

A numerical study of the Dirac Spectrum and Transmission Problems employing the Method of Fundamental Solutions

Francisco Bento

Orientado por:

Juha Hans Videman

Pedro Ricardo Simão Antunes

Instituto Superior Técnico - Lisboa, Portugal

11 de Outubro de 2023

Visão geral do trabalho

- ① O Método das Soluções Fundamentais:
 - Construção;
 - Enriquecimento de base;
- ② O operador de Dirac e um problema de decomposição:
 - Propriedades;
 - Resultados relevantes;
- ③ Simulações Numéricas;
- ④ Discussão e Conclusão.

Visão geral do trabalho

- 1 O Método das Soluções Fundamentais:
 - Construção;
 - Enriquecimento de base;
- 2 O operador de Dirac e um problema de decomposição:
 - Propriedades;
 - Resultados relevantes;
- 3 Simulações Numéricas;
- 4 Discussão e Conclusão.

Visão geral do trabalho

- 1 O Método das Soluções Fundamentais:
 - Construção;
 - Enriquecimento de base;
- 2 O operador de Dirac e um problema de decomposição:
 - Propriedades;
 - Resultados relevantes;
- 3 Simulações Numéricas;
- 4 Discussão e Conclusão.

Visão geral do trabalho

- 1 O Método das Soluções Fundamentais:
 - Construção;
 - Enriquecimento de base;
- 2 O operador de Dirac e um problema de decomposição:
 - Propriedades;
 - Resultados relevantes;
- 3 Simulações Numéricas;
- 4 Discussão e Conclusão.

Visão geral do trabalho

- ① O Método das Soluções Fundamentais:
 - Construção;
 - Enriquecimento de base;
- ② O operador de Dirac e um problema de decomposição:
 - Propriedades;
 - Resultados relevantes;
- ③ Simulações Numéricas;
- ④ Discussão e Conclusão.

O Método das Soluções Fundamentais

O Método das Soluções Fundamentais

Considere-se o Problema de Valores de Fronteira (BVP em inglês)

$$\begin{cases} \mathcal{L}u(x) = 0, & x \in \Omega \\ \mathcal{B}u(x) = 0, & x \in \Gamma, \end{cases}$$

onde Ω é um domínio limitado, \mathcal{L} é um operador diferencial linear elíptico, $\Gamma = \partial\Omega$ e \mathcal{B} é um operador linear sobre Γ .

O Método das Soluções Fundamentais

Seja $\hat{\Omega}$ tal que $\bar{\Omega} \subset \hat{\Omega}$ com $\hat{\Gamma} = \partial\hat{\Omega}$, e $\mathcal{Y} = \{y_j \in \hat{\Gamma} : j = 1, \dots, N\}$ um conjunto de *pontos fonte* sobre a *fronteira artificial* $\hat{\Gamma}$.

No contexto do Método das Soluções Fundamentais (MSF em português, MFS em inglês), consideramos a aproximação

$$\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi(x - y_j),$$

onde os coeficientes α_j podem ser determinados através do operador de fronteira

$$\mathcal{B}\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathcal{B}\Phi(x - y_j) = 0.$$

O Método das Soluções Fundamentais

Seja $\hat{\Omega}$ tal que $\bar{\Omega} \subset \hat{\Omega}$ com $\hat{\Gamma} = \partial\hat{\Omega}$, e $\mathcal{Y} = \{y_j \in \hat{\Gamma} : j = 1, \dots, N\}$ um conjunto de *pontos fonte* sobre a *fronteira artificial* $\hat{\Gamma}$.

No contexto do Método das Soluções Fundamentais (MSF em português, MFS em inglês), consideramos a aproximação

$$\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi(x - y_j),$$

onde os coeficientes α_j podem ser determinados através do operador de fronteira

$$\mathcal{B}\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \mathcal{B}\Phi(x - y_j) = 0.$$

O Método das Soluções Fundamentais

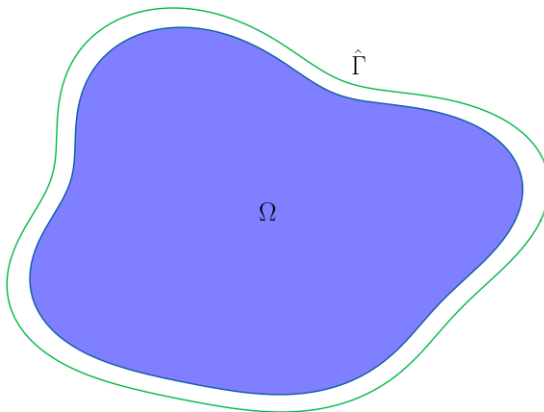


Figura: Um domínio conexo Ω com fronteira artificial $\hat{\Gamma}$.

Um método de enriquecimento para a equação de Laplace

Para descrever o comportamento das soluções perto de um canto podemos usar *soluções particulares*, soluções da equação de Laplace em coordenadas polares

$$\left(\partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 \right) u(r, \theta) = 0, \quad r > 0, \quad 0 \leq \theta \leq \Theta.$$

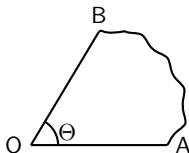


Figura: Um domínio com um canto com ângulo interior Θ .

Um método de enriquecimento para a equação de Laplace

Por separação de variáveis, $u(r, \theta) = R(r)T(\theta)$, temos as duas famílias de soluções particulares

$$u(r, \theta) = (c_1 r^\alpha + c_2 r^{-\alpha}) \times (c_3 \cos(\alpha\theta) + c_4 \sin(\alpha\theta)), \quad \alpha > 0$$

ou

$$u(r, \theta) = (c_1 \log(r) + c_2) \times (c_3 \theta + c_4),$$

onde $c_1, c_2, c_3, c_4 \in \mathbb{R}$ e α depende das condições de fronteira e de Θ .

Um método de enriquecimento para a equação de Laplace

Expandindo a aproximação com as soluções particulares,

$$\tilde{u}(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi(x - y_j) + \sum_{s=1}^P \beta_s \phi_s(r(x), \theta(x)), \quad x \in \overline{\Omega},$$

onde ϕ_s é a forma geral de cada solução particular, centrada no canto.

O operador de Dirac

O operador de Dirac

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz com fronteira Γ , e $m \geq 0$. O operador de Dirac é dado pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} m & -i(\partial_1 - i\partial_2) \\ -i(\partial_1 + i\partial_2) & -m \end{bmatrix}$$

cujo domínio é dado por

$$\text{Dom}(\hat{H}) = \{\mathbf{u} \in H^1(\Omega, \mathbb{C}^2) : u_2 = i(n_1 + in_2)u_1 \text{ em } \Gamma\}$$

onde $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ é a normal unitária exterior em cada ponto $x \in \Gamma$.

Estudamos a solução $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{bmatrix}$ da equação (de Dirac)

$$\hat{H}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$$

em $\text{Dom}(\hat{H})$.

O operador de Dirac

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz com fronteira Γ , e $m \geq 0$. O operador de Dirac é dado pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} m & -i(\partial_1 - i\partial_2) \\ -i(\partial_1 + i\partial_2) & -m \end{bmatrix}$$

cujo domínio é dado por

$$\text{Dom}(\hat{H}) = \{\mathbf{u} \in H^1(\Omega, \mathbb{C}^2) : u_2 = i(n_1 + in_2)u_1 \text{ em } \Gamma\}$$

onde $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ é a normal unitária exterior em cada ponto $x \in \Gamma$.

Estudamos a solução $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{bmatrix}$ da equação (de Dirac)

$$\hat{H}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$$

em $\text{Dom}(\hat{H})$.

O operador de Dirac

Após algumas manipulações, a equação de Dirac pode ser transformada na equação de Helmholtz com condições de fronteira de Cauchy-Riemann oblíquas

$$\begin{cases} -\Delta u_1 = (\lambda^2 - m^2)u_1, & \text{em } \Omega \\ i(\partial_1 + i\partial_2)u_1 + (\lambda + m)i(n_1 + in_2)u_1 = 0, & \text{em } \Gamma, \end{cases}$$

e

$$u_2 = \frac{-i(\partial_1 + i\partial_2)u_1}{\lambda + m}.$$

O operador de Dirac (conjeturas a estudar)

Conjetura (Uma conjetura do tipo Faber-Krahn)

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz. Então,

$$\lambda_1(\Omega) \geq \lambda_1(\Omega^*)$$

onde Ω^ é o disco com a mesma área ou perímetro de Ω .*

Conjetura (Uma conjetura do tipo Ashbaugh-Benguria)

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz. Então, a solução para o problema de maximização

$$\max \left\{ \frac{\lambda_2(\Omega)}{\lambda_1(\Omega)} : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \right\}$$

é a bola em \mathbb{R}^2 .

O operador de Dirac (conjeturas a estudar)

Conjetura (Uma conjetura do tipo Faber-Krahn)

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz. Então,

$$\lambda_1(\Omega) \geq \lambda_1(\Omega^*)$$

onde Ω^ é o disco com a mesma área ou perímetro de Ω .*

Conjetura (Uma conjetura do tipo Ashbaugh-Benguria)

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um domínio Lipschitz. Então, a solução para o problema de maximização

$$\max \left\{ \frac{\lambda_2(\Omega)}{\lambda_1(\Omega)} : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \right\}$$

é a bola em \mathbb{R}^2 .

O operador de Dirac (conjeturas a estudar)

Conjetura (Otimização de forma em retângulos)

Seja $\lambda_1(a, b) = \lambda_1(\Omega_{a,b})$ o primeiro valor próprio do operador de Dirac com condições de massa infinita num retângulo de lados a e b . Então,

- ① Restrição de área (unitária):

$$\lambda_1(a, \frac{1}{a}) \geq \lambda_1(1, 1), \quad \forall a > 0;$$

- ② Restrição de perímetro (igual a 4):

$$\lambda_1(a, 2 - a) \geq \lambda_1(1, 1), \quad \forall a \in (0, 2).$$

O operador de Dirac (conjeturas a estudar)

Conjetura (Otimização de forma em triângulos)

Considere-se o triângulo $\Omega_{a,b}$ definindo pelos pontos $O = (0, 0)$, $A = (a, 0)$ e $B = (0, b)$ com $a, b > 0$ e seja $\lambda_1(a, b) = \lambda_1(\Omega_{a,b})$. Então,

① Restrição de área

$$\lambda_1(a, b) \geq \lambda_1(k, k), \quad \forall a, b > 0$$

para qualquer k positivo tal que $ab = k^2$;

② Restrição de perímetro

$$\lambda_1(a, b) \geq \lambda_1(k, k), \quad \forall a \in (0, (2 + \sqrt{2})k)$$

e $\forall b > 0$ tal que $a + b + \sqrt{a^2 + b^2} = (2 + \sqrt{2})k$, para qualquer k positivo.

O operador de Dirac (conjeturas a estudar)

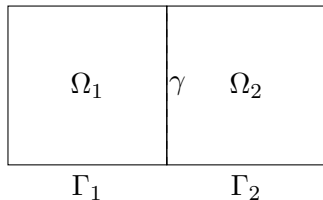
Conjetura

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um aberto Lipschitz, $n \geq 5$ e considere-se a classe dos polígonos de n lados. Então, o polígono regular de n lados tem o menor primeiro valor próprio entre todos os polígonos de n lados com área fixa.

Um problema de decomposição com condições de transmissibilidade

Problema de decomposição com condições de transmissibilidade

Seja $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_1 \cup \bar{\Omega}_2$, $\gamma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$, $\Gamma_i = \partial\Omega_i \setminus \gamma$ e $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$ a normal unitária de Ω_i quando restringido a γ , para $i = 1, 2$. Para os coeficientes materiais $k_1 \geq k_2 > 0$ e $f_i \in L^2(\Omega_i)$, consideramos



$$\begin{cases} -\nabla \cdot (k_i \nabla u_i) = f_i, & \text{em } \Omega_i \\ u_1 - u_2 = 0, & \text{em } \gamma \\ k_1 \frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{n}_1} + k_2 \frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}_2} = 0, & \text{em } \gamma \\ u_i = 0, & \text{em } \Gamma_i, \end{cases}$$

Figura: Possível configuração do problema de transmissão

Simulações Numéricas

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Resultados para retângulos com área fixa:

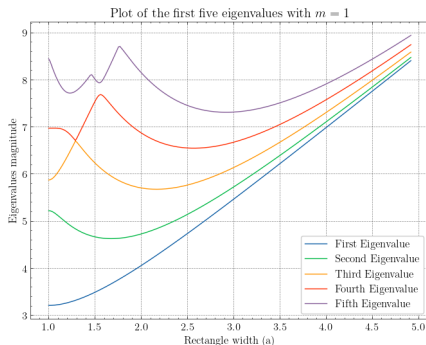


Figura: Comportamento dos primeiros cinco valores próprios para retângulos de área unitária, comprimento a e $m = 1$.

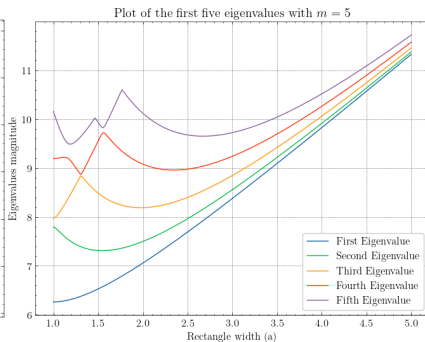


Figura: Comportamento dos primeiros cinco valores próprios para retângulos de área unitária, comprimento a e $m = 5$.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Resultados para retângulos com perímetro fixo:

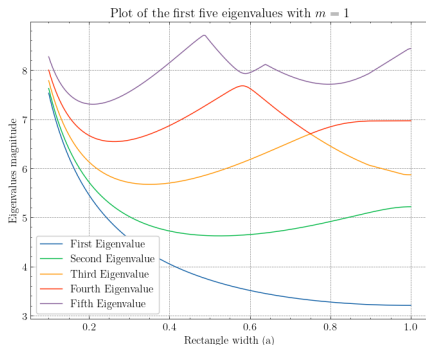


Figura: Comportamento dos primeiros cinco valores próprios para retângulos de perímetro 4, comprimento a e $m = 1$.

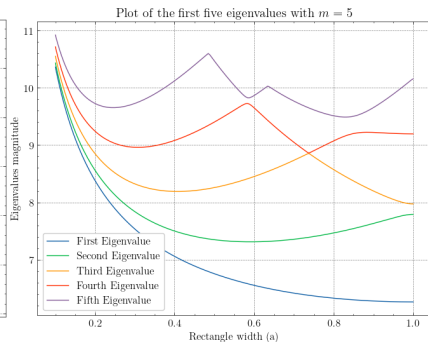


Figura: Comportamento dos primeiros cinco valores próprios para retângulos de perímetro 4, comprimento a e $m = 5$.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Resultados para quadriláteros com área fixa e $m = 1$:

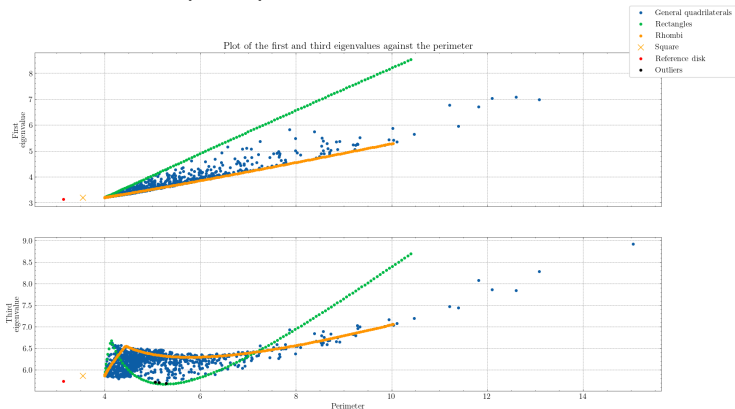


Figura: Resultados para os três primeiros valores próprios de quadriláteros aleatórios em função do perímetro para $m = 1$. A preto, encontram-se representados os domínios cujos terceiro valor próprio é menos que o terceiro valor próprio do disco.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Rácio entre λ_2 e λ_1 para $m = 1$.

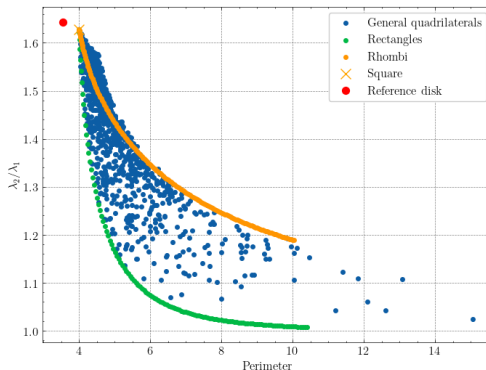


Figura: Rácio $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ em função do perímetro de quadriláteros aleatórios, para $m = 1$.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

De forma a abordar a conjectura para triângulos, consideramos a seguinte região de triângulos admissíveis:

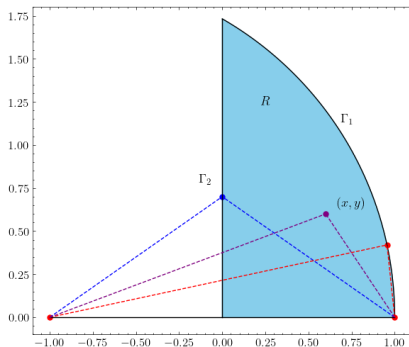


Figura: Espaço de configuração de regiões admissíveis (representada por R). A linha vermelha a tracejado representa um triângulo *subequilátero*; a tracejado azul, um triângulo *superequilátero*.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Resultados para triângulos com área fixa e $m = 1$:

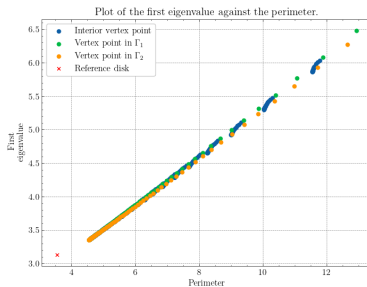


Figura: Resultado para o primeiro valor próprio de triângulos admissíveis em função do perímetro para $m = 1$.

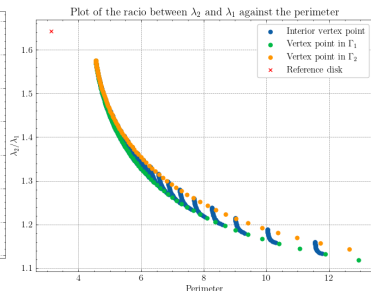


Figura: Ratio between the first two eigenvalues $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$ for triangular domains.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Resultados para polígonos de n lados com área fixa e $m = 1$:

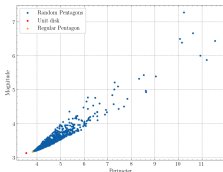


Figura: Simulações numéricas para o primeiro valor próprio de pentágonos aleatórios.

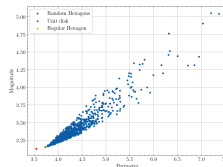


Figura: Simulações numéricas para o primeiro valor próprio de hexágonos aleatórios.

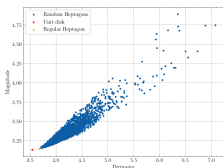


Figura: Simulações numéricas para o primeiro valor próprio de heptágonos aleatórios.

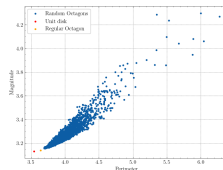


Figura: Simulações numéricas para o primeiro valor próprio de octógonos aleatórios.

Simulações Numéricas (operador de Dirac)

Por fim, procuramos a forma ótima para o terceiro valor próprio, provando não ser o disco.

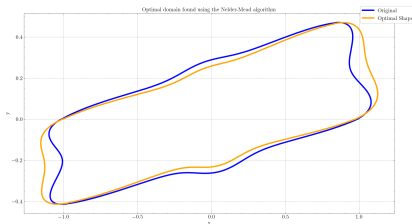


Figura: Domínio ótimo Ω^* (a laranja) e o domínio original (a azul) usado para iniciar o método de Nelder-Mead.

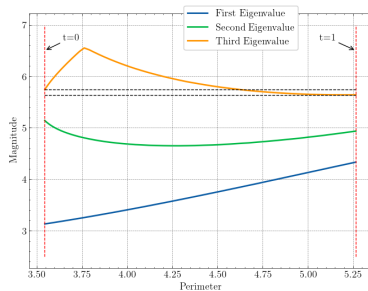


Figura: Os primeiros três valores próprios dos domínios definidos através da soma de Minkowski entre o disco e o domínio ótimo Ω^* .

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

Transformamos o problema de transmissão numa EDP homogênea

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (k_i \nabla u_i^H) = 0, & \text{em } \Omega_i \\ u_1^H - u_2^H = u_2^{NH} - u_1^{NH}, & \text{em } \gamma \\ k_1 \frac{\partial u_1^H}{\partial \mathbf{n}_1} - k_2 \frac{\partial u_2^H}{\partial \mathbf{n}_1} = k_2 \frac{\partial u_2^{NH}}{\partial \mathbf{n}_1} - k_1 \frac{\partial u_1^{NH}}{\partial \mathbf{n}_1}, & \text{em } \gamma \\ u_i^H = -u_i^{NH}, & \text{em } \Gamma_i, \end{cases}$$

onde k_1 e k_2 são coeficientes materiais.

A solução final pode ser recuperada obtendo uma solução não homogênea dada por

$$u_i = u_i^H + u_i^{NH}, \quad i = 1, 2.$$

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

Transformamos o problema de transmissão numa EDP homogênea

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (k_i \nabla u_i^H) = 0, & \text{em } \Omega_i \\ u_1^H - u_2^H = u_2^{NH} - u_1^{NH}, & \text{em } \gamma \\ k_1 \frac{\partial u_1^H}{\partial \mathbf{n}_1} - k_2 \frac{\partial u_2^H}{\partial \mathbf{n}_1} = k_2 \frac{\partial u_2^{NH}}{\partial \mathbf{n}_1} - k_1 \frac{\partial u_1^{NH}}{\partial \mathbf{n}_1}, & \text{em } \gamma \\ u_i^H = -u_i^{NH}, & \text{em } \Gamma_i, \end{cases}$$

onde k_1 e k_2 são coeficientes materiais.

A solução final pode ser recuperada obtendo uma solução não homogênea dada por

$$u_i = u_i^H + u_i^{NH}, \quad i = 1, 2.$$

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

O erro é calculado descretizando a norma de L^2 na *Root mean squared error* (RMSE) dada por

$$\|u - \tilde{u}\| = \sqrt{\frac{1}{\#\mathcal{I}} \sum_{z \in \mathcal{I}} |u(z) - \tilde{u}(z)|^2},$$

onde medimos os erros de consistência

- $\|\tilde{u}_i - 0\|_{L^2(\Gamma_i)}$, $i = 1, 2$: erro de colocação na fronteira;
- $e_\gamma^0 = \|\tilde{u}_1 - \tilde{u}_2\|_{L^2(\gamma)}$, $i = 1, 2$: L^2 erro de \tilde{u} ao longo de γ ;
- $e_\gamma^1 = \|k_1 \partial_n \tilde{u}_1 - k_2 \partial_n \tilde{u}_2\|_{L^2(\gamma)}$, $i = 1, 2$: L^2 erro de $\partial_n \tilde{u}$ ao longo de γ .

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

O erro é calculado descretizando a norma de L^2 na *Root mean squared error* (RMSE) dada por

$$\|u - \tilde{u}\| = \sqrt{\frac{1}{\#\mathcal{I}} \sum_{z \in \mathcal{I}} |u(z) - \tilde{u}(z)|^2},$$

onde medimos os erros de consistência

- $\|\tilde{u}_i - 0\|_{L^2(\Gamma_i)}$, $i = 1, 2$: erro de colocação na fronteira;
- $e_\gamma^0 = \|\tilde{u}_1 - \tilde{u}_2\|_{L^2(\gamma)}$, $i = 1, 2$: L^2 erro de \tilde{u} ao longo de γ ;
- $e_\gamma^1 = \|k_1 \partial_n \tilde{u}_1 - k_2 \partial_n \tilde{u}_2\|_{L^2(\gamma)}$, $i = 1, 2$: L^2 erro de $\partial_n \tilde{u}$ ao longo de γ .

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

Resultados para retângulos:

k_1 value	Boundary Error		Interface Errors	
	$\partial\Omega_1$	$\partial\Omega_2$	e_γ^0	e_γ^1
1	7.775×10^{-8}	7.779×10^{-8}	4.732×10^{-9}	7.589×10^{-9}
2	4.398×10^{-8}	8.614×10^{-8}	2.499×10^{-6}	7.868×10^{-8}
5	2.181×10^{-8}	1.036×10^{-7}	3.838×10^{-6}	1.551×10^{-7}

Tabela: Erros de consistência na fronteira e na interface γ .

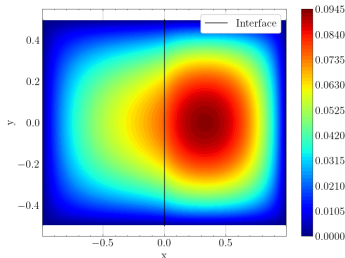


Figura: Simulações numéricas para $k_1 = 2$.

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

Resultados para uma L-shape com interface no eixo de simetria:

k_1 value	Boundary Error		Interface Errors	
	$\partial\Omega_1$	$\partial\Omega_2$	e_γ^0	e_γ^1
1	1.812×10^{-4}	2.060×10^{-4}	7.305×10^{-3}	8.018×10^{-5}
2	1.398×10^{-4}	9.729×10^{-5}	5.986×10^{-4}	5.505×10^{-5}
5	7.096×10^{-5}	3.030×10^{-5}	1.528×10^{-3}	4.348×10^{-5}

Tabela: Erros de consistência na fronteira e na interface γ .

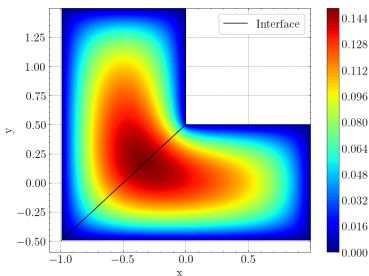


Figura: Simulações numéricas para $k_1 = 1$.

Simulações Numéricas (problema de transmissão)

Resultados para uma L-shape com interface no eixo de simetria, após enriquecimento de base usando soluções particulares do tipo Dirichlet-Neumann (p_1) e Neumann-Dirichlet ($p_2 = (0, 1)$):

p_1 values	k_1 value	Boundary Error		Interface Errors	
		$\partial\Omega_1$	$\partial\Omega_2$	e_γ^0	e_γ^1
0, 1	1	2.965×10^{-5}	7.907×10^{-5}	2.94×10^{-3}	2.624×10^{-5}
	2	2.203×10^{-5}	6.657×10^{-5}	1.86×10^{-3}	2.068×10^{-5}
	5	2.203×10^{-5}	6.657×10^{-5}	1.86×10^{-3}	2.068×10^{-5}
-1, 0, 1	1	8.627×10^{-6}	4.132×10^{-5}	7.68×10^{-4}	6.876×10^{-6}
	2	7.333×10^{-6}	2.791×10^{-5}	6.01×10^{-4}	2.555×10^{-5}
	5	4.271×10^{-6}	1.118×10^{-5}	2.69×10^{-4}	4.166×10^{-5}
-2, -1, 0, 1	1	3.898×10^{-6}	5.975×10^{-6}	1.44×10^{-3}	2.505×10^{-6}
	2	2.584×10^{-6}	2.514×10^{-6}	9.69×10^{-4}	1.048×10^{-5}
	5	1.119×10^{-6}	6.838×10^{-7}	4.89×10^{-4}	1.106×10^{-5}

Tabela: Erros de consistência na fronteira e na interface γ após enriquecimento de base com soluções particulares.

Conclusões e trabalho futuro (operador de Dirac):

- Provámos a inexistência de soluções dadas por separação de variáveis usando coordenadas polares centradas num canto;
- Encontrámos evidência numérica que sustenta as conjecturas de Faber-Krahn e Ashbaugh-Benguria em várias classes de domínios;
- Expusemos a dependência do espectro do operador de Dirac na massa m ;
- Trabalho futuro:
 - Resultados para outros valores próprios (por exemplo, $\lambda_2(\Omega)$);
 - Otimização de forma em domínios desconexos.

Conclusões e trabalho futuro (operador de Dirac):

- Provámos a inexistência de soluções dadas por separação de variáveis usando coordenadas polares centradas num canto;
- Encontrámos evidência numérica que sustenta as conjecturas de Faber-Krahn e Ashbaugh-Benguria em várias classes de domínios;
- Expusemos a dependência do espectro do operador de Dirac na massa m ;
- Trabalho futuro:
 - Resultados para outros valores próprios (por exemplo, $\lambda_2(\Omega)$);
 - Otimização de forma em domínios desconexos.

Conclusões e trabalho futuro (operador de Dirac):

- Provámos a inexistência de soluções dadas por separação de variáveis usando coordenadas polares centradas num canto;
- Encontrámos evidência numérica que sustenta as conjecturas de Faber-Krahn e Ashbaugh-Benguria em várias classes de domínios;
- Expusemos a dependência do espectro do operador de Dirac na massa m ;
- Trabalho futuro:
 - Resultados para outros valores próprios (por exemplo, $\lambda_2(\Omega)$);
 - Otimização de forma em domínios desconexos.

Conclusões e trabalho futuro (operador de Dirac):

- Provámos a inexistência de soluções dadas por separação de variáveis usando coordenadas polares centradas num canto;
- Encontrámos evidência numérica que sustenta as conjecturas de Faber-Krahn e Ashbaugh-Benguria em várias classes de domínios;
- Expusemos a dependência do espectro do operador de Dirac na massa m ;
- Trabalho futuro:
 - Resultados para outros valores próprios (por exemplo, $\lambda_2(\Omega)$);
 - Otimização de forma em domínios desconexos.

Conclusões e trabalho futuro (operador de Dirac):

- Provámos a inexistência de soluções dadas por separação de variáveis usando coordenadas polares centradas num canto;
- Encontrámos evidência numérica que sustenta as conjecturas de Faber-Krahn e Ashbaugh-Benguria em várias classes de domínios;
- Expusemos a dependência do espectro do operador de Dirac na massa m ;
- Trabalho futuro:
 - Resultados para outros valores próprios (por exemplo, $\lambda_2(\Omega)$);
 - Otimização de forma em domínios desconexos.

Conclusões e trabalho futuro (Problema de decomposição com condições de transmissão):

- Provámos a equivalência entre as formulações fracas da equação de Poisson com fonte descontínua e o problema de decomposição, justificando a aplicação do Método das Soluções Fundamentais;
- Foi utilizada, pela primeira vez, enriquecimento de base neste tipo de problemas, diminuindo os erros de consistência em duas ordens de magnitude;
- Trabalho futuro:
 - Apresentar uma estimativa *a posteriori* para o Método das Soluções Fundamentais para problemas de decomposição;
 - Estudar melhores formas de enriquecimento.

Conclusões e trabalho futuro (Problema de decomposição com condições de transmissão):

- Provámos a equivalência entre as formulações fracas da equação de Poisson com fonte descontínua e o problema de decomposição, justificando a aplicação do Método das Soluções Fundamentais;
- Foi utilizada, pela primeira vez, enriquecimento de base neste tipo de problemas, diminuindo os erros de consistência em duas ordens de magnitude;
- Trabalho futuro:
 - Apresentar uma estimativa *a posteriori* para o Método das Soluções Fundamentais para problemas de decomposição;
 - Estudar melhores formas de enriquecimento.

Conclusões e trabalho futuro (Problema de decomposição com condições de transmissão):

- Provámos a equivalência entre as formulações fracas da equação de Poisson com fonte descontínua e o problema de decomposição, justificando a aplicação do Método das Soluções Fundamentais;
- Foi utilizada, pela primeira vez, enriquecimento de base neste tipo de problemas, diminuindo os erros de consistência em duas ordens de magnitude;
- Trabalho futuro:
 - Apresentar uma estimativa *a posteriori* para o Método das Soluções Fundamentais para problemas de decomposição;
 - Estudar melhores formas de enriquecimento.

Conclusões e trabalho futuro (Problema de decomposição com condições de transmissão):

- Provámos a equivalência entre as formulações fracas da equação de Poisson com fonte descontínua e o problema de decomposição, justificando a aplicação do Método das Soluções Fundamentais;
- Foi utilizada, pela primeira vez, enriquecimento de base neste tipo de problemas, diminuindo os erros de consistência em duas ordens de magnitude;
- Trabalho futuro:
 - Apresentar uma estimativa *a posteriori* para o Método das Soluções Fundamentais para problemas de decomposição;
 - Estudar melhores formas de enriquecimento.

Obrigado por terem assistido!
Perguntas?

Referências I

- [AC05] CJS Alves e CS Chen. “A new method of fundamental solutions applied to nonhomogeneous elliptic problems”. Em: *Advances in Computational Mathematics* 23 (2005), pp. 125–142.
- [Alv09] Carlos JS Alves. “On the choice of source points in the method of fundamental solutions”. Em: *Engineering Analysis with Boundary Elements* 33.12 (2009), pp. 1348–1361.
- [AV10] Pedro RS Antunes e Svilen S Valtchev. “A meshfree numerical method for acoustic wave propagation problems in planar domains with corners and cracks”. Em: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 234.9 (2010), pp. 2646–2662.

Referências II

- [Ben+17] Rafael D Benguria et al. “Spectral gaps of Dirac operators describing graphene quantum dots”. Em: *Mathematical Physics, Analysis and Geometry* 20 (2017), pp. 1–12.
- [BK22] Philippe Briet e David Krejčířík. “Spectral optimization of Dirac rectangles”. Em: *Journal of Mathematical Physics* 63.1 (2022), p. 013502.
- [BT05] Timo Betcke e Lloyd N Trefethen. “Reviving the method of particular solutions”. Em: *SIAM review* 47.3 (2005), pp. 469–491.
- [GSV19] Tom Gustafsson, Rolf Stenberg e Juha Videman. “Error analysis of Nitsche’s mortar method”. Em: *Numerische Mathematik* 142 (2019), pp. 973–994.

Referências III

- [Hen06] Antoine Henrot. *Extremum problems for eigenvalues of elliptic operators*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [KLL19] David Krejčířík, Simon Larson e Vladimir Lotoreichik. *Problem List of the AIM Workshop*. 2019. URL: <http://aimpl.org/shapesurface/>.
- [QV99] Alfio Quarteroni e Alberto Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. BOOK. Oxford University Press, 1999.
- [Vu23] Tuyen Vu. “Spectral inequality for Dirac right triangles”. Em: *arXiv preprint arXiv:2302.13040* (2023).

Seja \mathcal{L} um operador linear elíptico. Dizemos que uma distribuição $\Phi \in \mathcal{D}^*(\mathbb{R}^d)$ é a solução fundamental da equação diferencial

$$\mathcal{L}u(x) = 0, \text{ em } \mathbb{R}^d$$

se Φ satisfaz

$$\mathcal{L}\Phi = \delta, \text{ em } \mathbb{R}^d$$

no sentido das distribuições, onde δ é um Delta de Dirac.

Sejam x_1, \dots, x_M pontos de colocação sobre Γ e y_1, \dots, y_N pontos fonte sobre $\hat{\Gamma}$.

Assumindo condições de fronteira de Dirichlet $u = g$ em Γ , os coeficientes α são determinados resolvendo o sistema

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \Phi(x_1, y_1) & \cdots & \Phi(x_1, y_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi(x_M, y_1) & \cdots & \Phi(x_M, y_N) \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{bmatrix}}_{\alpha} = \underbrace{\begin{bmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_M \end{bmatrix}}_g$$

$M \times N \quad N \times 1 \quad M \times 1$

onde $g_i = g(x_i)$.

Considere-se o espaço funcional

$$\mathcal{S}(\Gamma, \hat{\Gamma}) = \text{span}\{\Phi(x - y)|_{x \in \Gamma} : y \in \hat{\Gamma}\}.$$

Neste trabalho, apresentamos uma variação da prova do resultado de densidade do MSF¹.

Teorema

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um conjunto aberto, limitado e fronteira C^2 . Então, $\mathcal{S}(\Gamma, \hat{\Gamma}) \oplus \mathbb{R}$ é denso em $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$.

¹Válido para outras condições de fronteira, para as equações de Laplace e Helmholtz.

Considere-se o espaço funcional

$$\mathcal{S}(\Gamma, \hat{\Gamma}) = \text{span}\{\Phi(x - y)|_{x \in \Gamma} : y \in \hat{\Gamma}\}.$$

Neste trabalho, apresentamos uma variação da prova do resultado de densidade do MSF¹.

Teorema

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ um conjunto aberto, limitado e fronteira C^2 . Então, $\mathcal{S}(\Gamma, \hat{\Gamma}) \oplus \mathbb{R}$ é denso em $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$.

¹Válido para outras condições de fronteira, para as equações de Laplace e Helmholtz.

Neste trabalho, o seguinte teorema é estendido para coordenadas polares, tendo implicações no enriquecimento da base do MSF.

Teorema

Seja $\mathbf{u} \in H^2(\Omega)$ a solução da equação de Dirac com condições de fronteira de massa infinita. Então, \mathbf{u} não pode ser escrita através de separação de variáveis em retângulos (coordenadas cartesianas) nem em coordenadas polares (na proximidade de um canto).

O principal resultado relativo ao problema de decomposição refere-se à equivalência entre o problema de transmissão e a equação de Poisson com uma função fonte descontínua.

Seja

$$f = \begin{cases} \frac{f_1}{k_1}, & \text{in } \Omega_1 \\ \frac{f_2}{k_2}, & \text{in } \Omega_2. \end{cases}$$

Então, a formulação fraca da equação de Poisson

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{em } \Omega \\ u = 0, & \text{em } \partial\Omega \end{cases}$$

lê-se

$$\text{encontrar } u \in H_0^1(\Omega) : \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} f v dx, \forall v \in H_0^1.$$

O principal resultado relativo ao problema de decomposição refere-se à equivalência entre o problema de transmissão e a equação de Poisson com uma função fonte descontínua.

Seja

$$f = \begin{cases} \frac{f_1}{k_1}, & \text{in } \Omega_1 \\ \frac{f_2}{k_2}, & \text{in } \Omega_2. \end{cases}$$

Então, a formulação fraca da equação de Poisson

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{em } \Omega \\ u = 0, & \text{em } \partial\Omega \end{cases}$$

lê-se

$$\text{encontrar } u \in H_0^1(\Omega) : \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v dx = \int_{\Omega} f v dx, \forall v \in H_0^1.$$

Para a formulação fraca do problema de decomposição, começamos por definir os seguintes espaços de Sobolev e formas bilineares:

$$V_i = \{v_i \in H^1(\Omega_i) : v_i|_{\partial\Omega \cap \partial\Omega_i} = 0\}$$

$$, V_i^0 = H_0^1(\Omega_i),$$

$$\Lambda = \{\eta \in H^{\frac{1}{2}}(\gamma) : \eta = v|_{\gamma} \text{ para algum } v \in V^0\},$$

$$a_i(u_i, v_i) = \int_{\Omega_i} \nabla u_i \cdot \nabla v_i,$$

$$(f_i, v_i) = \int_{\Omega_i} f_i v_i dx \quad (\text{produto interno de } L^2(\Omega_i)).$$

Proposição

A formulação fraca do problema de transmissão pode ser lida como:

encontrar $u_1 \in V_1, u_2 \in V_2$ tais que

$$\left\{ \begin{array}{ll} a_1(u_1, v_1) = (\frac{f_1}{k_1}, v_1), & \forall v_1 \in V_1^0 \\ a_2(u_2, v_2) = (\frac{f_2}{k_2}, v_2), & \forall v_2 \in V_2^0 \\ u_1 = u_2, & \text{em } \gamma \\ a_1(k_1 u_1, P_1 \mu) + a_2(k_2 u_2, P_2 \mu) & \\ = (f_1, P_1 \mu) + (f_2, P_2 \mu), & \forall \mu \in \Lambda \end{array} \right.$$

Problema de decomposição com condições de transmissibilidade

Teorema

As formulações fracas da equação de Poisson e do problema de decomposição com condições de transmissibilidade são equivalentes.

Seja:

- $N^{(i)}$ o número de pontos fonte para o domínio Ω_i , tal que $N = N^{(1)} + N^{(2)}$;
- $M^{(i)}$ o número de pontos de colocação na fronteira $x_m^{(i)}$ para cada Ω_i e $M = M^{(1)} + M^{(2)}$;
- Q o número de pontos de colocação na interface $z_q \in \gamma$.

Resolvemos um sistema da forma $A\alpha = b$ com

$$A = \begin{bmatrix} \left[\Phi \left(x_m^{(1)} - y_j^{(1)} \right) \right]_{M^{(1)} \times N^{(1)}} & [0]_{M^{(1)} \times N^{(2)}} \\ [0]_{M^{(2)} \times N^{(1)}} & \left[\Phi \left(x_m^{(2)} - y_j^{(2)} \right) \right]_{M^{(2)} \times N^{(2)}} \\ \left[\Phi \left(z_q - y_j^{(1)} \right) \right]_{Q \times N^{(1)}} & \left[-\Phi \left(z_q - y_j^{(2)} \right) \right]_{Q \times N^{(2)}} \\ \left[k_1 \partial_n \Phi \left(z_q - y_j^{(1)} \right) \right]_{Q \times N^{(1)}} & \left[-k_2 \partial_n \Phi \left(z_q - y_j^{(2)} \right) \right]_{Q \times N^{(2)}} \end{bmatrix},$$

e

$$b = \begin{bmatrix} \left[-u_1^{NH}(x_m^{(1)}) \right]_{M^{(1)} \times 1} \\ \left[-u_2^{NH}(x_m^{(2)}) \right]_{M^{(2)} \times 1} \\ \left[u_2^{NH}(z_q) - u_1^{NH}(z_q) \right]_{Q \times 1} \\ \left[k_2 \partial_n u_2^{NH}(z_q) - k_1 \partial_n u_1^{NH}(z_q) \right]_{Q \times 1} \end{bmatrix}.$$