Receita do Método da Aproximação Polinomial Global Aplicado a Problemas Unidirecionais sem Simetria

Estrutura Geral do Problema:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t} = F\left[t, x, y(x,t), \frac{\partial y(x,t)}{\partial x}, \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}\right] \text{ no domínio : } 0 < x < 1 \text{ e } t>0.$$

Sujeita às condições de contorno:

CC1: $G_0\left[t, y(x,t), \frac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right]_{x=0} = 0$ e CC2: $G_1\left[t, y(x,t), \frac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right]_{x=1} = 0$

E à condição inicial: $y(x,t)\big|_{t=0} = y_{inicial}(x)$

Propondo-se a aproximação polinomial de grau n+1 em x para $y(x,t)$:

$$y(x,t) \cong y^{(n+1)}(x,t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot y_j(t)$$

$y_j(t) = y^{(n+1)}(x_j,t)$ e os polinômios base de Lagrange:

$$\ell_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n+1} \left(\frac{x-x_k}{x_j-x_k}\right) = \frac{p_{nodal}(x)}{(x-x_j)\cdot p'_{nodal}(x_j)} \text{ sendo : } p_{nodal}(x) = \prod_{k=0}^{n+1}(x-x_k).$$

Um possível algoritmo de implementação da interpolação de Lagrange é a seguir descrito:

Especifique os valores dos pontos de interpolação $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < x_{n+1} \equiv 1$, dos correspondentes valores discretos da função: $y_0,\ y_1,\ y_2, \cdots y_n,\ y_{n+1}$ e do valor genérico de x em que se deseja interpolar a função y: seja este valor designado por z

Faça: $y_{\text{interpolado}} \leftarrow 0$

Para $i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça $p \leftarrow 1$

Para $k = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça se $k \neq i$ $\quad p \leftarrow p \cdot \left(\frac{z-x_k}{x_i-x_k}\right)$

$y_{\text{interpolado}} \leftarrow y_{\text{interpolado}} + p \cdot y_i$

Como o polinômio interpolador da Lagrange é exato para funções constantes (que é uma função polinomial de grau zero!), tem-se: $\sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) = 1$

As primeira e segunda derivadas dessa aproximação polinomial podem ser calculadas em cada um dos pontos de interpolação segundo:

$$\left.\frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x}\right|_{x_i} = \sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j}\cdot y_j(t) \text{ e } \left.\frac{\partial^2 y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x^2}\right|_{x_i} = \sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j}\cdot y_j(t).$$

Em que: $A_{i,j} = \left.\frac{d\ell_j(x)}{dx}\right|_{x_i}$ e $B_{i,j} = \left.\frac{d^2\ell_j(x)}{dx^2}\right|_{x_i}$ para $i,\ j = 0,\ 1,\ \cdots,\ n+1$.

Algumas observações importantes devem ser feitas em relação essas matrizes:

(i) $\mathbf{B} = \mathbf{A}^2$;

(ii) No caso particular de $y^{(n+1)}(x,t) = C^{te} \Rightarrow \frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x} = 0$ e $\frac{\partial^2 y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x^2} = 0$

para todo valor de x, assim: $\sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} = 0$ e $\sum_{j=0}^{n+1} B_{i,j} = 0$: a soma dos elementos de uma mesma linha das matrizes $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ é nula;

(ii) Os elementos da matriz $\mathbf{A}$ só dependem dos valores das derivadas do polinômio nodal em cada um dos pontos de interpolação, pois: $\ell_j(x) = \frac{p_{nodal}(x)}{(x-x_j)\cdot p'_{nodal}(x_j)}$, logo:

$$(x-x_j)\cdot \ell_j(x) = \frac{p_{nodal}(x)}{p'_{nodal}(x_j)} \Rightarrow (x-x_j)\cdot \ell'_j(x) + \ell_j(x) = \frac{p'_{nodal}(x)}{p'_{nodal}(x_j)}$$

Com $x = x_i \neq x_j \Rightarrow (x_i - x_j)\cdot \ell'_j(x_i) + \ell_j(x_i) = \frac{p'_{nodal}(x_i)}{p'_{nodal}(x_j)}$ mas $\ell_j(x_i) = 0$, então:

$$A_{i,j} = \ell'_j(x_i) = \frac{p'_{nodal}(x_i)}{(x_i - x_j)\cdot p'_{nodal}(x_j)} \text{ para } i \neq j$$

Como: $\sum_{j=0}^{n+1} A_{i,j} = 0 \Rightarrow A_{i,i} = -\sum_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n+1} A_{i,j}$

A seguir apresenta-se o algoritmo de cômputo da matriz $\mathbf{A}$.

Para $i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça $p \leftarrow 1$ e $v_i \leftarrow 0$

Para $j = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça: $\begin{cases} q \leftarrow x_i - x_j \\ v_i \leftarrow p + q \cdot v_i \\ p \leftarrow q \cdot p \end{cases}$

Para $i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça $A_{i,i} \leftarrow 0$

Para $j = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n,\ n+1$, faça se $j \neq i$: $\begin{cases} A_{i,j} \leftarrow \dfrac{v_i}{\left(x_i - x_j\right) \cdot v_j} \\ A_{i,i} \leftarrow A_{i,i} - A_{i,j} \end{cases}$

A substituição da aproximação polinomial $y^{(n+1)}(x)$ nas duas condições de contorno do problema dá origem às equações algébricas:

$$\text{CC1: } G_0\left[t, y_0(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j(t)\right] = 0 \text{ e CC2: } G_1\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0$$

A substituição da aproximação polinomial $y^{(n+1)}(x)$ na equação diferencial do problema dá origem à expressão do resíduo:

$$\boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,t) = \frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial t} - F\left[t, x, y^{(n+1)}(x,t), \frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x}, \frac{\partial^2 y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x^2}\right]$$

$$\text{Em que: } \frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial t} = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot \frac{dy_j(t)}{dt};\ y^{(n+1)}(x,t) = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot y_j(t);$$

$$\frac{\partial y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x} = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} A_{j,k} \cdot y_k(t)\right] = \sum_{j=0}^{n+1}\left(\sum_{k=0}^{n+1} \ell_k(x) \cdot A_{k,j}\right) \cdot y_j(t)$$

$$\frac{\partial^2 y^{(n+1)}(x,t)}{\partial x^2} = \sum_{j=0}^{n+1} \ell_j(x) \cdot \left[\sum_{k=0}^{n+1} B_{j,k} \cdot y_k(t)\right] = \sum_{j=0}^{n+1}\left(\sum_{k=0}^{n+1} \ell_k(x) \cdot B_{k,j}\right) \cdot y_j(t)$$

Este resíduo mede a qualidade da aproximação ponto a ponto do intervalo: $0 < x < 1$, para quantificá-lo globalmente no método dos momentos, o mesmo é associado à seguinte forma integral: $\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t) = \int_{x=0}^{x=1} x^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x,t) \cdot dx \equiv 0$, para $j = 1,\ 2,\ \ldots, n$

Calculando $\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t)$ por quadratura de Gauss, tem-se:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t) \cong \sum_{i=1}^{n} H_i \cdot x_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0$$

para j = 1, 2, ..., n, em que $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i,t)$ e $0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < 1$ são as n raízes de $P_n^{(0,0)}(x)$. A equação acima é satisfeita se:

$$\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i,t) = 0 \Rightarrow \frac{dy_i(t)}{dt} = F\left[t, y_i(t), \sum_{k=0}^{n+1} A_{i,k} \cdot y_k(t), \sum_{k=0}^{n+1} B_{i,k} \cdot y_k(t)\right]$$

para $i =$ 1, 2,...n. Com as condições iniciais: $y_i(0) = y_{inicial}(x_i)$

Sendo este o *Método da Colocação Ortogonal* em que os *Pontos de Colocação* são as n raízes de $P_n^{(0,0)}(x)$. Nesse caso, chega-se a um sistema explícito de n equações diferenciais não lineares acoplado às duas equações algébricas oriundas das duas condições de contorno associadas ao problema:

$$\text{CC1: } G_0\left[t, y_0(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j} \cdot y_j(t)\right] = 0 \text{ e CC2: } G_1\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0$$

Calculando $\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t)$ por quadratura de Lobatto , tem-se:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t) \cong \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i(t) \equiv 0, \text{ para } j = 1, 2, ..., n \text{ sendo } \boldsymbol{R}_i(t) = \boldsymbol{R}^{(n+1)}(x_i,t).$$

Em que: $0 < x_1 < x_2 < \cdots x_n < 1$ são as n raízes de $P_n^{(1,1)}(x)$, $x_0 = 0$ e $x_{n+1} = 1$. Substituindo na expressão de $\boldsymbol{R}_j^{(n+1)}(t)$, as expressões dos resíduos, em vista de:

$$\sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1} \cdot \frac{dy_i(t)}{dt} = \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1} \cdot F\left[t, y_i(t), \sum_{k=0}^{n+1} A_{i,k} \cdot y_k(t), \sum_{k=0}^{n+1} B_{i,k} \cdot y_k(t)\right]$$

para $j = 1, \cdots, n$.

Resultando em um sistema algébrico diferencial composto por n equações diferenciais ordinárias acopladas às duas equações algébricas oriundas das duas condições de contorno associadas ao problema:

CC1: $G_0\left[t, y_0(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j}\cdot y_j(t)\right]=0$ e CC2: $G_1\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j}\cdot y_j(t)\right]=0$

Para evitar a forma não explícita das equações diferenciais ordinárias do sistema anterior, define-se uma nova variável: $\Upsilon_j(t)=\sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1}\cdot y_i(t)$ para $j=1, 2, \cdots, n$, o que permite escrever:

$$\frac{d\Upsilon_j(t)}{dt}=\sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1}\cdot F\left[t, y_i(t), \sum_{k=0}^{n+1} A_{i,k}\cdot y_k(t), \sum_{k=0}^{n+1} B_{i,k}\cdot y_k(t)\right] \text{ para } j=1, \cdots, n.$$

Com as condições iniciais: $\Upsilon_j(0)=\sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1}\cdot y_{inicial}(x_i)$

Essas equações diferenciais ordinárias (agora em forma explícita) estão acopladas ao sistema algébrico:

$$\begin{cases} G_0\left[t, y_0(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{0,j}\cdot y_j(t)\right]=0 \\ \sum_{i=0}^{n+1} H_i \cdot x_i^{j-1}\cdot y_i(t)=\Upsilon_j(t) \text{ para } j=1, 2, \cdots, n \\ G_1\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=0}^{n+1} A_{n+1,j}\cdot y_j(t)\right]=0 \end{cases}$$

<u>Receita do Método da Aproximação Polinomial Global Aplicado a Problemas Unidirecionais com Simetria</u>

Estrutura Geral do Problema:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial t}=F\left[t, x, y(x,t), \frac{\partial y(x,t)}{\partial x}, \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}\right] \text{ no domínio : } 0<x<1 \text{ e } t>0.$$

Sujeita às condições de contorno:

CC1: $\left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0}=0$ e CC2: $G\left[t, y(x,t), \dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right]_{x=1}=0$

E à condição inicial: $y(x,t)\big|_{t=0}=y_{inicial}(x)$

A CC1: $\left.\dfrac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0}=0$ pode também ser interpretada como uma condição de contorno de simetria, traduzida por: $y(x,t)\big|_{x=\kappa}=y(x,t)\big|_{x=-\kappa}$, ou seja, $y(x,t)$ é uma função para em *x*.

Tal propriedade sugere a mudança da variável independente *x* para $u=x^2$, assim:

$$\frac{\partial y(x,t)}{\partial x}=2\cdot x\cdot\frac{\partial y(u,t)}{\partial u}=2\cdot\sqrt{u}\cdot\frac{\partial y(u,t)}{\partial u}\Rightarrow\left.\frac{\partial y(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1}=2\cdot\left.\frac{\partial y(u,t)}{\partial u}\right|_{u=1}\quad\text{e}$$

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2}=4\cdot x^2\cdot\frac{\partial^2 y(u,t)}{\partial u^2}+2\cdot\frac{\partial y(u,t)}{\partial u}=4\cdot u\cdot\frac{\partial^2 y(u,t)}{\partial u^2}+2\cdot\frac{\partial y(u,t)}{\partial u}$$

$\dfrac{\partial y(u,t)}{\partial t}=F\left[t,u,y(u,t),\dfrac{\partial y(u,t)}{\partial u},\dfrac{\partial^2 y(u,t)}{\partial u^2}\right]$ no domínio : 0 < *u* < 1 e *t*>0.

Sujeita às condições de contorno:

CC1: $\left.\dfrac{\partial y(u,t)}{\partial u}\right|_{u=0}$ é finita e CC2: $G\left[t, y(u,t), \dfrac{\partial y(u,t)}{\partial u}\right]_{u=1}=0$

E à condição inicial: $y(u,t)\big|_{t=0}=y_{inicial}\left(\sqrt{u}\right)$

Propondo-se a aproximação polinomial de grau *n* em *x* para $y(u,t)$:

$$y(u,t)\cong y^{(n)}(u,t)=\sum_{j=1}^{n+1}\ell_j(u)\cdot y_j(t)$$

$y_j(t)=y^{(n)}(u_j,t)$ e os polinômios base de Lagrange:

$$\ell_j(u)=\prod_{\substack{k=1\\k\neq j}}^{n+1}\left(\frac{u-u_k}{u_j-u_k}\right)=\frac{p_{nodal}(u)}{\left(u-u_j\right)\cdot p'_{nodal}\left(u_j\right)}\ \text{ sendo : } p_{nodal}(u)=\prod_{k=1}^{n+1}\left(u-u_k\right).$$

As primeira e segunda derivadas dessa aproximação polinomial podem ser calculadas em cada um dos pontos de interpolação segundo:

$$\left.\frac{\partial y^{(n)}(u,t)}{\partial u}\right|_{u_i} = \sum_{j=1}^{n+1} A_{i,j} \cdot y_j(t) \text{ e } \left.\frac{\partial^2 y^{(n+1)}(u,t)}{\partial u^2}\right|_{u_i} = \sum_{j=1}^{n+1} B_{i,j} \cdot y_j(t).$$

Em que: $A_{i,j} = \left.\dfrac{d\ell_j(u)}{du}\right|_{u_i}$ e $B_{i,j} = \left.\dfrac{d^2\ell_j(u)}{du^2}\right|_{u_i}$ para $i,\ j = 1,\ \cdots,\ n+1$.

A substituição da aproximação polinomial $y^{(n)}(u)$ na condição de contorno 2 dá origem à equação algébrica: $G\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=1}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0$

A substituição da aproximação polinomial $y^{(n)}(u)$ na equação diferencial do problema dá origem à expressão do resíduo:

$$\boldsymbol{R}^{(n)}(u,t) = \frac{\partial y^{(n)}(u,t)}{\partial t} - F\left[t, u, y^{(n)}(u,t), \frac{\partial y^{(n)}(u,t)}{\partial u}, \frac{\partial^2 y^{(n)}(u,t)}{\partial u^2}\right]$$

Em que: $\dfrac{\partial y^{(n)}(u,t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n+1} \ell_j(u) \cdot \dfrac{dy_j(t)}{dt}$; $y^{(n)}(u,t) = \sum_{j=1}^{n+1} \ell_j(u) \cdot y_j(t)$;

$$\frac{\partial y^{(n)}(u,t)}{\partial u} = \sum_{j=1}^{n+1} \ell_j(u) \cdot \left[\sum_{k=1}^{n+1} A_{j,k} \cdot y_k(t)\right] = \sum_{j=1}^{n+1}\left(\sum_{k=1}^{n+1} \ell_k(u) \cdot A_{k,j}\right) \cdot y_j(t)$$

$$\frac{\partial^2 y^{(n)}(u,t)}{\partial u^2} = \sum_{j=1}^{n+1} \ell_j(u) \cdot \left[\sum_{k=1}^{n+1} B_{j,k} \cdot y_k(t)\right] = \sum_{j=1}^{n+1}\left(\sum_{k=1}^{n+1} \ell_k(u) \cdot B_{k,j}\right) \cdot y_j(t)$$

Este resíduo mede a qualidade da aproximação ponto a ponto do intervalo: $0 < u < 1$, para quantificá-lo globalmente no método dos momentos, o mesmo é associado à seguinte forma integral: $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t) = \int_{u=0}^{u=1} u^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n)}(u,t) \cdot du \equiv 0$, para $j = 1, 2, \ldots, n$

Em muitos problemas, com geometrias regulares (plana, polar ou esférica), as integrais envolvidas estão associadas ao elemento infinitesimal de volume, o que pode ser generalizado através da forma: $\bar{\phi}(t) = (s+1) \cdot \int_{x=0}^{x=1} x^s \cdot \phi(x,t) \cdot dx$

$[s = 0$ geometria plana; $s = 1$ geometria polar; $s = 2$ geometria esférica$]$. Caso a função $\phi(x,t)$ for uma função simétrica em relação a *x*, isto é: $\phi(x,t) = \phi(x^2,t)$, sugere-se a mudança da variável de integração para $u = x^2 \Rightarrow x = \sqrt{u}$ e $dx = \frac{du}{2 \cdot \sqrt{u}}$, logo:

$x^s \cdot dx = \frac{1}{2} \cdot u^{\frac{s-1}{2}} \cdot du \Rightarrow \bar{\phi}(t) = \left(\frac{s+1}{2}\right) \cdot \int_{u=0}^{u=1} u^{\frac{s-1}{2}} \cdot \phi(u,t) \cdot du$. Neste caso os resíduos ponderados seriam: $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t) = \left(\frac{s+1}{2}\right) \cdot \int_{u=0}^{u=1} u^{\frac{s-1}{2}} \cdot u^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}^{(n)}(u,t) \cdot du \equiv 0$, para $j = 1, 2, ..., n$

Calculando $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t)$ por quadratura de Gauss, tem-se:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t) \cong \sum_{i=1}^{n} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i \equiv 0$$

para $j = 1, 2, ..., n$, em que $\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n)}(u_i,t)$ e $0 < u_1 < u_2 < \cdots u_n < 1$ são as *n* raízes de $P_n^{(0,0)}(u)$ ou, no caso das geometrias regulares apresentadas anteriormente, $P_n^{\left(0,\frac{s-1}{2}\right)}(u)$.

A equação acima é satisfeita se:

$$\boldsymbol{R}_i = \boldsymbol{R}^{(n)}(u_i,t) = 0 \Rightarrow \frac{dy_i(t)}{dt} = F\left[t, y_i(t), \sum_{k=1}^{n+1} A_{i,k} \cdot y_k(t), \sum_{k=1}^{n+1} B_{i,k} \cdot y_k(t)\right]$$

para $i = 1, 2, ...n$. Com as condições iniciais: $y_i(0) = y_{inicial}\left(\sqrt{u_i}\right)$

Sendo este o *Método da Colocação Ortogonal* em que os *Pontos de Colocação* são as *n* raízes de $P_n^{(0,0)}(u)$ ou, no caso das geometrias regulares apresentadas anteriormente, $P_n^{\left(0,\frac{s-1}{2}\right)}(u)$.

Nesse caso, chega-se a um sistema explícito de n equações diferenciais não lineares acoplado a uma equação algébrica oriunda da condição de contorno associada ao problema:

$$\text{CC2: } G\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=1}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0$$

Calculando $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t)$ por quadratura de Radau com extremidade superior , tem-se:

$$\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t) \cong \sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot \boldsymbol{R}_i(t) \equiv 0 \text{, para } j = 1, 2, ..., n \text{ sendo } \boldsymbol{R}_i(t) = \boldsymbol{R}^{(n)}(u_i, t).$$

Em que: $u_{n+1} = 1$, $0 < u_1 < u_2 < \cdots u_n < 1$ são as n raízes de $P_n^{(1,0)}(u)$, ou, no caso das geometrias regulares apresentadas anteriormente, $P_n^{\left(1, \frac{s-1}{2}\right)}(u)$. Substituindo na expressão de $\boldsymbol{R}_j^{(n)}(t)$, as expressões dos resíduos, em vista de:

$$\sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot \frac{dy_i(t)}{dt} = \sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot F\left[t, y_i(t), \sum_{k=1}^{n+1} A_{i,k} \cdot y_k(t), \sum_{k=1}^{n+1} B_{i,k} \cdot y_k(t)\right]$$

para $j = 1, \cdots, n$.

Resultando em um sistema algébrico diferencial composto por n equações diferenciais ordinárias acoplado a uma equação algébrica oriunda da condição de contorno associada ao problema:

$$\text{CC2: } G\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=1}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0$$

Para evitar a forma não explícita das equações diferenciais ordinárias do sistema anterior, define-se uma nova variável: $\Upsilon_j(t) = \sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot y_i(t)$ para $j = 1, 2, \cdots, n$, o que permite escrever:

$$\frac{d\Upsilon_j(t)}{dt} = \sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot F\left[t, y_i(t), \sum_{k=1}^{n+1} A_{i,k} \cdot y_k(t), \sum_{k=1}^{n+1} B_{i,k} \cdot y_k(t)\right] \text{ para } j = 1, \cdots, n.$$

Com as condições iniciais: $\Upsilon_j(0)=\sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot y_{inicial}\left(\sqrt{u_i}\right)$

Essas equações diferenciais ordinárias (agora em forma explícita) estão acopladas ao sistema algébrico:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n+1} H_i \cdot u_i^{j-1} \cdot y_i(t) = \Upsilon_j(t) \text{ para } j = 1, 2, \cdots, n \\ G\left[t, y_{n+1}(t), \sum_{j=1}^{n+1} A_{n+1,j} \cdot y_j(t)\right] = 0 \end{cases}$$

Geração dos Polinômios de Jacobi e Determinação Numérica das Raízes

Considerando a forma de padronização dos polinômios de Jacobi, designada por $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ na qual o coeficiente de x^n é sempre igual a 1[a forma mais usual encontrada na literatura de padronização dos polinômios de Jacobi é considerar o termo independente de x igual a $(-1)^n$].

Pode-se gerar recursivamente $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ segundo o procedimento:

$p_i^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_i(\alpha,\beta)\right] \cdot p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) - h_i(\alpha,\beta)\, p_{i-2}^{(\alpha,\beta)}(x)$ para $i = 2, 3, \cdots, n$

com $p_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$ e $p_1^{(\alpha,\beta)}(x) = x - \dfrac{\beta+1}{\alpha+\beta+2}$

Em que: $g_i(\alpha,\beta) = \dfrac{1}{2} \cdot \left[1 - \dfrac{\left(\alpha^2-\beta^2\right)}{\left(2 \cdot i + \alpha + \beta - 1\right)^2 - 1}\right]$ e

$h_i^{(\alpha,\beta)} = \dfrac{(i-1)\cdot(i+\alpha-1)\cdot(i+\beta-1)\cdot(i+\alpha+\beta-1)}{(2i+\alpha+\beta-1)\cdot(2i+\alpha+\beta-2)^2\cdot(2i+\alpha+\beta-3)}$ para $i = 2, \cdots, n$

Tal procedimento, em comparação com os demais é o mais apropriado à implementação computacional e para o cálculo do valor numérico do polinômio com diferentes valores do argumento.

Para determinar as raízes de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ será aplicado o método de Newton-Raphson que necessita do cálculo da derivada de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$: $q_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x) = \dfrac{dp_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{dx}$, que pode também ser obtida de forma recursiva através da diferenciação da forma recursiva anterior. Reescrevendo a forma recursiva anterior na forma:

$p_{i+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_{i+1}(\alpha,\beta)\right]\cdot p_i^{(\alpha,\beta)}(x) - h_{i+1}(\alpha,\beta)\, p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x)$ para $i = 1, 2, \cdots, n$, resulta:

$q_i^{(\alpha,\beta)}(x) = p_i^{(\alpha,\beta)}(x) + \left[x - g_{i+1}(\alpha,\beta)\right]\cdot q_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) - h_{i+1}(\alpha,\beta)\cdot q_{i-2}^{(\alpha,\beta)}(x)$ para $i = 1, 2, \cdots, n$

com $q_{-1}^{(\alpha,\beta)}(x) = 0$ e $q_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$

As duas formas recursivas devem ser associadas, dando origem a:

$$\begin{cases} q_i^{(\alpha,\beta)}(x) = p_i^{(\alpha,\beta)}(x) + \left[x - g_{i+1}(\alpha,\beta)\right]\cdot q_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) - h_{i+1}(\alpha,\beta)\cdot q_{i-2}^{(\alpha,\beta)}(x) \\ p_{i+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = \left[x - g_{i+1}(\alpha,\beta)\right]\cdot p_i^{(\alpha,\beta)}(x) - h_{i+1}(\alpha,\beta)\, p_{i-1}^{(\alpha,\beta)}(x) \end{cases}$$

para $i = 1, 2, \cdots, n.$

Com: $q_{-1}^{(\alpha,\beta)}(x) = 0$; $q_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$; $p_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1$ e $p_1^{(\alpha,\beta)}(x) = x - \dfrac{\beta+1}{\alpha+\beta+2}$

Um possível algoritmo de implementação da geração de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ e $q_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x)$, é a seguir descrito.

Procedimento: $P_{Jacobi}(n,\alpha,\beta,x)$, especifique os valores de n, α, β e x.

Faça: $q \leftarrow 1$, $dq \leftarrow 0$, $p \leftarrow x - \dfrac{1+\beta}{\alpha+\beta+2}$ e $dp \leftarrow 1$

Se $n > 1$, para $i = 2, \cdots, n$ faça:

$g \leftarrow \dfrac{1}{2}\cdot\left[1 - \dfrac{\left(\alpha^2-\beta^2\right)}{(2\cdot i+\alpha+\beta-1)^2 - 1}\right]$,

$h \leftarrow \dfrac{(i-1)\cdot(i+\alpha-1)\cdot(i+\beta-1)\cdot(i+\alpha+\beta-1)}{(2i+\alpha+\beta-1)\cdot(2i+\alpha+\beta-2)^2\cdot(2i+\alpha+\beta-3)}$

$dP \leftarrow p + (x-g)\cdot dp - h\cdot dq$

$P \leftarrow (x-g)\cdot p - h\cdot q$

$q \leftarrow p$

$dq \leftarrow dp$

$p \leftarrow P$

$dp \leftarrow dP$

Saída: $F \leftarrow \dfrac{p}{dp}$

A propriedade de ortogonalidade de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ assegura que todas suas *n* raízes estejam contidas no interior do intervalo de ortogonalidade $[0 < x < 1]$. Tal característica permite determinar a menor das *n* raízes de $p_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ considerando o chute inicial $r_1^{(0)} = 0$ dando origem ao procedimento recursivo:

$$r_1^{(k+1)} = r_1^{(k)} - \left.\frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{q_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x)}\right|_{x=r_1^{(k)}} \quad \text{com } r_1^{(0)} = 0 \text{ para } k = 0, 1, 2, \cdots \text{ até } \left|r_1^{(k+1)} - r_1^{(k)}\right| < tol$$

As demais raízes são determinadas segundo o procedimento, para $i = 2, \cdots, n$:

$$r_i^{(k+1)} = r_i^{(k)} - \frac{\left.\dfrac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{q_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x)}\right|_{x=r_i^{(k)}}}{1 - \left.\dfrac{p_n^{(\alpha,\beta)}(x)}{q_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x)}\right|_{x=r_i^{(k)}} \cdot \left(\displaystyle\sum_{j=1}^{j=i-1} \frac{1}{r_i^{(k)} - r_j^*}\right)}$$

com $r_i^{(0)} = r_{i-1}^* + \varepsilon$ para $k = 0, 1, 2, \cdots$ até $\left|r_i^{(k+1)} - r_i^{(k)}\right| < tol$

Sendo r_j^* para $j = 1, \cdots, i-1$ os valores convergidos das raízes anteriores $(1 < j < i)$