

Uma Abordagem para Reduzir o Mau Condicionamento do Método das Soluções Fundamentais para a Equação de Laplace em 3D

Pedro R. S. Antunes¹

GFM, Lisboa, Portugal e DM, IST, Lisboa, Portugal

Vinicius Santos²

GFM, Lisboa, Portugal e DCeT, UAb, Lisboa, Portugal

Pedro Serranho³

DCeT, UAb, Lisboa, Portugal e CIBIT, UC, Coimbra, Portugal e CEMAT, UL, Lisboa, Portugal

Resumo. Este trabalho apresenta os métodos QR-MFS, SVD-MFS e Hybrid-MFS, que abordam o problema do mau condicionamento das matrizes envolvidas na resolução pelo método das soluções fundamentais (MFS) do problema de Dirichlet para a equação de Laplace. Além disso, propomos uma variação do método QR-MFS que garante um número de condição igual a 1. Esse novo método, denominado QRGs-MFS, é então utilizado para construir uma variante do Hybrid-MFS, chamada HybridGS-MFS. Os resultados numéricos demonstram que essas abordagens superam o método tradicional.

Palavras-chave. Equação de Laplace, Método das Soluções Fundamentais, Mau Condicionamento

1 Introdução

O problema de Dirichlet para a equação de Laplace é definido por

$$\Delta u = 0, \quad \text{em } \Omega, \quad (1)$$

$$u = g, \quad \text{em } \partial\Omega, \quad (2)$$

onde Δ denota o operador laplaciano, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ é um domínio limitado e suave, e g é uma função prescrita sobre a fronteira $\partial\Omega$.

O Método das Soluções Fundamentais (MFS) tem sido amplamente aplicado na resolução de problemas envolvendo equações diferenciais parciais. Esse método destaca-se por ser verdadeiramente sem malha e de implementação computacional relativamente simples.

No MFS, a solução numérica é expressa como uma combinação linear de soluções fundamentais da equação de Laplace, ou seja,

$$u_{n_S}(x) = \sum_{n=1}^{n_S} c_n^D \Phi(x, y_n), \quad x \in \overline{\Omega}, \quad y_n \in \hat{\Omega}, \quad (3)$$

¹prasantunes@tecnico.ulisboa.pt

²1901413@estudante.uab.pt

³pedro.serranho@uab.pt

onde $\bar{\Omega}$ é o fecho de Ω e $\hat{\Omega}$ é uma bola fechada do \mathbb{R}^3 tal que $\bar{\Omega} \subset \text{int}(\hat{\Omega})$, isto é, $\bar{\Omega}$ está contido no interior de $\hat{\Omega}$. Os coeficientes $c_n^D \in \mathbb{R}$ devem ser determinados, os pontos y_n pertencem à superfície $\partial\hat{\Omega}$, e Φ representa a solução fundamental da equação de Laplace em \mathbb{R}^3 , dada por

$$\Phi(x, y) = \frac{1}{4\pi\|x - y\|}, \quad x \neq y, \quad (4)$$

sendo $\|x - y\|$ a distância euclidiana entre os pontos x e y .

A aproximação em (3) em parte é justificada por resultados sobre densidade que provam que $\text{span}\{\Phi(\bullet, y)|_{\Omega} : y \in \hat{\Omega}\}$ é denso em $L^2(\partial\Omega)$ [1].

Desta forma, uma vez que a representação da forma (3) satisfaz a equação de Laplace, para obter a solução numérica utilizando o MFS colocamos a equação (2), considerando n_c pontos de colocação e n_s pontos fonte, e, em seguida, resolvemos para \mathbf{c}^D a equação matricial

$$A^{(C)} \mathbf{c}^D = \mathbf{b}, \quad (5)$$

onde $A_{m,n}^{(C)} = \Phi(x_m, y_n)$ e $b_m = g(x_m)$ para $m = 1, 2, \dots, n_c$, $n = 1, 2, \dots, n_s$. Obtidos assim os coeficientes no vetor \mathbf{c}^D , podemos aproximar a solução para n_e pontos de avaliação pela simples multiplicação matricial

$$\mathbf{u}^{(E)} = A^{(E)} \mathbf{c}^D, \quad (6)$$

onde $A_{m,n}^{(E)} = \Phi(x_m, y_n)$ para $m = 1, 2, \dots, n_e$ e x_m são os pontos de avaliação. Referiremos a este método como Direct-MFS.

Sobre o MFS há ainda dois problemas a serem totalmente esclarecidos, um sobre a localização ótima dos pontos fonte e o outro sobre a redução do mau condicionamento da matriz $A^{(C)}$. Embora a melhor localização dos pontos fonte tenha sido amplamente estudada, há poucos trabalhos dedicados a reduzir o mau condicionamento [2]. Recentemente, em [2] foi apresentado um método capaz de evitar completamente o mau condicionamento em domínios planares. Essa técnica tem sido estendida a outros problemas como em [3] e para domínios limitados estrelados em 3D [4], com superfície dada por

$$\partial\Omega = \left\{ (x, y, z) = r(\theta, \phi) (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta) : 0 \leq \theta \leq \pi, -\pi \leq \phi < \pi \right\}, \quad (7)$$

onde $r(\theta, \phi)$ representa a função radial.

O presente artigo tem o objetivo de explorar as técnicas apresentadas em [4] e fornecer uma variação para o método QR-MFS e Hybrid-MFS. Na seção 2 descrevemos o método SVD-MFS, QR-MFS e Hybrid-MFS. Na seção 3, abordamos o método QRGS-MFS e o método HybridGS-MFS. Na seção 4, apresentamos os resultados numéricos e na 5 as conclusões.

2 SVD-MFS, QR-MFS e Hybrid-MFS

Vamos apresentar de forma concisa os métodos, remetendo para [4] para mais detalhes.

2.1 SVD–MFS

Seja $x = (r, \omega, \varphi)$ e $y = (R, \varepsilon, \eta)$ as coordenadas esféricas de x e y . Com a expansão das esféricas harmônicas em [5], obtemos para $|x| < |y|$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi\|x-y\|} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \frac{r^k}{R^{k+1}} \sum_{m=-k}^k \overline{Y_k^m(\omega, \varphi)} Y_k^m(\varepsilon, \eta) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=-k}^k \frac{r_{\Omega}^k}{2k+1} \frac{Y_k^m(\varepsilon, \eta)}{R^{k+1}} \frac{r^k \overline{Y_k^m(\omega, \varphi)}}{r_{\Omega}^k}, \end{aligned} \quad (8)$$

onde $r_{\Omega}^k := \max_{x \in \partial\Omega} \|x\|^k$ e Y_n^m são as esféricas harmônicas de grau n e ordem m .

Assim, podemos reescrever $(A^{(C)})^T$, onde o símbolo T representa a matriz transposta, de forma aproximada como sendo a multiplicação $A^{(C)} \approx MF^{(C)}$, onde

$$M = \begin{bmatrix} \frac{1}{R_1^1} Y_0^0(\varepsilon_1, \eta_1) \frac{r_{\Omega}^0}{1} & \cdots & \frac{1}{R_1^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\varepsilon_1, \eta_1) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} & \cdots & \frac{1}{R_1^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\varepsilon_1, \eta_1) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} \\ \frac{1}{R_2^1} Y_0^0(\varepsilon_2, \eta_2) \frac{r_{\Omega}^0}{1} & \cdots & \frac{1}{R_2^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\varepsilon_2, \eta_2) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} & \cdots & \frac{1}{R_2^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\varepsilon_2, \eta_2) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{R_{n_s}^1} Y_0^0(\varepsilon_{n_s}, \eta_{n_s}) \frac{r_{\Omega}^0}{1} & \cdots & \frac{1}{R_{n_s}^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\varepsilon_{n_s}, \eta_{n_s}) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} & \cdots & \frac{1}{R_{n_s}^{\mathcal{K}+1}} Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\varepsilon_{n_s}, \eta_{n_s}) \frac{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}}{2\mathcal{K}+1} \end{bmatrix} \quad (9)$$

e

$$F^{(C)} = \begin{bmatrix} \frac{r^0(\theta_1, \phi_1)}{r_{\Omega}^0} \overline{Y_0^0(\omega, \varphi)} & \frac{r^0(\theta_2, \phi_2)}{r_{\Omega}^0} \overline{Y_0^0(\omega, \varphi)} & \cdots & \frac{r^0(\theta_{n_c}, \phi_{n_c})}{r_{\Omega}^0} \overline{Y_0^0(\omega, \varphi)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_1, \phi_1)}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} & \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_2, \phi_2)}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} & \cdots & \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_{n_c}, \phi_{n_c})}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{-\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_1, \phi_1)}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} & \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_2, \phi_2)}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} & \cdots & \frac{r^{\mathcal{K}}(\theta_{n_c}, \phi_{n_c})}{r_{\Omega}^{\mathcal{K}}} \overline{Y_{\mathcal{K}}^{\mathcal{K}}(\omega, \varphi)} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

com $\mathcal{K} := \max(\mathcal{K}_0, \lceil \sqrt{n_s} - 1 \rceil)$ e

$$\mathcal{K}_0 = \left\lceil \frac{\ln(\epsilon(R-r))}{\ln \frac{r}{R}} - 1 \right\rceil. \quad (11)$$

Aplicando a decomposição em valores singulares na matriz M , obtemos $M = USV^*$, onde U e V^* são matrizes unitárias e S é uma matriz diagonal com entradas não negativas. Uma vez que $\mathcal{K} > n_s$ podemos escrever a multiplicação SV^* como $S_1 V_1^*$, onde S_1 é uma matriz diagonal quadrada formada com os valores positivos de S e V_1^* é uma matriz formada pelas n_s primeiras linhas de V^* .

Por simples multiplicação matricial [4], a equação (5) pode ser reescrita como

$$(V_1^* F^{(C)})^T \mathbf{c}^{SVD} = \mathbf{b}, \quad (12)$$

onde $\mathbf{c}^{SVD} := (S_1)^T U^T \mathbf{c}^D$. Com o valor de \mathbf{c}^{SVD} , que agora obtemos evitando o mau condicionamento presente em M , e construindo a matriz $F^{(E)}$ como fizemos em $F^{(C)}$, mas com os n_e pontos de avaliação, obtemos os valores de u nos pontos de avaliação por

$$\mathbf{u}^{(E)} = (V_1^* F^{(E)})^T \mathbf{c}^{SVD}. \quad (13)$$

2.2 QR–MFS

Para a norma euclidiana foi provado em [4] que quando realizamos a fatorização QR reduzida na matriz $A = QR$ o número de condição de A é igual ao número de condição de R . Portanto, resolver a equação da forma

$$R\mathbf{c}^D = Q^*\mathbf{b}, \quad (14)$$

não evita o mau condicionamento. Uma forma de contornar o mau condicionamento é construir uma matriz $\mathcal{M} = \begin{bmatrix} A^{(C)} \\ A^{(E)} \end{bmatrix}$ e aplicar a fatorização QR reduzida à matriz \mathcal{M} , obtendo

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} Q^{(C)}R \\ Q^{(E)}R \end{bmatrix}, \quad (15)$$

onde $Q^{(C)}$ e $Q^{(E)}$ têm, respectivamente, as mesmas dimensões de $A^{(C)}$ e $A^{(E)}$. Assim, com a equação (5) obtemos

$$Q^{(C)}\mathbf{c}^{QR} = \mathbf{b}, \quad (16)$$

onde $\mathbf{c}^{QR} = R\mathbf{c}^D$. Dessa forma, a solução numérica dos pontos de avaliação será dada por

$$\mathbf{u}^{(E)} = Q^{(E)}\mathbf{c}^{QR}. \quad (17)$$

2.3 Hybrid–MFS

O método Hybrid-MFS é originado da combinação dos métodos MFS-SVD e QR-MFS, isto é, precisamos tratar o mau condicionamento presente em $F^{(C)}$ e para isso, vamos construir a matriz P tal que

$$P = \begin{bmatrix} (F^{(C)})^T \\ (F^{(E)})^T \end{bmatrix}, \quad (18)$$

e usando a fatoração QR reduzida podemos escrever

$$P^T = \begin{bmatrix} R^T Q^{(C)} \\ R^T Q^{(E)} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Agora, a matriz $(A^{(C)})^T$ pode ser aproximada por $MR^T Q^{(C)}$. Definindo $\tilde{M} := MR^T$ e aplicando sobre \tilde{M} o método SVD–MFS podemos reescrever a equação (5) como

$$(\tilde{V}_1^* Q^{(C)})^T \mathbf{c}^H = \mathbf{b}, \quad (20)$$

onde $\mathbf{c}^H := (\tilde{S}_1)^T \tilde{U}^T \mathbf{c}^D$. Calculada \mathbf{c}^H obtemos a solução numérica para os pontos de avaliação por

$$\mathbf{u}^{(E)} = (\tilde{V}_1^* Q^{(E)})^T \mathbf{c}^H. \quad (21)$$

3 Modificando a Fatorização QR

Ao aplicar a fatorização QR reduzida na matriz \mathcal{M} , a matriz $Q^{(C)}$ resultante não é unitária. Conjeturamos que $Q^{(C)}$ é bem condicionada, mas permanece um problema em aberto a sua prova teórica.

Para contornar essa limitação, podemos encontrar matrizes $Q_1^{(C)}$, $Q_1^{(E)}$ e R_1 com $Q_1^{(C)}$ unitária tal que

$$\begin{bmatrix} Q^{(C)} \\ Q^{(E)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_1^{(C)} \\ Q_1^{(E)} \end{bmatrix} R_1, \quad (22)$$

aplicando o algoritmo de Gram-Schmidt modificado às primeiras n_c linhas.

3.1 QRGS–MFS e HybridGS–MFS

A partir da nova fatorização, adaptamos os métodos QR–MFS e Hybrid–MFS. No QRGS–MFS, a equação (16) é reescrita como

$$Q_1^{(C)} \mathbf{c}^{QRS} = \mathbf{b}, \quad (23)$$

onde $\mathbf{c}^{QRS} = R_1 R \mathbf{c}^D$. Os pontos de avaliação são aproximados por

$$\mathbf{u}^{(E)} = Q_1^{(E)} \mathbf{c}^{QRS}. \quad (24)$$

No HybridGS–MFS, utilizamos a nova fatorização para a matriz F , permitindo reescrever a equação (20) como

$$(\tilde{V}_1^* Q_1^{(C)})^T \mathbf{c}^{HGS} = \mathbf{b}, \quad (25)$$

sendo os pontos de avaliação aproximados por

$$\mathbf{u}^{(E)} = (\tilde{V}_1^* Q_1^{(E)}) \mathbf{c}^{HGS}. \quad (26)$$

4 Resultados Numéricos

Apresentamos os resultados numéricos para um domínio cuja fronteira é parametrizada pela equação (7), na qual a função radial é dada por

$$r(\theta, \phi) = 0.8 \left(\cos(3\phi) + \sqrt{7 - \sin^2(3\phi)} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (27)$$

Neste exemplo, consideramos $n_c \approx 3n_e$. Os pontos fonte foram localizados sobre uma esfera de raio $R = 3$ e a função de contorno é dada por $g(x, y, z) = x^2 y^2 z^2$.

Para estimar o erro, consideramos a norma discreta ℓ^∞ em $\partial\Omega$ em aproximadamente 10.000 pontos de contorno e definimos $\epsilon_\Omega := \|u - u^{(E)}\|_{\ell^\infty(\partial\Omega)}$, que representa o erro absoluto máximo entre a solução analítica u e a solução numérica $u^{(E)}$. Além disso, o número de condição da matriz do sistema, denotado por $\kappa_2(\cdot)$, é dado pela razão

$$\kappa_2(\cdot) = \frac{\sigma_{\max}(\cdot)}{\sigma_{\min}(\cdot)}, \quad (28)$$

onde σ_{\max} e σ_{\min} representam, respectivamente, os maiores e menores valores singulares.

Os resultados numéricos foram obtidos com o Matlab 2024 em um notebook com processador 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-1165G7 @ 2.80GHz, 20 GB de RAM, rodando Windows 11.

Observamos na Figura 1 que o método Direct–MFS sofre uma quebra devido ao mau condicionamento, aproximadamente para $n_s = 1000$. Por outro lado, os métodos QR–MFS e QRGS–MFS, apesar de serem bem condicionados, apresentam uma quebra, mas ainda fornecem resultados superiores ao Direct–MFS. Já os métodos SVD–MFS, Hybrid–MFS e HybridGS–MFS continuam a se aproximar da solução com o aumento de n_s . O método SVD–MFS é eficaz na redução do mau condicionamento e continua a se aproximar da solução, ao contrário dos métodos QR–MFS e QRGS–MFS, que possuem números de condição baixos, mas apresentam falhas na aproximação.

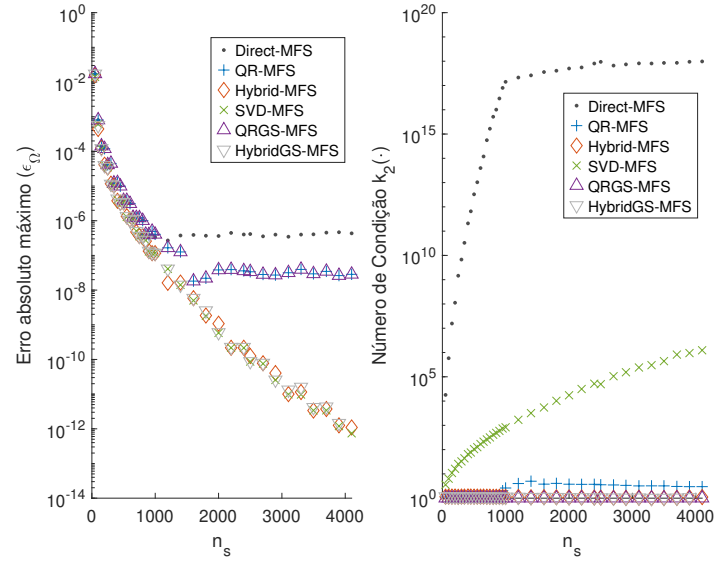


Figura 1: O gráfico à esquerda mostra o erro de aproximação entre os métodos Direct-MFS, QR-MFS, Hybrid-MFS, SVD-MFS, QRGs-MFS e HybridGS-MFS à medida que o parâmetro n_s aumenta. O gráfico à direita apresenta o número de condição das matrizes envolvidas em cada um dos métodos.

Fonte: autoria própria.

5 Considerações Finais

Apresentamos abordagens para reduzir o mau condicionamento do método Direct-MFS. Os métodos QRGs-MFS e HybridGS-MFS são os mais caros em termos de computação, pois precisam realizar duas e três fatorizações, respectivamente. A vantagem do QRGs-MFS é que seu número de condição é sempre igual a 1, mas essa condição não melhora a sua aproximação quando comparado com o QR-MFS. Esperamos que, em trabalhos futuros, abordagens similares possam ser consideradas para outros tipos de PDEs. Essas abordagens abrem novas possibilidades quanto à escolha da localização dos pontos fonte sem o efeito do mau condicionamento.

6 Anexo I

O código em MATLAB para implementar a fatorização modificada de Gram-Schmidt em uma matriz Q , considerando apenas as primeiras n_c linhas, é apresentado a seguir

```
function [Q1, R1] = modGS(n_c, Q)
    n = size(Q, 1); % Número de linhas de Q
    p = size(Q, 2); % Número de colunas de Q
    m = n_c;        % Número de linhas a serem processadas
    Q1 = zeros(n, p); % Inicializa Q1
    R1 = zeros(p, p); % Inicializa R1

    for k = 1:p
        Q1(:, k) = Q(:, k); % Copia a k-ésima coluna de Q para Q1
```

```

for i = 1:k-1
    R1(i, k) = Q1(1:m, i)' * Q1(1:m, k); % Produto interno
    Q1(:, k) = Q1(:, k) - R1(i, k) * Q1(:, i); % Ortogonalização
end

R1(k, k) = norm(Q1(1:m, k)); % Norma da coluna k
Q1(:, k) = Q1(:, k) / R1(k, k); % Normalização
end
end

```

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação para a Ciência e Tecnologia, Portugal, pelo suporte financeiro. A pesquisa de Pedro R. S. Antunes e Vinicius Santos foi parcialmente financiada pelo projeto científico UIDB/00208/2020 (DOI:10.54499/UIDB/00208/2020). A pesquisa de Pedro Serranho foi parcialmente financiada pelos projetos científicos UIDB/04950/2020 (DOI:10.54499/UIDB/04950/2020), UIDP/04950/2020 (DOI:10.54499/UIDP/04950/2020), UIDB/04621/2020 (DOI:10.54499/UIDB/04621/2020) e UIDP/04621/2020 (DOI:10.54499/UIDP/04621/2020).

Referências

- [1] C. J. S. 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. DOI: 10.1016/j.enganabound.2009.05.007.
- [2] P. R. S. Antunes. “A well-conditioned method of fundamental solutions for Laplace equation”. Em: **Numerical Algorithms** 91.3 (2022), pp. 1381–1405. DOI: 10.1007/s11075-022-01306-x.
- [3] P. R. S. Antunes, H. Calunga e P. Serranho. “Improving the conditioning of the Method of Fundamental Solutions for the Helmholtz equation on domains in polar or elliptic coordinates”. Em: **Applied Mathematics and Computation** 482 (2024), p. 128969. DOI: 10.1016/j.amc.2024.128969.
- [4] P. R. S. Antunes, V. Santos e P. Serranho. “The MFS-SVD Method for the Laplace Equation in Three Dimensions”. Em: **SIAM Journal on Scientific Computing** 47.1 (2025), A454–A471. DOI: 10.1137/24M1634928.
- [5] G. B. Arfken, H. J. Weber e F. E. Harris. “Angular Momentum”. Em: **Mathematical Methods for Physicists (Seventh Edition)**. Seventh Edition. Boston: Academic Press, 2013. Cap. 16, pp. 773–814. DOI: 10.1016/B978-0-12-384654-9.00016-5.