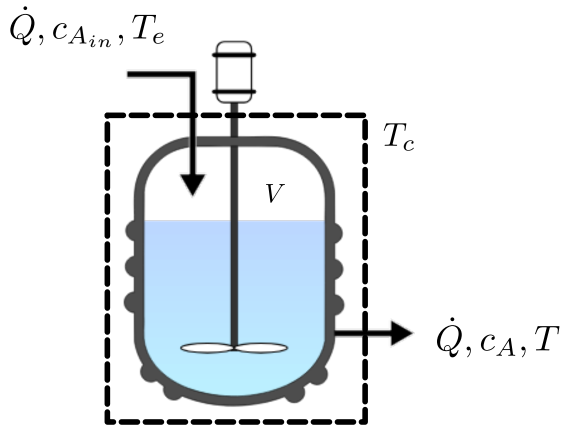
# Estudo de caso: reator contínuo de tanque agitado (CSTR)

$\dot{Q} \rightarrow$ vazão volumétrica;
$c_{A_{in}} \rightarrow$ concentração de A na entrada;
$Te \rightarrow$ temperatura na entrada;
$T_c \rightarrow$ temperatura da camisa externa;
$c_A \rightarrow$ concentração de A na saída;
$T \rightarrow$ temperatura na saída;




Continuous Stirred-Tank Reactor

- Vamos modelar esse problema num contexto em que ocorra uma reação química dentro do reator associada à transformação da espécie A numa outra espécie B;

- Nesse contexto, as equações de balanço de massa e energia, aplicadas ao nosso tanque fornecem:

$$c_{A_{in}} - c_A = \tau k(T) c_A \rightarrow \text{Conservação da massa}$$

$$\rho c_p \dot{Q}(T_e - T) - UA(T - T_c) = -\Delta H V k(T) c_A \rightarrow \text{Primeira Lei da Termodinâmica}$$

- Estamos assumindo aqui uma reação exotérmica, onde a mistura esquenta dentro do reator;

- A não linearidade desse sistema se faz por meio do modelo que iremos utilizar para modelar a cinética da reação:

$$k(T) = k_0 \exp[-E/(RT)] \rightarrow \text{Arrhenius}$$

- Considerando os seguintes valores típicos (realistas) para finalizarmos a modelagem

$$\begin{aligned}
c_{A_{in}} &= 2000 \text{ mol}/m^3\\
V &= 1.0m^3\\
\tau &= 100s\\
k_0 &= 1.0\times 10^6 \text{ s}^{-1}\\
E &= 8.0\times 10^4 \text{ J/mol}\\
R &= 8.314 \text{ J/mol.K}\\
\Delta H &= 4.0\times 10^4 \text{ J/mol}\\
\rho &= 1000kg/m^3\\
c_p &= 4180 \text{ J/kg.K}\\
UA &= 2.0\times 10^4 \text{ W/K}\\
T_e &= 330 \text{ K}\\
T_c &= 300 \text{ K}
\end{aligned}$$

$\tau = V/\dot{Q} \rightarrow$ tempo de residência;
$k(T) \rightarrow$ constante de velocidade da reação;
$\rho \rightarrow$ massa específica da mistura;
$c_p \rightarrow$ calor específico da mistura;
$U \rightarrow$ coeficiente global de troca de calor;
$A \rightarrow$ área de troca térmica;
$\Delta H \rightarrow$ entalpia de reação;

Variáveis físicas do problema

$$\begin{aligned}
&c_a\left(1+10^8 e^{-9622/T}\right) - 2000 = 0\\
&c_A\left(5\times 10^{10} e^{-9622/T}\right) - \left(6.18\times 10^4\right)T + 1.979\times 10^7 = 0
\end{aligned}$$

- Para amansar um pouco as escalas, vamos dividir a primeira equação por 2000 e a segunda pelo fator $1.979\times 10^7$.

$$\begin{aligned}
&c_a\left(0.0005+50000 e^{-9622/T}\right) - 1 = 0\\
&c_A\left(2526 e^{-9622/T}\right) - 0.00312T + 1 = 0
\end{aligned}$$

- Para facilitar mais a nossa percepção, vamos chamar as variáveis $c_a, T$ de x e y respectivamente;

$$u(x,y) = 0.0005x + \left(50000e^{-9622/y}\right)x - 1$$
$$v(x,y) = \left(2526e^{-9622/y}\right)x - 0.00312y + 1$$

Para resolvermos esse sistema, vamos precisar determinar:

$$\frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, \frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0.0005 + 50000e^{-9622/y}$$
$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\left(4.811 \times 10^8\right) x e^{-9622/y}}{y^2}$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 2526e^{-9622/y}$$
$$\frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\left(2.431 \times 10^7\right) x e^{-9622/y}}{y^2} - 0.00312$$

## Para casa (Programa 2) – Data de entrega: 29/09/25

1 – Escreva um programa de computador que resolva esse sistema não-linear (2x2) de equações na forma em que ele aparece aqui;

2 – Em seguida, mude os valores de referência das variavéis fixas para os seguintes valores abaixo:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| ca_in = 2000.0 | VOL = 1.0 | tau = 50.0 | ko = 1.0E+08 | E = 7.0E+04 | R = 8.314 |
| DH = 2.0E+05 | rho = 1.0E+03 | cp = 4.18E+03 | UA = 1.5E+03 | Te = 330.0 | Tc = 280.0 |

e teste diferentes valores iniciais de concentração e temperatura, por exemplo (600, 1200, 2000) para ca_0 e (305, 350, 420) e verifique se o sistema evolui para soluções diferentes (distintas);

3 – Finalmente, implemente uma varredura automatizada de pares de valores iniciais (ca_0, T_0) em que para cada par considerado o programa deverá plotar uma cor associada ao valor de saída calculado tanto de ca quanto de T na saída do reator (2 gráficos);

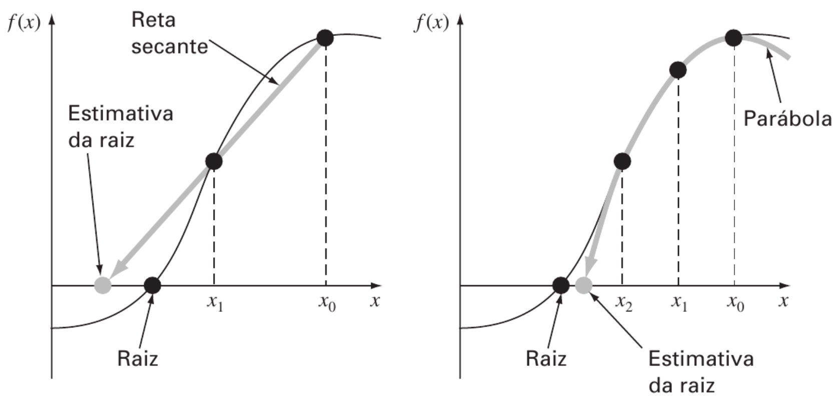
# Métodos especiais para polinômios

– Grande parte da história da matemática tem sido empregada na busca por fórmulas fechadas para a solução de polinômios;

– Polinômios aparecem naturalmente em diferentes problemas de Engenharia, seja na forma direta, em que um problema é regido naturalmente por um polinômio, seja na forma indireta, por exemplo, em problemas de vibração, regidos por edos, frequentemente a solução da edo para pela solução de uma equação característica de natureza polinomial;

– Veremos daqui para frente alguns métodos especiais destinados à busca de raízes de polinômios;

## O método de Müller




– O método de Müller é uma extensão do método da secante;

– Ao invés de uma reta que cruza 2 pontos da função, buscamos agora uma parábola que cruza 3 pontos da função:

$$\boxed{x_0, f(x_0); \quad x_1, f(x_1); \quad x_2, f(x_2).}$$

– Para montarmos esse método, considere escrevermos a parábola que estamos buscando da seguinte forma:

$\boxed{f_2(x) = a(x-x_2)^2 + b(x-x_2) + c,}$ em que $a, b, c$ são números a serem determinados e $f_2(x) \neq f(x)$ → polinômio cujas raízes queremos saber

↓ parábola com 3 pontos comuns à f(x)

– Para encontrarmos $a, b, c$ igualamos $f_2(x) = f(x)$ nos pontos comuns, ou seja, em

$$\boxed{x_0, f(x_0); \quad x_1, f(x_1); \quad x_2, f(x_2).}$$

- Fazendo isso, obtemos:

$$\boxed{\begin{array}{ll} f(x_0) = a(x_0 - x_2)^2 + b(x_0 - x_2) + c & (1) \\ f(x_1) = a(x_1 - x_2)^2 + b(x_1 - x_2) + c & (2) \\ f(x_2) = a(x_2 - x_2)^2 + b(x_2 - x_2) + c & (3) \end{array}} \longrightarrow \boxed{c = f(x_2) \quad (4)}$$

- O próximo passo agora é substituir (4) em (1) e (2), fazendo isso:

$$\boxed{\begin{array}{ll} f(x_0) - f(x_2) = a(x_0 - x_2)^2 + b(x_0 - x_2) & (5) \\ f(x_1) - f(x_2) = a(x_1 - x_2)^2 + b(x_1 - x_2) & (6) \end{array}}$$

- Para facilitar um pouco a nossa vida, vamos rebatizar algumas dessas variáveis, como:

$$\boxed{\begin{array}{l} h_0 = x_1 - x_0, \quad h_1 = x_2 - x_1 \qquad (7) \\ \delta_0 = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \quad \delta_1 = \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} \end{array}}$$

- Substituindo (7) em (5) e (6) chegamos em:

$$\boxed{\begin{array}{ll} (h_0 + h_1)b - (h_0 + h_1)^2 a = h_0\delta_0 + h_1\delta_1 & (8) \\ h_1 b - h_1^2 a = h_1\delta_1 & (9) \end{array}}$$

$$\downarrow$$

**Para casa**

1 – Combinando (8) e (9) isole a e b para obter: $a = \dfrac{\delta_1 - \delta_0}{h_1 + h_0}; \quad b = ah_1 + \delta_1, \quad c = f(x_2)$

2 – Rescreva a, b e c em termos de: $x_0, x_1, x_2, f(x_0), f(x_1), f(x_2)$

- O passo final para aplicação do método de Müller consiste em utilizar os coeficientes a, b e c junto à fórmula quadrática para obter as raízes deste polinômio aproximador;

- Para isso, voltemos nossa atenção à equação original para o polinômio aproximador: $f_2(x) = a(x - x_2)^2 + b(x - x_2) + c$;

- Chamando $x^* = x - x_2$, temos: $f_x(x^*) = ax^{*2} + bx^* + c \rightarrow x^* = \dfrac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$;

- Nosso método está quase pronto, falta só averiguarmos uma coisinha...

- Na nossa parametrização, definimos a como $a = \dfrac{\delta_1 - \delta_0}{h_1 + h_0}$, com $\delta_0 = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$ e $\delta_1 = \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$;

- Dessa forma, a é definido como uma diferença entre deltas e a chance de a << 1 é muito grande;

- Nesse limite, o discriminante $b^2 - 4ac$ tenderia à $\approx b^2$ e $x^*$seria dado por uma diferença entre números em ponto flutuante quase iguais;

- Nesse cenário, podemos utilizar a seguinte fórmula alternativa para a solução de uma equação do segundo grau:

$$\boxed{x^* = x_{i+1} - x_i = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}} \qquad (10)}$$

Aqui temos duas raízes, nossa escolha natural será aquela com o maior denominador, pois será a que mais aproximará $x_{i+1}$ de $x_i$;

- A fórmula alternativa da quadrática, equação (10) pode ser obtida por meio das fórmulas de Viète;

- Esta denominação deve-se a François Viète e suas fórmulas são especialmente úteis em álgebra;

- A demonstração dessa fórmula alternativa para a quadrática está fora do escopo deste curso;

- O método de Müller funciona tanto para raízes reais quanto para raízes complexas;

## Para treinarmos um pouco...

Exemplo: $f(x) = x^3 - 13x - 12$

$x_0 = 6.5, \quad x_1 = 6.0, \quad x_2 = 5.5$

$h_0 = x_1 - x_0, \quad h_1 = x_2 - x_1$

$$\delta_0 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \ \delta_1 = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

$$a = \frac{\delta_1 - \delta_0}{h_1 + h_0}; \quad b = ah_1 + \delta_1, \quad c = f(x_2)$$

$$x_3 = x_2 - \frac{2c}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}}$$ → raiz mais próxima

- Faça uma planilha que mostre a evolução para as 4 primeiras iterações de todos os parâmetros da solução ao lado;

- Considere que a cada iteração o novo $x_0$ é o $x_3$ da iteração anterior;

- Considere ainda que sempre $x_1 = x_0 - 0.5$
  $x_2 = x_1 - 0.5$

- Com 5 casas decimais, qual o erro absoluto após 4 iterações, sendo o valor exato da raiz igual à 4?

## Programa 3 – Müller x Secante (06/10/25)

Considere um polinômio de ordem 5, dado por

$$f(x) = (x-1)(x-3)(x-5)(x-7)(x-9), \tag{2.77}$$

cujas raízes sabemos ser $x_r = [1, 3, 5, 7, 9]$. Para esse cenário, escreva um programa de computador que permita ao usuário escolher entre os métodos da secante e de Müller para encontrar aproximações numéricas dessas raízes reais. O programa deverá iniciar a busca a partir de valores definidos pelo usuário. Para fins de análise, considere os seguintes valores fixos pré-definidos de $x_0$, próximos das raízes, conforme a lista:

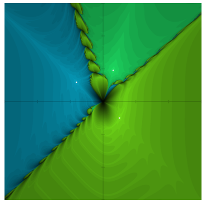
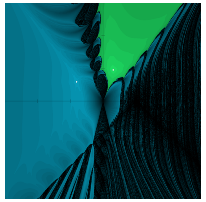
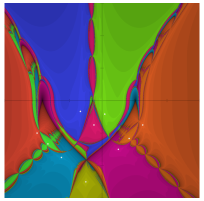
$$x_0 = [0.5, \ 2.0, \ 4.1, \ 6.5, \ 8.4]$$

Para cada valor de $x_0$, os métodos deverão construir os pontos adicionais conforme descrito:

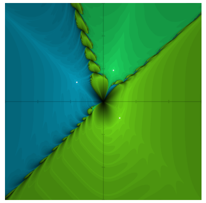
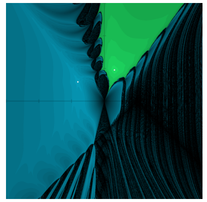
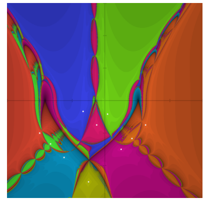
- Método da Secante: utilizar os pontos iniciais $x_0$ e $x_1 = x_0 + \delta x$;
- Método de Müller: utilizar os pontos iniciais $x_0$, $x_1 = x_0 + \delta x$ e $x_2 = x_1 + \delta x$;

Utilize o valor de $\delta x = 0.05$ para ambos os métodos. O programa deverá calcular e registrar, a cada iteração: a estimativa atual da raiz e o erro relativo entre duas iterações sucessivas.

Os dados de cada simulação devem ser salvos em arquivos .dat, e ao final, o programa (ou um script auxiliar) deverá produzir um gráfico comparando a evolução do erro relativo em função do número de iterações para os dois métodos, com curvas separadas para cada valor de $x_0$. O gráfico final deverá utilizar escala logarítmica no eixo vertical para melhor visualização das ordens de grandeza dos erros.

# O método de Bairstow

- É um dos métodos mais bonitos para obtenção de zeros de funções;

- Vale tanto para raízes reais quanto para raízes complexas;

- É um método iterativo que possui rápida velocidade de convergência;

- Se baseia numa mistura indireta entre o método de Müller com o de Newton-Raphson;

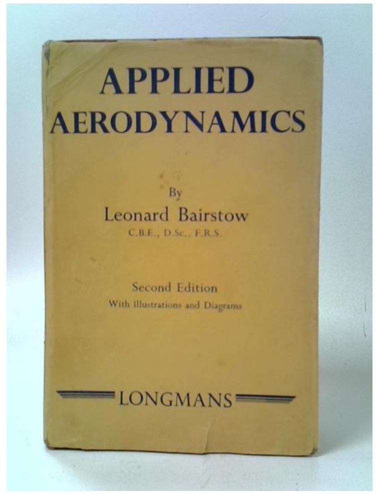
- Foi proposto em 1920 por um aerodinamicista chamado Leonard Bairstow;

- Aparece pela primeira vez como um apêndice do livro de Bairstow chamado: "Applied aerodynamics";

- Usa apenas álgebra real e se baseia no Teorema Fundamental da Álgebra que diz:

> *"Todo polinômio de grau n com coeficientes reais possui exatamente n raízes (contadas com multiplicidade) que podem ser complexas e ou reais, sendo que as raízes complexas ocorrem em pares conjugados."*

- É baseado na ideia de zerar o resto associado a um processo de divisão do polinômio que se deseja conhecer as raízes por um outro polinômio: deflação polinomial + método de Newton-Raphson para zerar o resto da divisão;



# A ideia do método

– Considere o seguinte polinômio, representado em sua forma fatorada: $\boxed{f(x) = (x+1)(x-4)(x-5)(x+3)(x-2)}$

– Este é um polinômio de quinta ordem. Note que se dividimos este polinômio pelo monômio $(x+1)$, obtemos como resultado um polinômio de quarta ordem, com resto zero.

– Porém, se dividirmos o mesmo polinômio pelo monômio $(x+6)$, obtemos um resto não nulo;

<u>Essência do método de Bairstow:</u> dividir um polinômio por outro e verificar o resto dessa divisão para a partir daí ir ajustando os coeficientes do polinômio divisor até zerar o resto.

**<u>Algoritmo geral (ingênuo)</u>**

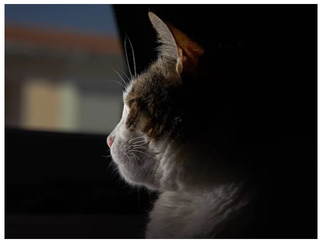
1 – Escolhe-se uma raiz inicial: $x = t$;
2 – Divide-se o polinômio por: $(x - t)$;
3 – Se o resto da divisão é zero, a raiz é: $x = t$;
4 – Se o resto da divisão não for zero: ajusta-se a raiz e retorna-se ao passo 2;

– A divisão de um polinômio por um monômio é chamada de deflação polinomial;

Para aplicarmos esse algoritmo precisamos nos aprofundar em 2 partes importantes:

1 – Como checar o resto da divisão de um polinômio por um monômio?

2 – Como ajustar a raiz para zerar o resto?



# Deflação polinomial: algoritmo de Briot-Ruffini

- Considere o seguinte polinômio: $p(x) = 2x^3 + 3x^2 - 4$;
- Desejamos dividir $p(x)$ pelo monômio: $D(x) = x + 1$

Passo 1: reescrevemos $D(x)$ na forma: $D(x) = x - (\overset{a}{-1})$

Passo 2: transcrevemos os coeficientes de $p(x)$ na seguinte forma:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 2 | 3 | 0 | −4 |
| $a \leftarrow$ −1 | | | | |
| | | | | |

- Passo 3: passamos o primeiro coeficiente para a última linha, dentro da mesma coluna:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 2 | 3 | 0 | −4 |
| −1 | | | | |
| | 2 | | | |

- Passo 4: multiplicamos esse primeiro coeficiente por $a$ e passamos o resultado para cima avançando para a próxima casa à direita:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 2 | 3 | 0 | −4 |
| −1 | | −2 | | |
| | 2 | | | |

- Passo 5: somamos os valores da coluna e repetimos os passos 3 e 4 até a última coluna:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 2 | 3 | 0 | −4 |
| −1 | | −2 | −1 | 1 |
| | 2 | 1 | −1 | −3 |

coeficientes do novo polinômio

resto

Para esse exemplo, temos que o resultado $Q(x)$ da divisão de $p(x)$ por $D(x)$ é:

$$\boxed{Q(x) = 2x^2 + x - 1 \quad \text{com resto } r = -3}$$

Isso significa que:

$$\boxed{\underbrace{2x^3 + 3x^2 - 4}_{p(x)} = \underbrace{(x+1)}_{D(x)}\underbrace{(2x^2 + x - 1)}_{Q(x)} \underbrace{-\,3}_{r}} \rightarrow \boxed{\frac{p(x)}{D(x)} = Q(x) + r}$$

Para treinar um pouco: determine o resto da divisão entre $f(x) = x^5 - 5x^4 - 5x^3 + 35x^2 + 24x - 120$ e o seguinte monômio: $D(x) = x - 5$

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | 1 | −5 | −5 | 35 | 24 | −120 |
| 5 | | 5 | 0 | −25 | 50 | −130 |
| | 1 | 0 | −5 | 10 | −26 | 10 |

$$\boxed{\frac{p(x)}{D(x)} = Q(x) + r} \longrightarrow$$

Essa relação expressa que a divisão de um polinômio geral de grau "n", denotado por $f_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_n x^n$ por um monômio $(x - t)$ fornece como resultado um segundo polinômio de grau "n−1", representado por $f_{n-1}(x) = b_1 + b_2 x + b_3 x^2 + ... + b_n x^{n-1}$ com resto $R = b_0$, em que os i−ésimos coeficientes de a e b se relacionam por meio da seguinte relação de recorrência:

$$\boxed{\begin{array}{l} b_n = a_n \\ b_i = a_i + b_{i+1} t, \quad \text{para} \;\; i = n - 1 \to 0 \end{array}}$$

*"Essas relações de recorrência são equivalentes à aplicação do algoritmo de Briot−Ruffini para a divisão de um polinômio geral por um monômio."*

## Voltando ao exemplo dado anteriormente...

$$\underbrace{2x^3+3x^2-4}_{p(x)} = \underbrace{(x+1)}_{D(x)}\underbrace{(2x^2+x-1)}_{Q(x)} \underbrace{-3}_{r} \longrightarrow \boxed{\frac{p(x)}{D(x)} = Q(x) + r}$$

- No exemplo dado: $f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + ... + a_nx^n \longrightarrow f_n(x) = 2x^3 + 3x^2 - 4;$

$f_{n-1}(x) = b_1 + b_2x + b_3x^2 + ... + b_nx^{n-1} \longrightarrow f_{n-1}(x) = 2x^2 + x - 1;$

$D(x) = (x - t) \longrightarrow D(x) = x + 1 \rightarrow t = -1;$

$$\begin{aligned} a_0 &= -4 \\ a_1 &= 0 \\ a_2 &= 3 \\ a_n &= a_3 = 2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b_1 &= -1 \\ b_2 &= 1 \\ b_n &= b_3 = 2 \end{aligned}$$

$t = -1, b_3 = b_n = a_n = 2$

| $i$ | $a_i$ | $b_{i+1}$ | $b_i = a_i + b_{i+1}t$ |
|---|---|---|---|
| 2 | 3 | 2 | $b_2 = 1 \rightarrow 3+2\times(-1)$ |
| 1 | 0 | 1 | $b_1 = -1 \rightarrow 0+1\times(-1)$ |
| 0 | -4 | -1 | $b_0 = R = -3 \rightarrow -4+1\times(-1)$ |

- Para permitir o cálculo de raízes complexas, o método de Bairstow divide o polinômio por um fator quadrático, do tipo:

$$\boxed{x^2 - rx - s} \longrightarrow x_r = \frac{r \pm \sqrt{r^2+4s}}{2}$$

- Essa proposta é feita devido ao fato de que essas raízes complexas aparecem em pares (conjugados);

- A ideia é que se $x^2 - rx - s$ for um divisor exato, então podemos encontrar as raízes que estamos buscando por meio da aplicação direta da fórmula quadrática;

- O objetivo passa a ser então descobrir valores de "r" e "s" que façam o fator quadrático ser um divisor exato do polinômio cujas raízes queremos obter utilizando deflação polinomial;

- Na divisão de $f_n(x)$ pelo fator quadrático que estamos propondo, temos como resultado um polinômio $f_{n-2}(x)$ dado por $f_{n-2} = b_2 + b_3x + b_4x^2 + ...b_{n-1}x^{n-3} + b_nx^{n-2}$ com resto $\boxed{R = b_1(x-r) + b_0;}$

- Em que $b_0$ e $b_1$ podem ser determinados pela seguinte relação de recorrência: $\boxed{b_n = a_n} \rightarrow \boxed{b_{n-1} = a_{n-1} + rb_n}$

$$\downarrow$$

$$\boxed{b_i = a_i + rb_{i+1} + sb_{i+2}}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{i = n-2 \rightarrow 0}$$

- Como o resto da divisão é $R = b_1(x-r) + b_0 \rightarrow$ temos que zerar $b_0$ e $b_1$;

- Mas note que $b_0$ e $b_1$ são ambos funções de "r" e "s", que são os coeficientes que estamos querendo ajustar: $b_0(r,s)$ e $b_1(r,s)$;

- Vamos então recorrer à ideia de expansão em série de Taylor:

$$\boxed{\begin{aligned} b_0(r+\Delta r, s+\Delta s) &= b_0 + \frac{\partial b_0}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial b_0}{\partial s}\Delta s \\ b_1(r+\Delta r, s+\Delta s) &= b_1 + \frac{\partial b_1}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial b_1}{\partial s}\Delta s \end{aligned}} \rightarrow$$

A ideia aqui é procurar variações de "r" e "s", ou seja, os "deltas" que zerem $b_0(r+\Delta r, s+\Delta s)$ e $b_1(r+\Delta r, s+\Delta s)$

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial b_1}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial b_1}{\partial s}\Delta s &= -b_1 \\ \frac{\partial b_0}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial b_0}{\partial s}\Delta s &= -b_0 \end{aligned}} \rightarrow$$

Se conhecermos as derivadas parciais, passamos a ter um sistema de duas equações e duas icógnitas;

- Bairstow mostrou que essas derivadas parciais podem ser obtidas por meio de um processo de divisão sintética, de modo análogo à determinação dos próprios "b's" utilizando as seguintes relações de recorrência:

$$\boxed{\begin{aligned} &c_n = b_n \\ &c_{n-1} = b_{n-1} + rc_n \\ &c_i = b_i + rc_{i+1} + sc_{i+2} \rightarrow i = n-2 \rightarrow 1 \end{aligned}} \quad \text{com} \quad \boxed{c_1 = \frac{\partial b_0}{\partial r}, \quad c_2 = \frac{\partial b_0}{\partial s} = \frac{\partial b_1}{\partial r}, \quad c_3 = \frac{\partial b_1}{\partial s}}$$

- Com essas equações encontramos os "deltas" que melhoram as aproximações iniciais para "r" e "s" e vamos iterando até obtermos um resto bem pequeno da divisão do polinômio cujas raízes queremos encontrar pelo polinômio quadrático proposto. Quando isso ocorre, usamos a fórmula quadrática para determinar o par de raízes que buscamos;

## Um resumo do método

1 – Supomos aproximições iniciais para "r" e "s";
2 – Mapeamos os a's;
3 – Estimamos os b's;
4 – Estimamos os c's;
5 – Montamos um sistema linear 2 x 2;
6 – Resolvemos para encontrar os "deltas";
7 – Atualizamos os "r" e "s";
8 – Voltamos ao passo 3 até que os deltas fiquem muito pequenos:
9 – Resolvemos a quadrática: Habemus raízes;
10 – Verificamos a ordem do polinômio que sobrou;
11 – Vamos aplicando o Método Inteiro até resolvermos todas as raízes;

## Fluxograma

$b_n = a_n \rightarrow b_{n-1} = a_{n-1} + rb_n$

$b_i = a_i + rb_{i+1} + sb_{i+2}$

$i = n-2 \rightarrow 0$

$c_n = b_n$
$c_{n-1} = b_{n-1} + rc_n$
$c_i = b_i + rc_{i+1} + sc_{i+2} \rightarrow i = n-2 \rightarrow 1$

$c_1 \Delta r + c_2 \Delta s = -b_0$

$c_2 \Delta r + c_3 \Delta s = -b_1$

$r_i = r_{i-1} + \Delta r$
$s_i = s_{i-1} + \Delta s$

$\left|\frac{\Delta r}{r}\right| \times 100\% \leq tol_1$ ?
e
$\left|\frac{\Delta s}{s}\right| \times 100\% \leq tol_2$ ?

Não

Sim

Se em $f_{n-2}(x) \rightarrow n-2 \geq 3$

Aplica-se novamente o método ao quociente

Se em $f_{n-2}(x) \rightarrow n-2 = 2$

$$x_r = \frac{r \pm \sqrt{r^2 + 4s}}{2}$$

Se em $f_{n-2}(x) \rightarrow n-2 = 1$

$$x_r = -\frac{s}{r}$$

Método de Bairstow

Enunciado do Problema. Use o método de Bairstow para determinar as raízes do polinômio

$$\boxed{f_5(x) = x^5 - 3{,}5x^4 + 2{,}75x^3 + 2{,}125x^2 - 3{,}875x + 1{,}25}$$

Use aproximações iniciais $r = s = -1$ e itere até o nível de $\varepsilon_s = 1\%$.

Solução. As Equações (7.32) e (7.36) podem ser usadas para calcular

$$b_5 = 1 \quad b_4 = -4{,}5 \quad b_3 = 6{,}25 \quad b_2 = 0{,}375 \quad b_1 = -10{,}5$$
$$b_0 = 11{,}375$$
$$c_5 = 1 \quad c_4 = -5{,}5 \quad c_3 = 10{,}75 \quad c_2 = -4{,}875 \quad c_1 = -16{,}375$$

Logo, as equações simultâneas para $\Delta r$ e $\Delta s$ que devem ser resolvidas são

$$-4{,}875\Delta r + 10{,}75\Delta s = 10{,}5$$
$$-16{,}375\Delta r - 4{,}875\Delta s = -11{,}375$$

e cuja solução é $\Delta r = 0{,}3558$ e $\Delta s = 1{,}1381$. Portanto, nossas aproximações iniciais podem ser corrigidas para

$$r = -1 + 0{,}3558 = -0{,}6442$$
$$s = -1 + 1{,}1381 = 0{,}1381$$

e os erros aproximados podem ser calculados pelas Equações (7.37) e (7.38),

$$|\varepsilon_{a,r}| = \left|\frac{0{,}3558}{-0{,}6442}\right| 100\% = 55{,}23\% \qquad |\varepsilon_{a,s}| = \left|\frac{1{,}1381}{0{,}1381}\right| 100\% = 824{,}1\%$$

A seguir, os cálculos são repetidos usando-se os valores revistos de $r$ e $s$. Aplicando as Equações (7.32) e (7.36) obtem-se:

$$b_5 = 1 \quad b_4 = -4{,}1442 \quad b_3 = 5{,}5578 \quad b_2 = -2{,}0276 \quad b_1 = -1{,}8013$$
$$b_0 = 2{,}1304$$
$$c_5 = 1 \quad c_4 = -4{,}7884 \quad c_3 = 8{,}7806 \quad c_2 = -8{,}3454 \quad c_1 = 4{,}7874$$

Portanto, é preciso resolver

$$-8{,}3454\Delta r + 8{,}7806\Delta s = 1{,}8013$$
$$4{,}7874\Delta r - 8{,}3454\Delta s = -2{,}1304$$

e obtêm-se $\Delta r = 0{,}1331$ e $\Delta s = 0{,}3316$, os quais podem ser usados para corrigir as estimativas da raiz para

$$r = -0{,}6442 + 0{,}1331 = -0{,}5111 \qquad |\varepsilon_{a,r}| = 26{,}0\%$$
$$s = 0{,}1381 + 0{,}3316 = 0{,}4697 \qquad |\varepsilon_{a,s}| = 70{,}6\%$$

Pode-se continuar os cálculos, com o resultado de que após quatro iterações o método converge para os valores $r = -0{,}5$ ($|\varepsilon_{a,r}| = 0{,}063\%$) e $s = 0{,}5$ ($|\varepsilon_{a,s}| = 0{,}040\%$). A Equação (7.39) pode então ser usada para calcular as raízes como sendo

$$x = \frac{-0{,}5 \pm \sqrt{(-0{,}5)^2 + 4(0{,}5)}}{2} = 0{,}5, -1{,}0$$

Nesse ponto, o quociente é a equação cúbica

$$f(x) = x^3 - 4x^2 + 5{,}25x - 2{,}5$$

O método de Bairstow pode ser aplicado a esse polinômio usando-se os resultados do passo anterior, $r = -0{,}5$ e $s = 0{,}5$, como aproximações iniciais. Cinco iterações fornecem as estimativas $r = 2$ e $s = -1{,}249$, as quais podem ser usadas para calcular

$$x = \frac{2 \pm \sqrt{2^2 + 4(-1{,}249)}}{2} = 1 \pm 0{,}499i$$

Nesse ponto, o quociente é um polinômio de grau um que pode ser resolvido diretamente pela Equação (7.40) para determinar a quinta raiz: 2.

# Fractais de Bairstow

- Dependendo do chute inicial para "r" e "s", o método pode apresentar divergência;

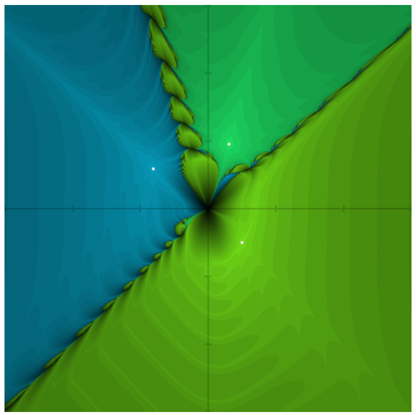
- Uma forma de mapear bons valores para essa escolha consiste na construção de um mapa: "fractal de Bairstow";

- Esse mapa atribui uma cor associada à velocidade de convergência do método (número de iterações por exemplo) a cada par (r,s) inicial;

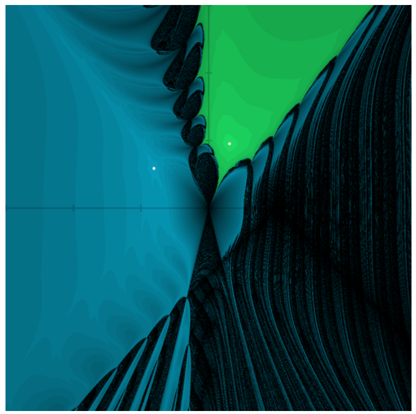
- Para combinações não-convergentes de (r,s) pode-se atribuir por exemplo a cor preta, indicando um ponto de divergência do método;

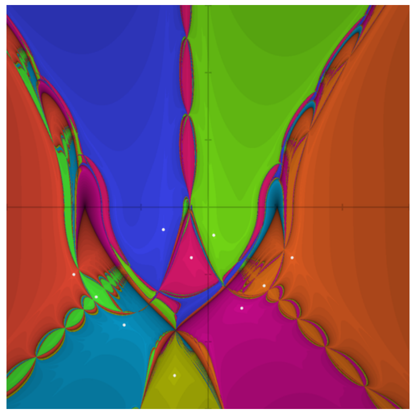
- É uma mistura de análise numérica com análise dinâmica não-linear bem interessante;

$$f(x) = x^6 - x$$



$$f(x) = x^5 - 1$$





$$f(x) = 6x^5 + 11x^4 - 33x^3 - 33x^2 + 11x + 6$$