ao meu Pai
ao Marcelo, à Mariana e ao Filipe

Agradecimentos

A realização deste trabalho não teria sido possível sem a ajuda de algumas pessoas que me incentivaram e apoiaram no decorrer deste processo. Nem sempre foi fácil ultrapassar os contratempos que foram surgindo pelo caminho! É para elas que dirijo estas sinceras e sentidas palavras de agradecimento.

Ao Professor Doutor José Matos, meu orientador, quero deixar-lhe uma palavra de profundo apreço pela total disponibilidade, dedicação e empenho. Os conhecimentos transmitidos, as sugestões, mas principalmente, as palavras de incentivo, nos momentos mais difíceis, a compreensão e a amizade foram, sem dúvida, fundamentais para a realização deste trabalho.

Ao Professor Doutor Paulo Vasconcelos, meu orientador, o interesse, as opiniões críticas, as sugestões, a revisão do trabalho e a disponibilidade que sempre demonstrou.

Às minhas colegas de trabalho, Professora Doutora Ana Júlia Viamonte e Dra. Alzira Faria o apoio dado nos períodos letivos, a compreensão e o companheirismo.

Ao Marcelo, meu marido, a paciência, o incentivo, a confiança, a companhia e o apoio nos momentos mais difíceis.

Aos meus filhos, Mariana e Filipe, por nem sempre lhes ter dado a atenção que queriam e mereciam.

Ao meu pai (post mortem) por despertar desde cedo o meu interesse pela matemática e à minha mãe a amizade, o carinho e a paciência.

Agradeço, ainda, ao Instituto Superior de Engenharia do Porto pela ajuda

iv

institucional, em particular na regularização do pagamento das propinas.

Alexandra Gavina

O método espectral Tau para problemas de controlo ótimo

Resumo

O método Tau foi desenvolvido para calcular aproximações polinomiais para a solução de problemas diferenciais lineares com suporte em intervalos limitados. As aproximações são obtidas impondo que a solução satisfaça de forma exata as condições suplementares (iniciais ou fronteira) e de forma aproximada o problema diferencial impondo ortogonalidade do resíduo em relação aos primeiros termos de uma base de polinómios ortogonais.

Este método, proposto por Lanczos, tem vindo a ser usado ao longo dos anos na resolução de problemas particulares. Para cada um destes problemas, interessantes extensões têm sido apresentadas. Vários problemas com equações diferenciais não lineares e em derivadas parciais têm sido abordados. Contudo, o método ainda não foi trabalhado de forma integrada para ser usado de forma generalizada em problemas diferenciais em geral.

Este trabalho aborda a aplicação do método Tau a sistemas de equações diferenciais resultantes de problemas de controlo ótimo. Estes problemas podem ser formulados quer em intervalo de tempo finito quer infinito e são em geral não lineares. Esta classe de problemas requer a resposta a variadas questões como a instabilidade do método em muitos problemas não lineares e a sua extensão para abordar intervalos não limitados. Estas soluções são fundamentais para a aplicação do método de Tau noutras classes de problemas e, portanto, contribuem para a sua generalização e uso pelas comunidades académica e industrial.

No âmbito desta tese os problemas em intervalo ilimitado são reformulados, usando funções de transformação de variável, num novo problema diferencial em intervalo limitado; o método Tau é aplicado ao novo problema e recupera-se uma solução aproximada do problema inicial invertendo a função de mudança de variável.

No caso dos problemas definidos por operadores diferenciais não lineares são construídos iterativamente novos operadores (lineares) aos quais o método de Tau é aplicado. De entre estes problemas (não lineares), são abordados os operadores diferenciais polinomiais e os funcionais não polinomiais. Para ambas as classes de problemas utiliza-se um processo de linearização do tipo Newton, mas para a segunda acresce a necessidade de introduzir uma nova função incógnita, solução de um problema diferencial artificial, que conduz a um problema da primeira classe. Este processo de linearização envolve produtos de polinómios cujo cálculo dos coeficientes em geral introduz instabilidades numéricas no cálculo da solução Tau. É proposta a introdução no método Tau dos coeficientes de linearização de produtos de polinómios ortogonais, mostrando ser uma técnica eficaz para a redução da instabilidade numérica.

Palavras Chave (MSC[2010]): Métodos espectrais, de colocação e outros relacionados (65N35); Problemas de controlo ótimo envolvendo equações diferenciais ordinárias (49J15); Operadores diferenciais não lineares (34L30).

The Tau spectral method for optimal control problems

Abstract

The Tau method was developed to compute polynomial approximations to the solution of linear differential problems, with support on finite intervals. The approximations are obtained imposing that the solution satisfies accurately the supplementary conditions (initial or boundary) and approximately the differential problem, by imposing the residual to be orthogonal with respect to the first terms of the orthogonal polynomial basis. This method, proposed by Lanczos, has been used over the years to solve particular problems. For each of these problems, interesting extensions have been presented. Several problems with nonlinear differential equations and partial derivatives have been addressed. However, the method has not yet been worked in an integrated manner to be used widely in general differential problems. This work discusses the application of the Tau method to differential equations issued from optimal control problems. These problems can be formulated either for finite or infinite time intervals and are in general nonlinear. This class of problems requires the answer to various issues such as instability of the method in many nonlinear problems and its extension to address infinite intervals. These solutions are fundamental for the implementation of the Tau method for other types of problems and thus contribute to widespread it to academic and industrial communities. Problems on infinite range are reformulated into new differential problems on finite interval, through a change of variable; the Tau method is applied to the new problem and retrie-

ves an approximate solution to the original problem by inverting the change of variable function. In the case of problems defined by nonlinear differential operators, new (linear) operators are iteratively built to which the Tau method is applied. Among these nonlinear problems, polynomial differential operators and functional non-polynomial differential operators are discussed. For both classes of problems a Newton-type linearization procedure is undertaken, but for the second a new unknown function must be additionally introduced, solution of an artificial differential problem leading to the first class of problems. This linearization process involves the product of polynomials, which generally introduces numerical instabilities in the computation of the Tau solution. It is proposed to incorporate linearization coefficients for orthogonal polynomials products in the Tau method. Results show this is an effective technique for reducing numerical instabilities.

Palavras Chave (MSC[2010]): Spectral, collocation and related methods (65N35); Optimal control problems involving ordinary differential equations (49J15); Nonlinear ordinary differential operators (34L30).

La méthode spectrale Tau pour des problèmes de contrôle optimal

Résumé

La méthode Tau a été développée pour calculer des approximations polynomiales à la solution des problèmes différentielles linéaires, avec support sur des intervalles finis. Les approchés sont obtenus imposant que la solution satisfait exactement les conditions supplémentaires (initiales ou aux limites) et approximativement le problème différentielle en imposant des résidus orthogonaux par rapport aux premiers termes de la base des polynômes orthogonaux. Cette méthode, proposée par Lanczos, a été utilisé au cours des années à résoudre des problèmes particuliers. Pour chacun de ces problèmes, extensions intéressantes ont été présentées. Plusieurs problèmes avec équations différentielles non linéaires et aux dérivées partielles ont été abordées. Cependant, le procédé n'a pas encore été travaillé de manière intégrée à utiliser largement dans des problèmes différentiels en général. Ce travail traite de l'application de la méthode Tau à systèmes d'équations différentielles résultantes des systèmes de problèmes de contrôle optimal. Ces problèmes peuvent être formulés sur intervalle de temps fini ou infini et sont en général non linéaires. Cette classe de problèmes nécessite la réponse à plusieurs questions telles que l'instabilité de la méthode dans de nombreux problèmes non linéaires et son extension pour des intervalles infinis. La solution de ces problèmes sont essentielles à la mise en oeuvre de la méthode Tau pour d'autres classes de problèmes, contribuent ainsi à sa diffusion et utilisation

pour les communautés académiques et industrielles. Les problèmes en intervalle infini sont reformulés, en utilisant des fonctions de changement de variables, dans un nouveau problème différentiel sur un intervalle fini. La méthode Tau est appliquée au nouveau problème et une solution approchée au problème original est récupérée par inversion de la fonction de changement de variable. Dans le cas de problèmes définis par les opérateurs différentiels non linéaires, nouveaux opérateurs (linéaires) sont construits itérativement et sur ces la Tau méthode est appliqué. Parmi ces problèmes non linéaires, les opérateurs différentiels polynomiaux et les opérateurs différentiels fonctionnels non polynomiaux sont discutés. Pour les deux classes de problèmes une procédure de linéarisation de type Newton est utilisé, mais pour la deuxième il y a la nécessité d'introduire une nouvelle fonction inconnue, solution d'un problème différentielle artificiel conduisant à la première classe de problèmes. Ce processus de linéarisation engage des produits de polynômes, qui en général exposent des instabilités numériques dans le calcul de la solution Tau. Il est proposé d'introduire de coefficients de linéarisation du produit de polynômes orthogonaux dans la méthode de Tau. Les résultats numériques montré que cette technique est efficace pour réduire l'instabilité numérique.

Palavras Chave (MSC[2010]): Méthodes spectral, de colocalisation et connexes (65N35); Problèmes de contrôle optimal impliquant des équations différentielles ordinaires (49J15); Opérateurs différentielles ordinaires non linéaires (34L30).

Lista de Figuras

1.1	Estrutura de dependências para a resolução de problemas de controle ótimo usando o método de Tau	19
3.1	Gráficos das funções y e w e das soluções aproximadas u_n e v_n	49
3.2	Erros nas soluções aproximadas u_n e v_n obtidas anulando as primeiras componentes do resíduo	50
3.3	Gráficos das funções y e w e das soluções aproximadas u_n e v_n obtidas através da minimização do resíduo no sentido dos mínimos quadrados	51
3.4	Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n através da minimização do resíduo no sentido dos mínimos quadrados	52
3.5	Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n obtidas com o método Tau	54
3.6	Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n diferentes graus de n obtidas com o método Tau	55
3.7	Esparsidade da matriz associada ao método Tau, para o exemplo (3.19)	56
5.1	$u(t)$ e $u_n(t)$ para diferentes valores de n no problema (5.1). . .	98
5.2	Erros $e_n(t) = u(t) - u_n(t)$ para vários valores de n do problema (5.1).	99
5.3	Solução analítica x_1 (linha castanha) e aproximação Tau $x_{1,19}$ (linha azul) do problema (5.3). Zoom para valores de t em $[0, 700]$	103

5.4	Solução analítica x_2 (linha castanha) e aproximação Tau $x_{1,19}$ (linha azul) do problema (5.3). Zoom para valores de t em $[0, 700]$	104
5.5	Erros $ x_1 - x_{1,n} $ e $ x_2 - x_{2,n} $ para diferentes valores de n do problema (5.3).	105
5.6	Curvas das trajetórias de estado x_1 e x_2 do problema (5.7). . .	107
5.7	x_1 e x_2 usando coeficientes de linearização no método Tau, efetuando 11 iterações, com polinômios de grau $n = 20$, para o problema (5.7).	108
5.8	$ x_{1,n+1} - x_{1,n} $ e $ x_{2,n+1} - x_{2,n} $ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 11 iterações, utilizando polinômios de Legendre, no problema (5.7).	109
5.9	$ x_{1,n+1} - x_{1,n} $ e $ x_{2,n+1} - x_{2,n} $ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 21 iterações, utilizando polinômios de Legendre, no problema (5.7).	110
5.10	$ u_{i,n+1} - u_{i,n} $, $i = 1, 2, 3$ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 6 iterações, usando polinômios de Chebyshev, no problema (5.12).	112
5.11	Gráfico da solução exata e do aproximante Tau de ordem $n = 19$ para o problema (5.19).	116
5.12	Erros $ k - k_{19} $ e $ c - c_{19} $ para o problema (5.19).	116
5.13	Erro absoluto obtido efetuando it iterações com $it = 5, 6, 7$, para o aproximante Tau de ordem $n = 19$, no problema (5.19).	117

Conteúdo

1	Introdução	15
2	Problemas de Controlo Ótimo	23
2.1	Formulação do Problema	24
2.2	Problema de Controlo Ótimo	26
2.3	Exemplos de Problemas de Controlo Ótimo	31
3	Métodos Numéricos Espetrais	35
3.1	Introdução	36
3.1.1	Conceitos Elementares	36
3.1.2	Polinómios Ortogonais Clássicos	39
3.2	Métodos Espetrais	43
3.2.1	Formulação do Problema	43
3.2.2	Minimização do Resíduo	45
3.2.3	Método de Colocação	56
3.2.4	Método de Galerkin	57
3.3	Método Tau	58
4	Método Tau em Controlo Ótimo	67
4.1	Problemas Lineares	68
4.1.1	Problemas em Horizonte Finito	68
4.1.2	Problemas em Horizonte Infinito	73
4.2	Problemas não Lineares	76
4.2.1	Métodos de Linearização	77

4.2.2	Definição do Operador Linear	78
4.2.3	Cálculo da Matriz Π_v	80
4.2.4	Coefficientes de Linearização	81
4.2.5	Coefficientes de Linearização dos Polinómios Ortogonais Clássicos	85
4.2.6	Coefficientes do Produto de Polinómios	88
5	Resolução Numérica	95
5.1	Método Tau em Problemas Lineares	96
5.1.1	Problema em Horizonte Finito	96
5.1.2	Problema em Horizonte Infinito	100
5.2	Método Tau em Problemas não Lineares	103
5.2.1	Problema em Horizonte Finito	103
5.2.2	Problemas em Horizonte Infinito	108
6	Conclusão e Trabalho Futuro	119
	Referências Bibliográficas	121
A	Regulador Linear Quadrático	129
B	Modelo de Ramsey-Cass-Koopmans	133

1

Introdução

A aplicação de métodos numéricos, na obtenção da solução de problemas de controlo ótimo (PCO), tem sofrido uma evolução quer em termos de complexidade, quer em termos de variedade dos problemas a resolver, desde que Pontryagin e os seus colaboradores generalizaram a teoria do cálculo das variações a curvas que tomam valores em conjuntos fechados (com fronteira), através da formulação e demonstração do Princípio do Máximo de Pontryagin [41].

A aplicação destes métodos pode ser dividida em duas grandes classes: métodos indiretos e métodos diretos. Usando uma abordagem direta, as variáveis de estado e controlo são discretizadas, num número finito de pontos, otimizando-se diretamente a função de desempenho. A solução resultante é obtida como solução de problemas de Programação não Linear. Abordagens numéricas para obtenção da solução utilizando o método de "shooting" múltiplo e de colocação podem ser consultados em [6] e [48], respetivamente. Quanto à resolução do problema utilizando uma abordagem indireta, esta baseia-se, quer no cálculo de variações [8] quer no Princípio do Máximo de Pontryagin [41], transformando o problema de controlo ótimo num problema de valor fronteira. Como resultado, a determinação da solução ótima reduz-se à resolução de um sistema de equações diferenciais com condições

fronteira. Nestes casos, os métodos de resolução de problemas diferenciais são instrumentais para determinar a solução de PCO.

Sendo os métodos espectrais utilizados no cálculo de soluções aproximadas de equações diferenciais, a sua aplicação tem vindo a ser explorada para a solução numérica de PCO. Ao contrário dos métodos das diferenças finitas e dos elementos finitos, cuja aproximação da solução utiliza informação local, os métodos espectrais aproximam a solução da equação diferencial como uma combinação linear de funções base com suporte global e cuja solução tem convergência espectral isto é, o erro de aproximação decai mais rapidamente do que qualquer potência de $1/n$, onde n é o número de termos da expansão $u_n = \sum_{j=0}^{n-1} a_j \Phi_j$ [18].

De entre os métodos espectrais referidos na literatura, os mais frequentes são o método de colocação e o método de Galerkin. O método Tau (de Lanczos), sobre o qual recai este trabalho embora conhecido há muito, tem sido menos utilizado talvez porque a sua formulação foi estabelecida para problemas lineares e de coeficientes polinomiais.

Proposto por Lanczos [31] para aproximar polinomialmente a solução de equações diferenciais ordinárias lineares, o método Tau tem vindo a ser aplicado, na resolução de sistemas de equações diferenciais, equações em derivadas parciais, equações integro-diferenciais. Vários autores têm contribuído na resolução de problemas específicos, tais como em [39, 34, 30, 24, 25, 42, 16], entre outros.

Na sua essência, o método Tau visa construir uma aproximação polinomial da solução do problema, num intervalo limitado, definido implicitamente por um operador diferencial linear que transforma polinómios em polinómios. A aproximação é obtida impondo que a solução satisfaz de forma exata as condições suplementares e de forma aproximada a solução do problema diferencial, minimizando o resíduo ao impor que este é ortogonal aos primeiros termos de uma base de polinómios ortogonais.

O trabalho nesta tese baseia-se na generalização do método Tau a sistemas de equações diferenciais, provenientes da aplicação do Princípio do Máximo

de Pontryagin a PCO. Estes problemas são formulados num intervalo de tempo da forma $[t_0, t_f[$, podendo t_f ser finito ou infinito e podem ser definidos por operadores diferenciais lineares ou não lineares.

Os problemas definidos num intervalo ilimitado são reformulados, usando uma função de transformação de variável e definindo um novo problema diferencial em intervalo limitado [16]. Aplicado o método Tau ao novo problema, recupera-se uma solução aproximada do problema dado, invertendo a função de mudança de variável.

No caso dos problemas definidos por operadores diferenciais não lineares, são contruídos novos operadores (lineares), para posterior aplicação do método Tau, de forma iterativa [17]. De entre os problemas definidos por operadores diferenciais não lineares, destacam-se duas classes que são abordadas de forma distinta: os operadores diferenciais polinomiais e os operadores diferenciais não polinomiais. Para ambas as classe de problemas utilizamos um processo de linearização do tipo Newton, mas para a segunda acresce a necessidade de introduzir uma nova função incógnita, solução de um problema diferencial artificial, permitindo a redução a um problema diferencial polinomial.

Esta construção é baseada em processos de linearização envolvendo produtos de polinómios, cujo cálculo dos coeficientes pode conduzir a instabilidades numéricas no decurso da determinação da solução Tau. Como forma de evitar esta instabilidade, são introduzidos no método Tau os coeficientes de linearização de produtos de polinómios ortogonais.

Contributos

O trabalho desenvolvido sobre o método Tau nesta tese pretende contribuir para a:

- disseminação da utilização do método em sistemas de equações diferenciais ordinárias;

- adequação do método à resolução de problema definidos em intervalos infinitos;
- resolução eficiente e estável de problemas não lineares polinomiais e não polinomiais;
- identificação de instabilidades numéricas no cálculo dos coeficientes de produtos de polinómios e respetiva resolução;
- abordagem a problemas de controlo ótimo;
- utilização do método em problemas de modelação e simulação económica;
- generalização da aplicabilidade e conseqüente utilidade do método.

Na Figura 1.1 apresenta-se esquematicamente o processo de extensão do método Tau, e todas as generalizações necessárias, permitindo aplicar à resolução de problemas de controlo ótimo um método destinado à resolução de equações diferenciais lineares. Como se ilustra na figura, a primeira generalização do método Tau consiste na aplicação a sistemas de equações diferenciais lineares, o que é feito recorrendo a operadores diferenciais vectoriais e à sua representação algébrica em blocos matriciais.

Considera-se na sequência o tratamento de sistemas de equações diferenciais lineares definidos em intervalos ilimitados. As equações e as condições suplementares do problema original são reformuladas usando uma função de transformação de domínio, permitindo a aplicação do método a problemas de controlo ótimo definidos em $[0, \infty[$ e tratar as condições em 0 e em ∞ .

De seguida, estende-se a aplicação do método à resolução de sistemas de equações diferenciais não lineares, em particular às equações que resultam de problemas de controlo ótimo com índice de desempenho quadrático. Neste caso, recorreremos a processos de linearização das equações diferenciais, à definição de novos operadores diferenciais e subsequente utilização do método Tau de forma iterativa. Foram, também, introduzidas técnicas de estabilização no método. Estudamos a possibilidade da aplicação a casos mais gerais, nomeadamente a problemas não polinomiais.

Figura 1.1: Estrutura de dependências para a resolução de problemas de controle ótimo usando o método de Tau

O conjunto de todas estas generalizações permite resolver com êxito um vasto conjunto de problemas de controle ótimo, ilustrando a abrangência do método.

Organização da tese

No Capítulo 2 é apresentada uma revisão dos aspetos mais relevantes na resolução dos PCO, tendo por base a aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin. São apresentadas condições necessárias de otimalidade para problemas definidos em intervalos de tempo finito ou infinito, sem restrições na variável de estado e, também, para problemas cuja função objetivo apresenta

um fator de desconto na forma $e^{-\rho t}$. São ilustrados vários exemplos de problemas, de classes distintas, para os quais será mostrada a aplicabilidade do método Tau à resolução deste tipo de problemas.

No Capítulo 3 são apresentados conceitos sobre polinómios ortogonais, em particular, pela sua importância nas aplicações, as famílias dos polinómios ortogonais clássicos; é apresentada uma breve descrição dos métodos espectrais, particularmente do método de colocação, do método de Galerkin e, com destaque, do método Tau, na sua formulação operacional.

No Capítulo 4 são apresentadas as generalizações do método Tau, nomeadamente a sistemas de equações diferenciais. Estes sistemas podem ser lineares, não lineares, definidos num intervalo de tempo finito ou infinito. Estas características distintas são relevantes, para a forma de implementar o método Tau. Começa-se pelo caso em que os problemas diferenciais, resultantes da aplicação do princípio do máximo de Pontryagin a PCO, resultam em sistemas de equações diferenciais lineares, com condições fronteira, em horizonte finito. Ainda com problemas lineares, introduz-se um processo de mudança de variável de forma a tornar possível a resolução de problemas em horizonte infinito e passa-se de seguida à aplicação do método Tau em problemas diferenciais não lineares. Na generalização do método a este tipo de equações diferenciais, utilizam-se processos de linearização do tipo Newton, apresentam-se novos operadores diferenciais e introduzem-se no método os coeficientes de linearização de produtos de polinómios ortogonais como forma de evitar a instabilidade inerente ao cálculo do produto dos polinómios.

No Capítulo 5 concretiza-se, com exemplos, a aplicação de todos os processos anteriores, ilustrando a aplicabilidade do método Tau na resolução de problemas de controlo ótimo. Começa-se pela utilização do método em problemas cuja dinâmica é caracterizada por equações diferenciais lineares, primeiro com condições fronteira num intervalo limitado e o segundo em $[0, \infty[$. Na segunda parte deste capítulo, aprofunda-se a utilização do método aos problemas cuja dinâmica está descrita por equações diferenciais não lineares.

O trabalho conclui-se com o Capítulo 6 apresentando as conclusões e pers-

petivas de trabalho futuro. Dois apêndices, com alguns resultados relativos ao Regulador Linear Quadrático e ao Modelo de Ramsey-Cass-Koopmans, completam esta tese.

2

Problemas de Controlo Ótimo

Conteúdo

2.1	Formulação do Problema	24
2.2	Problema de Controlo Ótimo	26
2.3	Exemplos de Problemas de Controlo Ótimo . .	31

Inserido na Teoria de Controlo, o controlo ótimo é um dos ramos de investigação que se tem evidenciado desde os anos 50, à imagem de toda a ciência do decurso da II guerra mundial com o advento dos computadores. O objetivo do controlo ótimo consiste em determinar, através de uma função de controlo (uma excelente referência para o tópico é [29], entre muitas outras), formas de minimizar (maximizar) uma determinada função de desempenho. Geralmente usado na resolução de problemas de otimização dinâmica, isto é, que evoluem com o tempo, t , o controlo ótimo tem uma ampla gama de aplicações que vão desde a física, biologia ou engenharia às ciências sociais e económicas.

Um dos passos mais importantes na formulação de um problema de controlo ótimo consiste no processo de modelação matemática. Recorre-se a equações diferenciais, integrais, funcionais, de diferenças finitas, às derivadas

parciais, determinísticas ou estocásticas que representem as várias condicionantes do problema, geralmente designado por sistema, e através das quais se obtém resposta ao problema para todos os controlos admissíveis. No controlo ótimo as variáveis estão separadas em duas classes: as variáveis de estado e as variáveis de controlo, intrinsecamente ligadas, pelas equações do sistema. Quaisquer que sejam as variáveis de controlo, estas, irão influenciar as trajetórias das variáveis de estado. No controlo ótimo [3] reside no facto de que as variáveis de controlo precisam, apenas, de ser contínuas por partes para serem admissíveis e as variáveis de estado devem ser diferenciáveis por partes.

Estes problemas podem ser formulados num intervalo de tempo da forma $[t_0, t_f]$, com $|t_0|, |t_f| < \infty$, chamados problemas de controlo ótimo de horizonte finito, ou num intervalo de tempo na forma $[t_0, \infty[$, ditos problemas de controlo ótimo de horizonte infinito.

Geralmente, neste tipo de problemas, a solução é obtida através do uso de métodos numéricos (diferenças finitas, elementos finitos, métodos espectrais,...) produzindo uma ou mais soluções aproximadas para o problema formulado.

Neste trabalho vamos aplicar o método Tau a problemas de controlo ótimo, com dinâmica descrita por equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. São abordados casos em que tais equações são lineares nas funções incógnitas e são investigadas extensões do método Tau para aplicação a problemas cuja dinâmica é descrita por equações diferenciais não lineares. São considerados problemas com horizontes finitos e com horizontes infinitos.

2.1 Formulação do Problema

Sejam $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ as variáveis de estado, $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^m$ as variáveis de controlo definidas num determinado instante de tempo $t \in [0, +\infty[$ e $\dot{\mathbf{x}}(t) =$

$\mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ definido por

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = f_1(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t), u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t)) \\ \dot{x}_2(t) = f_2(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t), u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t)) \\ \vdots \\ \dot{x}_n(t) = f_n(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t), u_1(t), u_2(t), \dots, u_m(t)) \end{cases} \quad (2.1)$$

as equações diferenciais ordinárias (ODE) que caracterizam a dinâmica do problema satisfazendo a condição inicial $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.

Assume-se que $\mathbf{f}$ é uma função contínua nas variáveis $t, \mathbf{x}, \mathbf{u}$ e que é diferenciável em ordem a $\mathbf{x}$, ou seja, que $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})$, $\partial f_i / \partial x_j$ são contínuas em $[0, \infty[\times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$, para $i, j = 1, 2, \dots, n$.

Definição 2.1.1. *Um controlo $\mathbf{u}(t)$ com $t \in [t_0, t_f]$ diz-se admissível se a função $\mathbf{u}$ for contínua por partes e satisfizer a condição $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^m$, onde $\mathcal{U}$ representa o conjunto dos controlos admissíveis.*

Pretende-se escolher o controlo admissível de forma que, em conjunto com a trajetória de estado, ele possibilite a otimização da seguinte função objetivo:

$$J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \int_{t_0}^{t_f} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) dt \quad (2.2)$$

sendo $F : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^{n+m}$ a função de desempenho, $[t_0, t_f]$ o intervalo de tempo de atuação do controlo (horizonte do controlo). Diz-se que a função J , descrita em (2.2) está na forma de **Lagrange**. Equivalentemente, pode ser escrita na forma de **Mayer** ou de **Bolza** [44]

- **Mayer**

$$J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \phi(t_f, \mathbf{x}(t_f)) \quad (2.3)$$

- **Bolza**

$$J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \phi(t_f, \mathbf{x}(t_f)) + \int_{t_0}^{t_f} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) dt \quad (2.4)$$

sendo $\phi : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^1 .

No que se segue, consideramos que a função objetivo está na forma de Lagrange.

Definição 2.1.2. *Seja J a função definida em (2.2) sujeita às condições*

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \quad (2.5)$$

O problema de controlo ótimo consiste em encontrar um sinal de controlo $\mathbf{u}^(t) \in \mathcal{U}$ e a variável de estado associada $\mathbf{x}^*$ que minimizem (maximizem) a função J e satisfaçam as condições (2.5).*

2.2 Problema de Controlo Ótimo

Como definido anteriormente, um problema de controlo ótimo consiste em determinar os controlos admissíveis, $\mathbf{u}$ que maximizem (minimizem) a função definida em (2.2), sujeita às condições referidas em (2.5), ou seja,

$$\begin{cases} \max J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \int_{t_0}^{t_f} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) dt \\ \text{s.a.} \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \end{cases} \quad (2.6)$$

Definição 2.2.1. *O controlo $\mathbf{u}^*$ diz-se ótimo (controlo ótimo) se $J(\mathbf{u}) \leq J(\mathbf{u}^*) < \infty, \forall \mathbf{u} \in \mathcal{U}$. A trajetória de estado $\mathbf{x}^*$ associada a $\mathbf{u}^*$ é denominada de trajetória de estado ótima.*

Definição 2.2.2. *Define-se a função Hamiltoniana $H : [t_0, t_f] \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ do problema (2.6) na forma*

$$H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) = \lambda_0 F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.7)$$

onde F e $\mathbf{f}$ são as funções envolvidas no problema (2.6), λ_0 é uma constante e $\boldsymbol{\lambda}(t) \in \mathbb{R}^n$ são variáveis de co-estado (ou variáveis adjuntas) diferenciáveis por partes em $[t_0, t_f]$.

Teorema 2.2.3. *Considere-se o problema definido em (2.6) onde $\mathbf{f}$ e F são funções de classe C^1 em $[t_0, t_f] \times \mathbb{R}^{n+m}$ e $t_f < \infty$. Sejam,*

- $(\mathbf{u}^*, \mathbf{x}^*)$ uma solução ótima para (2.6);
 - $(\lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_n)$ um multiplicador tal que $(\lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) \neq (0, \mathbf{0})$.
1. Seja $(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t))$ uma trajetória definida no intervalo $[t_0, t_f]$ tal que o controlo $\mathbf{u}^*$ é contínuo por partes. Se $(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*)$ é uma trajetória ótima então

$$H(t, \mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\lambda}) \geq H(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}), \quad \forall \mathbf{u} \in \mathcal{U} \quad (2.8)$$

À relação (2.8) dá-se o nome de **Princípio do Máximo de Pontryagin**.

2. Se o par $(\mathbf{x}^*(t), \mathbf{u}^*(t))$ é ótimo em $[t_0, t_f]$, então as seguintes condições de 1ª ordem são satisfeitas:

$$\begin{aligned} i) \quad & H_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}} \\ ii) \quad & H_{\mathbf{u}} = 0 \\ iii) \quad & H_{\boldsymbol{\lambda}} = \dot{\mathbf{x}} \\ iv) \quad & \lambda_0 = 1 \end{aligned} \quad (2.9)$$

As condições *i) – iv)* são designadas por condições necessárias de otimalidade.

3. Se $\boldsymbol{\lambda}$ existe, então $\boldsymbol{\lambda}(t_f) = \mathbf{0}$. Esta condição é denominada de condição de transversalidade.

Demonstração. Ver [45]. □

O objetivo deste trabalho consiste em calcular aproximações numéricas das trajetórias ótimas, aplicando o método Tau ao problema diferencial que resulta de se associarem às condições do problema (2.6) as condições 2. e 3. do Teorema 2.2.3. Deste modo, o problema a resolver é da forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}} \\ H_{\mathbf{u}} = 0 \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \\ \boldsymbol{\lambda}(t_f) = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (2.10)$$

correspondendo a um problema de valor fronteira, sendo H a função Hamiltoniana definida em (2.7) com $\lambda_0 = 1$. Note-se que, a condição *iii*) do Teorema 2.2.3 corresponde à equação de estado $\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ definida em (2.6).

No problema descrito em (2.6) não são apresentadas quaisquer restrições quer sobre t_f , quer sobre o estado terminal. Se ao problema (2.6) adicionarmos condições terminais, a condição de transversalidade descrita no ponto 3 do Teorema 2.2.3, assumirá formas alternativas. Podem ser considerados 5 tipos de restrições terminais (para mais detalhes ver [9]):

- **Ponto Terminal Fixo**

A condição de transversalidade é substituída por $\mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}_f$;

- **Problema do Ponto final-Fixo**

Neste tipo de problemas conhecemos $\mathbf{x}(t_f)$, sendo t_f livre, isto é, o problema tem uma linha terminal horizontal. A função Hamiltoniana deve atingir o valor zero no tempo terminal ótimo, não existindo restrições sobre λ em t_f . Assim, a condição de transversalidade assume a forma $[H]_{t=t_f} = 0$;

- **Curva terminal**

Se o ponto terminal é governado por uma curva ϕ , isto é, $\mathbf{x}_f = \phi(t_f)$, a condição de transversalidade é da forma $[H - \lambda\phi']_{t=t_f} = 0$;

- **Linha Terminal Vertical Truncada**

Neste problema, o tempo terminal é fixo, mas o estado terminal é livre, variando de acordo com um nível mínimo permissível, $x_{\min}$, ou seja, $x_{t_f} \geq x_{\min}$. A condição de transversalidade passa a assumir a forma $\lambda(t_f) \geq 0$, $x_{t_f} \geq x_{\min}$, $(x_{t_f} - x_{\min})\lambda(t_f) = 0$;

- **Linha Horizontal Terminal Truncada**

O estado terminal é fixo, mas o tempo terminal varia sujeito a uma restrição na forma $t \leq t_{\max}$, onde $t_{\max}$, é o máximo permitido para

t . A condição de transversalidade é, neste caso, $[H]_{t=t_f} \geq 0$, $t \leq t_{\max}$, $(t - t_{\max})[H]_{t=t_f} = 0$.

Se no problema descrito em (2.6) $t_f = \infty$ então, em primeiro lugar devemos assumir que o integral impróprio $\int_{t_0}^{\infty} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})dt$ é convergente, isto é, que $\lim_{t_f \rightarrow \infty} \int_{t_0}^{t_f} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})dt$ existe e é finito. Deste modo, define-se um problema de controlo ótimo com horizonte infinito, na forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \max J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \int_{t_0}^{\infty} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u})dt \\ s.a. \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Tal como nos problemas de horizonte finito, a resolução destes problemas pode passar por aplicar a função Hamiltoniana definida em (2.7) juntamente com o princípio máximo de Pontryagin. Assim, podemos procurar a solução de (2.11) resolvendo o problema seguinte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ H_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}} \\ H_{\mathbf{u}} = 0 \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{array} \right. \quad (2.12)$$

Note-se que, no problema (2.12) não está descrita nenhuma condição de transversalidade em t_f . Esta situação deve-se ao facto de não existir, na bibliografia uma condição de transversalidade única. Vários autores definem a condição de transversalidade [5, 22, 28, 46, 40] em função do problema que está a ser tratado. Neste trabalho, adotamos a condição de transversalidade definida em [9]. Assim, a solução do problema (2.11) poderá ser obtida se adicionarmos ao problema (2.12) a condição

$$\lim_{t_f \rightarrow \infty} \boldsymbol{\lambda}(t_f) = \mathbf{0} \quad (2.13)$$

considerando que não existem restrições para $\mathbf{x}$ em t_f e resolvendo o problema de valor fronteira associado.

Em muitos problemas de otimização dinâmica, nomeadamente problemas relacionados com a economia, a função objetivo definida em (2.11) apresenta um fator de desconto na forma $e^{-\rho t}$. A forma como a função J está definida irá influenciar a natureza da solução do problema de controlo ótimo associado.

Considere-se o problema de controlo ótimo na forma

$$\begin{cases} \max J(\mathbf{x}(\cdot), \mathbf{u}(\cdot)) = \int_{t_0}^{\infty} F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) e^{-\rho t} dt \\ s.a. \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \end{cases} \quad (2.14)$$

O Hamiltoniano, neste caso será:

$$H = F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) e^{-\rho t} + \boldsymbol{\lambda} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.15)$$

Multiplicando H por $e^{\rho t}$, o fator desconto é removido de H originando uma nova função. A esta nova função dá-se o nome de *Hamiltoniano corrente* e define-se na forma:

$$H_c = H e^{\rho t} = F(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) + \boldsymbol{\mu} \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (2.16)$$

sendo $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\lambda} e^{\rho t}$. O objetivo, neste caso, consiste em determinar $\mathbf{u}$ maximizando H_c . As condições necessárias do Teorema 2.2.3 são transpostas para H_c . Assim, sendo H a função definida em (2.15)

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{u}} = 0 &\Leftrightarrow e^{-\rho t} F_{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\lambda} f_{\mathbf{u}} = 0 \\ &\Leftrightarrow F_{\mathbf{u}} + e^{\rho t} \boldsymbol{\lambda} f_{\mathbf{u}} = 0 \\ &\Leftrightarrow F_{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\mu} f_{\mathbf{u}} = 0 \\ &\Leftrightarrow \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{u}} = 0 \end{aligned}$$

Antes de resolver a equação $H_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}}$ devemos notar que $\boldsymbol{\mu}(t) = \boldsymbol{\lambda}(t) e^{\rho t} \Leftrightarrow \boldsymbol{\lambda}(t) = e^{-\rho t} \boldsymbol{\mu}(t)$, a derivada de $\boldsymbol{\lambda}$ é dada por $\dot{\boldsymbol{\lambda}}(t) = -\rho e^{-\rho t} \boldsymbol{\mu}(t) + e^{-\rho t} \dot{\boldsymbol{\mu}}(t)$.

Assim,

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}} &\Leftrightarrow e^{-\rho t} F_{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda} f_{\mathbf{x}} = -\dot{\boldsymbol{\lambda}} \\ &\Leftrightarrow e^{-\rho t} F_{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda} f_{\mathbf{x}} = -(-\rho e^{-\rho t} \boldsymbol{\mu} + e^{-\rho t} \dot{\boldsymbol{\mu}}) \\ &\Leftrightarrow F_{\mathbf{x}} + e^{\rho t} \boldsymbol{\lambda} f_{\mathbf{x}} = \rho \boldsymbol{\mu} - \dot{\boldsymbol{\mu}} \\ &\Leftrightarrow \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{x}} = \rho \boldsymbol{\mu} - \dot{\boldsymbol{\mu}} \end{aligned}$$

A condição de transversalidade neste tipo de problemas é da forma $[H_c(t)e^{-\rho t}]_{t=t_f} = 0$ [9]. Resumindo, as condições necessárias de otimalidade, do problema (2.14), estão traduzidas pelas equações do sistema:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{u}} = 0 \\ \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{x}} = \rho \boldsymbol{\mu} - \dot{\boldsymbol{\mu}} \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \\ [H_c(t)e^{-\rho t}]_{t=t_f} = 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

2.3 Exemplos de Problemas de Controlo Ótimo

Nesta secção ilustramos cinco exemplos distintos de PCO retirados da literatura. De entre estes, consideramos 2 problemas cuja dinâmica é descrita por equações diferenciais lineares, apresentando-se como dos mais relevantes os definidos pelo regulador linear quadrático, cuja descrição se encontra no Anexo A. A dinâmica dos restantes problemas é descrita por equações diferenciais não lineares.

Exemplo 1. Problema linear de horizonte finito (PLHF) [21]

$$PLHF = \begin{cases} \min J = \int_0^1 \left(\frac{5}{8}x^2 + \frac{1}{2}xu + \frac{1}{2}u^2 \right) dt \\ s.a. \\ \dot{x} = \frac{1}{2}x + u \\ x(0) = 1 \end{cases} \quad (2.18)$$

Exemplo 2. Problema linear de horizonte infinito (PLHI) [12]

$$PLHI = \begin{cases} \min J = \int_0^\infty \left(x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{4}u^2 \right) dt \\ s.a. \\ \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_1 - x_2 + u \\ x_1(0) = -4 \\ x_2(0) = 4 \end{cases} \quad (2.19)$$

Exemplo 3. Problema não linear de horizonte finito (PNLHF) [35]

$$PNLHF = \begin{cases} \min J = \int_0^T (u^2(t) + x_1^2(t))dt \\ s.a \\ \dot{x}_1(t) = x_2(t) \\ \dot{x}_2(t) = -x_1(t) + x_2(t)(1.4 - px_2^2(t))x_2(t) + 4u(t) \\ x_1(0) = -5 \\ x_2(0) = -5 \end{cases} \quad (2.20)$$

O problema (2.20), conhecido como o problema de Rayleigh, definido num intervalo de tempo finito, $[t_0, t_f]$, $t_f = T < \infty$, e cuja dinâmica pode ser vista como uma variante do oscilador de Van der Pol [19], é um problema de Engenharia Eletrotécnica, para o qual pretendemos determinar as trajetórias ótimas de um circuito elétrico, que contém um diodo túnel, isto é um diodo semiconductor com características de resistência negativa.

Exemplo 4. Problema não linear de horizonte infinito (PNLHI) [27]

$$PNLHI = \begin{cases} \min J = \frac{1}{2} \int_0^\infty (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)dt \\ s.a \\ \dot{x}_1 = A_1 x_2 x_3 + \frac{1}{I_1} u_1 \\ \dot{x}_2 = A_2 x_1 x_3 + \frac{1}{I_2} u_2 \\ \dot{x}_3 = A_3 x_1 x_2 + \frac{1}{I_3} u_3 \\ x_1(0) = 0.01, \quad x_2(0) = 0.005, \quad x_3(0) = 0.001 \end{cases} \quad (2.21)$$

sendo $I_1 = 86.24, I_2 = 85.07, I_3 = 113.59$ e $A_1 = -\frac{I_3 - I_2}{I_1}, A_2 = -\frac{I_1 - I_3}{I_2}, A_3 = -\frac{I_2 - I_1}{I_3}$.

O problema (2.21) [27], é um problema ligado à Engenharia Aeronáutica, definido num intervalo de tempo infinito, $[t_0, +\infty[$, e está relacionado com a dinâmica de um corpo rígido.

Exemplo 5. Problema não linear de horizonte infinito com fator de

desconto

$$\max_{c(t)} \int_0^{\infty} \frac{(c(t)e^{gt})^{1-\theta}}{1-\theta} e^{-(\rho-n)t} dt \quad (2.22)$$

sujeito às condições:

$$\begin{cases} \dot{k}(t) = f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g) \\ k(0) = k_0 > 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

com $\rho > n > 0$, $\theta > 0 \wedge \theta \neq 1$ e $g(1 - \theta) - (\rho - n) < 0$.

Este problema é conhecido como o problema de Ramsey-Cass-Koopmans representativo de um modelo neoclássico de crescimento ótimo, com horizonte infinito, sendo ρ , δ , n e g parâmetros do problema e k e c , respetivamente, as variáveis de estado e de controlo.

Com este conjunto de PCO vamos, nos capítulos seguintes, verificar a aplicabilidade da utilização do método Tau na sua resolução. A estratégia utilizada consiste em aplicar o Princípio do Mínimo/Máximo de Pontryagin e utilizar o método Tau aos problemas de valor fronteira resultantes. No Exemplo 2, caracterizado por um problema de horizonte infinito, é usada uma mudança de variável descrita na secção 4.1.2 do Capítulo 4 de forma a obter um problema diferencial com condições fronteira num intervalo finito. No caso dos Exemplos 3, 4 e 5, em que a dinâmica destes problemas é descrita por equações diferenciais não lineares, utilizamos a metodologia de linearização e de implementação de um processo iterativo baseado no método Tau, descrita na secção 4.2.1, calculamos as matrizes Π_v descritas na secção 4.2.3 e introduzimos os coeficientes de linearização de produtos de polinómios ortogonais descritos em 4.2.4.

3

Métodos Numéricos Espetrais

Conteúdo

3.1	Introdução	36
3.1.1	Conceitos Elementares	36
3.1.2	Polinómios Ortogonais Clássicos	39
3.2	Métodos Espetrais	43
3.2.1	Formulação do Problema	43
3.2.2	Minimização do Resíduo	45
3.2.3	Método de Colocação	56
3.2.4	Método de Galerkin	57
3.3	Método Tau	58

Utilizados no cálculo de soluções de equações diferenciais, os métodos numéricos espectrais aproximam polinomialmente a solução de uma equação diferencial como combinação linear de funções base com suporte global, geralmente escritas numa base de polinómios ortogonais. Estes métodos podem derivar do método dos resíduos ponderados, sendo o método de colocação e o método de Galerkin os mais conhecidos.

Neste capítulo serão apresentados os métodos espectrais mais conhecidos e introduzido o método de Tau. Iniciamos com uma breve descrição sobre polinômios ortogonais, que estão na base dos métodos espectrais.

3.1 Introdução

3.1.1 Conceitos Elementares

Sejam $\mathcal{V}$ o espaço vetorial das funções contínuas e integráveis em $[t_0, t_f]$, $\mathbb{P}_r$ o espaço de todas as combinações lineares de polinômios de grau $\leq r$ e w uma função não negativa, denominada função peso.

Os elementos de $\mathbb{P}_r$ são designados de polinômios de grau r , e podem ser escritos na forma

$$P_r(t) = a_{r0} + a_{r1}t + \dots + a_{rr}t^r = \sum_{j=0}^r a_{rj}t^j, \quad a_{rr} \neq 0 \quad (3.1)$$

Em $\mathcal{V}$ é possível definir um produto interno.

Definição 3.1.1. *Sejam $f, g \in \mathcal{V}$ o produto interno $\langle f, g \rangle$ em $\mathcal{V}$ é uma aplicação definida por*

$$\langle f, g \rangle = \int_{t_0}^{t_f} f(t)g(t)w(t)dt \quad (3.2)$$

A partir desta definição, é possível introduzir uma relação de ortogonalidade.

Definição 3.1.2. *Os polinômios P_n e P_m dizem-se ortogonais se e só se $\langle P_n, P_m \rangle = 0$.*

Definição 3.1.3. *Diz-se que $\{P_n\}_{n \geq 0} = \{P_0, P_1, P_2, \dots\}$ é uma sequência de polinômios ortogonais (SPO) se*

- P_i é um polinômio de grau i , $i \geq 0$;
- $\langle P_i, P_j \rangle = 0$ para $i \neq j$;

- $\langle P_i, P_i \rangle = s_i, i \geq 0.$

O Teorema seguinte estabelece que os primeiros $k + 1$ elementos de uma SPO constitui uma base para o espaço dos polinómios de grau não superior a k .

Teorema 3.1.4. *Seja $\{P_n\}_{n \geq 0}$ uma SPO não nula e seja $p_k(t) \in \mathbb{P}_k$ um polinómio de grau k . Então, p_k pode ser escrito, de forma única, como uma combinação linear de $P_0, P_1, P_2, \dots$ e, além disso, $p_k(t) = \sum_{i=0}^k \beta_i P_i$ com $\beta_i = \frac{1}{k_i} \langle p_k, P_i \rangle, i = 0, \dots, k$*

Demonstração. Considerando $p_k = \beta_0 P_0 + \beta_1 P_1 + \dots + \beta_k P_k$, então, calculando o produto interno $\langle p_k, P_i \rangle$, para cada $i = 0, \dots, k$, tem-se que

$$\begin{aligned} \langle p_k, P_i \rangle &= \beta_0 \langle P_0, P_i \rangle + \beta_1 \langle P_1, P_i \rangle + \dots + \beta_k \langle P_k, P_i \rangle \\ &= 0 + \dots + 0 + \beta_i \langle P_i, P_i \rangle + 0 + \dots + 0 \end{aligned}$$

então, uma vez que $\langle P_i, P_i \rangle = s_i \neq 0$, temos que

$$\beta_i = \frac{\langle p_k, P_i \rangle}{k_i}$$

Por outro lado, é imediato verificar que $\langle p_k, P_i \rangle = 0$ para qualquer valor $i > k$. □

Teorema 3.1.5. *Considere-se o produto interno definido em (3.2) e a SPO $\{P_n\}_{n \geq 0}$. Então, para todo o $i \in \mathbb{N}_0$ o polinómio P_i tem i zeros reais e distintos em $[t_0, t_f]$.*

Demonstração. [10]. □

Teorema 3.1.6. *Se $\{P_n\}_{n \geq 0}$ é uma SPO então a seguinte relação de recorrência a três termos é satisfeita:*

$$\begin{cases} tP_i(t) = \alpha_i P_{i+1}(t) + \beta_i P_i(t) + \gamma_i P_{i-1}(t), & i \geq 0 \\ P_{-1}(t) = 0, & P_0(t) = 1 \end{cases} \quad (3.3)$$

em que α_i, β_i e γ_i são constantes em t , variando apenas com i .

Demonstração. [47]. □

Teorema 3.1.7. *Se $\{P_n\}_{n \geq 0}$ é uma SPO que satisfaz a relação de recorrência (3.3), $P = [P_0 \ P_1 \ \dots]^T$ e $\mathbf{t} = [1 \ t \ t^2 \ \dots]^T$ então verifica-se a igualdade $P = V\mathbf{t}$, sendo V a matriz definida por*

$$V = \begin{bmatrix} a_{00} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a_{10} & a_{11} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & 0 & 0 & \dots \\ a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

com os coeficientes $a_{i,j}$ determinados por

$$\begin{cases} a_{i+1,0} = -\frac{1}{\alpha_i}(\beta_i a_{i,0} + \gamma_i a_{i-1,0}) \\ a_{i+1,j} = \frac{1}{\alpha_i}(a_{i,j-1} - \beta_i a_{i,j} - \gamma_i a_{i-1,j}), \quad j = 1, 2, \dots, i-1 \\ a_{i+1,i} = \frac{1}{\alpha_i}(a_{i,i-1} - \beta_i a_{i,i}) \\ a_{i+1,i+1} = \frac{a_{i,i}}{\alpha_i} \end{cases}$$

para $i \geq 0$, com $a_{0,0} = 1$ e $a_{-1,0} = a_{0,-1} = 0$.

Demonstração. Reescrevendo (3.1) como $P_i = \sum_{j=0}^i a_{ij} t^j$ e considerando a relação de recorrência (3.3), tem-se que

$$\sum_{j=0}^i a_{i,j} t^{j+1} = \alpha_i \sum_{j=0}^{i+1} a_{i+1,j} t^j + \beta_i \sum_{j=0}^i a_{i,j} t^j + \gamma_i \sum_{j=0}^{i-1} a_{i-1,j} t^j$$

ou ainda, que

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{i+1} a_{i,j-1} t^j &= \sum_{j=0}^{i-1} (\alpha_i a_{i+1,j} + \beta_i a_{i,j} t^j \\ &\quad + \gamma_i a_{i-1,j}) t^j + (\alpha_i a_{i+1,i} + \beta_i a_{i,i}) t^i + \alpha_i a_{i+1,j+1} t^{i+1} \end{aligned}$$

A prova conclui-se, comparando os coeficientes dos termos com o mesmo grau. □

Corolário 3.1.8. *Os elementos da diagonal principal de (3.4) são obtidos pela relação*

$$a_{i,i} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = 0 \\ \frac{1}{\prod_{j=0}^{i-1} \alpha_j} & \text{se } i \geq 1 \end{cases}$$

3.1.2 Polinómios Ortogonais Clássicos

De entre as famílias mais relevantes nas aplicações, constam as famílias dos polinómios ortogonais clássicos (POC). Não existindo uma definição de POC transversal a todos os autores, assume-se, neste trabalho, a definição adotada em [14].

Definição 3.1.9. *Os polinómios P_n que satisfazem uma equação diferencial linear homogénea de 2ª ordem na forma*

$$g_2(t)P_n''(t) + g_1(t)P_n'(t) + b_nP_n(t) = 0 \quad (3.5)$$

e cuja expressão designatória é do tipo Rodrigues, isto é,

$$P_n(t) = \frac{1}{k_n w(t)} \frac{d^n}{dt^n} (w(t)(g_2(t))^n) \quad (3.6)$$

são designados de polinómios ortogonais clássicos.

Os polinómios g_1 e g_2 são de 1º e 2º graus, respetivamente, independentes de n , $b_n = -\frac{1}{2}n((n-1)g_2'' + 2g_1')$ e k_n constantes que dependem exclusivamente de n ; w é a função peso, solução da equação de Pearson $[g_2(t)w(t)]' = g_1(t)w(t)$.

Hahn provou que uma das características destes polinómios reside no facto de a sucessão das derivadas ser, também ela, uma sucessão de polinómios ortogonais [10]. Estes polinómios satisfazem a relação

$$g_2(t)P_n'(t) = c_nP_{n-1}(t) + d_nP_n(t) + e_nP_{n+1}(t), \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

Normalmente, estes polinómios estão associados aos polinómios de Hermite, Laguerre, Bessel e Jacobi. Considere-se, nas definições seguintes, o produto interno definido em (3.2), a norma $s_n = \|P_n\|^2$ e os polinómios ortogonais de grau n

$$P_n(t) = a_{n,0} + a_{n,1}t + \dots + a_{n,n}t^n, \quad a_{n,n} \neq 0$$

Polinómios de Hermite

Os polinómios de Hermite, H_n , normalizados pela condição $k_n = (-1)^n$, são os polinómios definidos pela fórmula de Rodrigues

$$H_n(t) = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}$$

Estes polinómios são ortogonais em $] -\infty, +\infty[$ relativamente à função peso $w(t) = e^{-t^2}$ e satisfazem a relação de recorrência (3.3) para $\alpha_n = \frac{1}{2}$, $\beta_n = 0$ e $\gamma_n = n$. O coeficiente do termo de grau n é $a_{n,n} = 2^n$.

Polinómios de Laguerre

Os polinómios de Laguerre, $L_n^{(\alpha)}$, são definidos por

$$L_n^{(\alpha)}(t) = \frac{t^{-\alpha} e^t}{n!} \frac{d^n}{dt^n} (t^{n+\alpha} e^{-t})$$

com $\alpha > -1$. No caso em que $\alpha = 0$, correspondem aos polinómios estudados por Laguerre [10] cuja notação convencionada é $L_n(t) = L_n^{(0)}(t)$. Estes polinómios são ortogonais em $]0, +\infty[$ relativamente à função peso $w(t) = e^{-t} t^\alpha$, onde o coeficiente do termo de maior grau é dado por $a_{n,n} = \frac{(-1)^n}{n!}$ e a relação de recorrência (3.3) fica definida com os valores $\alpha_n = -(n+1)$, $\beta_n = (2n + \alpha + 1)$ e $\gamma_n = -(n + \alpha)$.

Polinómios de Bessel

Os polinómios de Bessel, Y_n , são definidos por:

$$Y_n(t) = 2^{-n} e^{\frac{2}{t}} \frac{d^n}{dt^n} \left(t^{2n} e^{-\frac{2}{t}} \right) \quad (3.8)$$

Estes polinómios são ortogonais no círculo unitário relativamente à função peso $w(t) = e^{-\frac{2}{t}}$ e satisfazem a relação de recorrência (3.3) com $\alpha_n = \frac{1}{2n+1}$, $\beta_n = 0$ e $\gamma_n = -\frac{1}{2n+1}$.

Polinómios de Jacobi

Os polinómios de Jacobi, $P_n^{(\alpha,\beta)}$ são os polinómios definidos por:

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(t) = \frac{(-2)^{-n}}{n!} (1-t)^{-\alpha} (1+t)^{-\beta} \frac{d^n}{dt^n} [(1-t)^{n+\alpha} (1+t)^{n+\beta}] \quad (3.9)$$

onde $\alpha > -1$ e $\beta > -1$ são constantes reais. Estes polinómios são ortogonais em $[-1, 1]$ relativamente à função peso $w(t) = (1-t)^\alpha (1+t)^\beta$, normalizados

pela condição $P_n^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{n+\alpha}{n}$ onde o coeficiente do termo de grau n é dado por $a_{n,n} = \frac{1}{2^n} \binom{2n+\alpha+\beta}{n}$ e satisfazem a relação de recorrência

$$\begin{cases} tP_n^{(\alpha,\beta)}(t) = \alpha_n P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(t) + \beta_n P_n^{(\alpha,\beta)}(t) + \gamma_n P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(t), & n \geq 1 \\ P_0^{(\alpha,\beta)}(t) = 1, & P_1^{(\alpha,\beta)}(t) = \frac{1}{2}(\alpha + \beta + 2)t + \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \end{cases}$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)}{(2n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta+2)(2n+\alpha+\beta)} \\ \beta_n &= -\frac{(2n+\alpha+\beta+1)(\alpha^2-\beta^2)}{(2n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta+2)(2n+\alpha+\beta)} \\ \gamma_n &= \frac{2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)}{(2n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta+2)(2n+\alpha+\beta)} \end{aligned}$$

Para casos particulares de α e β destacamos os seguintes polinómios:

a) Polinómios de Chebyshev de 1ª espécie

Os polinómios Chebyshev de 1ª espécie, T_n são definidos pela equação (3.9) para valores de $\alpha = \beta = -\frac{1}{2}$. Estes polinómios são ortogonais em $[-1, 1]$ relativamente à função peso $w(t) = (1-t^2)^{-1/2}$, normalizados por $T_n(1) = 1$, com $a_{n,n} = 2^{n-1}$ e definem-se através da fórmula de Rodrigues pela equação

$$T_n(t) = \frac{(-2)^{-n}}{n!} (1-t^2)^{1/2} \frac{d^n}{dt^n} (1-t^2)^{n-1/2}$$

Os polinómios de Chebyshev podem, também, ser definidos através da equação

$$T_n(t) = \cos(n \arccos(t)), \quad t \in [-1, 1], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

ou equivalentemente por,

$$T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta), \quad \theta \in [0, \pi], \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.10)$$

Estes polinómios satisfazem a relação de recorrência

$$\begin{cases} T_{n+1}(t) = 2tT_n(t) - T_{n-1}(t), & n \geq 1 \\ T_0(t) = 1, & T_1(t) = t \end{cases}$$

Advém, do Teorema 3.1.7, que, em notação matricial, os polinómios de Chebyshev satisfazem a igualdade:

$$\begin{bmatrix} T_0(t) \\ T_1(t) \\ T_2(t) \\ T_3(t) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & -3 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ t \\ t^2 \\ t^3 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

b) Polinómios de Gegenbauer

Os polinómios de Gegenbauer, $P_n^{(\lambda)}$, são definidos pela equação (3.9) para valores de $\alpha = \beta = \lambda - \frac{1}{2}$, com $\lambda \neq 0$, normalizados pela condição $P_n^{(\lambda)}(1) = \binom{n+2\lambda-1}{n}$ e cuja relação de recorrência é

$$\begin{cases} (n+1)P_{n+1}^{(\lambda)}(t) = 2(n+\lambda)tP_n^{(\lambda)}(t) - (n+2\lambda-1)P_{n-1}^{(\lambda)}(t), & n \geq 1 \\ P_0^{(\lambda)}(t) = 1, & P_1^{(\lambda)}(t) = 2\lambda t \end{cases}$$

Para,

i) $\lambda = \frac{1}{2}$: os polinómios correspondem aos **polinómios de Legendre**. Estes polinómios são ortogonais em $[-1, 1]$ relativamente à função peso $w(t) = 1$, normalizados pela condição $P_n(1) = 1$, com $a_{n,n} = \frac{(2n)!}{2^n n!^2}$ e são definidos por

$$P_n(t) = \frac{(-2)^{-n}}{n!} \frac{d^n}{dt^n} (1-t^2)^n$$

A relação de recorrência é

$$\begin{cases} (n+1)P_{n+1}(t) = (2n+1)tP_n(t) - nP_{n-1}(t) \\ P_0(t) = 1, & P_1(t) = t \end{cases}$$

ii) $\lambda = 1$: os polinómios correspondem aos **polinómios de Chebyshev de 2ª espécie**. São ortogonais relativamente à função peso $w(t) = (1-t^2)^{1/2}$, normalizados por $U_n(1) = n+1$, com $a_{n,n} = 2^n$ e cuja expressão, utilizando a fórmula de Rodrigues, é dada por

$$U_n(t) = \frac{(-2)^{-n}}{n!} (1-t^2)^{-1/2} \frac{d^n}{dt^n} (1-t^2)^{n+1/2}$$

Tal como os polinómios de Chebyshev de 1ª espécie, os de 2ª espécie também, podem ser definidos recorrendo a uma mudança de variável trigonométrica

$$U_n(t) = \frac{\sin((n+1)\arccos(t))}{\sqrt{1-t^2}} = \frac{\sin((n+1)\theta)}{\sin\theta}, \quad n \geq 0$$

onde $t = \cos\theta$ com $\theta \in [0, \pi]$. A relação de recorrência é

$$\begin{cases} U_{n+1}(t) = 2tU_n(t) - U_{n-1}(t), & n \geq 1 \\ U_0(t) = 1, & U_1(t) = 2t \end{cases}$$

3.2 Métodos Espetrais

Os métodos espectrais pertencem a uma classe de métodos numéricos utilizados no cálculo de soluções aproximadas de equações diferenciais, que utilizam funções base com suporte global (polinómios algébricos e trigonométricos) por oposição aos métodos dos elementos finitos, que recorrem a funções base com suporte local. Estes métodos aplicam-se quer a equações diferenciais ordinárias, de valor inicial ou de valor fronteira, quer a equações em derivadas parciais. Na formulação destes métodos são considerados dois tipos de funções: funções *aproximantes* e funções *teste* ou *peso*. As primeiras funções são usadas para representar a solução da equação de uma forma aproximada, isto é, na forma $u_n = \sum_{j=0}^n a_j \Phi_j$ onde $\{a_j\}_{j=0:n}$ são coeficientes a determinar e $\{\Phi_j\}_{j \geq 0}$ são funções base, geralmente, escritas em base de polinómios ortogonais. As segundas funções são utilizadas para garantir que a equação diferencial e as condições suplementares, iniciais e/ou fronteira, são satisfeitas, tanto quanto possível, pelo polinómio u_n , minimizando, relativamente a uma determinada norma, o resíduo produzido. Esta minimização, pode traduzir-se impondo que o resíduo deve satisfazer uma condição de ortogonalidade relativamente a cada uma das funções peso. Deste modo, estes métodos podem ser vistos como uma sub-classe dos métodos dos resíduos ponderados. A forma como o resíduo é minimizado caracteriza diferentes tipos de métodos espectrais. Os mais conhecidos são o método de colocação, o método de Galerkin e o método Tau (de Lanczos), sobre o qual nos debruçaremos ao longo deste trabalho. De seguida são apresentadas formulações, para estas três classes de métodos, e a sua relação com os métodos dos resíduos ponderados, aplicados a problemas diferenciais de segunda ordem com condições fronteira.

3.2.1 Formulação do Problema

Considere-se a equação diferencial de 2ª ordem

$$y'' = f(t, y, y') \quad t_0 < t < t_f \quad (3.11)$$

sujeita às condições fronteira

$$\begin{cases} \alpha_1 y(t_0) + \beta_1 y'(t_0) = \gamma_1 \\ \alpha_2 y(t_f) + \beta_2 y'(t_f) = \gamma_2 \end{cases} \quad (3.12)$$

com $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{R}$. Ao problema (3.11) com os valores na fronteira (3.12), designamos por **problema diferencial com condições fronteira** (PVF). Classificamos as condições (3.12) como sendo:

- condições de Dirichelet se $\beta_1 = \beta_2 = 0$;
- condições de Neumann se $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$;
- condições de Robin (ou mistas) se $|\alpha_1| + |\alpha_2| \neq 0 \wedge |\beta_1| + |\beta_2| \neq 0$

Considerando que, u_n , representa a solução aproximada do problema (3.11)-(3.12), isto é,

$$y \cong u_n \quad (3.13)$$

e que u_n se exprime na forma

$$u_n = \sum_{j=0}^n a_j \Phi_j \quad (3.14)$$

onde $\{a_j\}_{j=0:n}$ são coeficientes a determinar, derivando ambos os membros de (3.13) e substituindo as expressões obtidas na equação diferencial (3.11), obtemos a expressão

$$u_n'' \cong f(t, u_n, u_n') \quad (3.15)$$

ficando o *resíduo*, R_n , da equação diferencial definido por:

$$R_n = u_n'' - f(t, u_n, u_n') \quad (3.16)$$

O *método dos resíduos ponderados* consiste em determinar os coeficientes $\{a_j\}_{j=0,\dots,n}$ de u_n considerando que são nulos os integrais

$$\int_{t_0}^{t_f} w_j(t) R_n(t) dt, \quad j = 0, 1, \dots, n \quad (3.17)$$

com funções w_j homogéneas nas condições de contorno [13], e designadas por funções *peso* ou funções *teste*.

Ao longo deste trabalho, os PVF apresentados são obtidos como resultado de aplicação do princípio do máximo de Pontryagin a PCO e estão descritos por sistemas de equações diferenciais de primeira ordem com condições fronteira. Assim, nesta secção vamos considerar o seguinte sistema de equações diferenciais com valores fronteira:

$$\begin{cases} y_1' = g_1(t, y_1, y_2) \\ y_2' = g_2(t, y_1, y_2) \\ \alpha_1 y_1(t_0) + \beta_1 y_1'(t_0) = \gamma_1 \\ \alpha_2 y_2(t_f) + \beta_2 y_2'(t_f) = \gamma_2 \end{cases} \quad (3.18)$$

Neste caso, temos duas funções incógnitas a considerar e temos que anular duas componentes das funções resíduo.

3.2.2 Minimização do Resíduo

Distintas formas de escolher as funções Φ_j de base de representação da solução, de minimizar o resíduo R_n e de tratar as condições fronteira, conduzem a classes distintas de métodos. No sentido de enquadrar estas opções nas especificidades da formulação de cada um dos métodos das secções seguintes, considera-se, como exemplo ilustrativo, o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\begin{cases} y' = \frac{3}{2}ty + \frac{5}{2}tw, & t \in]-1, 1[\\ w' = -\frac{5}{2}ty - \frac{3}{2}tw, & t \in]-1, 1[\\ y(-1) = 1, w(1) = 1 \end{cases} \quad (3.19)$$

Trata-se de um problema cuja solução exacta é conhecida

$$\begin{cases} y = \cos(1 - t^2) - 2 \operatorname{sen}(1 - t^2) \\ w = \cos(1 - t^2) + 2 \operatorname{sen}(1 - t^2) \end{cases}$$

Se u_n e v_n são, respetivamente, aproximações polinomiais de y e w , definidas em $[-1, 1]$, e se foram obtidas representando ambos os polinómios na

base canónica, no caso em que $\Phi_i = t^i$, $i = 0, 1, \dots$, isto é, se para algum $n \in \mathbb{N}$

$$u_n = \sum_{i=0}^n a_i t^i \quad \text{e} \quad v_n = \sum_{i=0}^n b_i t^i \quad (3.20)$$

então

$$u'_n = \sum_{i=0}^{n-1} (i+1)a_{i+1}t^i \quad \text{e} \quad tu_n = \sum_{i=1}^{n+1} a_{i-1}t^i \quad (3.21)$$

e, com expressões análogas com o polinómio v_n . De salientar que a opção em considerar ambos os polinómios, u_n e v_n , com o mesmo grau n não é obrigatória, mas resulta numa simplificação das expressões seguintes. O cálculo dos coeficientes $a_i, b_i, i = 0, \dots, n$ terá de fazer-se impondo que os polinómios u_n e v_n satisfazem as condições fronteira do problema (3.19). Traduzidas em termos dos coeficientes a_i, b_i , estas condições podem escrever-se

$$\begin{cases} a_0 - a_1 + a_2 + \dots + (-1)^n a_n = 1 \\ b_0 + b_1 + b_2 + \dots + b_n = 1 \end{cases} \quad (3.22)$$

significando que as soluções aproximadas se podem escrever na forma

$$\begin{cases} u_n = a_1(t+1) + a_2(t^2-1) + a_3(t^3+1) + \dots + a_n(t^n - (-1)^n) \\ v_n = b_1(t-1) + b_2(t^2-1) + b_3(t^3-1) + \dots + b_n(t^n-1) \end{cases}$$

Substituídas as aproximações polinomiais (3.20) em (3.19) obtemos para as componentes do resíduo $R = (R_1, R_2)$, com

$$\begin{cases} R_1 = u'_n - \frac{3}{2}tu_n - \frac{5}{2}tv_n \\ R_2 = v'_n + \frac{5}{2}tu_n + \frac{3}{2}tv_n \end{cases}$$

que, utilizando (3.21) e agrupando coeficientes de termos do mesmo grau, resulta nas seguintes expressões polinomiais

$$R_1 = a_1 + \sum_{i=1}^{n-1} \left((i+1)a_{i+1} - \frac{3}{2}a_{i-1} - \frac{5}{2}b_{i-1} \right) t^i - \left(\frac{3}{2}a_{n-1} + \frac{5}{2}b_{n-1} \right) t^n - \left(\frac{3}{2}a_n + \frac{5}{2}b_n \right) t^{n+1}$$

e

$$R_2 = b_1 + \sum_{i=1}^{n-1} \left((i+1)b_{i+1} + \frac{5}{2}a_{i-1} + \frac{3}{2}b_{i-1} \right) t^i + \left(\frac{5}{2}a_{n-1} + \frac{3}{2}b_{n-1} \right) t^n + \left(\frac{5}{2}a_n + \frac{3}{2}b_n \right) t^{n+1}$$

ou, definindo os vetores

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} a_1 \\ 2a_2 - \frac{3}{2}a_0 - \frac{5}{2}b_0 \\ 3a_3 - \frac{3}{2}a_1 - \frac{5}{2}b_1 \\ \vdots \\ na_n - \frac{3}{2}a_{n-2} - \frac{5}{2}b_{n-2} \\ -\frac{3}{2}a_{n-1} - \frac{5}{2}b_{n-1} \\ -\frac{3}{2}a_n - \frac{5}{2}b_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{bmatrix} b_1 \\ 2b_2 + \frac{5}{2}a_0 + \frac{3}{2}b_0 \\ 3b_3 + \frac{5}{2}a_1 + \frac{3}{2}b_1 \\ \vdots \\ nb_n + \frac{5}{2}a_{n-2} + \frac{3}{2}b_{n-2} \\ \frac{5}{2}a_{n-1} + \frac{3}{2}b_{n-1} \\ \frac{5}{2}a_n + \frac{3}{2}b_n \end{bmatrix}$$

podemos escrever as componentes do resíduo como $R_1 = \mathbf{r}_1^T \mathbf{t}$ e $R_2 = \mathbf{r}_2^T \mathbf{t}$, com $\mathbf{t} = [1 \ t \ t^2 \ \dots \ t^{n+1}]^T$.

A determinação dos coeficientes a_i , b_i , $i = 0, \dots, n$ constitui um problema com $2(n+1)$ incógnitas. Uma vez que as condições (3.22) são impostas pelas condições fronteira, podemos impor $2n$ condições para minimizar as componentes do resíduo R introduzido pelas equações diferenciais. As propriedades de minimização deste resíduo conduzem a soluções aproximadas com propriedades distintas.

Considerando, a título de exemplo, $n = 5$, os vetores do resíduo são

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} a_1 \\ 2a_2 - \frac{3}{2}a_0 - \frac{5}{2}b_0 \\ 3a_3 - \frac{3}{2}a_1 - \frac{5}{2}b_1 \\ 4a_4 - \frac{3}{2}a_2 - \frac{5}{2}b_2 \\ 5a_5 - \frac{3}{2}a_3 - \frac{5}{2}b_3 \\ -\frac{3}{2}a_4 - \frac{5}{2}b_4 \\ -\frac{3}{2}a_5 - \frac{5}{2}b_5 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{bmatrix} b_1 \\ 2b_2 + \frac{5}{2}a_0 + \frac{3}{2}b_0 \\ 3b_3 + \frac{5}{2}a_1 + \frac{3}{2}b_1 \\ 4b_4 + \frac{5}{2}a_2 + \frac{3}{2}b_2 \\ 5b_5 + \frac{5}{2}a_3 + \frac{3}{2}b_3 \\ \frac{5}{2}a_4 + \frac{3}{2}b_4 \\ \frac{5}{2}a_5 + \frac{3}{2}b_5 \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

e, impor que são nulas as primeiras 5 componentes de cada um dos dois vetores $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$, resulta em

$$u_5 = \frac{1}{5}(-6 + 8t^2 + 3t^4) \quad \text{e} \quad v_5 = 2 - t^4$$

Este resultado permite observar uma propriedade observada frequentemente nos métodos espectrais e que se traduz por preservar propriedades

de paridade da solução exacta do problema. De facto, apesar de tomarmos $n = 5$ para graus dos polinómios dos aproximantes, o resultado obtido é constituído por polinómios de grau 4. O facto de serem nulos todos os coeficientes dos termos de grau ímpar, faz com que os aproximantes herdem a paridade das soluções exactas do problema diferencial. A observação dos índices dos elementos que constituem as componentes do vector resíduo, neste exemplo, permite verificar facilmente que esta propriedade está presente nos aproximantes de qualquer grau.

É imediato verificar que estes polinómios satisfazem de forma exata o problema

$$\begin{cases} u'_5 = \frac{3}{2}tu_5 + \frac{5}{2}tv_5 + \frac{8}{5}t^5 \\ v'_5 = -\frac{5}{2}tu_5 - \frac{3}{2}tv_5 \\ u_5(-1) = 1, v_5(1) = 1 \end{cases}$$

e este resultado ilustra outra propriedade recorrente em métodos espectrais e que se traduz por o resíduo ter mais coeficientes nulos para além daqueles que são impostos.

Na Figura 3.1 apresentam-se os gráficos das funções y e w , soluções exactas do problema (3.19), juntamente com as soluções aproximadas u_n e v_n , obtidas anulando as primeiras componentes do resíduo com polinómios de grau n , para $n = 4, 6, 8$, sendo

$$u_4 = \frac{1}{5}(-6 + 8t^2 + 3t^4) \text{ e } v_4 = 2 - t^4;$$

$$u_6 = \frac{1}{34}(-42 + 66t^2 + 21t^4 - 11t^6) \text{ e } v_6 = \frac{1}{34}(78 - 6t^2 - 39t^4 + t^6);$$

$$u_8 = \frac{1}{569}(-648 + 1104t^2 + 324t^4 - 184t^6 - 27t^8)$$

e

$$v_8 = \frac{1}{569}(1272 - 144t^2 - 636t^4 + 24t^6 + 53t^8)$$

Esta coincidência de resultados, observada neste exemplo para valores pares do grau n , ocorre com frequência nos métodos espectrais. Acontece por vezes que metodologias distintas, resultantes da aplicação de princípios de aproximação distintos, conduzem às mesmas soluções aproximadas. Na

Figura 3.2 apresentam-se as respectivas curvas dos erros nos mesmos aproximantes.

Figura 3.1: Gráficos das funções y e w e das soluções aproximadas u_n e v_n

Outra forma de minimizar os resíduos consiste na escolha de uma norma e em determinar os coeficientes que minimizem os vetores $\mathbf{r}_1$ e $\mathbf{r}_2$ no sentido dessa norma. Neste exemplo, usando minimização do resíduo no sentido dos mínimos quadrados, os resultados obtidos com valores pares do grau n coincidem com os aproximantes anteriores. Para valores ímpares de n os resultados são distintos dos anteriores. Os casos $n = 5, 7, 9$, em que

$$u_5 = -2.3199 + 1.09693t + 3.5164t^2 + 0.9265t^3 + 1.6101t^4 - 0.2169t^5$$

$$u_7 = -1.1679 + 0.026507t + 1.9786t^2 + 0.09802t^3 \\ + 0.6254t^4 + 0.001207t^5 - 0.3193t^6 - 0.008921t^7$$

$$u_9 = -1.1361 - 0.002467t + 1.9416t^2 - 0.001196t^3 \\ + 0.5674t^4 + 0.0005387t^5 - 0.3249t^6 \\ + 0.00009215t^7 - 0.05111t^8 - 0.00005568t^9$$

Figura 3.2: Erros nas soluções aproximadas u_n e v_n obtidas anulando as primeiras componentes do resíduo

e

$$v_5 = 4.02780 + 0.3384t + 0.05259t^2 - 1.0428t^3 - 2.2464t^4 - 0.1296t^5$$

$$v_7 = 2.2794 + 0.09886t - 0.1964t^2 - 0.05793t^3$$

$$-1.1719t^4 - 0.02660t^5 + 0.06598t^6 + 0.008535t^7$$

$$v_9 = 2.2353 + 0.0003123t - 0.2562t^2 + 0.001941t^3$$

$$-1.1175t^4 + 0.00003225t^5 + 0.04306t^6$$

$$-0.0001908t^7 + 0.09319t^8 + 0.00001239t^9$$

estão representados na Figura 3.3 e as respectivas curvas dos erros na Figura 3.4.

Neste exemplo, impor o anulamento dos primeiros coeficientes do resíduo e minimizar a norma quadrática do mesmo resíduo conduzem à mesma solução, para valores de n par e a soluções distintas para valores de n ímpar.

Outro processo de minimizar o resíduo consiste em impor condições de interpolação às suas componentes. Neste exemplo, as componentes do resíduo

Figura 3.3: Gráficos das funções y e w e das soluções aproximadas u_n e v_n obtidas através da minimização do resíduo no sentido dos mínimos quadrados

constituem polinómios de grau $n + 1$ e, após impor as condições fronteira do problema, temos os $2n$ coeficientes de u_n e de v_n a determinar, pelo que podemos impor n condições de interpolação a cada um dos resíduos R_1 e R_2 . Seguindo a sugestão de Lanczos, no seu trabalho fundador do método Tau, podemos balancear o grau dos polinómios no resíduo com o número de condições de interpolação e o número de incógnitas com a introdução de mais incógnitas no resíduo. Neste caso podemos fazer o resíduo depender de dois parâmetros, em cada componente, e impor que cada um dos polinómios R_i se anule nos n zeros do polinómio de Chebyshev T_n . Este processo, que constitui um método de colocação, é equivalente a escrever as componentes do resíduo na forma

$$\begin{cases} R_1 = (\tau_0 + \tau_1 t)T_n \\ R_2 = (\rho_0 + \rho_1 t)T_n \end{cases}$$

com τ_i e ρ_i a determinar. Identificando os coeficientes dos termos do mesmo grau, em ambos os membros destas igualdades, encontramos um sistema de $2(n + 2)$ equações lineares em $2(n + 3)$ incógnitas, que juntamente com as

Figura 3.4: Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n através da minimização do resíduo no sentido dos mínimos quadrados

duas condições fronteira produz um sistema quadrado. Considerando de novo $n = 5$, e porque $T_5 = 5t - 20t^3 + 16t^5$, obtemos

$$\begin{cases} R_1 = 5\tau_0 t + 5\tau_1 t^2 - 20\tau_0 t^3 - 20\tau_1 t^4 + 16\tau_0 t^5 + 16\tau_1 t^6 \\ R_2 = 5\rho_0 t + 5\rho_1 t^2 - 20\rho_0 t^3 - 20\rho_1 t^4 + 16\rho_0 t^5 + 16\rho_1 t^6 \end{cases}$$

Igualando os coeficientes destes polinómios, respectivamente a r_1 e r_2 em (3.23), obtemos

$$u_5 = \frac{1}{1105}(-1291 + 2508t^2 + 112t^4) \quad \text{e} \quad v_5 = \frac{1}{221}(497 - 100t^2 - 176t^4)$$

e $\tau_0 = -148/1105$, $\tau_1 = 0$, $\rho_0 = 20/221$, $\rho_1 = 0$. Tal como anteriormente, estas aproximações possuem a mesma propriedade de paridade das soluções exactas do problema. Com valores dos coeficientes arredondados a 6 algarismos significativos, apresentam-se os resultados obtidos para $n = 6, \dots, 9$.

$$u_6 = -1.14168 + 1.92224t^2 + 0.58014t^4 - 0.36070t^6$$

$$u_7 = -1.14260 + 1.92225t^2 + 0.58357t^4 - 0.36322t^6$$

$$u_8 = -1.14267 + 1.92134t^2 + 0.58272t^4 - 0.35808t^6 - 0.0033167t^8$$

$$u_9 = -1.14256 + 1.91885t^2 + 0.59277t^4 - 0.37147t^6 + 0.0024157t^8$$

e

$$v_6 = 2.22312 - 0.23099t^2 - 1.19814t^4 + 0.20600t^6$$

$$v_7 = 2.22184 - 0.20749t^2 - 1.24617t^4 + 0.23182t^6$$

$$v_8 = 2.22325 - 0.23869t^2 - 1.11784t^4 + 0.058348t^6 + 0.074932t^8$$

$$v_9 = 2.22319 - 0.23719t^2 - 1.12365t^4 + 0.065897t^6 - 0.071757t^8$$

Nestes resultados, podemos observar que o mesmo método espectral pode produzir soluções polinomiais com os mesmos graus mas com resultados distintos. Neste caso, o aumento de grau para um valor de n ímpar não destroi a paridade da solução e permite melhorar a solução por compensação com o aumento do número de zeros dos resíduos. Para os mesmos graus, os resíduos resultantes neste exemplo são:

$$R_{1_6} = 0.000814229 t T_6, R_{2_6} = 0.0185237 t T_6$$

$$R_{1_7} = 0.000542352 T_7, R_{2_7} = 0.00875511 T_7$$

$$R_{1_8} = 0.00142465 t T_8, R_{2_8} = -0.000813330 t T_8$$

$$R_{1_9} = 0.000714912 T_9, R_{2_9} = -0.000444045 T_9$$

Na Figura 3.5 apresentam-se as curvas dos erros obtidos com $n = 6, \dots, 9$. Podemos observar que a introdução de zeros nos polinômios que constituem os resíduos resulta na existência de zeros nas funções erro. Para além disso, pelo menos para os aproximantes observados, o número de zeros nos erros aumenta com o grau n de aproximação e as amplitudes dos valores máximos e mínimos dos erros diminuem.

Outra forma de minimizar o resíduo no sentido do método Tau consiste

Figura 3.5: Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n obtidas com o método Tau

em escrever as componentes do resíduo na forma

$$\begin{cases} R_1 = \tau_0 T_n + \tau_1 T_{n+1} \\ R_2 = \rho_0 T_n + \rho_1 T_{n+1} \end{cases}$$

Esta forma resulta da formulação operacional do método Tau, introduzida por Ortiz [38], e será apresentada em pormenor nos capítulos seguintes. Esta formulação do método é equivalente à projecção das componentes do resíduo no sistema $\{T_i\}_{i=0}^{n-1}$, dos polinómios de Chebyshev de grau menor do que n , isto é, resulta equivalente a impor

$$\langle R_i, T_k \rangle = \int_{-1}^1 \frac{T_k}{\sqrt{1-t^2}} R_i dt = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad i = 1, 2$$

minimizando o resíduo no sentido da norma uniforme.

Neste exemplo, com $n = 5$ encontramos os mesmos polinómios de grau 4 calculados com o procedimento anterior. Pode, ainda, verificar-se que todos os aproximantes calculados com n ímpar coincidem com o aproximante de grau $n - 1$ e os aproximantes de grau n par coincidem com os aproximantes calculados com o procedimento anterior com grau $n + 1$.

Na Figura 3.6 apresentam-se as curvas dos erros obtidos com uma amostra de valores de $n \leq 20$. Para valores de $n \geq 22$ os aproximantes calculados

apresentam erros da ordem da precisão da máquina. Podemos observar o mesmo carácter oscilatório, em torno de zero, das curvas do erro e o mesmo decrescimento das amplitudes destas oscilações, que observamos nos aproximantes anteriores.

Figura 3.6: Erros nas soluções aproximadas de u_n e v_n diferentes graus de n obtidas com o método Tau

Outro facto a destacar, comum a todos os sistemas lineares algébricos associados a estas formulações, é o carácter esparsa da matriz que lhe está associada. Na Figura 3.7 ilustra-se a estrutura de esparsidade da matriz associada ao sistema, resultante desta última formulação, com $n = 50$.

Os mesmos princípios de minimização do resíduo podem impor-se, a aproximações polinomiais das soluções de problemas diferenciais, com estas escritas em outras bases de polinómios que não as potências, como neste exemplo. Tais formulações têm vantagens do ponto de vista da estabilidade do cálculo e podem ter vantagens do ponto de vista da própria formulação dos métodos. Dependendo das equações diferenciais e dependendo das bases polinomiais escolhidas, o carácter esparsa das matrizes pode não ocorrer nesses casos. Nas secções seguintes apresentam-se alguns dos métodos espectrais mais fre-

Figura 3.7: Esparsidade da matriz associada ao método Tau, para o exemplo (3.19)

quentes na literatura.

3.2.3 Método de Colocação

No método de colocação a função *teste*, w , definida em (3.17), corresponde à função Delta de Dirac em $n + 1$ pontos de $[t_0, t_f]$, designados por pontos de colocação ou nós de colocação:

$$w_i(t) = \delta(t - t_i), \quad i = 0, \dots, n$$

fazendo com que o resíduo, R , se anule nesses pontos:

$$\sum_{j=0}^n a_j \phi_j''(t_i) - f(t_i, \sum_{j=0}^n a_j \phi_j(t_i), \sum_{j=0}^n a_j \phi_j'(t_i)) = 0, \quad i = 0, \dots, n \quad (3.24)$$

Considere-se, então, que $u_n = \sum_{j=0}^n a_j \Phi_j$ é uma aproximação polinomial da solução do problema definido em (3.11), (3.12) e que o primeiro ponto de colocação é t_0 e o último é $t_n = t_f$. Note-se que, ao definir que t_0 e

que t_n , dois dos pontos de colocação estão fixos. Para os restantes $n - 1$ pontos de colocação podemos, por exemplo, considerar que são equidistantes, $t_i = t_0 + ih$, $h = \frac{t_f - t_0}{n}$, $i = 0, 1, \dots, n$ (ver por exemplo [18]), ou que são os zeros de $\sin(nt)$, isto é, $t_i = \frac{\pi i}{n}$, $i = 1, \dots, n - 1$ ou ainda que $t_i = \cos(\frac{\pi i}{n})$, $i = 1, \dots, n - 1$ correspondendo aos extremos de um polinómio de Chebyshev T_n [18].

Escolhidos os pontos de colocação e efetuando a substituição $y(t) = u_n(t_i)$, $i = 0, \dots, n$ nas equações do problema (3.11), (3.12), obtemos o seguinte sistema com $n + 1$ equações:

$$\begin{cases} \sum_{j=0}^n a_j \phi_j''(t_i) = f(t_i, \sum_{j=0}^n a_j \phi_j(t_i), \sum_{j=0}^n a_j \phi_j'(t_i)) \\ \alpha_1 \sum_{j=0}^n a_j \phi_j(t_0) + \beta_1 \sum_{j=0}^n a_j \phi_j'(t_0) = \gamma_1 \\ \alpha_2 \sum_{j=0}^n a_j \phi_j(t_n) + \beta_2 \sum_{j=0}^n a_j \phi_j'(t_n) = \gamma_2 \end{cases}$$

O objetivo consiste em determinar os coeficientes $\{a_j\}_{j=0, \dots, n}$ que satisfaçam a equação (3.24), garantindo que o polinómio obtido é solução exata da equação diferencial nesses mesmos pontos. Quando as funções Φ_j estão escritas em base de polinómios ortogonais, os pontos de colocação a escolher podem corresponder aos zeros desses mesmos polinómios [18].

3.2.4 Método de Galerkin

No método de Galerkin as funções *teste*, w_j , definida em (3.17), correspondem às funções Φ_j definida em (3.14), obrigando o resíduo R a ser ortogonal a cada uma das funções base Φ , ou seja, verifica-se a igualdade:

$$\int_{t_0}^{t_f} w_j(t) R(t) dt = \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) R(t) dt = 0 \quad (3.25)$$

para $j = 0, \dots, n$. Substituindo o resíduo da equação (3.25) pela expressão definida em (3.17) tem-se que

$$\int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) u_n''(t) dt = \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) f(t, u_n(t), u_n'(t)) dt \quad (3.26)$$

Integrando por partes o 1º membro da equação anterior,

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) u_n''(t) dt &= [\Phi_j(t) u_n'(t)]_{t_0}^{t_f} - \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j'(t) u_n'(t) dt \\ &= \Phi_j(t_f) u_n'(t_f) - \Phi_j(t_0) u_n'(t_0) - \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j'(t) u_n'(t) dt \end{aligned} \quad (3.27)$$

$j = 0, \dots, n$. Assumindo que as funções base Φ_j são homogêneas nas condições de contorno [13], isto é que $\Phi_j(t_0) = \Phi_j(t_f) = 0$, então a equação (3.26) reduz-se a

$$- \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j'(t) u_n'(t) dt = \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) f(t, u_n(t), u_n'(t)) dt$$

ou ainda,

$$- \sum_{i=0}^n a_i \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j'(t) \Phi_i'(t) dt = \int_{t_0}^{t_f} \Phi_j(t) f(t, \sum_{i=0}^n a_i \Phi_i(t), \sum_{i=0}^n a_i \Phi_i'(t)) dt$$

Esta equação corresponde a resolver um sistema de $n + 1$ equações com $n + 1$ incógnitas, através do qual se determinam os coeficientes a_i da solução aproximada do PVF.

3.3 Método Tau

O método Tau, tal como o método de colocação e o método de Galerkin, é um método espectral que produz uma aproximação polinomial da solução de um problema diferencial, quer seja de valor inicial ou de valor fronteira.

Este método foi proposto por Lanczos [31] em 1938 para resolver equações diferenciais ordinárias (EDOs) lineares, e tem sido desde então, aplicado à resolução de diferentes tipos de problemas. Por exemplo, Ortiz [39], Matos et al. [34], Kong and Wu [30], utilizaram o método na resolução de equações em derivadas parciais (EDPs); Hosseini [24, 25], Pour-Mahmoud et al. [42] utilizaram-no na resolução de equações diferenciais integrais (IDEs).

Formulação do método Tau

Por simplicidade, consideremos a resolução de uma equação diferencial na forma $Dy(t) = f(t)$. Este método visa construir uma aproximação $y_n(t)$, polinomial, da função y num determinado intervalo $[t_0, t_f]$, definida implicitamente por um operador linear $\mathcal{D}$, diferencial, integral ou algébrico, que transforma polinómios em polinómios. Esta aproximação é obtida impondo que a solução satisfaz de forma exata as condições suplementares e de forma aproximada a solução do problema diferencial, minimizando o resíduo ao impor que este é ortogonal aos primeiros termos de uma base de polinómios ortogonais.

Seja D um operador diferencial linear ordinário de ordem $\nu \geq 1$ com coeficientes polinomiais definido por

$$D \equiv \sum_{r=0}^{\nu} p_r(t) \frac{d^r}{dt^r} \quad (3.28)$$

e

$$Dy(t) = f(t), \quad t_0 < t < t_f \quad (3.29)$$

uma equação diferencial ordinária onde f é um polinómio de grau $l \geq 0$ que, juntamente com as ν funcionais lineares, em $C^\nu[a, b]$,

$$g_j(y) = \sigma_j, \quad j = 1, \dots, \nu \quad (3.30)$$

representam as condições suplementares (condições iniciais, fronteira ou mistas) envolvendo valores de y e das suas $\nu - 1$ primeiras derivadas num ou mais pontos de $[t_0, t_f]$, definem a função y que se pretende aproximar. O método Tau visa aproximar y por um polinómio

$$y_n = \sum_{i=0}^n a_{n,i} P_i \quad (3.31)$$

onde $\{P_i\}_{i=0, \dots, n}$ constitui uma SPO.

Considerando que y admite o desenvolvimento em série

$$y = \sum_{i=0}^{\infty} a_i P_i \quad (3.32)$$

os coeficiente a_i , $i = 0, 1, \dots$ podem ser associados a um sistema algébrico infinito, que se obtém fazendo operar D em (3.32), substituindo em (3.29) e igualando os coeficientes dos termos da mesma ordem. Ao truncar a série definida em (3.32) pelo polinómio (3.31), obtém-se um sistema, com um número finito de equações que juntamente com as condições suplementares definidas em (3.30) é geralmente incompatível (com mais equações do que incógnitas). Esta incompatibilidade pode ser removida se, ao segundo membro de (3.29) adicionarmos uma perturbação polinomial, τ_n , de coeficientes nulos até ao grau $n + 1 - \nu$, isto é,

$$\tau_n = \sum_{i \geq n+1-\nu} \tau_{n,i} P_i, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

de forma a garantir que o problema

$$\begin{cases} Dy_n(t) = f(t) + \tau_n(t), & t_0 < t < t_f \\ g_j(y_n) = \sigma_j, & j = 1, \dots, \nu \end{cases} \quad (3.33)$$

denominado *problema τ associado*, tenha solução única. A escolha da perturbação τ_n deverá ser feita tendo em conta as condições suplementares, as características do operador D e a natureza da aproximação pretendida, como por exemplo a escolha da base polinomial. Uma característica do operador que impõe propriedades à perturbação τ_n é a sua altura.

Definição 3.3.1. *Seja $D : \mathbb{P}_n \rightarrow \mathbb{P}_m$ o operador definido em (3.28), onde $\mathbb{P}_k$ designa o espaço dos polinómios algébricos de grau $\leq k$. A altura do operador D fica definida por:*

$$h = \sup_{n \in \mathbb{N}_0} (\sigma_n - n)$$

onde σ_n representa o grau de Dt^n .

Desta definição resulta que τ_n , tendo grau máximo $n + h$, pode escrever-se na forma

$$\tau_n = \sum_{i=n+1-\nu}^{n+h} \tau_{n,i} P_i, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

Ao polinómio obtido, y_n , dá-se o nome de *aproximante τ de ordem n* e corresponde à solução única do problema perturbado satisfazendo as condições

suplementares (3.30) de forma exata e garantindo que Dy_n coincide com Dy tanto quanto possível.

Método Tau em termos operacionais

A abordagem operacional do método Tau permite obter a solução aproximada y_n do problema τ definido em (3.33) sem que a perturbação τ_n tenha de ser calculada explicitamente. O problema diferencial é transformado num sistema de equações algébricas, de dimensão infinita, cuja solução aproximada é obtida, resolvendo o sistema truncado a um número finito de equações.

Definição 3.3.2. *Seja y a solução do problema diferencial escrita na base das potências de t , com coeficientes $\mathbf{a} = [a_0 \ a_1 \ \dots \ a_n \ \dots]$, tal que $y(t) = \sum_{i \geq 0} a_i t^i$. Se $\mathbf{t} = [1 \ t \ t^2 \ \dots \ t^n \ \dots]^T$, o polinómio y fica definido, em notação matricial, por $y = \mathbf{a}\mathbf{t}$.*

Com esta notação, a ação do operador diferencial D actuando em y , pode representar-se matricialmente como um operador algébrico actuando no vetor $\mathbf{a}$, dos coeficientes de y .

Definição 3.3.3. [38] *Definindo a matriz*

$$\mu = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

o efeito de multiplicar por t por y corresponde a efetuar o cálculo das operações matriciais

$$t.y(t) = \mathbf{a}\mu\mathbf{t}$$

Definição 3.3.4. [38] *Definindo a matriz*

$$\eta = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

o efeito de derivar em ordem a t o polinómio y corresponde ao cálculo das operações matriciais

$$y'(t) = \mathbf{a}t' = \mathbf{a}\eta\mathbf{t}$$

sendo $(t^n)' = \frac{d}{dt}(t^n) = nt^{n-1}$, $n = 0, 1, \dots$

Esta abordagem é denominada operacional uma vez que a aplicação do método Tau é baseada na representação matricial das operações de multiplicação e de derivação atuando sobre vectores de coeficientes .

Lema 3.3.5. *O efeito de α derivações sucessivas ou β multiplicações sobre o vetor dos coeficientes $\mathbf{a}$ de y corresponde a multiplicar respetivamente $\mathbf{a}$ por η^α ou $\mathbf{a}$ por μ^β ,*

$$\begin{aligned}\frac{d^\alpha y}{dt^\alpha} &= \mathbf{a}\eta^\alpha\mathbf{t}, \quad \alpha = 1, 2, \dots \\ t^\beta y &= \mathbf{a}\mu^\beta\mathbf{t}, \quad \beta = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Demonstração. Ver [38]. □

Note-se que, se $y_n = \sum_{i=0}^n a_i t^i$ então

$$\begin{aligned}y_n \cdot 1 &= a_0 \cdot 1 + a_1 \cdot t + a_2 \cdot t^2 + \dots + a_n \cdot t^n \\ y_n \cdot t &= a_0 \cdot t + a_1 \cdot t^2 + \dots + a_n \cdot t^{n+1} \\ &\vdots \\ y_n \cdot t^k &= \dots + a_0 \cdot t^k + a_1 \cdot t^{k+1} + \dots + a_n \cdot t^{n+k}, \quad k = 0, 1, \dots\end{aligned}$$

isto é,

$$y_n \cdot \mathbf{t} = y_n(\mu) \cdot \mathbf{t}$$

onde

$$y_n(\mu) = \sum_{i=0}^n a_i \mu^i$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(y_n) &= a_1 + 2a_2 t + \dots + na_n t^{n-1} \\ \frac{d^2}{dt^2}(y_n) &= 2a_2 + 6a_3 t + \dots + n(n-1)a_n t^{n-2} \\ &\vdots \\ \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}}(y_n) &= (n-1)!a_{n-1} + n!a_n t \\ \frac{d^n}{dt^n}(y_n) &= (n)!a_n\end{aligned}$$

em notação matricial corresponde a ter $\frac{d^i}{dx^i}y_n = \mathbf{a}_n\eta^i\mathbf{x}$, com

$$\eta^i = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & & \\ \frac{i!}{0!} & 0 & & \\ & \frac{(i+1)!}{1!} & 0 & \\ & & \frac{(i+2)!}{2!} & 0 \\ & & & \dots \end{bmatrix}$$

e $\mathbf{a}_n = [a_0 \ a_1 \ \dots \ a_n \ 0 \ 0 \ \dots]$.

Proposição 3.3.6. [38] *Seja D o operador diferencial definido em (3.28), y_n um polinómio escrito na base das potências e Π a matriz determinada por D , tal que,*

$$\Pi = \sum_{i=0}^v \eta^i p_i(\mu) \quad (3.36)$$

A acção que o operador D exerce sobre o polinómio y_n fica definida, em notação matricial, por:

$$Dy_n = \mathbf{a}_n \Pi \mathbf{t} \quad (3.37)$$

Proposição 3.3.7. *Seja D o operador diferencial definido em (3.28) e y_n um polinómio escrito numa base de polinómios ortogonais $\mathbf{v} = V\mathbf{t}$, sendo V a matriz definida em (3.4). A acção que o operador D exerce sobre y_n , em representação matricial é dada por:*

$$Dy_n = \mathbf{a}_n \Pi_v \mathbf{v}$$

sendo $\Pi_v = V\Pi V^{-1}$.

Se f é um polinómio ou é representado por uma aproximação polinomial, escrito numa base de polinómios ortogonais $\mathbf{v}$, tal que

$$f(t) = \mathbf{f}_m \mathbf{v}$$

com $\mathbf{f}_m = [f_0 \ f_1 \ \dots \ f_m]$ e $\Pi_{i,j} = \langle DP_i, P_j \rangle$ são as componentes da matriz Π_v , a equação $Dy = f$ fica traduzida pelo sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{a}\Pi_0 = f_0 \\ \mathbf{a}\Pi_1 = f_1 \\ \dots \\ \mathbf{a}\Pi_m = f_m \\ \mathbf{a}\Pi_{m+1} = 0 \\ \vdots \end{array} \right. \quad (3.38)$$

Definição 3.3.8. *As condições suplementares do problema (3.33) ficam definidas através da equação matricial*

$$\mathbf{a}\mathbf{B} = \boldsymbol{\sigma}$$

onde, $B_{i,j} = g_j(P_i)$ representa a condição $g_j(y_n)$ e $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_1 \ \sigma_2 \ \dots \ \sigma_\nu]$.

Se $B_{i,j} = g_j(P_i)$ representa a condição $g_j(y_n)$ do problema (3.33), escrito na base do aproximante Tau e $\mathbf{B} = [B_1 \ B_2 \ \dots \ B_\nu]$, então as condições suplementares traduzem-se pelo sistema de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{a}B_1 = \sigma_1 \\ \mathbf{a}B_2 = \sigma_2 \\ \dots \\ \mathbf{a}B_\nu = \sigma_\nu \end{array} \right. \quad (3.39)$$

Note-se que, os sistemas (3.38) - (3.39) são inconsistentes entre o número de equações e o número de incógnitas. Assim, uma forma de obter a solução Tau consiste em truncar estes sistemas, desde que $n > m + \nu$.

Definição 3.3.9. *Seja $G = [\mathbf{B} \mid \Pi_{n+1, n+1-\nu}]$ a matriz representativa dos sistemas (3.38) e (3.39), truncada às suas $n + 1$ linhas e $n + 1$ colunas, que associa o operador D com as condições suplementares do problema (3.33).*

Os coeficientes $\mathbf{a}_n$ do polinómio y_n ficam determinados resolvendo o sistema

$$\mathbf{a}G = \mathbf{b} \quad (3.40)$$

com $\mathbf{b} = [\boldsymbol{\sigma} \ \mathbf{f} \ \dots \ 0 \ \dots \ 0]$.

*O polinómio y_n , definido por (3.40), diz-se o **aproximante Tau** para a solução do problema (3.29)-(3.30) [38].*

Análise do erro

Tratando-se de equações diferenciais lineares, pode verificar-se que o método Tau pode fornecer, *a posteriori*, uma estimativa do erro, na aproximação Tau.

Definição 3.3.10. *Define-se o erro com que y_n aproxima y por*

$$e_n(t) = y(t) - y_n(t) \quad (3.41)$$

De uma forma geral, não é possível obter a expressão exata para o erro e_n dos aproximantes de Tau [11]. Em alternativa ao cálculo do erro e_n , podemos estimar o erro cometido.

Proposição 3.3.11. *Sejam y_n e y_m dois aproximantes Tau, com $m > n$. Uma estimativa do erro com que y_n representa y é dada por*

$$e_{n,m} = y_m - y_n \quad (3.42)$$

Demonstração. Sabendo que o operador diferencial D , definido em (3.28) é linear, que $y(t)$ é a solução do problema

$$\begin{cases} Dy(t) = f(t), & t_0 < t < t_f \\ g_j(y) = \sigma_j, & j = 1, \dots, \nu \end{cases} \quad (3.43)$$

e que $y_n(t)$ é a solução do problema Tau associado

$$\begin{cases} Dy_n(t) = f(t) + \tau_n(t), & t_0 < t < t_f \\ g_j(y_n) = \sigma_j, & j = 1, \dots, \nu \end{cases}$$

então, aplicando o operador D à função erro, e_n , e às condições suplementares, g_j , obtemos um novo problema diferencial na forma

$$\begin{cases} De_n = Dy - Dy_n, & t_0 < t < t_f \\ g_j(e_n) = g_j(y) - g_j(y_n) & j = 1, \dots, \nu \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} De_n = -\tau_n \\ g_j(e_n) = 0 & j = 1, \dots, \nu \end{cases}$$

Se $e_{n,m}$ é um polinómio de grau $\leq m$, com $m > n$, que aproxima e_n , usando a mesma técnica que usamos para resolver o problema (4.4), isto é aplicando o método Tau, então $e_{n,m}$ satisfaz o problema perturbado

$$\begin{cases} De_{n,m}(t) = -\tau_n(t) + \tau_m(t) \\ g_j(e_{n,m}) = 0 \end{cases} \quad j = 1, \dots, \nu$$

□

Esta estimativa pode utilizar-se, não só para estimar o sinal e a ordem de grandeza de e_n , mas também como estimativa de um majorante do erro absoluto com que y_n aproxima y . Diversas aplicações têm sido apresentadas, calculando-se uma sucessão de aproximantes y_n , com n crescente, e utilizando como critério que $\|e_n\| \leq \epsilon$, para alguma norma e algum valor $\epsilon > 0$ previamente fixados [11].

4

Método Tau em Controlo Ótimo

Conteúdo

4.1	Problemas Lineares	68
4.1.1	Problemas em Horizonte Finito	68
4.1.2	Problemas em Horizonte Infinito	73
4.2	Problemas não Lineares	76
4.2.1	Métodos de Linearização	77
4.2.2	Definição do Operador Linear	78
4.2.3	Cálculo da Matriz Π_v	80
4.2.4	Coefficientes de Linearização	81
4.2.5	Coefficientes de Linearização dos Polinómios Ortogonais Clássicos	85
4.2.6	Coefficientes do Produto de Polinómios	88

Como vimos, a obtenção da solução de problemas de controlo ótimo passa por aplicar o Princípio do Máximo de Pontryagin, transformando o problema original num problema de valor fronteira, definido por um sistema

de equações diferenciais de primeira ordem, juntamente com as condições fronteira. Estes sistemas podem ser lineares, não lineares, definidos num intervalo de tempo finito ou infinito. Estas características distintas são relevantes, como veremos neste capítulo, para a forma de implementar o método Tau.

Sendo o método Tau um método utilizado na resolução de equações diferenciais, é nosso intuito generalizar a sua aplicação aos sistemas de equações diferenciais resultantes da aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin aos problemas de controlo ótimo.

Consideramos sistemas de equações diferenciais de 1^a ordem

$$\begin{cases} y'_1 = f_1(t, y_1, \dots, y_k) \\ y'_2 = f_2(t, y_1, \dots, y_k) \\ \vdots \\ y'_k = f_k(t, y_1, \dots, y_k), \quad t \in [t_0, t_f] \end{cases} \quad (4.1)$$

com condições fronteira na forma de Dirichelet¹

$$y_i(\kappa_i) = v_i, \quad \kappa_i \in [t_0, t_f], \quad i = 1, \dots, k \quad (4.2)$$

Distinguimos os problemas lineares dos não lineares uma vez que a utilização do método Tau, na resolução destes, assume estratégias distintas, consoante o problema é linear ou não. No caso do problema ser não linear é implementado um processo iterativo, após a linearização das equações e definição de novos operadores diferenciais.

4.1 Problemas Lineares

4.1.1 Problemas em Horizonte Finito

Quando os problemas de controlo ótimo são lineares, nas funções incógnitas, e têm coeficientes polinomiais então as funções $f_j(t, y_1, \dots, y_k) = f_j - \sum_{i=1}^k p_{j,i} y_i$

¹As condições fronteira na forma de Dirichelet resultam de se associarem às condições do problema (2.6) as condições 2. e 3. do Teorema 2.2.3.

traduzem-se no sistema (4.1)

$$\begin{cases} y'_1 + \sum_{i=1}^k p_{1i}y_i = f_1 \\ y'_2 + \sum_{i=1}^k p_{2i}y_i = f_2 \\ \vdots \\ y'_k + \sum_{i=1}^k p_{ki}y_i = f_k \end{cases} \quad (4.3)$$

onde p_{ji} e f_j , $i, j = 1, \dots, k$ representam polinómios algébricos. Considere-se a notação usual

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_k]^T \\ \mathbf{f} &= [f_1 \ f_2 \ \dots \ f_k]^T \end{aligned}$$

onde cada elemento f_i de $\mathbf{f}$ é um polinómio e cada elemento y_i de $\mathbf{y}$ é a função incógnita a determinar. Definindo que a diferenciação é efetuada componente a componente, isto é,

$$\mathbf{y}' = [y'_1 \ y'_2 \ \dots \ y'_k]^T$$

o sistema (4.3) juntamente com as condições (4.2) pode ser escrito como

$$\begin{cases} \mathbf{y}' = \mathbf{f} \\ \mathbf{y}(\kappa_i) = \mathbf{v}_i, \ i = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.4)$$

Seja $\mathbf{D}$ a matriz definida por

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D + p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1k} \\ p_{21} & D + p_{22} & \dots & p_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{k1} & p_{k2} & \dots & D + p_{kk} \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

sendo $D = \frac{d}{dt}$ o operador de diferenciação. O problema (4.4) fica traduzido por

$$\begin{cases} \mathbf{D}\mathbf{y} = \mathbf{f} \\ \mathbf{y}(\kappa_i) = \mathbf{v}_i, \ i = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.6)$$

Proposição 4.1.1. *A solução Tau, de grau n, do problema (4.6) é um vetor de polinómios*

$$\mathbf{y}_n = [y_{1n} \ y_{2n} \ \dots \ y_{kn}]^T$$

que satisfaz de forma exata o problema perturbado

$$\begin{cases} \mathbf{D}\mathbf{y}_n = \mathbf{f} + \boldsymbol{\tau}_n \\ \mathbf{y}(\kappa_i) = \mathbf{v}_i, \quad i = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.7)$$

onde $\boldsymbol{\tau}_n = [\tau_{1n} \ \tau_{2n} \ \dots \ \tau_{kn}]^T$ é um vetor de polinómios representativos da perturbações introduzidas em cada uma das equações diferenciais do problema (4.3).

Definição 4.1.2. Considerando que

$$\begin{aligned} y_{1n} &= \sum_{j=0}^n a_{1j} P_j \\ y_{2n} &= \sum_{j=0}^n a_{2j} P_j \\ &\vdots \\ y_{kn} &= \sum_{j=0}^n a_{kj} P_j \end{aligned}$$

define-se, em notação matricial, $\mathbf{y}_n = [y_{1n} \ y_{2n} \ \dots \ y_{kn}]^T$ por

$$\mathbf{y}_n = A_{k,n} \mathbf{P}$$

onde

$$A_{k,n} = \begin{bmatrix} a_{10} & a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{20} & a_{21} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k0} & a_{k1} & \dots & a_{kn} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

e

$$\mathbf{P} = [P_0 \ P_1 \ \dots \ P_n]^T$$

A matriz $A_{k,n}$ corresponde à matriz dos coeficientes a determinar de $\mathbf{y}_n$ e $\{P_i\}_{i=0,\dots,n}$ constitui uma base do espaço dos polinómios de grau $\leq n$. Se,

- $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ são polinómios escritos na base das potências de t , então

$$\mathbf{y}_{in} = \mathbf{a}_i \mathbf{t}$$

onde $\mathbf{a}_i$ representa a linha i da matriz A e $\mathbf{t} = [1 \ t \ \dots \ t^n]^T$;

- $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ são polinómios ortogonais, então

$$\mathbf{y}_{in} = \boldsymbol{\alpha}_i \mathbf{v}$$

sendo V a matriz definida em (3.4). Os coeficientes $\boldsymbol{\alpha}_i$ são determinados pela relação $\boldsymbol{\alpha}_i = \mathbf{a}_i V^{-1}$.

Definição 4.1.3. Se $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ constitui a base das potências de t , então a matriz Π , determinada pelo operador D definido em (4.5) é uma matriz na forma

$$\Pi = \begin{bmatrix} \eta + p_{11}(\mu) & p_{21}(\mu) & \dots & p_{k1}(\mu) \\ p_{12}(\mu) & \eta + p_{22}(\mu) & \dots & p_{k2}(\mu) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{1k}(\mu) & p_{2k}(\mu) & \dots & \eta + p_{kk}(\mu) \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

onde μ e η são as matrizes definidas em (3.34) e (3.35).

A matriz Π é uma matriz definida por $k \times k$ blocos, onde cada bloco (i, j) , $i, j = 1, \dots, k$ corresponde a uma matriz de dimensão $(n+1) \times (n+1)$.

Proposição 4.1.4. Se $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ constitui uma base de polinómios ortogonais e D é o operador definido em (4.5), então Π_v é uma matriz da forma

$$\Pi_v = \begin{bmatrix} \Pi_{v_{11}} & \Pi_{v_{12}} & \dots & \Pi_{v_{1k}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Pi_{v_{k1}} & \Pi_{v_{k2}} & \dots & \Pi_{v_{kk}} \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

onde cada bloco $\Pi_{v_{i,j}}$ é definido por

$$\Pi_{v_{ij}} = V \Pi_{i,j} V^{-1} \text{ e } \Pi_{i,j} = \delta_{i,j} \eta + p_{i,j}(\mu) \quad i, j = 1, \dots, k \quad (4.11)$$

Definição 4.1.5. Sejam B a matriz, representativa das condições fronteira de (4.2), calculadas na base polinomial $\mathbf{P}$ do aproximante Tau , e seja $\mathbf{G} = [B \ C_1 \ \dots \ C_k]$ a matriz cujas colunas C_i , $i = 1, \dots, k$, são blocos de dimensão $k(n+1) \times kn$, provenientes das matrizes (4.9) ou (4.10), consoante $\mathbf{P} = [P_0 \ P_1 \ \dots \ P_n]^T$ representa o vetor das funções escritas na base das potências de t ou das funções escritas em base de polinómios ortogonais. Se a matriz $\mathbf{G}$ é não singular e

- Se $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ corresponde às potências de t , então a solução Tau do problema (4.7) fica determinada resolvendo o sistema de equações lineares

$$\underline{\mathbf{a}}\mathbf{G} = \mathbf{b}$$

onde $\underline{\mathbf{a}} = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \dots \ \mathbf{a}_k]$ e $\mathbf{b} = [\mathbf{v} \ f_{1m} \ \dots \ f_{km}]$ sendo $f_{im} = [f_{i0} \ f_{i1} \ \dots \ f_{im}]$, $\mathbf{v} = [v_1, \ \dots \ v_k]$, $i = 1, \dots, k$ e $m \leq n$;

- Se $\{P_j\}_{j=0,\dots,n}$ são funções escritas em base de polinómios ortogonais, então a solução Tau do problema (4.7) fica determinada resolvendo o sistema de equações lineares

$$\underline{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{G} = \underline{\mathbf{b}}$$

onde $\underline{\boldsymbol{\alpha}} = [\boldsymbol{\alpha}_1 \ \boldsymbol{\alpha}_2 \ \dots \ \boldsymbol{\alpha}_k]$ e $\underline{\mathbf{b}} = [\mathbf{v} \ \underline{f}_{1m} \ \dots \ \underline{f}_{km}]^T$ sendo $\mathbf{v} = [v_1, \ \dots \ v_k]$, $\underline{f}_{im} = [f_{i0}V^{-1} \ f_{i1}V^{-1} \ \dots \ f_{im}V^{-1}]$, $i = 1, \dots, k$ e $m \leq n$

Resolvido o sistema, temos calculado um conjunto de k polinómios de grau n , $y_{i,n} \approx y_i$, $i = 1, \dots, k$, no sentido do método Tau, isto é

$$y_{i,n}(k_i) = v_i, \quad i = 1, \dots, k$$

e

$$y'_{i,n} + \sum_{j=1}^k p_{i,j}y_{j,n} = f_i + \tau_{i,n}, \quad i = 1, \dots, k$$

Note-se que a opção por considerar todas as funções y_i aproximadas por polinómios do mesmo grau n não é obrigatória, tendo sido tomada por questões de simplificação, das fórmulas e dos algoritmos.

Esta mesma implementação do método Tau vai ser utilizada para PCO em horizonte infinito, sendo que nesses casos é necessário um processo prévio que reduza o problema a um horizonte finito.

Esta generalização do método, a sistemas de equações na forma (4.3), permite aproximar numericamente a solução de PCO. Usando o Exemplo 1, ilustramos, no Capítulo 5, a aplicabilidade do método um PCO, formulado num intervalo de tempo da forma $[t_0, t_f]$, $t_0, t_f \in \mathbb{R}$ e cuja dinâmica é caracterizada por um sistema de equações diferenciais.

4.1.2 Problemas em Horizonte Infinito

Muitos dos problemas de controlo ótimo têm como horizonte intervalos na forma $[0, +\infty[$ e, como forma de aproximar por polinómios a solução destes problemas, podemos utilizar diferentes técnicas, baseadas na aplicação de métodos espectrais. Em [7], duas das técnicas apresentadas consistem em truncar o domínio $[0, +\infty[$ num domínio $[0, L]$, com L suficientemente grande para aproximar a solução do problema no intervalo pretendido, ou utilizar funções racionais ortogonais, definindo, neste caso, novas bases espectrais. Uma terceira técnica é usada em [26], onde são apresentadas aproximações espectrais baseadas na expansão de polinómios ortogonais definidos em $[0, +\infty[$, nomeadamente, os polinómios de Laguerre. Podemos, ainda reformular o problema original definido em $[0, +\infty[$ num problema definido em $[x_0, x_f]$ com x_f finito. Em [20], é provada a estabilidade e convergência desta técnica, usando polinómios de Jacobi.

Em [36] é desenvolvida uma técnica de segmentação, usada para determinar a solução Tau do problema, em intervalos de grande amplitude. É efetuada uma partição do intervalo original em subintervalos, com a mesma amplitude, aplicando-se o método Tau em cada um desses sub-intervalos. Em [23] é usada a mesma técnica, mas neste caso, os sub-intervalos, $[x_i, x_i + h]$, têm amplitudes h_i distintas. Estas técnicas são usadas em problemas com condições iniciais, considerando para cada subintervalo a condição $y(x_{i+1}) = y(x_i + h_i)$. Por este motivo a técnica de segmentação não é aplicável aos problemas que resultam dos PCO.

Neste trabalho adotamos a estratégia em [7] para o método Tau [15, 16]. O problema original, definido em $[0, +\infty[$ é reformulado usando uma função de transformação de domínio. De acordo com [7], a utilização desta transformação, no domínio do problema diferencial, não interfere com a convergência do método espectral.

Transformação do domínio

Seja

$$\begin{cases} y_1'(t) + \sum_{i=1}^k p_{1i} y_i(t) = f_1(t), \\ y_2'(t) + \sum_{i=1}^k p_{2i} y_i(t) = f_2(t) \\ \vdots \\ y_k'(t) + \sum_{i=1}^k p_{ki} y_i(t) = f_k(t), \end{cases} \quad (4.12)$$

um sistema de equações diferenciais lineares, de 1ª ordem, definido em $[0, +\infty[$, com f_i , $i = 1, \dots, k$ polinómios e seja φ a função definida em $\varphi : [x_0, x_f[\rightarrow [0, +\infty[$, com $x_0 < x_f \in \mathbb{R}$, cuja expressão é dada por

$$t = \varphi(x) = \frac{x - x_0}{x_f - x}, \quad x \in [x_0, x_f[\quad (4.13)$$

Se

$$p_{r,i} = \sum_{j=0}^{q_{r,i}} p_{rij} t^j, \quad t \in [0, +\infty[\quad (4.14)$$

efetuando a mudança de variável (4.13) no sistema (4.12), as funções $p_{ri} = \sum_{j=0}^{q_{r,i}} p_{rij} \left(\frac{x-x_0}{x_f-x}\right)^j$ com $r, i = 1, \dots, k$ são funções racionais em x , definidas no intervalo $[x_0, x_f[$. Multiplicando ambos os membros de cada uma das equações $r = 1, \dots, k$ em (4.12) por $(x_f - x)^{q_r}$, com $q_r = \max\{q_{r,i}\}$, é possível definir um novo sistema de equações diferenciais, em $[x_0, x_f[$ com coeficientes polinomiais. Um caso particular resulta de sistemas de equações diferenciais lineares com coeficientes $p_{r,i}$ constantes, caso em que todos os valores $q_{r,i}$ são nulos. Este caso traduz-se na proposição seguinte

Proposição 4.1.6. *Efetuando a mudança de variável (4.13), no sistema (4.12) e considerando que os coeficientes $p_{r,i}$ são constantes, o sistema (4.12), definido em $[x_0, x_f[$, fica traduzido pela equação matricial*

$$\tilde{D}\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{f}}$$

onde $\tilde{D}$ é um operador dado por

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} \frac{d}{dx} + p_{11} & p_{12} & \dots & p_{1k} \\ p_{21} & \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} \frac{d}{dx} + p_{22} & \dots & p_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{k1} & p_{k2} & \dots & \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} \frac{d}{dx} + p_{kk} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Demonstração. Considerando que $t = \varphi(x) = \frac{x-x_0}{x_f-x}$ e que para $i = 1, \dots, k$

$$\begin{aligned}\tilde{y}_i(x) &= y_i(\varphi(x)) \\ \frac{d}{dx}(\tilde{y}_i(x)) &= \frac{d}{dx}(y_i(\varphi(x))) \\ \tilde{f}_i(x) &= f_i(\varphi(x))\end{aligned}$$

Se $\tilde{\mathbf{y}} = [\tilde{y}_1 \ \tilde{y}_2 \ \dots \ \tilde{y}_k]^T$ e $\tilde{\mathbf{f}} = [\tilde{f}_1 \ \tilde{f}_2 \ \dots \ \tilde{f}_k]^T$, então

$$\tilde{D} \begin{bmatrix} \tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \\ \vdots \\ \tilde{y}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \\ \vdots \\ \tilde{f}_k \end{bmatrix}$$

corresponde ao seguinte sistema de equações

$$\begin{cases} \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} \frac{d}{dx}(\tilde{y}_1(x)) + \sum_{i=1}^k p_{1i} \tilde{y}_i(x) = \tilde{f}_1(x) \\ \vdots \\ \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} \frac{d}{dx}(\tilde{y}_k(x)) + \sum_{i=1}^k p_{ki} \tilde{y}_i(x) = \tilde{f}_k(x) \end{cases} \quad (4.16)$$

Note-se que $\frac{d}{dx}(\tilde{y}_i(x)) = \frac{d}{dx}(y_i(\varphi(x))) = y'_i(\varphi(x)) \frac{x_f-x_0}{(x_f-x)^2}$, então (4.16) fica traduzido por

$$\begin{cases} \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} y'_1(\varphi(x)) \frac{x_f-x_0}{(x_f-x)^2} + \sum_{i=1}^k p_{1i} y_i(\varphi(x)) = f_1(\varphi(x)) \\ \vdots \\ \frac{(x_f-x)^2}{x_f-x_0} y'_k(\varphi(x)) \frac{x_f-x_0}{(x_f-x)^2} + \sum_{i=1}^k p_{ki} y_i(\varphi(x)) = f_k(\varphi(x)) \end{cases}$$

ou seja,

$$\begin{cases} y'_1(t) + \sum_{i=1}^k p_{1i} y_i(t) = f_1(t) \\ \vdots \\ y'_k(t) + \sum_{i=1}^k p_{ki} y_i(t) = f_k(t) \end{cases}$$

□

Definição 4.1.7. *Seja*

$$\begin{cases} y'_1(t) + \sum_{i=1}^k p_{1i} y_i(t) = f_1(t) \\ \vdots \\ y'_k(t) + \sum_{i=1}^k p_{ki} y_i(t) = f_k(t) \\ y_i(\varsigma_i) = v_i \quad \varsigma_i \in [0, +\infty[\quad i = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.17)$$

um problema de valor fronteira definido num intervalo na forma $[0, +\infty[$. Usando a transformação (4.13) e o operador (4.15), o problema (4.17) fica traduzido por

$$\begin{cases} \tilde{D}\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{f}} \\ \tilde{y}_i(\kappa_i) = v_i, \quad \kappa_i \in [x_0, x_f[\quad i = 1, \dots, k \end{cases} \quad (4.18)$$

O problema (4.18) encontra-se, agora, descrito nas condições do problema (4.6). Assim, a solução Tau de (4.18) assume a forma da solução descrita pela Definição 4.1.1, isto é, corresponde a um vetor de funções $\tilde{\mathbf{Y}}_n = [\tilde{y}_{1n} \ \tilde{y}_{2n} \ \dots \ \tilde{y}_{kn}]$, no intervalo $[x_0, x_f[$.

Proposição 4.1.8. *Se $\tilde{y}_{in} = \sum_{j=0}^n \tilde{a}_{ij}x^j$, $i = 1, \dots, k$, então a matriz Π determinada pelo operador $\tilde{D}$ é uma matriz na forma*

$$\Pi_{in,f} = \begin{bmatrix} \psi + p_{11}I & p_{21}I & \dots & p_{k1}I \\ p_{12}I & \psi + p_{22}I & \dots & p_{k2}I \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{1k}I & p_{2k}I & \dots & \psi + p_{kk}I \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

onde ψ é a matriz determinada por $\psi = \frac{1}{x_f - x_0} \eta (bI - \mu)^2$ e I a matriz identidade de dimensão $n + 1$.

Demonstração. Consideremos, para $i = 1, \dots, k$, que $\mathbf{x} = [1 \ x \ x^2 \ \dots \ x^n]^T$ e que $\tilde{\mathbf{a}}_i = [\tilde{a}_{i0} \ \tilde{a}_{i1} \ \dots \ \tilde{a}_{in}]$. Então, $\tilde{y}_{in} = \sum_{j=0}^n \tilde{a}_{ij}x^j = \tilde{\mathbf{a}}_i \mathbf{x}$. Pela Definição 3.3.4 decorre que $\tilde{y}'_{in} = \tilde{\mathbf{a}}_i \eta \mathbf{x}$ e pelo Lema 3.3.5 decorre que $t^n \tilde{y}'_{in} = \tilde{\mathbf{a}}_i \eta \mu^n \mathbf{t}$. Assim, $\frac{(x_f - t)^2}{x_f - x_0} \tilde{y}'_{in} = \frac{1}{x_f - x_0} (\tilde{\mathbf{a}}_i x_f^2 \eta \mathbf{x} - \tilde{\mathbf{a}}_i 2x_f \eta \mu \mathbf{x} + \tilde{\mathbf{a}}_i \eta \mu^2 \mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{a}}_i \frac{1}{x_f - x_0} \eta (bI - \mu)^2 \mathbf{x}$. $\square$

4.2 Problemas não Lineares

Recordando que o método Tau é um método que visa construir uma aproximação polinomial y_n de uma função y , definida implicitamente por um operador linear D , a generalização do método, para a resolução de equações diferenciais não lineares, passa por recorrer a algum tipo de linearização dessas equações, definir novos operadores (lineares) que traduzam o problema e, subsequentemente, proceder à utilização do método Tau iterativamente.

4.2.1 Métodos de Linearização

Seja

$$F(t, y(t), y'(t), \dots, y^{(\nu)}(t)) = 0 \quad (4.20)$$

uma equação diferencial onde F representa um operador diferencial não linear em y e nas suas derivadas, ν representa a ordem da equação diferencial não linear e $y^{(i)}$ representa a i -ésima derivada de y em relação a t .

Se (4.20) se puder escrever na forma

$$\sum_{i=0}^{\nu} q_i(t, y, y', \dots, y^{(i-1)}) y^{(i)} = f(t, y, y', \dots, y^{(\nu)}) \quad (4.21)$$

onde $q_i(t, y, y', \dots, y^{(i-1)})$ representam os coeficientes de $y^{(i)}$, um modo usual de linearizar esta equação [37], passa por considerar que $y \approx y_m$ e substituir em (4.21) os coeficientes $q_i(t, y, y', \dots, y^{(i-1)})$ por $q_i(t, y_m, y'_m, \dots, y_m^{(i-1)})$ e resolver, iterativamente, problemas auxiliares pelo método Tau, tomando, em cada iteração, a solução calculada y_{m+1} para solução aproximada de y , ou seja, resolvendo em ordem a y_{m+1} a equação linear

$$\sum_{i=0}^{\nu} q_i(t, y_m, y'_m, \dots, y_m^{(i-1)}) y_{m+1}^{(i)} = f(t, y_m, y'_m, \dots, y_m^{(\nu)}), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

Se o processo for convergente é gerada uma sequência de aproximações $y_m(t) \approx y$ para $m = 1, 2, \dots$. O processo termina quando um determinado critério de paragem é estabelecido.

Outra forma de linearizar (4.20), passa por considerar a aproximação linear de Taylor, isto é, se usarmos o facto que $y^{(i)} = y_m^{(i)} + (y^{(i)} - y_m^{(i)})$ então a linearização de (4.20) é dada por

$$F(t, y, y', \dots, y^{(\nu)}) \approx F(\tilde{y}_m) + (y - y_m) \left. \frac{\partial F}{\partial y_m} \right|_{\tilde{y}_m} + (y' - y'_m) \left. \frac{\partial F}{\partial y'_m} \right|_{\tilde{y}_m} + \dots \\ + (y^{(\nu)} - y_m^{(\nu)}) \left. \frac{\partial F}{\partial y_m^{(\nu)}} \right|_{\tilde{y}_m}$$

onde $\tilde{y}_m = (t, y_m, y'_m, \dots, y_m^{(\nu)})$. Com esta aproximação, implementamos um processo iterativo, baseado no método Tau, considerando, em cada iteração,

que $y^{(i)} \approx y_{m+1}^{(i)}$, $i = 0, 1, \dots, \nu$, ou seja, que a solução da equação (4.20) será aproximada pela solução da equação

$$F(\tilde{y}_m) + \sum_{i=0}^{\nu} (y_{m+1}^{(i)} - y_m^{(i)}) \left. \frac{\partial F}{\partial y_m^{(i)}} \right|_{\tilde{y}_m} = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.23)$$

Enquanto o primeiro processo está associado a um método de ponto fixo, este segundo processo está associado ao método de Newton [38, 11]. Nas nossas aplicações, do capítulo seguinte, optamos pela linearização do tipo Newton, na tentativa de se obter um processo iterativo de convergência rápida.

4.2.2 Definição do Operador Linear

No nosso trabalho consideramos que o operador diferencial em (4.20) transforma polinómios em polinómios. Como veremos mais à frente, no caso mais geral em que o operador envolve expressões funcionais não polinomiais, nas funções incógnita ou nas suas derivadas, teremos de proceder de forma a reduzir o problema a esta forma.

Seja $F(t, y, y', \dots, y^{(\nu)}) = 0$ uma equação diferencial, onde F representa um operador diferencial não linear. Se F é uma combinação linear das potências de y e das suas derivadas com coeficientes polinomiais então F fica definido por

$$F(t, y, y', \dots, y^{(\nu)}) = \sum_{r=0}^l p_r \prod_{j=0}^{\nu} (y^{(j)})^{n_{rj}}, \quad l, \nu, n_{rj} \in \mathbb{N}_0, \quad p_r \in \mathcal{P} \quad (4.24)$$

Assumindo, que y é aproximado pelo polinómio $y_{m,n} = a_{m,n}P$, com $a_{m,n} = [a_{m,0} \ a_{m,1} \ \dots \ a_{m,n} \ 0 \ \dots]$ e $P = [P_0 \ P_1 \ \dots]^T$, para que a solução de (4.20) seja determinada pelo método Tau é necessário definir um novo operador diferencial linear, $D_{m,n}$, tal que se $y_{m,n} \approx y$ então

$$D_{m,n}y \approx F(t, y, y', \dots, y^{(\nu)})$$

Proposição 4.2.1. *Seja F o operador definido por (4.24) e $D_{m,n}$ o polinómio de Taylor de 1ª ordem de F , centrado em $\tilde{y}_{m,n} = (t, y_{m,n}, y'_{m,n}, \dots, y_{m,n}^{(\nu)})$,*

$$D_{m,n}y = F(\tilde{y}_{m,n}) + \sum_{k=0}^{\nu} (y^{(k)} - y_{m,n}^{(k)}) \left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}} \quad (4.25)$$

Então, $D_{m,n}$ é um operador diferencial linear com coeficientes polinomiais na forma

$$D_{m,n}y = \sum_{k=0}^{\nu} q_{m,k}y^{(k)} + r_m, \quad q_{m,k}, r_m \in \mathcal{P} \quad (4.26)$$

Demonstração. Considerando (4.24), podemos reescrever (4.25) na forma

$$D_{m,n}y = \sum_{k=0}^{\nu} y^{(k)} \left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}} + \sum_{r=0}^l p_r \prod_{j=0}^{\nu} (y^{(j)})^{n_{rj}} - \sum_{k=0}^{\nu} y_{m,n}^{(k)} \left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}}$$

Como,

$$\frac{\partial}{\partial y^{(k)}} \prod_{j=0}^{\nu} (y^{(j)})^{n_{rj}} = \begin{cases} n_{rk} (y^{(k)})^{n_{rk}-1} \prod_{k \neq j=0}^{\nu} (y^{(j)})^{n_{rj}}, & \text{if } n_{rk} \in \mathbb{N} \\ 0, & \text{if } n_{rk} = 0 \end{cases}$$

então,

$$\left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}} = \sum_{r=0}^l n_{rk} p_r (y_{m,n}^{(k)})^{n_{rk}-1} \prod_{k \neq j=0}^{\nu} (y_{m,n}^{(j)})^{n_{rj}}, \quad k = 0, \dots, \nu$$

ou seja, para

$$q_{m,k} = \left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}}$$

e

$$r_m = \sum_{r=0}^l p_r \prod_{j=0}^{\nu} (y^{(j)})^{n_{rj}} - \sum_{k=0}^{\nu} y_{m,n}^{(k)} \left. \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \right|_{\tilde{y}_{m,n}}$$

os coeficientes são polinomiais. $\square$

De notar que, aplicar o método de Newton a (4.20), considerando que F é aproximado pelo operador (4.26) da Proposição 4.2.1, equivale a implementar um processo iterativo para resolver em ordem a y_{m+1} as equações diferenciais lineares

$$D_{m,n}y_{m+1}(t) = 0, \quad m = 0, 1, \dots \quad (4.27)$$

Se juntarmos as condições suplementares, o problema aproximado (4.27) pode ser resolvido através o método Tau.

4.2.3 Cálculo da Matriz Π_v

Proposição 4.2.2. *A matriz Π_v dada por*

$$\Pi_v = \sum_{k=0}^{\nu} \eta^k q_{m,k}(\mu) \quad (4.28)$$

define a ação do operador $D_{m,n}$.

Considerando que $y_{m,n}$ é a solução Tau do problema (4.27), e que em cada iteração os polinómios $r_m = \sum_{i=0}^n r_{m,i} P_i$ e $q_{m,k} = \sum_{i=0}^n q_{m,k,i} P_i$ são os polinómios obtidos na iteração anterior, a forma mais comum de determinar $q_{m,k}(\mu)$ de (4.28) consiste em reescrever o polinómio $q_{m,k}$ na base das potências de t , ou seja, na forma $q_{m,k} = \sum_{i=0}^n q'_{m,k,i} t^i$ e calcular $q_{m,k}(\mu) = \sum_{i=0}^n q'_{m,k,i} \mu^i$. Tal como descrito na Proposição 4.1.4, para que determinar a matriz Π_v é necessário recorrer ao cálculo da matriz inversa de V , o que pode gerar instabilidade numérica. Se em simultâneo seguirmos o trabalho de [33], onde a mudança de base dos polinómios não é exigida, e determinarmos de forma direta os coeficientes de r_m e $q_{m,k}$, é possível contornar a instabilidade numérica observada. Assim, tendo por base a relação de recorrência (3.3), são definidas matrizes auxiliares μ_v e η_v que permitem determinar a matriz Π_v sem recorrer ao cálculo da matriz inversa V^{-1} .

Seja P_i um elemento de uma família de polinómios ortogonais e considere-se a relação de recorrência definida em (3.3). O efeito da multiplicação de t sobre P_i , $i \geq 0$ é dado por

$$\begin{aligned} tP_0 &= \alpha_0 P_1 + \beta_0 P_0 + \gamma_0 P_{-1} = \beta_0 + \alpha_0 P_1 \\ tP_1 &= \alpha_1 P_2 + \beta_1 P_1 + \gamma_1 P_0 = \gamma_1 + \beta_1 P_1 + \alpha_1 P_2 \\ tP_2 &= \alpha_2 P_3 + \beta_2 P_2 + \gamma_2 P_1 = 0 + \gamma_2 P_1 + \beta_2 P_2 + \alpha_2 P_3 \\ &\vdots \end{aligned}$$

A matriz representativa deste efeito, na forma $tP = \mu_v P$, corresponde à

matriz μ_v dada por:

$$\mu_v = \begin{bmatrix} \beta_0 & \alpha_0 & & & \\ \gamma_1 & \beta_1 & \alpha_1 & & \\ & \gamma_2 & \beta_2 & \alpha_2 & \\ & & & & \dots \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

O efeito da derivação sobre os polinômios ortogonais P_i , $i \geq 0$ é dado pela matriz η_v [33]

$$\eta_v = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ \eta_{10} & 0 & & & \\ \eta_{20} & \eta_{21} & 0 & & \\ \eta_{30} & \eta_{31} & \eta_{32} & 0 & \\ & & & & \dots \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

tal que $P' = \eta_v P$, sendo

$$\begin{cases} \eta_{i+1,j} = \frac{1}{\alpha_i} (\alpha_{j-1} \eta_{i,j-1} + (\beta_j - \beta_i) \eta_{i,j} + \gamma_{j+1} \eta_{i,j+1} - \gamma_i \eta_{i-1,j}), & j = 0 : i - 1 \\ \eta_{i+1,i} = \frac{1}{\alpha_i} (1 + \alpha_{i-1} \eta_{i,i-1}) \end{cases}$$

Por outro lado, o processo de linearização da equação (4.20) dá, geralmente, origem a termos cujos coeficientes são constituídos por produtos de polinômios. Considerando que os polinômios estão representados numa base de polinômios ortogonais, se determinarmos de forma direta os coeficientes resultantes desse produto, sem recorrer à mudança para a base das potências, evitamos a instabilidade numérica que resulta do cálculo da inversão de matrizes, nomeadamente da matriz V^{-1} , sendo V a matriz definida em (3.1.7).

4.2.4 Coeficientes de Linearização

O recurso aos coeficientes de linearização permite determinar diretamente os coeficientes do produto de polinômios ortogonais, sem recorrer à mudança de base.

Definição 4.2.3. *Sejam P_i , Q_j e R_k elementos das famílias de polinômios $\{P_i, i \in \mathbb{N}_0\}$, $\{Q_j, j \in \mathbb{N}_0\}$ e $\{R_k, k \in \mathbb{N}_0\}$. Designam-se por coeficientes de linearização os valores $l_{i,j,k}$ da expansão*

$$P_i(t)Q_j(t) = \sum_{k=0}^{i+j} l_{i,j,k} R_k(t) \quad (4.31)$$

onde $i, j \in \mathbb{N}_0$ e $k = 0, \dots, i + j$.

Se os graus de P_i , Q_j e R_k são respectivamente i , j e k e se os polinómios $\{R_k, k = 0, \dots, i + j\}$ são linearmente independentes então os coeficientes $l_{i,j,k}$ existem e são únicos [2].

Considerando o caso particular em que as três famílias de polinómios da Definição 4.31 são coincidentes, com uma única família de polinómios ortogonais, estão garantidas as condições de existência e de unicidade dos coeficientes de linearização.

Proposição 4.2.4. *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma SPO que satisfaz (3.3). Uma relação de recorrência para os coeficientes de linearização $l_{i,j,k}$ de $P_i(t)P_j(t)$ é dada por*

$$l_{i,j+1,k} = \frac{1}{\alpha_j} [\alpha_i l_{i+1,j,k} - \gamma_j l_{i,j-1,k} + (\beta_i - \beta_j) l_{i,j,k} + \gamma_i l_{i-1,j,k}] \quad (4.32)$$

com os valores iniciais

$$\begin{cases} l_{i,0,k} = \delta_{ik} \\ l_{i,1,i-1} = \gamma_i \\ l_{i,1,i} = \beta_i \\ l_{i,1,i+1} = \alpha_i \\ l_{i,1,j} = 0 \text{ sempre que } |j - i| > 1 \end{cases} \quad (4.33)$$

para $k = 0, \dots, i + j + 1$.

Demonstração. Reescrevendo a relação de recorrência (3.3) na forma

$$P_{j+1} = \frac{1}{\alpha_j} (t - \beta_j) P_j - \frac{\gamma_j}{\alpha_j} P_{j-1}$$

multiplicando ambos os membros da equação por P_i e aplicando (3.3) ao produto tP_i , obtemos

$$P_i P_{j+1} = \frac{1}{\alpha_j} (\alpha_i P_{i+1} + \beta_i P_i + \gamma_i P_{i-1}) P_j - \frac{\beta_j}{\alpha_j} P_i P_j - \frac{\gamma_j}{\alpha_j} P_i P_{j-1}$$

isto é,

$$P_i P_{j+1} = \frac{\alpha_i}{\alpha_j} P_{i+1} P_j + \frac{\beta_i - \beta_j}{\alpha_j} P_i P_j + \frac{\gamma_i}{\alpha_j} P_{i-1} P_j - \frac{\gamma_j}{\alpha_j} P_i P_{j-1} \quad (4.34)$$

Decorre da Definição 4.2.3 que

$$P_i P_{j+1} = \sum_{k=0}^{i+j+1} l_{i,j+1,k} P_k$$

logo, a equação (4.34) é equivalente à equação

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{i+j+1} l_{i,j+1,k} P_k &= \frac{\alpha_i}{\alpha_j} \sum_{k=0}^{i+j+1} l_{i+1,j,k} P_k \\ &+ \frac{\gamma_i}{\alpha_j} \sum_{k=0}^{i+j-1} l_{i-1,j,k} P_k + \frac{\beta_i - \beta_j}{\alpha_j} \sum_{k=0}^{i+j} l_{i,j,k} P_k - \frac{\gamma_j}{\alpha_i} \sum_{k=0}^{i+j-1} l_{i,j-1,k} P_k \end{aligned} \quad (4.35)$$

da qual resulta, identificando os coeficientes homólogos, que para $k = 0, \dots, i+j+1$

$$l_{i,j+1,k} = \frac{1}{\alpha_j} [\alpha_i l_{i+1,j,k} - \gamma_j l_{i,j-1,k} + (\beta_i - \beta_j) l_{i,j,k} + \gamma_i l_{i-1,j,k}] \quad (4.36)$$

Para implementar a relação de recorrência (4.36) são necessários valores iniciais para os coeficientes de linearização. Assim, como o coeficiente $l_{i,0,k}$ resulta do produto $P_i P_0 = P_i$ então

$$l_{i,0,k} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = k \\ 0 & \text{se } i \neq k \end{cases}$$

Os 4 últimos coeficientes de linearização de (4.33) resultam do facto de $P_i P_1 = \sum_{k=0}^{i+1} l_{i,1,k} P_k$ e, se

- $k = i - 1$ então $l_{i,1,i-1} = \gamma_i$;
- $k = i$ então $l_{i,1,i} = \beta_i$;
- $k = i + 1$ então $l_{i,1,i+1} = \alpha_i$;
- $k = j$ então $l_{i,1,j} = 0$ sempre que $|j - i| > 1$.

□

A fórmula (4.36) é designada por *fórmula da cruz* porque, para cada valor fixo de k , estão envolvidos cinco coeficientes de linearização, que dispostos numa tabela, pela ordem natural induzida pelos índices i e j , ocupam as

posições relativas $\begin{matrix} \bullet \\ \bullet \cdot * \\ \bullet \end{matrix}$, onde $*$ representa a posição do coeficiente $l_{i,j+1,k}$ e $\bullet$ representa a posição dos coeficientes de linearização do segundo membro de (4.36). Esta fórmula é válida para $k = 0, \dots, i + j + 1$ se considerarmos que $l_{i,j,k} = 0, \forall k > i + j$.

Note-se que com estes valores (4.33), e sabendo que os coeficientes $l_{i,j,k}$ e $l_{j,i,k}$ são iguais, $\forall i, j, k \in \mathbb{N}_0$, então é possível calcular os valores das duas primeiras linhas e das duas primeiras colunas de uma tabela $\{l_{ijk}, i, j = 0, 1, \dots\}$. Com a fórmula (4.36) podemos calcular, por recorrência, os valores das colunas seguintes.

Este processo poderá ser dispendioso, do ponto de vista do esforço de cálculo, se apenas necessitarmos de um conjunto de valores $\{l_{mnk}, k = 0, 1, \dots, m + n\}$ para m e n fixos.

Podemos, analogamente, obter outras fórmulas de recorrência para os coeficientes de linearização, uma vez que a relação de recorrência dos polinómios ortogonais (3.3) pode ser aplicada de modos distintos. Por exemplo, multiplicando por t ambos os membros da igualdade (4.2.4)

$$tP_i P_j = \sum_{k=0}^{i+j} l_{i,j,k} tP_k$$

obtemos, conforme associarmos tP_i ou tP_j , respetivamente, para $k = 0, \dots, i + j$

$$l_{i,j,k+1} = \frac{1}{\gamma_{k+1}} [\alpha_j l_{i,j+1,k} + (\beta_j - \beta_k) l_{i,j,k} + \gamma_j l_{i,j-1,k} - \alpha_{k-1} l_{i,j,k-1}]$$

$$l_{i,j,k+1} = \frac{1}{\gamma_{k+1}} [\alpha_i l_{i+1,j,k} + (\beta_j - \beta_k) l_{i,j,k} + \gamma_i l_{i-1,j,k} - \alpha_{k-1} l_{i,j,k-1}]$$

Para efeito da aplicação do método Tau a problemas não lineares, os coeficientes de linearização permitem calcular os coeficientes do produto de

dois polinómios definidos numa base de polinómios ortogonais, partindo do conhecimento dos seus coeficientes, definidos na mesma base.

Outras fórmulas podem obter-se conhecendo propriedades particulares dos polinómios envolvidos.

4.2.5 Coeficientes de Linearização dos Polinómios Ortogonais Clássicos

No caso do produto de polinómios representados numa base de polinómios ortogonais clássicos, as propriedades de que gozam estes polinómios permitem obter fórmulas particulares, e mais eficientes, para os coeficientes de linearização. Provou-se, em [43], que os coeficientes de linearização $l_{i,j,k}$, provenientes de polinómios ortogonais clássicos, satisfazem uma relação de recorrência a três termos, conforme a proposição seguinte.

Proposição 4.2.5. *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma SPO clássicos que satisfaz (3.3). Os coeficientes de linearização $l_{i,j,k}$ satisfazem a seguinte relação de recorrência a três termos*

$$A_0(k)l_{i,j,k-1} + A_1(k)l_{i,j,k} + A_2(k)l_{i,j,k+1} = 0$$

com $|i - j| + 1 \leq k \leq i + j$ e $A_i(k)$, $i = 0, 1, 2$, a representarem coeficientes que envolvem apenas os índices k .

Demonstração. Ver [43]. □

De forma explícita ou através de relações de recorrência, é possível encontrar fórmulas de cálculo destes coeficientes.

Proposição 4.2.6. *Seja $\{P_i\}_{i \geq 0}$ uma SPO clássicos que satisfaz (3.3). Os coeficientes de linearização $l_{i,j,k}$ de*

$$P_i P_j = \sum_{k=|i-j|}^{i+j} l_{ijk} P_k, \quad i, j \in \mathbb{N}_0$$

satisfazem a relação

$$\begin{cases} A_k l_{i,j,k-1} = B_k \frac{s_k}{s_{k-1}} l_{i,j,k} + C_k \frac{s_{k+1}}{s_{k-1}} l_{i,j,k+1}, & k = |i-j| + 1, \dots, i+j \\ l_{i,j,i+j} = \frac{a_i a_j}{a_{i+j}} \\ l_{i,j,i+j+1} = 0 \end{cases} \quad i, j \in \mathbb{N}_0 \quad (4.37)$$

onde

$$\begin{cases} A_k = (\gamma_k N'_{k-1} + c_k M_{k-1})(b_k - G') + (\gamma_k G' + c_k)(b_i - b_j)^2, \\ B_k = (\beta_k N'_k + d_k M_k + N_k(0))(G' - b_k) + (\beta_k G' + d_k + G(0))(b_i - b_j)^2, \\ C_k = (G' - b_k)(N'_{k+1} \alpha_k + M_{k+1} e_k) + (\alpha_k G' + e_k)(b_i - b_k)^2, \\ G = g_1 - g'_2, \\ N_k = (b_k - b_i - b_j)g'_2 - b_k g_1, \\ M_k = b_k - 2b_i - 2b_j \end{cases}$$

As funções g_1 e g_2 assim como a constante b_n estão definidas em (3.6), c_n, d_n e e_n são as constantes de (3.7) e α_k, β_k e γ_k são as constantes do Teorema 3.3.

Demonstração. Ver [32]. □

No caso particular dos polinómios ortogonais clássicos descritos em 3.1.2, tem-se que:

Polinómios de Hermite

Sejam H_k , $k \in \mathbb{N}_0$ os polinómios de Hermite com norma $s_k = k!2^k \sqrt{\pi}$. Uma relação de recorrência para os coeficientes de linearização de $H_i H_j$ é dada por

$$\begin{cases} l_{i,j,k-1} = \frac{(k+1)^2 - (i-j)^2}{k-i-j-1} l_{i,j,k+1}, & k = |i-j| + 1, \dots, i+j \\ l_{i,j,i+j} = 1, \\ l_{i,j,i+j+1} = 0 \end{cases} \quad i, j \in \mathbb{N}_0$$

Polinómios de Laguerre

Se $L_k^{(\alpha)}$, $k \in \mathbb{N}_0$ são os polinómios de Laguerre com norma

$$s_k = \Gamma(\alpha + k + 1)/k!,$$

então

$$\begin{cases} l_{i,j,k-1} = \left[\frac{(k+1)^2 - (i-j)^2}{2k(k-i-j-1)} + \frac{2k+1}{2k} \right] l_{i,j,k} \\ \quad - \frac{(k+\alpha+1)[(k+1)^2 - (i-j)^2]}{2k(k+1)(k-i-j-1)} l_{i,j,k+1}, \quad k = |i-j| + 1, \dots, i+j \\ l_{i,j,i+j} = \binom{i+j}{i}, \\ l_{i,j,i+j+1} = 0 \end{cases} \quad i, j \in \mathbb{N}_0$$

Polinómios de Bessel

Se Y_k^α , $k \in \mathbb{N}_0$, são os polinómios de Bessel tais que $s_k = \frac{2(-1)^{k+1}k!}{(2k+\alpha+1)(\alpha+1)_k}$,

então

$$\begin{aligned} A_k l_{i,j,k-1} &= \frac{(2k+\alpha-1)k}{(2k+\alpha+1)(k+\alpha)} B_k l_{i,j,k} \\ &\quad - \frac{(2k+\alpha-1)k(k+1)}{(2k+\alpha+3)(k+\alpha)(k+\alpha+1)} C_k l_{i,j,k+1}, \quad k = |i-j| + 1, \dots, i+j \end{aligned}$$

com,

$$\begin{cases} l_{i,j,i+j} = \frac{(\alpha+i+1)_i (\alpha+j+1)_j}{(\alpha+i+j+1)_{i+j}}, \\ l_{i,j,i+j+1} = 0 \end{cases} \quad i, j \in \mathbb{N}_0$$

onde

$$\begin{cases} A_k = k(k+1)(2k+\alpha+2)[(k+\alpha)^2 - (i-j)^2][(k+\alpha)^2 - (i+j+\alpha+1)^2], \\ B_k = -2(k+1)(2k+\alpha+1)(k+\alpha) \\ \quad \times [b_k^2 + (b_k - b_i - b_j)(2b_k - \alpha) - (b_i - b_j)^2], \\ C_k = (k+\alpha)(k+\alpha+1)(2k+\alpha) \\ \quad \times [(k+1)^2 - (i-j)^2][(k+1)^2 - (i+j+\alpha+1)^2], \\ b_k = -k(k+\alpha+1) \end{cases}$$

Polinómios de Jacobi

Sejam $P_k^{(\alpha,\beta)}$, $k \in \mathbb{N}_0$ os polinómios de Jacobi tais que $P_k^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{k+\alpha}{k}$,

então os coeficientes A_k , B_k e C_k de (4.37) são determinados por

$$\begin{cases} \alpha_k = \frac{2(k+1)(k+\gamma)}{(2k+\gamma)(2k+\gamma+1)} & e_k = -\frac{2k(k+1)(k+\gamma)}{(2k+\gamma)(2k+\gamma+1)}, \\ \beta_k = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{(2k+\gamma-1)(2k+\gamma+1)} & d_k = \frac{k(\alpha-\beta)(2(k+\gamma)+\alpha+\beta)}{(2k+\gamma-1)(2k+\gamma+1)}, \\ \gamma_k = \frac{2(k+\alpha)(k+\beta)}{(2k+\gamma)(2k+\gamma-1)} & c_k = \frac{2(k+\alpha)(k+\beta)(k+\gamma)}{(2k+\gamma)(2k+\gamma-1)}, \\ g_1 = (\gamma+1)t + \alpha - \beta & g_2 = t^2 - 1, \\ b_k = -k(k+\gamma) & \gamma = \alpha + \beta + 1 \end{cases}$$

Para efeito da aplicação do método Tau, destacamos os polinómios de Chebyshev e de Legendre, que como vimos em 3.1.2 são casos particulares dos polinómios de Jacobi. Para estas duas famílias de polinómios ortogonais são conhecidas fórmulas explícitas para os coeficientes de linearização $l_{i,j,k}$, reduzindo o esforço de cálculo necessário.

Estes produtos de polinómios ocorrem no cálculo dos coeficientes dos polinómios $q_{m,k}$ e r_m em (4.26). Calculados os coeficientes de y_m , e das suas derivadas, numa base de polinómios ortogonais, a utilização dos coeficientes de linearização permite calcular os coeficientes de $q_{m,k}$ e de r_m , na mesma base de polinómios ortogonais, sem necessidade de passar pelos coeficientes da representação destes polinómios na base das potências.

Em [17] a estabilidade do método Tau é ilustrada após a introdução dos coeficientes de linearização no método.

4.2.6 Coeficientes do Produto de Polinómios

Sejam p e q dois polinómios representados na base de polinómios $\{P_k, k \in \mathbb{N}_0\}$. Para efeitos de simplificação das fórmulas, podemos supor sem perda de generalidade que $m = n$. Caso contrário, podemos fazer $n = \max\{m, n\}$ e acrescentar coeficientes nulos ao polinómio de menor grau. Nestas condições, é possível estabelecer fórmulas para o produto de polinómios.

Proposição 4.2.7. *Sejam $p = \sum_{i=0}^n a_i P_i$ e $q = \sum_{j=0}^n b_j P_j$ dois polinómios representados na base de polinómios $\{P_k, k \in \mathbb{N}_0\}$. O produto pq é dado por*

$$pq = \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i P_i^2 + \sum_{j=1}^{n-i} (a_i b_{i+j} + a_{i+j} b_i) P_i P_{i+j} \right] \quad (4.38)$$

Demonstração.

$$\begin{aligned} pq &= \left(\sum_{i=0}^n a_i P_i \right) \left(\sum_{j=0}^n b_j P_j \right) \\ &= \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i P_i^2 + \sum_{j=0}^{i-1} (a_i b_j + a_j b_i) P_i P_j \right] \end{aligned}$$

Rearranjando índices, esta fórmula pode escrever-se na forma (4.38) □

Note-se que o recurso aos coeficientes de linearização, $l_{i,j,k}$ da Definição 4.2.3, necessita do conjunto de valores $\{l_{i,i+j,k}, k = 0, \dots, 2i+j, j = 1, \dots, n-i, i = 0, \dots, n\}$. Com a implementação de (4.36) aplicada à fórmula (4.38) é possível calcular o vetor dos coeficientes do polinómio pq na mesma base $\{P_k, k = 0, \dots, 2n\}$ em que são representados os polinómios p e q .

Produto de polinómios na base de Chebyshev

Como vimos, os polinómios de Chebyshev podem definir-se pela equação $T_n(t) = \cos(n \arccos(t))$ e, por outro lado, para o cosseno é válida a fórmula de transformação

$$\cos(m\theta) \cos(n\theta) = \frac{1}{2} \cos((m+n)\theta) + \frac{1}{2} \cos((m-n)\theta)$$

Associando as duas equações, obtemos a seguinte fórmula de linearização

$$T_m T_n = \frac{1}{2} T_{m+n} + \frac{1}{2} T_{|m-n|}, \quad m, n \in \mathbb{N}_0$$

ou, de forma equivalente

$$T_i T_{i+k} = \frac{1}{2} T_k + \frac{1}{2} T_{2i+k}, \quad i, k \in \mathbb{N}_0 \quad (4.39)$$

De acordo com (4.38), o produto de dois polinómios representados na base de Chebyshev é dado por

$$pq = \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i T_i^2 + \sum_{k=1}^{n-i} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) T_i T_{k+i} \right] \quad (4.40)$$

que usando a fórmula de linearização (4.39), a equação (4.40) é equivalente à equação

$$\begin{aligned} pq &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n a_i b_i (T_0 + T_{2i}) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=1}^{n-i} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) (T_k + T_{k+2i}) \\ &= \left(a_0 b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i b_i \right) T_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=1}^{n-i} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) T_k \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=1}^{n-i} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) T_{k+2i} \end{aligned}$$

Rearranjando os índices na última parcela da equação,

$$pq = \left(a_0 b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i b_i \right) T_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=1}^{n-i} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) T_k \\ + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=1+2i}^{n+i} (a_i b_{k-i} + a_{k-i} b_i) T_k$$

Proposição 4.2.8. *Sejam $p = \sum_{i=0}^n a_i T_i$ e $q = \sum_{i=0}^n b_i T_i$ dois polinómios representados na base de Chebyshev. Os coeficientes do produto pq , são os coeficientes c_k da expansão $pq = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{2n} c_k T_k$ dados por*

$$c_k = \begin{cases} 2a_0 b_0 + \sum_{i=1}^n a_i b_i, & k = 0 \\ c'_k + \sum_{i=0}^{n-k} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) + \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor} (a_i b_{k-i} + a_{k-i} b_i), & k = 1, \dots, n \\ c'_k + \sum_{i=k-n}^{\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor} (a_i b_{k-i} + a_{k-i} b_i), & k = n+1, \dots, 2n-1 \\ a_n b_n, & k = 2n \end{cases}$$

com $c'_k = a_{k/2} b_{k/2}$ se k é par e zero caso contrário e $\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor$ a representar a parte inteira de $\frac{k-1}{2}$.

Demonstração. A prova é realizada usando indução.

Para $n = 1$, o produto de dois polinómios, p_1 e q_1 , representados na base de Chebyshev é dado por

$$p_1 q_1 = (a_0 T_0 + a_1 T_1)(b_0 T_0 + b_1 T_1) = (a_0 b_0 + \frac{1}{2} a_1 b_1) T_0 + (a_1 b_0 + a_0 b_1) T_1 + \frac{1}{2} a_1 b_1 T_2$$

Por outro lado, utilizando a hipótese com $n = 1$,

$$p_1 q_1 = \frac{1}{2} c_0 T_0 + \frac{1}{2} c_1 T_1 + \frac{1}{2} c_2 T_2 \\ = (a_0 b_0 + \frac{1}{2} a_1 b_1) T_0 + \frac{1}{2} (c'_1 + a_0 b_1 + a_1 b_0 + a_0 b_1 + a_1 b_0) T_1 \\ + \frac{1}{2} (c'_2 + 0) T_2 \\ = (a_0 b_0 + \frac{1}{2} a_1 b_1) T_0 + (a_1 b_0 + a_0 b_1) T_1 + \frac{1}{2} a_1 b_1 T_2$$

logo, para $n = 1$ a igualdade é verificada.

Supondo que a igualdade se verifica para o produto $p_n q_n$ então, pretendemos mostrar que, também, é verdade para o produto $p_{n+1} q_{n+1}$.

Sabendo que

$$\begin{aligned} p_{n+1} q_{n+1} &= (p_n + a_{n+1} T_{n+1})(q_n + b_{n+1} T_{n+1}) \\ &= p_n q_n + (a_{n+1} q_n + b_{n+1} p_n) T_{n+1} + a_{n+1} b_{n+1} T_{n+1}^2 \\ &= \left(a_0 b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i b_i \right) T_0 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2n} c_k T_k + (a_{n+1} q_n + b_{n+1} p_n) T_{n+1} \\ &\quad + a_{n+1} b_{n+1} \left(\frac{1}{2} T_0 + \frac{1}{2} T_{2n+2} \right) \end{aligned}$$

e que a expressão $(a_{n+1} q_n + b_{n+1} p_n) T_{n+1}$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned} (a_{n+1} q_n + b_{n+1} p_n) T_{n+1} &= \sum_{i=0}^n (a_{n+1} b_i + b_{n+1} a_i) T_i T_{n+1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n (a_{n+1} b_i + b_{n+1} a_i) [T_{n+i+1} + T_{n-i+1}] \end{aligned}$$

então, fazendo $n-i+1 = k$ e $n+i+1 = k$, resulta que $(a_{n+1} q_n + b_{n+1} p_n) T_{n+1}$ é igual a

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} (a_{n+1} b_{n+1-k} + b_{n+1} a_{n+1-k}) T_k + \frac{1}{2} \sum_{k=n+1}^{2n+1} (a_{n+1} b_{k-n-1} + b_{n+1} a_{k-n-1}) T_k$$

Deste modo, o produto $p_{n+1} q_{n+1}$ é dado por

$$\begin{aligned} p_{n+1} q_{n+1} &= \left(a_0 b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i b_i \right) T_0 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2n} c_k T_k \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} (a_{n+1} b_{n+1-k} + b_{n+1} a_{n+1-k}) T_k \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=n+1}^{2n+1} (a_{n+1} b_{k-n-1} + b_{n+1} a_{k-n-1}) T_k \\ &\quad + \frac{1}{2} a_{n+1} b_{n+1} T_0 + \frac{1}{2} a_{n+1} b_{n+1} T_{2n+2} \end{aligned} \tag{4.41}$$

Colocando em evidência T_i , $i = 0, \dots, 2n + 1$,

$$\begin{aligned}
p_{n+1}q_{n+1} &= \left(a_0b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i b_i + \frac{1}{2} a_{n+1} b_{n+1} \right) T_0 \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n c_k T_k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} (a_{n+1} b_{n+1-k} + b_{n+1} a_{n+1-k}) T_k \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=n+1}^{2n} c_k T_k + \frac{1}{2} \sum_{k=n+1}^{2n+1} (a_{n+1} b_{k-n-1} + b_{n+1} a_{k-n-1}) T_k \\
&\quad + \frac{1}{2} a_{n+1} b_{n+1} T_{2n+2} \\
&= \left(a_0b_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n+1} a_i b_i \right) T_0 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{2n+2} c_k T_k
\end{aligned} \tag{4.42}$$

com

$$c_k = \begin{cases} c'_k + \sum_{i=0}^{n+1-k} (a_i b_{k+i} + a_{k+i} b_i) + \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor} (a_i b_{k-i} + a_{k-i} b_i), & k = 1, \dots, n+1 \\ c'_k + \sum_{i=k-n-1}^{\lfloor \frac{k-1}{2} \rfloor} (a_i b_{k-i} + a_{k-i} b_i), & k = n+2, \dots, 2n+1 \\ a_{n+1} b_{n+1}, & k = 2n+2 \end{cases} \tag{4.43}$$

□

Produtos de polinómios na base de Legendre

Proposição 4.2.9. *Sejam $\{P_k, k \in \mathbb{N}_0\}$ os polinómios de Legendre com norma $P_k(1) = 1$. Os coeficientes de linearização, $l_{i,i+j,k}$ do produto*

$$P_i P_{i+j} = \sum_{k=j:2}^{2i+j} l_{i,i+j,k} P_k$$

são os coeficientes obtidos pela relação

$$l_{i,i+j,k} = \frac{2k+1}{i+j+k+1} \frac{B_{i+j-k} B_{k-j} B_{k+j}}{B_{2i+j+k}}, \quad i, j, k \in \mathbb{N}_0 \tag{4.44}$$

onde, $B_k = \frac{(k-1)!!}{k!!}$, $k!! = k(k-2)(k-4)\cdots 1$ representa semifactorial de k e $j : 2$ significa que a soma se estende ao subconjunto dos inteiros $\{j, j+2, j+4, \dots, 2i+j-2, 2i+j\}$.

Demonstração. Para o caso dos polinómios de Legendre é conhecida a fórmula seguinte, atribuída a Neumann-Adams [1]

$$P_m P_n = \sum_{r=0}^{\min(m,n)} \frac{2m+2n-4r+1}{2m+2n-2r+1} \frac{A_r A_{m-r} A_{n-r}}{A_{m+n-r}} P_{m+n-2r}, \quad m, n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.45)$$

onde

$$A_m = \frac{1.3.5 \dots (2m-1)}{1.2.3 \dots m} = \frac{2^m (1/2)_m}{m!}$$

e $(a)_m$ representa o símbolo de Pochhammer

$$(a)_m = \begin{cases} 1, & m = 0 \\ a(a+1)\cdots(a+m-1), & m \in \mathbb{N} \end{cases}$$

Os valores de A podem ser calculados pela recorrência:

$$\begin{cases} A_{m+1} = \frac{2m+1}{m+1} A_m \\ A_0 = A_1 = 1 \\ A_{-m} = 0, \quad \forall m \in \mathbb{N} \end{cases}$$

Reescrevendo o produto (4.45) na forma $P_i P_{i+j}$, tem-se que

$$P_i P_{i+j} = \sum_{r=0}^i \frac{4i+2j-4r+1}{4i+2j-2r+1} \frac{A_r A_{i-r} A_{i+j-r}}{A_{2i+j-r}} P_{2i+j-2r}, \quad m, n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.46)$$

Supondo $i \leq j$ e efectuando a troca de índices $k = 2i+j-2r$, obtemos após simplificações que (4.46) é equivalente a

$$P_i P_{i+j} = \sum_{k=j:2}^{2i+j} \frac{2k+1}{2i+j+k+1} \frac{B_{2i+j-k} B_{k-j} B_{k+j}}{B_{2i+j+k}} P_k, \quad i, j \in \mathbb{N}_0 \quad (4.47)$$

Os valores B_k resultam dos valores A_k , e da mudança de índices, e podem escrever-se como

$$B_k = \frac{(k-1)!!}{k!!}.$$

Estes valores podem calcular-se utilizando a recorrência

$$\begin{cases} B_0 = 1, \\ B_{k+2} = \frac{k+1}{k+2} B_k, \quad k \in \mathbb{N}_0 \end{cases}$$

□

Esta fórmula para os coeficientes de linearização do produto de polinómios de Legendre, pode utilizar-se para o cálculo dos coeficientes de Legendre do produto de dois polinómios escritos nesta mesma base.

Proposição 4.2.10. *Sejam $p = \sum_{i=0}^n a_i P_i$ e $q = \sum_{j=0}^n b_j P_j$ dois polinómios representados na base de Legendre. O produto pq é dado por:*

$$pq = \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i \sum_{k=0:2}^{2i} l_{i,i,k} P_k + \sum_{j=1}^{n-i} (a_i b_{i+j} + a_{i+j} b_i) \sum_{k=j:2}^{2i+j} l_{i,i+j,k} P_k \right] \quad (4.48)$$

onde $l_{i,i+j,k}$ são os coeficientes de linearização de (4.44).

Demonstração. Considerando o produto pq de (4.38), e sabendo que a expressão para P_i^2 é obtida de (4.47) quando $j = 0$, tem-se que

$$\begin{aligned} pq &= \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i P_i^2 + \sum_{j=1}^{n-i} (a_i b_{i+j} + a_{i+j} b_i) P_i P_{i+j} \right] \\ &= \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i \sum_{k=0:2}^{2i} \frac{2k+1}{2i+k+1} \frac{B_{2i-k} B_k^2}{B_{2i+k}} P_k \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{i-1} (a_i b_{i+j} + a_{i+j} b_i) \sum_{k=j:2}^{2i+j} \frac{2k+1}{2i+j+k+1} \frac{B_{2i+j-k} B_{k-j} B_{k+j}}{B_{2i+j+k}} P_k \right] \\ &= \sum_{i=0}^n \left[a_i b_i \sum_{k=0:2}^{2i} l_{i,i,k} P_k + \sum_{j=1}^{n-i} (a_i b_{i+j} + a_{i+j} b_i) \sum_{k=j:2}^{2i+j} l_{i,i+j,k} P_k \right] \end{aligned}$$

□

No capítulo seguinte, estas fórmulas são utilizadas no cálculo de produtos de polinómios que ocorrem no processo de linearização de problemas diferenciais não lineares. Como veremos, a utilização destas fórmulas permite reduzir a propagação de erros ocorrida na aplicação do método Tau a estes problemas.

5

Resolução Numérica

Conteúdo

5.1	Método Tau em Problemas Lineares	96
5.1.1	Problema em Horizonte Finito	96
5.1.2	Problema em Horizonte Infinito	100
5.2	Método Tau em Problemas não Lineares	103
5.2.1	Problema em Horizonte Finito	103
5.2.2	Problemas em Horizonte Infinito	108

Neste capítulo ilustramos a aplicabilidade do método Tau na resolução de problemas de controlo ótimo, em particular os problemas descritos no Capítulo 2. Estes problemas estão formulados quer em intervalos de tempo na forma $[t_0, t_f]$, $|t_0| < \infty$, $|t_f| < \infty$, designados de PCO de horizonte finito, quer em intervalos da forma $[0, +\infty[$, designados de PCO de horizonte infinito.

Começamos por mostrar a utilização do método em problemas cuja dinâmica é caracterizada por equações diferenciais lineares. No caso em que o horizonte é infinito, para que a utilização do método fosse possível, foi

necessário recorrer a uma mudança de variável, conduzindo à formulação de um novo operador diferencial.

Aprofundamos a utilização do método aos problemas cuja dinâmica está descrita por equações diferenciais não lineares. Neste caso, começamos por linearizar as equações do problema, definir novos operadores diferenciais e implementar um processo iterativo. Em paralelo, introduzimos os coeficientes de linearização. Deste modo, evitamos a inversão de matrizes, característica da formulação original do método, garantindo uma maior estabilidade no método e permitindo aproximações polinomiais de graus superiores.

5.1 Método Tau em Problemas Lineares

5.1.1 Problema em Horizonte Finito

Consideremos o problema descrito no Exemplo 1. Atendendo às condições (2.9) do Teorema 2.2.3, as trajetórias ótimas são determinadas resolvendo o seguinte problema de valor fronteira

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{1}{2}x + u \\ H_x = -\lambda \\ H_u = 0 \\ x(0) = 1 \\ \lambda(1) = 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

onde

$$H(t, \lambda, x, u) = \frac{5}{8}x^2 + \frac{1}{2}xu + \frac{1}{2}u^2 + \lambda\left(\frac{1}{2}x + u\right), \quad t \in [0, 1]$$

representa a função hamiltoneana, definida em (2.7) e x, u e λ são funções de t . Determinando as expressões para H_x e H_u , tem-se que (5.1) é equivalente

a

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{1}{2}x + u \\ u = -\lambda - \frac{1}{2}x \\ \frac{5}{4}x + \frac{1}{2}u + \frac{1}{2}\lambda = -\dot{\lambda} \\ x(0) = 1 \\ \lambda(1) = 0 \end{cases}$$

Substituindo $u = -\lambda - \frac{1}{2}x$ na primeira e na terceira equações, o problema de valor fronteira a resolver fica descrito por

$$\begin{cases} \dot{x} = -\lambda \\ x = -\dot{\lambda} \\ x(0) = 1 \\ \lambda(1) = 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

De acordo com a Definição 4.1.1, a solução Tau de grau n do problema (5.2) corresponde ao vetor

$$\begin{bmatrix} x_n \\ \lambda_n \end{bmatrix}$$

onde $x_n(t) = \sum_{i=0}^n \mathbf{a}_{1,i} P_i(t)$ e $\lambda_n(t) = \sum_{i=0}^n \mathbf{a}_{2,i} P_i(t)$ são polinómios escritos numa base de polinómios algébricos e $\mathbf{a}_i$, $i = 1, 2$ representa a linha i da matriz definida em (4.8). Se $P_i(t) = t^i$, segundo a Definição 4.1.3, a matriz resultante da acção que o operador D exerce sobre x_n e λ_n é dada por

$$\Pi = \begin{bmatrix} \eta & I \\ I & \eta \end{bmatrix}$$

e, se $P_i(t)$ são polinómios escritos numa base de polinómios ortogonais, pela Definição 4.1.4, a matriz obtida assume a forma

$$\Pi_v = \begin{bmatrix} \eta_v & I \\ I & \eta_v \end{bmatrix}$$

com $\eta_v = V\eta V^{-1}$, matrizes que serão calculadas utilizando as fórmulas (4.29) e (4.30), evitando-se assim a multiplicação por V e por V^{-1} .

Considerando que $x_n(t)$ e $\lambda_n(t)$ são polinômios, que os coeficientes a determinar de x_n e λ_n são dados por $\mathbf{a} = [a_0 \ a_1 \ \dots \ a_{2n+1}]$ então a matriz B que representa as condições fronteira de (5.2) é dada por

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & B_2 \end{bmatrix}$$

onde $\mathbf{0}$ são vetores nulos de comprimento $n + 1$, B_1 e B_2 são os vetores $B_1 = [P_0(0) \ P_1(0) \ \dots \ P_n(0)]^T$ e $B_2 = [P_0(1) \ P_1(1) \ \dots \ P_n(1)]^T$.

Decorre da Definição 4.1.5 que a solução Tau do problema (5.2) fica determinada resolvendo o sistema $\mathbf{a}G = \mathbf{b}$ sendo G a matriz constituída pelas duas colunas de B e pelas matrizes C_1 e C_2 representando, respetivamente, os dois blocos coluna da matriz Π_v truncados, cada um deles, às suas n primeiras colunas.

$$G = \left[B \ \middle| \ C_1 \ \middle| \ C_2 \right]$$

Figura 5.1: $u(t)$ e $u_n(t)$ para diferentes valores de n no problema (5.1).

Sendo

$$u = -\frac{\sinh(1-t) + \frac{1}{2} \cosh(1-t)}{\cosh(1)}, \quad t \in [0, 1].$$

a solução exata do problema (1) e $u_n(t)$ a solução obtida por aplicação do método Tau, com polinómios de Chebyshev no intervalo $[0, 1]$, os resultados numéricos estão apresentados na Figura (5.1). Determinamos aproximações $u_n(t)$ para $n = 2, 5, 8$ e 11 . Como se pode observar, para $n \geq 5$, na escala utilizada, os gráficos parecem estar sobrepostos. Por outro lado, determinando o erro e_n definido em (3.41) e representado na Figura 5.2, verifica-se, tal como era esperado, que à medida que o grau n do polinómio aumenta, reduz-se o respetivo erro em termos da norma $\max_{0 \leq t \leq 1} |e_n(t)|$, chegando a atingir a precisão da máquina para $n = 11$. Podemos concluir, neste caso, que o método Tau, com um custo computacional equivalente à inversão de uma matriz 12×12 , produz uma solução polinomial de grau 11 que, com a precisão da máquina, coincide neste intervalo, com a solução exata.

Figura 5.2: Erros $e_n(t) = u(t) - u_n(t)$ para vários valores de n do problema (5.1).

5.1.2 Problema em Horizonte Infinito

No caso do Exemplo 2 se $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2]^T$, o sistema de equações diferenciais a resolver é dado por

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_1 - x_2 + u, \ t \geq 0 \\ x_1(0) = -4 \\ x_2(0) = 4 \end{cases} \quad (5.3)$$

Assumindo que o integral, $\int_0^\infty (\mathbf{x}^T(t)Q\mathbf{x}(t) + \mathbf{u}^T(t)R\mathbf{u}(t))dt$, existe e é finito, depois de serem aplicadas as condições necessárias (2.9) do Teorema 2.2.3 e de considerarmos a condição de transversalidade (2.13), (5.3) é transformado no seguinte problema de valor fronteira

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_1 - x_2 - 2\lambda_2 \\ \dot{\lambda}_1 = -(2x_1 + 2\lambda_2) \\ \dot{\lambda}_2 = -(x_2 + \lambda_1 - \lambda_2), \ t \geq 0 \\ x_1(0) = -4 \\ x_2(0) = 4 \\ \lambda_1(\infty) = 0 \\ \lambda_2(\infty) = 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

Sendo este um problema definido num intervalo ilimitado, o sistema (5.4) é redefinido num intervalo limitado, usando a transformação definida em (4.13). Se, por exemplo, a solução Tau for obtida usando como base os polinómios de Chebyshev definidos em $[-1, 1]$, isto é $P_i(t) = T_i(t)$, então a transformação a usar é da forma $t = \frac{s+1}{1-s}$. Neste caso, $\frac{dt}{ds} = \frac{2}{(1-s)^2}$ e, o problema (5.4) fica traduzido pelo sistema equações

$$\left\{ \begin{array}{l} (1-s)^2 \dot{x}_1 - 2x_2 = 0 \\ (1-s)^2 \dot{x}_2 - 4x_1 + 2x_2 + 4\lambda_2 = 0 \\ (1-s)^2 \dot{\lambda}_1 + 4x_1 + 4\lambda_2 = 0 \\ (1-s)^2 \dot{\lambda}_2 + 2x_2 + 2\lambda_1 - 2\lambda_2 = 0, \quad s \in [-1, 1[\\ x_1(-1) = -4 \\ x_2(-1) = 4 \\ \lambda_1(1) = 0 \\ \lambda_2(1) = 0 \end{array} \right. \quad (5.5)$$

Considerando o operador $\tilde{D}$ definido em (4.15), note-se que, de acordo com a Definição 3.3.1, a altura de $\tilde{D}$ é $h = 1$, e considerando que a solução de (5.5) é um vetor de funções na forma $y_n = [y_{n1} \ y_{n2} \ y_{n3} \ y_{n4}]^T = [x_1 \ x_2 \ \lambda_1 \ \lambda_2]^T$, onde para $i = 1, \dots, 4$, $y_{ni} = \mathbf{a}_i \mathbf{s}$ sendo $\mathbf{a}_i$ a linha i da matriz (4.8) e $\mathbf{s} = [1 \ s \ s^2 \ \dots \ s^n]^T$, então pela Proposição 4.1.8 a matriz Π é uma matriz na forma

$$\Pi = \begin{bmatrix} (I - \mu)^2 \eta & -4I & 4I & 0 \\ -2I & (I - \mu)^2 \eta + 2I & 0 & 2I \\ 0 & 0 & (I - \mu)^2 \eta & 2I \\ 0 & 4I & 4I & (I - \mu)^2 \eta - 2I \end{bmatrix}$$

Se $\mathbf{s} = [T_0(s) \ T_1(s) \ T_2(s) \ \dots \ T_n(s)]^T$, usamos a relação (4.1.2) da Definição 4.1.4 para determinar as componentes i, j de Π

Considerando que $\Pi = [\Pi_1 \ \Pi_2 \ \Pi_3 \ \Pi_4]$, onde cada Π_i , $i = 1, \dots, 4$ representa, respetivamente, o primeiro membro de cada uma das 4 equações diferenciais de (5.4), a matriz Π pode ser vista como uma matriz de 1×4 blocos, onde cada bloco é uma matriz de dimensão $4(n+1) \times (n+2)$.

Acrescentando à matriz Π 4 novas colunas, representando as condições fronteira de (5.4) dadas pela matriz B

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & B_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & B_3 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & B_4 \end{bmatrix}$$

onde $\mathbf{0} = \underbrace{[0 \dots 0]}_{n+1 \text{ vezes}}^T$, $B_1 = B_2 = [T_0(-1) \ T_1(-1) \ T_2(-1) \ \dots \ T_n(-1)]^T$ e $B_3 = B_4 = [T_0(1) \ T_1(1) \ T_2(1) \ \dots \ T_n(1)]^T$, a solução Tau é obtida resolvendo o sistema da Definição 4.1.5, sendo a matriz $\mathbf{G}$ obtida truncando, as colunas Π_i da matriz $[B \ \Pi_1 \ \Pi_2 \ \Pi_3 \ \Pi_4]$, às suas n primeiras colunas. O vetor $\mathbf{f}$ é dado por $\mathbf{f} = [-4 \ -4 \ \underbrace{0 \ \dots \ 0}_{4n+2 \text{ vezes}}]^T$.

Vamos calcular soluções Tau para diversos valores de n e comparar os resultados obtidos com a solução exata deste problema, que pode ser determinada através da equação matricial de Riccati [3], e é dada por

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\alpha}{2}t} \left((8 - 4\alpha) \sinh\left(\frac{\beta}{2}t\right) - 4\beta \cosh\left(\frac{\beta}{2}t\right) \right) \\ x_2 = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\alpha}{2}t} \left(4\beta \cosh\left(\frac{\beta}{2}t\right) - (2\beta^2 + 4\alpha - 2\alpha^2) \sinh\left(\frac{\beta}{2}t\right) \right) \end{cases}$$

sendo $\alpha = \sqrt{7 + 4\sqrt{2}}$ e $\beta = \sqrt{7 - 4\sqrt{2}}$.

Nas Figuras 5.3 e 5.4 representamos, respetivamente, as trajetórias dos estados x_1 e x_2 juntamente com as soluções Tau $x_{1,n}$ e $x_{2,n}$, representadas por polinómios de grau 19. Como se pode observar, parece haver sobreposição gráfica entre a solução x_i e a solução aproximada $x_{i,n}$, $i = 1, 2$, levando-nos a efetuar um zoom, em torno de zero, que nos permite comparar o comportamento da solução Tau com a solução exata, para valores de t em $[0, 700]$, o que nos leva a concluir que a solução obtida pelo método Tau é uma boa aproximação para a solução do problema (5.3), observando-se um erro absoluto máximo inferior a 2×10^{-4} no intervalo $[0, 700]$, com $n = 19$, isto é, com uma matriz 80×80 .

Na Figura 5.5 estão representados, em escala logarítmica, os erros absolutos $e_n(x) = |x_i - x_{i,n}|$, $i = 1, 2$, obtidos para valores crescentes de n . Podemos observar que, à medida que o grau do polinómio aumenta, os erros obtidos diminuem, aproximando-se da precisão da máquina.

Figura 5.3: Solução analítica x_1 (linha castanha) e aproximação Tau $x_{1,19}$ (linha azul) do problema (5.3). Zoom para valores de t em $[0, 700]$.

5.2 Método Tau em Problemas não Lineares

5.2.1 Problema em Horizonte Finito

Consideremos, agora o Exemplo 3 cujas trajetórias serão obtidas após aplicação do Hamiltoniano (2.7), das condições necessárias (2.9) do Teorema 2.2.3 e da condição de transversalidade $\lambda(T) = 0$, com $T = 4.5$, isto é após resolução dos PVF dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -x_1 + 1.4x_2 - px_2^3 - 8\lambda_2 \\ \dot{\lambda}_1 = \lambda_2 - 2x_1 \\ \dot{\lambda}_2 = 3px_2^2\lambda_2 - \lambda_1 - 1.4\lambda_2 \\ x_1(0) = -5 \\ x_2(0) = -5 \\ \lambda_1(4.5) = 0 \\ \lambda_2(4.5) = 0 \end{array} \right. \quad (5.6)$$

Figura 5.4: Solução analítica x_2 (linha castanha) e aproximação Tau $x_{1,19}$ (linha azul) do problema (5.3). Zoom para valores de t em $[0, 700]$.

No sentido de implementar o método Tau, precisamos linearizar a 2ª e 4ª equações de (5.6), usando o polinómio de Taylor da Proposição 4.2.1, dando origem ao sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x}_1 - x_2 = 0 \\ \dot{x}_2 + x_1 - 1.4x_2 + 8\lambda_2 + 3px_{2,m}^2 x_2 = 2p2x_{2,m}^3 \\ \dot{\lambda}_1 - \lambda_2 + 2x_1 = 0 \\ \dot{\lambda}_2 + \lambda_1 + 1.4\lambda_2 - 6px_{2,m}\lambda_{2,m}x_2 - 3px_{2,m}^2 \lambda_2 = -6x_{2,m}^2 \lambda_{2,m} \\ x_1(0) = -5 \\ x_2(0) = -5 \\ \lambda_1(4.5) = 0 \\ \lambda_2(4.5) = 0 \end{array} \right. \quad (5.7)$$

Figura 5.5: Erros $|x_1 - x_{1,n}|$ e $|x_2 - x_{2,n}|$ para diferentes valores de n do problema (5.3).

onde $x_{2,m}$ e $\lambda_{2,m}$ são as aproximações polinomiais para x_2 e λ_2 . A representação matricial de (5.7) corresponde às matrizes

$$\Pi = \begin{bmatrix} \eta & I & 2I & 0 \\ -I & \eta - 1.4I + 3p(x_{2m}(\mu))^2 & 0 & -6px_{2m}(\mu)\lambda_{2m}(\mu) \\ 0 & 0 & \eta & I \\ 0 & 8I & -I & \eta + 1.4I - 3p(x_{2m}(\mu))^2 \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

e

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2px_{2,m}^3 \\ 0 \\ -6x_{2,m}^2\lambda_{20} \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

sendo $x_{2,m}(\mu)$ e $\lambda_{2,m}(\mu)$ as matrizes que resultam de uma combinação linear dos coeficientes de $x_{2,m} = \sum_{i=0}^n a_{i,m}x^i$ e $\lambda_{2,m} = \sum_{i=0}^n b_{i,m}x^i$ com as potências de μ , isto é, $x_{2,m}(\mu) = \sum_{i=0}^n a_{i,m}\mu^i$ e $\lambda_{2,m}(\mu) = \sum_{i=0}^n b_{i,m}\mu^i$. Os aproximantes Tau são

determinados resolvendo o sistema

$$\mathbf{a}G = \mathbf{b}, \quad (5.10)$$

onde $\mathbf{b} = [-5 \ -5 \ 0 \ 0 \ \mathbf{f}]$ e $G = [B \ \Pi_1 \ \Pi_2 \ \Pi_3 \ \Pi_4]$, B é a matriz das condições fronteira de (5.6) calculadas numa base polinomial. Considerando que a solução Tau é calculada, tendo como base os polinómios de Legendre, vamos considerar aproximações iniciais para x_2 e λ_2 os polinómios interpoladores das condições fronteira do problema, a que correspondem aos polinómios $x_{2,1} = -5P_0$ e $\lambda_{2,1} = -4.5P_0 + P_1$, implementamos um procedimento iterativo, onde na m -ésima iteração, os polinómios $x_{2,m}$ e $\lambda_{2,m}$ são representados pelas aproximações Tau, de x_2 e de λ_2 , obtidas na iteração anterior.

Dado que neste problema não é conhecida a solução exata, comparamos a solução Tau com a solução obtida pelo *solver* `bvp4c` do MATLAB. Considerando que o parâmetro p assume o valor 0.14, os resultados numéricos da nossa aproximação foram obtidos usando polinómios de Legendre $P_n(t)$, com $n = 6$, necessitando apenas de 20 iterações para obter a aproximação Tau. Note-se que em cada iteração o custo computacional corresponde ao recálculo da matriz G de dimensão $(4n+4) \times (4n+4)$ e da resolução do sistema linear associado a G . Podemos ver, na Figura 5.6, que ambos os métodos produzem aproximações com comportamento numérico semelhante, no entanto, observamos que o método Tau parece ser menos sensível à alteração do valor do parâmetro p , por exemplo, para $p = 1.14$ continuamos a obter uma solução Tau enquanto que com o `bvp4c`, para que a tolerância do *solver* seja atingida são precisos mais de 2500 pontos da malha.

Aumentando o grau dos polinómios de Legendre, $P_n(t)$, surgem problemas, em particular, no que diz respeito à estabilidade das matrizes envolvidas no método Tau. Esta instabilidade está associada ao cálculo das matrizes $x_{2,m}(\mu)$ e $\lambda_{2,m}(\mu)$, ao facto de os coeficientes dos polinómios $x_{2,m}$ e $\lambda_{2,m}$ serem calculados de forma aproximada e, também, por estes coeficientes respeitarem a uma base de polinómios ortogonais. Por exemplo, considerando a segunda equação de (5.7), o cálculo dos coeficientes de $x_{2,m}^2$, habitualmente, conduz à mudança de base, $x_2 = \boldsymbol{\alpha} \mathbf{v} = \mathbf{a} \mathbf{x}$, com $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{a} V^{-1}$ efetuando-se o produto de $x_{2,m}^2$, na base das potências e retornando-se, à base inicial $\mathbf{v}$, usando mudança de base $\mathbf{x} = V^{-1} \mathbf{v}$, sendo V a matriz inversa de (3.4). Este processo introduz instabilidade numérica no método.

Figura 5.6: Curvas das trajetórias de estado x_1 e x_2 do problema (5.7).

Como forma de contornar esta instabilidade introduzimos, no método Tau os coeficientes de linearização; estes coeficientes, como vimos no capítulo anterior, permitem determinar diretamente os coeficientes do produto de polinômios ortogonais, sem recorrer à mudança de base. Assim, os coeficientes do produto x_{2m}^2 , na base dos polinômios de Legendre, são determinados usando a relação (4.48) da Proposição 4.2.10.

Com a introdução do cálculo dos coeficientes de linearização no método Tau, podemos determinar os aproximantes Tau $x_{1,n}$ e $x_{2,n}$, para valores de n suficientemente grandes, uma vez que evitamos a inversão de matrizes e respetiva instabilidade que surge associada a esta inversão. Na Figura 5.7 podemos comparar os gráficos das trajetórias de estado $x_1(t)$ e $x_2(t)$ determinadas pelo *solver* `bvp4c` do Matlab e pelo método Tau operacional com coeficientes de linearização, usando polinômios de Legendre de grau $n = 20$, efetuando 11 iterações para obter a aproximação Tau. Neste caso, na escala utilizada, parece haver sobreposição gráfica das aproximações geradas pelo *solver* do Matlab e pela nossa rotina. Nas Figuras 5.8 e 5.9 representamos a diferença, em valor absoluto, entre dois aproximantes Tau con-

Figura 5.7: x_1 e x_2 usando coeficientes de linearização no método Tau, efetuando 11 iterações, com polinômios de grau $n = 20$, para o problema (5.7).

secutivos, isto é, $|x_{1,n+1} - x_{1,n}|$ e $|x_{2,n+1} - x_{2,n}|$ para valores de $n = 4, 8, 12, 16, 20$ efetuando, respetivamente, 11 e 21 iterações.

Como se pode observar, aumentar o grau n do aproximante conduz a uma diminuição do valor de $|x_{i,n+1} - x_{i,n}|$, $i = 1, 2$ e aumentando, para o mesmo valor n , o número de iterações efetuadas verificamos que a precisão da máquina é atingida muito rapidamente levando-nos a concluir que com a introdução dos coeficientes de linearização no método, melhoramos significativamente a aproximação Tau representativa da solução do problema (3).

Note-se que, como resulta de simples observação das equações (5.7), se as sucessões de polinômios $x_{i,n}$ e $\lambda_{i,n}$, com $i = 1, 2$, convergem, então os respetivos limites destas sucessões constituem as soluções exatas do problema (5.6).

5.2.2 Problemas em Horizonte Infinito

Nesta secção tratamos dois PCO que se traduzem em sistemas de equações diferenciais não lineares, ambos no intervalo de tempo $[0, \infty[$ e com condições nos dois extremos deste intervalo. No primeiro caso, os termos não lineares constituem produtos das funções incógnitas e, conseqüentemente, o processo de line-

Figura 5.8: $|x_{1,n+1} - x_{1,n}|$ e $|x_{2,n+1} - x_{2,n}|$ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 11 iterações, utilizando polinômios de Legendre, no problema (5.7).

linearização dá origem a operadores diferenciais lineares que transformam polinômios em polinômios. Pelo contrário, no segundo exemplo, tratando-se de um operador diferencial funcional não polinomial, o processo de linearização produz operadores diferenciais fora do domínio de aplicabilidade do método Tau. No Exemplo 4 estamos na presença de um problema não linear com horizonte de tempo infinito:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min J = \frac{1}{2} \int_0^\infty (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) dt \\ \text{s.a} \\ \dot{x}_1 = A_1 x_2 x_3 + \frac{1}{I_1} u_1 \\ \dot{x}_2 = A_2 x_1 x_3 + \frac{1}{I_2} u_2 \\ \dot{x}_3 = A_3 x_1 x_2 + \frac{1}{I_3} u_3 \\ x_1(0) = 0.01, \quad x_2(0) = 0.005, \quad x_3(0) = 0.001 \end{array} \right. \quad (5.11)$$

Aplicamos o Hamiltoniano (2.7) e as condições necessárias de otimalidade (2.9). Linearizamos as equações do sistema usando o polinômio de Taylor da Proposição

Figura 5.9: $|x_{1,n+1} - x_{1,n}|$ e $|x_{2,n+1} - x_{2,n}|$ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 21 iterações, utilizando polinômios de Legendre, no problema (5.7).

4.2.1, centrado em $x_{i,m}$, $i = 1, 2, 3$ e $m = 0, 1, \dots$, dando origem ao sistema

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = A_1(x_{3,m}x_2 + x_{2,m}x_3 - x_{2,m}x_{3,m}) - \frac{\lambda_1}{(I_1)^2} \\ \dot{x}_2 = A_2(x_{3,m}x_1 + x_{1,m}x_3 - x_{1,m}x_{3,m}) - \frac{\lambda_2}{(I_2)^2} \\ \dot{x}_3 = A_3(x_{2,m}x_1 + x_{1,m}x_2 - x_{1,m}x_{2,m}) - \frac{\lambda_3}{(I_3)^2} \\ \dot{\lambda}_1 = -(x_1 + A_2(\lambda_{2,m}x_3 + x_{3,m}\lambda_2 - x_{3,m}\lambda_{2,m})) + A_3(\lambda_{3,m}x_2 + x_{2,m}\lambda_3 - x_{2,m}\lambda_{3,m}) \\ \dot{\lambda}_2 = -(x_2 + A_1(\lambda_{1,m}x_3 + x_{3,m}\lambda_1 - x_{3,m}\lambda_{1,m})) + A_3(\lambda_{3,m}x_1 + x_{1,m}\lambda_3 - x_{1,m}\lambda_{3,m}) \\ \dot{\lambda}_3 = -(x_3 + A_1(\lambda_{1,m}x_2 + x_{2,m}\lambda_1 - x_{2,m}\lambda_{1,m})) + A_2(\lambda_{2,m}x_1 + x_{1,m}\lambda_2 - x_{1,m}\lambda_{2,m}) \end{cases} \quad (5.12)$$

com condições fronteira

$$\begin{cases} x_1(0) = 0.01, & x_2(0) = 0.005, & x_3(0) = 0.001 \\ \lambda_1(\infty) = \lambda_2(\infty) = \lambda_3(\infty) = 0 \end{cases}$$

onde, $A_1 = -\frac{I_3 - I_2}{I_1}$, $A_2 = -\frac{I_1 - I_3}{I_2}$, $A_3 = -\frac{I_2 - I_1}{I_3}$, $I_1 = 86.24$, $I_2 = 85.07$ e $I_3 = 113.59$ são os parâmetros usados em [27].

A matriz Π e o vetor $\mathbf{f}$ são dados por

$$\Pi = \begin{bmatrix} \eta & -A_2x_{3,m}(\mu) & -A_3x_{2,m}(\mu) & I & A_3\lambda_{3,m}(\mu) & A_2\lambda_{2,m}(\mu) \\ -A_1x_{3,m}(\mu) & \eta & -A_3x_{1,m}(\mu) & A_3\lambda_{3,m}(\mu) & I & A_1\lambda_{1,m}(\mu) \\ -A_1x_{2,m}(\mu) & -A_2x_{1,m}(\mu) & \eta & A_2\lambda_{2,m}(\mu) & A_1\lambda_{1,m}(\mu) & I \\ \frac{I}{I_1^2} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \eta & A_1x_{3,m}(\mu) & A_1x_{2,m}(\mu) \\ \mathbf{0} & \frac{I}{I_2^2} & \mathbf{0} & A_2x_{3,m}(\mu) & \eta & A_2x_{1,m}(\mu) \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \frac{I}{I_3^2} & A_3x_{2,m}(\mu) & A_3x_{1,m}(\mu) & \eta \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} -A_1x_{2,m}x_{3,m} \\ -A_2x_{1,m}x_{3,m} \\ -A_3x_{1,m}x_{2,m} \\ A_2x_{3,m}\lambda_{2,m} - A_3x_{2,m}\lambda_{3,m} \\ A_1x_{3,m}\lambda_{1,m} - A_3x_{1,m}\lambda_{3,m} \\ A_1x_{2,m}\lambda_{1,m} - A_2x_{1,m}\lambda_{2,m} \end{bmatrix}$$

As condições fronteira $\lambda_i(\infty) = 0$, $i = 1, 2, 3$ foram substituídas pelas condições $\lambda_i(L) = 0$, $i = 1, 2, 3$, para L suficientemente grande.

Comparamos a solução Tau com a solução do *solver* `bvp4c` do MATLAB, considerando o intervalo de tempo $[0, 1000]$ na representação dos controlos u_1 , u_2 e u_3 . Verificamos, tal como no Exemplo 3, que ao implementar o processo iterativo para determinar as soluções Tau, à medida que o grau dos polinómios aumenta, começam a surgir instabilidades numéricas nos resultados. Introduzidos os coeficientes de lienarização, foi possível determinar os aproximantes Tau com graus superiores aos obtidos pelo método sem esta modificação. Neste exemplo, foram usados polinómios de Chebyshev T_n com $n \leq 35$ para as aproximações Tau, quer dos estados x_i , quer dos controlos u_i , $i = 1, 2, 3$. Na Figura 5.10 representamos a diferença, em valor absoluto, entre dois aproximantes Tau consecutivos dos controlos, u_i , $i = 1, 2, 3$, para valores de $n = \{4, 10, 16, 22, 28, 34\}$. Para cada grau n utilizado, foram suficientes 6 iterações para calcular os coeficientes de Chebyshev, de cada uma das funções de estado x_i , com uma tolerância de 10^{-16} . Cada iteração representa o esforço computacional de resolver um sistema de equações lineares com uma matriz de dimensão $6(n + 1)$.

Figura 5.10: $|u_{i,n+1} - u_{i,n}|$, $i = 1, 2, 3$ usando coeficientes de linearização no método Tau, com 6 iterações, usando polinômios de Chebyshev, no problema (5.12).

Problema de Ramsey

O modelo de Ramsey-Cass-Koopmans (RCK) é um modelo neoclássico de crescimento ótimo, com horizonte infinito, considerado, ainda hoje, um modelo de referência nos modelos de crescimento econômico. Este modelo representa uma economia com apenas um setor onde, em mercados competitivos, as famílias e as firmas interagem com comportamentos otimizantes. O problema de controle ótimo associado a este modelo pode ser descrito por

$$\max_{c(t)} \int_0^{\infty} \frac{(c(t)e^{gt})^{1-\theta}}{1-\theta} e^{-(\rho-n)t} dt \quad (5.13)$$

onde ρ, n, θ e g são parâmetros com $\rho > n > 0$, $\theta > 0 \wedge \theta \neq 1$ e $g(1-\theta) - (\rho-n) < 0$ e sujeito às condições:

$$\begin{cases} \dot{k}(t) = f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g) \\ k(0) = k_0 > 0 \end{cases} \quad (5.14)$$

A função desempenho de (5.13) pode ser escrita na forma $u(c(t))e^{(g-g\theta+n)t}e^{-\rho t}$, onde $u(c(t)) = \frac{(c(t))^{1-\theta}}{1-\theta}$, por hipótese é uma função positiva, crescente e côncava. Sobre a função f , sabe-se que é uma função positiva e, ambas as funções, u e

f , satisfazem as condições de Inada.¹ Como, neste problema, a função desempenho apresenta um fator de desconto na forma $e^{-\rho t}$, as condições necessárias são determinadas em função do Hamiltoniano corrente, H_c , definido em (2.16), isto é,

$$H_c = \frac{(c(t))^{1-\theta}}{1-\theta} e^{(g-g\theta+n)t} + e^{\rho t} \lambda(t) (f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g))$$

traduzindo-se, tais condições, em

$$\frac{\partial H_c}{\partial c} = 0 \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial H_c}{\partial k} = \rho\mu - \dot{\mu} \quad (5.16)$$

com $\mu = \lambda e^{\rho t}$.

Da condição (5.15) resulta que $\lambda(t) = (c(t))^{-\theta} e^{(g-g\theta+n-\rho)t}$, ou ainda que

$$\frac{\dot{\lambda}(t)}{\lambda(t)} = -\theta \frac{\dot{c}(t)}{c(t)} + g - g\theta + n - \rho \quad (5.17)$$

Da condição (5.16), obtém-se que

$$\frac{\dot{\lambda}(t)}{\lambda(t)} = \delta + n + g - f'(k(t)) \quad (5.18)$$

Igualando as equações (5.17) e (5.18), tem-se que

$$\frac{\dot{c}(t)}{c(t)} = \frac{1}{\theta} (f'(k(t)) - (\delta + g\theta + \rho))$$

A função f é a função Cobb-Douglas [4], com $f(k(t)) = (k(t))^\alpha$, $0 < \alpha < 1$, o problema(5.13) reduz-se à resolução do seguinte sistema de equações diferenciais

$$\begin{cases} \dot{k}(t) = (k(t))^\alpha - c(t) - k(t)(\delta + n + g) \\ \dot{c}(t) = \frac{1}{\theta} \alpha (k(t))^{\alpha-1} c(t) - \frac{\delta + g\theta + \rho}{\theta} c(t) \end{cases} \quad (5.19)$$

De referir que este sistema apresenta três pontos de equilíbrio estacionário dados $\dot{k} = \dot{c} = 0$. Os detalhes sobre a determinação destes pontos estão no Anexo B.

O cálculo da solução pelo método Tau introduz um desafio adicional uma vez que as equações diferenciais do sistema (5.19) são não lineares e, além disso, se considerarmos que $k(t)$ e $c(t)$ são polinômios os termos $(k(t))^\alpha$ e $(k(t))^{\alpha-1}$, sendo

¹Se h é uma função que satisfaz as condições de Inada então $\lim_{t \rightarrow \infty} h' = 0$ e $\lim_{t \rightarrow 0} h' = \infty$.

o parâmetro α não inteiro, deixam de ser polinomiais. Resolvemos este problema introduzindo uma variável auxiliar e um problema diferencial artificial, permitindo aproximar polinomialmente estes termos não polinomiais.

Considerando a função, z , tal que

$$z(t) = (k(t))^\alpha \quad (5.20)$$

e definindo implicitamente z como solução de uma equação diferencial, podemos aplicar o método Tau para obter uma aproximação polinomial para $z(t)$. Esta equação pode obter-se derivando em ordem a t , ambos os membros de (5.20) obtemos

$$\dot{z}(t) = \alpha(k(t))^{\alpha-1}\dot{k}(t) \quad (5.21)$$

Com as equações (5.20) e (5.21) construímos a equação diferencial, $\dot{z}(t)k(t) = \alpha z(t)\dot{k}(t)$, que adicionamos ao sistema (5.19). Simultaneamente multiplicamos a segunda equação de (5.19) por $k(t)$ e efetuamos a substituição definida em (5.20) em ambas as equações de (5.19). Deste modo, obtemos um novo sistema de equações diferenciais dado por

$$\begin{cases} \dot{z}(t)k(t) = \alpha z(t)\dot{k}(t) \\ \dot{k}(t) = z(t) - c(t) - p_1k(t) \\ \dot{c}(t)k(t) = p_3c(t)z(t) - p_2c(t)k(t) \end{cases} \quad (5.22)$$

sendo $p_1 = \delta + n + g$, $p_2 = \frac{\delta + g\theta + \rho}{\theta}$ e $p_3 = \frac{\alpha}{\theta}$.

Apesar das equações do sistema (5.22) continuarem a ser não lineares, com as alterações efetuadas, todos os termos podem, agora, ser traduzidos por expressões polinomiais, uma vez que todas as equações se encontram na forma do operador diferencial 4.26. Usando o polinómio de Taylor da Proposição 4.2.1, as equações de (5.22) são linearizadas, resultando o sistema

$$\begin{cases} k_m\dot{z} - \alpha\dot{k}_m z + \dot{z}_m k - \alpha z_m \dot{k} = \dot{z}_m k_m - \alpha z_m \dot{k}_m \\ -z + \dot{k} + p_1 k + c = 0 \\ -p_3 c_m z + (\dot{c}_m + p_2 c_m)k + k_m \dot{c} - (p_3 z_m + p_2 k_m)c = \dot{c}_m k_m - p_3 c_m z_m + p_2 c_m k_m \end{cases} \quad (5.23)$$

A matriz Π_v de 4.28 é dada por

$$\begin{bmatrix} \eta k_m(\mu) - \alpha \dot{k}_m(\mu) & -I & -p_3 c_m(\mu) \\ \dot{z}_m(\mu) - \alpha \eta z_m(\mu) & \eta + p_1 I & \dot{c}_m(\mu) + p_2 c_m(\mu) \\ 0 & I & \eta k_m(\mu) - p_3 z_m(\mu) + p_2 k_m(\mu) \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

A solução Tau é determinada resolvendo de forma iterativa o problema $D_m \mathbf{y}_m = f_m$ onde $\mathbf{y}_m = [z_m \ k_m \ c_m]$, $m \geq 1$ corresponde ao vetor dos aproximantes Tau de z, k e c e $f_m = [\dot{z}_m k_m - \alpha z_m \dot{k}_m \ \mathbf{0} \ \dot{c}_m k_m - p_3 c_m z_m + p_2 c_m k_m]$, $m \geq 1$, corresponde ao vetor dos polinómios dos segundos membros em (5.23).

Considerando que

- o espaço temporal corresponde à análise do modelo económico no decorrer de um século;
- a solução Tau é determinada usando os polinómios de Chebyshev T_n definidos em $[0, 1]$, para tal, foi efetuada a mudança de variável $t = 100x$ com $x \in [0, 1]$ no sistema (5.23);
- para $m = 0$, podemos tomar como aproximação inicial para k_1 a reta que passa pelos pontos $(0, k_0)$ e $(1, k_{ss})$ dada por $k_1(t) = k_0 T_0 + (k_{ss} - k_0) T_1$, sendo k_{ss} a abcissa do ponto de equilíbrio P_3 do sistema (5.19) em estado estacionário;
- $z = k^\alpha$ e podemos tomar para aproximação inicial para z_1 a reta que passa pelos pontos $(0, z_0)$ e $(1, z_{ss})$, ou seja, $z_1(t) = z_0 T_0 + (z_{ss} - z_0) T_1$, sendo $z_0 = k_0^\alpha$ e $z_{ss} = k_{ss}^\alpha$;
- $c(t) = z(t) - p_1 k(t) - \dot{k}(t)$.
- as condições fronteira são os pontos

$$\begin{cases} z(0) = z_0 = k_0^\alpha \\ k(1) = k_{ss} \\ c(1) = c_{ss} \end{cases}$$

sendo c_{ss} é a ordenada do ponto de equilíbrio P_3 do sistema (5.19) em estado estacionário.

Tendo o modelo de Ramsey solução analítica [4], dada por

$$\begin{cases} k(t) = \left[\frac{1}{p_1 \theta} + (k_0^{1-\alpha} - \frac{1}{p_1 \theta}) e^{-(1-\alpha)p_1 t} \right]^{\frac{1}{1-\alpha}} \\ c(t) = (1 - \frac{1}{\theta})(k(t))^\alpha \end{cases} \quad (5.25)$$

estão representados na Figura 5.11 os gráficos da solução exata e os gráficos da solução Tau, para este modelo e na Figura 5.12 o erro absoluto cometido quando

Figura 5.11: Gráfico da solução exata e do aproximante Tau de ordem $n = 19$ para o problema (5.19).

aproximamos a solução exata pela solução Tau para diferentes valores de n . As soluções k_n e c_n foram determinadas usando polinômios de Chebyshev de grau $n = 19$ e na Figura 5.13 ilustramos números de iterações efetuadas com esta aproximação.

Figura 5.12: Erros $|k - k_{19}|$ e $|c - c_{19}|$ para o problema (5.19).

Os resultados numéricos são coerentes com a solução exata, ilustrando que o método Tau permite resolver problemas diferenciais definidos por sistemas de equações não lineares com termos não polinomiais e condições fronteira no intervalo

Figura 5.13: Erro absoluto obtido efetuando it iterações com $it = 5, 6, 7$, para o aproximante Tau de ordem $n = 19$, no problema (5.19).

$[0, \infty[$. Verificamos que, com apenas 11 iterações, as aproximações Tau obtidas de grau $n \geq 19$ têm um erro absoluto máximo de 4×10^{-4} . Fixando o aproximante de grau $n = 19$, fizemos variar o número de iterações notando que, a partir da iteração $it = 7$ o erro absoluto permanecia inalterável.

Assim, com a introdução da equação auxiliar no sistema e com a utilização dos coeficientes de linearização nos termos que constituem produtos de polinômios estendemos a aplicação do método a uma classe de problemas que à priori não seria resolúvel, pelo método, na sua formulação original. Esta abordagem, mostra a abrangência do método Tau na resolução de problemas de modelação e simulação económica.

6

Conclusão e Perspetivas de Trabalho Futuro

O trabalho desenvolvido nesta tese visou a generalização do método Tau a sistemas de equações diferenciais não lineares gerais. Tendo por base problemas de controlo ótimo, com a aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin, o método Tau é adaptado e estendido de forma a resolver os sistemas de equações diferenciais resultantes.

O método Tau constrói uma aproximação polinomial da solução de uma equação diferencial, definida por um operador diferencial linear num intervalo limitado. Embora trabalhos pontuais tenham sido desenvolvidos na resolução de problemas não lineares, estes foram sempre concretizados para um problema específico. Com este trabalho pretendeu-se explorar a aplicação do método a problemas gerais estendendo-o a sistemas de equações diferenciais não lineares e em intervalos não necessariamente finitos. O objetivo último é contribuir para a disseminação do método Tau como método geral para a resolução de sistemas de equações diferenciais.

A tese começou por enquadrar e motivar para o método Tau. Introduziu, de forma breve, os problemas de controlo ótimo. Apresentou os conceitos e métodos numéricos espectralis, detalhando o método Tau. Adequou e aplicou o método Tau a problemas de controlo ótimo lineares em horizonte finito e infinito. Estendeu o método Tau a problemas de controlo ótimo não lineares.

Na sua gênese proposto para equações diferenciais lineares, o método Tau é generalizado para aplicação em sistemas de equações diferenciais definidos em $[t_0, t_f]$ com $t_0, t_f \in \mathbb{R}$. É também estendido de forma a ser aplicável a problemas definidos em $[0, +\infty[$, recorrendo a uma função de transformação de domínio. Em ambos os casos, foram estabelecidos operadores diferenciais vetoriais e a respetiva representação algébrica em blocos matriciais, conducentes à aplicação do método Tau.

Abordaram-se problemas não lineares definidos por operadores diferenciais polinomiais ou funcionais não polinomiais. Foram construídos novos operadores (lineares) para aplicação iterativa do método Tau, num processo de linearização do tipo Newton. Para os problemas não polinomiais foi proposta a introdução de novas funções incógnita, soluções de problemas diferenciais *artificiais*, permitindo a redução a problemas diferenciais polinomiais. No decurso do processo de linearização ocorrem instabilidades resultantes de produtos de polinómios.

Foram introduzidos no método Tau coeficientes de linearização do produto de polinómios ortogonais, em particular no produto de polinómios de Chebyshev e Legendre. Relações de recorrência para a obtenção destes coeficientes em polinómios ortogonais clássicos foram deduzidas. Esta abordagem, juntamente com um procedimento cuidado de cálculo das matrizes associadas aos operadores diferenciais, permitiu uma resolução eficiente e estável dos problemas não lineares. Resultados numéricos sobre problemas diferenciais com características distintivas ilustram o sucesso do uso combinado de todas as estratégias desenvolvidas.

O trabalho futuro passa por:

- Desenvolver e disponibilizar uma biblioteca de rotinas para implementar o método Tau, para disseminação pela comunidade académica e industrial.
- Desenvolver a resolução numérica dos sistemas de equações lineares de grande dimensão e com estrutura especial resultantes no método Tau; nomeadamente, métodos iterativos preconditionados e métodos diretos implementando um critério de paragem baseado em estimativas do erro.
- Estudar a possibilidade de obter aproximações racionais, baseadas no método Tau, da solução do problema.
- Estabelecer, mediante os diferentes tipos de problemas controlo ótimo, um

algoritmo que, *à priori*, indique a família dos polinómios ortogonais que melhor se adequa à determinação da solução aproximada, para o problema diferencial.

Referências Bibliográficas

- [1] J. C. Adams. On the expression of the product of any two Legendre's coefficients by means of a series of Legendre's coefficients. *Proceedings of the Royal Society of London*, 27(185-189):63–71, 1878.
- [2] R. Askey. *Orthogonal polynomials and special functions*. SIAM, 1975.
- [3] M. Athans and P. L. Falb. *Optimal control: an introduction to the theory and its applications*. Courier Dover Publications, 2006.
- [4] R. Barro and X. Sala-i Martin. *Economic Growth*. McGraw-Hill Advanced Series in Economics. McGraw-Hill, 2004.
- [5] J. Blot and P. Michel. First-order necessary conditions for infinite-horizon variational problems. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 88(2):339–364, 1996.
- [6] H. G. Bock and K. J. Plitt. A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems. Proceedings of the IFAC world congress, 1984.
- [7] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral methods: Second Revised Edition*. Courier Corporation, 2001.
- [8] A. Bryson. *Applied Optimal Control: Optimization, Estimation and Control*. Halsted Press book'. Taylor & Francis, 1975.
- [9] A. Chiang. *Elements of dynamic optimization*. McGraw-Hill, 1992.
- [10] T. S. Chihara. *An introduction to orthogonal polynomials*. Gordon and Breach, 1978.

- [11] M. Da Silva. Numerical treatment of differential equations with the τ method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 20:167–173, 1987.
- [12] F. Fahroo and I. M. Ross. Pseudospectral methods for infinite-horizon nonlinear optimal control problems. *Journal of Guidance, Control and Dynamics*, 31(4):927–936, 2008.
- [13] B. Finlayson and L. Scriven. The method of weighted residuals—a review. *Applied Mechanics Reviews*, 19(9):735–748, 1966.
- [14] W. Gautschi. *Orthogonal Polynomials: computation and approximation*. Oxford university press, 2004.
- [15] A. Gavina, J. Matos, and P. B. Vasconcelos. Computation of optimal control solutions with the Tau method and an error estimator. In *2014 14th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA)*, pages 111–115. IEEE, 2014.
- [16] A. Gavina, J. Matos, and P. B. Vasconcelos. Tau method for linear quadratic regulator problems. *Journal of Applied Nonlinear Dynamics*, 3(2):139–146, 2014.
- [17] A. Gavina, J. Matos, and P. B. Vasconcelos. Improving the accuracy of Chebyshev Tau method for nonlinear differential problems. submetido para publicação.
- [18] D. Gottlieb and S. A. Orszag. *Numerical analysis of spectral methods*. SIAM, 1977.
- [19] J. Guckenheimer. Dynamics of the van der Pol equation. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 27(11):983–989, 1980.
- [20] B. Guo. Jacobi spectral approximations to differential equations on the half line. *Journal of Computational Mathematics*, 18(1):95–112, 2000.
- [21] W. Hager. Rates of convergence for discrete approximations to unconstrained control problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 13(4):449–472, 1976.
- [22] H. Halkin. Necessary conditions for optimal control problems with infinite horizons. *Econometrica*, 42(2):267–272, 1974.

- [23] S. M. Hosseini. The adaptive operational Tau method for systems of ODEs. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 231(1):24–38, 2009.
- [24] S. M. Hosseini and S. Shahmorad. Numerical solution of a class of integro-differential equations by the Tau method with an error estimation. *Applied Mathematics and Computation*, 136(2):559–570, 2003.
- [25] S. M. Hosseini and S. Shahmorad. Tau numerical solution of fredholm integro-differential equations with arbitrary polynomial bases. *Applied Mathematical Modelling*, 27(2):145–154, 2003.
- [26] V. Iranzo and A. Falques. Some spectral approximations for differential equations in unbounded domains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 98(1):105–126, 1992.
- [27] A. Jajarmi, N. Pariz, S. Effati, and A. V. Kamyad. Solving infinite horizon nonlinear optimal control problems using an extended modal series method. *Journal of Zhejiang University Science C*, 12(8):667–677, 2011.
- [28] T. Kamihigashi. Necessity of transversality conditions for infinite horizon problems. *Econometrica*, 69(4):995–1012, 2001.
- [29] D. Kirk. *Optimal control theory: an introduction*. Dover Publications, 2004.
- [30] W. Kong and X. Wu. Chebyshev Tau matrix method for Poisson-type equations in irregular domain. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 228(1):158–167, 2009.
- [31] C. Lanczos. Trigonometric interpolation of empirical and analytical functions. *Journal of Mathematical Physics*, 17:123–199, 1938.
- [32] S. Lewanowicz. Second-order recurrence relation for the linearization coefficients of the classical orthogonal polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 69(1):159–170, 1996.
- [33] J. Matos, M. J. Rodrigues, J. Matos, and M. Cruz. Avoid similarity transformations in the operational Tau method. submetido para publicação.

- [34] J. Matos, M. J. Rodrigues, and P. B. Vasconcelos. New implementation of the Tau method for PDEs. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 164:555–567, 2004.
- [35] H. Maurer and H. J. Oberle. Second order sufficient conditions for optimal control problems with free final time: The Riccati approach. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 41(2):380–403, 2002.
- [36] E. Ortiz. Step by step Tau method—part i. piecewise polynomial approximations. *Computers & Mathematics with Applications*, 1(3):381–392, 1975.
- [37] E. Ortiz. On the numerical solution of nonlinear and functional differential equations with the Tau method. In *Numerical treatment of differential equations in applications*, pages 127–139. Springer, 1978.
- [38] E. Ortiz and H. Samara. An operational approach to the Tau method for the numerical solution of nonlinear differential equations. *Computing*, 27:15–25, 1981.
- [39] E. L. Ortiz. The Tau method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 6:480–492, 1969.
- [40] F. L. Pereira and G. N. da Silva. Necessary conditions of optimality for state constrained infinite horizon differential inclusions. In *Decision and Control and European Control Conference (CDC-ECC)*, pages 6717–6722. IEEE, 2011.
- [41] L. Pontryagin, V. Boltyanskii, R. Gamkrelidze, and E. Mishchenko. The mathematical theory of optimal processes (International series of monographs in pure and applied mathematics), 1962.
- [42] J. Pour-Mahmoud, M. Rahimi-Ardabili, and S. Shahmorad. Numerical solution of the system of Fredholm integro-differential equations by the tau method. *Applied Mathematics and Computation*, 168(1):465–478, 2005.
- [43] A. Ronveaux, M. Hounkonnou, and S. Belmehdi. Generalized linearization problems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 28(15):4423, 1995.
- [44] E. O. Roxin. *Control theory and its applications*. Gordon and Breach, 1997.

- [45] A. Seierstad and K. Sydsæter. *Optimal control theory with economic applications*. North-Holland, 1987.
- [46] G. V. Smirnov. Transversality condition for infinite-horizon problems. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 88(3):671–688, 1996.
- [47] G. Szego. *Orthogonal Polynomials*. American Mathematical Society Colloquium Publications, 23, 1939.
- [48] O. von Stryk and R. Bulirsch. Direct and indirect methods for trajectory optimization. *Annals of Operations Research*, 37(1):357–373, 1992.

A

Regulador Linear Quadrático

O problema do regulador linear quadrático (LQR) é um problema de regulação que se resolve a partir da otimização de um índice de desempenho quadrático. O objetivo do LQR consiste em determinar um controlo ótimo, caso exista, que minimize a função de desempenho J , geralmente, descrita na forma

$$J = x^T(t_f)P_0x(t_f) + \int_{t_0}^{t_f} (x^T Qx + u^T Ru) dt$$

onde, Q , R e P_0 são matrizes reais, simétricas, constantes e definidas positivas.¹ No caso em que $t_f \rightarrow \infty$, para que J seja finito, então J reduz-se a

$$J = \int_{t_0}^{\infty} (x^T Qx + u^T Ru) dt \quad (\text{A.1})$$

A dinâmica é descrita por equações diferenciais lineares, que se podem escrever na forma

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t)$$

Considerando que não existem restrições terminais em t_f e $x(t_f)$, que não existem restrições para $\mathbf{u}$ ($\mathcal{U} = \mathbb{R}^n$), que $x^T Qx + u^T Ru$ é uma função quadrática e que a dinâmica é linear então, se t_f é finito, a solução para o controlo é dada pela equação

$$u^* = -R^{-1}B^T P(t)x$$

¹ Q e P_0 podem ser definidas ou definidas positivas, não podendo ser simultaneamente nulas.

onde a função $P(t)$ pode ser calculada a partir da **equação diferencial de Riccati**. A existência de R^{-1} está assegurada visto que R é uma matriz definida positiva.

$$\frac{dP}{dt} + Q - P(t)BR^{-1}B^T P(t) + P(t)A + A^T P(t) = 0 \quad (\text{A.2})$$

com condição inicial $P(t_f) = P_0$. Note-se que a equação (A.2) é uma equação matricial não linear e a sua resolução passa por empregar algum método numérico.

Se $t_f \rightarrow \infty$, a solução para u é dada por

$$u^* = -R^{-1}B^T P_c x \quad (\text{A.3})$$

onde a matriz P_c é determinada pela solução da *equação algébrica de Riccati*

$$Q - P_c B R^{-1} B^T P_c + P_c A + A^T P_c = 0 \quad (\text{A.4})$$

Convém referir que para a solução da equação (A.4) ser única a matriz P_c deve ser definida positiva.

Considerando o Exemplo 2

$$\left\{ \begin{array}{l} \min \int_0^\infty (x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + \frac{1}{4}u^2) dt \\ s.a. \\ \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_1 - x_2 + u \end{array} \right.$$

com as condições $x_1(0) = -4$ e $x_2(0) = 4$. Este problema pode ser descrito na forma (A.1)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{2} \int_0^\infty (\mathbf{x}^T Q \mathbf{x} + \mathbf{u}^T R \mathbf{u}) dt \\ s.a. \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = A \mathbf{x} + B \mathbf{u} \\ \mathbf{x}(0) = [-4 \ 4]^T \end{array} \right.$$

onde A , B , e Q , são as matrizes

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e $R = \frac{1}{2}$.

De acordo (A.3) a solução da trajetória de controle é dada por

$$\begin{aligned} u^* &= -2[0 \ 1] \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ &= -(2bx_1 + 2cx_2) \end{aligned}$$

Os parâmetros b e c ficam determinados resolvendo a equação (A.4) dada por

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} [0 \ 1] \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

ou seja, resolvendo o sistema

$$\begin{cases} 4b - 2b^2 + 2 = 0 \\ 2c - 2bc + a - b = 0 \\ 2b - 2c - 2c^2 + 1 = 0 \end{cases}$$

Como $P_c = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$ é uma matriz definida positiva, então $a > 0 \Rightarrow c > 0$. Assim,

resulta do sistema anterior que $b = 1 + \sqrt{2}$, $c = \frac{\sqrt{7+4\sqrt{2}}-1}{2}$ e $a = b - 2c + 2bc$.

Portanto, a trajetória ótima de u é dada por

$$u^* = -(2 + \sqrt{2})x_1 + (1 - \sqrt{7 + 4\sqrt{2}})x_2$$

e as trajetórias dos estados x_1 e x_2 são determinadas resolvendo o sistema linear

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\sqrt{2}x_1 - \sqrt{7 + 4\sqrt{2}}x_2 \end{cases}$$

cujas soluções para x_1 e x_2 são da forma

$$\begin{aligned} x_1 &= k_1 e^{\alpha_1 t} + k_2 e^{\alpha_2 t} \\ x_2 &= \dot{x}_1 = k_1 \alpha_1 e^{\alpha_1 t} + k_2 \alpha_2 e^{\alpha_2 t} \end{aligned}$$

com $\alpha_1 = \frac{\sqrt{7-4\sqrt{2}}-\sqrt{7+4\sqrt{2}}}{2}$ e $\alpha_2 = -\frac{\sqrt{7-4\sqrt{2}}+\sqrt{7+4\sqrt{2}}}{2}$.

Como,

$$\begin{cases} x_1(0) = -4 \\ x_2(0) = 4 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} k_1 = -\frac{4(\alpha_2+1)}{\alpha_2-\alpha_1} \\ k_2 = \frac{4(\alpha_1+1)}{\alpha_2-\alpha_1} \end{cases}$$

Após simplificações, conclui-se que

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\alpha}{2}t} \left((8 - 4\alpha) \sinh\left(\frac{\beta}{2}t\right) - 4\beta \cosh\left(\frac{\beta}{2}t\right) \right) \\ x_2 = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{\alpha}{2}t} \left(4\beta \cosh\left(\frac{\beta}{2}t\right) - (2\beta^2 + 4\alpha - 2\alpha^2) \sinh\left(\frac{\beta}{2}t\right) \right) \end{cases}$$

com $\alpha = \sqrt{7 + 4\sqrt{2}}$ e $\beta = \sqrt{7 - 4\sqrt{2}}$.

B

Modelo de Ramsey-Cass-Koopmans

Ponto de equilíbrio estacionário do Modelo RCK

Recordando que o sistema dinâmico do modelo RCK é dado por

$$\begin{cases} \dot{k}(t) = (k(t))^\alpha - c(t) - k(t)(\delta + n + g) \\ \dot{c}(t) = \frac{1}{\theta}\alpha(k(t))^{\alpha-1}c(t) - \frac{\delta+g\theta+\rho}{\theta}c(t) \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

o ponto de equilíbrio deste sistema em estado estacionário corresponde à solução de

$$\begin{cases} \dot{k}(t) = 0 \\ \dot{c}(t) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Resulta da equação $\dot{c}(t) = 0$ que

$$\begin{aligned} \dot{c}(t) = 0 &\Leftrightarrow c(t) \left[\frac{1}{\theta}\alpha(k(t))^{\alpha-1} - \frac{\delta+g\theta+\rho}{\theta} \right] = 0 \\ &\Leftrightarrow c(t) = 0 \vee \frac{1}{\theta}\alpha(k(t))^{\alpha-1} = \frac{\delta+g\theta+\rho}{\theta} \\ &\Leftrightarrow c(t) = 0 \vee k(t) = \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

e da equação $\dot{k}(t) = 0$ que

$$\begin{aligned} \dot{k}(t) = 0 &\Leftrightarrow (k(t))^\alpha - c(t) - k(t)(\delta + n + g) = 0 \\ &\Leftrightarrow c(t) = (k(t))^\alpha - k(t)(\delta + n + g) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Se,

- $c(t) = 0$ então $k(t) = 0 \vee k(t) = (\delta + n + g)^{\frac{1}{\alpha-1}}$;

- $k(t) = \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\alpha-1}}$ então $c(t) = \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha}\right)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}} - (\delta+n+g) \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\alpha-1}}$.

Assim, obtemos, em estado estacionário, 3 pontos, P_1 , P_2 e P_3 na forma (k_{ss}, c_{ss}) dados por:

$$\begin{aligned} P_1 &= (0, 0) \\ P_2 &= \left((\delta+n+g)^{\frac{1}{\alpha-1}}, 0 \right) \\ P_3 &= \left(\left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}}, \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha-1}} - (\delta+n+g) \left(\frac{\delta+g\theta+\rho}{\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha-1}} \right) \end{aligned}$$

Para o estudo deste problema interessa-nos o ponto P_3 visto ser o único que é interior. O sistema (B.1) linearizado pelo polinómio de Taylor de 1ª ordem, em torno de P_3 pode ser descrito pela equação matricial $\dot{y} = Ay$, sendo $y = [k \ c]^T$, $\dot{y}$ o vetor das derivadas de y e A uma matriz de 2×2 . Se A é diagonalizável com valores próprios λ_i , $i = 1, 2$, então podemos analisar as propriedades de estabilidade dos sistema tendo em conta que

- se os valores próprios, λ_i , $i = 1, 2$, são reais e positivos então o sistema é instável,
- se os valores próprios, λ_i , $i = 1, 2$, são reais e negativos então o sistema é estável,
- se os 2 valores próprios são reais com sinais opostos o ponto crítico é um ponto de sela e o sistema é *saddle-path* estável,
- se os valores próprios, λ_i , $i = 1, 2$, são complexos com $\Re(\lambda_i) < 0$ então o sistema converge para o estado estacionário de modo oscilatório,
- se os valores próprios, λ_i , $i = 1, 2$, são complexos com $\Re(\lambda_i) > 0$ então o sistema é instável e oscilatório.

Neste caso, a matriz A corresponde à matriz

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} \alpha k_{ss}^{\alpha-1} - (\delta+n+g) & -1 \\ \frac{\alpha(\alpha-1)}{\theta} k_{ss}^{\alpha-2} c_{ss} & \frac{\alpha}{\theta} k_{ss}^{\alpha-1} - \frac{\delta+g\theta+\rho}{\theta} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \rho - g(1-\theta) - n & -1 \\ \frac{(\alpha-1)(\delta+g\theta+\rho)}{\theta} \left(\frac{g(1-\alpha) - g(\theta-\alpha) + \rho}{\alpha} - n \right) & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

A equação característica de A é da forma $D^2 - a_1 D + a_2 = 0$ com $a_1 = \rho - g(1 - \theta) - n$ e $a_2 = \frac{(\alpha - 1)(\delta + g\theta + \rho)}{\theta} \left(\frac{g(1 - \alpha) - g(\theta - \alpha) + \rho}{\alpha} - n \right)$. Como por hipótese $g - g\theta + n - \rho < 0$, então $a_1 > 0$ e $a_2 < 0$, logo existem 2 valores próprios reais, um positivo e outro negativo. O ponto P_3 é um ponto de sela.

Análise da condição de transversalidade $H_c(\infty) = 0$

Da equação (2.16), temos que,

$$H_c = \frac{(c(t))^{1-\theta}}{1-\theta} e^{(g-g\theta+n)t} + e^{\rho t} \lambda(t) (f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g))$$

Determinando $\lim_{t \rightarrow \infty} H_c(t) e^{-\rho t}$, temos que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} H_c(t) e^{-\rho t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(c(t))^{1-\theta}}{1-\theta} e^{(g-g\theta+n-\rho)t} + \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda(t) (f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g))$$

Como, por hipótese $g - g\theta + n - \rho < 0$, então

$$\lim_{t \rightarrow \infty} H_c(t) e^{-\rho t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda(t) (f(k(t)) - c(t) - k(t)(\delta + n + g))$$

A expressão para $\lambda(t)$ é determinada pela condição (5.15), e dada por $\lambda(t) = (c(t))^{-\theta} e^{(g-g\theta+n-\rho)t}$. Logo, $\lim_{t \rightarrow \infty} H_c(t) e^{-\rho t} = 0$, confirmando a condição de transversalidade de (2.17).