{s^3 \times s^3}$, e o número de elementos é s^6 . Exemplificamos a seguir o caso $s = 3$.

Exemplo 7.4. Para $s = 3$, os pontos são formados pelas combinações de 0, 1 e 2, a saber,

$$V = \{(0, 0, 0), (0, 0, 1), (0, 0, 2), (1, 0, 0), \dots, (2, 2, 1), (2, 2, 2)\}.$$

Na **Figura 23** é mostrada uma representação do conjunto V . A matriz original O é tal que $O[i, j] = \|v_i - v_j\|^2$ com $v_i, v_j \in V$, $i, j \in \{1, 2, \dots, s^3\}$. Assim,

$$O = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 4 & \dots & 8 & 9 & 12 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 9 & 8 & 9 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 9 & 8 & 9 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 12 & 9 & 8 & \dots & 4 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{27 \times 27}.$$

Para a matriz parcial M , são consideradas somente $M[i, j] \leq 2$. Assim, temos

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{27 \times 27}.$$

Deste modo a matriz parcial possui 729 entradas, das quais, 135 entradas são distâncias conhecidas.

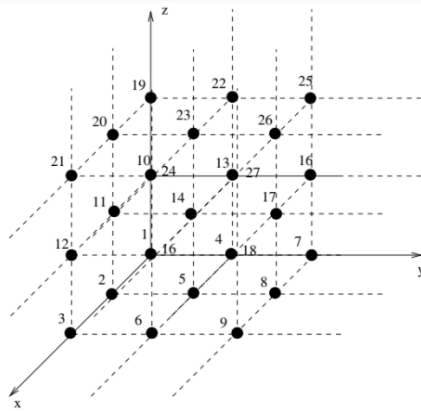


Figura 23 – Pontos que geram as distâncias da matriz $s = 3$. (Figura retirada de [20, p. 19]).

7.3 TESTES

Todos os métodos apresentados em [Capítulo 6](#) foram implementados para os experimentos. Para complementar os testes, propomos e implementamos o CRMPC que seria o algoritmo do CRM, porém apenas como ponto inicial é centralizado. Diferentemente do CCRM, o CRMPC faz somente uma centralização inicial; lembre-se que o CCRM centraliza seus pontos a cada iteração. O algoritmo CRMPC utilizado pode ser encontrado em [Algoritmo 5](#).

Algoritmo 5: Método CRMPC para encontrar $x^* \in U \cap V$ **Entrada:** $x^0, itmax, \epsilon$ **Saída:** x^* 1 **início**2 $Z = P_V P_U x^0;$ 3 $W = P_U Z;$ 4 $Y = \frac{W + Z}{2};$ 5 **para** $k = 0, 1, \dots, itmax$ **faça**6 $x^{k+1} = \text{circuncentro}(Y, R_U Y, R_V R_U Y);$ 7 **fim**8 **fim**

O critério de comparação para os métodos foi feito através da contabilização das projeções, vista que essas operações são de maior custo computacional e as iterações dos métodos fazem números diferentes de projeções. Os métodos MAP, DRM, CRM e o CRMPC contam com 2 projeções a cada iteração. O CRMPC ainda soma 3 projeções, referentes os passos de centralização do ponto inicial. Já CCRM conta com 4 projeções a cada iteração, 3 de centralização e 1 para calcular uma das reflexões simultâneas. Como critério de parada, olhamos para a distância entre as projeções nos conjuntos, isto é, paramos quando

$$\|P_U(x^k) - P_V(x^k)\| < tol,$$

com tolerância $tol = 1 \times 10^{-5}$, e com número máximo de iterações estabelecido em $itmax = 100\,000$. As projeções comutadas no critério de parada podem ser reaproveitadas para o próximo ponto, de modo que não são contabilizadas a mais. O ponto inicial estabelecido para todos os testes, foi a matriz de zeros de dimensão apropriada.

Em uma primeira bateria de testes, as matrizes parciais usadas foram geradas com $s = 3, 4, 5$ e 6 , com as distâncias conhecidas menores que 2 . As informações sobre as matrizes parciais podem ser encontradas na [Tabela 1](#). Outro conjunto de testes foi realizado com $s = 3$ variando agora a

quantidade de elementos conhecidos. Ambos testes foram executados para o problema convexo $C_1 \cap C_2$ e o problema não convexo $C_1 \cap C_2^r$ com $r = 3$.

Tabela 1 – Informações das matrizes parciais para teste completamento.

s	Tamanho	Nº elementos	Elementos conhecidos
3	27×27	729	135
4	64×64	4096	352
5	125×125	15625	725
6	216×216	46656	1296
7	343×343	117649	2107

O computador utilizado nos experimentos tem as seguintes especificações: processador Intel Xeon W-2133 3.60GHz com 32GB de RAM com sistema operacional Ubuntu 20.04. Todos os códigos foram programados na linguagem Julia [10]. Os códigos usados podem ser encontrados em <https://github.com/JuninhoTestoni/TCC>.

O resultado dos testes para resolver o problema convexo, podem ser verificados nas [Tabela 2](#), [3](#), [4](#), [5](#), [6](#). Para este problema, devemos ressaltar que o DRM converge para um ponto fixo do operador \mathcal{D} , diferentemente dos outros métodos que, convergem para um ponto de intersecção dos conjuntos convexos envolvidos.

Para o problema convexo $C_1 \cap C_2$ todos os métodos convergiram, com o número de projeções próximos para CRM, CCRM e CRMPC. Podemos observar que o MAP precisou de um número maior de projeções. Já o DRM convergiu com o menor número de projeções. O custo computacional ficou bem próximo, variando conforme o número de projeções. A medida que elevamos a quantidade de elementos da matriz, o tempo para calcular cada projeção aumenta, logo o tempo também aumenta. Com o passo inicial de centralização, notamos que o número de projeções para CRMPC reduz uma média de 18% em relação ao CRM.

Para o problema não convexo $C_1 \cap C_2^r$, com $r = 3$, os resultados podem ser observados nas [Tabela 7](#), [8](#), [9](#) e [10](#). Devemos destacar que os

Tabela 2 – Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 3$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	23	1.18755×10^{-14}	0.00459197
CCRM	32	1.96845×10^{-14}	0.0047326
MAP	210	9.01014×10^{-6}	0.017434
DRM	20	2.67676×10^{-14}	0.00357625
CRMPC	15	5.93035×10^{-10}	0.00273187

Tabela 3 – Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 4$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	49	7.89758×10^{-6}	0.0771582
CCRM	72	6.09543×10^{-6}	0.0846281
MAP	438	9.78667×10^{-6}	0.32033
DRM	28	6.55101×10^{-13}	0.0415405
CRMPC	45	8.57081×10^{-6}	0.0690891

Tabela 4 – Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 5$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	131	7.35996×10^{-6}	1.12879
CCRM	136	9.74908×10^{-6}	0.875049
MAP	832	9.93338×10^{-6}	3.60789
DRM	38	4.138×10^{-12}	0.346496
CRMPC	119	9.20355×10^{-6}	1.03145

Tabela 5 – Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 6$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	247	9.54314×10^{-6}	6.92407
CCRM	252	8.71899×10^{-6}	5.22977
MAP	1508	9.89572×10^{-6}	22.2399
DRM	48	9.66884×10^{-12}	1.43013
CRMPC	215	9.42079×10^{-6}	5.8175

Tabela 6 – Teste $C_1 \cap C_2$ para $s = 7$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	525	9.83782×10^{-6}	49.9079
CCRM	512	9.68012×10^{-6}	33.6817
MAP	2364	9.95723×10^{-6}	109.215
DRM	58	7.30137×10^{-12}	5.39285
CRMPC	371	9.6981×10^{-6}	30.2546

algoritmos CRM, CCRM e o CRMPC não tem convergência demonstrada ainda. Ao comparar com o problema convexo, podemos ver um aumento na dificuldade do problema, conseqüentemente um aumento significativo no número de projeções e tempo de processamento.

Para $s = 3$ todos os métodos convergiram antes do número máximo de projeções com boa aproximação.

Com $s = 4$ o DRM atingiu o número máximo de iterações, não chegando na aproximação desejada. Os outros métodos convergiram com número próximo de projeções com destaque para o CCRM que convergiu utilizando o menor número de projeções.

Para o problema de tamanho $s = 5$ todos os métodos convergiram, exceto o DRM. Destaque para o CCRM e para o CRMPC.

Nos casos $s = 6$ e 7 , todos os métodos chegaram no número máximo de iterações. A melhor aproximação foi do CCRM que chegou em $tol = 1 \times 10^{-3}$.

Ressaltamos que durante os experimentos está havendo uma diminuição do valor de critério de parada, indicando que com mais iterações, poderia haver convergência com a tolerância indicada.

O método CCRM foi o que mais se destacou, ficando a frente de todos os outros com um número de projeções inferior. Nesse contexto o passo de centralização do CRMPC se tornou mais eficaz, reduzindo em até 30% o número de projeções em relação ao CRM.

O segundo teste realizado foi para os mesmos conjuntos e $s = 3$. Sendo assim variamos o número de elementos conhecidos da matriz parcial

Tabela 7 – Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 3$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	509	9.4724×10^{-6}	0.107212
CCRM	300	8.82788×10^{-6}	0.0448301
MAP	946	9.9235×10^{-6}	0.0850525
DRM	1848	9.90367×10^{-6}	0.344326
CRMPC	445	9.51934×10^{-6}	0.0937504

Tabela 8 – Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 4$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	9047	9.98948×10^{-6}	15.7846
CCRM	4716	9.98975×10^{-6}	6.05631
MAP	9204	9.99569×10^{-6}	6.76276
DRM	100002	0.00138005	142.766
CRMPC	7605	9.97486×10^{-6}	13.3497

Tabela 9 – Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 5$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	13691	9.9786×10^{-6}	285.982
CCRM	5020	9.98114×10^{-6}	79.6782
MAP	22014	9.99454×10^{-6}	211.518
DRM	100002	0.00174761	1659.73
CRMPC	9469	9.97783×10^{-6}	92.9389

Tabela 10 – Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 6$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	100001	0.00154793	4137.11
CCRM	100004	0.000319083	3815.23
MAP	100002	0.00160833	2535.5
DRM	100002	0.0117147	4029.12
CRMPC	100001	0.000913238	4195.34

Tabela 11 – Teste $C_1 \cap C_2^r$ para $s = 7$.

Algoritmo	Nº projeções	Tolerância	Tempo
CRM	100001	0.005 297 6	10526.3
CCRM	100004	0.000 197 062	7550.56
MAP	100002	0.005 134 35	6241.36
DRM	100002	0.024 633 7	10185.7
CRMPC	100001	0.005 848 52	12289.0

Tabela 12 – Teste CRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$.

Nº elementos conhecidos	Nº projeções	Tolerância	Tempo
135	509	9.4724×10^{-6}	0.109134
351	31	$9.638 92 \times 10^{-6}$	0.00631852
405	1099	$2.157 19 \times 10^{-6}$	0.254332
645	47	$5.639 17 \times 10^{-6}$	0.00924959

em 135, 351, 405 e 645 de 729 elementos. Podemos verificar nos testes que a maior dificuldade se encontra quando a matriz possui 351 distâncias conhecidas, que representa 48% dos elementos da matriz. Embora que os métodos chegaram ao número máximo de projeções, podemos observar que novamente os métodos estavam convergindo e ficando próximos de uma solução. Podemos verificar também que quando temos uma pequena ou grande quantidade de elementos conhecidos, os métodos convergem mais rapidamente.

Os testes para o CRM podem ser observados nas [Tabela 13](#) e [12](#); DRM se encontra nas [Tabela 15](#) e [14](#), para CCRM nas [Tabela 17](#) e [16](#), do CRMPC nas [Tabela 19](#) e [18](#), e por fim o MAP nas [Tabela 21](#) e [20](#).

O interessante para se destacar é que os métodos CCRM, CRM, CRMPC e MAP encontraram mais dificuldades ao calcular o problema convexo e em alguns casos não convergiram para a solução. O DRM se destacou no caso convexo, mas perdeu para todos no problema não convexo.

Tabela 13 – Teste CRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	23	$1.187\,55 \times 10^{-14}$	0.00467664
351	100001	0.000 104 498	21.7477
405	7439	$9.953\,38 \times 10^{-6}$	1.65818
645	245	$9.998\,52 \times 10^{-6}$	0.0492429

Tabela 14 – Teste DRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	1848	$9.903\,67 \times 10^{-6}$	0.368722
351	100002	0.708 263	20.8171
405	806	9.7014×10^{-6}	0.17269
645	188	$9.168\,38 \times 10^{-6}$	0.0343153

Tabela 15 – Teste DRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	20	$2.676\,76 \times 10^{-14}$	0.00364119
351	194	9.779×10^{-6}	0.0376129
405	696	$9.304\,34 \times 10^{-6}$	0.137263
645	148	$8.882\,79 \times 10^{-6}$	0.027304

Tabela 16 – Teste CCRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	300	$8.827\,88 \times 10^{-6}$	0.0469866
351	40	$4.870\,49 \times 10^{-6}$	0.00616981
405	504	$9.969\,67 \times 10^{-6}$	0.0798676
645	48	$5.824\,72 \times 10^{-6}$	0.00701499

Tabela 17 – Teste CCRM para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	32	$1.968\,45 \times 10^{-14}$	0.00481015
351	100004	$8.934\,99 \times 10^{-5}$	16.3929
405	12988	9.9808×10^{-6}	2.09046
645	344	$8.543\,56 \times 10^{-6}$	0.0504335

Tabela 18 – Teste CRMPC para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	445	$9.519\,34 \times 10^{-6}$	0.0958421
351	31	$3.524\,29 \times 10^{-6}$	0.0060449
405	315	$7.796\,87 \times 10^{-6}$	0.0675119
645	37	$9.919\,28 \times 10^{-6}$	0.00701097

Tabela 19 – Teste CRMPC para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	15	$5.930\,35 \times 10^{-10}$	0.00277031
351	100001	$9.171\,17 \times 10^{-5}$	22.1563
405	7351	$9.984\,97 \times 10^{-6}$	1.65058
645	241	$9.863\,34 \times 10^{-6}$	0.0479111

Tabela 20 – Teste MAP para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2^r$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	946	9.9235×10^{-6}	0.0890768
351	62	$8.903\,96 \times 10^{-6}$	0.0056349
405	2696	$9.885\,68 \times 10^{-6}$	0.263699
645	118	$8.840\,64 \times 10^{-6}$	0.0101905

Tabela 21 – Teste MAP para $s = 3$ de $C_1 \cap C_2$.

N° elementos conhecidos	N° projeções	Tolerância	Tempo
135	210	$9.010\ 14 \times 10^{-6}$	0.017963
351	100002	$3.188\ 69 \times 10^{-5}$	9.36868
405	29392	$9.994\ 97 \times 10^{-6}$	2.63578
645	1004	$9.959\ 49 \times 10^{-6}$	0.0847349

8 CONCLUSÃO

Neste trabalho estudamos as matrizes de distâncias relacionadas ao problema de geometria de distâncias (PGD). Vimos as propriedades das matrizes euclidianas quando trabalhamos com a norma Euclidiana e as equivalências que podem ser verificadas entre as matrizes EDM e as matrizes semi-definidas positivas. A partir das EDM's apresentamos o problema do completamento de matrizes, como um problema de viabilidade.

Estudamos e implementamos os métodos CRM, CCRM, MAP, DRM e CRMPC, métodos baseados em projeções para solucionar o problema referido. Embora os métodos apresentados não convergiram para uma solução em alguns problemas, constatamos que o problema de viabilidade pode ser resolvido utilizando esses métodos. Destacamos a eficácia do DRM e CCRM para a resolução dos problemas convexos e não convexos reespectivamente. O passo de centralização para o CRM teve grande relevância e reduziu o número de projeções em todos os problemas que convergiu.

Como continuação dos estudos que vimos neste trabalho, pretende-se modelar o problema do completamento por outras formas, por exemplo, a reconstrução de proteínas e utilizar os métodos baseados em projeções para resolvê-lo. Este problema de completamento de matrizes também pode ser modelado como um problema de otimização convexa e esta é uma possibilidade de estudos, fazendo também testes e comparações. O estudo de teoria de convergência dos métodos envolvendo circuncentros para problemas não-convexos também é uma possível via de estudos que esta monografia apresenta.

REFERÊNCIAS

- [1] Francisco J Aragón Artacho, Jonathan M Borwein e Matthew K Tam. “Douglas–Rachford feasibility methods for matrix completion problems”. Em: *The ANZIAM Journal* 55.4 (2014), pp. 299–326.
- [2] Francisco J Aragón Artacho, Rubén Campoy e Matthew K Tam. “The Douglas–Rachford algorithm for convex and nonconvex feasibility problems”. Em: *Mathematical Methods of Operations Research* 91.2 (2020), pp. 201–240.
- [3] Heinz H Bauschke, Patrick L Combettes et al. *Convex analysis and monotone operator theory in Hilbert spaces*. Vol. 408. Springer, 2011.
- [4] R. Behling, J.Y. Bello-Cruz e L.-R. Santos. “On the circumcentered-reflection method for the convex feasibility problem”. Em: *Numerical Algorithms* 86.2 (2021), pp. 1475–1494. DOI: [10.1007/s11075-020-00941-6](https://doi.org/10.1007/s11075-020-00941-6).
- [5] Roger Behling, J.-Yunier Bello-Cruz e Luiz-Rafael Santos. “Circumcentering the Douglas–Rachford Method”. Em: *Numerical Algorithms* 78.3 (1 de jul. de 2018), pp. 759–776. ISSN: 1572-9265. DOI: [10.1007/s11075-017-0399-5](https://doi.org/10.1007/s11075-017-0399-5). (Acesso em 12/11/2020).
- [6] Roger Behling, J.-Yunier Bello-Cruz e Luiz-Rafael Santos. “On the Linear Convergence of the Circumcentered-Reflection Method”. Em: *Operations Research Letters* 46.2 (mar. de 2018), pp. 159–162. DOI: [10.1016/j.orl.2017.11.018](https://doi.org/10.1016/j.orl.2017.11.018). Disp. em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167637717304947>.
- [7] Roger Behling, J.-Yunier Bello-Cruz e Luiz-Rafael Santos. “The Block-Wise Circumcentered–Reflection Method”. Em: *Computational Op-*

- timization and Applications* 76.3 (jul. de 2020), pp. 675–699. DOI: [10.1007/s10589-019-00155-0](https://doi.org/10.1007/s10589-019-00155-0). Disp. em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10589-019-00155-0>.
- [8] Roger Behling, Yunier Bello-Cruz, Alfredo N. Iusem e Luiz-Rafael Santos. *On the Centralization of the Circumcentered-Reflection Method*. 12 de nov. de 2021. arXiv: [2111.07022](https://arxiv.org/abs/2111.07022) [math]. Disp. em: <http://arxiv.org/abs/2111.07022> (acesso em 16/11/2021).
- [9] Roger Behling, Yunier Bello-Cruz e Luiz-Rafael Santos. “Infeasibility and Error Bound Imply Finite Convergence of Alternating Projections”. Em: *SIAM Journal on Optimization* 31.4 (2021), pp. 2863–2892. DOI: [10.1137/20M1358669](https://doi.org/10.1137/20M1358669). arXiv: [2008.03354](https://arxiv.org/abs/2008.03354). Disp. em: <https://epubs.siam.org/doi/10.1137/20M1358669> (acesso em 11/08/2020).
- [10] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski e Viral B Shah. “Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing”. Em: *SIAM Review* 59.1 (1 fev. de 2017), pp. 65–98. DOI: [10.1137/141000671](https://doi.org/10.1137/141000671). Disp. em: <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/141000671>.
- [11] Gianfranco Cimmino. “Calcolo Approssimato per Le Soluzioni Dei Sistemi Di Equazioni Lineari”. Em: *La Ricerca Scientifica* 9.II (1938), pp. 326–333.
- [12] Frank Critchley. “On certain linear mappings between inner-product and squared-distance matrices”. Em: *Linear Algebra and its Applications* 105 (1988), pp. 91–107.
- [13] Ivan Dokmanic, Reza Parhizkar, Juri Ranieri e Martin Vetterli. “Euclidean Distance Matrices: Essential theory, algorithms, and applica-

- tions”. Em: *IEEE Signal Processing Magazine* 32.6 (2015), pp. 12–30. DOI: [10.1109/MSP.2015.2398954](https://doi.org/10.1109/MSP.2015.2398954).
- [14] René Escalante e Marcos Raydan. *Alternating Projection Methods*. Philadelphia, PA: Society for Industrial e Applied Mathematics, 2011. DOI: [10.1137/9781611971941](https://doi.org/10.1137/9781611971941). Disp. em: <https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/9781611971941>.
- [15] T.L. Hayden e Jim Wells. “Approximation by matrices positive semidefinite on a subspace”. Em: *Linear Algebra and its Applications* 109 (1988), pp. 115–130. ISSN: 0024-3795. DOI: [https://doi.org/10.1016/0024-3795\(88\)90202-9](https://doi.org/10.1016/0024-3795(88)90202-9). Disp. em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0024379588902029>.
- [16] Ouyang Hui. “Circumcenter operators in Hilbert spaces”. Diss. de mest. University of British Columbia, 2018. DOI: <http://dx.doi.org/10.14288/1.0371095>. Disp. em: <https://open.library.ubc.ca/collections/ubctheses/24/items/1.0371095>.
- [17] Alexey Izmailov e Mikhail Solodov. *Otimização, volume 1: condições de otimalidade, elementos de análise convexa e de dualidade*. 3ª ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2014.
- [18] Carlile Lavor, Leo Liberti, Weldon A Lodwick e Tiago Mendonça da Costa. *An introduction to distance geometry applied to molecular geometry*. 1ª ed. New York: Springer, 2017.
- [19] Leo Liberti, Carlile Lavor, Nelson Maculan e Antonio Mucherino. “Euclidean distance geometry and applications”. Em: *SIAM review* 56.1 (2014), pp. 3–69.

- [20] Leo Liberti, Carlile Lavor, Nelson Maculan e Antonio Mucherino. “Euclidean distance geometry and applications”. Em: *SIAM review* 56.1 (2014), pp. 3–69.
- [21] Elon L. Lima. *Álgebra linear*. 10^a ed. Coleção matemática universitária. Rio de Janeiro: IMPA, 2008.
- [22] Elon Lages Lima. *Espaços Métricos*. Rio de Janeiro: SBM, 2015.
- [23] Diaulas Murize Santana Vieira Marcondes. “Completamento de Matrizes de Distâncias Euclidianas”. Em: *Diss. de Mestrado, IME-USP* (2020). DOI: <https://doi.org/10.11606/D.45.2020.tde-07012021-170531>.
- [24] Jorge J. Moré e Zhijun Wu. “ ε -optimal Solutions To Distance Geometry Problems Via Global Continuation”. Em: *Global Minimization of Nonconvex Energy Functions: Molecular Conformation and Protein Folding*. Ed. por P.M. Pardalos, D. Shalloway e G. Xue. Vol. 23. DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science. Providence, R.I: American Mathematical Society, 1995, pp. 151–168.
- [25] G Pierra. “Decomposition through Formalization in a Product Space”. Em: *Mathematical Programming* 28.1 (1 jan. de 1984), pp. 96–115. DOI: [10.1007/BF02612715](https://doi.org/10.1007/BF02612715). Disp. em: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02612715>.
- [26] I. J. Schoenberg. “Remarks to Maurice Frechet’s Article “Sur La Definition Axiomatique D’Une Classe D’Espace Distances Vectoriellement Applicable Sur L’Espace De Hilbert””. Em: *Annals of Mathematics* 36.3 (1935), pp. 724–732. ISSN: 0003486X. Disp. em: <http://www.jstor.org/stable/1968654>.

-
- [27] David S Watkins. *Fundamentals of matrix computations*. 2^a ed. New York: John Wiley & Sons, 2004.
- [28] G. Marion Young e Alston S. Householder. “Discussion of a set of points in terms of their mutual distances”. Em: *Psychometrika* 3 (1938), pp. 19–22.