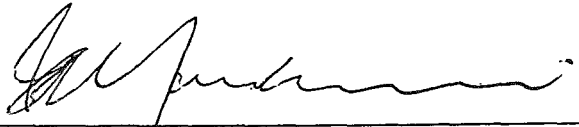


O PROBLEMA DE STEINER E A ESTRUTURA DAS
BIOMACROMOLÉCULAS

Nilomar Vieira de Oliveira

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO
DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE SISTEMAS E COMPUTAÇÃO.

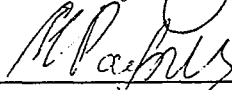
Aprovada por:



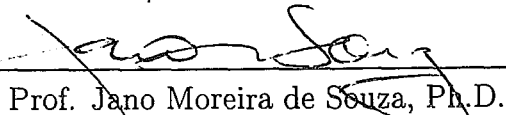
Prof. Rubem Mondaini, D.Sc.



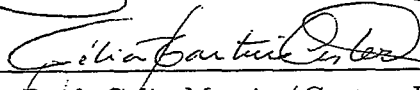
Prof. Rodney Carlos Bassanezi, D.Sc.



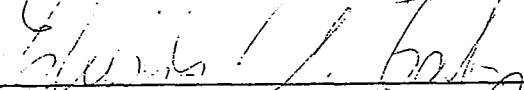
Prof. Marat Rafikov, D.Sc.



Prof. Jano Moreira de Souza, Ph.D.



Prof. Célia Martins Cortez, D.Sc.



Prof. Eduardo Uchoa Barboza, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MAIO DE 2005

OLIVEIRA, NILOMAR VIEIRA DE

O Problema de Steiner e a Estrutura das
Biomacromoléculas [Rio de Janeiro] 2005

XII, 141 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ,
D.Sc., Engenharia de Sistemas e Computação,
2005)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1 - Biomacromoléculas

3 - Steiner Ratio

3 - Árvore Mínima de Steiner

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

A meus pais

Agradecimentos

Ao Prof. Rubem Mondaini pelo crédito inicial, pela orientação, por todas as lições que espero ter aprendido e, principalmente, pela amizade sincera.

Aos colegas do Grupo BIOMAT da UFRJ pelo incentivo, principalmente ao meu amigo Roberto Antonio Cordeiro Prata.

Aos Profs. Inês Dutra de Castro e Edil Severiano Tavares Fernandes pela ajuda em fazer o programa APOLONIO funcionar outra vez em meio às vicissitudes usuais do sistema computacional do PESC.

Obrigado aos membros do Departamento de Matemática da UFAM que me liberaram para cursar o doutorado e, posteriormente, para concluir esta tese.

Grato a todos os servidores do PESC/COPPE, principalmente à Cláudia, à Lúcia e ao Adilson Barros.

Obrigado à CAPES pelo suporte financeiro.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

O Problema de Steiner e a Estrutura das Biomacromoléculas

Nilomar Vieira de Oliveira

Maio/2005

Orientador: Rubem Mondaini

Programa: Engenharia de Sistemas e Computação

Este trabalho estuda a obtenção dos pontos de Steiner numa configuração de pontos do espaço tridimensional dispostos ao longo de uma hélice circular reta, tomados igualmente espaçados. Foi feito um estudo computacional intenso da configuração dos pontos de Steiner obtidos, do qual foi possível deduzir uma expressão analítica que descreve o lugar geométrico dos pontos de Steiner, sujeito a uma suposição de topologia tomada da observação da Natureza. Esta suposição possibilitou a dedução de várias expressões, relativas a ângulos e arestas, sendo a mais importante uma que computa o comprimento da árvore mínima de Steiner, e que possibilita o cálculo da razão de Steiner para a referida configuração. Mostramos que dentro de certas hipóteses a razão mínima de Steiner é aquela de uma famosa conjectura sobre pontos de Steiner no \mathbb{R}^3 . Estes resultados foram usados em problemas de Biologia Matemática e em alguns modelos cuja estrutura das configurações biomacromoleculares é descrita por árvores de Steiner.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

The Steiner Problem and the Biomacromolecular Structure

Nilomar Vieira de Oliveira

May/2005

Advisor: Rubem Mondaini

Department: Computing and Systems Engineering

In this work we analyze the properties of the Steiner point configuration obtained from a helical set of points which are evenly spaced along a right circular helix. Through exhaustive computational experiences, we were able to derive an analytical expression for the geometrical locus of the Steiner Points. This was done by a careful observation of the 3-dimensional biomacromolecular structure of DNA forms and proteins as available at data banks. Some restrictions related to full Steiner Trees are then imposed to give a fundamental mathematical support for the proof of a famous conjecture which has remained in the literature since 1995. Some applications of these results to topics of biomacromolecular structure are also done and a formula for the treatment of the Euclidean Steiner Ratio as unconstrained optimization problem is presented.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Um Breve Histórico do Problema de Steiner	1
1.2	Motivação e Métodos do Trabalho	4
1.3	Estrutura do Trabalho	6
2	O Problema de Steiner no E^2	7
2.1	Introdução	7
2.2	O Problema de Fermat	7
2.3	O Problema de Steiner Generalizado	13
2.4	Algumas Definições	14
2.5	Propriedades das árvores de Steiner	15
2.6	O Algoritmo de Melzak	21
2.7	A Razão de Steiner no E^2	26
3	O Problema de Steiner no E^d, $d \geq 3$	29
3.1	Introdução	29
3.2	Algoritmos para o Problema de Steiner Euclidiano no \mathbb{R}^d , $d \geq 3$	30
3.2.1	O algoritmo de Smith	30
3.2.2	O algoritmo de MacGregor Smith	36
3.3	A d -sausage e suas propriedades, $d \geq 2$	43
3.3.1	Introdução à d -sausage	43
3.3.2	A 3-sausage	45
3.3.3	Cálculo da razão de Steiner para a 3-sausage como um problema de minimização	48
3.4	Cálculo do ângulo polar ω e do passo da hélice circular reta	53
3.5	Comparação da razão de Steiner da d -sausage com outros politopos	54

3.6	Cotas inferiores para a razão de Steiner	56
3.7	O programa Apolonio	60
4	Resultados e Conclusões	62
4.1	Introdução	62
4.2	Tratamento numérico dos pontos de Steiner na 3-sausage	63
4.3	A função razão de Steiner	75
4.4	Alguns resultados obtidos na aplicação do Problema de Steiner Euclidiano a configurações macromoleculares	100
4.4.1	Dados obtidos com o Apolonio comparados com resultados experimentais da literatura	101
4.4.2	Equivalência de Problemas de Otimização: Problema de Steiner <i>versus</i> Energia Potencial de Configuração espinha de peixe	103
4.4.3	Uma proposta para a medida de quiralidade	107
4.5	Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	109
	Referências Bibliográficas	112
	Apêndice: O programa Apolônio	119

Lista de Figuras

2.1	<i>O ponto de Steiner como interseção de circunferências.</i>	8
2.2	<i>O ponto de Steiner como interseção das linhas de Simpson</i>	9
2.3	<i>Vértices dados sobre os lados do triângulo equilátero de altura máxima</i>	9
2.4	<i>Todos os ângulos internos do triângulo ABC são menores que 120°.</i>	11
2.5	<i>O ponto S é a interseção dos círculos de Torricelli.</i>	12
2.6	<i>O ângulo $\angle ABC \geq 120^\circ$.</i>	13
2.7	<i>Duas topologias de uma árvore de Steiner com quatro pontos dados.</i>	15
2.8	<i>Solução do problema de Steiner por bolha de sabão.</i>	16
2.9	<i>O ângulo ASB tem medida inferior que 120° na árvore de Steiner.</i>	17
2.10	<i>O Ponto S' encurta o comprimento da árvore de Steiner.</i>	18
2.11	<i>Exemplo de uma lúnula $L(U < V)$.</i>	19
2.12	<i>Região em formato de fatia</i>	20
2.13	<i>Os pares de pontos (P_1, P_2) e (P_4, P_5) são vizinhos; P_3 não é vizinho de nenhum ponto regular</i>	22
2.14	<i>E_{ij} é um ponto equilateral, pois o triângulo $A_i E_{ij} A_j$ é equilátero</i>	22
2.15	<i>E_{ij} é substituído por A_i, A_j e S_{ij}</i>	23
2.16	<i>Exemplo da 1ª. fase do algoritmo de Melzak</i>	24
2.17	<i>O ponto equilateral E_{1234} é substituído por E_{12}, E_{34} e S_1.</i>	24
2.18	<i>A árvore de Steiner resultante após a fase de reconstrução.</i>	25
3.1	<i>Três pontos no espaço v_k, v_i, v_j e o ponto equilateral t_{ij} obtido da aresta $[v_i, v_j]$.</i>	38
3.2	<i>As três possíveis topologias para o tetraedro.</i>	39
3.3	<i>Uma topologia para o problema primal para o tetraedro.</i>	40
3.4	<i>Construção dual para o tetraedro.</i>	40

3.5	<i>A 2-sausage de 9 pontos.</i>	43
3.6	<i>Célula unitária da 3-sausage.</i>	48
3.7	<i>Triângulo de lados a, b, c e altura h.</i>	49
3.8	<i>Uma diagrama para dedução da cota inferior de Moore</i>	56
3.9	<i>A árvore mínima de Steiner (linha contínua) e a árvore geradora mínima (linha tracejada).</i>	57
3.10	<i>O diagrama usado na dedução da equação (3.23).</i>	58
3.11	<i>Representação gráfica de parte de uma árvore de Steiner cheia.</i>	59
4.1	<i>Exemplo da imagem de uma hélice circular reta de raio $a = 1$.</i>	65
4.2	<i>Duas células unitárias da 3-sausage.</i>	66
4.3	<i>Aproximação numérica para a função raio e dados experimentais obtidos pelo programa Apolonio.</i>	72
4.4	<i>Co-seno do ângulo entre arestas consecutivas, $s = 1$.</i>	77
4.5	<i>Co-seno do ângulo para $s = 2$.</i>	78
4.6	<i>Co-seno do ângulo entre arestas consecutivas, $s = 3$.</i>	79
4.7	<i>A árvore geradora formada por pontos consecutivos.</i>	80
4.8	<i>Topologia de referência.</i>	80
4.9	<i>Comparação da função raio obtida com os dados experimentais do Programa Apolonio.</i>	82
4.10	<i>O 1° corte da superfície $\rho(\omega, \alpha)$.</i>	86
4.11	<i>Perfil da função $\rho(\omega, \alpha)$ em $\omega = \pi$.</i>	87
4.12	<i>O corte que define o espaço de busca do problema de minimização.</i>	88
4.13	<i>Comparação dos dados com a função razão de Steiner obtida para um valor a α fixo, $\alpha = \alpha_R$.</i>	90
4.14	<i>Exemplo de uma árvore geradora Sp_2 formada através da conexão de P_{j+s} com P_{j+2s}.</i>	91
4.15	<i>Comparação dos comprimentos de dois tipos de árvores geradoras Sp_1 e Sp_2.</i>	92
4.16	<i>Exemplo de uma árvore geradora Sp_3 formada através da conexão de P_{j+s} com P_{j+3s}.</i>	93
4.17	<i>Comparação dos comprimentos dos três tipos de árvore geradoras Sp_1, Sp_2 e Sp_3.</i>	94

4.18	<i>Gráficos de ρ_1, ρ_2, ρ_3 e os pontos experimentais obtidos com o programa Apolonio.</i>	97
4.19	<i>Gráfico da função $f(\omega, \alpha_R)$ e os pontos experimentais obtidos com o programa Apolonio.</i>	98
4.20	<i>Gráficos da função $\rho(\omega, \alpha)$ para um pequeno domínio do \mathbb{R}^2.</i>	99
4.21	<i>Curvas de nível da função $\rho(\omega, \alpha)$.</i>	100
4.22	<i>Forma menos hidratada do DNA (A-DNA).</i>	101
4.23	<i>O vírus Mosaico do Tabaco.</i>	102
4.24	<i>A topologia de referência para uma árvore de Steiner com p pontos regulares e $p - 2$ pontos de Steiner.</i>	103
4.25	<i>O quadrado da soma das distâncias como candidato para quiralidade, $p = 300$.</i>	109

Lista de Tabelas

3.1	Razões de Steiner para algumas configurações	46
3.2	Comparação da razão de Steiner de vários politopos	55

Capítulo 1

Introdução

1.1 Um Breve Histórico do Problema de Steiner

Os problemas de otimização surgem com freqüência em questões relacionadas a problemas de Engenharias e Ciências. Dentre estes, o de minimizar uma soma de distâncias é um dos mais antigos na Matemática e, conseqüentemente, foi estudado por matemáticos renomados ao longo da História, tais como Euler e Gauss.

Por volta da metade do século XVII, um problema simples era proposto: encontrar um ponto P que minimizava a soma das distâncias de P a cada um de três pontos dados num plano. Soluções para este problema foram conseguidas independentemente por Fermat e Torricelli. Eles deduziram que poderiam surgir duas situações exclusivas: o ponto P estava na região interior ao triângulo formado pelos três pontos dados (nesse caso, os ângulos em P determinados pelos segmentos unindo P aos três pontos são todos 120° ou P é um dos três vértices e o ângulo em P , formado pelos segmentos juntando P aos outros dois pontos é maior ou igual a 120° .

No século XIX, um matemático da Universidade de Berlim chamado Jacob Steiner, estudou este problema e o generalizou com a inclusão de um conjunto arbitrariamente grande de pontos no plano. O problema foi generalizado posteriormente para um problema de minimização de caminho com a seguinte questão: dados n pontos num plano, encontrar o comprimento do menor caminho possível, ligando-os por segmentos de retas, podendo-se acrescentar k pontos, com $k \leq n - 2$. Este problema foi bastante divulgado após o surgimento do livro de Courant e Robbins [1] *What is Mathematics?*, de 1941. Courant e Robbins ligaram o nome

de Steiner a este problema generalizado, passando a partir de então a chamar-se "Problema da Árvore Mínima de Steiner". A solução para essa questão que permite o acréscimo de outros pontos, cada um dos quais chamado ponto de Steiner, é mais geral do que o problema original de Fermat para n pontos dados, e tem uma configuração final de uma árvore ao invés de uma "estrela".

Até 1961, apesar de muito estudado, apenas heurísticas eram conhecidas para a solução do problema da árvore mínima de Steiner (ou SMT, do inglês Steiner Minimal Tree). Nesse ano, Melzak [2] desenvolveu o primeiro algoritmo conhecido para a solução do SMT com um número finito de passos, explorando propriedades das árvores, e baseando-se em construções geométricas com régua e compasso. No entanto, esse algoritmo funciona apenas quando a quantidade de pontos é muito pequena, por ser de ordem exponencial. Devemos assinalar que persiste a afirmação da inexistência de construção geométrica para $n \geq 4$ pontos, dado o fato que o algoritmo de Melzak não ensina a escolher dentre as 2^{n-2} soluções geométricas possíveis qual a melhor. Ou seja, a melhor solução não pode ser construída inequivocamente com régua e compasso sem que todas as outras construções possíveis sejam feitas.

Em 1968, Gilbert e Pollak [3] cunharam definitivamente o termo "Árvore Mínima de Steiner" para o problema que relaciona a árvore dos pontos dados inicialmente e os pontos de Steiner, informalmente definidos acima. Com demonstração de algumas propriedades conhecidas até aquele momento, e espalhadas na literatura, sua revisão estimulou várias pesquisas nos anos seguintes, através de várias conjecturas interessantes. Foram também Gilbert e Pollak que popularizaram a *razão de Steiner*, um quociente entre o comprimento das Árvore Mínima de Steiner e o comprimento da Árvore Geradora Mínima, que trataremos nos próximos capítulos.

Nos anos seguintes, ainda no caso bidimensional, várias aplicações relacionadas ao Problema de Steiner surgiram, dando nova importância ao problema. Um dos exemplos mais notórios é o de planejamento de circuitos eletrônicos para rotas VLSI (*Very Large Scale Integrated*), que precisa usar uma definição de distância diferente da usual euclidiana, em que o ganho em performance em soluções ótimas é muito grande. Em Cieslik [4], e suas referências, podemos encontrar algumas outras aplicações interessantes em espaços métricos não necessariamente euclidianos.

Até 1992 nenhum algoritmo para tentar encontrar a SMT para o caso tridimen-

sional euclidiano era conhecido. Nesse ano, W. D. Smith [5] forneceu o primeiro algoritmo para tratar o problema tridimensional euclidiano que temos notícia, cuja performance, embora altamente insatisfatória mesmo para quantidade pequena de pontos, serviu de base para vários trabalhos que buscavam algoritmos heurísticos para o caso tridimensional e que, com devido aperfeiçoamento posteriormente explicado, será utilizado na presente tese como uma aplicação à Biologia Matemática.

McGregor Smith e W. Smith [6], ainda em 1995, fizeram uma famosa conjectura que chamaram "Main Conjecture" sobre uma configuração de pontos chamada de Sausage, a ser definida posteriormente, na qual a razão de Steiner no caso tridimensional teria um determinado valor, alcançado para um número infinito de pontos (diferente, portanto, do caso bidimensional), o qual seria obtido quando a configuração inicial dos pontos de entrada estivesse disposta em uma estrutura helicoidal, semelhante a uma molécula de DNA. Até o início do presente trabalho nenhum experimento computacional numérico havia questionado esse valor como referência para o caso tridimensional.

McGregor Smith [7, 8] apresentou várias propriedades que foram generalizadas do espaço euclidiano bidimensional para o tridimensional, e ainda metodologias algorítmicas que devido à novidade e potencialidade do problema de Steiner, podem ser utilizadas em diversas áreas de aplicações. E uma das aplicações mais interessantes é aquela relacionada ao Problema de Configuração de Energia Mínima, descrita em outros artigos, e enfatizada por McGregor Smith em [8, 9], que fornece boas idéias para o trabalho do Problema de Enovelamento de Proteínas e DNA, de grande importância para vários ramos das Ciências na atualidade, principalmente aquelas que buscam a produção de drogas para curas de doenças como Câncer e Aids.

Mondaini e colaboradores [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18] estudaram casos do problema de Fermat-Steiner generalizado em vários trabalhos, associando-o ao problema de aglomerados moleculares primitivos como evolução do problema de Fermat com n arestas densamente conectadas para o problema de Steiner com menor quantidade de arestas e estiramento desse aglomerado para minimização da energia do referido conjunto. Além disso, iniciaram o estudo de configurações específicas de pontos do espaço euclidiano \mathbb{R}^n , $n \geq 3$. O grupo liderado pelo Prof. Mondaini iniciou um estudo para a configuração de pontos de Steiner obtidos a

partir de hélice circular reta.

1.2 Motivação e Métodos do Trabalho

Existem duas questões básicas que motivaram este trabalho. Primeiro, várias tentativas foram feitas para encontrar ρ_d , $d \geq 3$, a razão de Steiner, que será definida no capítulo seguinte. No entanto, permanecia a ausência uma demonstração que comprovasse a conjectura de Smith e MacGregor Smith [6], embora todos os testes numéricos feitos até aquela data indicavam que esse valor é uma cota superior para o problema da razão de Steiner. Seria necessário, portanto, a busca de configurações de pontos que contribuíssem para um avanço no estudo da razão de Steiner, comprovando-a ou não. Ninguém então havia pensado em obter uma expressão analítica para a razão de Steiner euclidiana de uma configuração de pontos equidistantes ao longo de uma hélice circular reta.

Poucos trabalhos têm surgido para comprovar o quanto forte é, em termos matemáticos, a ligação entre as macromoléculas de interesse biológico com a razão de Steiner [8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]. Isso se deve ao fato, principalmente, dessas moléculas possuírem uma quantidade de átomos muito grande, dificultando o uso dos algoritmos atuais que tratam o problema no caso tridimensional, e cuja eficiência está limitada a cerca de 16 pontos (equivalentemente a 30 pontos de saída), enquanto das moléculas que são interessantes para um estudo mais aprofundado - e, talvez, mais conclusivo - estão na ordem de centenas ou milhares.

Devido aos fatos relatados acima, ou seja, à pouca pesquisa em configurações novas para teste do problema de Steiner que apresentassem uma razão de Steiner inferior ao da "Main Conjecture", ou seja, que desbancassem uma famosa conjectura da literatura a ser especificada, e também ao desconhecimento de uma expressão analítica para a função de razão de Steiner para certas conformações. Além disso, a pesquisa nesta área teve avanços muito pouco conclusivos devido à falta de um estudo mais aprofundado na relação entre a razão de Steiner e as macromoléculas

de interesse biológico (proteínas e ácidos nucléicos), e também pela quase inexistência de algoritmos que tratam o problema de Steiner para o caso tridimensional, a conjectura feita na literatura permaneceu inexpugnável. Esta tese faz um estudo do Problema de Árvore Mínima de Steiner Euclidiana, relacionando a função razão de Steiner ao Problema de Configuração de Energia Mínima de macromoléculas de interesse biológico e tenta avançar o conhecimento para além do que foi aceito até 1995.

Usamos a adaptação do algoritmo de W. Smith [5] pela escolha de uma determinada configuração de interesse para a Biologia Matemática, a saber, aquela em que os pontos de entrada estão sobre uma hélice circular reta. A escolha dessa topologia específica dos pontos da árvore de entrada tem uma razão, e está detalhadamente explicada nos capítulos 3 e 4, assim como alguns resultados alcançados com a adaptação desse algoritmo. O algoritmo de W. D. Smith foi transformado para reduzir seu espaço de busca àquela topologia. Este algoritmo encontra-se em um dos apêndices assim como os passos necessários para operá-lo nas facilidades computacionais da COPPE/PESC. Também, uma vez escolhida a topologia, fizemos uma modelagem teórica para os pontos da árvore obtida, e, em seguida, a comparação com a saída do programa de computador. Assim, estudamos uma famosa conjectura da literatura, ajudando na resposta de questões relacionadas a configurações ideais para a razão da Steiner no caso tridimensional e na relação desse fato com a estabilidade de proteínas e ácidos nucléicos. Alguns resultados intrigantes conseguidos na fase inicial do estudo estão relatados no capítulo 4. Detalhamos a base do programa utilizado no capítulo 3, com as alterações feitas no algoritmo original devidamente assinaladas.

1.3 Estrutura do Trabalho

No capítulo seguinte faremos revisão bibliográfica básica do problema de Steiner euclidiano para o \mathbb{R}^2 , mostrando a primeira solução detalhada do problema de Fermat, definições e propriedades que são prontamente estendidas para dimensões superiores, o algoritmo de Melzak, cuja adaptação deu origem a vários outros. Além disso, mostramos como foi o desencadeamento para a solução do problema da razão de Steiner no caso bidimensional.

No capítulo 3 tratamos, basicamente, o problema de Steiner para o caso euclidiano tridimensional, com a discussão de dois algoritmos básicos: o de Smith, e de MacGregor Smith [7, 8, 9]. A adaptação do primeiro algoritmo gerou um programa de computador apresentado no Anexo, e o segundo oferece a oportunidade do tratamento de uma forma alternativa do problema de Steiner, utilizando a sua formulação dual. Porém, mostramos porque o tratamento desse segundo caso é extremamente difícil quando visto apenas como um problema de otimização clássico, sendo, geralmente, resolvido apenas para um pequeno número de pontos no caso tridimensional. Além disso, apresentamos as cotas inferiores para o problema da razão de Steiner, que são válidos para espaços euclidianos de dimensões $d \geq 2$.

No capítulo 4 apresentamos alguns resultados conseguidos nesse trabalho. Aplicamos definições e propriedades dos capítulos anteriores para deduzir resultados com pontos regulares dados sobre a hélice circular reta. Inicialmente, mostramos o estudo computacional do qual os dados utilizados posteriormente na modelagem analítica foram originados. Na seqüência, apresentamos a modelagem analítica para os pontos de Steiner e justificativas para restringir uma função que obtivemos. Ao final deste capítulo são apresentadas algumas aplicações, com conclusões e possibilidades de novos trabalhos.

Capítulo 2

O Problema de Steiner no E^2

2.1 Introdução

Neste capítulo vamos descrever as principais propriedades do problema de Steiner euclidiano plano. Estas propriedades podem ser generalizadas para dimensões superiores a 2, sendo importantes nos algoritmos que descrevemos neste e no capítulo seguinte. Vamos introduzir o problema da razão de Steiner, algumas soluções para casos particulares e como o problema foi resolvido para o caso bidimensional.

2.2 O Problema de Fermat

O problema de Steiner para três pontos, também conhecido como problema de Torricelli-Fermat neste caso, é um bom exemplo de problema de minimização que combina geometria elementar e um princípio de minimização em sua solução. Ele foi proposto pela primeira vez no século XVII por Fermat (veja [1, 2, 3]) no fim do seu livro *Treatise on Minima and Maxima*, em que faz o seguinte questionamento:

Dados três pontos no plano, qual é o quarto ponto tal que a soma dos comprimentos de suas distâncias aos três pontos dados é mínima?

As figuras 2.1, 2.2 e 2.3 apresentam três formas alternativas de encontrarmos a solução para este problema, ou seja, o ponto de Steiner para um triângulo.

Na figura 2.1, dados três vértices A , B e C de um triângulo, temos três circunferências λ_1 , λ_2 e λ_3 , cada uma passando por vértices tomados dois a dois desse triângulo e pontos X_i , $i = 1, 2, 3$, em cada uma das circunferências formando

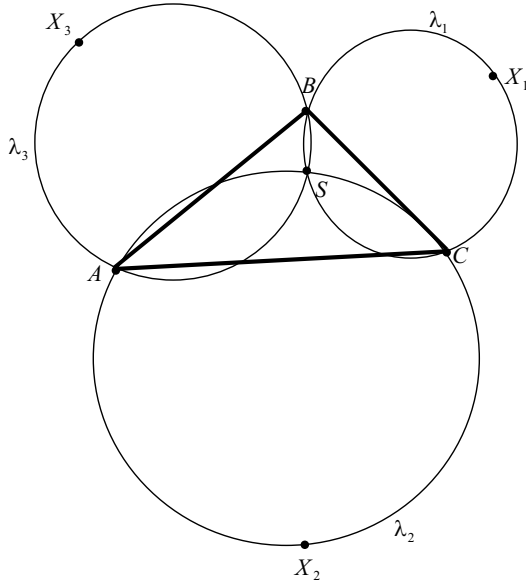


Figura 2.1: O ponto de Steiner como interseção de circunferências.

triângulos equiláteros com estes vértices. Estas circunferências se interceptam num ponto S interior ao triângulo ABC (sob certas condições para os ângulos internos desse triângulo), o ponto de Steiner.

Na figura 2.2, são mostrados três triângulos equiláteros determinados da mesma forma que a abordagem anterior, cujo segmento obtido pela união dos vértices X_i , $i = 1, 2, 3$, dos triângulos equiláteros com o vértice oposto do triângulo em questão, determina as chamadas linhas de Simpson. As três linhas têm exatamente o comprimento da árvore mínima de Steiner. A interseção das linhas de Simpson também determina a localização do ponto de Steiner.

A figura 2.3 mostra a conformação do problema dual consistindo da construção do triângulo equilátero circunscritível de altura máxima, passando pelos vértices dados (veja [4]). O primeiro método de solução do problema de Fermat apresentado acima foi descoberto por Torricelli em 1640, sendo por esta razão os círculos utilizados na construção conhecida como círculos de Torricelli. O segundo método foi descoberto por Simpson em 1750. Na realidade, redescoberto, pois um aluno de Torricelli chamado Viviani já havia encontrado tal solução. E o problema dual foi descoberto em 1846 por Fasbender, considerando que o ponto procurado deve estar sempre no interior do triângulo ABC dado.

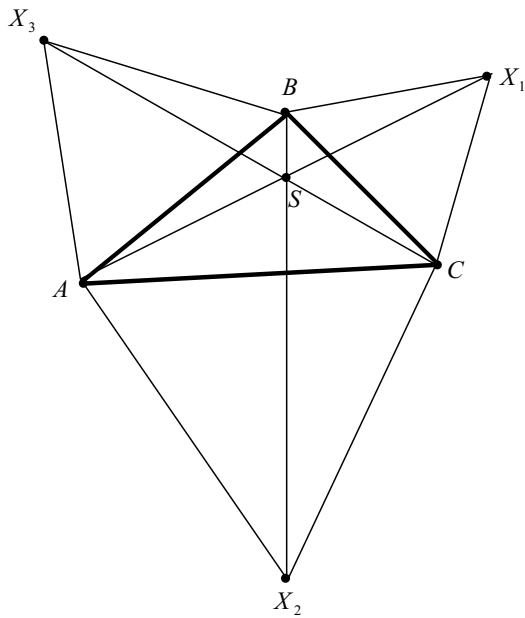


Figura 2.2: O ponto de Steiner como interseção das linhas de Simpson

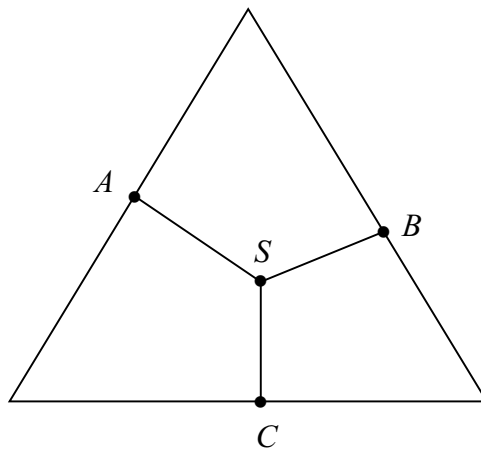


Figura 2.3: Vértices dados sobre os lados do triângulo equilátero de altura máxima

Ambos os métodos de Torricelli e Simpson resultam num ponto de Steiner somente se os ângulos internos do triângulo ABC forem menores que 120° . Se um dos ângulos internos do triângulo ABC for maior ou igual a 120° nenhum dos métodos funciona. Nesse caso, o método de Torricelli produz um ponto fora do triângulo ABC, e os segmentos determinados pelas linhas de Simpson não se interceptam.

Cerca de 84 anos depois, Heinen (veja [4, 19]) juntou todos esses fatos e propôs uma solução para o problema de Fermat. A seguir apresentamos essa demonstração.

Teorema 2.1 (Heinen - 1834) *Se um triângulo ABC tem um ângulo interno maior ou igual a 120° , então o ponto que minimiza a soma das distâncias aos três vértices coincidirá com aquele vértice que determina esse ângulo com os demais. Entretanto, se todos os ângulos internos do triângulo ABC forem menores que 120° então deve existir um ponto S, interior à região do triângulo ABC dado, ponto esse determinado pelos círculos de Torricelli, cuja distância do ponto S aos pontos A, B e C é mínima. Além disso,*

$$AS + BS + CS = AA' = BB' = CC' \tag{2.1}$$

onde AA' , BB' e CC' são as linhas de Simpson.

Demonstração. Vamos utilizar uma construção bastante simples para facilitar a prova da segunda parte do teorema, onde nenhum dos ângulos internos do triângulo ABC dado é maior ou igual 120° . Seja S qualquer ponto no plano do triângulo, conforme mostrado na figura 2.4, abaixo.

Com centro de rotação no ponto B, giramos o segmento BA no sentido anti-horário num ângulo de 60° até chegar a posição BC' , e semelhantemente giramos o segmento BS até BS' . Dessa forma são equiláteros os triângulos ABC' e BSS' .

Como a construção resulta em uma rotação do triângulo ABS de um ângulo de 60° ao redor do ponto B até a posição $C'S'$, vemos que $AS = C'S'$. Também temos que $BS = SS'$, e portanto

$$AS + BS + CS = C'S' + S'S + SC. \tag{2.2}$$

Então o problema de minimizar a soma do lado esquerdo da equação 2.2 resulta no problema de minimizar o lado direito, pela escolha da localização apropriada

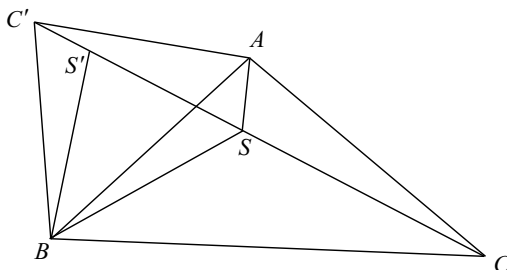


Figura 2.4: Todos os ângulos internos do triângulo ABC são menores que 120° .

para o ponto S . Notemos agora que o ponto C' , determinado somente pelo triângulo ABC é independente do ponto S . A soma do lado direito de (2.2) denota o caminho do ponto C' até o ponto C passando pelos pontos intermediários S' e S . Se pudermos fazer desse caminho uma linha reta, então o lado direito de (2.2) seria minimizado, assim como o comprimento do caminho de C' a C . Isto pode ser feito se o ponto S pudesse ser localizado de forma que cada um dos ângulos $\angle ASB$, $\angle ASC$ e $\angle BSC$ seja 120° . Neste caso temos

$$\angle C'S'B = \angle ASB = 120^\circ,$$

$$\angle C'S'B + \angle BS'S = 180^\circ = \angle BSS' + \angle BSC,$$

e portanto $C'S'SC$ é um segmento de linha reta.

Vamos agora mostrar que o ponto S pode realmente ser obtido de forma que os ângulos determinados em S pelos lados AB , AC e BC sejam 120° . Considere os círculos circunscritos aos triângulos equiláteros $C'AB$ e $A'BC$, conforme a figura 2.5 abaixo.

Estes círculos se interceptam no ponto B , obviamente, mas também em outro ponto, e este é o ponto S que minimiza o comprimento de $AS + BS + CS$. Como os quatro pontos C' , A , S , B estão no mesmo círculo, os ângulos opostos deste quadrilátero são suplementares, e portanto

$$\angle AC'B + \angle ASB = 180^\circ.$$

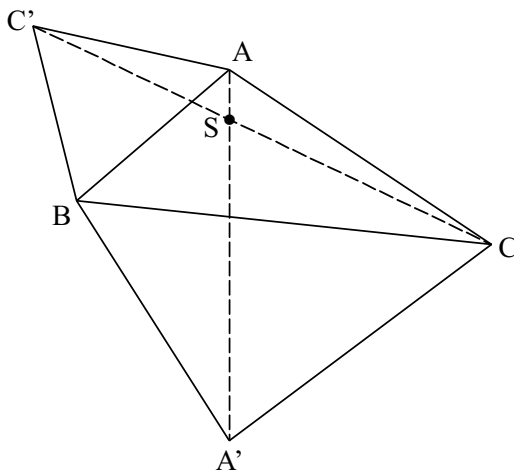


Figura 2.5: O ponto S é a interseção dos círculos de Torricelli.

Mas $\angle AC'B = 60^\circ$, então temos $\angle ASB = 120^\circ$, como queríamos. Similarmente os pontos A' , B , C e S estão num mesmo círculo e pelo mesmo argumento da construção anterior $\angle BSC = 120^\circ$. Segue que $\angle ASC = 120^\circ$, pois os três ângulos em S devem totalizar 360° .

Vamos provar agora a primeira parte do teorema. No caso de um dos ângulos do triângulo ABC , digamos $\angle ABC$, ser maior ou igual a 120° , a análise acima não é satisfatória. No caso que o ângulo $\angle ABC = 120^\circ$, por exemplo, os pontos C' , B e C são colineares. Isto sugere que a localização do ponto S é o ponto B . No caso em que $\angle ABC$ é maior que 120° , a construção usada acima não leva a uma solução do problema.

Recomeçaremos com uma construção diferente para ser analisada e utilizaremos um método análogo aos anteriores estudados, ou seja, através de rotação de segmentos específicos. Seja S qualquer ponto, que não seja o ponto B , no plano do triângulo ABC . Provaremos que $AB + BC < AS + BS + CS$, como afirmado pelo teorema. A figura 2.6 mostra o ponto C' escolhido na reta CB , ou na extensão do segmento BC para ser mais claro, de forma que $C'B = AB$. O ponto S' é escolhido de forma que o triângulo $C'S'B$ seja obtido por rotação no sentido anti-horário do triângulo ABS .

Logo vemos que

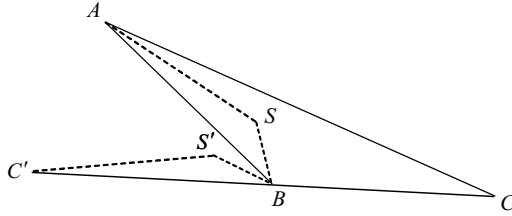


Figura 2.6: O ângulo $\angle ABC \geq 120^\circ$.

$$C'S' = AS,$$

$$\angle SBS' = \angle ABC' \leq 60^\circ$$

Segue que

$$BS \geq S'S,$$

$$AS + BS + CS \geq C'S' + S'S + SC$$

$$> C'C = AB + BC$$

pois não podem estar ambos S e S' sobre o segmento $C'C$ pela construção. Isto conclui a demonstração.

2.3 O Problema de Steiner Generalizado

Existem várias maneiras de generalizar o problema de Fermat para três pontos. A primeira delas é perguntando qual o ponto P cuja soma das distâncias de n pontos, com $n \geq 3$, P_1, P_2, \dots, P_n a esse ponto é mínima. No caso $n = 3$ é o caso que estudamos na seção anterior. Para o caso $n > 3$ resulta num problema não-linear que é possível determinar a sua solução teórica (veja [20, 21, 22]). Podemos ainda atribuir pesos às arestas que conectam os pontos P_n ao ponto P procurado. Não trataremos esses casos no presente trabalho.

Outra generalização para o problema de Fermat é considerar n pontos no plano (ou no espaço d -dimensional, $d \geq 2$) e perguntar qual é a menor árvore que interconecta esses pontos se pudermos acrescentar tantos pontos extras quanto quisermos, desde que esse acréscimo de pontos corresponda a uma diminuição no

comprimento total da árvore formada. Esse problema ficou conhecido na literatura como "Problema de Steiner", em homenagem ao célebre geômetra alemão Jacob Steiner, que lecionou na Universidade de Berlin no século XIX. Foram Courant e Robbins que nomearam dessa forma essa generalização do problema de Fermat no seu livro *What is Mathematics?* de 1941, que ajudou a divulgar o problema devido à popularidade deste, no entanto causando descontentamento em relação ao nome do problema. Alguns reclamam pela prioridade temporal para Fermat, que teria sido o primeiro a propor o problema; outros, que a generalização deveria lembrar Jarnik e Kössler, que em 1934 estudaram o problema de interconectar pontos no plano com comprimento mínimo, analisando o caso em que os n pontos são os vértices de um polígono regular. Mais especificamente, eles encontraram a árvore mais curta para $n = 3, 4, 5$ e mostraram que $n - 1$ lados do polígono regular de n lados constituem a árvore mais curta quando $n \geq 13$.

Neste momento, para finalizar, citaremos Kuhn [22]:

"Although this very gifted geometer (Steiner) of the 19th century can be counted among the dozens of mathematicians who have written on the subject, he does not seem to have contributed anything new, either to its formulation or its solution."

Utilizaremos a nomenclatura clássica, ou seja, o segundo problema da generalização do problema de Fermat descrito acima nesta seção será chamado de problema de Steiner, termo que foi cristalizado no trabalho de Gilbert e Pollak (veja [3]).

2.4 Algumas Definições

Uma topologia de uma árvore define quais pares de pontos devem ter conexões entre si, mas não as posições dos pontos de Steiner, os pontos adicionados à árvore para encurtá-la. Abaixo, na figura 2.7, são apresentadas duas topologias distintas de árvores de Steiner que possuem quatro pontos dados e dois pontos de Steiner.

Fixada uma topologia, uma árvore de Steiner é aquela que não pode ser encurtada por qualquer perturbação. Se uma árvore de Steiner pode ter seu comprimento diminuído pelo acréscimo de pontos de Steiner então ela é chamada de árvore relativamente mínima. Uma árvore mínima de Steiner, relativa àquela topologia, é

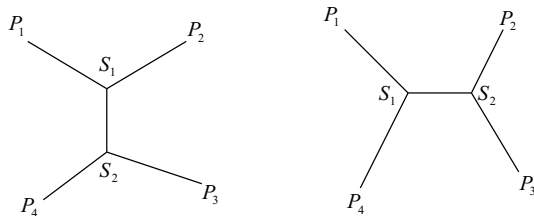


Figura 2.7: *Dois topologias de uma árvore de Steiner com quatro pontos dados.*

árvore de menor comprimento obtida. É importante notar que uma árvore mínima de Steiner é sempre uma árvore de Steiner, e que uma árvore de Steiner é sempre uma árvore mínima, relativamente àquela topologia. A árvore mínima de Steiner (global) é a árvore de Steiner obtida quando todas as possíveis topologias são analisadas. As árvores mínimas relativas possuem duas propriedades importantes: primeiro, existe, no máximo, uma árvore mínima referente à topologia escolhida e um conjunto de pontos dados; segundo, se existe uma árvore mínima relativa, existe um algoritmo para encontrá-la, com auxílio de propriedades elementares dessas árvores, que discutiremos na seção seguinte.

A árvore obtida pela conexão de todos os pontos dados, sem formação de ciclos, sem acréscimos de pontos de Steiner é chamada de árvore geradora mínima. Essa árvore é facilmente encontrada, sua complexidade computacional é de ordem polinomial, e existe um vasto número de algoritmos para obtê-la, sendo os mais conhecidos os algoritmos de Prim e de Kruskal (veja [23, 24]).

2.5 Propriedades das árvores de Steiner

Algumas propriedades do problema de Steiner no plano podem ser utilizadas como guia para generalizações em espaços de dimensões superiores e, em particular, no espaço tridimensional, que se caracterizará como espaço de interesse desse trabalho. Vamos destacar aquelas propriedades que são mais relevantes nas aplicações teóricas e práticas.

Antes, porém, de apresentar as propriedades das árvores de Steiner, mostraremos duas interpretações físicas e que são utilizadas para encontrar as posições dos pontos de Steiner para uma configuração relativamente pequena de pontos regulares, os pontos dados.

A primeira delas é como um sistema mecânico em que a energia potencial está relacionada com a soma das distâncias entre os vértices adjacentes, e o equilíbrio estável é obtido quando a árvore tem um comprimento mínimo relativo. Podemos pensar nesse sistema como n pontos fixos, seguros por fios elásticos de tensões unitárias constantes não importando o quanto são esticados, e com outros k pontos de Steiner podendo mover-se livremente.

A outra interpretação é uma que envolve uma película de sabão entre planos paralelos separados por palitos em P_1, P_2, \dots, P_n , veja figura 2.8. Como a película pode mudar sua topologia por separação, a árvore de equilíbrio é a árvore de Steiner. Existem outros modelos físicos para conseguir árvores de Steiner, mas surgem dificuldades na sua aplicação, dentre as quais podemos destacar: não produzir uma *SMT*; consumir um tempo muito grande para a construção de modelos grandes; podem aparecer erros mecânicos em modelos com grande número de pontos (veja [19, 25, 26, 27]).

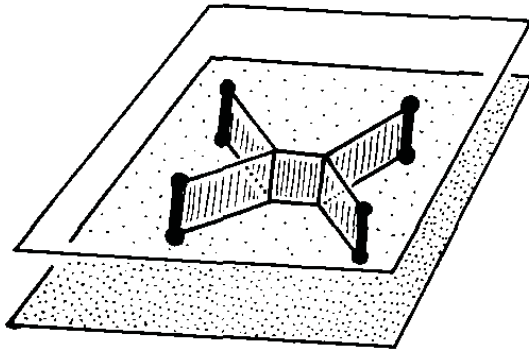


Figura 2.8: *Solução do problema de Steiner por bolha de sabão.*

As propriedades mais utilizadas são as seguintes: (veja [19])

A. Sobre ângulos e arestas na árvore de Steiner

Proposição 2.1 *i) Numa árvore de Steiner, nenhum par de arestas se encontra com um ângulo menor que 120° .*

ii) Duas arestas de uma árvore de Steiner não se interceptam mais - não há "loops".

iii) Cada ponto de Steiner possui exatamente três arestas incidentes, e o ângulo entre quaisquer dois desses segmentos é exatamente 120° .

Demonstração. Vamos mostrar o item *i*, pois os dois outros são conseqüências imediatas dele. Seja S um ponto de Steiner tal que duas arestas da árvore de Steiner se encontram nesse ponto formando um ângulo menor que 120° . Sejam A e B dois pontos sobre estas arestas tal que o comprimento AS é igual ao comprimento de BS , conforme a figura 2.9, abaixo.

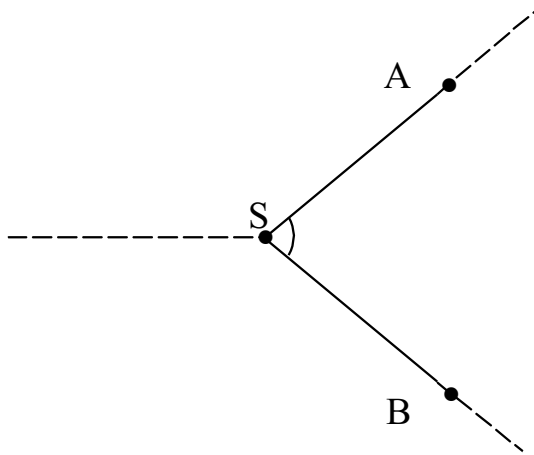


Figura 2.9: O ângulo ASB tem medida inferior que 120° na árvore de Steiner.

Seja S' o ponto de interseção para as três linhas de Simpson para o triângulo ABS . Na árvore de Steiner, se trocarmos AS e BS pelos três segmentos AS' , BS' e SS' então obtemos uma árvore com um comprimento menor ainda, conforme a figura 2.10, abaixo. Essa contradição mostra que o ângulo entre duas arestas quaisquer numa árvore de Steiner é, no mínimo, 120° .

B. Sobre o número de pontos de Steiner

Cada árvore de Steiner tem um número a mais de pontos do que o número de arestas. Seja uma árvore com n pontos regulares P_1, P_2, \dots, P_n , e k pontos de Steiner, logo o número de arestas desta árvore deve ser $n + k - 1$. Como cada aresta tem duas extremidades, obtemos $2(n + k - 1)$ arestas incidentes pela soma em todos os vértices do número de arestas incidentes. Se n_m dos vértices P_i possuem m arestas incidentes ($\sum_m n_m = n$), essa soma será [3]

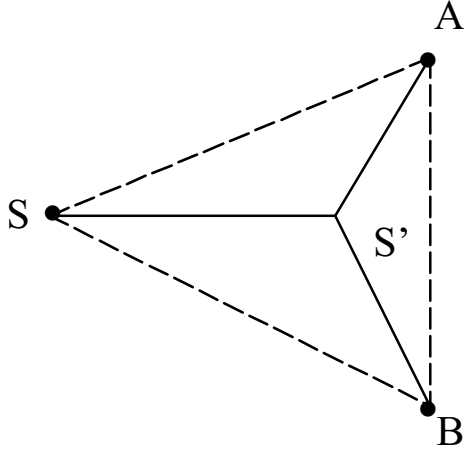


Figura 2.10: O Ponto S' encurta o comprimento da árvore de Steiner.

$$3k + \sum_m mn_m = 2(n + k - 1) = 2k - 2 + 2 \sum_m n_m,$$

então

$$k = n_1 - 2 - n_3 - 2n_4 - \dots$$

Em particular,

$$k \leq n - 2,$$

com a igualdade valendo se, e somente se, P_i possuir uma única aresta incidente.

C. Envoltória convexa dos pontos de Steiner

Vamos mostrar a seguir que numa árvore com mínimo relativo, todos os pontos de Steiner estão dentro de uma envoltória convexa. Uma *envoltória de Steiner* para um dado conjunto de n pontos é definido como sendo a região que sabemos conter uma árvore mínima de Steiner. Uma vez conhecida a envoltória de Steiner, podemos confinar suas computações dentro da área dada. Portanto, quanto menor for uma envoltória de Steiner, menor esforço computacional será dispendido. Os dois lemas abaixo nos dão algumas ferramentas para restringir as árvores mínimas de Steiner.

Lema 2.1 (Propriedade Lunar [3]). *Seja UV qualquer aresta de uma árvore mínima de Steiner. Seja $L(U, V)$ a região consistindo de todos os pontos P satisfazendo*

$$PU < UV, PV < UV,$$

onde $L(U, V)$ é uma interseção de formato lunar de círculos de raios do comprimento de UV , centrados nos pontos U e V . Então nenhum outro vértice da árvore mínima de Steiner pode estar em $L(U, V)$.

Demonstração. Se Q fosse um desses vértices, a árvore mínima de Steiner deveria conter ou um caminho de Q para U não contendo V , ou vice-versa. No último caso, por exemplo, a árvore mínima de Steiner pode ser encurtada pela retirada da aresta UV e pela adição da aresta QV , uma contradição (veja a figura 2.11, abaixo).

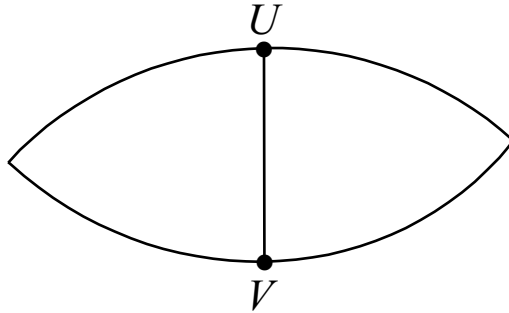


Figura 2.11: Exemplo de uma lúnula $L(U < V)$.

Lema 2.2 (Propriedade da fatia [3]) *Seja W qualquer região aberta com formato de fatia, tendo um ângulo igual ou superior a 120° e não contendo nenhum dos pontos regulares. Então W não contém pontos de Steiner.*

Demonstração. Sem perda de generalidade, suponhamos que W englobe a região angular de -60° a 60° , conforme a figura 2.12, abaixo.

Suponhamos que existam pontos de Steiner nessa região, dos quais o ponto S é aquele com maior abscissa. Das três arestas incidentes em S , uma o deixa na direção $\pm 60^\circ$ do eixo positivo. Esta não pode sair de W e, portanto, não pode acabar num ponto regular. Além disso, esse final teria uma coordenada x maior que a de S , uma contradição.

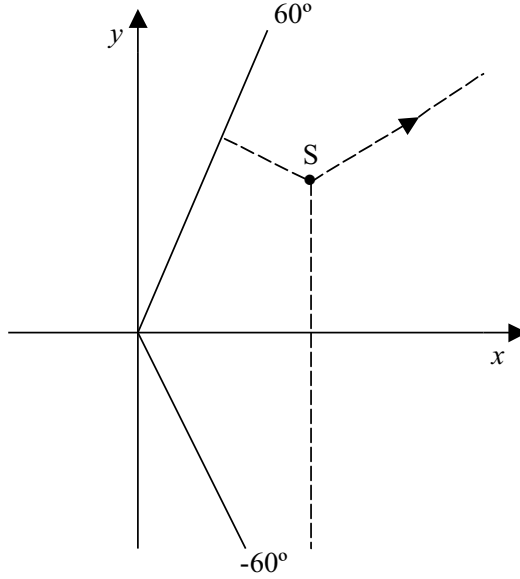


Figura 2.12: *Região em formato de fatia*

Corolário 2.1 (Envoltória convexa [3]) *A envoltória convexa dos pontos regulares é uma envoltória de Steiner.*

Demonstração. Cada reta suporte da envoltória convexa dos pontos regulares define uma fatia de 180° livre de pontos regulares.

C. Teorema de Maxwell para árvores de Steiner

Lema 2.3 *Se tomarmos vetores unitários para fora de uma árvore mínima relativa nas direções de cada uma das arestas incidentes em A_1, A_2, \dots, A_n com F_i denotando a soma das forças unitárias em A_i . Em termos mecânicos F_i é a força externa necessária em A_i para manter a árvore em equilíbrio. O comprimento L da árvore é dado pela fórmula [3]*

$$L = \sum_{i=1}^n A_i \cdot F_i. \quad (2.3)$$

(Aqui qualquer origem conveniente pode ser usada para medir os vetores posição A_i .)

Demonstração. Para provar (2.3), devemos construir um vetor unitário de força f_k apontando para fora de cada ponto A_k , considerando todas as arestas da

árvore. Como existem $n + s - 1$ arestas, devem existir $2(n + s - 1)$ vetores para traçar. Depois, consideramos uma soma de produtos internos definidos por

$$T = \sum P_k \cdot f_k,$$

onde a soma é estendida a todos os $2(n + s - 1)$ pontos das arestas. Os termos de T podem ser agrupados de duas maneiras. Primeiro, podemos combinar termos para os quais P_k é o mesmo ponto. Cada ponto de Steiner aparece em três termos de T . A contribuição de um ponto de Steiner S para T é zero porque as três forças em S estão em equilíbrio. A contribuição de um dado ponto A_i para T é $A_k \cdot F_k$. Então T é o lado direito de (2.3). No segundo agrupamento, combinamos os dois termos associados com as duas extremidades de cada aresta. Se P_1P_2 é uma aresta de comprimento L_{12} então

$$P_2 = P_1 + L_{12}\vec{u},$$

onde \vec{u} é um vetor unitário. Os termos para esta aresta contribuem $P_1 \cdot (-\vec{u}) + P_2 \cdot \vec{u} = L_{12}$. Então T é também o lado esquerdo de (2.3).

2.6 O Algoritmo de Melzak

O primeiro algoritmo para a resolução do problema de Steiner euclidiano plano em um número finito de passos foi proposto por Melzak (veja [2]), constituindo uma generalização do método para encontrar o ponto de Steiner dados três pontos. Esse algoritmo encontra todas as árvores mínimas de Steiner possíveis e escolhe aquela que possuir o menor comprimento. Vários outros algoritmos surgiram da adaptação ou melhoramento do algoritmo de Melzak (veja [28, 29, 30, 31, 32, 33]).

O algoritmo de Melzak consiste numa fase de combinação dos pontos, em que a árvore original será reduzida a dois pontos apenas, e uma outra fase de reconstrução em que são obtidos os pontos de Steiner na árvore original. Vamos explicar as duas fases desse algoritmo, ilustrando com um exemplo de cinco pontos regulares.

Durante a fase de combinação, conforme já foi dito, reduziremos o número de pontos regulares a dois pontos (não necessariamente regulares) pelo processo que explicaremos a seguir. Para fixar as idéias tomaremos uma topologia F como referência. Dizemos que dois pontos são vizinhos se estão conectados a um mesmo ponto de Steiner nessa topologia, ou seja, são adjacentes a este ponto de Steiner.

Um ponto E_{ij} é chamado de ponto *equilátero*, referente a uma aresta A_iA_j de uma árvore (veja as figuras 2.13 e 2.14 para as duas últimas definições).

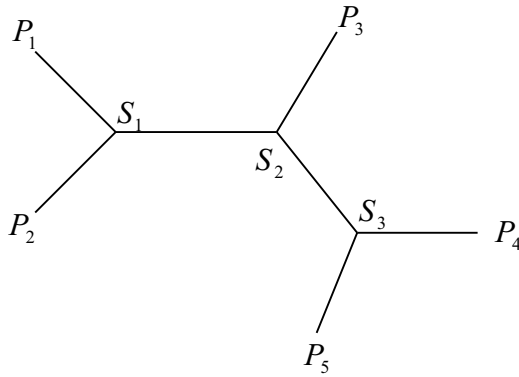


Figura 2.13: *Os pares de pontos (P_1, P_2) e (P_4, P_5) são vizinhos; P_3 não é vizinho de nenhum ponto regular*

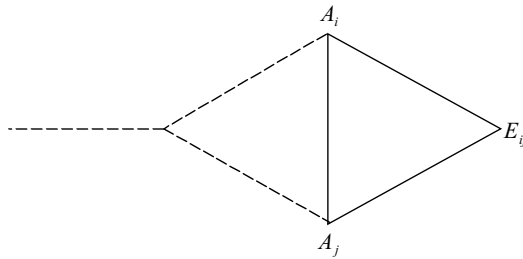


Figura 2.14: *E_{ij} é um ponto equilátero, pois o triângulo $A_iE_{ij}A_j$ é equilátero*

A cada passo do estágio de combinação dois pontos vizinhos são substituídos por um ponto equilátero. Pela figura 2.14 podemos observar que existem dois pontos equiláteros para cada par de pontos A_iA_j . Retiramos A_i e A_j da lista de pontos existentes na árvore e acrescentamos os pontos equiláteros E_{ij} , um por vez. A fase de reconstrução termina quando houver apenas dois pontos restantes.

A fase de reconstrução começa pela junção dos dois pontos que sobraram pela linha de Simpson para a configuração de n pontos regulares. O segmento determinado por linha de Simpson tem a mesma propriedade descrita para três pontos no teorema 2.1, ou seja, é exatamente o comprimento da árvore mínima de Steiner nessa topologia (veja [19]). A árvore inicial é mudada de T para T' no estágio de reconstrução através da substituição de uma aresta de T , que possui um ponto

equilátero por um ponto de Steiner e seus dois pontos adjacentes, conforme a figura 2.15.

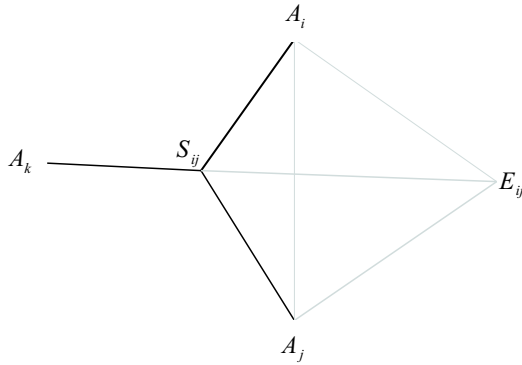


Figura 2.15: E_{ij} é substituído por A_i , A_j e S_{ij}

Destacamos novamente o fato dos A_i e A_j não serem necessariamente pontos regulares. Neste caso, possivelmente serão pontos equiláteros. Se o arco $A_i A_j$ não tiver interseção com o segmento $A_k E_{ij}$ então o estágio de reconstrução deve terminar, e concluímos que não existe árvore de Steiner cheia para a topologia F . O estágio de reconstrução segue enquanto houver algum ponto regular fora da árvore considerada ou até que não exista uma interseção conforme descrito acima.

Vamos agora exemplificar o algoritmo de Melzak com uma árvore que possui cinco pontos regulares. Procedemos da seguinte maneira: agrupamos P_1 e P_2 e geramos o ponto equilátero E_{12} (obviamente existe outro ponto equilátero E'_{12} , mas existem critérios para que seja tomado o ponto equilátero adequado). Depois agrupamos os pontos P_3 e P_4 , dando origem ao ponto equilátero E_{34} . Finalmente, agrupamos os pontos equiláteros E_{12} e E_{34} num único ponto equilátero E_{1234} . Todos esses passos pedidos acima são mostrados na figura 2.16, onde, além da configuração inicial, podemos também observar a linha de Simpson da árvore considerada, o segmento ligando os pontos E_{1234} e P_5 . O comprimento da árvore de Steiner nessa topologia é igual ao comprimento desse segmento, como verificaremos a seguir. Finalizamos dessa forma a primeira fase, a combinação dos pontos regulares da árvore.

Agora passemos à fase de reconstrução. Vamos começar substituindo o ponto E_{1234} pelo primeiro ponto de Steiner, que chamaremos aqui de S_1 , também pelos

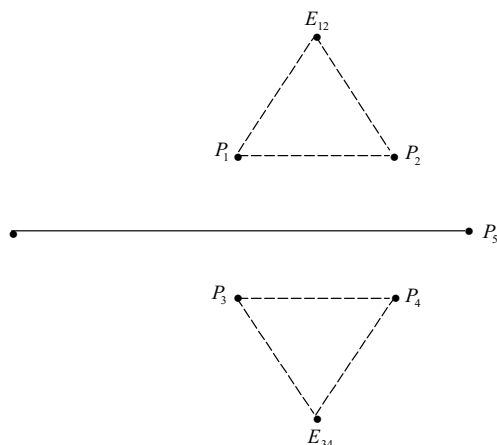


Figura 2.16: *Exemplo da 1ª. fase do algoritmo de Melzak*

pontos equiláteros E_{12} e E_{34} , como está sendo mostrado na figura 2.17, abaixo.

Em seguida, devemos substituir o ponto E_{12} por P_1 , P_2 e S_2 , e o ponto E_{34} por P_3 , P_4 e S_3 . O ponto de Steiner S_1 , que agora já pertence à T , está conectado com E_{12} . A interseção do segmento $E_{12}S_1$ com o círculo circunscrito ao triângulo $P_1P_2E_{12}$ gerará o ponto S_2 . Da mesma forma o segmento $E_{34}S_1$ e o círculo circunscrito ao triângulo $P_3P_4E_{34}$ determinará o ponto de Steiner S_3 , conforme a figura 2.18.

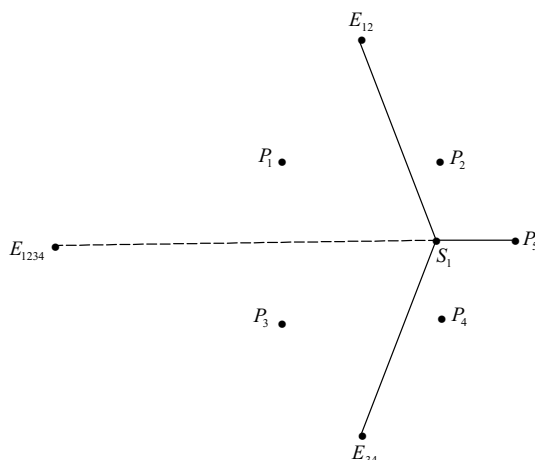


Figura 2.17: *O ponto equilátero E_{1234} é substituído por E_{12} , E_{34} e S_1 .*

Para verificar o comprimento da linha de Simpson é, realmente, dada pelo comprimento da árvore de Steiner obtida, notemos que

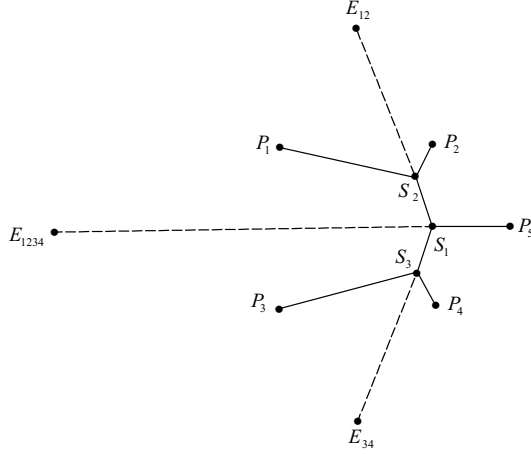


Figura 2.18: A árvore de Steiner resultante após a fase de reconstrução.

$$E_{1234}P_5 = E_{12}S_1 + E_{34}S_1 + S_1P_5. \quad (2.4)$$

Mas,

$$E_{12}S_1 = P_1S_2 + P_2S_2 + S_2S_1 \quad (2.5)$$

e

$$E_{34}S_1 = P_3S_3 + P_4S_3 + S_3S_1. \quad (2.6)$$

Se substituirmos as equações (2.5) e (2.6) na equação (2.4), obtemos

$$E_{1234}P_5 = P_1S_2 + P_2S_2 + S_2S_1 + P_3S_3 + P_4S_3 + S_3S_1 + S_1P_5. \quad (2.7)$$

Portanto, o comprimento da linha de Simpson (generalizada para n pontos) tem o mesmo comprimento da árvore de Steiner.

Para que tenhamos certeza que encontramos a menor árvore de Steiner, devemos verificar todas as topologias, o que é inviável para uma árvore com grande número de pontos regulares.

2.7 A Razão de Steiner no E^2

Nesta seção vamos discutir a razão de Steiner no caso particular em que a dimensão d do espaço euclidiano em questão é 2, mas definiremos a caso d -dimensional para uso e referência posterior.

Seja $l(SMT(V))$ o comprimento da árvore mínima de Steiner euclidiana para um conjunto V de pontos em E^d ; $l(MST(V))$ o comprimento da árvore mínima geradora para esse mesmo conjunto V de pontos no espaço euclidiano E^d , então

ρ_d é a menor razão de Steiner dentre todos os conjuntos V na dimensão d , isto é,

$$\rho_d = \inf_{V \subseteq \mathbb{R}^d} \rho(V),$$

onde $\rho(V) = \frac{l(SMT(V))}{l(MST(V))}$.

Claramente, a razão de Steiner ρ_d é, no máximo, igual a um. Daqui em diante chamaremos de ρ apenas, pois o contexto que estamos interessados neste trabalho será o espaço euclidiano tridimensional.

Existem duas maneiras mais imediatas de interpretação da razão de Steiner. A primeira é o conhecimento do quanto podemos ganhar ao substituir a árvore mínima geradora pela árvore mínima de Steiner. Como a complexidade computacional para encontrar a árvore mínima de Steiner é muito grande, pode ser mais adequado continuar com a árvore mínima geradora, cuja complexidade é polinomial no pior caso. Simplificadamente, essa comparação pode ser feita pela observação do fato que a razão de Steiner é equivalente a seguinte igualdade

$$l(SMT(V)) = \rho \cdot l(MST(V)),$$

fixadas as topologias e o número de pontos. Assim, podemos dizer que ρ representa o decréscimo máximo possível no comprimento da MST , através de pontos de Steiner.

A outra interpretação interessante para a razão de Steiner é a relacionada à de uma configuração de energia mínima. Sabemos que a energia potencial de um sistema será mínima se este estiver em equilíbrio, sendo chamado de *estável* quando sua função potencial não puder ser melhorada para atingir um valor de mínimo ainda inferior ao conseguido. Neste caso, dizemos que o sistema atingiu

um estado de energia mínima global. No entanto, o sistema pode estar em equilíbrio instável quando a função energia do sistema alcançar um valor menor. Neste caso, dizemos que o sistema está num mínimo relativo. A conexão que existe entre a razão de Steiner e a configuração de energia mínima é que *, possivelmente, quanto mais próximo da unidade for a razão de Steiner de certos agregados protéicos, mais estáveis estariam essas determinadas moléculas, ou trechos destas. Ou seja, ao aumento da razão de Steiner corresponderia à diminuição da energia potencial da configuração. Assim, algumas macromoléculas de interesse biológico, como as proteínas, que representariam configurações estáveis, estariam com seus átomos numa configuração dada por árvores de Steiner, ou seja, a razão de Steiner de sua configuração seria aproximadamente igual à unidade, o que representaria um valor de equilíbrio estável.

Antes de sua recente solução, a razão de Steiner para a métrica euclidiana no \mathbb{R}^2 era problema aberto famoso. Em 1968, Gilbert e Pollak observaram que a razão de Steiner era $\frac{\sqrt{3}}{2}$ para os vértices de um triângulo equilátero e conjecturaram que nenhum conjunto de pontos no plano alcançava uma razão de Steiner inferior. Por vários anos, pesquisadores avançaram em direção à demonstração de duas maneiras: pelo estudo de conjuntos arbitrários, mas com um número fixo de pontos, para $n = 3, 4, 5, 6$ (veja [3, 34, 35, 36], respectivamente); e por outra linha de raciocínio, levantando o limite inferior para a razão de Steiner para conjuntos arbitrários de pontos, com $\rho \geq 0.5, \rho \geq 0.57, \rho \geq 0.74, \rho \geq 0.80, \rho \geq 0.824$ (veja [3, 37, 38, 39, 40], respectivamente). Finalmente, cerca de vinte e dois anos após conjecturado por Gilbert e Pollak, Du e Hwang anunciaram (veja [41]) uma prova da conjectura (veja [42]):

$$\rho_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

Demonstrações mais detalhadas podem ser encontradas em dois outros artigos dos mesmos autores (veja [43, 44]). Em sua demonstração incorporaram algumas idéias de Rubinstein e Thomas (veja [36, 45, 46]).

Para o caso tridimensional, no entanto, a generalização de Gilbert e Pollak se mostrou falsa. Smith e Du (veja [47]) mostraram que a razão de Steiner para o d -simplex, que era a configuração imaginada por Gilbert e Pollak como a que

*Por modelagem computacional, não conclusiva, pois foram usadas apenas duas proteínas e um algoritmo que não conseguia trabalhar na molécula inteira, conforme [9].

deveria possuir a menor razão de Steiner, não era a que apresentava a menor razão Steiner para o caso d -dimensional, $d \geq 3$. Eles mostraram que uma configuração que chamaram de d -sausage apresentava valores ainda menores que os do d -simplex, e desta constatação, conjecturaram que a configuração da d -sausage seria a que apresentava a menor razão de Steiner em todas as dimensões, com $d \geq 3$.

Capítulo 3

O Problema de Steiner no E^d , $d \geq 3$

3.1 Introdução

Neste capítulo revisaremos o problema da Razão de Steiner para o espaço euclidiano E^d , $d \geq 3$, enfatizando principalmente o espaço E^3 . A transição do problema de Steiner euclidiano bidimensional para o tridimensional não acontece de forma simples. Algumas propriedades importantes da *SMT* descritas no capítulo 2 deste trabalho são perdidas, enquanto outras mantêm suas características. Uma das questões mais difíceis no desenvolvimento de um algoritmo exato para o problema de Steiner euclidiano tridimensional surge em decorrência de sua complexidade computacional: Smith mostrou que, mesmo para quatro pontos é necessário um algoritmo que encontre a solução de uma equação algébrica do oitavo grau, com isso justificando a necessidade de métodos iterativos para a sua solução.

Apresentaremos inicialmente dois algoritmos utilizados para a solução do problema da árvore de Steiner, o primeiro tendo sido elaborado por W. D. Smith, e o segundo por J. MacGregor Smith. A razão pelo qual escolhemos apresentar neste capítulo estes dois algoritmos foi pela generalidade do algoritmo de Smith, uma vez que é utilizado não só para o caso em que o espaço em questão é $d = 3$, mas para dimensões superiores. Além disso, esse algoritmo é base para o programa Apolonio, obtido a partir de algumas modificações necessárias no código original para um melhor desempenho em aplicações de caráter biológico, utilizado na fase inicial desta trabalho, e que explicado com grande detalhe na última seção desta capítulo. Já o algoritmo de MacGregor Smith foi escolhido por oferecer uma boa oportunidade de compreensão geométrica dos cálculos para encontrar os círculos

de Melzak no E^3 , uma generalização dos fatos discutidos com bastante detalhe no capítulo anterior. Também é uma oportunidade de compreendermos porque os métodos clássicos de otimização são falhos para o tratamento do problema de Steiner nessa sua versão dual.

Também apresentaremos a d -sausage e algumas de suas propriedades fundamentais, assim como as principais conjecturas a ela relacionadas. Embora essas propriedades sejam válidas para $d \geq 3$, em geral, estamos preocupados com estudo da 3-sausage, cujos resultados principais desempenharão papel importante no capítulo seguinte.

Além dos tópicos assinalados acima, discutiremos algumas cotas inferiores para o problema da razão de Steiner no espaço E^d , com $d \geq 2$. Deixamos para inserir neste capítulo essas demonstrações devido ao caráter geral das demonstrações, isto é, valem não só para o espaço euclidiano bidimensional, mas para $d > 2$.

3.2 Algoritmos para o Problema de Steiner Euclidiano no \mathbb{R}^d , $d \geq 3$

3.2.1 O algoritmo de Smith

Alguns fatos foram observados por Smith [5] que muito diferenciam o desenvolvimento de um algoritmo para o problema de Steiner no E^2 e de um no E^3 . A principal constatação é que algoritmos que utilizam técnicas geométricas não podem ser sempre transferidos do E^2 para o E^3 .

Além disso, mesmo para quatro pontos no espaço (o que já era do conhecimento de Gilbert e Pollak [3]) e como foi dito acima, é necessário encontrar as raízes de uma equação do oitavo grau para que se tenha as coordenadas dos pontos de Steiner e, conseqüentemente, o comprimento da árvore mínima de Steiner. Para demonstrar esse fato, a prova foi dividida em duas partes. Inicialmente, mostrou que o comprimento da árvore mínima de Steiner é igual ao comprimento do segmento ligando os dois círculos de Melzak. Depois, utilizando o método do círculo-distância, descrito por [48], ajustando vários cálculos e simplificando o resultado, mostrou que teria como resultado uma equação polinomial de uma variável, de grau oito irreduzível sobre o corpo dos racionais. Assim, o problema de Steiner envolvendo n pontos seria resolvido com a solução de uma equação algébrica de, no mínimo,

grau 8. Devido a isto conjecturou que

"Existe uma seqüência S_n de conjuntos de n pontos no \mathbb{R}^3 , tal que para qualquer inteiro positivo C existe um valor n_C tal que se $n > n_C$, então o comprimento da SMT do conjunto S_n não pode ser encontrado pela solução de qualquer seqüência de equações de grau C ".

Desse fato, e por não existir até então um algoritmo como o Melzak no \mathbb{R}^2 com a convergência garantida em um número finito de iterações que pudesse ser generalizado para dimensões superiores, surgiu a necessidade de um processo de convergência infinita. Além disso, os problemas no \mathbb{R}^2 apresentam um grande número de árvores com degenerescências, enquanto que no \mathbb{R}^3 , e dimensões superiores, geralmente, temos uma única árvore cheia para a SMT procurada [5].

A primeira observação a respeito desse algoritmo é que ele só procura por topologias cheias, em contraste com a grande maioria dos algoritmos que, além destas, procuram as que possuem degenerescências, pois não sabem lidar com o caso em que as segundas são tratadas como um subconjunto particular da primeira em que certos pontos de Steiner coincidem com os pontos regulares. No entanto, apesar dessa simplificação enorme no espaço de busca das soluções, o número de árvores cheias ainda é exponencial em n .

Existem dois métodos básicos para a construção de árvores de Steiner a partir de um conjunto de pontos dados num espaço euclidiano e com uma topologia pré-especificada num processo iterativo que descrito por Smith. O primeiro método consiste num processo simples iterativo que nunca aumenta o comprimento da árvore e é: tome algum ponto candidato a ponto de Steiner na árvore (como por exemplo o baricentro de 3 pontos) e o substitua com o ponto de Steiner ótimo de seus vizinhos. Esta forma de iteração sempre convergirá para o único ótimo (se todos os pontos de Steiner forem repetidamente percorridos e otimizados). Infelizmente, a convergência pode ser muito lenta, essencialmente porque a "informação" pode levar muito tempo para se "propagar" ao longo da árvore. (A árvore torna-se rapidamente "localmente" ótima, mas o conhecimento da estrutura "global" não se acentua com isso, sendo mesmo bastante irrelevante). O segundo método, por sua vez, tem a preferência de buscar uma forma de iteração onde, em cada passo, todos os pontos de Steiner fossem atualizados simultaneamente e compativelmente.

Smith desenvolveu um método iterativo, com o intuito de tratar o problema geral euclidiano para qualquer dimensão d , apresentando as coordenadas dos pontos de Steiner em qualquer dimensão, utilizando uma topologia pré-especificada, a qual não é necessariamente cheia ou degenerada. Ele poderia ter usado a idéia mais simples que não altera o custo (comprimento) da árvore, tomando cada ponto da árvore de Steiner, colocado em posição ótima em relação aos dois pontos mais próximos, conforme descrito anteriormente. Esse processo deve ser continuado até que não exista mais nenhum ângulo com mais de 120° . No entanto, o método utilizado por Smith foi uma versão melhorada deste procedimento. Em vez de trabalhar com um processo de otimização local, ele preferiu trabalhar com o segundo processo descrito, o qual altera todos os pontos de forma simultânea e compatível. Essa forma de otimização tem se mostrado mais eficiente do que a otimização ponto a ponto, contrastante com o caso $d = 2$, devido às peculiaridades do problema bidimensional.

Duas observações apontam para a superioridade do segundo método. Primeiro, depois de apenas um único passo de iteração simultânea (começando em qualquer lugar), todos os pontos de Steiner estarão automaticamente dentro da envoltória convexa formada pelos pontos regulares (enquanto, talvez, um número muito grande de passos da iteração ponto-a-ponto deverá ser preciso para assegurar isto para uma configuração desfavorável), e realmente irá formar uma árvore bastante razoável pois eles (os pontos de Steiner) minimizarão exatamente uma função que é relacionada ao comprimento. Segundo, na prática, tipicamente as iterações simultâneas convergem mais rapidamente que várias variantes do método ponto-a-ponto. Em todas as dimensões maiores que dois, a vantagem foi aproximadamente na razão de $\frac{n}{2}$, onde n foi o número de pontos regulares, e uma performance de razão maior ainda surgiu quando apenas baixa acurácia foi requerida. Em duas dimensões, contudo, os métodos geralmente usaram cerca da mesma quantidade de tempo! Presumivelmente isto aconteceu porque a maior parte das árvores bidimensionais otimizadas pode ser particionadas em árvores de Steiner cheias menores, de forma que a informação não necessite "viajar longas distâncias" para obter convergência.

O processo de otimização dos pontos de Steiner pode ser definido matematicamente da seguinte maneira: o conjunto dos pontos de Steiner é \mathcal{S} , \mathcal{N} é o con-

junto dos pontos regulares (pontos terminais inicialmente dados), T é a topologia da árvore e d é a dimensão do espaço euclidiano em questão. O vetor posição d -dimensional do j -ésimo ponto externo é denotado por \vec{r}_j onde $j = 1, 2, \dots, n$ e do k -ésimo ponto de Steiner por \vec{r}_k onde $k = n + 1, n + 2, \dots, 2n - 2$. O algoritmo de otimização a ser descrito, pode ser resumido no teorema:

Teorema 3.1 *Se, no i -ésimo passo do processo de iteração, $i = 0, 1, \dots$, resolvermos o seguinte sistema com $n - 2$ equações lineares:*

$$\vec{r}_k^{(i+1)} \approx \frac{\sum_{j, jk \in T} \frac{\vec{r}_j^{(i+1)}}{\|\vec{r}_j^{(i)} - \vec{r}_k^{(i)}\|}}{\sum_{j, jk \in T} \frac{1}{\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|}}, \quad n + 1 \leq k \leq 2n - 2. \quad (3.1)$$

Então, a partir de todas as escolhas iniciais das coordenadas dos pontos de Steiner $\vec{r}_k^{(0)}$'s, exceto para um conjunto de medida nula em $\mathbb{R}^{(n-2)d}$, a iteração converge para as únicas coordenadas ótimas dos pontos de Steiner que minimizam L , o comprimento total da árvore. Esta convergência acontece de tal forma que a seqüência dos comprimentos das árvores $L(S(i))$ é monotonicamente decrescente, onde

$$L(\vec{r}_{n+1}, \vec{r}_{n+2}, \dots, \vec{r}_{2n-2}) = \sum_{j, k, 1 \leq j < k \leq 2n-2} \|\vec{r}_j - \vec{r}_k\|.$$

Demonstração. Inicialmente, é prontamente visto que, após a primeira iteração, todos os pontos de Steiner estão dentro de uma envoltória convexa dos pontos regulares. O teorema de Bolzano-Weierstrass nos diz que uma seqüência infinita de pontos dentro de uma região compacta tem alguma subseqüência infinita se aproximando de alguma ponto de acumulação. Planejamos mostrar que o único ponto de acumulação da subseqüência de Bolzano-Weierstrass que poderá existir (exceto quando os pontos iterados iniciais repousam em algum conjunto de medida nula) representará a árvore ótima.

Depois de cada (i -ésima) iteração, $S^{(i+1)}$, realmente, minimiza exatamente uma certa forma quadrática que chamamos $Q^{(i)}(S)$:

$$Q^{(i)}(S) = \sum_{jk \in T, j < k} \frac{\|\vec{r}_k - \vec{r}_j\|^2}{\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|}$$

$Q(S)$ é relacionado ao comprimento $L(S)$ como segue

$$L(S^{(i)}) = Q^{(i)}(S^{(i)})$$

e $Q^{(i)}(S)$ pode ser usado no processo de otimização através do cálculo dos gradientes realizado nos pontos de Steiner, ou

$$\vec{\nabla}L(S^{(i+1)}) \approx 2 \vec{\nabla}Q^{(i)}(S^{(i+1)})$$

Fisicamente, devemos pensar em Q como a energia potencial de um sistema de molas ideais (obedecendo a lei de Hooke) sobre as arestas da árvore: a força constante em cada mola é proporcional ao recíproco de seu comprimento (original) antes de começar cada iteração. A i -ésima iteração faz com que todas as molas se relaxem simultaneamente até atingir a configuração que minimiza a energia potencial $Q^{(i)}$.

A iteração do teorema 3.1 pode ser reescrita como

$$\sum_j \frac{(\vec{r}_k^{(i+1)} - \vec{r}_j^{(i+1)})}{\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|} \approx 0, \quad k = n + 1, \dots, 2n - 2,$$

Uma vez que as normas convergem mais rápido que o módulo da diferença das coordenadas. Agora escrevamos

$$\begin{aligned} L(S^{(i)}) &= Q^{(i)}(S^{(i)}) \\ &\geq Q^{(i)}(S^{(i+1)}) \\ &= \sum_{j, k; j < k, k \in \mathcal{S}} \frac{(\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\| + \|\vec{r}_k^{(i+1)} - \vec{r}_j^{(i+1)}\| - \|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|)^2}{\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|} \\ &= L(S^{(i)}) + 2(L(S^{(i+1)}) - L(S^{(i)})) \\ &+ \sum_{j, k; j < k, k \in \mathcal{S}} \frac{(\|\vec{r}_k^{(i+1)} - \vec{r}_j^{(i+1)}\| - \|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|)^2}{\|\vec{r}_k^{(i)} - \vec{r}_j^{(i)}\|} \end{aligned}$$

Na última expressão, o somatório é obviamente não negativo, portanto

$$L(S^{(i)}) \geq L(S^{(i+1)}).$$

A única maneira da igualdade ser atingida é se estivermos num ponto fixo da iteração. Os únicos pontos fixos da iteração estão no ótimo (onde L é minimizado) ou em certos lugares onde um ou mais comprimentos das arestas de T são nulas. Nesses lugares, como já dissemos anteriormente, não é estritamente definida pois existe uma divisão por zero. Portanto, claramente, estes pontos críticos são instáveis pois uma pequena perturbação de S em qualquer direção L decrescente irá

fazer que a iteração retome o decréscimo de L , pela propriedade descrita por Gilbert e Pollak [3] de L -convexidade, sempre existe uma direção de descida (na realidade, existe um meio-espaço inteiro de tais direções). Um fato um pouco menos óbvio é que um pequeno passo na direção oposta a qualquer direção de decréscimo também irá fazer com que a iteração retome o decréscimo de L *. Então, as configurações relaxadas depois de uma iteração são idênticas, e portanto, ambas diminuem o comprimento total de L , causando um abandono irreversível da vizinhança do ponto fixo em questão. Logo vemos que não somente são os pontos fixos não-ótimos instáveis, na verdade, eles são instáveis essencialmente em todas as direções.

Então existe um conjunto de medida nula de pontos de iterações iniciais que, depois de um número finito de passos, está contido numa variedade instável de baixa dimensão de pontos fixos não-ótimos. Descartando este conjunto, vemos que L decresce estritamente em cada iteração. Portanto, qualquer árvore, limite de uma subsequência de Bolzano-Weierstrass, deve ser um ponto fixo da iteração (pela continuidade de L e da função de iteração, e desde que os únicos pontos onde a iteração não causa decréscimo do valor de L são os pontos fixos). Mas excluimos todos os pontos fixos, exceto o ótimo ■

Cada uma dessas $n - 2$ equações são calculadas d vezes, uma para componente do ponto de Steiner. No caso particular em que se esteja trabalhando com o \mathbb{R}^3 , por exemplo, deve-se calcular cada uma dessas equações três vezes, que significa atualizar as coordenadas x , y e z do k -ésimo ponto de Steiner.

Smith provou que este processo de iteração converge para a árvore mínima de Steiner. E o estudo sobre a análise da convergência indicou que, para pontos gerados aleatoriamente dentro de um cubo, a convergência deveria ser geométrica. Ou seja, com auxílio de técnicas auxiliares, a convergência pode ser acelerada. Vários desses aperfeiçoamentos foram citados por Smith e não foram utilizados em seu algoritmo.

Devido à restrição na quantidade de pontos que podem ser utilizados nesse algoritmo, sua aplicação a casos práticos é bastante limitada. Segundo Smith, o

*Isto é porque, argumentando fisicamente, cada uma das "molas" que estivesse com um pequeno comprimento inicial não seria essencialmente afetada por uma pequena perturbação, enquanto todas as molas de pequeno comprimento no ponto fixo podem ser consideradas como de igual comprimento depois de uma pequena perturbação.

algoritmo é capaz de resolver problemas envolvendo até 20 pontos.

Os passos do algoritmo são os mesmos do plano mestre de Gilbert-Pollak:

1. Gere todas as topologias cujas árvores sejam cheias;
2. Otimize as coordenadas de cada ponto de Steiner simultaneamente em toda árvore gerada no passo 1, utilizando a fórmula 3.1 para atualização.

O Programa em C que implementa o algoritmo de Smith [5] e sua modificação chamada Apolonio executada por D. F. Mondaini estão no fim desta monografia. Nele, além desses passos, existem os passos intermediários, como a geração do vetor topologia, etc.

3.2.2 O algoritmo de MacGregor Smith

J. MacGregor Smith [7] propôs a solução do problema dual, definido pela construção dos círculos de Melzak. Esse problema é um problema de otimização quadrático, convexo, logo a sua solução é garantia da existência de maximizadores locais, porém não-globais. Apesar de não apresentar grandes ganhos em relação ao trabalho original de Smith [5], esse algoritmo apresenta a facilidade de melhor entendimento do problema geométrico através de construções semelhantes às de Gilbert e Pollak para o \mathbb{R}^2 , com a utilização da metodologia semelhante ao algoritmo de Melzak no plano para encontrar a árvore de Steiner. No entanto, com o aumento de número de pontos, a questão relacionada com a complexidade se mantém.

Num trabalho posterior [8] foram propostas várias heurísticas para a árvore geradora mínima para conseguir melhorar a performance do algoritmo. O conjunto de testes também sofreu alteração, ao invés de trabalhar com conjuntos de pontos aleatórios, tomaram sempre a melhor configuração possível. A explicação para este fato é simples: se o algoritmo encontrar em resultado próximo ao mínimo, realmente se pode concluir que ele é bom, caso contrário, não é bom. No entanto, para um conjunto que fosse gerado aleatoriamente, a obtenção de um resultado ruim, pode ou não significar que o algoritmo era verdadeiramente ruim (o algoritmo poderia ter encontrado o melhor resultado possível para aquela determinada configuração).

Uma forma de obtermos uma boa configuração é a seguinte regra: *sucessivamente adicione pontos, tal que o n -ésimo ponto adicionado esteja equidistante dos $n - 3$, $n - 2$, $(n - 1)$ -ésimos pontos mais recentemente adicionados.* Se os pontos adicionados privilegiarem uma direção, a configuração obtida é chamada de 3-sausage. E embora não se possa concluir que é a melhor conformação possível, visto que é sua minimalidade é apenas uma conjectura [6], ainda não se dispõe de uma configuração melhor até o momento. No entanto, a perturbação dessa configuração como será explicado no próximo capítulo viola a razão de Steiner para o \mathbb{R}^3 se condições estritas relativas a árvores cheias forem adotadas.

Apresentaremos a seguir uma seqüência de teoremas. O primeiro deles, o teorema 3.2 é sempre uma boa justificativa para a utilização de algoritmos baseados em métodos numéricos para encontrar a SMT para pontos regulares dados no espaço euclidiano \mathbb{R}^3 . Os teoremas seguintes formam a base para o algoritmo de MacGregor Smith, o qual possui uma biblioteca no software *Mathematica*[®] e é disponibilizado pelo autor.

Teorema 3.2 *As coordenadas dos dois pontos de Steiner devem ser expressos como a raiz de uma equação polinomial geral do 8° grau essencialmente geral (isto é, geralmente irredutível), ou ainda com grupo de Galois não solúvel. Portanto, esses pontos não podem ser obtidos em geral por construções de régua e compasso nem pela solução de qualquer seqüência de equações com grau ≤ 7 .*

Demonstração. (ver [5]).

Teorema 3.3 *Dados três pontos no \mathbb{R}^3 , v_i, v_j, v_k , a distância do ponto t_{ij} (vértice do triângulo equilátero cuja base é v_i , e v_j) ao ponto v_k mais afastado dele é igual ao comprimento da árvore de Steiner.*

Demonstração. Para três pontos no \mathbb{R}^3 , eles definem um plano que, portanto, reduz o problema de três pontos à versão planar do problema da árvore mínima de Steiner. Pelas propriedades fundamentais de construção de um ponto de Steiner no plano, veja o capítulo 2, qualquer ponto equilátero refletido e o correspondente círculo de Melzak definem o comprimento da SMT e a localização do ponto de Steiner (veja [2, 3]). Contudo, como o plano é arbitrariamente orientado no espaço,

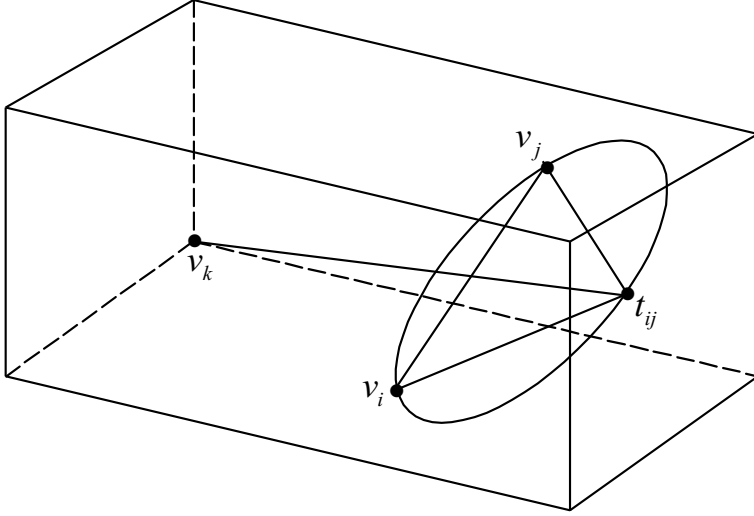


Figura 3.1: Três pontos no espaço v_k, v_i, v_j e o ponto equilátero t_{ij} obtido da aresta $[v_i, v_j]$.

existe um número infinito de círculos de Melzak possíveis construídos sobre uma aresta $[v_i, v_j]$, veja a figura 3.1.

Dados que três pontos repousam sobre um plano, vamos utilizar um dos métodos anteriores do \mathbb{R}^2 para construir uma solução para a *SMT* e chamaremos a solução de comprimento ótimo desta solução de *SMT**. Mais ainda estabeleçamos uma orientação para o círculo de Melzak onde desejamos encontrar o ponto equilátero t_{ij} mais distante relativamente aos pontos v_i e v_j como o seguinte problema de otimização

$$\max \phi = \|t_{ij} - v_k\|$$

onde as coordenadas cartesianas dos pontos t_{ij}, v_i, v_j e v_k são dados por $t_{ij} = (x_{ij}, y_{ij}, z_{ij})$ e $v_{i,j,k} = (x_{v_{i,j,k}}, y_{v_{i,j,k}}, z_{v_{i,j,k}})$.

$$\text{Sujeito a } \begin{cases} \sqrt{(x_{ij} - x_{v_i})^2 + (y_{ij} - y_{v_i})^2 + (z_{ij} - z_{v_i})^2} = d_{ij} \\ \sqrt{(x_{ij} - x_{v_j})^2 + (y_{ij} - y_{v_j})^2 + (z_{ij} - z_{v_j})^2} = d_{ij} \end{cases}$$

A solução para este problema de orientação resulta no comprimento da corda ϕ^* . A única solução para este problema de orientação deve ter t_{ij} e o círculo de Melzak repousando sobre o mesmo plano, como os pontos que geraram a solução

SMT^* , caso contrário, $\phi^* < SMT^*$, e t_{ij} é o ponto mais distante de v_k ■

Como nosso trabalho consiste num estudo de pontos sobre a hélice circular reta, cuja unidades básicas são tetraedros ou suas deformações, mostraremos como podem ser encontrados os pontos de Steiner e, conseqüentemente, a SMT para essa configuração. Começemos com o tetraedro regular, com os seguintes pontos:

$$v_i = (1, 1, 1), v_j = (1, -1, -1), v_k = (-1, 1, -1), v_l = (-1, -1, 1).$$

Existem três topologias alternativas para a SMT no tetraedro. É útil considerar as três topologias em relação às orientações dos pares de arestas do tetraedro. As três topologias alternativas para os pares de arestas são dadas em relação à direção na qual o comprimento da aresta (s_i, s_j) existe, ou seja, uma das opções seguintes:

$$(v_i, v_j) \cap (v_k, v_l), (v_i, v_k) \cap (v_j, v_l), (v_i, v_l) \cap (v_j, v_k),$$

conforme a figura 3.2.

Mostraremos a seguir a formulação primal, tomando como base a topologia abaixo definida, veja a figura 3.3. A formulação algébrica desse problema torna-se mais complexa porque devemos explicitamente dar conta das topologias de ligação. Se desejarmos encontrar a SMT da topologia da figura 3.3 devemos minimizar:

$$(P) \quad Z = a + b + c + d + f$$

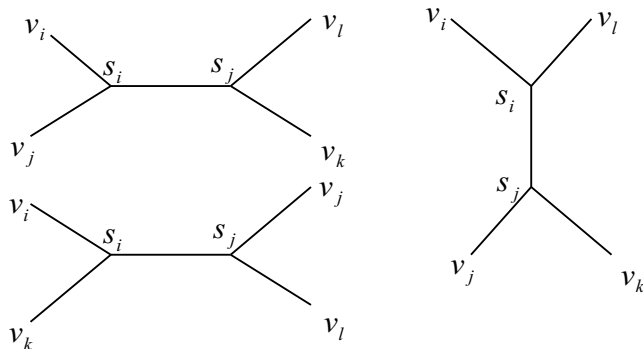


Figura 3.2: As três possíveis topologias para o tetraedro.

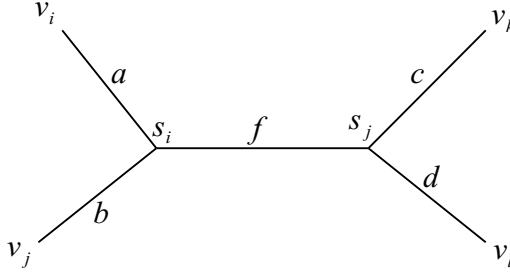


Figura 3.3: Uma topologia para o problema primal para o tetraedro.

Vamos considerar a formulação dual para o tetraedro. Para isto, vamos agora refletir os pontos equiláteros t_{ij} e t_{kl} , respectivamente e construir os correspondentes círculos de Melzak para estes pontos, conforme a figura 3.4, abaixo.

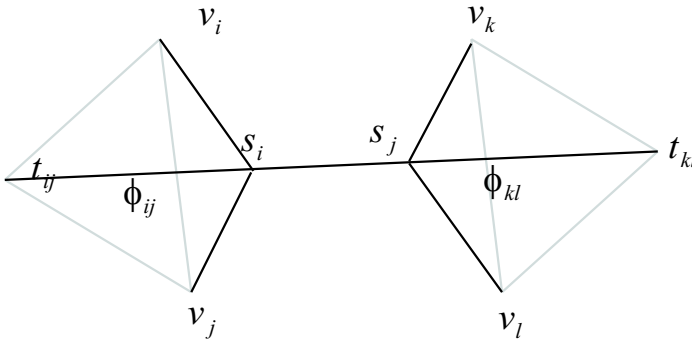


Figura 3.4: Construção dual para o tetraedro.

Teorema 3.4 *Sejam a e b a distância dos vértices v_i e v_j ao ponto de Steiner s_i , c e d a distância dos vértices v_k e v_l ao ponto de Steiner s_j , e ϕ_{ij} e ϕ_{kl} o diâmetro de cada círculo de Melzak C_{ij} e C_{kl} então $\phi_{ij} = a + b$ e $\phi_{kl} = c + d$, respectivamente para cada triângulo equilátero construído e para cada par de pontos dados.*

Demonstração. Vamos examinar cada par de pontos regulares da construção acima, figura 3.4. Pelo teorema 2.1, podemos construir um ponto equilátero e um círculo de Melzak passando pelos dois pontos dados e este ponto equilátero determinado. Além disso, como cada construção (separadamente) é plana, pelo mesmo teorema, temos que o diâmetro de cada círculo é igual à soma dos comprimentos de

cada um dos vértices ao respectivo ponto de Steiner. Assim, $\phi_{ij} = a+b$ e $\phi_{kl} = c+d$

■

O que é importante sobre esta construção (e que segue para outros conjuntos de pontos em geral com $n \geq 4$) é que dois pontos regulares e um ponto de Steiner sempre estão no plano de um triângulo (ou círculo de Melzak) no \mathbb{R}^3 .

Teorema 3.5 *Para quatro pontos dados no \mathbb{R}^3 , a máxima distância entre t_{ij} e t_{kl} é equivalente ao comprimento da árvore mínima de Steiner.*

Demonstração. É baseado nos teoremas 2.1 para três pontos dados e na possibilidade de construção dos círculos de Melzak euclidianos de pontos no plano (veja Melzak [2], Gilbert e Pollak [3] e Smith [5]) ■

O que devemos fazer é encontrar a maior distância ente os pares de pontos equiláteros do par de arestas. Temos o seguinte problema de otimização com as restrições assegurando que a igualdade nas arestas de mesmo comprimento nos triângulos correspondentes seja satisfeita:

$$(D) \quad \max \phi = \|t_{ij} - t_{kl}\|$$

as coordenadas cartesianas sendo dadas analogamente como na pág. 38.

$$\text{Sujeito a } \begin{cases} \sqrt{(x_{ij} - x_{v_i})^2 + (y_{ij} - y_{v_i})^2 + (z_{ij} - z_{v_i})^2} = d_{ij} \\ \sqrt{(x_{ij} - x_{v_j})^2 + (y_{ij} - y_{v_j})^2 + (z_{ij} - z_{v_j})^2} = d_{ij} \\ \sqrt{(x_{kl} - x_{v_k})^2 + (y_{kl} - y_{v_k})^2 + (z_{kl} - z_{v_k})^2} = d_{kl} \\ \sqrt{(x_{kl} - x_{v_l})^2 + (y_{kl} - y_{v_l})^2 + (z_{kl} - z_{v_l})^2} = d_{kl} \end{cases}$$

Teorema 3.6 *O problema do círculo de Melzak é um problema de otimização convexo.*

Demonstração. Pela observação dos menores principais aninhados do hessiano da função objetivo [49], temos:

$$\left[\frac{(y_{ij} - y_{kl})^2 + (z_{ij} - z_{kl})^2}{\sqrt{(x_{ij} - x_{kl})^2 + (y_{ij} - y_{kl})^2 + (z_{ij} - z_{kl})^2}}, 0, 0, 0, 0, 0 \right].$$

O hessiano da função objetivo é, portanto, positivo semidefinido, e por definição, a função é convexa. Também cada restrição é convexa e como a soma de um conjunto de funções convexas é convexa, o espaço das restrições é também convexo ■

Contudo, como estamos maximizando a função objetivo, deve não haver um único máximo.

Teorema 3.7 *O problema da construção do círculo de Melzak é problema dual (D) do primal (P) e $\phi = Z$ na otimalidade.*

Demonstração. Pelo teorema 3.3, os comprimentos das arestas devido à construção do círculo de Melzak são iguais a $\phi_{ij} = a + b$ e $\phi_{kl} = c + d$, respectivamente. Pelo teorema 3.5, sabemos que a distância entre os pontos t_{ij} e t_{kl} nos círculos de Melzak que maximizam ϕ é equivalente ao comprimento da *SMT*. Seja qual for a topologia para quatro pontos, a *SMT* é igual a $a + b + c + d$ e a distância da aresta que expressa o comprimento entre os pontos de Steiner $f = \|s_i - s_j\|$. A maior distância entre t_{ij} e t_{kl} incluirá o comprimento da aresta $f = \|s_i - s_j\|$. Logo, na otimalidade $\phi = Z$ ■

O dual ainda representa um problema de otimização quadrático difícil com restrições de igualdade e nenhum algoritmo em tempo polinomial para o problema geral parece possível (veja [50]), somente para alguns casos específicos. Este fato nos leva a dispensar um estudo mais aprofundado para um maior número de pontos, pois isso nos levaria um problema de otimização quadrático com grande número de variáveis.

Teorema 3.8 *Uma aproximação do problema dual $\phi \leq Z$.*

Com base no teorema acima é possível a construção de um algoritmo, que objetivo a solução de um conjunto de equações, equivalentes à função langrangeana, através do método de Newton. Para um conjunto de pontos regulares pequeno, o software disponibilizado por MacGregor Smith oferece uma oportunidade de compreensão do problema dos círculos de Melzak, podendo a configuração final ser visualizada.

3.3 A d -sausage e suas propriedades, $d \geq 2$

3.3.1 Introdução à d -sausage

O conjunto de pontos que chamaremos de d -sausage pode ser descrito como segue:

1. Comece com uma bola unitária (diâmetro) no espaço d -dimensional.
2. Sucessivamente acrescente bolas unitárias de forma que a n -ésima bola adicionada esteja sempre tocando as $\min(d, n - 1)$ bolas mais recentemente adicionadas.

Este procedimento define unicamente (por congruência) uma seqüência infinita de bolas numeradas d -dimensionais de interior disjunto. Os centros dessas bolas formam um conjunto de pontos discreto, o qual chamamos de d -sausage. Um conjunto de pontos consistindo de quaisquer n pontos consecutivos da d -sausage é chamado de d -sausage de n pontos.

A 1-sausage são simplesmente os inteiros da reta real. A treliça da figura 3.5 abaixo representa a 2-sausage, para a 3-sausage conduziremos um estudo mais detalhado na próxima seção.

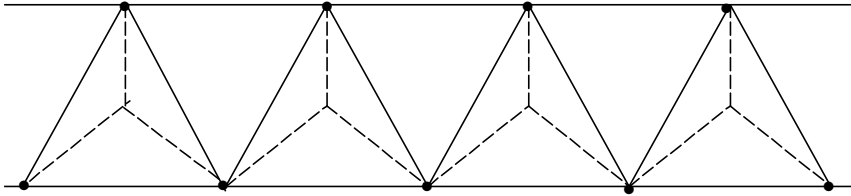


Figura 3.5: A 2-sausage de 9 pontos.

Existem duas imagens mentais convenientes para a representação da d -sausage. A primeira é vê-la como os vértices de um simplexo complexo constituído d -simplexos colados juntos por faces comuns. A saber, pontos numerados por $m, m + 1, m + 2, \dots, m + d$ para um d -simplexo regular para qualquer inteiro m , e dois de tais simplexos são adjacentes numa face $(d - 1)$ -dimensional se, e somente se, seus m valores são adjacentes. Assim, a 3-sausage pode ser imaginada como um simplexo complexo constituído por tetraedros regulares ligados nas faces comuns.

Quaisquer quatro pontos consecutivos numerados da 3-sausage, por exemplo, formam um tetraedro regular.

A segunda representação mental é aquela que os pontos estão numa ordem consecutiva, igualmente espaçados ao longo de uma "hélice" d -dimensional. Isto é, a d -sausage apresenta um grupo de simetria discreto, infinito, transitivo. Existe uma isometria de um d -espaço que transformará o m ponto da sausage para o ponto $m + k$ para todos m simultaneamente, onde k é qualquer inteiro, e consiste numa translação por k vezes um vetor "axial", mais k vezes um particular "giro" (rotação do d -espaço preservando o vetor axial). A transformação linear completa - translação axial e giro - surgindo quando $k = 1$ é prontamente univocamente determinada a partir das coordenadas dos pontos $0, 1, 2, \dots, d + 1$.

Existem dois fatos imediatos decorrentes dessa segunda forma de visualização da d -sausage:

1. A construção da d -sausage definida acima pode ser continuada indefinidamente e, portanto, a d -sausage realmente existe;
2. Todo ponto da sausage é um ponto extremo da envoltória convexa da d -sausage.

Claramente o comprimento da MST da sausage de n pontos é $(n - 1)\|P_m P_{m+1}\|$, onde P_m e P_{m+1} são pontos consecutivos da sausage. A razão de Steiner (veja o capítulo 2 para a definição geral) da d -sausage será definida como o ínfimo das razões de Steiner da d -sausage de n pontos quando $n \rightarrow \infty$.

3.3.2 A 3-sausage

Existe uma série de conjecturas com relação à 3-sausage. A principal delas é que ela é a estrutura geométrica que deve apresentar a menor razão de Steiner no espaço euclidiano em comparação com qualquer outro conjunto de pontos tomado no espaço. Ou seja,

Conjectura principal: [6]

A 3-sausage atinge ρ_3 , e

$$\begin{aligned}\rho_3 &= \sqrt{\frac{283}{700} - \frac{2\sqrt{27}}{700} + \frac{9\sqrt{11 - \sqrt{21}\sqrt{2}}}{140}} \\ &\approx 0.7841903\dots\end{aligned}$$

Na realidade, esta conjectura é estendida para outras dimensões $d > 3$. É a d -sausage que permanece como o recorde corrente para dimensões $d > 3$, com alguns desses valores tabelados por Du e Smith [47]. Porém, nem mesmo os próprios autores da extensão da conjectura para $d > 3$, acreditam que ela seja sempre válida, principalmente, em decorrência de uma série de conjecturas que devem suportar a asserção. Apresentamos, a seguir, algumas conjecturas feitas para a 3-sausage.

Conjectura 1: O conjunto de n pontos da 3-sausage apresenta a menor razão de Steiner entre os conjuntos de n pontos do \mathbb{R}^3 , sempre que o inteiro $n > 1$ e $n \neq 5$. O conjunto de 5 pontos com menor razão de Steiner é o tetraedro regular (= 3-sausage de 4 pontos) onde o 5º ponto está infinitesimalmente próximo do 4º ponto.

Essa conjectura é verdadeira quando o número de pontos é $n = 2$ e $n = 3$, sendo que a prova para $n = 3$ foi feita por Du e Hwang [42, 43, 44] para o problema da razão de Steiner no \mathbb{R}^2 , ou seja, $\rho_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}$. Para $n = 4$, Smith e MacGregor Smith (veja [6]) utilizando um lema demonstrado por Du e Hwang, mostraram que o tetraedro apresenta a menor razão de Steiner. Também apresentam a evidência heurística para esta conjectura, através da tabela 3.1 que reproduzimos abaixo.

n	ρ	Nome
4	0.813052529585	Tetraedro regular
5	0.815469669674	Bipirâmide triangular
6	0.808064936179	"Propano"
7	0.802859896946	1 de 2 cadeias de "butanos"
8	0.800899342742	Pentano
9	0.798704227344	Hexano
10	0.797013231353	Heptano
11	0.795785747249	Octano
12	0.794720989050	Nonano
13	0.793838038891	Decano
14	≤ 0.7934	-
15	≤ 0.7926	-
∞	≤ 0.7841903733	3-sausage

Tabela 3.1: Razões de Steiner para algumas configurações

Conjectura 2: (Decrescimento monotônico) A d -sausage de n pontos tem uma razão de Steiner menor que a d -sausage de $n - 1$ pontos se $n \geq 2d \geq 6$.

Conjectura 3: (A topologia das *SMT* das Sausages). A 3-sausage de n pontos, $n \geq 3$, tem uma única topologia que é a seguinte:

Existem $n - 2$ pontos de Steiner. O ponto de Steiner i é conectado ao ponto de Steiner $i + 1$ para $i = 1, \dots, n - 3$. Também o ponto i da sausage está conectado ao ponto de Steiner $i - 1$ para $i = 2, \dots, n - 1$, e também o ponto da sausage 1 está ligado ao ponto de Steiner 1 e o ponto n da sausage está ligado ao ponto de Steiner $n - 2$.

Esta topologia também é conhecida por "path topology" (veja [47]), pois os pontos de Steiner estão sobre um caminho simples. Smith e MacGregor Smith [6] apresentaram a evidência computacional que essa topologia é válida para a 3-sausage quando $n = 3, \dots, 13$.

Além das conjecturas assinaladas existe um fato demonstrado (veja [47, 6]):

Teorema 3.9 *A d -sausage de n pontos tem um valor menor que a $(d - 1)$ -sausage de n pontos se $N > d \geq 3$.*

Uma consequência imediata das conjecturas 1 e 2 é que não seria atingida a ρ_3

para nenhum conjunto finito de pontos.

Conjectura 4. Nenhum conjunto finito de pontos do \mathbb{R}^3 tem ρ_3 mínimo.

Esta última conjectura é totalmente contrastante com o caso no plano, onde o ínfimo para um conjunto de n pontos é $\frac{\sqrt{3}}{2}$ independentemente do valor $n \geq 3$. Mais especificamente, o valor $\rho_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}$ é atingido quando os pontos dados estão sobre os vértices de um triângulo equilátero.

A aceitação da Conjectura 3, a path topology, leva-nos, como descrito por Du e Smith (veja [47]), à conclusão que a SMT apresenta as mesmas características de simetria da própria d -sausage, devendo ser "periódica" e com a "célula unitária" sendo um tetraedro regular formado por 4 pontos da sausage consecutivamente numerados.

Outras propriedades da 3-sausage

Ângulos. Todos os ângulos nas junções de Steiner são 120° . Esta propriedade é a mesma que as árvores de Steiner possuem no plano.

Grau do ponto de Steiner. Todos os pontos de Steiner tem 3 arestas incidentes em cada vértice. Todos os vértices dados tem grau 1. A configuração da árvore de Steiner visualizada para a 3-sausage é uma construção de uma tripla hélice.

Eixo helical. Existe uma rotação de eixo bem definida na qual giram ambos os vértices dos pontos regulares e os pontos de Steiner.

Periodicidade. É bastante interessante que a 3-sausage não seja periódica. Se escolhermos um vértice qualquer como o vértice inicial para a 3-sausage, então, depois de 28 tetraedros, por causa da simetria de enroscamento da 3-sausage, ele deveria reaparecer após uma revolução de 360° , mas reaparece ligeiramente deslocado em $354^\circ 20'$. Este fato foi demonstrado por Coxeter (veja [51]).

3.3.3 Cálculo da razão de Steiner para a 3-sausage como um problema de minimização

Os esquemas de cálculo que utilizaremos abaixo é baseado nos trabalhos de W. D. Smith e D. Z. Du [47]; J. MacGregor Smith e W. D. Smith [6].

Consideremos o tetraedro abaixo, a célula unitária da 3-sausage, e suponhamos que a adoção da topologia de caminho (*path topology*) descrita nos trabalhos supracitados esteja correta, ou seja, que os pontos de Steiner do começo e do fim da árvore estão ligados a dois pontos regulares e um outro ponto de Steiner e que os pontos de Steiner do interior da árvore estão ligados a somente um ponto regular e dois outros pontos de Steiner.

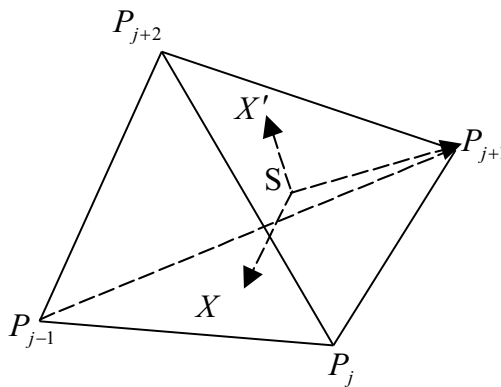


Figura 3.6: Célula unitária da 3-sausage.

Antes de prosseguirmos nos cálculos para encontrar o valor da razão de Steiner para a 3-sausage através de um problema de minimização, voltaremos brevemente ao caso particular do cálculo do razão de Steiner para três pontos.

O comprimento da SMT é dado por

$$l(SMT) = AS + BS + CS,$$

e, conforme já foi dito no capítulo anterior, é conhecido desde meados do século XVII a solução para este problema inicialmente proposto por Fermat (1601-1665) e resolvido por Torricelli parcialmente. Por esta razão o ponto S na figura anterior é conhecido como ponto de Torricelli-Fermat, além da designação de Ponto de Steiner. Simpson mostrou em 1750 no seu livro "Doctrine and Applications of Fluxions"

que as três linhas juntando os vértices exteriores dos triângulos eqüiláteros definidos acima dos lados e opostos ao terceiro vértice deste triângulo interceptam-se no ponto de Steiner. Estes três segmentos são chamados de linhas de Simpson e possuem o mesmo comprimento da SMT, conforme demonstrado por Heinen em 1834 e reproduzido no capítulo 2. Ou seja,

$$l(SMT) = BB' = CC'.$$

Suponhamos que temos os lados a, b, c do triângulo ABC , veja figura 3.7. Queremos agora escrever o comprimento da SMT, $l(SMT) = L$, como função desses lados e da área S desse triângulo.

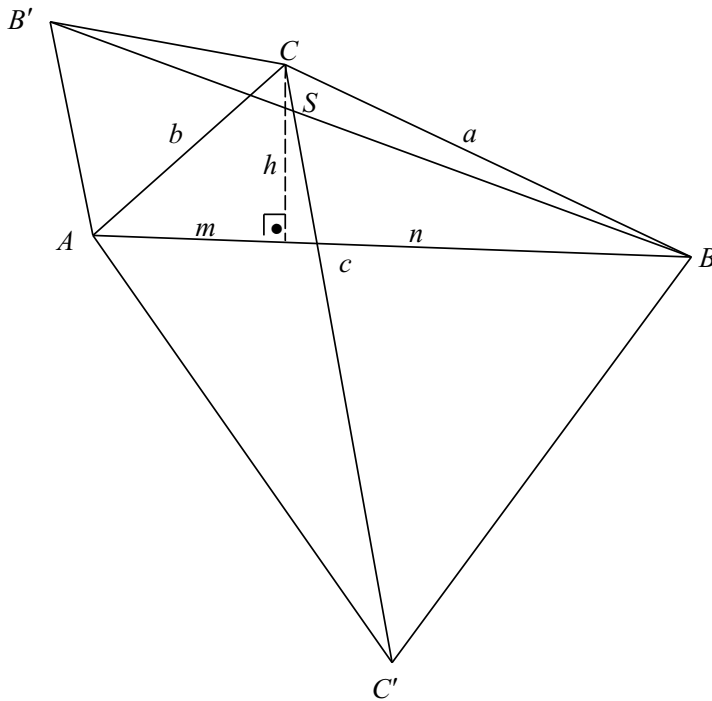


Figura 3.7: Triângulo de lados a, b, c e altura h .

Do triângulo ABB' , pela utilização da lei dos co-senos:

$$L^2 = b^2 + c^2 - 2bc\left(\frac{1}{2} \cos \hat{A} - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \hat{A}\right) \quad (3.2)$$

Do triângulo BCC' , pela utilização da lei dos co-senos:

$$L^2 = a^2 + c^2 - 2ac\left(\frac{1}{2} \cos \hat{B} - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \hat{B}\right) \quad (3.3)$$

Adicionando membro a membro as equações (3.2) e (3.3), temos:

$$2L^2 = a^2 + b^2 + c^2 - 2bc\left(\frac{1}{2} \cos \hat{B} - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \hat{B}\right) - 2ac\left(\frac{1}{2} \cos \hat{B} - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \hat{B}\right). \quad (3.4)$$

Temos também

$$h = b \sin \hat{A} = a \sin \hat{B} \quad (3.5)$$

$$m = b \cos \hat{A} \quad (3.6)$$

$$n = a \cos \hat{B} \quad (3.7)$$

E das equações (3.5),(3.6)e (3.7), respectivamente,

$$2S = ch = cb \sin \hat{A} = ac \sin \hat{B} \quad (3.8)$$

$$cm = cb \cos \hat{A} \quad (3.9)$$

$$cn = ca \cos \hat{B} \quad (3.10)$$

Se substituirmos as equações (3.8), (3.9) e (3.10) na equação (3.4) e fizermos as devidas simplificações, obteremos

$$2L^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 4\sqrt{3}S, \quad (3.11)$$

onde a área $S = \sqrt{p(p-a)(p-b)(p-c)}$ e $p = \frac{a+b+c}{2}$ é o semi-perímetro do triângulo ABC .

O comprimento da MST desse triângulo é

$$l(MST) = a + b + c - \max(a, b, c). \quad (3.12)$$

Se supusermos que $a \geq b \geq c$, temos o seguinte problema de minimização:

$$\rho^2 = \min \left[\frac{1}{2(b+c)^2} \left(a^2 + b^2 + c^2 + \sqrt{3} \sqrt{2(a^2b^2 + a^2c^2 + b^2c^2) - (a^4 + b^4 + c^4)} \right) \right]. \quad (3.13)$$

A única solução não trivial para este problema é $a = b = c$ e $\rho = \frac{\sqrt{3}}{2}$, como esperado devido a validade da conjectura de Gilbert e Pollak.

O problema de minimização a ser formulado agora utiliza coordenadas baricêntricas para a célula unitária dos vértices do tetraedro como sendo as linhas da matriz identidade 4×4 . Estas coordenadas são convenientes porque conferem uma característica especial a estes pontos: todos repousam no hiperplano do \mathbb{R}^4 em que a soma das coordenadas é a unidade [51]. Veremos como o uso de coordenadas baricêntricas, quando percorremos a topologia de referência, é apropriado. Na escolha destacada acima, o pedaço da *SMT* de um triângulo, cujo três vértices são $(u, v, w, 0)$, $(0, u, v, w)$ e $(0, 0, 1, 0)$ e cujos lados são x, y, z (adiante mostraremos todas as possibilidades). Da forma como foram definidos os pontos do tetraedro, vemos que $u + v + w = 1$.

Proseguiremos agora com o esquema de cálculo de Du e Smith [47]. Vamos considerar quatro pontos consecutivos $P_{j-1}, P_j, P_{j+1}, P_{j+2}$, que são vértices do tetraedro regular com coordenadas em $\mathbb{R}^4 : (1, 0, 0, 0), (0, 1, 0, 0), (0, 0, 1, 0)$ e $(0, 0, 0, 1)$, respectivamente. Os pontos sobre as faces em que a parte da *SMT* deixa a célula unitária chamamos de X e X' , de acordo com a figura 3.6.

As coordenadas dos pontos X e X' em cada par de faces, podem ser escritas como $(u, v, w, 0), (v, w, 0, u), (w, 0, u, v), (0, u, v, w)$. Existem 12 possibilidades que podem ser agrupadas em três grupos de quatro problemas equivalentes. As representações correspondentes a estes três grupos são [55]:

$$\begin{aligned}
 x^2 &= (u - 1)^2 + v^2 + w^2 \\
 y^2 &= u^2 + (v - 1)^2 + w^2 \\
 z^2 &= (u - v)^2 + (v - w)^2 + u^2 + w^2
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned}
 x^2 &= (u - 1)^2 + v^2 + w^2 \\
 y^2 &= u^2 + v^2 + (w - 1)^2 \\
 z^2 &= 2(u - v)^2 + 2v^2
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
x^2 &= u^2 + (v - 1)^2 + w^2 \\
y^2 &= u^2 + v^2 + (w - 1)^2 \\
z^2 &= (u - v)^2 + (v - w)^2 + u^2 + w^2
\end{aligned} \tag{3.16}$$

juntamente com a restrição $u + v + w = 1$.

Para que possamos gerar uma nova célula unitária do 3-sausage, devemos adicionar um outro ponto. O comprimento da árvore mínima geradora para uma árvore com p pontos é então dada por

$$l(SMT) = (p - 1)\sqrt{2}. \tag{3.17}$$

O comprimento da árvore mínima de Steiner correspondente pode ser obtida da equação (3.11):

$$l(SMT) = (p - 3) \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + \sqrt{3} \sqrt{2(x^2y^2 + x^2z^2 + y^2z^2 - (x^4 + y^4 + z^4))}} \tag{3.18}$$

O problema de minimização da 3-sausage ($p \rightarrow \infty$) pode ser escrito como

$$\rho^2 = \frac{l^2(SMT)}{l^2(MST)} = \min \left[\frac{1}{4} \left(x^2 + y^2 + z^2 + \sqrt{3} \sqrt{2(x^2y^2 + x^2z^2 + y^2z^2) - (x^4 + y^4 + z^4)} \right) \right]. \tag{3.19}$$

Devido a esse problema ser de minimização de uma função convexa, este ponto de mínimo é único. Após a escolha de uma das representações dadas pelas equações (3.14), (3.15) e (3.16), (na realidade, a representação (3.15) não corresponde a uma formulação bem definida para o problema (3.19), pois somente apresenta com arbitrário) a solução deste problema de minimização (3.19) nos dá

$$u = w = \frac{21 - \sqrt{21}}{70} \approx 0.2345346,$$

com o valor da razão de Steiner dado por

$$\rho = \frac{1}{10}(3\sqrt{3} + \sqrt{7}),$$

que é também o mesmo valor da conjectura principal de MacGregor Smith e Smith, ou seja,

$$\rho = \sqrt{\frac{283}{700} - \frac{2\sqrt{27}}{700} + \frac{9\sqrt{11 - \sqrt{21}\sqrt{2}}}{140}} \approx 0.7841903\dots$$

3.4 Cálculo do ângulo polar ω e do passo da hélice circular reta

Considere a hélice circular reta que repousa sobre o cilindro de raio $r = 1$, onde os pontos interessantes estão igualmente espaçados na hélice e

$$\|\overrightarrow{A_j A_{j+1}}\| = \|\overrightarrow{A_0 A_1}\|, \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1.$$

A hélice é dada por

$$\vec{A}_j = (\cos \omega j, \sin \omega j, \bar{\alpha} j).$$

Tomemos o vetor

$$\overrightarrow{A_j A_{j+k}} = (\cos \omega(j+k) - \cos \omega j, \sin \omega(j+k) - \sin \omega j, \bar{\alpha} k)$$

dessa hélice, cuja norma euclidiana é

$$\|\overrightarrow{A_j A_{j+k}}\| = \sqrt{2 - 2 \cos \omega k + \bar{\alpha}^2 k^2}.$$

Assim, tomando a equação anterior ao quadrado para $k = 1, 2, 3$, temos

$$2 - 2 \cos \omega + \bar{\alpha} = 2 - 2 \cos 2\omega + 4\bar{\alpha}^2 = 2 - 2 \cos 3\omega + 9\bar{\alpha}^2.$$

Da última expressão deduzimos

$$3(\cos 3\omega - \cos \omega) = 8(\cos 2\omega - \cos \omega) = 12\bar{\alpha}^2,$$

ou ainda, chamando $\cos \omega = x$

$$3(4x^3 - 4x) = 8(2x^2 - x - 1) = 12\bar{\alpha}^2. \tag{3.20}$$

Após algumas manipulações simples da equação anterior, temos

$$(x - 1)^2(3x + 2) = 0.$$

Mas $x \neq 1$, pois estamos interessados numa configuração tridimensional. Logo,

$$x = \cos \omega = -\frac{2}{3}.$$

Portanto, $\omega = 2.300523983$.

Substituindo o correspondente valor de x equação (3.20), obtemos

$$\bar{\alpha} = \sqrt{\frac{10}{27}}.$$

Como $\bar{\alpha} = \alpha\omega$, temos $\alpha \approx 0.264540002$ e $2\pi\alpha$ é o passo desta hélice.

Detalhes e fatos adicionais podem ser encontrados no capítulo 4, onde mostraremos uma forma alternativa para os cálculos efetuados aqui.

3.5 Comparação da razão de Steiner da d -sausage com outros politopos

Apresentamos abaixo uma tabela de comparação entre os valores das cotas superiores para a razão de Steiner para o espaço euclidiano d -dimensional, baseado nos trabalhos de Chung e Gilbert [52] para o d -simplexo (para $d \geq 2$), de Smith [5] para configurações específicas, e de Du e Smith [47] para a d -sausage.

Os resultados obtidos por Smith, reportados na terceira coluna da tabela 3.23.2, refutam uma conjectura feita por Gilbert e Pollak em 1968, a qual dizia que a razão de Steiner para o espaço euclidiano d -dimensional é exatamente o valor atingido pelo uso dos vértices do d -simplexo regular, sendo falsa para $3 \leq d \leq 9$.

Na realidade, o d -simplexo apresenta a seguinte propriedade:

Teorema 3.10 *O simplexo regular d -dimensional ($d \geq 3$) não pode ter a razão de Steiner mínima.*

Dimensão	Chung-Gilbert	Smith	Du-Smith
2	0.86602...		
3	0.81305...	0.81119...	0.78419...
4	0.78374...	0.76871...	0.74398...
5	0.76456...	0.74574...	0.72181...
6	0.75142...	0.73199...	0.70853...
7	0.74126...	0.72242...	0.70012...
8	0.73376...	0.71550...	0.69455...
9	0.72743...	0.71112...	0.69076...
10	0.72250...		0.68812...
11	0.71811...		0.68624...
20	0.69839...		
40	0.68499...		
80	0.67775...		
160	0.67392...		
∞	0.66984...		

Tabela 3.2: Comparação da razão de Steiner de vários politopos

Vamos introduzir algumas considerações para facilitar a compreensão da demonstração desse teorema.

Seja um conjunto de pontos no \mathbb{R}^{d+1} com as duas das coordenadas cartesianas sendo 1 e -1 e as $(d - 1)$ restantes, zero, ou seja,

$$(1, -1, 0, 0, 0, \dots, 0),$$

pertencentes ao hiperplano $\sum_{i=1}^{d+1} x_i = 0$.

Como a ordem das coordenadas implica pontos distintos, teremos que o número total de pontos será dado por

$$P_{d-1}^{d+1} = \frac{(d+1)!}{(d-1)!} = d(d+1).$$

Incluindo o ponto da origem ou $(0, 0, 0, \dots, 0)$, teremos, $1+d+d^2$ pontos distintos. Teremos, então

1. A distância entre quaisquer dois destes pontos é $\geq \sqrt{2}$
2. Os pontos formam $d + 1$ d -dimensionais simplexos regulares, cada um dos quais compartilhando o vértice comum $(0, 0, \dots, 0)$ mas nenhum outro vértice. Para a obtenção do i -ésimo destes simplexos d -dimensionais devemos tomar os pontos tendo um 1 na coordenada i .

3. Cada destes simplexos regulares tem aresta com comprimento $\sqrt{2}$.

Agora, claramente

$$\rho(\mathcal{P}) \leq \frac{l(SMT \text{ para o } d - \text{simplexo})}{l(MST \text{ para o } d - \text{simplexo})} = \rho(d - \text{simplexo}) \quad (3.21)$$

pelas observações 1 e 3. Mas pela observação do fato 2, e do fato que $d + 1 \geq 4$, e o fato de que qualquer árvore com um ponto de valência ≥ 4 não pode ser mínima, vemos que não pode haver igualdade em (3.21), ou seja, $\rho(\mathcal{P}) < \rho(d - \text{simplexo})$ se $d \geq 3$.

3.6 Cotas inferiores para a razão de Steiner

Nesta seção apresentamos parte do trabalho (veja [53]) que mostra os principais resultados alcançados ao longo de 35 anos de pesquisa de vários estudiosos no problema de Steiner euclidiano e, mais especificamente, das cotas inferiores e superiores para o problema da razão de Steiner.

O primeiro resultado deduzido de uma cota inferior para a razão de Steiner euclidiana em qualquer dimensão d é atribuída por Gilbert e Pollak a Moore (veja [3]). Na figura 3.8 abaixo, seja $l(\mathcal{P})$ perímetro do polígono externo, representado com linhas tracejadas, obtido pela conexão de todos os pontos dados. A árvore interna representa a árvore mínima de Steiner.

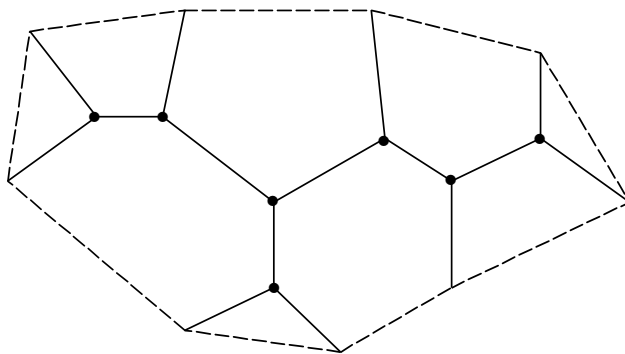


Figura 3.8: Uma diagrama para dedução da cota inferior de Moore

Pode ser facilmente visto que

$$l(MST) \leq l(\mathcal{P}) \leq 2l(SMT), \quad (3.22)$$

uma vez que as arestas da árvore de Steiner são contadas duas vezes e aplicamos a propriedade da desigualdade triangular para qualquer espaço euclidiano no \mathbb{R}^n . A desigualdade acima significa que $\rho \leq \frac{1}{2}$.

A segunda cota inferior também independe de construções geométricas e também vale para todas as dimensões em espaços euclidianos de dimensões d . Esta outra cota inferior pode ser escrita como:

$$\frac{l(SMT)}{l(MST)} = \frac{\sqrt{3}}{3} = 0.577... \quad (3.23)$$

Vamos deduzir a cota inferior acima (veja também [37]). Isto é demonstrado para árvores de Steiner cheias com $2n - 2 \geq 4$ vértices (uma árvore de Steiner com $n - 2$ pontos). Em termos da demonstração a ser feita, podemos começar de uma árvore de Steiner que não é cheia, pode ela poda ser decomposta numa união de árvores cheias de Steiner e um processo simples de indução pode ser aplicado.

Seja R_{ij} a distância euclidiana d -dimensional entre os pontos i e j . Considere a árvore representada abaixo na figura 3.9, em que as estruturas correspondentes à árvore mínima geradora ($l(MST)$) e à árvore mínima de Steiner ($l(SMT)$) estão claramente representadas. Os pontos externos são dados por r_j , ($1 \leq k \leq n$) e nos restringiremos às árvores de Steiner cheias.

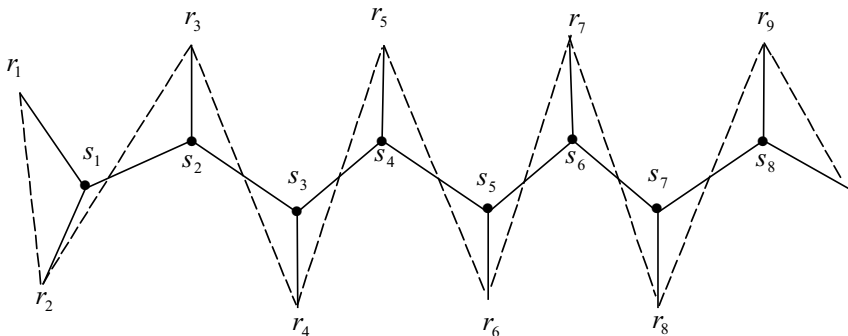


Figura 3.9: A árvore mínima de Steiner (linha contínua) e a árvore geradora mínima (linha tracejada).

Suponha que

$$R_{r_2 s_1} \geq R_{r_1 s_1} \quad (3.24)$$

na figura 3.10, abaixo. As arestas incidentes num ponto de Steiner devem, necessariamente, determinar um ângulo de 120° , de onde segue a figura 3.10.

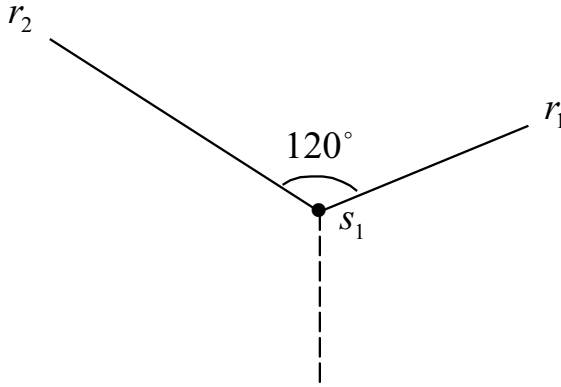


Figura 3.10: O diagrama usado na dedução da equação (3.23).

Agora, utilizando a lei dos co-senos, temos

$$R_{r_2 r_1}^2 = R_{r_2 s_1}^2 + R_{r_1 s_1}^2 - 2R_{r_2 s_1} R_{r_1 s_1} \cos 120^\circ, \quad (3.25)$$

ou equivalentemente,

$$R_{r_2 r_1}^2 = R_{r_2 s_1}^2 + R_{r_1 s_1}^2 + R_{r_2 s_1} R_{r_1 s_1}. \quad (3.26)$$

Levando em conta a inequação (3.24) obtemos

$$R_{r_2 r_1}^2 = R_{r_2 s_1}^2 + R_{r_1 s_1}^2 + R_{r_2 s_1} R_{r_1 s_1} \quad (3.27)$$

$$\leq R_{r_2 s_1}^2 + R_{r_2 s_1}^2 + R_{r_2 s_1}^2 \quad (3.28)$$

$$= 3R_{r_2 s_1}^2, \quad (3.29)$$

donde, pela positividade das normas na inequação acima,

$$R_{r_1 r_2} \leq \sqrt{3} R_{r_2 s_1}. \quad (3.30)$$

Considere agora o conjunto

$$A_1 = r_j - \{r_1\}, j = 1, 2, \dots n.$$

O conjunto A_1 corresponde à árvore de Steiner cheia está representado na figura 3.11, abaixo.

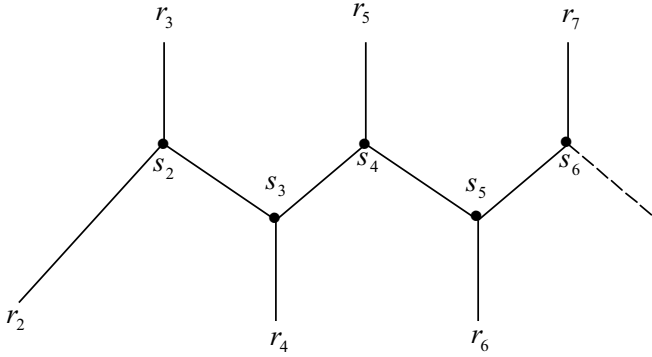


Figura 3.11: Representação gráfica de parte de uma árvore de Steiner cheia.

Agora considere o conjunto $A_2 = A_1 - \{r_2\}$. Depois de um cálculo análogo, como feito para o conjunto A_1 , pelo uso de

$$R_{r_2 r_3} \geq R_{r_3 s_2}, \quad (3.31)$$

teremos

$$R_{r_2 r_3} \leq R_{r_3 s_2} \sqrt{3}. \quad (3.32)$$

Utilizando o processo evidente e pela soma de todas as desigualdades obtidas acima, temos

$$R_{r_1 r_2} + R_{r_2 r_3} + R_{r_3 r_4} + \dots \leq (R_{r_2 s_1} + R_{r_3 s_2} + R_{r_4 s_3} + \dots) \sqrt{3} \quad (3.33)$$

O lado esquerdo da equação (3.33) é o comprimento da árvore geradora mínima ($l(MST)$). O comprimento da árvore mínima de Steiner é uma cota superior para o lado direito. Podemos então escrever:

$$l(MST) \leq l(SMT) \sqrt{3}. \quad (3.34)$$

Esta é a prova para o resultado introduzido pela equação (3.23).

O mesmo processo de indução pode ser usado para demonstrar a cota inferior de Moore se começarmos da desigualdade triangular e da equação (3.24). Neste caso, temos:

$$R_{r_1 r_2} \leq R_{r_1 s_1} + R_{r_2 s_1} \leq 2R_{r_2 s_1}. \quad (3.35)$$

É importante notar que a demonstração anterior depende do ângulo entre as arestas incidente num ponto de Steiner serem 120° .

A melhor cota inferior para o ρ_3 (e também para qualquer $\rho_d, d \geq 3$) é (veja [47, 54])

$$\rho \geq \frac{2 + x - \sqrt{x^2 + x + 1}}{\sqrt{3}} \approx 0.6158277481$$

e $x = 0.148663719631161$ é a única raiz real positiva de

$$12x^6 + 456x^5 + 783x^4 + 764x^3 + 408x^2 + 108x - 28.$$

Até o momento não conseguimos provar esta conjectura. A prova feita por Du é de difícil acesso e falhamos em todas as nossas tentativas em consegui-la. As referências citadas não contém a prova.

3.7 O programa Apolonio

O Programa Apolonio utiliza o algoritmo de Smith [5]. Ele pode ser encontrado na página www.biomat.org/apolonio. Foi desenvolvido em 1996 através da observação de estruturas predominantes nas biomacromoléculas de interesse e a mudança que foi feita nesse algoritmo se refere à parte que trata da busca de todas as topologias cheias. Várias configurações de estruturas secundárias encontradas na natureza serviram como inspiração para a utilização de uma única topologia: a que pode ser representada em um plano na forma de um "pente" ou "espinha de peixe".

Com essa abordagem, pode-se tratar o problema com um número maior de átomos, diferentemente dos algoritmos existentes na literatura que conseguem tratar o problema de Steiner com uma quantidade de pontos muito pequena, impossibilitando o seu uso em problemas de estruturas de macromoléculas ou de configuração

de estruturas secundárias e, com as devidas alterações posteriores em problemas de configuração de proteínas em sua estrutura terciária.

Para tecer mais alguns comentários, notou-se que uma das razões que tornam o algoritmo de Smith lento é a busca em várias topologias. Apesar de restrito o espaço de busca quando se procura apenas por topologias cheias, o número de topologias a ser otimizada ainda é muito grande, com a totalidade de combinações crescendo exponencialmente. Além disso, o algoritmo é bastante genérico à medida que não se restringe a uma única dimensão fixa d o que não parece ter nenhuma importância no processo de modelagem que estamos considerando.

Uma maneira mais prática de se conseguir um ganho computacional, tanto no número de pontos de entrada como no tempo de execução no algoritmo descrito no trabalho [5] é a percepção de especificidades de cada espaço d de aplicação. Em outros termos, heurísticas podem ser acrescentadas nesse algoritmo (ou num de seus aperfeiçoamentos) para acrescentar eficiência. No entanto, a robustez é uma outra questão: MacGregor Smith, no seu trabalho com o problema dual mostra que é possível acrescentar os métodos clássicos de otimização para acelerar sua convergência. Esse fato já havia sido observado pelo próprio Smith em seu trabalho original.

J. Macgregor Smith observou, que tratando o problema dual relacionado à configuração dos pontos de Steiner no espaço, teria como aplicar os métodos clássicos de programação ao problema quadrático resultante. Esse problema de otimização clássico não admite um algoritmo em tempo polinomial para sua solução e, por isso, continua a ser um dos problemas muito difíceis de otimização. Além disso, mesmo o problema sendo convexo, a função objetivo é de maximização, logo pode não haver um único ótimo. Essas informações já foram enfatizadas nas páginas anteriores.

Capítulo 4

Resultados e Conclusões

4.1 Introdução

Neste capítulo discutiremos alguns resultados obtidos nesta pesquisa. Definiremos os principais entes matemáticos utilizados na dedução dos fatos observados: os pontos regulares, o comprimento de árvores mínimas geradoras referentes a estes pontos de entrada tomados na hélice circular reta, os ângulos formados pelas arestas na topologia de referência a ser definida, e em conexões arbitrárias que sugerem resultados interessantes, alguns relatados em trabalhos e exposições recentes (veja [10, 55, 56, 57, 58, 53, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68]). A árvore geradora mínima oferece as primeiras restrições fundamentais para o problema da razão de Steiner na hélice circular reta e oferece a oportunidade de abordagens diferentes das atuais, descritas na seção 4.3 deste capítulo. Essas restrições fundamentais serão detalhadas com objetivo de guiar os interessados na busca de configurações ótimas para o problema de Steiner no \mathbb{R}^3 , principalmente aquelas que apresentam inspiração biológica, conforme atestado em trabalhos anteriores.

Depois de estabelecer as principais relações que envolvem a árvore geradora mínima (*MST*) passaremos a estabelecer os fatos que dizem respeito a árvore mínima de Steiner (*SMT*). Essas árvores descrevem conexões mínimas entre os pontos regulares com acréscimo de pontos extras (pontos de Steiner), caso necessário, desde que isso acarrete um decréscimo no comprimento da árvore geradora mínima. Definiremos a topologia inicialmente adotada para os pontos tomados na hélice, e depois mostraremos uma outra forma de conexão que poderá ser generalizada para configurações de pontos arbitrárias. Finalmente apresentaremos algumas

conclusões e sugestões para trabalhos posteriores.

4.2 Tratamento numérico dos pontos de Steiner na 3-sausage

A hélice circular reta apresenta características que parecem estar mais próximas aos modelos de geometria apropriada para moléculas biológicas, pois que é a modelagem inicial da estrutura apresentada pelo DNA [69], e parece ser um bom ponto de partida para uma pesquisa do conhecimento de processamento de informação na matéria viva.

Dividimos a pesquisa em duas partes: a primeira buscando a formação de um banco de dados a partir do programa Apolônio das árvores de Steiner de saída computacional, com uma quantidade de pontos suficiente para se ter uma conclusão confiável da localização dos pontos de Steiner quando os pontos de entrada estão sobre uma hélice (com variação de seu passo e espaçamento entre estes pontos variáveis). Outra, numa tentativa de modelagem teórica da árvore de Steiner, para numa etapa posterior fazer o confronto dessas duas abordagens e concluir qual boa é a aproximação teórica obtida para os pontos de Steiner. Temos, dessa maneira, uma forma de comparar os algoritmos que tratam os pontos de Steiner e retificar, ou ratificar, conjecturas que tratam da razão de Steiner. Da robustez do algoritmo (ou equivalentemente, a aproximação teórica conseguida), surge a possibilidade de aplicação na modelagem de ácidos nucleicos e proteínas, através da imensa massa de dados presentes em bancos de proteínas existentes na rede mundial de computadores.

Outros trabalhos [10, 11] já haviam descoberto que os pontos de Steiner deveriam estar sobre uma hélice circular reta de mesmo passo e raio menor que a original, se os pontos de entrada estivessem numa conformação que o quarto ponto de entrada formasse com os últimos três, um tetraedro regular - a equivalência à conhecida 3-sausage.

No entanto, neste trabalho, resolvemos fazer uma perturbação dos pontos de entrada, colocando-os em posições igualmente espaçadas, aqui chamadas de ω apenas, mas não mais formando necessariamente tetraedros regulares com o quarto ponto. Além disso, modificamos o passo dessa hélice, chamado aqui de α , simplesmente.

Essas perturbações foram feitas com o intuito de se descobrir se, realmente, uma configuração análoga à 3-sausage nos pontos de entrada detém a mínima razão de Steiner. Por existir uma famosa conjectura que a configuração 3-sausage é a menor possível para a razão de Steiner em todas as dimensões, tentamos verificar a validade dessa afirmação no caso particular do espaço tridimensional com as perturbações (ω, α) .

As perturbações assinaladas acima são fundamentais para que compreendamos o problema de Steiner numa estrutura semelhante à helicoidal, como também um passo inicial para a determinação de uma superfície que poderá servir de base para estudos de estabilidade de macromoléculas biológicas.

Uma outra maneira de estudarmos a estrutura de uma macromolécula é através de suas coordenadas cartesianas. No entanto, esse método não é suficiente para extrair características de estabilidade que possibilitem esquemas de classificações genéricos. A metodologia procurada nesse trabalho tenta encontrar esquemas mais gerais para descrição das proteínas, que possibilitem não só a classificação estrutural aparente. E, para essa finalidade, surge como possibilidade de abordagem um esquema de ordenação em termos de energia potencial / razão de Steiner para estabelecer o grau de similaridade de duas macromoléculas. Esse fato possibilitará a criação de uma árvore de conectividade entre as macromoléculas e mais ainda, mostrar características entre elas que permitam voltar a moléculas ancestrais, fato muito importante para conhecer como determinadas macromoléculas evoluíram e, portanto, prever possibilidades de futuras evoluções.

Tomamos os pontos de entrada sobre uma hélice circular reta. As coordenadas paramétricas de uma hélice circular reta, em que seus pontos repousam sobre um cilindro de raio igual a $a = \text{constante}$, e passo igual a $2\pi\alpha$ constante são:

$$\vec{r}(t) = (a \cos t, a \sin t, \alpha t), \quad (4.1)$$

onde $t \in \mathbb{R}$. Na figura 4.1 temos o gráfico imagem da hélice circular reta com raio $a = 1$, cujo traço é uma curva em espiral contínua no semi-espaco acima do plano xy .

Discretizemos a hélice circular reta, de forma que o j -ésimo ponto sobre a hélice circular reta terá as seguintes coordenadas para α e ω dados fixos,

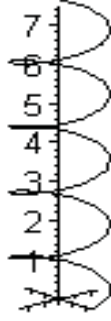


Figura 4.1: *Exemplo da imagem de uma hélice circular reta de raio $a = 1$.*

$$P_j = (a \cos \omega j, a \sin \omega j, \alpha \omega j), \quad (4.2)$$

onde: $j = 1 \dots n$, e $a = \text{constante}$, como sendo o raio do cilindro circular reto em que a referida hélice circular reta repousa.

O primeiro experimento computacional feito tomou os valores de α e ω constantes e tentou descobrir qual o lugar geométrico dos pontos de Steiner. Mais especificamente, foram tomados os valores de α e ω obtidos a partir da 3-sausage, ou equivalentemente, dos tetraedros regulares justapostos pelas faces seguindo numa direção pré-especificada.

Vamos calcular α e ω para os tetraedros regulares, lembrando que a 3-sausage é um conjunto particular de pontos do \mathbb{R}^3 , descrita no capítulo 3 e obtida da seguinte maneira: 1) Começamos com uma bola de diâmetro unitário no espaço tridimensional; 2) sucessivamente adicionamos bolas de mesmo diâmetro, de forma que a n -ésima bola adicionada esteja sempre tocando as $\min\{3, n - 1\}$ bolas mais recentemente adicionadas. Uma maneira de visualizar este conjunto de pontos é imagina-lo como aquele cujos pontos estão igualmente espaçados sobre uma hélice circular reta.

Na discussão seguinte, sempre que nos referirmos a *ponto* e *segmento*, estamos tratando de vetor posição, em relação à base canônica do \mathbb{R}^3 .

Considerando as regras 1 e 2 para a formação da 3-sausage, vemos que o ponto \vec{P}_n é equidistante da face formada pelos últimos 3 pontos dados \vec{P}_{n-1} , \vec{P}_{n-2} e \vec{P}_{n-3} , acontecendo fato semelhante com \vec{P}_{n-4} em relação a estes mesmos pontos, veja figura 4.2.

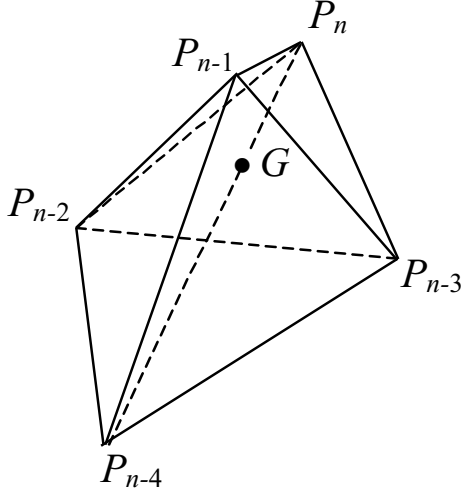


Figura 4.2: Duas células unitárias da 3-sausage.

O ponto \vec{G} , ponto de interseção do segmento $\overrightarrow{P_n P_{n-4}}$ com o triângulo formado pelos três pontos \vec{P}_{n-1} , \vec{P}_{n-2} e \vec{P}_{n-3} , é o baricentro dessa triângulo, ou seja,

$$\vec{G} = \frac{1}{3}(\vec{P}_{n-1} + \vec{P}_{n-2} + \vec{P}_{n-3}) \quad (4.3)$$

Além disso, o ponto \vec{G} também é o ponto médio do segmento $\overrightarrow{P_n P_{n-4}}$, pois os pontos \vec{P}_{n-4} e \vec{P}_n encontram-se simetricamente localizados em relação ao plano determinado pelos pontos \vec{P}_{n-1} , \vec{P}_{n-2} e \vec{P}_{n-3} , pois foram definidos como pontos da 3-sausage. Logo,

$$\vec{G} = \frac{\vec{P}_n + \vec{P}_{n-4}}{2} \quad (4.4)$$

Das equações (4.3) e (4.4) (veja [70]), resulta que

$$\vec{P}_n = \frac{2}{3}(\vec{P}_{n-1} + \vec{P}_{n-2} + \vec{P}_{n-3}) - \vec{P}_{n-4} \quad (4.5)$$

Como estes pontos estão sobre a hélice circular reta com raio $a = 1$, em conformidade com a equação 4.2, podemos explicitar os pontos P_j que precisaremos para a equação acima como o seguinte conjunto

$$\{\vec{P}_n = (\cos n\omega, \text{sen } n\omega, n\alpha\omega),$$

$$\begin{aligned}
\vec{P}_{n-1} &= (\cos(n-1)\omega, \sin(n-1)\omega, (n-1)\alpha\omega), \\
\vec{P}_{n-2} &= (\cos(n-2)\omega, \sin(n-2)\omega, (n-2)\alpha\omega), \\
\vec{P}_{n-3} &= (\cos(n-3)\omega, \sin(n-3)\omega, (n-3)\alpha\omega), \\
\vec{P}_{n-4} &= (\cos(n-4)\omega, \sin(n-4)\omega, (n-4)\alpha\omega)
\end{aligned}$$

Então a equação 4.5 pode ser reescrita como o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases}
\cos n\omega = \frac{2}{3}(\cos(n-1)\omega + \cos(n-2)\omega + \cos(n-3)\omega) - \cos(n-4)\omega \\
\sin n\omega = \frac{2}{3}(\sin(n-1)\omega + \sin(n-2)\omega + \sin(n-3)\omega) - \sin(n-4)\omega, \\
n\bar{\omega} = \frac{2}{3}((n-1)\bar{\omega} + (n-2)\bar{\omega} + (n-3)\bar{\omega}) - (n-4)\bar{\omega}
\end{cases} \quad (4.6)$$

onde $\bar{\omega} = \alpha\omega$.

A última das equações do sistema de equações 4.6 nos apresenta uma identidade como relação entre as terceiras coordenadas dos pontos dados. No entanto, as duas primeiras podem ser reescritas ajustadas ao plano de Gauss, da seguinte maneira:

$$e^{n\omega i} = \frac{2}{3}(e^{(n-1)\omega i} + e^{(n-2)\omega i} + e^{(n-3)\omega i}) - e^{(n-4)\omega i}. \quad (4.7)$$

A equação 4.7 vale para todo $\omega \in \mathbb{R}$, o conjunto dos números reais e \mathbb{Z} , conjunto dos números inteiros relativos. Em particular, tomando $n = 4$, temos a seguinte relação

$$e^{4\omega i} = \frac{2}{3}(e^{3\omega i} + e^{2\omega i} + e^{\omega i}) - 1. \quad (4.8)$$

Ou equivalentemente,

$$-3z^4 + 2z^3 + 2z^2 + 2z - 3 = 0, \quad (4.9)$$

onde $z = e^{\omega i}$.

Resolvendo a equação (4.9) encontramos as seguintes soluções: $z_1 = -\frac{2}{3} + \frac{\sqrt{5}}{3}i$, $z_2 = -\frac{2}{3} - \frac{\sqrt{5}}{3}i$ e $z_3 = 1$ (com multiplicidade 2). Descartando o terceiro resultado, trivial e que não pode ser a solução do nosso problema, pois significaria que $\omega = \pi$ (configuração planar), verificamos que o valor de $\cos \omega = -\frac{2}{3}$. Considerando ainda a célula unitária da 3-sausage, o tetraedro regular, com os pontos P_j , $j = n-1, n, n+1, n+2$, podemos calcular o quadrado das normas

$$\|\overrightarrow{P_{n-1}P_n}\|^2 = \|\overrightarrow{P_{n+1}P_n}\|^2 = \|\overrightarrow{P_{n+1}P_{n+2}}\|^2 = 4 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) + \alpha^2\omega^2. \quad (4.10)$$

$$\|\overrightarrow{P_{n-1}P_{n+1}}\|^2 = \|\overrightarrow{P_nP_{n+2}}\|^2 = 4 \operatorname{sen}^2\omega + 4\alpha^2\omega^2. \quad (4.11)$$

$$\|\overrightarrow{P_{n-1}P_{n+2}}\|^2 = 4 \operatorname{sen}^2\left(\frac{3\omega}{2}\right) + 9\alpha^2\omega^2. \quad (4.12)$$

Das equações (4.10), (4.11) e (4.12) com os requerimentos de regularidade da célula unitária da 3-sausage, obtemos as seguintes equações

$$5 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) - 8 \operatorname{sen}^2\omega + 3 \operatorname{sen}^2\left(\frac{3\omega}{2}\right) = 0. \quad (4.13)$$

$$\alpha = \frac{2}{\omega\sqrt{3}} \sqrt{\operatorname{sen}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) - \operatorname{sen}^2\omega}. \quad (4.14)$$

das quais podemos obter os valores para α e ω com o número de dígitos decimais desejados. Para exemplificar e também para uso posterior, apresentamos nas equações (4.16) e (4.15) abaixo um cálculo com 40 dígitos decimais para α e ω .

$$\omega_R = 2.300523983021862982686118351453072137495, \quad (4.15)$$

$$\alpha_R = 0.2645400021654114340179065639101187607985, \quad (4.16)$$

onde o subscrito R denota uma referência aos tetraedros regulares.

Através de um experimento computacional, Mondaini (veja [11]) observou que os pontos de Steiner para essa configuração de α_R e ω_R estão sobre a mesma superfície helicoidal dos pontos regulares, porém sobre uma hélice num cilindro interior. Mais especificamente, os pontos de Steiner obtidos estavam sobre uma hélice de raio $r(\alpha_R, \omega_R) = 0.218217a$, onde a seria o raio da hélice externa. Através do resultado desse trabalho visamos responder a outras questões relacionadas.

A primeira pergunta que buscamos responder foi se as características dos pontos de Steiner estarem sobre a mesma helicóide dos pontos originalmente dados se estendia para outras configurações de α e ω . Inicialmente, fixamos o valor de $\alpha = \alpha_R$ e variamos o valor de ω , para obter os diversos valores de raio r . Chamamos

a interseção do plano $\alpha = \alpha_R$ com a superfície a ser definida, paralelamente ao plano (ω, ρ) , onde ρ é a razão de Steiner, de *corte dos tetraedros regulares*, numa referência à célula unitária da 3-sausage.

Verificamos computacionalmente através de grande conjunto de testes que os pontos de Steiner estavam, assim como os pontos analisados no trabalho anterior, sobre um cilindro circular reto, com os pontos de Steiner na mesma helicóide dos pontos regulares dados originalmente. No entanto, embora tivéssemos a localização precisa dos pontos de Steiner conseguidos com o auxílio do programa de computador Apolônio, não possuíamos uma maneira analítica de obtê-los. Sabíamos, contudo, que os pontos de Steiner estimados deveriam ter a seguinte forma

$$\vec{S}_k = (r(\omega) \cos k\omega, r(\omega) \sin k\omega, k\alpha\omega), \quad (4.17)$$

onde $r = r(\omega)$ é o raio referido anterior, uma função dependente do valor ω , mas independentemente do α , uma vez que ele foi fixado para o valor dos tetraedros regulares.

A necessidade de explicitação de função raio $r(\omega)$ para a definição dos pontos de Steiner das diversas configurações que precisávamos estudar, resultou na tentativa de diversos métodos numéricos para conseguir uma aproximação. Essa função $r(\omega)$ será chamada de *função raio*, sendo fundamental para a modelagem dos pontos de Steiner, uma vez que as duas primeiras coordenadas dos pontos de Steiner dela depende, conforme pode ser visto na equação (4.17).

Supusemos que a saída computacional fosse correta, isto é, que ela realmente representava a configuração dos pontos de Steiner procurados para prosseguir na busca de uma modelagem para esses pontos. Para este fim, foi necessária a utilização de vários métodos numéricos computacionais para conseguir uma função que aproximasse os pontos obtidos, tais como Padé, Tchebyshev, e também a associação desses dois métodos, conhecida na literatura de Cálculo Numérico e Teoria da Aproximação como método *ChebPade*. Destes, o que mais ajustou esses pontos de saída foi o método de Tchebyshev, associado ao método clássico de aproximação por mínimos quadrados.

Os polinômios de *Tchebyshev*, que definiremos logo a seguir, podem ser usados para reduzir o grau de um polinômio aproximante com uma perda mínima de precisão. Como os polinômios de Tchebyshev têm um mínimo valor absoluto máximo (são os polinômios *minimax*) que é estendido uniformemente para todo

o seu intervalo de definição, podem reduzir o grau de um polinômio aproximante sem exceder a tolerância de erro. Esta foi uma das razões que nos levaram a tentar este método, pois tínhamos um conjunto de dados muito grande, e quaisquer aproximações unicamente por polinômios arbitrários de grau alto não são práticas e, portanto, indesejáveis.

Vamos descrever brevemente como obter os polinômios utilizados na modelagem. Para cada $x \in [-1, 1]$, o polinômio de Tchebyshev, definimos

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), \tag{4.18}$$

para cada $n \geq 0$.

Fazendo a substituição $\theta = \arccos x$, mudamos a equação (4.18) para

$$T_n(\theta(x)) = T_n(\theta) = \cos n\theta, \tag{4.19}$$

onde $\theta \in [0, \pi]$.

Utilizando a equação (4.19) uma relação recursiva pode ser obtida através da observação que

$$T_{n+1}(\theta) = \cos n\theta \cos \theta - \operatorname{sen} n\theta \operatorname{sen} \theta, \tag{4.20}$$

$$T_{n-1}(\theta) = \cos n\theta \cos \theta + \operatorname{sen} n\theta \operatorname{sen} \theta, \tag{4.21}$$

e, das equações (4.20) e (4.21), podemos deduzir

$$T_{n+1}(\theta) = 2 \cos n\theta \cos \theta - T_{n-1}(\theta), \tag{4.22}$$

Ou ainda, retornando para as variáveis x originais temos

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n \geq 1. \tag{4.23}$$

Utilizando a definição e a fórmula de recorrência, podemos verificar que os cinco primeiros polinômios de *Tchebyshev* são os seguintes:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x \quad \text{e} \quad T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1.$$

Para variar o valor de ω num intervalo escolhido previamente, por exemplo $\omega \in (0, \pi)$, resolvemos utilizar o co-seno do ângulo entre duas arestas consecutivas

para vértices dispostos ao longo de uma hélice circular reta como variável dependente dos polinômios de Tchebyshev, pois ele se ajusta à condição de pertencer ao intervalo $[-1, 1]$.

O co-seno do ângulo entre arestas consecutivas será deduzido mais adiante, assim como uma formula generalizada que considera o ângulo entre arestas que conectam pontos não-consecutivos na mesma hélice discretizada uniformemente. O co-seno dos ângulos θ de arestas consecutivas é dado por

$$\cos(\theta, \alpha) = -1 + \frac{2(1 - \cos \omega)^2}{2(1 - \cos \omega) + \omega^2 \alpha^2}. \quad (4.24)$$

Assim, tomamos para nova variável para função de aproximação $\cos(\theta, \alpha_R) = u(\omega)$, e um resultado interessante para a modelagem da função raio foi obtido. Neste caso, a equação (4.24) terá seguinte forma

$$u(\omega) = -1 + \frac{2(1 - \cos \omega)^2}{2(1 - \cos \omega) + 0.069981412\omega^2}, \quad (4.25)$$

onde $\alpha_R = 0.26454000216$ na equação (4.24) acima.

A aproximação para a função raio é então buscada na forma,

$$\bar{r}(\omega) = aT_0(u) + bT_1(u) + cT_2(u) + dT_3(u) + eT_4(u), \quad (4.26)$$

onde os $T_j(u), j = 0, 1, \dots, 4$ são os primeiros polinômios de *Tchebyshev*. Testes feitos com os dados mostraram que a consideração de polinômios de grau par seria mais adequado à modelagem pela disposição dos pontos. Ajustamos pelo métodos dos mínimos quadrados, utilizando os polinômios de Tchebyshev, e adicionalmente ordenamos o resultado em potências de $u(\omega)$. Para isso, utilizamos o sistema de computação algébrica *Maple*®.

$$\begin{aligned} \bar{r}(\omega) &= 1.259790114 - 1.608492460u + 0.4890590338u^2 \\ &+ 0.5272768124u^3 - 0.2470980688u^4. \end{aligned} \quad (4.27)$$

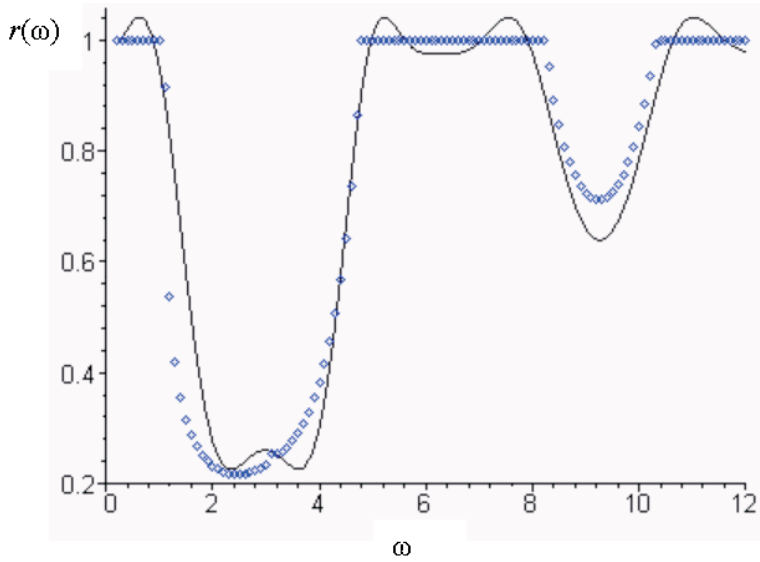


Figura 4.3: Aproximação numérica para a função raio e dados experimentais obtidos pelo programa Apolonio.

A figura 4.3 mostra a aproximação da função raio pela expressão deduzida acima. Como pode ser visto, a função da modelagem (linha contínua) está bastante próxima do resultado obtido pelo programa APOLONIO (pontilhado). No entanto, alguns trechos do gráfico não se ajustaram muito bem. Uma diferença mais acentuada é percebida nos pontos mais próximos ao valor para $\omega = \pi$ e em alguns outros pontos. Devido à falta de uma função representativa aproximada por método numérico, passamos a buscar a função exata descrita pelas propriedades dos pontos de Steiner.

Antes de mostrar a busca da função analítica utilizando as propriedades dos pontos de Steiner, vamos apresentar ainda algumas considerações que se mostraram altamente proveitosas para as idéias que se sucederam e que serão descritas nas próximas seções. A primeira delas foi a dedução de uma expressão que apresentava onde deveria estar a posição do ponto de Steiner obtido em relação aos pontos regulares de entrada.

Vamos esboçar brevemente a modelagem dos dados experimentais do programa *Apolonio*. A saída computacional se mostrou muito sensível às mudanças nos parâmetros de entrada e, para a conclusão da modelagem, seria necessária uma série de outros experimentos suplementares seguidos de outros testes de caráter

estatístico que assegurem uma função objeto resultante cuja correção seja minimamente aceitável.

Como etapa inicial dessa modelagem, é importante notar que os valores de ω de saída computacional não são mais os mesmos valores ω dos pontos regulares de entrada. É preciso observar que, desta vez, os valores de ω sofrerão uma pequena perturbação em relação aos números ω de entrada, o qual chamamos de ω_{kcorr} , com o significado que o ω de entrada sofreu uma correção. Para essa modelagem admitimos que os pontos de Steiner também estão sobre uma hélice circular reta, devido aos testes numéricos feitos. A fórmula de correção deduzida tem a seguinte forma

$$\omega_{kcorr} = \arctan \frac{y_k}{x_k} + 2\pi \left[\frac{z_k}{2\pi\alpha} \right] + \pi \left[\frac{m}{2} \right], \quad (4.28)$$

onde x_k , y_k e z_k são as coordenadas do k -ésimo ponto de entrada, o símbolo $[\bullet]$ denota a função maior inteiro contido no intervalo e $m = 1, 2, 3, 4$ corresponde ao número do quadrante de co-seno e seno no par ordenado (co-seno, seno). Ou, $1 = (+, +)$, $2 = (-, +)$, $3 = (-, -)$, $4 = (+, -)$. Esta fórmula foi deduzida em 2001, pelo Prof. R. Mondaini, após um número muito grande de experimentos computacionais relevantes, utilizando o programa Apolônio listado ao fim desta monografia.

Abaixo, consideraremos novamente os pontos de Steiner escritos em relação à base canônica do espaço euclidiano tridimensional, da seguinte maneira

$$S_k = (r(\omega_{kcorr}) \cos \omega_{kcorr}, r(\omega_{kcorr}) \sen \omega_{kcorr}, \alpha(\omega_{kcorr})\omega_{kcorr}), \quad (4.29)$$

onde ω_{kcorr} é definido pela equação 4.28.

Além disso, consideramos os vetores diferenças determinados \vec{S}_k , \vec{S}_{k+1} e \vec{S}_{k-1} :

$$\vec{S}_{k+1} - \vec{S}_k = \begin{cases} x = r(\cos \omega_{(k+1)corr} - \cos \omega_{kcorr}) \\ y = r(\sen \omega_{(k+1)corr} - \sen \omega_{kcorr}) \\ z = \alpha(\omega_{(k+1)corr} - \omega_{kcorr}) \end{cases} \quad (4.30)$$

$$\vec{S}_{k-1} - \vec{S}_k = \begin{cases} x = r(\cos \omega_{(k-1)corr} - \cos \omega_{kcorr}) \\ y = r(\sen \omega_{(k-1)corr} - \sen \omega_{kcorr}) \\ z = \alpha(\omega_{(k-1)corr} - \omega_{kcorr}) \end{cases} \quad (4.31)$$

e

$$\vec{P}_{k-1} - \vec{S}_k = \begin{cases} x = \cos k\omega - r \cos \omega_{kcorr} \\ y = \sen k\omega - r \sen \omega_{kcorr} \\ z = \alpha(k\omega - \omega_{kcorr}) \end{cases} \quad (4.32)$$

onde ω_{kcorr} é dado pela eq. 4.28 e ω é o "valor de entrada" da coordenada angular dos pontos regulares que estão dispostos equidistantemente em uma hélice. As normas euclidianas dos vetores acima são calculados usando uma análise estatística que forneceu $\omega_{kcorr} = bk\omega + c$, ou $\omega_{(k+1)corr} - \omega_{kcorr} = b\omega$. Temos:

$$\|\vec{S}_{k-1} - \vec{S}_k\| = \|\vec{S}_{k+1} - \vec{S}_k\| = \sqrt{\alpha^2 b^2 \omega^2 + 2r^2(1 - \cos b\omega)}, \quad (4.33)$$

$$\|\vec{P}_{k+1} - \vec{S}_k\| = \sqrt{1 + r^2 - 2r \cos(k\omega - \omega_{kcorr}) + \alpha^2(k\omega - \omega_{kcorr})^2}. \quad (4.34)$$

Estas normas serviram como testes com os valores numéricos conseguidos através do programa *Apolonio*. Tínhamos os valores das árvores mínimas geradoras e também das árvores mínimas de Steiner obtidos com o programa computacional *Apolonio*, confrontamos os valores com as árvores com esses comprimentos e verificamos se o modelo estava ajustado. Dentre as observações mais significantes dos testes numéricos podemos citar os seguintes resultados:

$$\omega_{(k+1)corr} - \omega_{kcorr} \approx b\omega, \quad (4.35)$$

$$r(\omega_{kcorr}) \approx r(\omega), \quad \forall k, \quad (4.36)$$

$$\alpha(\omega_{k_{corr}}) \approx \alpha(\omega), \quad \forall k. \quad (4.37)$$

Como síntese das observações dos vários experimentos computacionais temos que a variação $\omega_{(k+1)_{corr}} - \omega_{k_{corr}}$ é aproximadamente linear em relação à coordenada angular ω de entrada, e com coeficientes b e c dados aproximadamente por $b \approx 1$, $c \approx 0$. Além disso, notamos que a função $\alpha(\omega)$ é praticamente insensível às pequenas alterações feitas. Logo, a aceitação de $\alpha(\omega) = \alpha = \text{constante}$ é um procedimento natural para a modelagem realizada.

Finalmente, podemos apresentar a modelagem conseguida para a saída, que já aponta para alguns bons resultados. Faremos isto pela utilização dos pontos de Steiner com as coordenadas de forma semelhante à eq. (4.17) e de vetores diferença expressos adequadamente como veremos a seguir. Isto nos possibilitou o cálculo dos comprimentos das árvores mínimas geradoras e de Steiner, apresentado nas seções seguintes.

4.3 A função razão de Steiner

Ao invés de calcular simplesmente a medida dos ângulos entre arestas consecutivas na árvore geradora, usaremos o conjunto dos pontos regulares para calcular o ângulo entre as arestas cujos pontos finais P_{j+n} e P_{j+2n} estão localizados equidistantemente de um determinado ponto regular P_j , ou seja, queremos obter o ângulo entre as arestas $\overrightarrow{P_j P_{j+n}}$ e $\overrightarrow{P_{j+n} P_{j+2n}}$. No caso particular em que $n = 1$, temos os ângulos entre as arestas consecutivas. Observemos que

$$\vec{P}_{j+n} = (\cos(j+n)\omega, \text{sen}(j+n)\omega, (j+n)\alpha\omega), \quad (4.38)$$

$$\vec{P}_{j+2n} = (\cos(j+2n)\omega, \text{sen}(j+2n)\omega, (j+2n)\alpha\omega), \quad (4.39)$$

onde n é um número inteiro, \vec{P}_j é dado como na equação 4.2.

Podemos agora tornar explícitos os vetores $\overrightarrow{P_j P_{j+n}}$ e $\overrightarrow{P_{j+n} P_{j+2n}}$, que são os seguintes:

$$\overrightarrow{P_j P_{j+n}} = (\cos(j+n)\omega - \cos j\omega, \text{sen}(j+n)\omega - \text{sen} j\omega, n\alpha\omega) \quad (4.40)$$

$$\overrightarrow{P_{j+n}P_{j+2n}} = (\cos(j+2n)\omega - \cos(j+n)\omega, \sin(j+2n)\omega - \sin(j+n)\omega, n\alpha\omega) \quad (4.41)$$

Como os pontos regulares foram tomados igualmente espaçados na hélice circular reta, então são iguais as seguintes normas

$$\|\overrightarrow{P_jP_{j+n}}\| = \|\overrightarrow{P_{j+n}P_{j+2n}}\| = \sqrt{2 - 2\cos n\omega + n^2\alpha^2\omega^2}. \quad (4.42)$$

Agora calculando o produto interno usual

$$\langle \overrightarrow{P_jP_{j+n}}, \overrightarrow{P_{j+n}P_{j+2n}} \rangle = \cos 2n\omega - 2\cos n\omega - n^2\alpha^2\omega^2 + 1. \quad (4.43)$$

Das equações (4.42) e (4.43), somando e subtraindo a expressão $2(\cos n\omega - 1)$ a esta última, podemos calcular o co-seno dos ângulos entre as arestas da árvore geradora, quando saltamos $s - 1$ pontos dados na hélice, que é a seguinte:

$$\cos \theta_s = -1 + \frac{2(1 - \cos s\omega)^2}{2 - 2\cos s\omega + s^2\omega^2\alpha^2} \quad (4.44)$$

No caso particular em que não saltamos pontos dados na hélice ($s = 1$), ou saltamos 1 e 2 ($s = 2, s = 3$, respectivamente), as equações obtidas a partir de (4.44) terão a seguinte forma:

$$\cos \theta_1 = -1 + \frac{2(1 - \cos \omega)^2}{2 - 2\cos \omega + \omega^2\alpha^2}. \quad (4.45)$$

$$\cos \theta_2 = -1 + \frac{2(1 - \cos 2\omega)^2}{2 - 2\cos 2\omega + 4\omega^2\alpha^2}. \quad (4.46)$$

$$\cos \theta_3 = -1 + \frac{2(1 - \cos 3\omega)^2}{2 - 2\cos 3\omega + 9\omega^2\alpha^2}. \quad (4.47)$$

A equação (4.45) representa o co-seno do ângulo entre as arestas adjacentes na hélice circular reta. As funções definidas pelas equações (4.45), (4.46) e (4.47) são importantes porque permitem fazer uma restrição nos ângulos entre arestas para árvores de Steiner obtidas a partir de árvores geradoras mínimas, válidas para espaços euclidianos quaisquer, e que foi discutida no capítulo 2. Essa restrição nos diz que numa árvore de Steiner que possui os ângulos entre certas arestas maiores ou iguais a 120° então, necessariamente, os pontos de Steiner devem coincidir com

os pontos regulares no ponto em que tal fato ocorre. Portanto, a árvore de Steiner não é cheia, destoando daquelas que pretendemos tratar.

Abaixo, apresentamos os gráficos das funções $f_s(\omega, \alpha) = \cos \theta_s$ para o corte dos tetraedros regulares ($\alpha_R = 0.2645400021654114340179065639101187607985$), com $s = 1, 2$ e 3 . A análise da restrição do ângulo na árvore geradora pode ser resumida pela desigualdade $\cos \theta_s > -\frac{1}{2}$, e algumas configurações são prontamente excluídas.

Tomamos como a região de interesse o intervalo de números reais $(1.23, 5.05)$. Esta região será justificada quando estudarmos a função razão de Steiner proposta neste capítulo. Na figura 4.4, podemos observar que o intervalo de valores dos ângulos ω é praticamente todo válido. Em contraste, pelas figuras 4.5 e 4.6 que representam os gráficos de co-senos quando saltamos um ou dois pontos regulares de cada vez, com $n = 2$ e $n = 3$, respectivamente, vemos que são excluídas grandes regiões dentro do intervalo de interesse. As duas últimas configurações inviabilizam boa parte do domínio que trabalhamos. Assim, decidimos descartar estas configurações como possibilidades de árvores geradoras. Porém, como veremos adiante, esta restrição não está explícita no programa computacional que trabalhamos. Veremos que podemos explicitar precisamente a saída computacional, embora esta não obedeça a estas restrições de ângulos. Vamos então proceder como se estas configurações não tenham ainda sido descartadas.

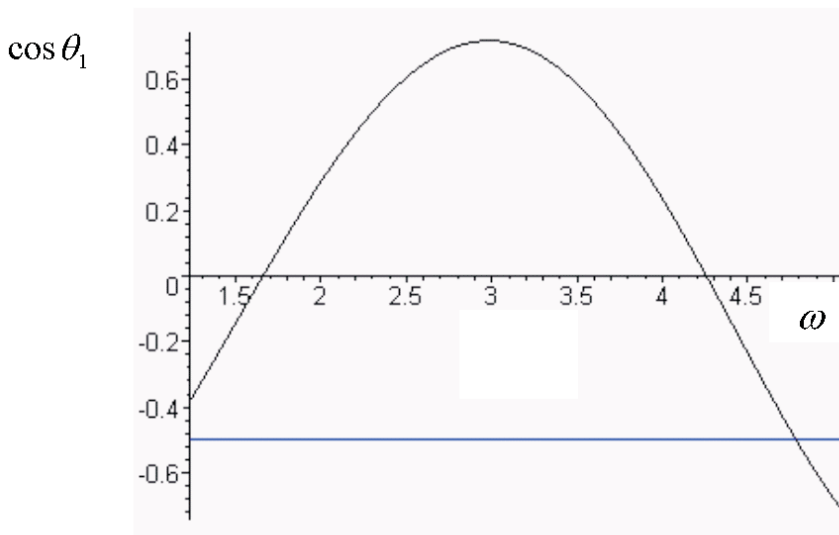


Figura 4.4: *Co-seno do ângulo entre arestas consecutivas, $s = 1$.*

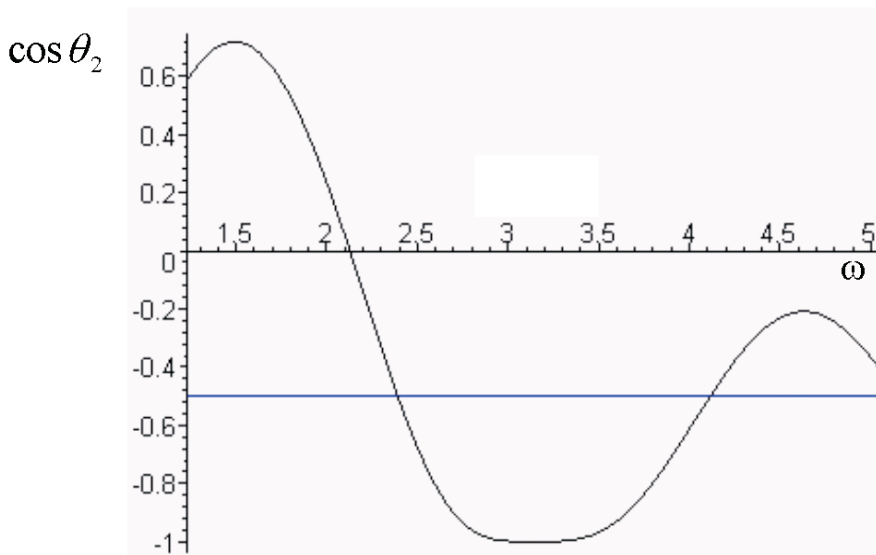


Figura 4.5: *Co-seno do ângulo para $s = 2$.*

Inicialmente, vamos calcular a árvore geradora imaginando que somente exista uma forma de conexão para os pontos dados na hélice. Vamos mostrar as vantagens dessa abordagem e alguns resultados preliminares conseguidos. Posteriormente, para calcular os possíveis comprimentos das árvores geradoras, seguiremos procedimento análogo ao utilizado para deduzir a fórmula para o co-seno do ângulo entre suas arestas assim formadas. A analogia da abordagem está no fato de que as árvores geradoras formadas terão comprimentos de arestas congruentes constituídas também por omissão de pontos regulares numa primeira montagem de árvores geradoras parciais, com o processo todo explicado em detalhes.

Suponhamos que a única maneira de conectar os pontos regulares seja de maneira sequencial, ou seja, pela formação dos vetores $\overrightarrow{P_j P_{j+1}}$, $j = 0, \dots, n - 1$. Poderemos formar, utilizando essa forma de conectar, $n - 1$ vetores, cuja soma do total das arestas existentes na árvore, chamada $l(Sp_1)$, é dada por

$$l(Sp_1) = (n - 1)\sqrt{2 - 2 \cos \omega + \alpha^2 \omega^2} \quad (4.48)$$

pois o comprimento da aresta $\|\overrightarrow{P_j P_{j+1}}\| = \sqrt{2 - 2 \cos \omega + \alpha^2 \omega^2}$, conforme a equação (4.42).

A figura 4.7 mostra a configuração da árvore geradora formada por 23 pontos regulares conectados sequencialmente para sua formação. Para a função razão de

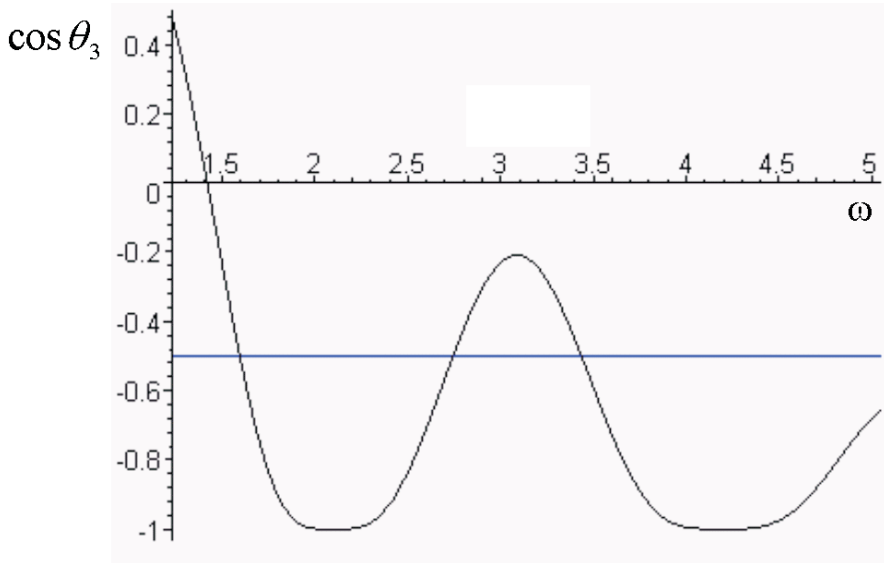


Figura 4.6: *Co-seno do ângulo entre arestas consecutivas, $s = 3$.*

Steiner com que trabalhamos esse número de pontos tende a infinito, pois a configuração da 3-sausage possui essa característica. Vamos então obter a função razão de Steiner a partir destas configurações de árvore geradora.

Para isso consideremos \mathcal{S} , o conjunto dos pontos de Steiner e \mathcal{N} o conjunto dos pontos regulares de entrada. Devemos enfatizar aqui que os pontos inicialmente gerados são fixos e os pontos de Steiner são as variáveis que se deseja obter. Podemos, então, formar os vetores gerados por estes dois conjuntos de pontos. Existem dois tipos de vetores que podem ser obtidos: os que ligam um ponto de Steiner a outro, e os que ligam os pontos de Steiner aos pontos regulares lançados como pontos de entrada. Pela figura 4.8, podemos claramente diferenciar estes dois tipos de vetores. Outra característica importante dessa árvore de Steiner é a existência de dois tipos de vetores para serem somados: os que estão nas extremidades da árvore, neste caso, haverá ligações de um ponto de Steiner com dois pontos regulares e uma ligação com outro ponto de Steiner; e os pontos que estão interiores à árvore de Steiner. Neste outro caso, poderá ser constatado uma ligação com um ponto regular e duas ligações com outros pontos de Steiner.

Os fatos acima relatados, baseados na figura 4.8, podem ser organizados da

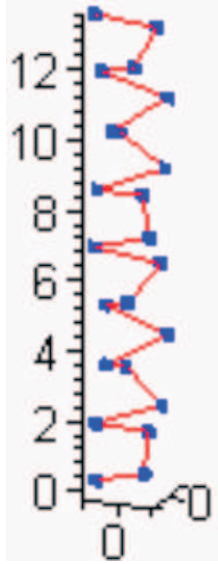


Figura 4.7: A árvore geradora formada por pontos consecutivos.

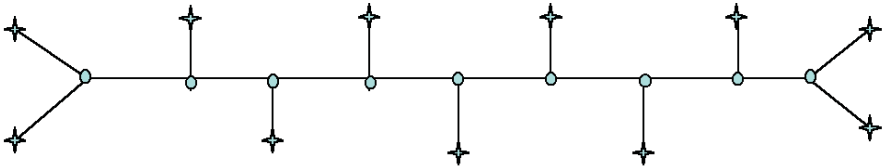


Figura 4.8: Topologia de referência.

seguinte maneira. Seja

$$\vec{S}_k = (r(\omega, \alpha) \cos k\omega, r(\omega, \alpha) \sin k\omega, \alpha k\omega) \quad (4.49)$$

onde $k = 1, 2, \dots, n - 2$, o vetor posição do k -ésimo ponto de Steiner, escrito em relação à base canônica do \mathbb{R}^3 . A função $r = r(\omega, \alpha)$ é a função raio como descrita na seção anterior, com a generalização para quaisquer valores de α e ω .

Sejam as coordenadas do j -ésimo ponto regular para qualquer perturbação da hélice circular reta dada pela equação (4.2).

Os vetores unitários formados a partir dos pontos regulares e dos pontos de Steiner são do tipo:

$$\vec{t}_{k,k} = \frac{\overrightarrow{S_k P_k}}{\|\overrightarrow{S_k P_k}\|}, \quad (4.50)$$

$$\vec{s}_{k,k-1} = \frac{\overrightarrow{S_k S_{k-1}}}{\|\overrightarrow{S_k S_{k-1}}\|} \quad (4.51)$$

onde $\|\bullet\|$, significa a norma euclidiana dos vetores em questão.

Com a observação da propriedade que o ângulo formado por estes vetores deve ser um ângulo de 120° , é possível obter o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \langle \vec{s}_{k-1,k}, \vec{s}_{k+1,k} \rangle = -\frac{1}{2} \\ \langle \vec{t}_{k,k}, \vec{s}_{k,k-1} \rangle = -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.52)$$

onde \langle, \rangle denota o produto interno euclidiano.

Estas equações são suficientes para determinar a função raio $r(\omega, \alpha)$, ou seja, [55, 59].

$$r(\omega, \alpha) = \frac{\alpha\omega}{\sqrt{2(1 - \cos \omega)(1 - 2 \cos \omega)}} \quad (4.53)$$

Para verificar a veracidade da solução encontrada, foi feita a comparação com os dados obtidos pelo programa APOLONIO para o corte dos tetraedros regulares. A figura 4.9 mostra a função raio exata (nos trechos em que $r > 1$, foi substituída por $r = 1$. Isto é comprovado pelas experiências numéricas efetuadas). Constatamos que, a menos de uma pequena diferença ao redor do valor π , obtivemos uma descrição apropriada para a função raio, conforme o conjunto de pontos obtidos.

Com a posse de um resultado bastante razoável para a função raio, o passo seguinte foi a busca da função razão de Steiner. Essa apresenta uma série de propriedades que podem ser utilizadas no tratamento de problemas de interesse biológico; alguns desses exemplos podem ser encontrados nos trabalhos recentemente publicados (veja [10, 55, 56, 53]) e também na seção seguinte.

Uma vez calculada a Sp_1 , e, neste caso, por ser a única árvore geradora possível, a própria MST , passamos a uma etapa mais elaborada, que é o cálculo da função razão de Steiner, modelagem de uma função teórica para a saída computacional. Essa é uma etapa que consumiu mais tempo. As duas partes em que foi dividida a pesquisa nesta etapa tiveram a seguinte seqüência: primeiro, foi calculada a SMT

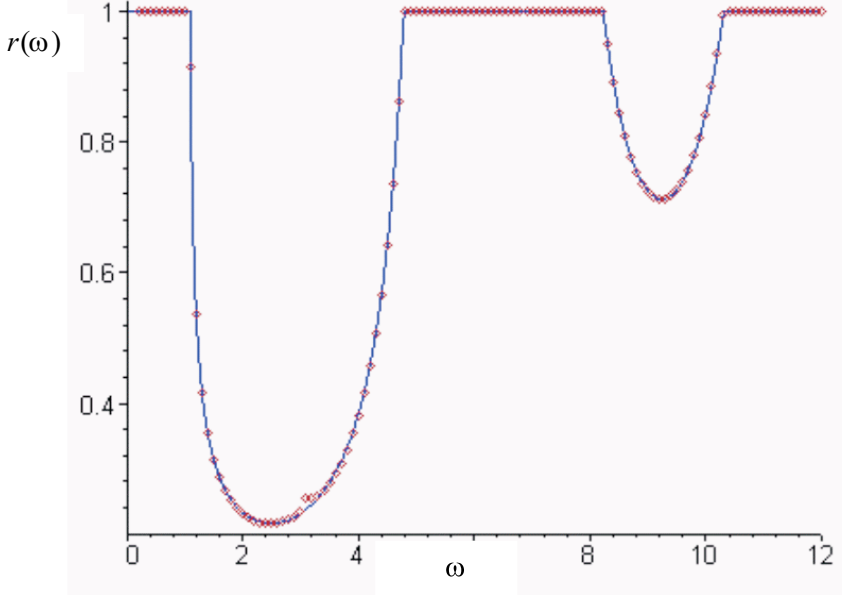


Figura 4.9: Comparação da função raio obtida com os dados experimentais do Programa Apolonio.

teórica com seu comprimento e , em seguida, a função razão de Steiner. Essa modelagem teórica utilizou equações tais como (4.48) para o cálculo do comprimento da $MST = Sp_1$.

Para o cálculo da SMT é preciso utilizar as normas dos vetores $\overrightarrow{S_k S_{k+1}}$, $\overrightarrow{S_k S_{k-1}}$ e $\overrightarrow{S_k P_k}$. É importante notar, mais uma vez, que os pontos das extremidades geram vetores diferentes dos pontos intermediários. Os vetores $\overrightarrow{S_k S_{k+1}}$, $\overrightarrow{S_k S_{k-1}}$ (intermediários) possuem a mesma norma, ou seja:

$$\|\overrightarrow{S_k S_{k+1}}\| = \|\overrightarrow{S_k S_{k-1}}\| = \sqrt{\alpha^2 \omega^2 + 2r^2(1 - \cos \omega)}, \quad (4.54)$$

enquanto que os vetores $\overrightarrow{S_k P_k}$ (intermediários) possuem a seguinte norma:

$$\|\overrightarrow{S_k P_k}\| = 1 - r, \quad (4.55)$$

onde $r \leq 1$ e a função $r(\omega, \alpha)$ é dada por (4.53).

Os vetores $\overrightarrow{S_k P_k}$ localizados nas extremidades da árvore possuem a seguinte

norma:

$$\|\overrightarrow{S_k P_k}\| = 2\sqrt{(1-r)^2 + 2r(1-\cos\omega) + \alpha^2\omega^2}. \quad (4.56)$$

Pela soma das normas desses dois tipos vetores, obtemos o seguinte comprimento total para a SMT de uma árvore com n pontos regulares:

$$\begin{aligned} l(SMT) &= (n-2)(1-r) + (n-3)\sqrt{\alpha^2\omega^2 + 2r^2(1-\cos\omega)} + \\ &+ 2\sqrt{(1-r)^2 + 2r(1-\cos\omega) + \alpha^2\omega^2}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

onde $r = r(\omega, \alpha)$ é a *função raio* deduzida, dada pela equação (4.53).

Com as equações (4.48) e (4.53) é possível agora definir a função razão de Steiner aplicado a conjunto de \mathcal{N} pontos regulares de entrada e possuindo $(n-2)$ pontos de Steiner como saída. A função razão de Steiner, que é o quociente $\rho(\omega, \alpha) = \frac{l(SMT)}{l(MST)}$, será então:

$$\rho(\alpha, \omega) = \frac{(n-2)(1-r) + (n-3)\sqrt{\alpha^2\omega^2 + 2r^2(1-\cos\omega)} + 2\sqrt{(1-r)^2 + 2r(1-\cos\omega) + \alpha^2\omega^2}}{(n-1)\sqrt{\alpha^2\omega^2 + 2(1-\cos\omega)}} \quad (4.58)$$

onde $r = r(\omega, \alpha)$ é dado pela equação (4.53).

Como o mínimo desta função deve ser alcançado para um número muito grande de pontos, possivelmente um número infinito de pontos, então a fórmula (4.58) para $\rho(\omega, \alpha)$ pode ser reescrita da seguinte maneira

$$\rho(\omega, \alpha) = \frac{1-r + \sqrt{\alpha^2\omega^2 + 2r^2(1-\cos\omega)}}{\sqrt{\alpha^2\omega^2 + 2(1-\cos\omega)}}. \quad (4.59)$$

Esta fórmula, conjuntamente com os resultados necessários para escrevê-la como a função $r(\omega, \alpha)$ da eq. (4.53), foram obtidas pela primeira vez por R. P. Mondaini em 2001 e anunciadas em [18]. Veja também refs. [55, 59]. Esta dedução possibilitou e motivou todo o desenvolvimento posterior da modelagem analítica aqui apresentada.

A relação (4.59) obtida acima nos levou a considerar essa função muito especial a uma tentativa de minimização. Essa foi a primeira vez que tal enfoque para a função razão de Steiner no \mathbb{R}^3 foi apresentado, isto é, através dos métodos de otimização usuais.

A função representativa no limite quando $n \rightarrow \infty$ também pode ser reescrita como [55]

$$\rho(\omega, \alpha) = \frac{1 - r + \sqrt{\alpha^2 \omega^2 + r^2(A + 1)}}{\sqrt{\alpha^2 \omega^2 + A + 1}}, \quad (\omega, \alpha) \in \mathbb{R}_{++} \quad (4.60)$$

onde

$$r(\omega, \alpha) = \frac{\alpha \omega}{\sqrt{A(A + 1)}}, \quad (4.61)$$

e $A = 1 - 2 \cos \omega$.

A função $r(\omega, \alpha)$ nos mostra o comprimento do raio do cilindro circular reto obtida através da solução do sistema (4.52). O valor máximo para o raio é aquele correspondente aos pontos da árvore geradora correspondente, ou seja, $r = 1$, podendo ser ainda inferior. Com respeito à razão de Steiner, sabemos que deve ser igual ou inferior 1, também. Isto significa, resumidamente, que $r \leq 1$ e $\rho \leq 1$. Mas é interessante notar que $r \rightarrow 1$ significa $\rho \rightarrow 1$ nas fórmulas acima, o que é mais um teste da consistência da modelagem feita. Além disto, uma boa candidata à função razão de Steiner deve também satisfazer a cota inferior de Moore (veja [55, 53] ou cap. 3 desta monografia), ou seja, $\rho \geq \frac{1}{2}$. Estas restrições quando aplicadas às equações 4.60 e 4.61 mostram a compatibilidade da função razão de Steiner com a cota inferior de Moore, assim como também com o limite usual $\rho = 1$ para a razão de Steiner. Após aplicação das restrições acima às equações (4.60) e (4.61) temos

$$\left(\alpha \omega - \sqrt{A(A + 1)}\right)^2 \geq 0, \quad (4.62)$$

$$(A + 1)\sqrt{\alpha^2 \omega^2 + A + 1} \geq 0, \quad (4.63)$$

$$\alpha \omega \leq \sqrt{A(A + 1)} \quad (4.64)$$

Embora duas destas equações pareçam ineficazes, elas são suficiente para a restrição de nossa região de busca do \mathbb{R}_{++} ao conjunto

$$U = \left\{ (\omega, \alpha) \mid (\omega, \alpha) \in \mathbb{R}_{++}, \frac{\pi}{3} \leq \omega \leq \frac{5\pi}{3}, \alpha \geq 0 \right\} \quad (4.65)$$

Este é também um conjunto viável para um triângulo equilátero numa hélice circular reta, com vértices correspondendo a $0, \omega, 2\omega$.

Vamos agora examinar os cortes ω da superfície $\rho(\omega, \alpha)$. Inicialmente, vamos examinar os cortes nos limites da região U , definido pelas inequações 4.65. Para isto, escrevamos [55]

$$\xi_0(\omega) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \rho(\omega, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{A+1}}, \quad (4.66)$$

$$\xi_\infty(\omega) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \rho(\omega, \alpha) = \frac{\sqrt{A}}{\sqrt{A+1}}. \quad (4.67)$$

O valor correspondem a um mínimo e a um máximo das curvas dadas pelas equações (4.66) e (4.67), respectivamente. Os valores correspondentes das funções são

$$\xi_0(\pi) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \rho(\omega, \alpha) = \frac{1}{2}, \quad (4.68)$$

$$\xi_\infty(\pi) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \rho(\omega, \alpha) = \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (4.69)$$

É útil observar a existência das curvas $\rho(\omega, \bar{\alpha})$, com valores de α fixos, nas quais existe uma transição de mínimo para máximo, veja fig. 4.10, abaixo. Em seguida, na fig. 4.11, mostramos a função $\rho(\omega, \alpha)$ para o corte $\omega = \pi$ em que um máximo pode ser observado. Essa característica é mantida para cada corte em ω , com diferentes valores de α atingindo esse valor máximo.

Dado este valor fixo $\alpha = \bar{\alpha}$, o correspondente valor ω é dado pela equação

$$\bar{\alpha}\bar{\omega} = \sqrt{A(\bar{\omega})(A(\bar{\omega}) + 1)} \quad (4.70)$$

Entre estas curvas, aquela com $\bar{\omega} = \pi$ contém o ponto que corresponde ao mínimo global da superfície. Um método simples de descida mais íngreme, começando

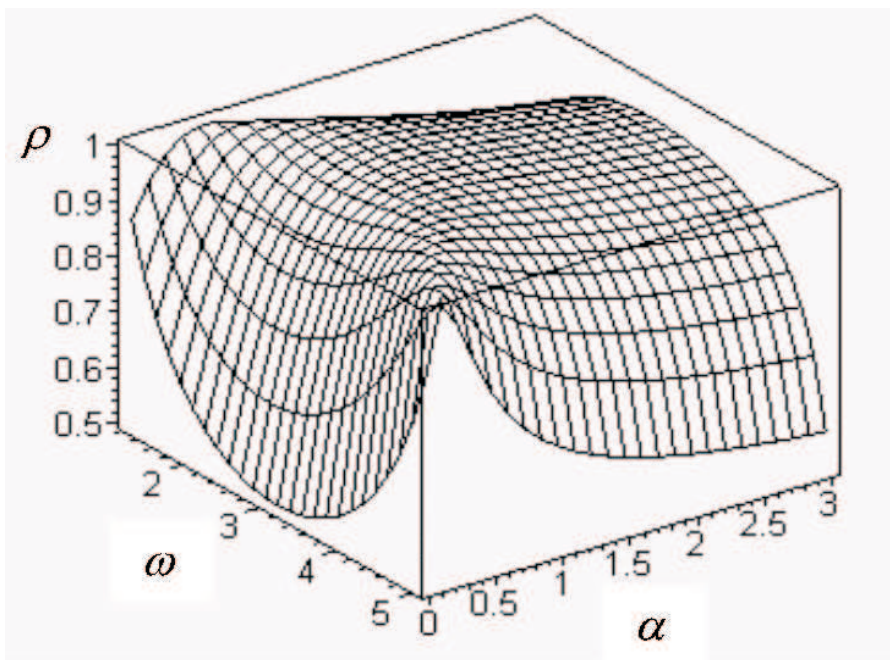


Figura 4.10: O 1° corte da superfície $\rho(\omega, \alpha)$.

de qualquer ponto na superfície com coordenadas satisfazendo a equação (4.64), mostra uma trajetória que converge vagarosamente para $\omega = \pi$. Chamamos a superfície, restrito ao domínio descrito pela desigualdade (4.65), de 1° corte da superfície *bathangar*.

Antes de proceder ao estudo dos cortes em ω , temos de nos certificar que não há violação da cota inferior de *Moore* ao longo da superfície inteira, para considerar a função $\rho(\omega, \alpha)$ uma boa representante para a função razão de Steiner. Isto significa que devemos exigir que

$$\frac{1}{2} \leq \xi_0(\omega) \leq 1, \quad (4.71)$$

$$\frac{1}{2} \leq \xi_\infty(\omega) \leq 1, \quad (4.72)$$

Estas desigualdades podem ser resolvidas por

$$-1 \leq \cos \omega \leq \frac{1}{3}. \quad (4.73)$$

Temos então uma restrição adicional para nossa região experimental de busca.

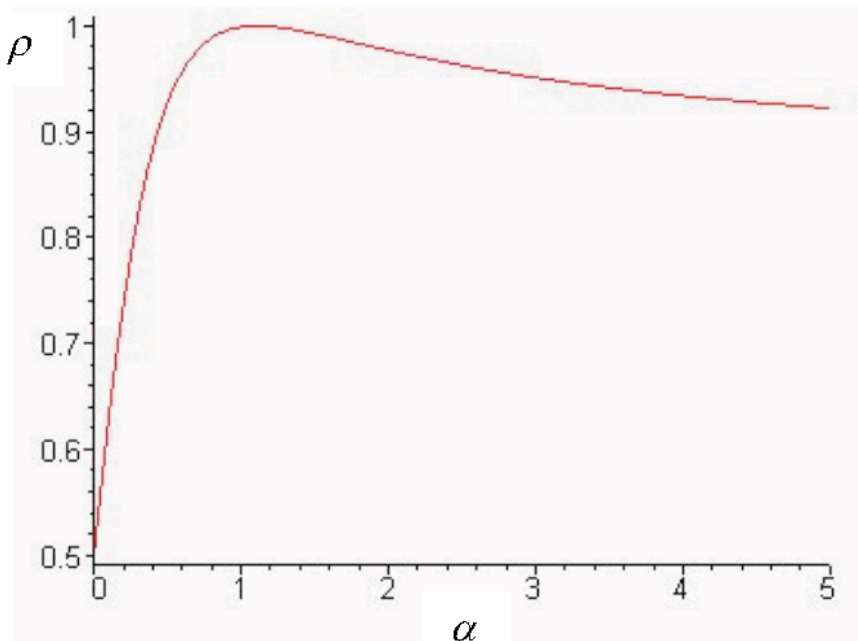


Figura 4.11: Perfil da função $\rho(\omega, \alpha)$ em $\omega = \pi$.

Nosso conjunto para a resolução do problema de minimização é [55].

$$V = \left\{ (\omega, \alpha) \in \mathbb{R}_{++} \mid \arccos\left(\frac{1}{3}\right) \leq \omega \leq 2\pi - \arccos\left(\frac{1}{3}\right), \alpha \geq 0 \right\}. \quad (4.74)$$

Este domínio para a função $\rho(\omega, \alpha)$ cortará ainda mais as laterais da superfície *bathangar*. Este corte da superfície é apresentado na figura (4.12), conjuntamente com a curva de máximos relativos e a trajetória obtida por um processo de convergência lenta como o método de gradiente. Assim, deve ser notado que o procedimento de corte mantém o comportamento da trajetória do processo lentamente convergente tal como método de descida mais íngreme de aproximação da reta $\omega = \pi$ e do ponto $(\pi, 0)$.

Como estamos descrevendo o comportamento por método que requer o cálculo do gradiente da superfície $\rho(\omega, \alpha)$, apresentaremos algumas informações úteis.

Das equações (4.60) e (4.61), podemos agora escrever

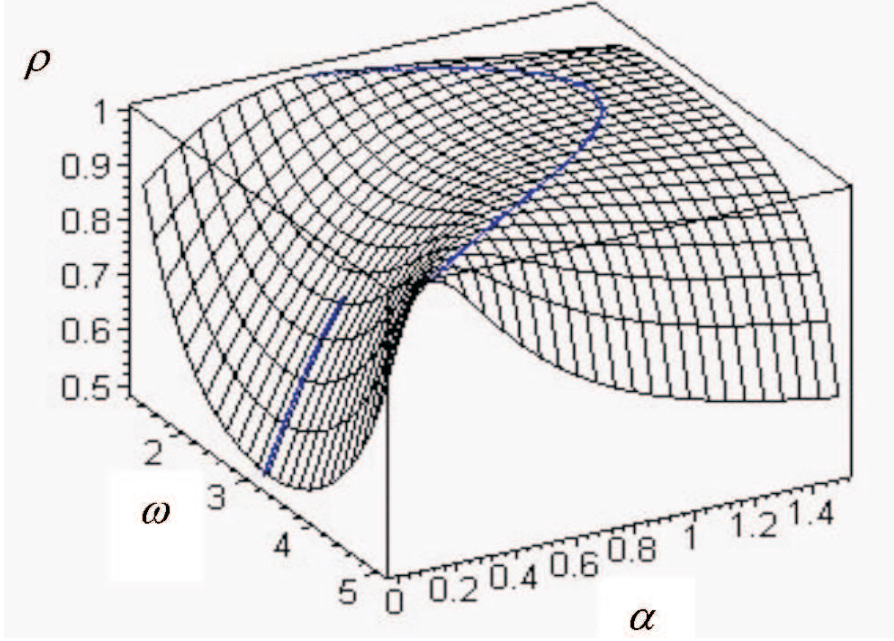


Figura 4.12: O corte que define o espaço de busca do problema de minimização.

$$\rho(\omega, \alpha) = \frac{1 + \alpha\omega \frac{\sqrt{A}}{\sqrt{A+1}}}{\sqrt{\alpha^2\omega^2 + A + 1}}, \quad (\omega, \alpha) \in V, \quad (4.75)$$

onde V é o conjunto dado pela equação (4.74).

As primeiras derivadas parciais [55] são

$$\frac{\partial \rho}{\partial \omega} = - \left[\alpha + \sin \omega \frac{\left[\alpha\omega \left(\alpha\omega + \sqrt{A(A+1)} \right) + A + 1 \right]}{\sqrt{A(A+1)}^3} \right] \frac{\left(\alpha\omega - \sqrt{A(A+1)} \right)}{\sqrt{(\alpha^2\omega^2 + A + 1)}^3}, \quad (4.76)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \alpha} = - \frac{\omega \left(\alpha\omega - \sqrt{A(A+1)} \right)}{\sqrt{(\alpha^2\omega^2 + A + 1)}^3}. \quad (4.77)$$

Uma análise de máximas e mínimos em termos da forma quadrática da função $\rho(\omega, \alpha)$ verifica que $\frac{\partial^2 \rho}{\partial \omega^2}$ não possui sinal definido, $\frac{\partial^2 \rho}{\partial \alpha^2} \leq 0$ e o discriminante [55] da matriz hessiana

$$H_\rho(\omega, \alpha) = \frac{\partial^2 \rho}{\partial \omega^2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \alpha^2} - \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial \omega \partial \alpha} \right)^2, \quad (4.78)$$

como definido negativo para todo $(\omega, \alpha) \in V$. No entanto, existe uma linha de pontos críticos como pode ser visto das equações (4.76) e (4.77), que é novamente dado por

$$\alpha\omega = \sqrt{A(A+1)}. \quad (4.79)$$

O discriminante (4.78) é um número negativo muito pequeno para todos os pontos que satisfazem a equação (4.79). A análise se mostrou não-conclusiva, pois $H_\rho(\omega, \alpha)$ deveria ser considerada zero dentro da precisão de 40 dígitos usado para o cálculo. Passamos então a analisar o comportamento da superfície numa vizinhança da curva (4.79). Colocamos

$$\alpha\omega = \sqrt{A(A+1)} + \eta, \quad (4.80)$$

onde η é um número real, não necessariamente pequeno. Se supusermos que $\rho(\omega, \alpha) \geq 1$ para qualquer (ω, α) satisfazendo a equação (4.80), teremos

$$A \geq A + 1, \quad (4.81)$$

que é um absurdo para todo ω . Dessa forma, provamos que $\rho(\omega, \alpha) < 1$ com (ω, α) satisfazendo a equação (4.80) e $\alpha\omega = \sqrt{A(A+1)}$ é uma curva de máximos relativos (veja [55]).

Agora trataremos o corte dos tetraedros regulares. Para verificar a veracidade dos valores obtidos, foi feito o calculo dessa função razão de Steiner para algumas saídas computacionais (os resultados experimentais obtidos através do programa Apolonio postos em comparação com a função razão de Steiner obtida através da equação (4.59)). Para o corte testado a seguir, por exemplo, a função obtida mostra-se compatível com os resultados experimentais. Abaixo, na figura 4.11, o resultado para o corte dos tetraedros regulares, ou seja, $\alpha_R = 0.26454000216$, experimentalmente obtido através do programa Apolonio, é comparado com o resultado obtido pela utilização da função razão de Steiner. Notamos que o

resultado teórico forma uma envoltória para os dados experimentais obtidos com o programa. Além disso, verificamos a existência de um valor inferior para a função razão de Steiner em comparação com conjectura de 3-sausage (construção utilizada como modelo para construção de árvores mínimas). O ponto de mínimo para essa Função Razão de Steiner quando $\alpha = \alpha_R$ e $\omega_I = 2.62786439909\dots$, onde o índice I é uma referência a tetraedros irregulares, onde esse valor é alcançado. O valor da função razão de Steiner obtida é $\rho(\omega_I) = 0.776\dots$ e é cerca de 1% do valor conjecturado para a razão de Steiner do \mathbb{R}^3 , que é $\rho(\omega_R) = 0.7841\dots$, como anunciado no cap. 3, ítem 3.3.2.

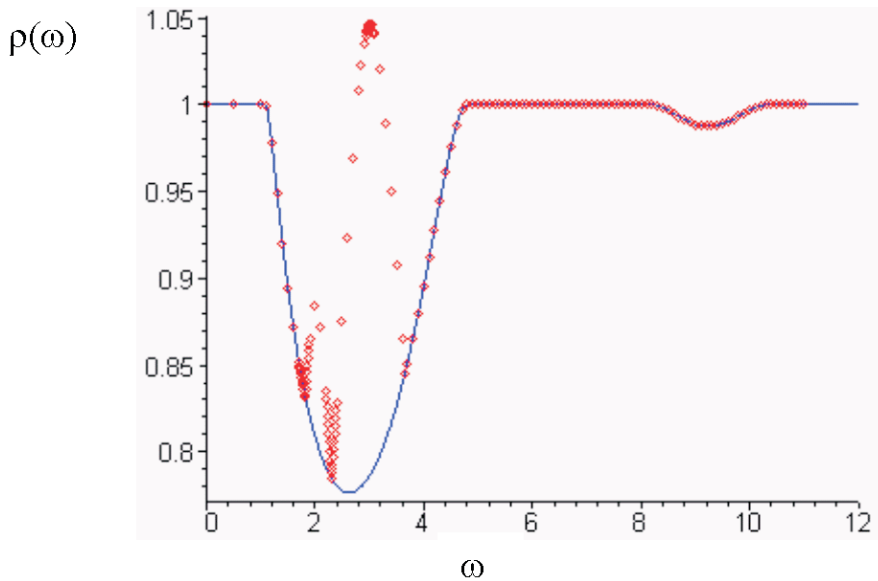


Figura 4.13: Comparação dos dados com a função razão de Steiner obtida para um valor a α fixo, $\alpha = \alpha_R$.

Quando permitimos a inclusão de árvores não-cheias, ou seja, aquelas em que alguns pontos de Steiner confundem-se com os pontos regulares (ou em termos da função dos co-senos dos ângulos entre as arestas, quando permitimos que tais co-senos tenham quaisquer valores, privilegiando apenas a minimalidade das árvores geradoras Sp_s , $s = 1, 2, 3$, que serão definidas a seguir, podemos obter precisamente a função que descreve o comportamento dos pontos experimentais obtidos pelo programa Apolonio.

A árvore geradora que chamaremos de Sp_2 pode ser obtida quando conectamos pontos regulares cujo valor dos índices difere em 2 unidades, ou seja, P_j com P_{j+2} . Para termos uma árvore geradora conectando toda a árvore, é necessária uma conexão seqüencial entre pontos da extremidade da árvore. A figura 4.14 abaixo mostra uma configuração de 23 pontos regulares para a Sp_2 . Existem pares (ω, α) em que a configuração Sp_2 é a que apresenta o menor comprimento dentre as árvores geradoras. Abaixo, na figura 4.15, apresentamos uma comparação entre os comprimentos da Sp_1 (que é a MST quando questões de ângulos entre as arestas são observadas) e a Sp_2 , ambos os comprimentos calculados para o corte dos tetraedros regulares. Observamos que para certos valores localizados num intervalo $[2, 4]$ existe a troca de minimalidade do comprimento total da árvore geradora.

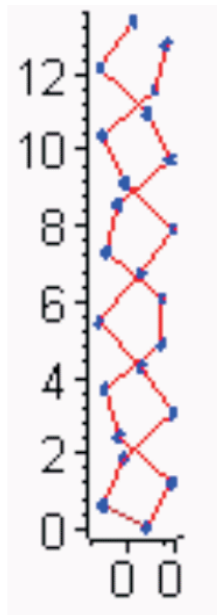


Figura 4.14: Exemplo de uma árvore geradora Sp_2 formada através da conexão de P_{j+s} com P_{j+2s} .

O comprimento da árvore geradora Sp_2 para um número infinito de pontos n quando desprezamos a aresta auxiliar que interconecta os dois caminhos é prontamente obtida. Essa aresta é eliminada porque na razão de Steiner com o número de pontos tendendo ao infinito, ela não influenciará no somatório do denominador.

Utilizando a relação (4.42), o comprimento total com as arestas representativas será

$$lSp_2 = (n - 2)\sqrt{2 - 2 \cos 2\omega + 4 \alpha^2 \omega^2} \quad (4.82)$$

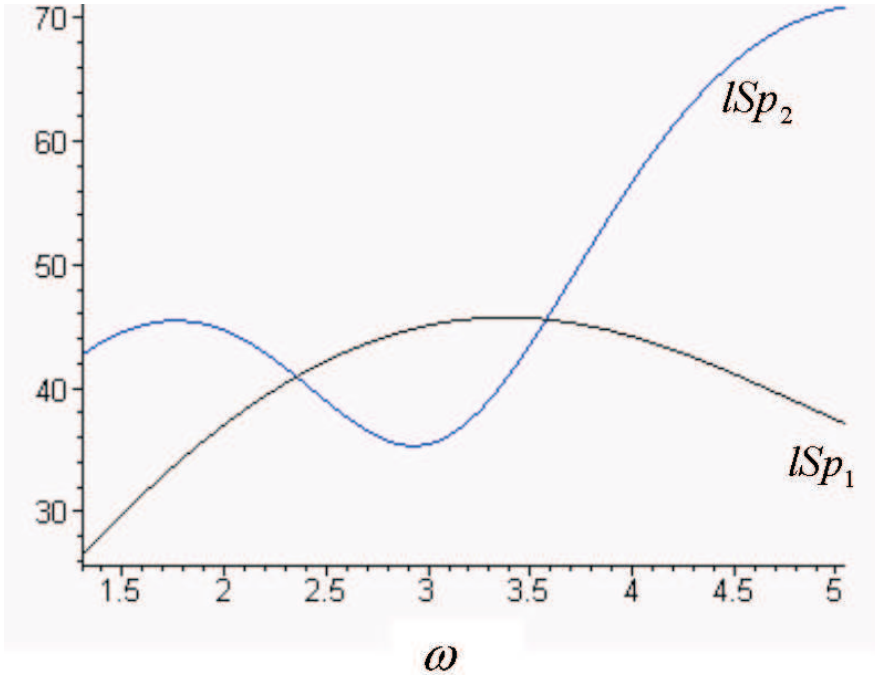


Figura 4.15: Comparação dos comprimentos de dois tipos de árvores geradoras Sp_1 e Sp_2 .

Uma outra árvore que podemos formar com os pontos regulares dados sobre a hélice é Sp_3 , constituída de maneira semelhante à árvore Sp_2 . Neste caso, são conectados pontos para a formação das arestas cujo valor dos índices difere em 3 unidades. Assim como no caso anteriormente analisado, observamos que são necessárias outras arestas para conectar a árvore geradora, dois pontos ligados seqüencialmente e outros dois que também devem ser assim conectados para fechar qualquer árvore finita. O comprimento da árvore geradora Sp_3 para um número infinito de pontos n quando desprezamos duas arestas que interconectam os três segmentos de hélices possíveis pode ser também obtida. Da mesma maneira que a

Sp_2 , essas duas arestas são eliminadas porque na razão de Steiner com o número de pontos tendendo ao infinito, não influenciam no somatório do denominador. Utilizando a relação (4.42), o comprimento total com as arestas efetivas será

$$lSp_3 = (n - 3)\sqrt{2 - 2 \cos 3\omega + 9 \alpha^2 \omega^2} \quad (4.83)$$

Abaixo, na figura 4.16, apresentamos uma configuração de 23 pontos para Sp_3 , com as duas arestas adicionais para conectar completamente a árvore.

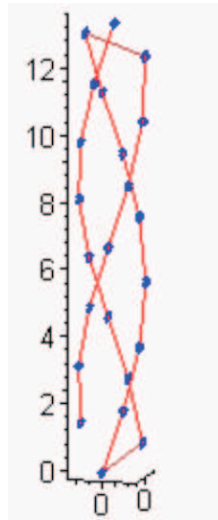


Figura 4.16: Exemplo de uma árvore geradora Sp_3 formada através da conexão de P_{j+s} com P_{j+3s} .

Novamente podemos encontrar pares (ω, α) em que a configuração Sp_3 é a que apresenta o menor comprimento dentre as todas as árvores geradoras. Abaixo, na figura 4.17, apresentamos uma comparação entre os comprimentos da Sp_1 , Sp_2 e Sp_3 no corte dos tetraedros regulares. Observamos que, no intervalo $[2, 3]$, existe um valor $\omega = \omega_0$ em que as três árvores coincidem quando n tende ao infinito e que, à esquerda desse valor a árvore Sp_3 tem o menor comprimento, enquanto que à direita dele a árvore que apresenta o menor comprimento é Sp_2 , existindo outras trocas de minimalidade do comprimento total das árvores geradoras no intervalo inteiro em que podemos efetuar busca. Este fato observado é equivalente a busca da menor configuração possível na hélice circular reta sem acréscimos de pontos

adicionais, ou seja, estamos trabalhando apenas com as configurações dos pontos regulares.

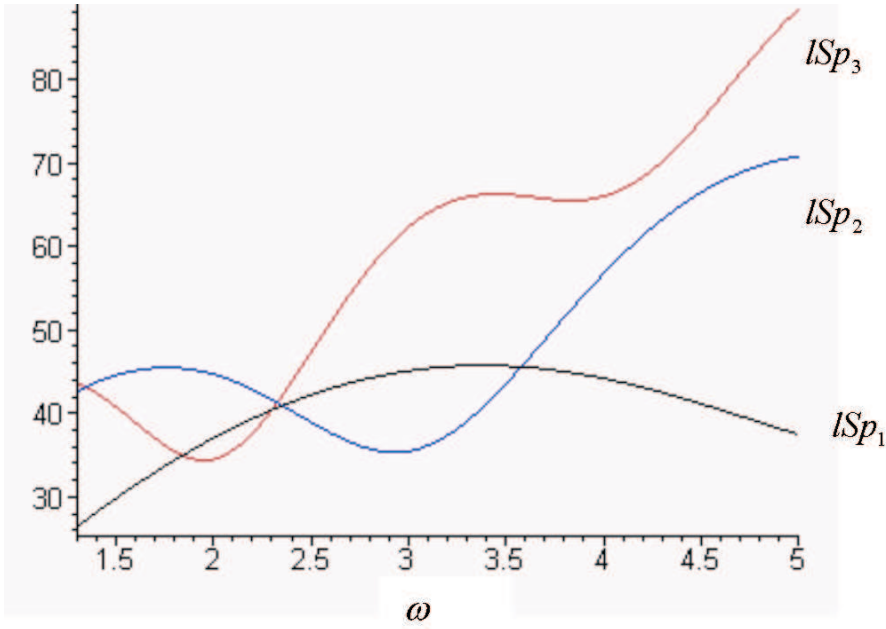


Figura 4.17: Comparação dos comprimentos dos três tipos de árvore geradoras Sp_1 , Sp_2 e Sp_3 .

O processo de conexão de pontos regulares com omissão de alguns pontos intermediários pode ser continuado indefinidamente, mas, na prática, apenas as três formas anteriormente discutidas são utilizadas, pois quando "saltamos" muitos pontos deveremos ter o valor do ângulo entre as arestas muito maior que 120° . Logo, não deve ser admitida a existência de árvores de Steiner cheias. Nesse caso, a escolha de conexão com menor comprimento está bem definida: é aquele que conecta certos ramos gerados pelas conexões escolhidas. Uma teoria de identificação das árvores geradoras possíveis foi desenvolvida na ref. [72].

Considerando as três árvores geradoras obtidas podemos agora definir uma função que calcula a menor razão entre a árvore de Steiner e a menor dessas três árvores geradoras. O primeiro fato a ser observado é que buscamos a função que, no intervalo de busca considerado oferece o maior ganho em relação à menor árvore geradora. Este fato por si só descreve somente diferença entre relações de comprimento. No entanto, ele resolve o problema para a configuração de 3-sausage com a topologia considerada como referência, significando em breves palavras que,

para qualquer perturbação de $[\omega, \alpha]$ numa certa região considerada, não haverá decréscimo na razão de Steiner conjecturada.

A função que definiremos a seguir não é a função razão de Steiner, mas uma boa aproximação para a topologia de referência dentro do intervalo de busca. Esta função é a seguinte:

$$\rho(\omega, \alpha) = \frac{lSMT}{\min\{lSp_1, lSp_2, lSp_3\}} \quad (4.84)$$

onde o numerador e o denominador dependem de (ω, α) e dadas respectivamente pelas eqs. (4.60), (4.53), (4.48), (4.82) e (4.83).

Se $lSMT > 0$, $lSp_1 > 1$, $lSp_2 > 1$ e $lSp_3 > 1$ então

$$\frac{lSMT}{\min\{lSp_1, lSp_2, lSp_3\}} = \max\left\{\frac{lSMT}{lSp_1}, \frac{lSMT}{lSp_2}, \frac{lSMT}{lSp_3}\right\}. \quad (4.85)$$

De fato, suponhamos, que em um determinado intervalo de valores de ω ,

$$lSp_1 < lSp_2 < lSp_3. \quad (4.86)$$

Das desigualdades (4.86) e do fato que $lSp_1 > 1$, $lSp_2 > 1$ e $lSp_3 > 1$ temos

$$\frac{1}{lSp_1} > \frac{1}{lSp_2} > \frac{1}{lSp_3}. \quad (4.87)$$

Multiplicando por $lSMT > 0$ a desigualdade (4.87) acima obtemos

$$\frac{lSMT}{lSp_1} > \frac{lSMT}{lSp_2} > \frac{lSMT}{lSp_3}. \quad (4.88)$$

Das inequações (4.88) verificamos que

$$\max \left\{ \frac{lSMT}{lSp_1}, \frac{lSMT}{lSp_2}, \frac{lSMT}{lSp_3} \right\} = \frac{lSMT}{lSp_1}. \quad (4.89)$$

Por outro lado, das desigualdades (4.86) obtemos

$$\min\{lSp_1, lSp_2, lSp_3\} = lSp_1 \quad (4.90)$$

Ou seja:

$$\frac{lSMT}{\min\{lSp_1, lSp_2, lSp_3\}} = \frac{lSMT}{lSp_1}. \quad (4.91)$$

Este procedimento pode ser executado para qualquer outro intervalo de ω -valores, com o que teríamos desigualdades diferentes das (4.86) acima, e assim concluimos que

$$\frac{lSMT}{\min\{lSp_1, lSp_2, lSp_3\}} = \max \left\{ \frac{lSMT}{lSp_1}, \frac{lSMT}{lSp_2}, \frac{lSMT}{lSp_3} \right\}.$$

A proposta feita da função razão de Steiner é, portanto,

$$\rho(\omega, \alpha) = \max \left\{ \frac{lSMT}{lSp_1}, \frac{lSMT}{lSp_2}, \frac{lSMT}{lSp_3} \right\} = \max\{\rho_1, \rho_2, \rho_3\}. \quad (4.92)$$

Chamamos às razões definidas de $\rho_1(\omega, \alpha) = \frac{lSMT(\omega, \alpha)}{lSp_1(\omega, \alpha)}$, $\rho_2(\omega, \alpha) = \frac{lSMT(\omega, \alpha)}{lSp_2(\omega, \alpha)}$ e $\rho_3(\omega, \alpha) = \frac{lSMT(\omega, \alpha)}{lSp_3(\omega, \alpha)}$. Abaixo, na figura 4.18, apresentamos o gráfico dessas funções

juntamente com os pontos experimentais obtidos com o programa Apolonio para o corte dos tetraedros regulares, ou seja, $\alpha = \alpha_R$. Observamos que existem trechos em que os pontos obtidos ajustam-se perfeitamente com os gráficos de uma das três funções. A partir dessas três funções podemos definir uma outra, levando em conta que queremos obter o maior ganho possível em relação à menor das árvores geradoras.

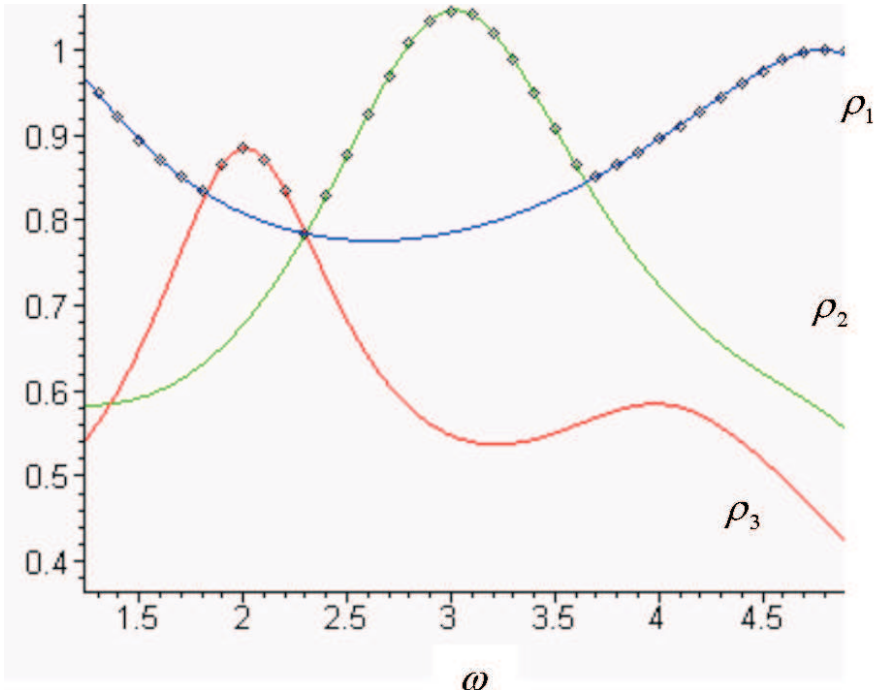


Figura 4.18: Gráficos de ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 e os pontos experimentais obtidos com o programa Apolonio.

Mais uma vez vamos detalhar o estudo para o corte dos tetraedros regulares. Os pontos individualizados na fig. (4.19) foram obtidos através do programa Apolonio, e a linha contínua denota a função $\rho(\omega, \alpha_R)$ para o intervalo de interesse. Há um trecho no domínio de busca em que a razão é maior que 1. Isso significa que, nesse intervalo é impróprio o uso da topologia da 3-sausage como referência, sendo provavelmente a árvore geradora a mais indicada para essa parte do domínio.

Apesar de considerarmos nos argumentos acima apenas o corte dos tetraedros regulares, a função $\rho(\omega, \alpha)$ definida através da eq. (4.92) pode ser estudada num subconjunto do \mathbb{R}^2 . A figura 4.20 mostra que para $(\omega, \alpha) \in [1.8; 3.0] \times [0.1; 0.3]$, ou seja para pequenas perturbações nos pontos dados na hélice circular reta não

implicam numa diminuição do valor da razão de Steiner conjecturado se considerarmos apenas configurações que obedecem a topologia de referência. As curvas de nível, ilustradas através da figura 4.21 confirmam que, para a função $\rho(\omega, \alpha)$, existe um ponto de mínimo local nesse domínio considerado.

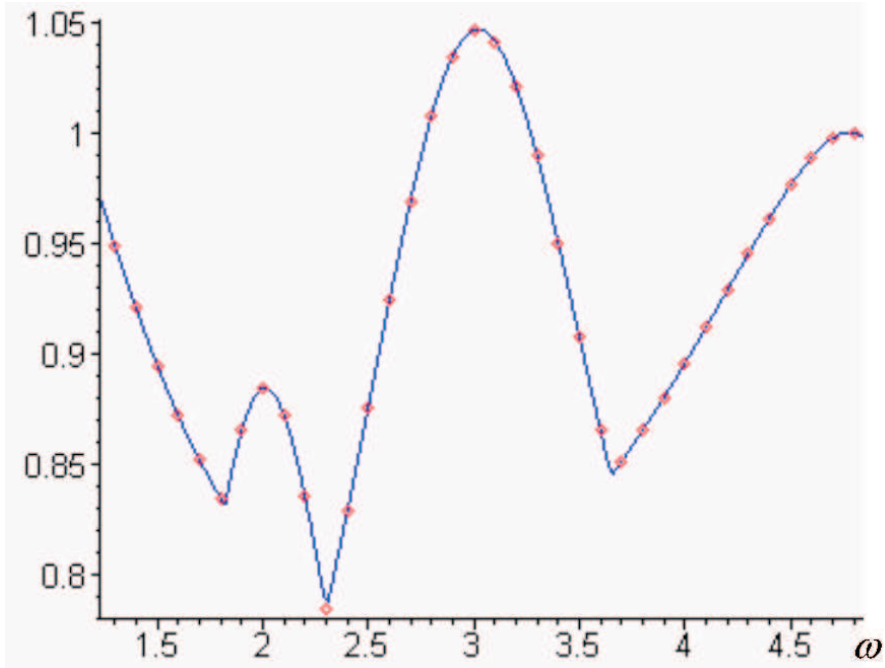


Figura 4.19: Gráfico da função $f(\omega, \alpha_R)$ e os pontos experimentais obtidos com o programa Apolonio.

Inicialmente havíamos trabalhado com outra proposta de função razão de Steiner, que se mostrou adequada a vários desenvolvimentos (veja [10, 55, 56, 57]). O primeiro fato a ser observado é que buscamos uma função razão de Steiner em que partimos das Sp_s , $s = 1, 2, 3$, as quais determinarão a topologia respectiva, semelhantemente à maneira de conectar fundamentada através da topologia da 3-sausage, isto nos permitiu obter os resultados anteriores como caso particular da seqüência que definiremos. Para este fim, chamamos a árvore geradora Sp_s de árvore geradora relativa e árvore de Steiner SMT_s de árvore de Steiner relativa, obtida a partir da Sp_s .

As razões serão então consideradas na forma $\rho_{ss} = \frac{lSMT_s}{lSp_s}$. Através de argumentos que consideram a relação dos ângulos entre as arestas e a restrição a árvores cheias, temos como única opção para árvore geradora relativa dentro dessa abor-

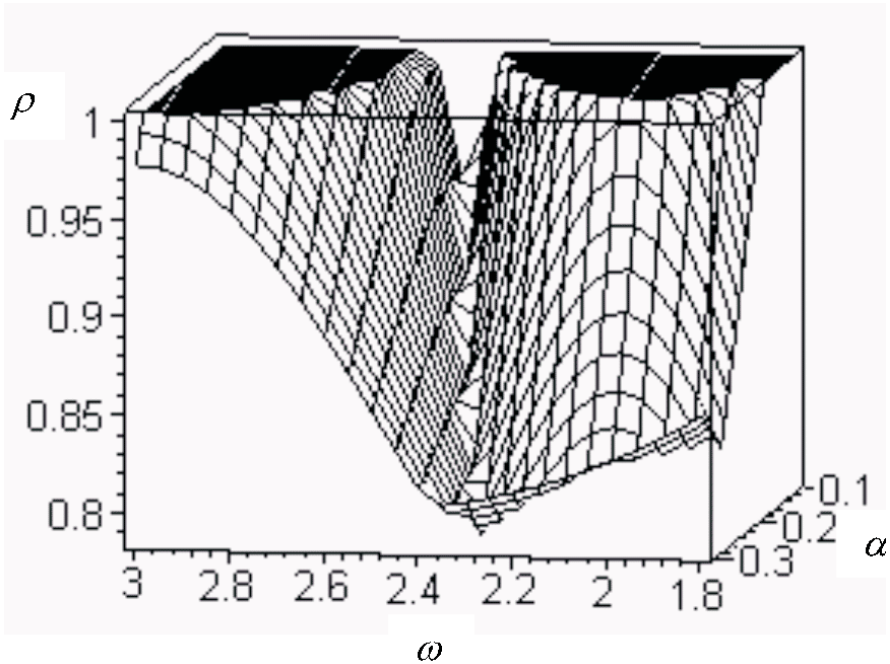


Figura 4.20: Gráficos da função $\rho(\omega, \alpha)$ para um pequeno domínio do \mathbb{R}^2 .

dagem a Sp_1 , ou seja, $\rho = \rho_{11}(\omega, \alpha) = \frac{l_{SMT_1}}{l_{Sp_1}}$ foi a função escolhida para apresentar resultados confiáveis em nossa modelagem (ver [55, 56]).

No entanto, insistiremos no fato de que a consideração de árvores cheias já esteja satisfeita na prescrição de topologia *fishbone* ou *sausage* para a *SMT*, o que resulta na fórmula (4.84) ou (4.92) como a melhor proposta para a função razão de Steiner. Outras árvores geradoras podem ser consideradas no denominador de (4.84) ou Sp_k para $k \geq 4$, mas estas parecem não acrescentar qualquer informação, dadas as restrições nos ângulos para as árvores cheias de Steiner e ao fato de que a estrutura do mínimo global em (4.92) é governada apenas pelas Sp_k , $k = 1, 2, 3$. A idéia por detrás desse método pode ser continuada para k arbitrário, acarretando em configurações de árvores de Steiner não-viáveis, com os pontos de Steiner obtidos a partir dessas árvores coincidindo com os pontos regulares [72, 57].

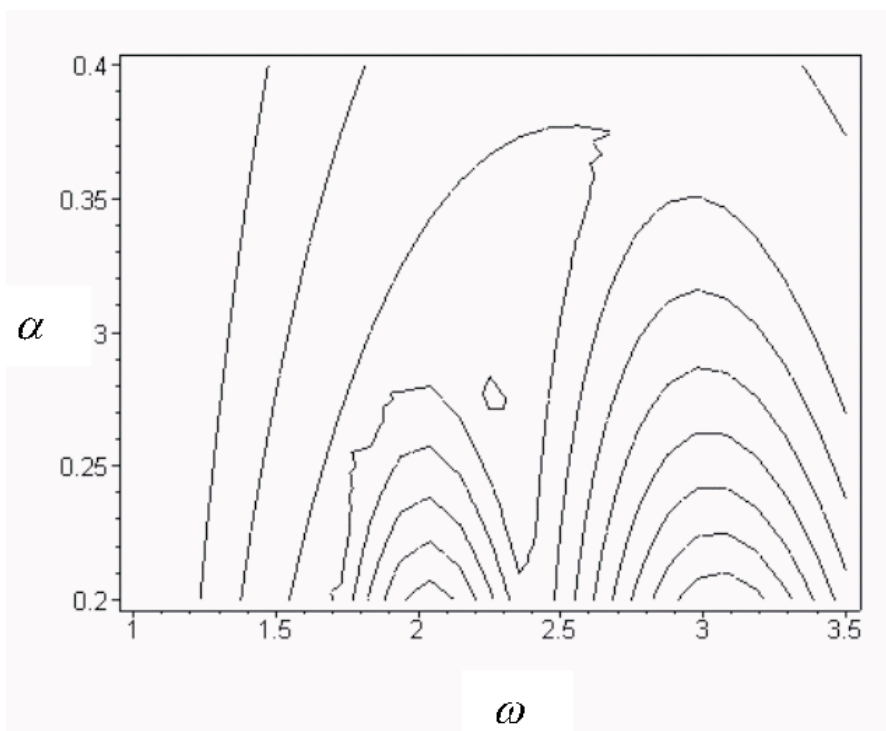


Figura 4.21: *Curvas de nível da função $\rho(\omega, \alpha)$.*

4.4 Alguns resultados obtidos na aplicação do Problema de Steiner Euclidiano a configurações macromoleculares

Nesta seção mostraremos a associação do problema de Steiner à estrutura das biomacromoléculas, com algumas descobertas feitas pelo Prof. Rubem Mondaini (veja [10, 55, 56, 58]). Começaremos expondo uma descoberta que faz a comparação de dados experimentais existentes na literatura [71] com uma modelagem que relaciona os pontos regulares e os pontos de Steiner obtidos através do programa Apolonio na hélice circular reta. Depois, veremos que sob certas hipóteses, a topologia de conexão *fishbone* serve de modelo para um problema de otimização que equivale a minimização de energia potencial de um aglomerado molecular. Finalmente, mostraremos duas propostas para a medida de quiralidade geométrica, uma envolvendo a soma do quadrado das distâncias das coordenadas dos pontos regulares tomados numa configuração de hélice e em uma configuração que é a sua imagem de espelho em relação a um dos planos coordenados, e outra que aplica um pseudo

escalar, uma medida de volume envolvendo os pontos regulares da célula unitária.

4.4.1 Dados obtidos com o Apolonio comparados com resultados experimentais da literatura

Nesta subseção apresentamos alguns resultados preliminares conseguidos para a solução do problema de Steiner do espaço euclidiano tridimensional. Esse trabalho foi desenvolvido com a utilização de algoritmo exato, apropriadamente adaptado do trabalho de Warren D. Smith, para ser utilizado sobre uma configuração especial de pontos: os localizados sobre uma hélice circular reta, com uma estrutura semelhante à molécula do DNA.

Foram realizados vários testes computacionais sobre os dados experimentais conseguidos com a adaptação feita, a saber, uma restrição sobre o espaço de busca. No algoritmo original são otimizadas todas as topologias e no adaptado apenas uma topologia é otimizada. Essa mudança trouxe velocidade ao algoritmo, além de proporcionar o uso de uma quantidade muito maior de pontos que o original. Essa alteração foi feita com o intuito de aplicá-la a problemas na Biomatemática, no caso particular da estrutura tridimensional de macromoléculas.

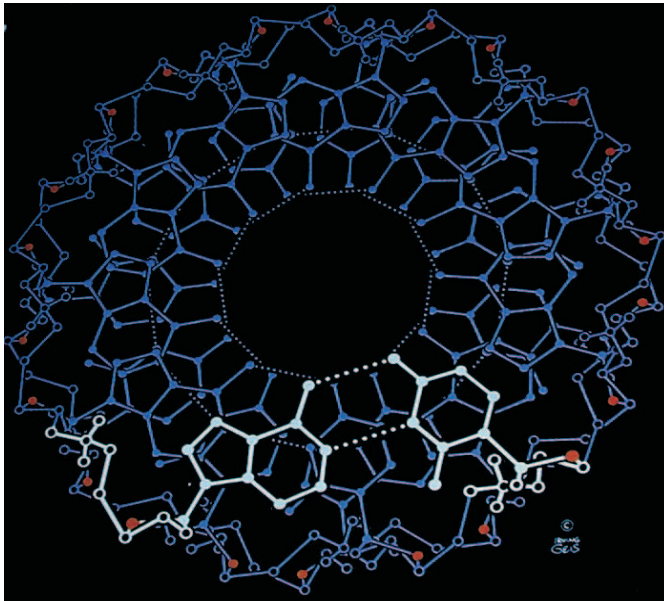


Figura 4.22: *Forma menos hidratada do DNA (A-DNA).*

Nos casos iniciais analisados, observou-se que tanto a aproximação teórica como

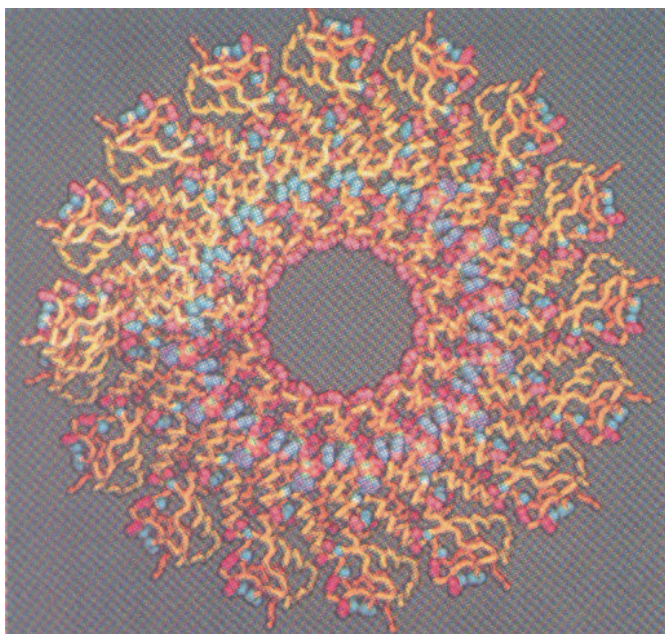


Figura 4.23: *O vírus Mosaico do Tabaco.*

a computacional, realizada pela utilização do programa de computador Apolônio, disponível na página eletrônica www.biomat.org e no apêndice a esta monografia, apresentam resultados que parecem promissores para o uso em problemas relacionados com as macromoléculas de interesse biológico. Essa etapa será realizada posteriormente neste projeto com o que nos comprometemos a realizar em trabalhos posteriores do grupo BIOMAT a que pertencemos na UFRJ, mas duas aplicações serão relatadas brevemente aqui. A primeira é o estudo da forma menos hidratada do DNA, a configuração A-DNA, vista ao longo de um eixo vertical, figura 4.22. A segunda aplicação é ao vírus mosaico do tabaco, o TMV (primeiro vírus a ser descoberto e o primeiro a ser isolado), figura 4.23. Essas duas macromoléculas apresentam hélices internas e externas. O raio da hélice interna (onde devem estar os pontos de Steiner na abordagem teórica) do A-DNA e também do TMV foram comparados com os raios obtidos utilizando o programa APOLONIO para encontrar os pontos de Steiner. A discrepância da modelagem comparada com resultados experimentais [71] é 5.4% e 1.8%, para o A-DNA e o TMV, respectivamente.

4.4.2 Equivalência de Problemas de Otimização: Problema de Steiner *versus* Energia Potencial de Configuração espinha de peixe

A função razão de Steiner para os pontos de Steiner sobre a hélice circular reta pode trazer idéias para a formação de uma função energia que seja mais geral no contexto das abordagens geométricas utilizadas atualmente. Esse fato pode ser utilizado para descrever a ordenação estrutural para as moléculas biológicas, já que existe uma forte associação entre a configuração dos pontos de Steiner e a função de energia potencial (veja [57, 58]), descrita brevemente abaixo, com os cálculos baseados na estrutura da topologia de referência, também chamada de fishbone, fig. 4.21, abaixo.

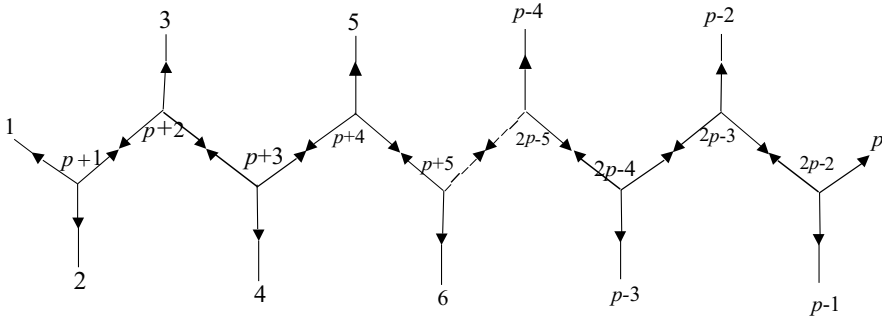


Figura 4.24: A topologia de referência para uma árvore de Steiner com p pontos regulares e $p - 2$ pontos de Steiner.

O Problema de Steiner pode ser caracterizado pelas p equações abaixo:

$$\hat{r}_{p+1,1} + \hat{r}_{p+1,2} + \hat{r}_{p+1,p+2} = 0 \quad (4.93)$$

$$\hat{r}_{j,j-1} + \hat{r}_{j,j-p+1} + \hat{r}_{j,j+1} = 0 \quad p + 2 \leq j \leq 2p - 3 \quad (4.94)$$

$$\hat{r}_{2p-2,2p-3} + \hat{r}_{2p-2,p-1} + \hat{r}_{2p-2,p} = 0 \quad (4.95)$$

onde o circunflexo acima de uma letra significa vetor unitário, o qual é dado por

$$\hat{r}_{k,l} = \frac{\vec{r}_l - \vec{r}_k}{R_{k,l}}$$

e $R_{k,l}$, com $1 \leq k, l \leq 2p - 2$ é a distância euclidiana entre o k -ésimo ponto de Steiner e a l -ésima folha ou entre o k -ésimo e o l -ésimo ponto de Steiner, ou seja,

$$R_{k,l} = [(x_k^{(1)} - x_l^{(1)})^2 + (x_k^{(2)} - x_l^{(2)})^2 + (x_k^{(3)} - x_l^{(3)})^2]^{\frac{1}{2}} \quad (4.96)$$

Cada equação do conjunto (4.93)-(4.95) tem como consequência a igualdade de ângulos ao redor de um ponto de Steiner.

Seja \hat{i}_s um vetor unitário na direção do s -ésimo eixo coordenado, temos das equações (4.93)-(4.95)

$$\sum_{s=1}^3 \left(\frac{x_{p+1}^{(s)} - x_1^{(s)}}{R_{p+1,1}} + \frac{x_{p+1}^{(s)} - x_2^{(s)}}{R_{p+1,2}} + \frac{x_{p+1}^{(s)} - x_{p+2}^{(s)}}{R_{p+1,p+2}} \right) \hat{i}_s = 0, \quad (4.97)$$

$$\sum_{s=1}^3 \left(\frac{x_j^{(s)} - x_{j-1}^{(s)}}{R_{j,j-1}} + \frac{x_j^{(s)} - x_{j-p+1}^{(s)}}{R_{j-p+1,2}} + \frac{x_j^{(s)} - x_{p+2}^{(s)}}{R_{j,j+1}} \right) \hat{i}_s = 0, \quad (4.98)$$

$$\sum_{s=1}^3 \left(\frac{x_{2p-2}^{(s)} - x_{2p-3}^{(s)}}{R_{2p-2,2p-3}} + \frac{x_{2p-2}^{(s)} - x_{p-1}^{(s)}}{R_{2p-2,p-1}} + \frac{x_{2p-2}^{(s)} - x_p^{(s)}}{R_{2p-2,p}} \right) \hat{i}_s = 0, \quad (4.99)$$

onde $p+2 \leq j \leq 2p-3$.

As equações de (4.97)-(4.99) podem ser resumidas na expressão abaixo

$$\sum_{s=1}^3 \left[\delta_m^{p+1} \frac{x_{p+1}^{(s)} - x_1^{(s)}}{R_{p+1,1}} + \frac{x_m^{(s)} - x_{m-1+p}^{(s)}}{R_{m,m-p+1}} + (1 - \delta_m^{2p-2}) \frac{x_m^{(s)} - x_{m+1}^{(s)}}{R_{m,m+1}} + (1 - \delta_m^{p+1}) \frac{x_m^{(s)} - x_{m-1}^{(s)}}{R_{m,m-1}} + (\delta_m^{2p-2}) \frac{x_{2p-2}^{(s)} - x_p^{(s)}}{R_{2p-2,p}} \right] \hat{i}_s = 0, \quad (4.100)$$

onde δ_m^n é o índice de Kronecker, com $p+1 \leq m$, $n \leq 2p-2$.

Da independência linear dos vetores unitários $\hat{i}_1, \hat{i}_2, \dots, \hat{i}_s$, podemos escrever

$$\begin{aligned} & \delta_m^{p+1} \frac{\partial R_{p+1,1}}{\partial x_{p+1}^{(s)}} + \frac{\partial R_{m,m-p+1}}{\partial x_m^{(s)}} + (1 - \delta_m^{2p-2}) \frac{\partial R_{m,m+1}}{\partial x_m^{(s)}} + \\ & + (1 - \delta_m^{p+1}) \frac{\partial R_{m,m-1}}{\partial x_m^{(s)}} + \delta_m^{2p-2} \frac{\partial R_{2p-2,p}}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} = 0. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Estas são $3(p-2)$ que são suficiente para resolver o problema de determinação de $3(p-2)$ coordenadas dos $p-2$ pontos de Steiner.

Podemos notar ainda que a equação 4.101 pode também ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial x_m^{(s)}} \left(R_{1,p+1} + R_{2,p+2} + \sum_{m=p+1}^{2p-2} R_{m,m-p+1} + \sum_{m=p+1}^{2p-2} R_{m,m+1} \right) = 0. \quad (4.102)$$

Estas equações podem também ser obtidas diretamente pela observação da árvore *fishbone*, da topologia de referência, figura 4.24.

Voltaremos agora à figura 4.24 e suporemos que para cada folha ou nó existe um "peso" μ_k , característico de cada tipo de interação (por exemplo, carga elétrica para interações eletrostáticas coulombianas) entre os átomos, cuja média das posições são dadas pelas posições dos nós e folhas. Seja K uma constante de interação universal. Pela suposição que as folhas são fixas, podemos escrever a função de energia potencial para essa configuração *fishbone* como

$$\begin{aligned} U = & K\mu_{p+1} \left(\frac{\mu_1}{R_{p+1,1}} + \frac{\mu_2}{R_{p+1,2}} + \frac{\mu_3}{R_{p+1,p+2}} \right) + K\mu_{p+2} \left(\frac{\mu_3}{R_{p+2,3}} + \frac{\mu_{p+3}}{R_{p+2,p+3}} \right) + \\ & + K\mu_{p+1} \left(\frac{\mu_3}{R_{p+2,3}} + \frac{\mu_{p+3}}{R_{p+2,p+3}} \right) + \dots + K\mu_{p+2} \left(\frac{\mu_{p-2}}{R_{2p-3,p-2}} + \frac{\mu_{2p-2}}{R_{2p-3,2p-2}} \right) + \\ & + K\mu_{p+1} \left(\frac{\mu_{p-1}}{R_{2p-2,p-1}} + \frac{\mu_p}{R_{2p-2,p}} \right). \end{aligned} \quad (4.103)$$

As posições correspondentes ao equilíbrio são então dadas por

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial U}{\partial x_{p+1}^{(s)}} &= K\mu_{p+1} \left(\frac{\mu_1}{(R_{p+1,1})^2} \frac{\partial R_{p+1,1}}{\partial x_{p+1}^{(s)}} + \frac{\mu_2}{(R_{p+1,2})^2} \frac{\partial R_{p+1,2}}{\partial x_{p+1}^{(s)}} + \frac{\mu_{p+1}}{(R_{p+1,p+2})^2} \frac{\partial R_{p+1,1}}{\partial x_{p+1}^{(s)}} \right) \\ 0 = \frac{\partial U}{\partial x_m^{(s)}} &= K\mu_m \left(\frac{\mu_{m-1}}{(R_{m,m-1})^2} \frac{\partial R_{m,m-1}}{\partial x_m^{(s)}} + \frac{\mu_{m-p+1}}{(R_{m,m-p+1})^2} \frac{\partial R_{m,m-p+1}}{\partial x_m^{(s)}} + \frac{\mu_{m+1}}{(R_{m,m+1})^2} \frac{\partial R_{m,m+1}}{\partial x_m^{(s)}} \right) \\ 0 = \frac{\partial U}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} &= K\mu_{2p-2} \left(\frac{\mu_{2p-3}}{(R_{2p-1,2p-3})^2} \frac{\partial R_{2p-2,2p-3}}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} + \frac{\mu_{p-1}}{(R_{2p-2,p-1})^2} \frac{\partial R_{2p-2,p-1}}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} + \right. \\ & \left. + \frac{\mu_p}{(R_{2p-2,p})^2} \frac{\partial R_{2p-2,p}}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} \right) \end{aligned} \quad (4.104)$$

Estas são $3(p-2)$ equações para $3(p-2)$ variáveis e são suficientes para descrever uma solução de equilíbrio para a topologia de referência. Restringimos a busca de equilíbrio para um tipo especial de árvore. Isto é especificado pela igualdade de forças de interação de cada nó em relação às suas folhas e nós adjacentes. Se escolhermos a interação coulombiana como a única fundamental para esta configuração, temos

$$\begin{aligned} \frac{\mu_{p+1}\mu_1}{R_{p+1,1}} &= \frac{\mu_{p+1}\mu_2}{R_{p+1,2}} = \frac{\mu_{p+1}\mu_{p+2}}{R_{p+1,p+2}}, \\ \frac{\mu_m\mu_{m-1}}{R_{m,m-1}} &= \frac{\mu_{m-p+1}\mu_1}{R_{m,m-p+1}} = \frac{\mu_m\mu_{m+1}}{R_{m,m+1}} \\ \frac{\mu_{2p-2}\mu_{2p-3}}{R_{2p-2,2p-3}} &= \frac{\mu_{2p-2}\mu_{p-1}}{R_{2p-2,p-1}} = \frac{\mu_{2p-2}\mu_p}{R_{2p-2,p}}. \end{aligned} \quad p+2 \leq m \leq 2p-3, \quad (4.105)$$

Depois da substituição da equação (4.105) na equação (4.104), obtemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial U}{\partial x_{p+1}^{(s)}} = -K\mu_{p+1} \frac{\mu_2}{(R_{p+1,2})^2} \frac{\partial}{\partial x_{p+1}^{(s)}} (R_{p+1,1} + R_{p+1,2} + R_{p+1,p+2}) \\ 0 &= \frac{\partial U}{\partial x_m^{(s)}} = -K\mu_m \frac{\mu_{m-p+1}}{(R_{m,m-p+1})^2} \frac{\partial}{\partial x_m^{(s)}} (R_{m,m-1} + R_{m,m-p+1} + R_{m,m+1}) \quad (4.106) \\ 0 &= \frac{\partial U}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} = -K\mu_{2p-2} \frac{\mu_{p-1}}{(R_{2p-2,p-1})^2} \frac{\partial}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} (R_{2p-2,2p-3} + R_{2p-2,p-1} + R_{2p-2,p}) \end{aligned}$$

Este último conjunto de equações pode também ser escrito como

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial U}{\partial x_m^{(s)}} = -K \frac{\mu_m\mu_{m-p+1}}{(R_{m,m-p+1})^2} \left(\delta_m^{p+1} \frac{\partial R_{p+1,1}}{\partial x_{p+1}^{(s)}} + \frac{\partial R_{m,m-p+1}}{\partial x_m^{(s)}} \right. \\ &\quad \left. + (1 - \delta_m^{2p-2}) \frac{\partial R_{m,m+1}}{\partial x_m^{(s)}} + (1 - \delta_m^{p+1}) \frac{\partial R_{m,m-1}}{\partial x_m^{(s)}} + \delta_m^{2p-2} \frac{\partial R_{2p-2,p}}{\partial x_{2p-2}^{(s)}} \right). \quad (4.107) \end{aligned}$$

Este último conjunto de equações é o mesmo que o conjunto de equações (4.101), o qual foi escrito como a equação (4.102). Estes fatos são suficientes para mostrar a equivalência do problema posto pelas equações (4.97)-(4.99) e o problema de minimização de energia potencial tendo como restrição as relações (4.105).

4.4.3 Uma proposta para a medida de quiralidade

Agora discutiremos o problema da definição de uma medida quantitativa para a quiralidade. Sabemos que a quiralidade para um objeto, da maneira como definida por Kelvin, é insuficiente para a utilização e caracterização das biomacromoléculas. Na classificação de Kelvin um objeto é chamado de quiral quando, por rotações e translações, é possível fazê-lo coincidir com sua imagem de espelho. Quando é possível fazer coincidir o objeto e sua imagem de espelho utilizando desses artifícios então o objeto é chamado de não-quiral. Ou seja, segundo a classificação de Kelvin um objeto é quiral ou não-quiral, não existindo uma classificação de quanto um objeto é quiral em relação a outro.

Um dos fatos mais interessantes que podemos observar diz respeito à quiralidade das células unitárias: se estas forem tetraedros regulares, apenas a partir do empilhamento de três tetraedros na formação da *sausage* é que temos uma configuração quiral. Individualmente cada tetraedro regular é não-quiral, enquanto que se os tetraedros forem irregulares, cada uma das células unitárias é quiral, determinando igualmente sua junção a formação de uma *sausage* quiral.

Uma maneira usual de quantificar a quiralidade de duas conformações macromoleculares é através da diferença do quadrado da soma das distâncias da posição média dos centros dos aglomerados (átomos). Outra maneira que pode usada ainda para classificação de quiralidade geométrica é através da definição de um pseudo-escalar.

Para descrever a primeira maneira escolhida como representante da quiralidade geométrica, consideremos duas hélices que reproduzem as cadeias atômicas numa macromolécula. Tomaremos o plano xz como sendo o plano do espelho. As duas hélices são então imagens de espelho e seus pontos igualmente espaçados corres-

pondentes podem ser escritos da seguinte maneira:

$$\vec{r}_{jD} = (\cos j\omega, \sin j\omega, \alpha j\omega), \quad 1 \leq j \leq p \quad (4.108)$$

e

$$\vec{r}_{jE} = (\cos j\omega, -\sin j\omega, \alpha j\omega), \quad 1 \leq j \leq p. \quad (4.109)$$

Das equações (4.108) e (4.109) acima podemos deduzir que a soma do quadrado das distâncias entre os pontos correspondentes é dado por

$$S(\omega) = 4 \sum_{j=1}^p \sin^2 j\omega = 2 \left[p - \frac{\sin p\omega}{\sin \omega} \cos(p-1)\omega \right] \quad (4.110)$$

A função $S(\omega)$ possui um mínimo global no ponto $x = \pi$, e sua derivada muda de sinal na vizinhança deste ponto, passando de negativa para positiva (veja figura 4.25). Em nossa modelagem o comportamento da função $S(\omega)$ não apresenta desvantagens, embora a soma do quadrado da distância sofra algumas críticas quanto a sua eficiência (veja [58]).

A primeira definição de quiralidade geométrica é a seguinte:

$$\chi^\pm(\varepsilon) = \frac{dS}{d\omega} \Big|_{\omega=\pi\pm\varepsilon} = \pm 2 \left[\frac{\sin 2p\varepsilon - 2p \sin \varepsilon \cos(2p-1)\varepsilon}{\sin^2 \varepsilon} \right]. \quad (4.111)$$

Agora, estudando a vizinhança do ponto $\omega = \pi$, temos

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \chi^\pm(\varepsilon) = \pm 2p(p-1) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sin(2p-1)\varepsilon}{\cos \varepsilon}. \quad (4.112)$$

O comportamento observado na função χ definida acima parece não ser suficiente para descartar essa definição como uma medida razoável de quiralidade geométrica [58] da forma como o nosso modelo foi concebido.

O segundo exemplo de uma função candidata à medida de quiralidade geométrica pode ser, como já mencionamos acima, representado por uma quantidade representada por um pseudo-escalar. Tomaremos como um representante o volume da célula unitária do tetraedro determinado pelas arestas de comprimento $R_{j,j+1}$, $R_{j+1,j+2}$, $R_{j+2,j+3}$, $1 \leq j \leq p$, na estrutura *fishbone* representada pela figura 4.24, e obtemos

$$\chi(\omega, \alpha) = \frac{1}{6} \vec{C} \cdot \vec{A} \times \vec{B} = \frac{2}{3} \alpha \omega \sin \omega (1 - \cos \omega)^2 \quad (4.113)$$

onde $\vec{A} = \vec{r}_{j+1} - \vec{r}_j$, $\vec{B} = \vec{r}_{j+2} - \vec{r}_j$, $\vec{C} = \vec{r}_{j+3} - \vec{r}_j$ e $\vec{r}_j, \vec{r}_{j+2}, \vec{r}_{j+3}$ são obtidos de

$$\vec{r}_{j+l} = (\cos(j+l)\omega, \sin(j+l)\omega, (j+l)\alpha\omega), \quad l = 0, 1, 2, 3. \quad (4.114)$$

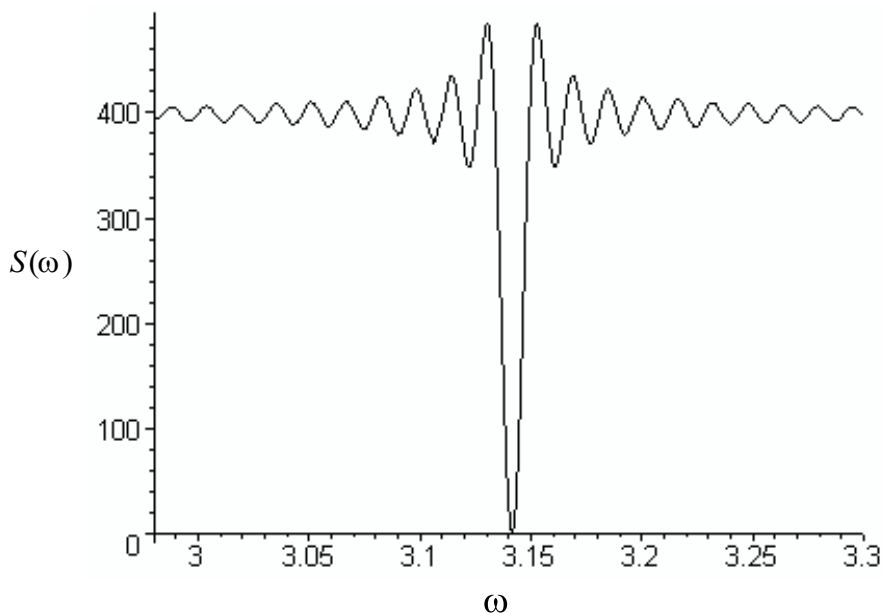


Figura 4.25: O quadrado da soma das distâncias como candidato para quiralidade, $p = 300$.

4.5 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros

Neste trabalho foi feita uma modelagem matemática para os pontos de Steiner obtidos a partir da hélice circular reta. Inicialmente foi utilizado um programa de computador chamado Apolônio (ver Apêndice) para obter a posição dos pontos de Steiner. Posteriormente, pela observação das propriedades das árvores de Steiner com métrica euclidiana, foi possível deduzir uma fórmula para calcular o comprimento das árvores geradoras mínimas e a árvore de Steiner e, conseqüentemente a razão de Steiner euclidiana, e a comparação com valores conhecidos na literatura.

Foi obtida uma fórmula para a computação da razão de Steiner para pontos regulares tomados sobre a hélice circular reta. Foram testadas diversas configurações com o intuito de testar a robustez da *3-sausage* quanto a perturbações e verificar se poderia ser encontrado, dentro da topologia considerada como a de referência para a *d-sausage*, um valor inferior para razão de Steiner. Inicialmente foram feitos intensivos testes computacionais e, posteriormente, foi obtida uma fórmula empírica que se mostrou completamente ajustada aos valores obtidos no trabalho computacional. Além disso, foi possível uma expressão que simplifica a expressão conhecida na literatura como o valor da razão de Steiner no \mathbb{R}^3 com

métrica euclidiana.

Verificamos que, para quaisquer perturbações da *3-sausage* com pontos tomados sobre a hélice circular reta e a topologia de referência considerada, não é possível conseguir valores inferiores aos conjecturados na literatura sobre a razão de Steiner. Portanto, devemos procurar a razão de Steiner em outras configurações, visto que o valor mínimo para $\rho(\omega, \alpha)$ obtido na seção 4.3, é $\rho(\alpha_R, \omega_R) \approx 0.7841903733771\dots$, mantendo o valor conhecido na literatura como mínimo.

Existe uma possibilidade de generalização do método que utilizamos nesta tese para dimensões superiores com fórmulas semelhantes àquelas que deduzimos e aplicar essa nova abordagem para verificação de robustez da *d-sausage*, $d > 3$, quanto à razão de Steiner.

Uma série de resultados em conexão com este trabalho foram recentemente deduzidos, como por exemplo, (ver [55, 56, 58]) a definição de uma medida para a quiralidade geométrica, expressa por um pseudo-escalar que representa a medida do volume da célula unitária dos tetraedros regulares dados.

Existe uma série de possibilidades de prosseguimento deste trabalho. Vamos enumerar os principais:

1. Desenvolver uma abordagem análoga para testar se a topologia de referência é válida para espaços euclidianos $d > 3$, pois nem mesmo os autores da conjectura fundamental acreditam na sua validade.
2. Aplicar os resultados a outros problemas de interesse biológico como, por exemplo, testar o quanto o problema de Steiner se ajusta a problemas de enovelamento de proteínas. Existem poucos trabalhos que testaram a validade e não são conclusivos.
3. Verificar a viabilidade de outras topologias a partir de variedades diferentes da helicóide para obter cotas superiores para a razão de Steiner. Para isso é preciso verificar condições necessárias para que uma variedade tenha um conjunto de pontos que possa representar uma cota superior para a razão de Steiner.
4. Verificar as generalizações de resultados conhecidos para espaços euclidianos

$d > 3$ envolvendo ângulos entre arestas, comprimento das árvores geradoras, possibilidade de formações de funções razões de Steiner.

5. O problema de Steiner euclidiano possui basicamente um algoritmo (exponencial) exato para o caso bidimensional. O desenvolvimento de algoritmos heurísticos é importante para a solução aproximada desse problema. Atualmente poucos algoritmos heurísticos são conhecidos para o caso tridimensional.

Referências Bibliográficas

- [1] COURANT, R., ROBBINS, H., *What is Mathematics?*. 1 ed., New York, Oxford University Press, 1941.
- [2] MELZAK, Z.A. "On the Problem of Steiner", *Canadian Mathematics Bulletin*, v.4, pp. 143-148, 1961.
- [3] GILBERT, E. N, POLLAK, H.O. "Steiner Minimal Trees", *SIAM J. Appl. Math.*, v. 16, n.1, pp. 1-29, 1968.
- [4] CIESLIK, A., *On the Steiner Ratio*. 1 ed., Amsterdam, Kluwer Academic Publishers, 2001.
- [5] SMITH, W.D. "How to Find Steiner Minimal Trees in Euclidean d -Space", *Algorithmica*, v. 7, pp. 137-177, 1992.
- [6] SMITH, J.M, SMITH, W.D. "On the Steiner Ratio in 3 - Space", *Journal of Combinatorial Theory, A*, v. 69, pp. 301-332, 1995.
- [7] SMITH, J. M., WEISS, R., PATEL, M. "An $O(N^2)$ Heuristic for Steiner Minimal Trees in E^3 ", *Networks*, v. 25, pp. 273-289, 1995.
- [8] SMITH, J.M. "Steiner Minimal Tree in E^3 : Theory, Algorithms and Applications." v.2, In: *Handbook of Combinatorial Optimization*, pp. 397-470. Kluwer Academic Publishers, 1998.
- [9] SMITH, J.M., TOPPUR, B. "Euclidean Steiner Minimal Trees, Minimal Energy Configurations, and the Embedding Problem of Weighted Graphs in E^3 ". *Discrete Applied Mathematics*, v.71, pp. 187-215, 1996.

- [10] MONDAINI, R. "The Minimal Surface Structure of Biomolecules". In: *Proceedings of the First Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology*, pp. 1-11, Rio de Janeiro, 2001.
- [11] MONDAINI, R., MONDAINI, D.F., MACULAN N. "The Study of Steiner Points Associated with the Vertices of Regular Tetraedra Joined Together at Common Faces". *Invesgation Operativa*, v.6, pp.103 - 110, 1998.
- [12] MONDAINI, R. P., MONTENEGRO, F., MONDAINI, D. F. Modelling a Steiner Point Distribution of a Generic Helix Point configuration. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-406/96, 1996.
- [13] MONDAINI, R. P., MONTENEGRO, F., MONDAINI, D. F. *Modelling a Steiner Point Distribution of a special helix point configuration*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-398/96, 1996.
- [14] MONDAINI, R. P., MACULAN, N. *Steiner and Baricentric Trees. The Possible Binders of Macromolecular Structure*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-409/96, 1996.
- [15] MONDAINI, R. P. *Three Elementary Proofs of the Uniqueness of the Regular Tetrahedron whose Vertices belong to a Circular Helix*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-410/96, 1996.
- [16] MONDAINI, R. P., TORRES, R. D. "The Steiner Tree Structure of Molecular Configurations". XXIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Santos, SP, 2000.
- [17] MONDAINI, R. P., TORRES, R. D., MARQUEZ, R. M. G., BRITO, L. R. "A connection Between the Fermat-Steiner Problem and Steiner Theorem of Geometrical Constructions". XXIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Resumo das Comunicações, SBMAC, pp. 48, Santos, SP, 2000.
- [18] MONDAINI, R. P. "Minimal Surfaces and Steiner Trees. Fundamental Patterns of Biomacromolecular Structure". Encontro França-Brasil de Bioinformática, Série Algorithmique et Biologie, Lyon, France, 2002.

- [19] HWANG, F.K., RICHARDS, D.S., WINTER, P. *The Steiner Tree Problem*. North-Holland, 1992.
- [20] HWANG, F.K., RICHARDS, D.S. "The Steiner Tree Problems". *Networks*, v. 22, pp. 55-89, 1992.
- [21] KUHN, H.W. "A note on Fermat's Problem". *Mathematical Programming*, v. 4, pp. 98-107, 1973.
- [22] KUHN, H.W. "Steiner's" Problem Revisited ". *Studies in Optimization*, v. 10, Dantzig , G.B., Eaves, B.C. (eds.), Math. Assoc. Amer., pp. 53-70, 1975.
- [23] PRIM, R.C. "Shortest connection networks and some generalizations". *Bell System Tech. J.*, v. 36, pp. 1389-1401, 1957.
- [24] KRUSKAL, Jr., J. B. "On the shortest spanning tree of a graph and the traveling salesman problem". *Proc. Amer. Math. Soc.*, v. 7, pp. 48-50, 1956.
- [25] POLYA, G. *Induction and Analogy in Mathematics*. Princeton Univ. Press, New Jersey, 1954.
- [26] MIEHLE, W. "Link-length Minimization in Networks". *Operations Research*, v. 6., 232-243, 1958.
- [27] SOUKUP, J. "Minimal Steiner Tree, Roots of Polynomial, and Other Magic". *ACM/SIGMAP Newsletter*, v. 22, 37-51, 1977.
- [28] COCKAYNE, E. J. "On the Steiner Problem". *Canadian Mathematics Bulletin*, v. 10, pp. 431-450, 1967.
- [29] COCKAYNE, E. J., SHILLER, D. G. "On the Steiner Problem". *Computation of Steiner Tree. Combinatorics*, Welsh , D. J. A., Woodall, D. R. (eds.). pp. 53-71, 1972.
- [30] HWANG, F. K. "A Linear Time Algorithm for Full Steiner trees". *Operations Research Letters*, v. 4, pp. 235-237, 1986.
- [31] COCKAYNE, E.J., HEWGILL, D.E. "Improved Computation of Plane Steiner Minimal Trees". *Algorithmica*, v. 7, pp. 219-229, 1992.

- [32] WINTER, P. "An Algorithm for the Steiner Problem in the Euclidean Plane". *Networks*, v. 15, pp. 323-345, 1985.
- [33] COCKAYNE, E. J. "On the Efficiency of the Algorithm for Steiner Minimal Trees". *SIAM J. Appl. Math. Programming*, v. 69, pp. 150-159, 1995.
- [34] POLLAK, H. O. "Some remarks on the Steiner Trees Problems". *J. Comb. Theory, Ser. A*, v. 24, pp. 278-295, 1978.
- [35] DU, D.Z., HWANG, F.K., YAO, E. N. "The Steiner ratio conjecture is true for five points". *J. Comb. Theory, Ser. A*, v. 38, pp. 230-240, 1985.
- [36] RUBINSTEIN, J. H., THOMAS, D. A. "The Steiner Ratio conjecture is true for six points". *J. Comb. Theory, Ser. A*, v. 58, pp. 54-77, 1991.
- [37] GRAHAM, R. L., HWANG, F. K. "A Remark on Steiner Minimal Trees". *Bull. Of the Inst. of Math. Sinica*, v. 4, pp. 177-182, 1976.
- [38] CHUNG, F. R. K., HWANG, F. K. "A lower bound for the Steiner Tree Problem". *SIAM J. Appl. Math.*, v. 34, pp. 27-36, 1978.
- [39] DU, D.Z., HWANG, F. K. "A new bound for the Steiner Ratio". *Trans. Am. Soc.*, v. 278, pp. 137-148, 1983.
- [40] CHUNG, F. R. K., GRAHAM, R. L. "A new bound for Euclidean Steiner Minimal Trees". *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, v. 440, pp. 328-346, 1985.
- [41] DU, D.Z, HWANG, F.K. "An Approach for Proving Lower Bounds: Solution of Gilbert-Pollak's Conjecture on the Steiner Ratio". In: *Proc. of the 31st Ann. Symp. on Foundations of the Computer Science*, St. Louis, 1990.
- [42] DU, D.Z, HWANG, F.K. "The Steiner ratio conjecture of Gilbert and Pollak is true". In: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, v. 87, pp. 9464-9466, 1990.
- [43] DU, D.Z, HWANG, F.K. "The state of art in Steiner ratio problems". In: *Computing in Euclidean Geometry*, Du, D.Z., Hwang, F. K. (eds.), pp. 163-192. World Scientific, Singapore, 1992.

- [44] DU, D. Z., HWANG, F. K. "A proof of Gilbert-Pollak's conjecture on the Steiner ratio". *Algorithmica*, v. 7, pp. 121-135, 1992.
- [45] RUBINSTEIN, J. H., THOMAS, D. A. "Variational approach to the Steiner network problem". In: *Topological Network Design*, Smith, J. M., Winter, P. (eds.), Annals of Operations Research, , v. 33, pp. 481-500, J. C. Baltzer AG, Basel, 1991.
- [46] MEEKS, W., YAU, S. T. "Topology of three manifolds and the embedding problem in minimal surface theory". *Ann. Math.*, v. 112, pp. 441-485, 1980.
- [47] DU, D.Z, SMITH, W.D. "Disproofs of the Generalized Gilbert-Pollak Conjecture on the Steiner Ratio in Three or More Dimensions". *Journal of Combinatorial Theory, Ser. A*, v. 74, pp. 115-130, 1996.
- [48] WAERDEN, B. L. V. D. *Algebra*, Ungar, New York, 1970.
- [49] PERESSINI, A. L., SULLIVAN, F. E., UHL, J. J. *The Mathematics of Non-linear Programming*, New York, Springer-Verlag, 1988.
- [50] BELLARE, M., ROGAWAY, P. "The Complexity of Approximating a Nonlinear Problem". *Math. Programming*, v. 69, pp. 429-441, 1995.
- [51] COXETER, H. S. M. *Introduction to Geometry*. 2 ed., New York, John Wiley & Sons, Wiley Classics Library, 1961.
- [52] CHUNG, F. R. K., GILBERT, E. N. "Steiner Trees for the regular simplex". *Bull of the Inst. of Math. Ac. Sinica*, v. 4, pp. 313-325, 1976.
- [53] MONDAINI, R. P., OLIVEIRA, N. V. "The State of Art on the Steiner Ratio Value in R^3 ". TEMA - *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, v. 5, 2005.
- [54] DU, D. Z. "On the Steiner ratio conjectures". In: *Topological Network Design*, Smith, J. M., Winter, P. (eds.), *Annals of Operations Research*, v. 33, pp. 437-451, J. C. Baltzer AG, Basel, 1991.

- [55] MONDAINI, R. "The Disproof of a Conjecture on the Steiner Ratio in E^3 and its Consequences for Full Geometric Description of Macromolecular Chirality". In: *Proceedings of the Second Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology*, pp. 101-177, Rio de Janeiro, 2003.
- [56] MONDAINI, R. "Proposal for Chirality Measure as the Constraint of a Constrained Optimization Problem". In: *Proceedings of the Third Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology*, pp. 65-74, Rio de Janeiro, 2004.
- [57] MONDAINI, R. "The Geometry of Macromolecular Structure: Steiner's Points and Trees". In: *Proceedings of the 4th Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology, Rio de Janeiro*, pp. 347-356, 2005.
- [58] MONDAINI, R. P. "The Euclidean Steiner Ratio and the Measure of Chirality of Biomacromolecules". *Genetics and Molecular Biology*, v. 27, n.4, pp. 658-664, 2004.
- [59] MONDAINI, R. P. "The Steiner Ratio and Homochirality of Biomacromolecular Structures". In: *Nonconvex Optimization and Its Applications*, Kluwer Academic Publishers, pp. 73-90, 2003.
- [60] MONDAINI, R. P., OLIVEIRA, N. V. "The Euclidean Steiner Ratio and the Measure of Chirality of Biomacromolecules". Talk at *International Conference on Bioinformatics and Computational Biology*, Ribeirão Preto, SP, 2003.
- [61] MONDAINI, R. P. "The Steiner Ratio and Homochirality of Biomacromolecular Structures". Talk at *4th International Conference on Frontiers in Global Optimization*, Santorini, Greece, 2003.
- [62] MONDAINI, R. P. "Minimal Surfaces as Internal Manifolds of Biomolecular Structure. International Conference on Mathematical and Theoretical Biology". Talk at *Proceedings of the International Conference on Mathematical and Theoretical Biology*, v. 1, pp.25 - 25, Hilo, Hawaii, USA, 2001.

- [63] MONDAINI, R. P. *The Euclidean Steiner Ratio and the Measure of Chirality of Biomacromolecules*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-612/03, 2003.
- [64] MONDAINI, R. P. *The Steiner Ratio and the Homochirality of Biomacromolecular structures*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES- 601/03, 2003.
- [65] MONDAINI, R. P. *Tiling the plane with Chiral Tiles and the space with Chiral Tetrahedra*. In: Relatório Técnico - UFRJ - COPPE - ES-611/03, 2003.
- [66] MONDAINI, R. P., OLIVEIRA, N. V. "The Improvement of the Upper Bound Value of a Well-established Conjecture on the Steiner Ratio in a 3D-Euclidean Space". XXV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Nova Friburgo, RJ, 2002.
- [67] MONDAINI, R. P., OLIVEIRA, N. V. "The State of Art on the Steiner Ratio Value in R^3 ". XXVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, São José do Rio Preto, SP, 2003.
- [68] MONDAINI, R. P., OLIVEIRA, N. V. "A Dilemma on the Euclidean Steiner Ratio for helical point sets". XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional , Porto Alegre, RS, 2004.
- [69] WATSON, J.D., CRICK, F.H.C. "Molecular Structure of nucleic acids: A structure for desoxyribose nucleic acid". *Nature*, v. 171, pp. 737-738, 1953.
- [70] TOPPUR, B., SMITH, J. M. "Properties of R-Sausages." *Discrete and Computational Geometry*, v. 31, pp. 587-611, 2004.
- [71] VOET, D., VOET, J. G. *Biochemistry*, 2 ed., Wiley & Sons, 1995.
- [72] MONDAINI, R. "Modelling the Biomacromolecular Structure with Selected Combinatorial Optimization Techniques". In: *Proceedings of the 4th Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology, Rio de Janeiro*, pp. 269-282, 2005.

Apêndice: O Programa Apolonio

Esta é uma modificação do Programa original de *W. D. Smith* com redução de espaço de busca de árvores de Steiner à topologia de espinha de peixe apresentada no texto.

Steiner foi considerado por seus contemporâneos e sucessores como o Apolônio do século XIX. *Apolonio* foi um dos grandes mestres da Biblioteca de Alexandria, famoso por suas obras sobre as seções cônicas e a sistematização da geometria euclidiana.

Para utilizar o programa Apolonio devem ser seguintes os seguintes passos:

1. Gere o programa executável: "*apolonio*".

No ambiente Linux, utilizando o compilador gcc, será o comando necessário será:

```
gcc atualapolonio.c mst.c -o apolonio -lm
```

Devem estar no mesmo diretório do arquivo atualapolonio.c, os arquivos "tree.h" e "mst.c". O arquivo "tree.h" é um cabeçalho e o arquivo "mst.c" que calcula o comprimento da árvore geradora mínima, pedido pelo programa principal.

2. Gere o programa executável: "*gerando*".

Antes de executar o programa Apolonio, é preciso criar o arquivo de entrada dos dados: "dados.txt". Para este fim, foi elaborado o programa "gerando", que pode ser obtido através da seguinte linha de comando no ambiente Linux

```
gcc gerando.c -o gerando -lm
```

O menu do programa "gerando" é bastante simples. Ao executar o programa "gerando" (através do comando "gerando"), será perguntado:

- nome do arquivo?

- números de sítios e dimensão?
- o valor de ω ?
- o valor de α ?

3. Execute o programa: "apolonio"

Uma vez gerado o arquivo de entrada de dados, chamado aqui de dados.txt, o programa Apolonio pode ser executado através da seguinte linha de comando.

apolonio dados.txt 30 -pn > saida.txt

O arquivo "saida.txt", apresenta os pontos dados na entrada, além da localização dos pontos de Steiner, dos comprimentos da SMT e MST, e o ρ resultado da razão $\frac{l(SMT)}{l(MST)}$.

A seguir apresentamos os seguintes arquivos: *tree.h*, *atualapolonio.c*, *mst.c* e *gerando.c*.

tree.h

```
#include <math.h>
#include <ctype.h>
#include <stdio.h>
#include <time.h>
#define REAL double
#define SQROOT(a) sqrt(a)
#define RANDM( ) drand48( ) /* uniform random deviates in (0,1) */
#define INITRAND() srand48(57731)
#define DoForever while(1)
#define MAXDIM 3 /* max space dimension permitted ==original 12*/
#define NMAX 3002 /* max number of sites permitted */
```

Atualapolonio.c

```

#include"tree.h"
/*This file holds all the definitions */

/* Global variables: */
REAL STUB,SCALE,N;
int NUMSITES, DIMENSION;
REAL XX[NMAX*2][MAXDIM];
REAL edil; /* teste geracao de nums aleatorios */
static int BESTVEC[NMAX],STACK[NMAX*NMAX],adj[NMAX-2][3],
edge[2*NMAX][2]; /*
int BESTVEC[NMAX],STACK[NMAX*NMAX],adj[NMAX-2][3],edge[2*NMAX][2];
/*static REAL LEN[NMAX],EL[NMAX][3]; retirei "static"*/
REAL LEN[NMAX],EL[NMAX][3];

/*****/
/*XO is a copy of XX, edgeo is a copy of edge*/
/*They are updated in output_tree module */
/*These variables are used to facilitate correct output processing*/

/* static REAL XO[NMAX*2][MAXDIM] esse era o original */
REAL XO[NMAX*2][MAXDIM];
/*static int edgeo[2*NMAX][2]; esse era o original */
int edgeo[2*NMAX][2];

/*****/
/* SMT representation: Steiner point i is adjacent to points adj[i][0..2].
* (If neighbor is Steiner - NUMSITES added!)
* There are N-2 Steiner points and N regular sites.
* The coordinates of Steiner point i are XX[i+NUMSITES][0..DIMENSION-1], and
* The coordinates of regular site i are XX[i][0..DIMENSION-1], i=1,2...
* Edge i has endpoints edge[i][0]<edge[i][1] (same NUMSITES-add convention).
*/

/*****/

buildtree(k,topvec)
int k, topvec[];
{ /* builds tree represented by topvec[1..k]. Initial location of new Steiner pts
* is a slight random perturbation of the centroid of its neighbors */
register int i,e,m,j,sn,ea,eb,en,iseek;
/* First: build the tree corresponding to the null vector. */
N = 3; m = NUMSITES+1; iseek = 13;
adj[1][0] = 1; adj[1][1] = 2; adj[1][2] = 3;
edge[1][0] = 1; edge[2][0] = 2; edge[3][0] = 3;
edge[1][1] = m; edge[2][1] = m; edge[3][1] = m;
for(i=0; i<DIMENSION; i++)
    edil=0.001*SCALE*rand();
}

```

```

XX[m][i] = (XX[1][i]+XX[2][i]+XX[3][i])/3.0 + edil;

for(i=1; i<=k; i++){ /* Now: do vector element topvec[i] */
  en = i+3; m = i+1; sn = m+NUMSITES;
  e = topvec[i]; ea = edge[e][0]; eb = edge[e][1];
  adj[m][0] = ea; adj[m][1] = eb; adj[m][2] = en;
  m = ea-NUMSITES;
  if(m>0) for(j=0; j<3; j++) if(adj[m][j]==eb){ adj[m][j] = sn; break; }
  m = eb-NUMSITES;
  if(m>0) for(j=0; j<3; j++) if(adj[m][j]==ea){ adj[m][j] = sn; break; }
  edge[e][1] = sn; e = en+en-4; edge[e][0] = en; edge[e][1] = sn;
  e++; edge[e][0] = eb; edge[e][1] = sn;
  for(j=0; j<DIMENSION; j++)
/* XX[sn][j] = (XX[ea][j]+XX[eb][j]+XX[en][j])/3.0 +
0.001*SCALE*RANDM(iseek); */
  XX[sn][j] = (XX[ea][j]+XX[eb][j]+XX[en][j])/3.0 + 0.001*SCALE*rand(); }
  N = k+3; /* Tree is now built. Initial coords in general position. */ return;
}

/*****

REAL length()
/* Stores edge lengths of tree T in array EL[1..k1][0..2] and returns total length. */
#define dist(a,b) t=0.0; for(m=0; m<DIMENSION; m++)
{ r=XX[a][m]-XX[b][m]; t += r*r; }\
t = SQROOT(t);
register int m,i2,i,j; int n0,n1,n2,k1; REAL leng,t,r;
leng = 0.0; k1 = N-2;
for(i=1; i<=k1; i++){
  i2 = i+NUMSITES;
  n0 = adj[i][0]; n1 = adj[i][1]; n2 = adj[i][2];
  if(n0<i2){
    dist(n0,i2); leng += t; EL[i][0] = t; n0 -= NUMSITES;
    if(n0>0) for(j=0; j<3; j++) if(adj[n0][j]==i2){ EL[n0][j] = t; break; }
  }
  if(n1<i2){
    dist(n1,i2); leng += t; EL[i][1] = t; n1 -= NUMSITES;
    if(n1>0) for(j=0; j<3; j++) if(adj[n1][j]==i2){ EL[n1][j] = t; break; }
  }
  if(n2<i2){
    dist(n2,i2); leng += t; EL[i][2] = t; n2 -= NUMSITES;
    if(n2>0) for(j=0; j<3; j++) if(adj[n2][j]==i2){ EL[n2][j] = t; break; }
  }
} /* Have now figured out distances EL[i][0..2] from Steiner pt. i to neighbors. */
return(leng);
}

```

```

/*****

```

```

optimize(tol)

```

```

REAL tol; /* a small positive number */

```

```

/* finds better coordinates XX[NUMSITES+1..NUMSITES+k1][] for the k1 Steiner
points

```

```

* of tree T by: doing a relaxation iteration. Assumes edge lengths of old tree
* have been pre-stored in array EL[][] */

```

```

#define prep(a,b,c) if(b>NUMSITES){ val[i]++; B[i][a] = c; }\

```

```

else for(m=0; m<DIMENSION; m++) C[i][m] += XX[b][m]*c;

```

```

static REAL B[NMAX][3], C[NMAX][MAXDIM];

```

```

static int eqnstack[NMAX], leafQ[NMAX], val[NMAX];

```

```

register int i,m,j,i2; int n0,n1,n2,lqp,eqp,k1; REAL q0,q1,q2,t;

```

```

lqp = eqp = 0; k1 = N-2;

```

```

/* first: compute B array, C array, and valences. Set up leafQ. */

```

```

for(i=k1; i>0; i--){

```

```

n0 = adj[i][0]; n1 = adj[i][1]; n2 = adj[i][2];

```

```

q0 = 1.0/(EL[i][0]+tol); q1 = 1.0/(EL[i][1]+tol); q2 = 1.0/(EL[i][2]+tol);

```

```

/* Have now figured out reciprocal distances q0,q1,q2 from

```

```

* Steiner pt. i to neighbors n0,n1,n2. **/

```

```

t = q0+q1+q2; q0 /= t; q1 /= t; q2 /= t;

```

```

val[i] = 0; B[i][0] = B[i][1] = B[i][2] = 0.0;

```

```

for(m=0; m<DIMENSION; m++){ C[i][m] = 0.0; }

```

```

prep(0,n0,q0); prep(1,n1,q1); prep(2,n2,q2);

```

```

/* Now: Steiner point i has Steiner valence val[i];

```

```

* coords obey eqns XX[i+NUMSITES][] = sum(j)of B[i][j]*XX[nj][] + C[i][] */

```

```

if(val[i]<=1){ leafQ[lqp] = i; lqp++; } /* put leaves on leafQ */

```

```

} /* Have set up equations - now to solve them. */

```

```

/* Second: eliminate leaves */

```

```

while(lqp>1){

```

```

lqp--; i = leafQ[lqp]; val[i]--; i2 = i+NUMSITES;

```

```

/* now to eliminate leaf i */

```

```

eqnstack[eqp] = i; eqp++; /* push i onto stack */

```

```

for(j=0; j<3; j++) if(B[i][j] != 0.0) break; /* neighbor is #j */

```

```

q0 = B[i][j];

```

```

j = adj[i][j]-NUMSITES; /* neighbor is j */

```

```

val[j]--; if(val[j]==1){ leafQ[lqp] = j; lqp++; } /* new leaf? */

```

```

for(m=0; m<3; m++) if(adj[j][m]==i2) break;

```

```

q1 = B[j][m]; B[j][m] = 0.0;

```

```

t = 1.0-q1*q0; t = 1.0/t;

```

```

for(m=0; m<3; m++) B[j][m] *= t;

```

```

for(m=0; m<DIMENSION; m++){ C[j][m] += q1*C[i][m]; C[j][m] *= t; }

```

```

}

```

```

/* Third: Solve 1-vertex tree! */
i = leafQ[0]; i2 = i+NUMSITES;
for(m=0; m<DIMENSION; m++) XX[i2][m] = C[i][m];
/* Fourth: backsolve */
while(eqp>0){
    eqp--; i = eqnstack[eqp]; i2 = i+NUMSITES;
    for(j=0; j<3; j++) if(B[i][j] != 0.0) break; /* neighbor is #j */
    q0 = B[i][j];
    j = adj[i][j]; /* neighbor is j */
    for(m=0; m<DIMENSION; m++) XX[i2][m] = C[i][m] + q0*XX[j][m];
}
return;
}

/*****/

REAL error()
{ /* Returns the error figure of tree T with Steiner coords in XX[[]].
 * Assumes edge lengths have been pre-stored in array EL[[]]. */
register int i,m,i2,n0,n1,n2; int k1; REAL r,s,t,efig,d01,d12,d02;
k1 = N - 2; efig = 0.0;
for(i=1; i<=k1; i++){
    i2 = i+NUMSITES;
    n0 = adj[i][0]; n1 = adj[i][1]; n2 = adj[i][2];

    d12 = d01 = d02 = 0.0;
    for(m=0; m<DIMENSION; m++){
        t = XX[i2][m];
        r = XX[n0][m]-t; s = XX[n1][m]-t; t = XX[n2][m]-t;
        d12 += s*t; d01 += r*s; d02 += r*t;
    }
    /* only angles <120 cause error */
    t = d12 + d12 + EL[i][1]*EL[i][2]; if(t>0.0) efig += t;
    t = d01 + d01 + EL[i][0]*EL[i][1]; if(t>0.0) efig += t;
    t = d02 + d02 + EL[i][0]*EL[i][2]; if(t>0.0) efig += t;
}
efig = SQROOT(efig); return(efig);
}

/*****/

output_tree()
{
    int i,j;
    printf("topology-describing vector: ");
    for(i=1; i<=NUMSITES-3; i++){ printf("%d ",BESTVEC[i]); }
    printf("\nsteiner point coords\n");
}

```

```

for(i=NUMSITES+1; i<=2*NUMSITES-2; i++){
    for(j=0; j<DIMENSION; j++)
        {
            XO[i][j] = XX[i][j];
            printf("%7g ",XX[i][j]);
        }
    printf("\n");
}
printf("edges\n");
for(i=1; i<=2*NUMSITES-3; i++)
    {
        edgeo[i][0] = edge[i][0];
        edgeo[i][1] = edge[i][1];
        printf("%d %d\n",edge[i][0],edge[i][1]);
    }

fflush(stdout);
return;
}

/*****/
#include <stdlib.h>
#include <ctype.h>
#include <string.h>

main(argc,argv)
    int argc;
    char *argv[];

{ /* Inputs NUMSITES, DIMENSION, sites; outputs successive best Steiner
   trees found. Best tree's topology-vector is stored in BESTVEC. */
char p[20]; /* Holds InputFileName */
char tm[5]; /* Holds the Time (rtime) string */
char *s;
char nout[20]; /* name of O/P file */
char nmath[20]; /* name of Mathematica file */
int OPT_OP; /* Flag for seperate O/P FILE */
int OPT_MATH; /* Flag to tell Mathematica file to be generated or not */
int OPT_POW;

int i,j,x,k,m,nc,ct;
REAL q,r;
REAL mst_len; /* LENGTH OF MINIMAL SPANNING TREE */
REAL smt_len; /* LENGTH OF STEINER MINIMAL TREE */
REAL RHÖ; /* stm_len/mst_len */

FILE *fin;

```

```

int A[NMAX];
long start, end; /* starting time, ending time */
int FLAG; /* FLAG = 1, is set either when optimal soln reached or */
           /* program runs for a time exceeding a certain period */
           /*When FLAG = 1, program is exited */
int rtime; /* Maximum time for which program could run */
int genmst( );

/*****

INITRAND();
/* printf("No of arguments = %d\n", argc); */
if(argc > 1)
    strcpy(p,argv[1]);
if(argc > 2)
    strcpy(tm,argv[2]);

/* strcpy(nout,p); */
strcpy(nmath,p);

/* printf("%s\n",p); */
OPT_OP = 1; /* For this program this value will not be changed */
OPT_MATH = 1;
OPT_POW = 0;

argc -= 2;
/* printf("%d\n",argc); */
if(argc >= 0 )
    ++argv;
if(argc >= 1)
    ++argv;

while (--argc > 0 && (*++argv)[0] == '-') {
    for(s = argv[0]+1; *s != '\0'; s++)
        switch(*s){
            case 'n':
                OPT_MATH = 0;
                break;
            case 'p':
                OPT_POW = 1;
                break;
            default:
                printf(" Find: illegal option %c\n", *s);
                argc = -1;
                break;
        }
}

```

```

}
if(argc != 0){
    printf("Correct usage is: Progame InputFileName Time -pn\n\n");
    printf(" Remember that ProgName InputFileName Time have to be given\n");
    printf(" and in the order shown !!!!!!\n\n ");
    printf(" Time is a string of digits to give max. run_time of the program \n");
    printf(" Option -n indicates, mathematica file NOT to be generated\n");
    printf(" Option -p indicates *powin* be created as an I/P to main_pow\n");
    exit(1);
}

fin = fopen(p,"r");
if (NULL == fin){
    printf (" Input not opened, hence exiting from the program \n");
    printf ("Maybe you didn't give the file name or you gave the name of a file that ");
    printf ("doesn't exist\n");
    printf("The correct order of arguments should be :-\n\n");
    printf("ProgName InputFileName Time OptionsIfAnyLike -p-n\n");
    printf(" Remember that ProgName InputFileName Time have to be given\n");
    printf(" and in the order shown !!!!!!\n\n ");
    printf("Rerun with correct command \n\n");
    printf(" Exiting from the program \n ");
    exit(1);
}

/* Read INPUT file      */

fscanf(fin,"%d %d",&NUMSITES, &DIMENSION);

if(NUMSITES<3 || NUMSITES>NMAX){
    fprintf(stderr,"NUMSITES=%d out of range\n",NUMSITES); exit(1);
}

if(DIMENSION<2 || DIMENSION>MAXDIM){
    fprintf(stderr,"DIMENSION=%d out of range\n",DIMENSION); exit(1);
}
printf("%d %d\n",NUMSITES,DIMENSION);
for(i=1; i<=NUMSITES; i++)
{
    for(j=0; j<DIMENSION; j++)
    {
        fscanf(fin,"%lf",&(XX[i][j]));
        XO[i][j] = XX[i][j];
    }
}

/*input reading done */

```

```

fclose(fin);
/*****

i = 0;

while(tm[i] != '\0' && i <= 3 )
{
    if((isdigit(tm[i])) == 0)
    {
        printf(" You typed in the time wrongly \n");
        printf(" It should be an integer s.t. 0 < the integer < 60 \n");
        printf("The correct order of arguments should be :-\n\n");
        printf("ProgName InputFileName Time OptionsIfAnyLike -p-n\n");
        printf(" Remember that ProgName InputFileName Time have to be given\n");
        printf(" and in the order shown !!!!!\n\n ");
        printf("Rerun with the correct command \n\n");
        printf(" Exiting from the program \n ");
        exit(1);
    }
    i++;
}
if('\0' != tm[i])
    printf("(only) the first four digits will be accepted for run time \n\n");
tm[i] = '\0';
ptime = atoi(tm);
printf("The max runtime of program will be %d minutes\n\n",ptime);

if((1 == OPT_MATH) && (3 != DIMENSION))
{
    printf("Mathematica file will not be created as dimension neq to 3\n\n");
    OPT_MATH = 0;
}

i = 0;
/* strncpy(nout, "/tmp/", 5); */
/* i = 5; j = 0; */
while(p[i] != '.' && p[i] != '\0')
{
    nout[i] = p[i];
    i++;

}
nout[i] = '\0';

if(1 == OPT_MATH)

```

```

strcpy(nmath,nout);

strcpy(mst_math,nout);
strcat(mst_math,"_mst.m");

strcat(nout,".out");
printf("%s\n",nout);

if(1 == OPT_MATH)
    strcat(nmath,".m");
/*printf("%s\n",nmath);*/

/*GET length of MINIMAL SPANNING TREE */
    getmst(&mst_len);

/** The algorithm for STEINER MINIMAL TREE begins ****/
    time(&start);

SCALE = 0.0;
for(i=1; i<=NUMSITES; i++){
    for(j=0; j<DIMENSION; j++){
        q = XX[i][j] - XX[1][j];
        if(q<0.0)
            q = -q;
        if(q<SCALE)
            SCALE = q;
        printf("%g ",XX[i][j]);
    }
    printf("\n");
}
fflush(stdout);

if(NUMSITES==3){ /* Deal with special case of 3 sites */
    buildtree(0,A);
    q = length();
    r = error();
    do{
        optimize(0.0001*r/NUMSITES);
        chek_time(start,rtime,&FLAG);
        if(1 == FLAG){
            genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
            if(1 == OPT_MATH)
                genmath(nmath);
            if(1 == OPT_POW)
                genpow(smt_len);
            exit(1);
        }
    }
}

```

```

}while(r>q*0.0001);

printf("\nnew record length %g\n",q);
RHO = q/mst_len;
printf("RHO = %lf\n",RHO);
output_tree();
genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
if(1 == OPT_MATH)
    genmath(nmath);
if(1 == OPT_POW)
    genpow(smt_len);
FLAG = 1;
chek_time(start,rtime,&FLAG);
exit(1);
}

/* (2) Preprocessing and initialization */
/* Optionally, sort sites in some nice order here. */
/* STUB[B = any upper bound on the length of the SMT. */

STUB = HUGE;
k = 1;
m = 0;
ct = 0; /* ct counts backtrack iters. Unused at present */
FLAG = 0;

/* ***** */

/*DoForever{ */ /* 3: candidate leaf generation and backtracking */
nc=0;
ct++;
/*for(x=2*k+1; x>0 && k<=NUMSITES-3; x--){*/
k=NUMSITES-3;
for(i=2; i<=k; i++) A[i]=2*i;
A[1] = 3;
buildtree(k,A); /* Build the tree represented by the topol. vector A[1..k] */
ITER: /* ...and optimize it until either obviously bad or small error figure happens */
q = length();
r = error();
if(q-r<STUB){
    if(r>0.005*q){
        optimize(0.0001*r/NUMSITES);
        chek_time(start,rtime,&FLAG);
        if(1 == FLAG){
            genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
            if(1 == OPT_MATH)
                genmath(nmath);

```

```

        if(1 == OPT_POW)
            genpow(smt_len);
        exit(1);
    }
    goto ITER;
}
if(k>=NUMSITES-3){
    do{
        optimize(0.0001*r/NUMSITES);
        q = length();
        r = error();
        chek_time(start,rtime,&FLAG);
        if(1 == FLAG){
            genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
        }
        if(1 == OPT_MATH)
            genmath(nmath);
        if(1 == OPT_POW)
            genpow(smt_len);
        exit(1);
    }
    while(r>q*0.0001);
    if(q<STUB){
        printf("\nnew record length %20.20g\n",q);
        smt_len = q;
        RHO = smt_len/mst_len;
        printf("RHO = %lf\n",RHO);
        for(i=1; i<=k; i++){
            BESTVEC[i]=A[i];
            if(q<STUB*0.99999)
                output_tree();
            STUB=q;
        }
    }
    else{
        i = nc;
        nc++;
        while(i>0 && LEN[i]<q){
            STACK[m+i+1]=STACK[m+i];
            LEN[i+1]=LEN[i];
            i--;
        }
        i = i+1; STACK[m+i]=x; LEN[i] = q;
    }
}
}
/*} */
m = m+nc;

```

```

printf("steiner tree1, nc = %d\n",nc);

while(nc<=0){
    k--;
    printf("k = %d\n",k);
    if(k<=0){/* Make an Output File */
        genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
        printf("OPT_MATH = %d\n",OPT_MATH);
        if(1 == OPT_MATH)
            genmath(nmath);
        if(1 == OPT_POW)
            genpow(smt_len);
        FLAG = 1;
        chek_time(start,rtime,&FLAG);
        exit(1);
    }/*if(k <= 0)*/
    nc = STACK[m]; m--;
} /* while nc<=0 */

/*A[k]=STACK[m];
STACK[m]=nc-1;
if(k<NUMSITES-3)
    k++;
else
    m--;*/
chek_time(start,rtime,&FLAG);
if(1 == FLAG){
    genout(OPT_OP,p,nout,smt_len,mst_len,RHO);
    if(OPT_MATH == 1)
        genmath(nmath);
    if(1 == OPT_POW)
        genpow(smt_len);
    exit(1);
}
}/*}*/ DOFOREVER loop */

printf("steiner tree2\n");

} /* End of Steiner tree program. */
/*****

/* This module prints O/P in a separate O/P file of name I/PFileName.out*/

/*****
genout(OPT_OP,nin,nout,smt_len,mst_len,RHO)
char nout[],nin[];
double smt_len,mst_len,RHO;

```

```

int OPT_OP;

{ /* This module generates an output file */
  /* Giving coordinates of SITES, STEINER pts, */
  /* edges of STM, smt_len, mst_len, RHO */

FILE *fout;
int i,j;

/* printf("genout()\n"); */
if(1 == OPT_OP){
  /* printf("Cheguei aqui \n"); */
  fout = fopen(nout,"w");
  if (fout == NULL)
    {
      perror("Nao deu\n");
      exit(0);
    }
  else
    printf("*****\n");
  fprintf(fout,"  VERTICES \n");
  fprintf(fout,"  ***** \n\n");

  for (i = 1; i <= NUMSITES; i++){
    fprintf(fout," V%d: ",i);
    for(j = 0; j < DIMENSION; j++){
      fprintf(fout,"%f ",XO[i][j]);
    }
    fprintf(fout, "\n");
  }
}

else
  fout = fopen(nin,"a");
  /*******/

  fprintf(fout,"\n");
  fprintf(fout,"  STEINER POINTS \n");
  fprintf(fout,"  ***** \n\n");
  for (i = NUMSITES + 1; i <= 2*NUMSITES -2; i++){
    fprintf(fout," V%d: ",i);
    for(j = 0; j < DIMENSION; j++){
      fprintf(fout,"%f ",XO[i][j]);
    }
    fprintf(fout, "\n");
  }
}

```

```

fprintf(fout, "\n");
fprintf(fout, " EDGES\n");
fprintf(fout, " *****\n\n");
for(i = 1; i <= 2*NUMSITES -3; i++)
    fprintf(fout, "%d %d\n", edgeo[i][0], edgeo[i][1]);
fprintf(fout, "\n");
printf("Length of SMT = %lf\n", smt_len);
printf("Length of MST = %lf\n", mst_len);
printf("RHO = %lf\n", RHO);
fprintf(fout, "Length of SMT = %lf\n", smt_len);
fprintf(fout, "Length of MST = %lf\n", mst_len);
fprintf(fout, "RHO = %lf\n", RHO);

fclose(fout);
return;
}

/*****
/* Program to generate an input file powin to main_pow.c */
*****/
genpow(smt_len)
double smt_len;

{ /* This module generates an output file to give as an input to main_pow.c*/
/* Giving coordinates of SITES, STEINER pts, */
/* edges of STM */
FILE *fout;
int i,j;

/* printf("Cheguei aqui 2 \n"); */
fout = fopen("powin", "a");
if (fout == NULL)
    {
        perror("Nao deu 2 \n");
        exit(0);
    }
else
    printf("*****2 \n");

fprintf(fout, " %d %d\n ", NUMSITES, DIMENSION);
fprintf(fout, "\n");

for (i = 1; i <= 2*NUMSITES-2; i++)
    {
        for(j = 0; j < DIMENSION; j++)
            fprintf(fout, "%f ", XO[i][j]);
        fprintf(fout, "\n");
    }

```

```

    if(NUMSITES == i)
        fprintf(fout, "\n");
    }
fprintf(fout, "\n");

for(i = 1; i <= 2*NUMSITES - 3; i++)
    fprintf(fout, "%d %d\n", edgeo[i][0], edgeo[i][1]);
fprintf(fout, "\n\n");
fprintf(fout, "SMT_LEN = %lf\n", smt_len);
fclose(fout);
return;
}

/*****
/* Program to generate an input file to MATHEMATICA for 3D space */
*****/

genmath(nmath)
char nmath[];

{ /* Make a Mathematica file to plot the Steiner Tree */

FILE *fmath;
int i,s,t;

fmath = fopen(nmath, "a");
fprintf(fmath, "Show[Graphics3D[ {PointSize[0.02],"});
for (i = 1; i <= NUMSITES; i++)
{
    fprintf(fmath, "Point[ { %f, %f, %f } ],", XO[i][0], XO[i][1], XO[i][2]);
    fprintf(fmath, "Text[\" point no. %d\" , { %f, %f, %f } ],", i, XO[i][0],
XO[i][1], XO[i][2]);
}

fprintf(fmath, "PointSize[0.01],");
for(i = NUMSITES + 1; i <= 2*NUMSITES-2; i++)
    fprintf(fmath, "Point[ { %f, %f, %f } ],", XO[i][0], XO[i][1], XO[i][2]);
for (i = 1; i <= 2*NUMSITES - 3; i++) { /* for printing edges */
    s = edgeo[i][0];
    t = edgeo[i][1];
    if (2*NUMSITES - 3 == i)
        fprintf(fmath, "Line[ { { %f, %f, %f }, { %f, %f, %f } } ]]",
            XO[s][0], XO[s][1], XO[s][2], XO[t][0], XO[t][1], XO[t][2]);
    else
        fprintf(fmath, "Line[ { { %f, %f, %f }, { %f, %f, %f } },
, XO[s][0], XO[s][1], XO[s][2], XO[t][0], XO[t][1], XO[t][2]);
} /*for printing edges*/

```

```

fclose(fmath);
return;
}
/*****
/* Procedure to check the time the program has run and stop it if it exceeds */
/* a certain limit */
*****/
chek_time(start,rtime,flag)
long start;
int *flag,rtime;
{/* This module checks if the Doforever loop is running for */
/* more than a given period of time */
float min;
long end;
int flag2;

flag2 = *flag;
time(&end);
/* printf("rtime=%d\tmin=%.2f\tend=%d\n",rtime,min,end); */

end -= start;
min = end/60.0;

/* printf("rtime=%d\tmin=%.2f\tend=%d\n",rtime,min,end); */
/* printf("flag=%d\n",flag2); */
if(min >= (float)(rtime/60.0))
*flag = 1;

if(1 == *flag)
{
if (0 == flag2)
{
printf(" Process terminated after %d seconds \n",end);
}

else if( 1 == flag2)
{
printf("Process took %d seconds\n",end);
}

}

fflush(stdout);
}/*chek-time*/

```

mst.c

```

/* this mst routine also generates a math file to view */

#include "tree.h"
#define boolean int
#define TRUE 1
#define FALSE 0
#define BIGGESTNUM 1.7e38

/*
#define MACHEPS 1.0e-8      ]These may be required in some other
#define PI 3.141592653589793 ]related functions. They were in the
#define RT3 1.7320508075688773 ]file Warren sent. So they have been
double X[NMAX][DIMENSION];    ]commented and retained for any
#define TESTDIST FALSE        ]possible future use.
*/

extern double XX[][MAXDIM]; /* Defined and declared in stmmst_j.c */
extern int NUMSITES,DIMENSION;
extern char mst_math[20];
boolean WRAPAROUND;

/*****/

double wrap(x)
double x;
{ return( x-floor(x+0.5) ); }

/*****/

double distsq(a,b)
int a,b;
{
double s = 0.0,t; int i;
if(WRAPAROUND){
for(i=0; i<DIMENSION; i++){ t = wrap(XX[a][i]-XX[b][i]); s += t*t; }
}
else{
for(i=0; i<DIMENSION; i++){ t = XX[a][i]-XX[b][i]; s += t*t; }
}
return(s);
}

/*****/

```

```

#define dist(a,b) sqrt(distsq(a,b))

/*****

int mst(N,father,cost)
int N,father[]; double cost[];
/* Finds edges (e1,e2)[1..e] of MST of particles 1..N
 * in arbitrary metric space. Runs in O(N^2) time. Prim's method. */
int i,j,p; double d;
for(i=2; i<=N; i++){ cost[i] = distsq(i,1); father[i] = -1; }
for(j=2; j<=N; j++){
    d = BIGGESTNUM;
    for(i=2; i<=N; i++) if(father[i]<0 && cost[i]<d){
        d = cost[i]; p = i;
    }
    father[p] = -father[p];
    for(i=2; i<=N; i++) if(father[i]<0 && cost[i]>(d=distsq(p,i))){
        cost[i] = d; father[i] = -p;
    }
}
return;
}

*****/

/* This procedure generates Minimal Spanning Tree and is
called by main in stmmst_j.c */

/*****
/***** IMPORTANT!!!! *****/
/*This function differs from the one in file mst.c by just one line */
/* Which is the c2 = getchar() before while loop, commented in this file */

/* The func in this file is being called by the prog in stmmst_j.c */
/*modified for Jim Smith which doesn't do any kind of TERMINAL READ */
/* Because of no previous TERMINAL READ that line absent in this module*/

/* But in the func in mst.c this line has to be present is explained below*/
/* The reason c2 is first read and then the response read in c because */
/* in stmmstn.c the program which calls "getmst" does*/
/* atleast one TERMINAL READ */
/* which is the scanf(&rtime) and then now when getchar is called */
/* to get Y/y/N/n the <RETURN> character entered after the previous */
/* scanf or any previous TERMINAL READ is first read by getchar */
/* But if you use this procedure in some other context in which this */
/* is the FIRST INPUT OBTAINED FROM TERMINAL */
/*then remove the c2 = */

```

```

/* getchar() before the while loop */
/*****

getmst(p)
double *p;{
int i,j;
int father[NMAX];
double cost[NMAX],u;
char c,c2;
boolean WRAPAROUND;
WRAPAROUND = TRUE;
mst(NUMSITES,father,cost);

u = 0.0;
for(i=2; i<=NUMSITES; i++){
/*printf("%d %d\n",i,father[i]); */
u += sqrt(distsq(i,father[i]));
}
/* printf("MST, length=%.12g\n",u); */
genmst(father, mst_math);
*p = u;
return;
}/*GETMST*/

/*****
/* Program to generate an input file to MATHEMATICA for 3D space */
/*****

genmst( father, nmath)
int father[];
char nmath[];

{ /* Make a Mathematica file to plot the Steiner Tree */

FILE *fmath;
int i,s,t;

fmath = fopen(nmath,"w");
fprintf(fmath,"Show[Graphics3D[{PointSize[0.02],"});
for (i = 1; i<= NUMSITES; i++)
fprintf(fmath,"Point[ {%f,%f,%f} ],",XX[i][0],XX[i][1],XX[i][2]);
fprintf(fmath,"PointSize[0.01], Dashing[.05,.02],");
/*
for(i = 1; i<= NUMSITES; i++)
fprintf(fmath,"Point[ {%f,%f,%f} ],",XX[i][0],XX[i][1],XX[i][2]);
*/

```

```

for (i = 2; i<= NUMSITES; i++){/* for printing edges */
    s = i;
    t = father[i];
    if (NUMSITES == i)

fprintf(fmath, "Line[ { { %f, %f, %f }, { %f, %f, %f } } ]", XX[s][0], XX[s][1], XX[s][2], XX[t][0]
, XX[t][1], XX[t][2]);
    else

fprintf(fmath, "Line[ { { %f, %f, %f }, { %f, %f, %f } } ", XX[s][0], XX[s][1], XX[s][2], XX[t][0], X
X[t][1], XX[t][2]);
}/*for printing edges*/
fclose(fmath);
return;
}

```

gerando.c

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define REAL double
/* #define alpha 0.26454000216 */
/* #define omega 2.30052398302 */

main()
{
int dim, sitios, j, i;
double x, y, z;
double omega, alpha;
FILE *sai;
char nome[32];
printf("entrar com o nome do arquivo saida ...txt? ");
gets((char*)&nome);
sai=fopen((char*)&nome, "w");
printf("\n entrar com numero de pontos e dimensao: ");
scanf("%d %d", &sitios, &dim);
printf("\n entrar com o valor de omega: ");
scanf("%lf", &omega);
printf("\n entrar com o valor de ALPHA: ");
scanf("%lf", &alpha);
printf(" %6d sitios e %6d dimens \n", sitios, dim);
printf(" gerando para omega==%18.12lf \n", omega);
printf(" gerando para ALPHA==%18.12lf \n", alpha);

```

```
fprintf(sai, "%d %d\n", sitios, dim);
for (i=0; i < sitios; i++)
    {x=cos(omega*i);
    y=sin(omega*i);
    z=alpha*omega*i;
    fprintf(sai, "%lf %lf %lf\n", x, y, z);
    }
fclose(sai);
}
```