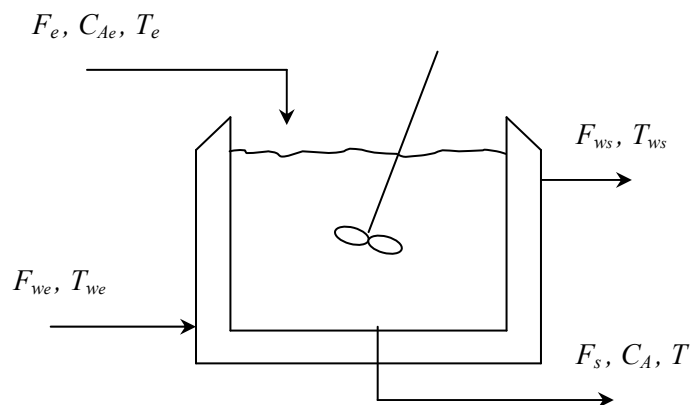


Capítulo 4

Soluções de Equações em uma Variável

Considerando o problema de um reator contínuo de tanque agitado (CSTR) não-isotérmico, com propriedades físicas constantes (ρ , c_p):



para uma reação de primeira ordem do tipo:

$$r_A = k C_A, \quad \text{onde } k(T) = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{R \cdot T}}$$

temos as seguintes equações de balanço de massa e energia do modelo:

$$\frac{dV}{dt} = F_e - F_s$$

$$\frac{d(V C_A)}{dt} = F_e C_{Ae} - F_s C_A - k C_A V$$

$$\rho V c_p \frac{dT}{dt} = F_e \rho c_p (T_e - T) + (-\Delta H_r) k C_A V - U A_t (T - T_w)$$

em que F_e e F_s são as vazões volumétricas de entrada e saída, respectivamente, V é o volume do meio reacional, C_A é a concentração molar do reagente, T e T_w são as temperaturas do meio reacional e do fluido de refrigeração, respectivamente, ΔH_r é a entalpia de reação, U é o coeficiente global de transferência de calor e A_t é a área de troca térmica.

No estado estacionário:

$$F_e = F_s \equiv F$$

$$\frac{F}{V}(C_{Ae} - C_A) = k C_A$$

$$\frac{F}{V}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho c_p V}(T - T_w) = \frac{(-\Delta H_r) k C_A}{\rho c_p}$$

definindo $\tau \equiv \frac{V}{F}$ como o tempo de residência médio no reator:

$$C_A = \frac{C_{Ae}}{1 + k\tau} \quad e$$

$$\frac{1}{\tau}(T - T_e) + \frac{U A_t}{\rho c_p V}(T - T_w) = \frac{(-\Delta H_r) C_{Ae} k}{\rho c_p (1 + k\tau)}$$

Substituindo a equação de balanço de massa no balanço de energia, multiplicando esta última por τ/T_e e definindo os adimensionais $\beta_w \equiv \frac{U A_t \tau}{\rho c_p V}$ e $\alpha_r \equiv \frac{(-\Delta H_r) C_{Ae}}{\rho c_p T_e}$, resulta em:

$$\frac{(T - T_e)}{T_e} + \beta_w \frac{(T - T_w)}{T_e} = \alpha_r \frac{k\tau}{1 + k\tau}$$

Dividindo a constante cinética $k(T)$ pela sua expressão em função da temperatura T_e :

$k_e \equiv k(T_e) = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_e}}$, temos:

$$\frac{k}{k_e} = \exp\left[\frac{-E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_e}\right)\right]$$

ou ainda $k(T) = k_e \exp\left[-\gamma\left(\frac{T_e}{T} - 1\right)\right]$, onde $\gamma \equiv \frac{E}{RT_e}$

Aplicando a mudança de variável $x \equiv \frac{T - T_e}{T_e}$, o balanço de energia é reescrito como:

$$x + \beta_w x + \beta_w \frac{(T_e - T_w)}{T_e} = \alpha_r \frac{k\tau}{1 + k\tau}$$

Para expressar a constante cinética em termos de x , usamos a relação $\frac{T}{T_e} = x + 1 \Rightarrow \frac{T_e}{T} = \frac{1}{x + 1}$:

$$k(x) = k_e \exp\left(\frac{\gamma x}{1 + x}\right)$$

Finalmente, definindo $D_a \equiv k_e \cdot \tau$, conhecido como número de Damköhler, e os novos adimensionais:

$$\frac{\beta_w}{1 + \beta_w} \left(\frac{T_w - T_e}{T_e} \right) \equiv \beta$$

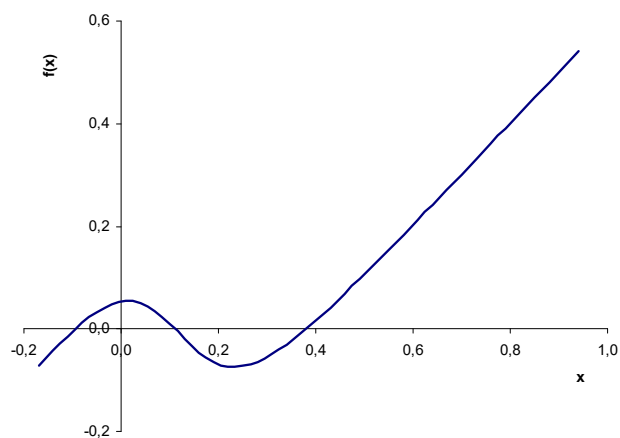
$$\frac{\alpha_r}{1 + \beta_w} \equiv \alpha$$

Resulta na seguinte equação algébrica na variável x , com quatro parâmetros característicos do sistema, α , β , γ e D_a :

$$f(x) = x - \beta - \alpha \frac{D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}{1 + D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)} = 0$$

Por exemplo, para $\alpha = 0,5$, $\beta = -0,1$, $\gamma = 20$ e $D_a = 0,1$, temos:

$$f(x) = x + 0,1 - \frac{0,05 \exp\left(\frac{20x}{1+x}\right)}{1 + 0,1 \exp\left(\frac{20x}{1+x}\right)} = 0$$



Portanto, a solução em estado estacionário do CSTR não-isotérmico implica em encontrar as raízes da equação:

$$\boxed{f(x) = 0} \quad \Rightarrow \quad \text{Equação algébrica em uma variável}$$

Para o caso onde $f(x)$ é uma equação linear: $f(x) = a x - b$, a solução é simplesmente:

$$x = \frac{b}{a}$$

No exemplo do reator CSTR, este caso ocorre quando não há geração de calor ($\alpha = 0$), ou seja: $f(x) = x - \beta$ e:

$$\boxed{x = \beta}$$

Voltando às variáveis originais:

$$x = \frac{\beta_w}{1 + \beta_w} \left(\frac{T_w - T_e}{T_e} \right) = \frac{T - T_e}{T_e} \quad \rightarrow \quad \boxed{T = T_e (1 + x)}$$

$$(T - T_e)(1 + \beta_w) = \beta_w (T_w - T_e)$$

$$(T - T_e) = \beta_w (T_w - T)$$

$$\boxed{\rho c_p F (T - T_e) = U A_t (T_w - T)}, \text{ que é o balanço de energia sem reação.}$$

Para o caso onde $f(x)$ é uma equação não-linear: $f(x) = 0$, $x \in \mathfrak{X}$, geralmente não existe uma solução analítica e, portanto, algum método numérico deve ser aplicado, tais como:

- substituições sucessivas (substituição direta ou iteração de ponto fixo)
- Newton
- Newton modificado
- Newton-secante (ou secante)
- Regula falsi
- Regula falsi modificado
- Bisseção (dicotomia)
- Busca aleatória
- Continuação

Que são assuntos deste capítulo, começando pelos métodos diretos (que não fazem uso de derivadas da função): bisseção e busca aleatória. Os métodos da secante, regula falsi e regula falsi modificado também podem ser classificados nesta classe de métodos, contudo eles serão discutidos somente na Seção 4.4 (métodos quasi-Newton).

4.1 Métodos diretos

Todos os métodos diretos de busca de raízes de equações algébricas não-lineares em uma variável iniciam com a busca do intervalo em que, obrigatoriamente, a raiz está contida. Sendo a a extremidade inferior do intervalo e b a extremidade superior do intervalo, deve-se ter necessariamente:

$$f(a) \cdot f(b) < 0$$

O próximo ponto no procedimento recursivo de busca, x , é um ponto contido entre a e b , que pode ser descrito matematicamente por:

$$x = a + \lambda \cdot (b - a) \quad \text{onde } 0 \leq \lambda \leq 1$$

Os métodos diretos diferem entre si simplesmente pela forma com que o parâmetro λ é escolhido em cada iteração.

No **método da biseção**, o valor de λ é mantido constante e igual a 0,5. O método da biseção é uma forma bastante simplificada do método de Wegstein (Seção 4.4), onde o cálculo de $x^{(k+1)}$ é uma simples média aritmética dos pontos x_R e x_L (pontos à direita e à esquerda da raiz, respectivamente):

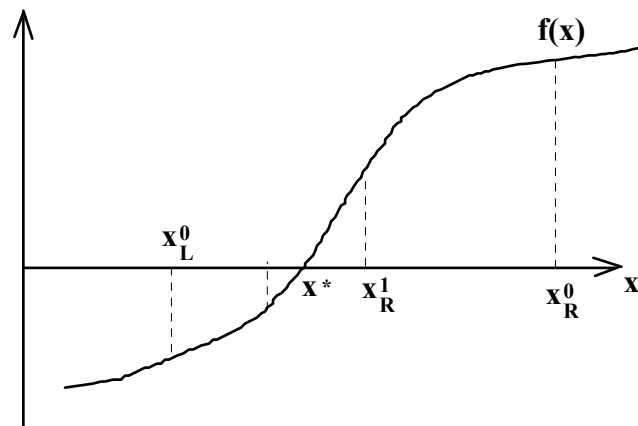
$$x^{(k+1)} = \frac{x_R^{(k)} + x_L^{(k)}}{2} = x_L^{(k)} + \lambda \cdot (x_R^{(k)} - x_L^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

em que

$$x_R^{(k)} = \begin{cases} x^{(k)}, & \text{se } \text{sign}[f(x^{(k)})] = \text{sign}[f(x_R^{(k-1)})] \\ x_R^{(k-1)}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$x_L^{(k)} = \begin{cases} x^{(k)}, & \text{se } \text{sign}[f(x^{(k)})] = \text{sign}[f(x_L^{(k-1)})] \\ x_L^{(k-1)}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e os pontos iniciais $x_L^{(0)}$ e $x_R^{(0)}$ devem satisfazer a condição: $\text{sign}[f(x_L^{(0)})] = -\text{sign}[f(x_R^{(0)})]$, onde a função $\text{sign}(x)$ fornece o sinal de x .



O número máximo de biseções que devem ser efetuadas para obter uma precisão desejada, ϵ , é dado por:

$$n = \log_2 \left(\frac{|x_R^{(0)} - x_L^{(0)}|}{\epsilon} \right).$$

No **método de busca aleatória**, se utiliza um gerador de números aleatórios, específico do equipamento de cálculo que se está empregando, para determinar o valor de λ . Por exemplo, na tabela abaixo são mostrados os 10 primeiros números aleatórios gerados no *MATHCAD*[®] no intervalo $[0, 1]$.

sorteio	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
λ	0,472	0,847	0,456	0,983	0,739	0,196	0,839	0,501	0,027	0,573

Algoritmo: Métodos diretos

Dados $a, b, \varepsilon, \delta, k_{\text{máximo}}$ e o método para cálculo de λ ,

$$f_a \leftarrow f(a)$$

$$f_b \leftarrow f(b)$$

se $f_a \cdot f_b > 0$ então entrar com novos valores de a e b

$$k \leftarrow 0$$

Faça

$$\lambda \leftarrow h(a, b)$$

$$x \leftarrow a + \lambda \cdot (b - a)$$

$$y \leftarrow f(x)$$

se $y \cdot f_a > 0$, então

$$f_a \leftarrow y$$

$$a \leftarrow x$$

senão

$$f_b \leftarrow y$$

$$b \leftarrow x$$

$$\Delta \leftarrow |b - a|$$

$$k \leftarrow k + 1$$

enquanto $(\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta)$ e $k < k_{\text{máximo}}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{\text{máximo}}$ então x contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x)$, senão o número máximo de iterações foi atingido sem convergência, devendo-se modificar o intervalo inicial $[a, b]$ ou trocar o método de cálculo de λ .

A função $h(a, b)$ deve ser escolhida de acordo com o método:

- 1) Método da bisseção: $h(a, b) = 0,5$;
- 2) Método da busca aleatória: $h(a, b) = \text{rand}()$, onde $\text{rand}()$ é uma função geradora de números aleatórios entre 0 e 1.

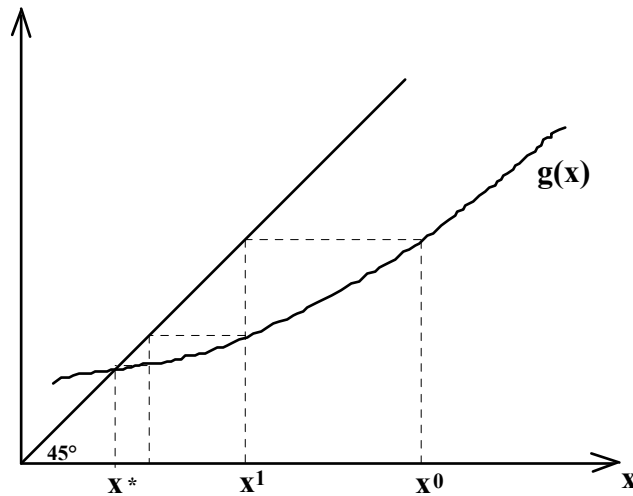
4.2 Substituições sucessivas

No método das substituições sucessivas, o processo iterativo é aplicado à equação algébrica na forma modificada:

$$x = g(x)$$

da equação $f(x) = 0$, que pode ser obtida por um rearranjo interno desta equação ou pela simples adição de x em ambos os lados da igualdade. Assim,

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$



que convergirá para a solução x^* se, para alguma constante $0 < \rho < 1$,

$$|g(x^{(k)}) - g(x^*)| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|$$

Isto é, se $g(x)$ for um mapeamento contrativo. Esta relação pode ser vista expandindo $f(x) = x - g(x)$ em série de Taylor em torno da solução x^* e truncando no segundo termo:

$$x - g(x) = f(x) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*)$$

Como $f(x^*) = 0$, então:

$$x - g(x) \approx (1 - g'(x^*))(x - x^*) = (x - x^*) - g'(x^*)(x - x^*)$$

Como x^* é um ponto fixo, isto é, $x^* = g(x^*)$, obtemos:

$$g(x) - g(x^*) \approx g'(x^*)(x - x^*)$$

Note que este resultado também pode ser obtido pela expansão em série de Taylor de $g(x)$ em torno de x^* .

Aplicando o módulo nesta expressão e comparando com a desigualdade acima, chegamos a:

$$|g(x) - g(x^*)| \approx |g'(x^*)| \cdot |x - x^*|$$

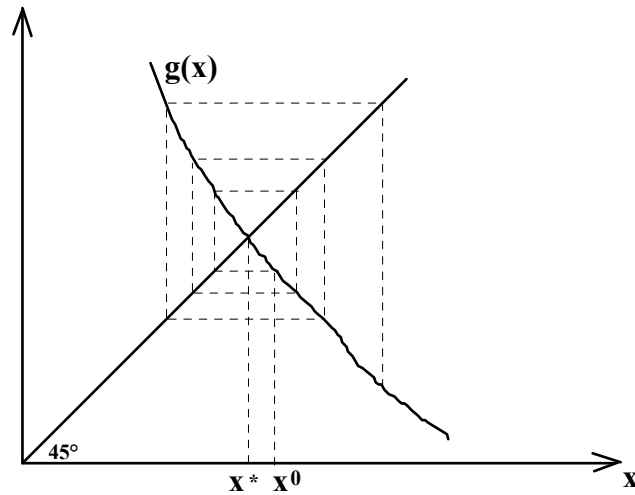
$$|g'(x^*)| \leq \rho < 1$$

Portanto, se $|g'(x^*)| \geq 1$ o processo iterativo não converge. Além disto, a expressão acima escrita para a k -ésima iteração:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \approx |g'(x^*)| \cdot |x^{(k)} - x^*|$$

mostra que o método das substituições sucessivas apresenta **convergência linear**.

O gráfico a seguir ilustra uma situação onde $|g'(x^*)| \geq 1$ e $g'(x^*) < 0$, onde a primeira condição leva a não convergência e a segunda a uma sequência oscilatória em torno da solução.



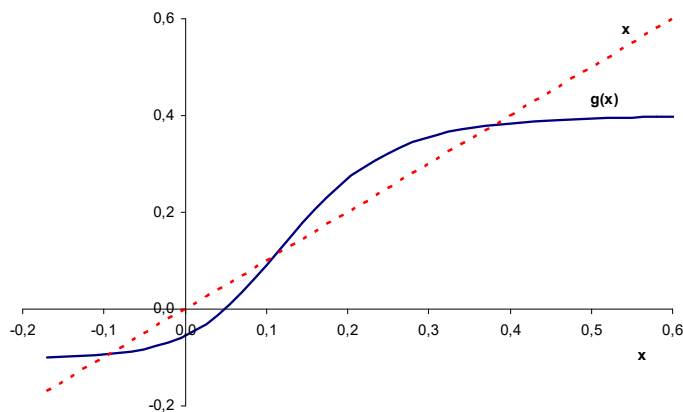
Exemplos:

1) Aplicando o método das substituições sucessivas ao caso do reator CSTR:

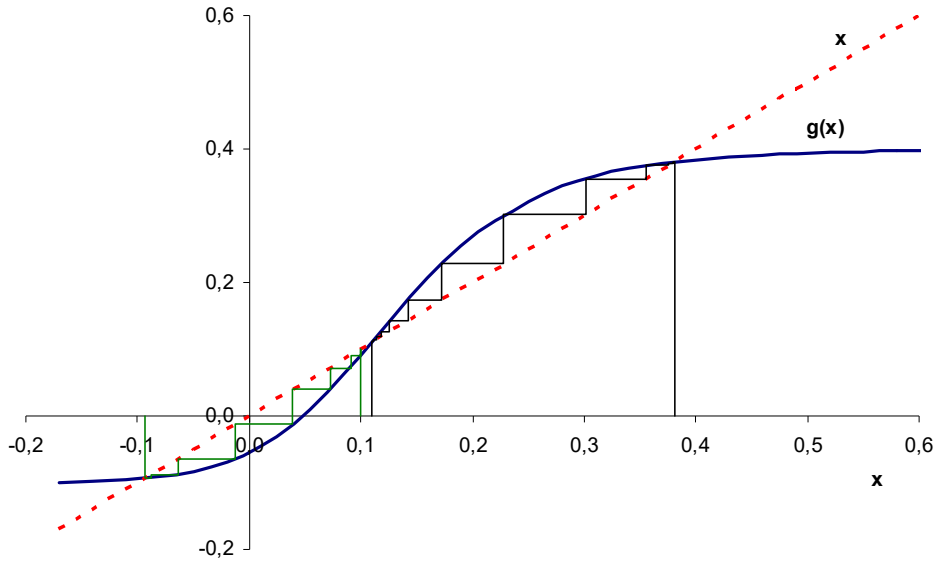
$$x = \beta + \underbrace{\alpha \frac{D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}{1 + D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}}_{g(x)}$$

e

$$g'(x) = \frac{\alpha \gamma}{(1+x)^2} \frac{D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)}{\left[1 + D_a \exp\left(\gamma \frac{x}{1+x}\right)\right]^2}$$

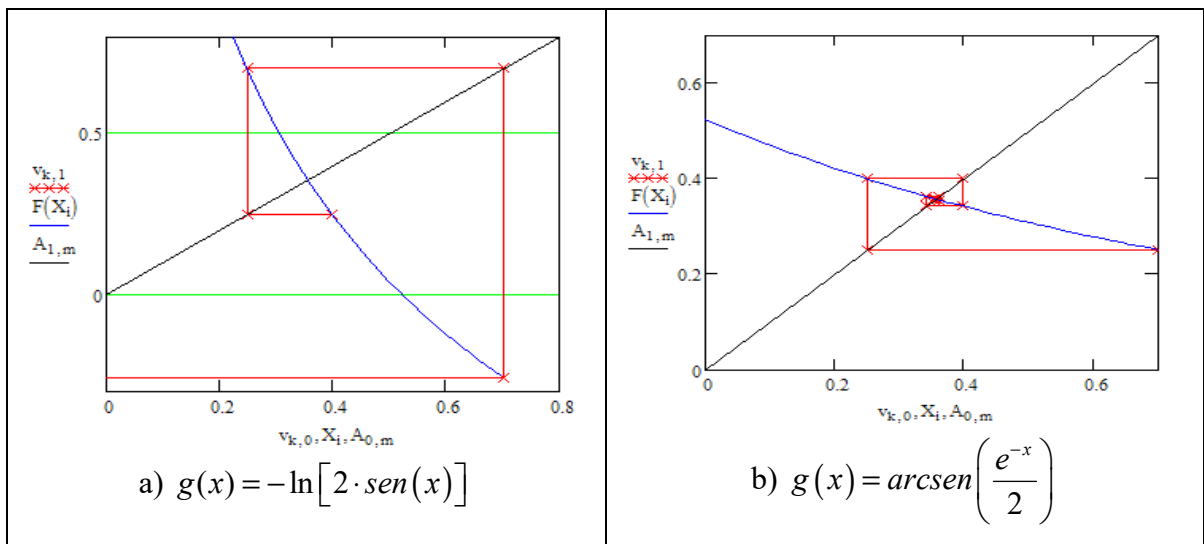


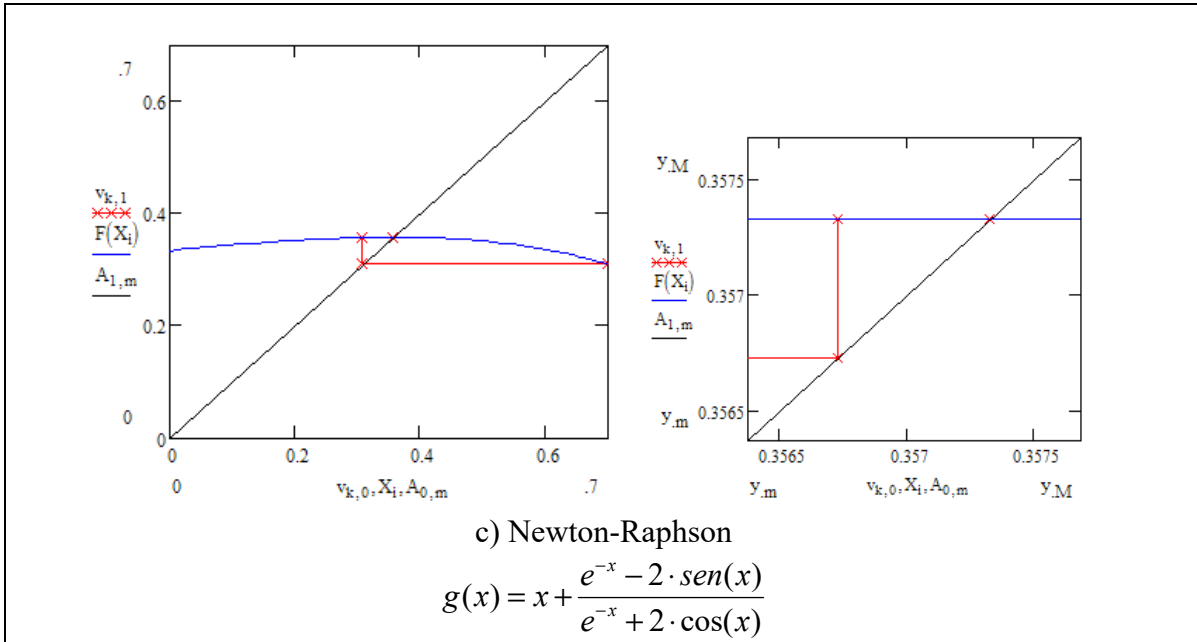
Partindo de duas estimativas iniciais distintas, $x^{(0)} = 0,1$ e $x^{(0)} = 0,11$, verificamos que a segunda raiz não pode ser obtida por esta escolha de $g(x)$, pois $|g'(x^*)| \geq 1$ neste ponto.



Iteração	$x^{(0)} = 0,1$	$x^{(0)} = 0,11$
$x^{(0)}$	0,100000	0,110000
$x^{(1)}$	0,090606	0,110264
$x^{(2)}$	0,072510	0,110787
$x^{(3)}$	0,039398	0,111822
$x^{(4)}$	-0,012058	0,113870
$x^{(5)}$	-0,063675	0,117928
$x^{(6)}$	-0,087489	0,125971
$x^{(7)}$	-0,092758	0,141875
$x^{(8)}$	-0,093613	0,172732
$x^{(9)}$	-0,093742	0,227741
$x^{(10)}$	-0,093762	0,301672
$x^{(11)}$	-0,093765	0,355769
$x^{(12)}$	-0,093765	0,375029
$x^{(13)}$		0,379499
$x^{(14)}$		0,380406
$x^{(15)}$		0,380584
$x^{(16)}$		0,380619
$x^{(17)}$		0,380626
$x^{(18)}$		0,380627
$x^{(19)}$		0,380628
$x^{(20)}$		0,380628

2) $f(x) = e^{-x} - 2 \cdot \text{sen}(x)$



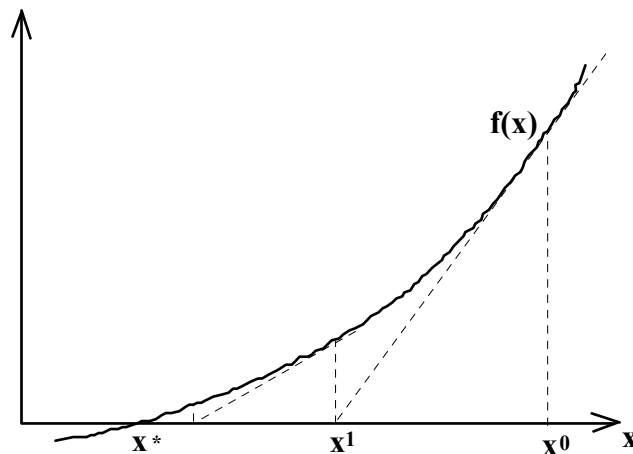


CASO	a	b	c
$x^{(0)}$	0,400000	0,700000	0,700000
$x^{(1)}$	0,249954	0,250917	0,309208
$x^{(2)}$	0,703766	0,399593	0,357327
$x^{(3)}$	-0,257883	0,341920	0,357327
$x^{(4)}$	ARGUMENTO INVÁLIDO	0,363131	0,357327

4.3 Método de Newton-Raphson

No método de Newton-Raphson, o processo iterativo é aplicado diretamente sobre a equação algébrica $f(x) = 0$ na forma:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$



Isto é, a função é linearizada em torno da estimativa inicial e o próximo ponto é encontrado de modo a satisfazer esta função linearizada. Diferente da convergência do método das substituições sucessivas, que converge linearmente (pois $|x^{(k+1)} - x^*| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|$ para $0 < \rho < 1$), o método de Newton converge quadraticamente:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|^2$$

em que $0 < \rho < 1$. Para verificar tal convergência, expande-se $f(x^{(k)})$ em torno da solução x^* :

$$f(x^{(k)}) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x^{(k)} - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x^{(k)} - x^*)^2$$

e substitui-se esta expressão na equação de Newton-Raphson, considerando que $x^{(k)}$ esteja próximo da solução de modo que se pode fazer a aproximação $f'(x^{(k)}) \approx f'(x^*)$ e sabendo que $f(x^*) = 0$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f'(x^*)(x^{(k)} - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x^{(k)} - x^*)^2}{f'(x^*)} = x^{(k)} - (x^{(k)} - x^*) - \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}(x^{(k)} - x^*)^2$$

que rearranjando resulta em:

$$x^{(k+1)} - x^* = -\frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)}(x^{(k)} - x^*)^2$$

Aplicando-se o módulo na equação resultante, chega-se a:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \approx \left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| |x^{(k)} - x^*|^2$$

em que $\left| \frac{f''(x^*)}{2f'(x^*)} \right| \leq \rho < 1$. A expressão acima mostra que o método de Newton-Raphson apresenta **convergência quadrática**.

Expressando o método de Newton-Raphson como um mapeamento:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} = g(x^{(k)})$$

podemos analisar a convergência de maneira similar ao método das substituições sucessivas. Então expandindo $g(x)$ em série de Taylor em torno de x^* :

$$g(x) \approx g(x^*) + g'(x^*)(x - x^*) + \frac{g''(x^*)}{2}(x - x^*)^2$$

Como $g'(x^*) = \frac{f(x^*)f''(x^*)}{[f'(x^*)]^2} = 0$, é necessário utilizar o termo de segunda ordem desta expansão onde $g''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$, chegando ao mesmo resultado da análise anterior.

Algoritmo: Newton-Raphson e Substituição Sucessiva

Dados ε , δ , $k_{\text{máximo}}$ e x^0

$k \leftarrow 0$

Faça

$$x^1 \leftarrow g(x^0)$$

$$y \leftarrow f(x^1)$$

$$\Delta \leftarrow |x^1 - x^0|$$

$$x^0 \leftarrow x^1$$

$$k \leftarrow k + 1$$

enquanto $(\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta)$ e $k < k_{\text{máximo}}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{\text{máximo}}$ então x^0 contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x^0)$, senão o número máximo de iterações foi atingido sem convergência, devendo-se modificar a estimativa inicial, x^0 , ou trocar de função $g(x)$.

A função $g(x)$ deve ser escolhida de acordo com o método:

1) Método das Substituições Sucessivas: $g(x)$ é escolhida pelo usuário tomando o cuidado em assegurar que $|g'(x)| < 1$ em todo o intervalo de busca da raiz;

2) Método de *Newton-Raphson* com derivada analítica: $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$;

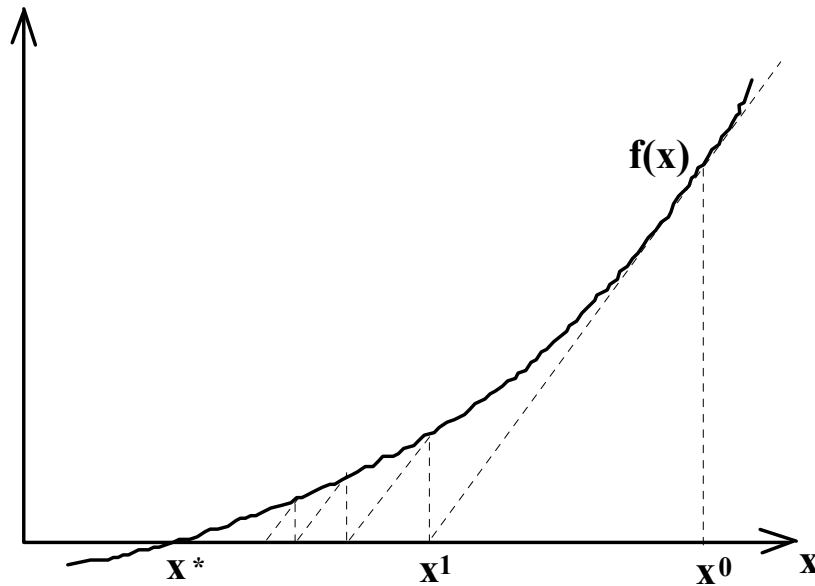
3) Método de *Newton-Raphson* com derivada numérica: $g(x) = x - \frac{f(x)}{\left(\frac{f(x+\varepsilon) - f(x)}{\varepsilon}\right)}$.

Newton-Raphson modificado

Uma modificação simples no método de Newton é considerar constante a derivada da função $f(x)$ durante todo, ou parte, do processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(m)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

em que $m \leq k$. Se $m = 0$, todas as retas que interceptam a função $f(x)$ nos pontos das iterações são paralelas.



Esta modificação tem a vantagem de calcular um número menor de derivadas da função, mas apresenta uma menor taxa de convergência.

Modificações de ordens mais elevadas, que convergem mais rapidamente, baseiam-se na expansão em série de Taylor de $f(x)$ truncada no terceiro termo:

$$f(x^*) \approx f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2}\Delta x^2 = 0$$

$$\text{a) } \Delta x = \frac{-f(x) - \frac{f''(x)}{2}\Delta x^2}{f'(x)} \quad (\text{isolando o } \Delta x \text{ do termo de primeira ordem})$$

$$\text{b) } \Delta x = \frac{-f(x)}{f'(x) + \frac{f''(x)}{2}\Delta x} \quad (\text{fatorando o } \Delta x \text{ dos termos de } 1^{\text{a}} \text{ e } 2^{\text{a}} \text{ ordens})$$

A escolha de $\overline{\Delta x}$ é que vai determinar o tipo de modificação do método de Newton. No caso $\overline{\Delta x} = 0$ tem-se o método clássico de Newton.

Usando o método de Newton para definir $\overline{\Delta x}$, isto é,

$$\overline{\Delta x} = -\frac{f(x)}{f'(x)}$$

chega-se a:

$$\text{caso a) } \Delta x = -\frac{f(x)}{f'(x)} \left(1 + \frac{f(x)f''(x)}{2(f'(x))^2} \right)$$

caso b)
$$\Delta x = -\frac{f(x)}{f'(x)} \bigg/ \left(1 - \frac{f(x)f''(x)}{2(f'(x))^2} \right)$$

Outra forma de definir $\overline{\Delta x}$ é através da solução da equação do segundo grau em Δx resultante da expansão em série de Taylor:

$$\overline{\Delta x} = -\frac{f'(x)}{f''(x)} \left(1 \mp \sqrt{1 - 2 \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}} \right)$$

e substituir esta expressão nos casos (a) e (b) definidos acima, ou usá-la diretamente para o cálculo de Δx .

Polinômios de coeficientes reais

Quando a função $f(x)$ é um polinômio, geralmente, deseja-se obter todas as suas raízes. Neste caso os métodos numéricos podem ser adaptados para este tipo especial de função. Para isto, primeiro veremos uma forma diferente de calcular o valor de um polinômio e sua derivada em um ponto dado.

1) Cálculo do valor do polinômio e de sua derivada em um ponto

Seja um polinômio em x de grau n , representado por:

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot x^i \quad \text{com } a_n \neq 0 \quad \text{e } a_i \in \mathfrak{R} \text{ para } i = 0, 1, \dots, n$$

para calcular o valor de $p_n(x)$ para $x = \alpha$, considere a divisão:

$$\frac{p_n(x)}{x - \alpha} = q_{n-1}(x) + \frac{b_0}{x - \alpha} \Rightarrow p_n(x) = (x - \alpha) \cdot q_{n-1}(x) + b_0$$

em que $q_{n-1}(x)$ é um polinômio em x de grau $(n-1)$ expresso por:

$$q_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} b_{i+1} \cdot x^i$$

assim:

$$(x - \alpha) \cdot q_{n-1}(x) = \sum_{i=0}^{n-1} b_{i+1} \cdot x^{i+1} - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha \cdot b_{i+1} \cdot x^i = b_n \cdot x^n + \sum_{i=1}^{n-1} (b_i - \alpha \cdot b_{i+1}) \cdot x^i - \alpha \cdot b_1$$

e
$$(x - \alpha) \cdot q_{n-1}(x) + b_0 = b_n \cdot x^n + \sum_{i=0}^{n-1} (b_i - \alpha \cdot b_{i+1}) \cdot x^i = p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot x^i$$

Igualando os coeficientes dos termos equipotentes de x , tem-se a forma recursiva:

$$b_n = a_n$$

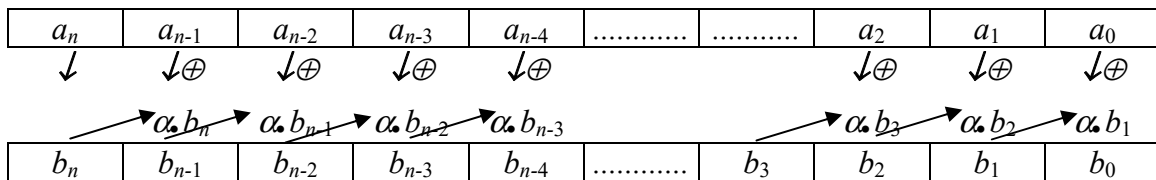
$$b_i - \alpha \cdot b_{i+1} = a_i \rightarrow b_i = \alpha \cdot b_{i+1} + a_i \text{ para } i = n-1, n-2, \dots, 1, 0$$

Note que com $x = \alpha$ tem-se: $p_n(\alpha) = b_0$ que é o resto da divisão de $p_n(x)$ por $(x - \alpha)$. Este procedimento apresenta menor erro de truncamento do que calcular $p_n(\alpha)$ diretamente por:

$P_n(\alpha) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot \alpha^i$ que envolve o cálculo de todas as potências de α de 1 a n , enquanto que o processo recursivo:

$$\begin{cases} b_n = a_n \\ b_i = \alpha \cdot b_{i+1} + a_i \text{ para } i = n-1, n-2, \dots, 1, 0 \end{cases}$$

em que $b_0 = p_n(\alpha)$, envolve apenas a primeira potência de α .



Observe que este procedimento é análogo à forma aninhada de cálculo de um polinômio, discutida no capítulo anterior:

$$p_n(x) = a_0 + x \cdot (a_1 + x \cdot (a_2 + \dots + x \cdot (a_{n-1} + x \cdot a_n) \dots))$$

que pode ser implementada conforme o algoritmo:

$$p \leftarrow a_n$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{Para } i = n-1, n-2, \dots, 2, 1, 0, \text{ faça} \\ p \leftarrow p \cdot x + a_i \end{array} \right.$$

Dividindo-se novamente $q_{n-1}(x)$ por $(x - \alpha)$, tem-se:

$$\frac{q_{n-1}(x)}{x - \alpha} = q_{n-2}(x) + \frac{c_0}{x - \alpha} \Rightarrow q_{n-1}(x) = (x - \alpha) \cdot q_{n-2}(x) + c_0$$

considerando $q_{n-2}(x) = \sum_{i=0}^{n-2} c_{i+1} \cdot x^i$. Aplicando o mesmo procedimento recursivo anterior:

$$\begin{cases} c_{n-1} = b_n \\ c_i = \alpha \cdot c_{i+1} + b_{i+1} \text{ para } i = n-2, n-3, \dots, 1, 0 \end{cases}$$

Substituindo a expressão de $q_{n-1}(x)$ em função de $q_{n-2}(x)$ em:

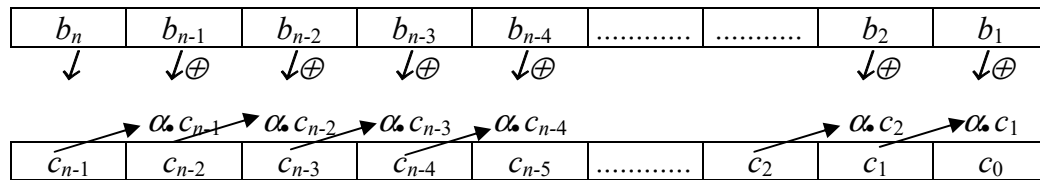
$$p_n(x) = (x - \alpha) \cdot q_{n-1}(x) + b_0, \text{ tem-se:}$$

$$p_n(x) = (x - \alpha) \cdot [(x - \alpha) \cdot q_{n-2}(x) + c_0] + b_0 = (x - \alpha)^2 \cdot q_{n-2}(x) + (x - \alpha) \cdot c_0 + b_0$$

Derivando membro a membro da expressão acima em x , tem-se:

$$p'_n(x) = 2(x - \alpha) \cdot q_{n-2}(x) + (x - \alpha)^2 \cdot q'_{n-2}(x) + c_0$$

assim: $p'_n(\alpha) = c_0$, isto é, o valor da derivada de $p_n(x)$ em $x = \alpha$ é o resto da divisão de $q_{n-1}(x)$ por $(x - \alpha)$.



2) Localização preliminar das raízes de $p_n(x)$

Regra de sinais de Descartes:

- a) Seja p o número de trocas de sinal dos coeficientes de $p_n(x)$ então o número de raízes reais positivas de $p_n(x)$ é igual a p ou $p-2$ ou $p-4$... ou [zero (se p é par) ou 1 (se p é ímpar)].
- b) Seja q o número de trocas de sinal dos coeficientes de $p_n(-x)$ então o número de raízes reais negativas de $p_n(x)$ é igual a q ou $q-2$ ou $q-4$... ou [zero (se q é par) ou 1 (se q é ímpar)].

Nas regras acima se algum coeficiente for *nulo* considere-o com o mesmo sinal do último verificado.

Exemplo: $p_7(x) = x^7 - 2 \cdot x^5 - 3 \cdot x^3 + 4 \cdot x^2 - 5 \cdot x + 6$

Assim: $p = 4$ havendo assim as possibilidades: 4 ou 2 ou 0 raízes reais positivas.

$$p_7(-x) = -x^7 + 2 \cdot x^5 + 3 \cdot x^3 + 4 \cdot x^2 + 5 \cdot x + 6$$

Assim: $q = 1$ havendo apenas a possibilidade de existência de 1 raiz real negativa.

A natureza das raízes de $p_7(x)$ é assim resumida:

Hipótese	Reais positivas	Real negativa	Pares de Conjugadas
A	0	1	3
B	2	1	2
C	4	1	1

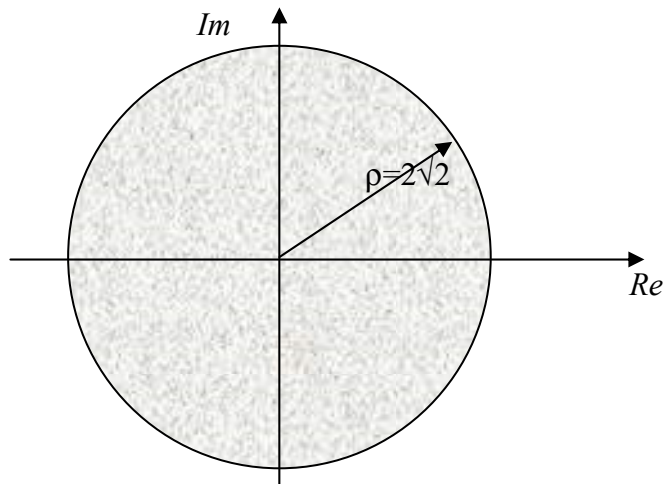
Estabelecimento do domínio máximo no plano complexo de localização das raízes:

Todas as raízes de $p_n(x)$ localizam-se, no plano complexo, no interior do círculo de raio ρ , determinado por:

$$\rho = 2 \cdot \max \left[\left| \frac{a_i}{a_n} \right|^{\frac{1}{n-i}} ; i = 0, 1, \dots, n-1 \right]$$

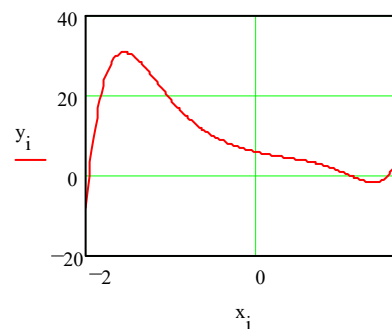
Exemplo: $p_7(x) = x^7 - 2 \cdot x^5 - 3 \cdot x^3 + 4 \cdot x^2 - 5 \cdot x + 6$

$$\rho = 2 \cdot \max \left[6^{\frac{1}{7}}; 5^{\frac{1}{6}}; 4^{\frac{1}{5}}; 3^{\frac{1}{4}}; 0^{\frac{1}{3}}; 2^{\frac{1}{2}}; 0^1 \right] = 2 \cdot \sqrt{2} \cong 2,83$$



Deste modo todas as raízes reais estão contidas entre $-2\sqrt{2}$ e $2\sqrt{2}$.

Na Figura abaixo $p_7(x)$ é plotado, no intervalo de -2 a $1,7$.



Visualmente vê-se que há uma raiz real negativa próxima de -2 , e duas raízes reais positivas (uma próxima de $1,2$ e outra próxima de $1,55$), sendo assim a hipótese B (apresentada anteriormente) a verdadeira.

3) Determinação das raízes pelo método de *Newton-Raphson*

Após a representação gráfica do polinômio, pode-se caracterizar a natureza de suas raízes, assim para determinar a menor raiz real aplica-se diretamente o método de Newton-Raphson adotando como estimativa inicial $x = -\rho$, de acordo com o processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{p_n(x^{(k)})}{p_n'(x^{(k)})} \quad \text{Para } k = 0, 1, \dots \text{ (até a convergência) com } x^{(0)} = -\rho.$$

Note que o valor de $p_n(x)$ e de sua derivada para $x = x^{(k)}$ são calculados pelo algoritmo recursivo descrito no item (1) acima.

Seja x_1 o valor convergido da primeira raiz real, para determinar a segunda raiz real, divide-se o polinômio $p_n(x)$ pelo monômio: $(x - x_1)$, assim:

$p_{n-1}(x) = \frac{p_n(x)}{x-x_1}$ como x_1 é raiz de $p_n(x)$ esta divisão é *exata* (isto é o resto é nulo). Aplicando-se o método de *Newton-Raphson* ao novo polinômio $p_{n-1}(x)$, tem-se:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{p_{n-1}(x^{(k)})}{p'_{n-1}(x^{(k)})} \quad \text{Para } k = 0, 1, \dots \text{ (até a convergência) com } x^{(0)} = x_1 + \varepsilon \text{ (onde } \varepsilon \approx 0 \text{)}.$$

Esta forma, entretanto, necessita a divisão de $p_n(x)$ por $(x - x_1)$ e o cômputo da derivada do polinômio resultante. Além do trabalho adicional, apresenta também as desvantagens de a primeira raiz x_1 *afetar* a determinação da segunda raiz e desta ser a raiz do polinômio *deflatado* $p_{n-1}(x)$. Uma maneira de se evitar estas desvantagens e o trabalho adicional é aplicar a função logaritmo em: $p_{n-1}(x) = \frac{p_n(x)}{x-x_1}$, assim:

$$\ln[p_{n-1}(x)] = \ln[p_n(x)] - \ln(x - x_1)$$

Calculando a seguir a derivada em relação à x de ambos os membros da equação acima, resulta:

$$\frac{p'_{n-1}(x)}{p_{n-1}(x)} = \frac{p'_n(x)}{p_n(x)} - \frac{1}{x-x_1} = \frac{p'_n(x)}{p_n(x)} \left[1 - \frac{p_n(x)}{p'_n(x)} \frac{1}{x-x_1} \right] \Rightarrow \frac{p_{n-1}(x)}{p'_{n-1}(x)} = \frac{\frac{p_n(x)}{p'_n(x)}}{\left[1 - \frac{p_n(x)}{p'_n(x)} \frac{1}{x-x_1} \right]},$$

Substituindo esta expressão no procedimento iterativo acima, tem-se:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})}}{\left[1 - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \cdot \frac{1}{x^{(k)} - x_1} \right]}$$

Para $k = 0, 1, \dots$ (até a convergência) com $x^{(0)} = x_1 + \varepsilon$ (onde $\varepsilon \approx 0$).

Este novo procedimento, além de evitar a divisão de $p_n(x)$ por $(x - x_1)$, permite que a nova raiz obtida reporte-se diretamente ao polinômio $p_n(x)$, pois à medida que o processo iterativo aproxima-se da solução tem-se:

$$\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \rightarrow 0 \quad \text{e} \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})},$$

que é o método de *Newton-Raphson* aplicado diretamente ao polinômio $p_n(x)$.

As demais raízes reais são determinadas aplicando-se o mesmo procedimento, resultando na determinação da raiz r em:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})}}{\left[1 - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \cdot \sum_{j=1}^{r-1} \frac{1}{x^{(k)} - x_j} \right]}$$

Para $k = 0, 1, \dots$ (até a convergência) com $x^{(0)} = x_{r-1} + \varepsilon$ (onde $\varepsilon \approx 0$).

Para determinar as raízes complexas (que aparecem sempre em pares conjugados), procede-se de forma análoga à anterior, assim para determinar a primeira raiz complexa aplica-se o procedimento iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})}}{\left[1 - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \cdot \sum_{j=1}^{real} \frac{1}{x^{(k)} - x_j} \right]}$$

Para $k = 0, 1, \dots$ (até a convergência) com $x^{(0)} = \rho \cdot i$ (estimativa inicial situada no eixo imaginário) e onde **real** é o número total de raízes reais.

O valor convergido desta raiz será: $x_1^{complexa} = \alpha_1 + \beta_1 \cdot i$ e como todos os coeficientes do polinômio são reais, o par conjugado desta raiz é também raiz do polinômio, assim: $\bar{x}_1^{complexa} = \alpha_1 - \beta_1 \cdot i$ é também raiz de $p_n(x)$. Para eliminar este par de raízes do polinômio, divide-se o mesmo pelo termo: $(x - \alpha_1)^2 + \beta_1^2 = (x - x_1^{complexa})(x - \bar{x}_1^{complexa})$, resultando assim, na determinação da segunda raiz complexa, no procedimento iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})}}{\left[1 - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \cdot \left[\sum_{j=1}^{real} \frac{1}{x^{(k)} - x_j} + \frac{2 \cdot (x^{(k)} - \alpha_1)}{(x^{(k)} - \alpha_1)^2 + \beta_1^2} \right] \right]}$$

Para $k = 0, 1, \dots$ (até a convergência) com $x^{(0)} = \alpha_1 + \beta_1 \cdot i + \varepsilon$.

Para a determinação da raiz complexa r , o procedimento iterativo é:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})}}{\left[1 - \frac{p_n(x^{(k)})}{p'_n(x^{(k)})} \cdot \left[\sum_{j=1}^{real} \frac{1}{x^{(k)} - x_j} + 2 \cdot \sum_{j=1}^{r-1} \frac{(x^{(k)} - \alpha_j)}{(x^{(k)} - \alpha_j)^2 + \beta_j^2} \right] \right]}$$

Para $k = 0, 1, \dots$ (até a convergência) com $x^{(0)} = \alpha_{r-1} + \beta_{r-1} \cdot i + \varepsilon$.

Aplicando este procedimento ao exemplo dado: $p_7(x) = x^7 - 2 \cdot x^5 - 3 \cdot x^3 + 4 \cdot x^2 - 5 \cdot x + 6$, cuja natureza das raízes já havia sido caracterizada a saber: 2 raízes reais positivas + 1 raiz real negativa + 2 pares conjugados de raízes complexas, resulta em:

Raiz	-1,962	1,108	1,538	0,305-0,992.i	-0,646-1,117.i
$p_7(\text{Raiz})$	$-2,6 \cdot 10^{-10}$	$5,1 \cdot 10^{-14}$	$1,6 \cdot 10^{-14}$	0	$-6,7 \cdot 10^{-13} + 6,4 \cdot 10^{-11}i$
Iterações	7	11	44	14	5

Uma outra maneira bastante eficiente de determinar as raízes complexas de polinômios é através do **método de Muller** (Seção 4.5) que deve ser aplicado após a determinação de todas as raízes reais. Tem ainda o **método de Newton-Bairstow** que determina todas as raízes de um polinômio (reais e complexas) sem a necessidade de primeiro obter todas as raízes reais. A idéia básica deste último é expressar o polinômio $p_n(x) = (x^2 - \alpha x - \beta) \cdot q_{n-2}(x) + b_1 \cdot (x - \alpha) + b_0$ e determinar as constantes α e β de modo a anular os coeficientes b_0 e b_1 . Uma vez encontradas α e β resolve-se a equação $x^2 - \alpha x - \beta = 0$ para determinar um par de raízes de $p_n(x)$, que pode ser complexo.

4.4 Métodos quasi-Newton

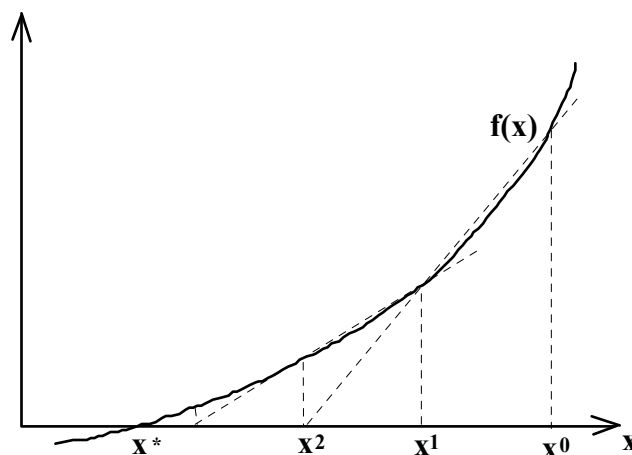
O **método de Newton-secante**, ou simplesmente **método da secante**, baseia-se na aproximação da derivada da função $f(x)$, que aparece no método clássico de Newton-Raphson, pela equação de diferenças à esquerda:

$$f'(x^{(k)}) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x^{(k)}} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}$$

resultando no seguinte processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - f(x^{(k)}) \frac{x^{(k)} - x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})} = \frac{x^{(k-1)} f(x^{(k)}) - x^{(k)} f(x^{(k-1)})}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

sendo, neste caso, necessários dois pontos para iniciar as iterações ($x^{(0)}$ e $x^{(1)}$), pois a equação da reta descrita pelo processo iterativo é definida pela passagem por dois pontos, ao passo que no método de Newton-Raphson a equação da reta é definida por um ponto e a tangente neste ponto.



A convergência deste método é super-linear, isto é, mais rápida que a convergência linear do método das substituições sucessivas e mais lenta que a convergência quadrática do método de Newton-Raphson, possuindo a seguinte forma:

$$|x^{(k+1)} - x^*| \leq \rho |x^{(k)} - x^*|^{1,618}, \quad \text{onde } 0 < \rho < 1.$$

Algoritmo: **Newton-secante**

Dados ε , δ , $k_{\text{máximo}}$, x^0 e x^1

$k \leftarrow 0$

$y^0 \leftarrow f(x^0)$

$y \leftarrow f(x^1)$

Faça

$$x \leftarrow \frac{x^0 y - x^1 y^0}{y - y^0}$$

$y^0 \leftarrow y$

$y \leftarrow f(x)$

$\Delta \leftarrow |x - x^1|$

$x^0 \leftarrow x^1$

$x^1 \leftarrow x$

$k \leftarrow k + 1$

enquanto $(\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta)$ e $k < k_{\text{máximo}}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{\text{máximo}}$ então x contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x)$, senão o número máximo de iterações foi atingido sem convergência, devendo-se modificar as estimativas iniciais, x^0 e/ou x^1 .

O **método da regula falsi** (ou posição falsa) é uma modificação do método da secante, onde a derivada da função $f(x)$ é grosseiramente aproximada pela equação das diferenças em relação a um ponto fixo:

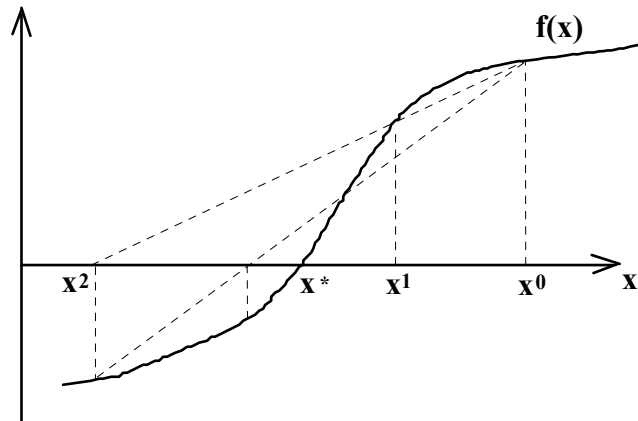
$$f'(x^{(k)}) = \left. \frac{df}{dx} \right|_{x^{(k)}} \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(0)})}{x^{(k)} - x^{(0)}}$$

resultando no seguinte processo iterativo:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - f(x^{(k)}) \frac{x^{(k)} - x^{(0)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(0)})}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

ou reescrevendo de outra forma:

$$x^{(k+1)} = \frac{x^{(0)} f(x^{(k)}) - x^{(k)} f(x^{(0)})}{f(x^{(k)}) - f(x^{(0)})}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$



Algoritmo: **Regula falsi**

Dados ε , δ , $k_{\text{máximo}}$, x^0 e x^1

$k \leftarrow 0$

$y^0 \leftarrow f(x^0)$

$y \leftarrow f(x^1)$

Faça

$$x \leftarrow \frac{x^0 y - x^1 y^0}{y - y^0}$$

$y \leftarrow f(x)$

$$\Delta \leftarrow |x - x^1|$$

$x^1 \leftarrow x$

$k \leftarrow k + 1$

enquanto $(\Delta > \varepsilon$ ou $|y| > \delta)$ e $k < k_{\text{máximo}}$

Ao final do algoritmo, se $k < k_{\text{máximo}}$ então x contém a raiz encontrada de $f(x)$ e y contém o valor de $f(x)$, senão o número máximo de iterações foi atingido sem convergência, devendo-se modificar as estimativas iniciais, x^0 e/ou x^1 .

No **método da regula falsi modificado** (ou **método de Wegstein**), ao invés de manter fixo o ponto base para o cálculo da aproximação da derivada da função $f(x)$, atualiza-se este ponto de acordo com a posição do ponto obtido em cada iteração. Assim, o processo iterativo apresenta a seguinte forma:

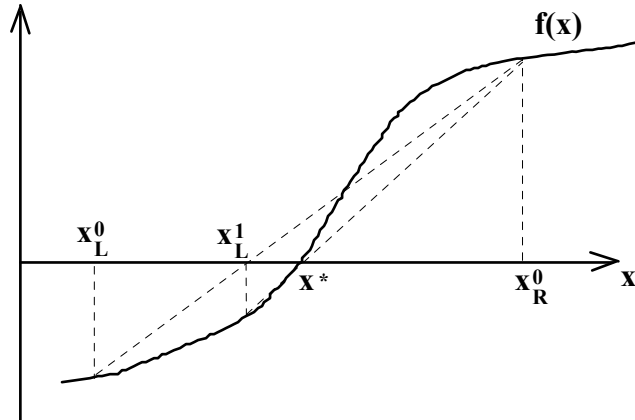
$$x^{(k+1)} = x_R^{(k)} - f(x_R^{(k)}) \frac{x_R^{(k)} - x_L^{(k)}}{f(x_R^{(k)}) - f(x_L^{(k)})} = \frac{x_L^{(k)} f(x_R^{(k)}) - x_R^{(k)} f(x_L^{(k)})}{f(x_R^{(k)}) - f(x_L^{(k)})}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

em que

$$x_R^{(k)} = \begin{cases} x^{(k)}, & \text{se } \text{sign}[f(x^{(k)})] = \text{sign}[f(x_R^{(k-1)})] \\ x_R^{(k-1)}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$x_L^{(k)} = \begin{cases} x^{(k)}, & \text{se } \text{sign}[f(x^{(k)})] = \text{sign}[f(x_L^{(k-1)})] \\ x_L^{(k-1)}, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e os pontos iniciais $x_L^{(0)}$ e $x_R^{(0)}$ devem satisfazer a condição: $\text{sign}[f(x_L^{(0)})] = -\text{sign}[f(x_R^{(0)})]$, onde a função $\text{sign}(x)$ fornece o sinal de x .

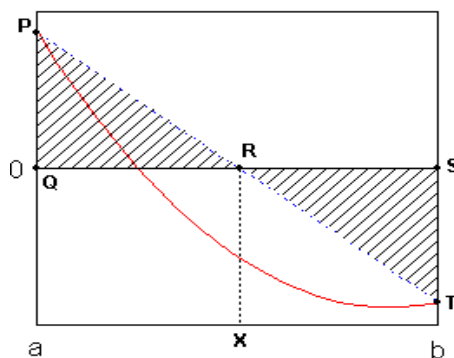


Observe que este método é similar ao método da secante quando ocorre alternância de sinal da função $f(x)$ entre iterações adjacentes do método da secante.

Este método pode ser implementado pelo mesmo algoritmo descrito na Seção 4.1, para os métodos diretos, em que a função $h(a, b)$ é dada por:

$$h(a, b) = \frac{f_a}{f_a - f_b}$$

Estes métodos também têm um embasamento geométrico de acordo com o representado na figura abaixo:



Nesta figura, tem-se a semelhança dos triângulos:

$$\frac{PQ}{QR} = \frac{TS}{SR}, \text{ mas: } PQ = f(a); TS = -f(b); QR = \lambda \cdot (b - a) \text{ e } SR = (1 - \lambda) \cdot (b - a),$$

$$\text{resultando em: } \frac{f(a)}{\lambda \cdot (b - a)} = -\frac{f(b)}{(1 - \lambda) \cdot (b - a)} \Rightarrow \lambda = \frac{f(a)}{f(a) - f(b)}$$

em que $x = a + \lambda \cdot (b - a) = a - \frac{f(a)}{\frac{f(b) - f(a)}{b - a}}$ e $0 \leq \lambda \leq 1$.

4.5 Método de Müller

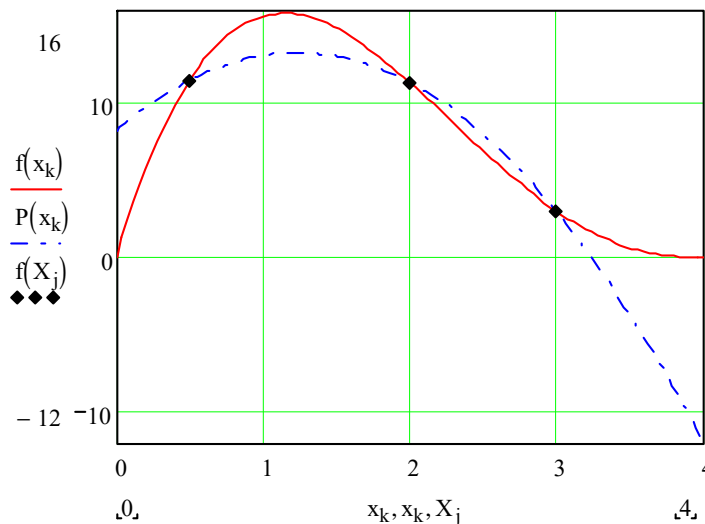
O método de Müller pode ser classificado como um método de busca direta (sem cômputo de derivadas) eficiente para a determinação de raízes reais múltiplas e raízes complexas de funções, especialmente polinômios. Este método se fundamenta na busca de raízes de interpolações parabólicas sucessivas da função que se deseja determinar as raízes, assim o processo se inicia após a especificação de 3 valores da variável independente x :

$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$. Calculando-se a seguir: $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$, com estes três pontos calculam-se:

[ETAPA A]

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - x_0 \\ x_2 - x_1 \end{pmatrix}; \quad \Delta = \begin{pmatrix} \Delta_0 \\ \Delta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{y_1 - y_0}{h_0} \\ \frac{y_2 - y_1}{h_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f[x_0, x_1] \\ f[x_1, x_2] \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{h_0 + h_1}$$

Com estes valores é possível calcular o polinômio interpolador de segundo grau segundo: $p_2(x) = f(x_2) + (x - x_2) \cdot f[x_1, x_2] + (x - x_1) \cdot (x - x_2) \cdot f[x_0, x_1, x_2]$, mostrado na figura abaixo:



Nesta figura, a curva contínua é a função $f(x)$ e a curva traço-ponto é a parábola interpoladora que utiliza os 3 pontos assinalados.

Reescrevendo o polinômio interpolador em termos da variável: $z = x - x_2$, resulta:

$$\begin{aligned} p_2(z) &= f(x_2) + z \cdot f[x_1, x_2] + (z + h_1) \cdot z \cdot f[x_0, x_1, x_2] = \\ &= f[x_0, x_1, x_2] \cdot z^2 + \{f[x_0, x_1, x_2] \cdot h_1 + f[x_1, x_2]\} \cdot z + f(x_2) \end{aligned}$$

Identificando: $a = f[x_0, x_1, x_2]$; $b = f[x_0, x_1, x_2] \cdot h_1 + f[x_1, x_2]$ e $c = f(x_2)$, as raízes de p_2 são:

$$r_1 = -\left(\frac{b + \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a}\right) \text{ e } r_2 = -\left(\frac{b - \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}{2 \cdot a}\right), \text{ como há a possibilidade de}$$

$a = f[x_0, x_1, x_2] \approx 0$, e sabendo que $r_1 + r_2 = -\frac{b}{a}$ e $r_1 \cdot r_2 = \frac{c}{a}$, é mais conveniente expressar estas raízes por:

$$r_1 = \frac{c}{a \cdot r_2} = -\left(\frac{2 \cdot c}{b - \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}\right) \text{ e } r_2 = \frac{c}{a \cdot r_1} = -\left(\frac{2 \cdot c}{b + \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}\right)$$

Como estas raízes estão expressas em termos da variável $z = x - x_2$, opta-se para calcular o próximo valor da variável independente x por:

$$x_{\text{nov}} = x_2 - \left(\frac{2 \cdot c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}}\right) \text{ o sinal '+' ou '-' é escolhido de modo que:}$$

$|b \pm \sqrt{b^2 - 4 \cdot a \cdot c}|$ assumo o maior valor possível.

A seguir novos valores dos pontos interpoladores são escolhidos de acordo com:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_{\text{nov}} \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ f(x_{\text{nov}}) \end{pmatrix}, \text{ na realidade, descartou-se o ponto } x_0 \text{ e reordenou-se os}$$

componentes do vetor \mathbf{x} . Após isto, o procedimento é repetido a partir da **ETAPA A** destacada anteriormente. O procedimento é repetido até: $|r^*| < \varepsilon$ ou $|f(x_{\text{nov}})| < \delta$, com valores de ε e δ selecionados pelo usuário.

Exemplo: Determinação da raiz real positiva de $f(x) = e^{-x^2} - x$

Iteração	0	1	2	3	4
x_0	0,000000	0,500000	1,000000	0,664528	0,652728
x_1	0,500000	1,000000	0,664528	0,652728	0,652918
x_2	1,000000	0,664528	0,652728	0,652918	0,652919
y_0	1,000000	0,278801	-0,632121	-0,021519	0,000352
y_1	0,278801	-0,632121	-0,021519	0,000352	0,00000041
y_2	-0,632121	-0,021519	0,000352	0,00000041	0,00000000

Solução: $\hat{x} = 0,652919$ e $f(\hat{x}) \cong 0$.

4.6 Homotopia e método da continuação

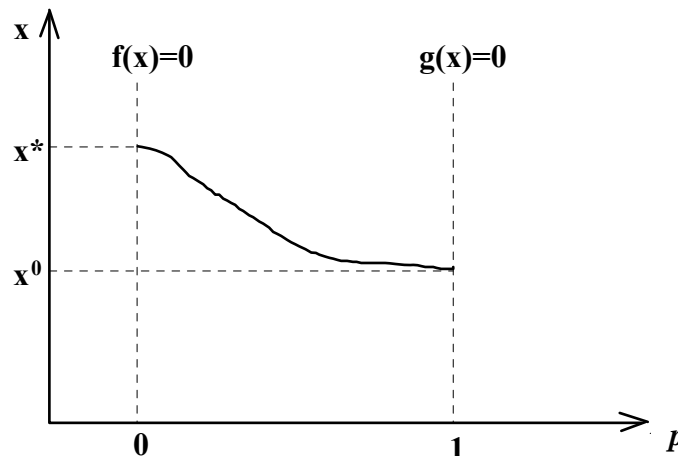
O método da continuação está baseado na variação contínua de um parâmetro na função, de modo a proporcionar condições de convergência mais fortes para os métodos de busca de raízes de funções, especialmente o método de Newton. Quando este parâmetro representa uma combinação entre a função $f(x)$ e uma outra função conhecida e de fácil solução tem-se o método da continuação homotópica (ou método da homotopia). O tipo mais comum de homotopia é a função convexa:

$$h(x; p) = (1 - p)f(x) + p g(x) = 0$$

onde $g(x)$ é uma função com solução conhecida e o parâmetro $p \in [0, 1]$. É fácil observar que

$$h(x; 1) = g(x) \text{ e } h(x; 0) = f(x)$$

e, portanto, fazendo o parâmetro p variar de 1 a 0 parte-se de um ponto com solução conhecida em direção a uma solução de $f(x)$. As soluções de $h(x; p)$ são funções de p , isto é, $x^* = x^*(p)$, com $x^*(1)$ sendo a solução de $g(x)$ e $x^*(0)$ a solução de $f(x)$. O cálculo das raízes de $h(x; p) = 0$, para cada valor fixo de p , é geralmente realizado pela aplicação do método de Newton-Raphson.



Uma escolha razoável para $g(x)$ é $g(x) = f'(x^{(0)})(x - x^{(0)})$, conhecida como homotopia *afine*, que representa uma linearização em torno do ponto $x^{(0)}$.

Outra definição da função $h(x; p)$ é a homotopia de Newton:

$$h(x; p) = f(x) - p f(x^{(0)})$$

onde $g(x) = f(x) - f(x^{(0)})$, com a mesma solução da anterior, isto é, $x^*(1) = x^{(0)}$.

Uma propriedade interessante do método da homotopia é que se $f(x)$ possuir mais de uma raiz e for permitido ao parâmetro p variar sem restrição de intervalo, então é possível encontrar todas as raízes de $f(x)$, seguindo o caminho de variação de p . Para isto, é importante que o método realize procedimentos de reparametrização quando dx/dp tender ao infinito, conforme descrito a seguir.

De um modo mais geral, o método da continuação (ou *path following*) consiste na solução de sistemas não-lineares do tipo:

$$F(x(s), p(s)) = 0 \quad , \quad x \in \mathfrak{R}^n \text{ e } p \in \mathfrak{R}^r$$

onde p é um vetor de parâmetros e s é alguma parametrização, como por exemplo o comprimento de arco do caminho gerado. Tratando, por simplicidade, do caso em que $p \in \mathfrak{R}$ e aplicando o teorema da função implícita, tem-se:

$$\frac{\partial F}{\partial x} \dot{x}(s) + \frac{\partial F}{\partial p} \dot{p}(s) = 0 \quad , \quad \text{com } \dot{x} = \frac{dx}{ds} \quad \text{e} \quad \dot{p} = \frac{dp}{ds}$$

de onde conclui-se que o vetor direção (\dot{x}, \dot{p}) está no espaço nulo da derivada de Frechet:

$$DF = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \end{bmatrix}$$

O vetor direção pode ser escalonado através de alguma normalização $N(x, p, s) = 0$, como, por exemplo, a do comprimento de arco:

$$N_1(x, p, s) = \int_{s_0}^s (\|\dot{x}\|^2 + \dot{p}^2) dt - (s - s_0)$$

onde $F(x(s_0), p(s_0)) = 0$ é uma solução conhecida. Aplicando o teorema da função implícita na expressão acima, tem-se:

$$\dot{x}^T \dot{x} + \dot{p}^2 - 1 = 0$$

gerando o sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \\ \dot{x} & \dot{p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

ou genericamente:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \\ \frac{\partial N}{\partial x} & \frac{\partial N}{\partial p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial N}{\partial s} \end{bmatrix}$$

Outro exemplo de norma é a do pseudo comprimento de arco:

$$N_2(x, p, s) = (x - x_0)^T \dot{x}_0 + (p - p_0) \dot{p}_0 - (s - s_0)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \\ \dot{x}_0 & \dot{p}_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

que é mais fácil de implementar computacionalmente. Outra norma muito utilizada é a da parametrização local (ou interna):

$$N_3(x, p, s) = e_k^T \begin{bmatrix} x - x_0 \\ p - p_0 \end{bmatrix} - (s - s_0)$$

onde e_k é o k -ésimo vetor unitário de dimensão $n+1$, que resulta em:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \end{bmatrix} \dot{x} = 0 \quad \text{e} \quad \dot{x}_k = 1$$

onde $x_{n+1} = p$. Uma maneira de escolher o índice k é pelo critério da maior derivada direcional:

$$k = \arg \max_k (|\dot{x}_1|, |\dot{x}_2|, \dots, |\dot{x}_n|, |\dot{x}_{n+1}|)$$

Existem vários algoritmos para realizar continuação em caminhos regulares, alguns outros que conseguem determinar pontos limites (ou *turning points*) e poucos que localizam pontos de bifurcação e continuam sobre as ramificações.

Um ponto (x_o, p_o) é:

- regular se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for não-singular;
- ponto limite se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver $\text{rank} = n$;
- bifurcação se $\frac{\partial F(x_o, p_o)}{\partial x}$ for singular e DF tiver $\text{rank} < n$.

No caso de um ponto limite, $\frac{\partial F}{\partial x}$ pode ser tornada não-singular por um procedimento de reparametrização, tal como escolher como parâmetro a variável com maior derivada direcional, possibilitando a continuação através deste ponto.

Métodos tipo predição-correção para a continuação paramétrica são métodos que seguem os seguintes passos principais:

- 1) obtenção de uma solução inicial (x_o, p_o) ;
- 2) predição: solução do sistema

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x} & \frac{\partial F}{\partial p} \\ \frac{\partial N}{\partial x} & \frac{\partial N}{\partial p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial N}{\partial s} \end{bmatrix}$$

realizando reparametrização quando necessário e determinando o tamanho do passo, $\Delta s = s - s_o$, na direção (\dot{x}, \dot{p}) , para então prever (extrapolar) $x = x_o + \dot{x} \Delta s$ e $p = p_o + \dot{p} \Delta s$;

- 3) correção: resolução do sistema não-linear $F(x(s), p(s)) = 0$.

4.7 Análise de convergência

Deseja-se $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \varepsilon$, onde ε é a tolerância. Porém, a solução do problema, x^* , não é conhecida, logo precisamos de alguma estimativa do erro.

- Critério do erro absoluto em x :

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon_{abs}$$

\Rightarrow Requer um conhecimento da ordem de grandeza de x^* .

- Critério do erro relativo em x :

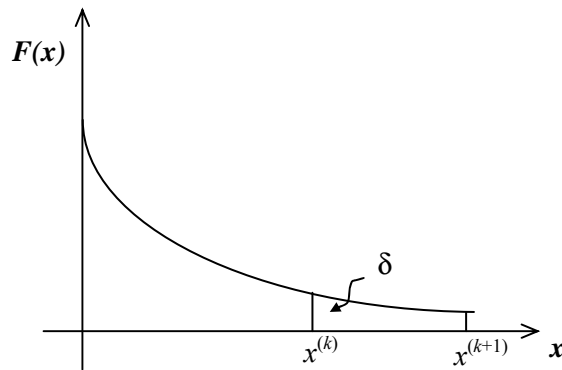
$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon_{rel} \|x^{(k)}\|$$

\Rightarrow Pode causar problemas quando $x^* \sim 0$.

- Critério do erro absoluto em $F(x)$:

$$\|F(x^{(k+1)})\| \leq \delta$$

\Rightarrow Pode mascarar a convergência em x :



- Combinação dos critérios do erro absoluto e relativo em x :

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon_{rel} \|x^{(k)}\| + \varepsilon_{abs}$$

\Rightarrow Ainda não resolve o problema de escala das variáveis, presente em todos os critérios em x descritos acima, pois $\|x\| = \left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right)^{1/2}$, com apenas um ε_{rel} e ε_{abs} .

Então, um critério que resolve também o problema de escala é:

$$|x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| \leq \varepsilon_{rel,i} |x_i^{(k)}| + \varepsilon_{abs,i}, \quad i = 1, \dots, n$$

Pode-se ainda definir uma norma ponderal:

$$\|x\|_w = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_i}{w_i} \right)^2 \right)^{1/2}$$

onde $w_i = \varepsilon_{rel,i} |X_i| + \varepsilon_{abs,i}$, $i = 1, \dots, n$ e X_i é um valor representativo de x_i .

$$\text{Assim: } \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_w \leq 1$$

$$\text{Se } \varepsilon_{rel,i} = 0 \quad \forall i \quad \text{e} \quad \varepsilon_{abs,i} = \varepsilon / \sqrt{N}$$

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_w \leq 1 \Rightarrow \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

$$\text{Se } \varepsilon_{abs,i} = 0 \quad \forall i \quad \text{e} \quad \varepsilon_{rel,i} = \varepsilon / \sqrt{N} \quad \text{e} \quad X = x^{(k)}$$

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_w \leq 1 \Rightarrow \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon \|x^{(k)}\|$$

Como garantir que $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \varepsilon$ implique em $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \varepsilon$?

Usando o conceito de **taxa de convergência**: $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$, considerando $0 < \rho < 1$ e constante.

$$\|x^{(k+2)} - x^{(k+1)}\| \leq \rho \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho^2 \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \dots$$

$$\|x^{(k+j)} - x^{(k+j-1)}\| \leq \rho^j \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

Usando a desigualdade triangular: $\|a - b\| \leq \|a - c\| + \|c - b\|$

chega-se a: $\|x^{(k+m)} - x^{(k)}\| \leq \sum_{j=1}^m \|x^{(k+j)} - x^{(k+j-1)}\|$, que ao substituir a desigualdade da taxa de convergência, resulta em:

$$\|x^{(k+m)} - x^{(k)}\| \leq \left(\sum_{j=1}^m \rho^j \right) \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

como para $m \rightarrow \infty \Rightarrow x^{(k+\infty)} = x^*$ e $\sum_{j=1}^m \rho^j = \frac{\rho}{1-\rho}$ ($0 < \rho < 1$), tem-se:

$$\|x^* - x^{(k)}\| \leq \frac{\rho}{1-\rho} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

e, portanto, se $\frac{\rho}{1-\rho} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \varepsilon$

$$\text{então } \|x^* - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

\Rightarrow O problema é conhecer ρ

Uma possível estimativa vem de:

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho^2 \|x^{(k-1)} - x^{(k-2)}\|$$

\vdots

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \rho^k \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$$

assim:
$$\rho \approx \left(\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(1)} - x^{(0)}\|} \right)^{\frac{1}{k}}, \quad k = 1, 2, 3, \dots,$$
 e, por questão de conservadorismo, é comum utilizar $\rho = 0,99$ para a primeira iteração ($k = 0$).

Exemplo: Taxa de convergência lenta: $\rho \approx 0,99$

$$\frac{\rho}{1-\rho} \approx 100 \Rightarrow \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq 10^{-2} \varepsilon$$

Taxa de convergência rápida: $\rho \approx 0,01$

$$\frac{\rho}{1-\rho} \approx 0,01 \Rightarrow \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq 10^2 \varepsilon$$

Taxa de convergência $\rho \approx 0,5$

$$\frac{\rho}{1-\rho} \approx 1 \Rightarrow \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \varepsilon$$

A ordem de convergência de um procedimento iterativo é a constante α que satisfaz o limite:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^\alpha} = \rho$$

Onde ρ é o coeficiente assintótico de convergência. Se $\alpha = 1$, o procedimento converge linearmente e se $\alpha = 2$ ele tem convergência quadrática. Retomando a análise de convergência da Seção 4.2, onde foi verificado que o método das substituições sucessivas tem convergência linear ($\alpha = 1$), com $\rho = |g'(x^*)|$, pode-se concluir que para este método:

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

se $g'(x^*) = 0$, $g''(x^*) = 0$, ..., $g^{(\alpha-1)}(x^*) = 0$ e $g^{(\alpha)}(x^*) \neq 0$, então:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^\alpha} = \rho = \frac{|g^{(\alpha)}(x^*)|}{\alpha!}$$

tendo, para estas situações, ordem convergência supralinear $\alpha > 1$. No caso do método de Newton-Raphson, onde

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

é fácil verificar que $g'(x^*) = 0$ e $g''(x^*) = \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}$ e, portanto:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{(k+1)} - x^*\|}{\|x^{(k)} - x^*\|^2} = \rho = \frac{|g''(x^*)|}{2!}$$

tendo, pelo menos, convergência quadrática.

Lista de exercícios

1) Em dois reatores tanque de mistura perfeita é conduzida a reação em fase líquida: $A+B \rightarrow C+D$ de forma isotérmica. Os balanços estacionários de massa do reagente A neste sistema são descritos pelas equações algébricas:

$$\text{Primeiro reator: } k \cdot C_1^2 = \frac{q}{V} \cdot [C_0 - C_1]$$

$$\text{Segundo reator: } k \cdot C_2^2 = \frac{q}{V} \cdot [C_1 - C_2]$$

Onde k : constante de velocidade da reação = 0,075 L/mol/min;

q : vazão volumétrica de alimentação do sistema = 30 L/min;

V : volume dos reatores (L)

C_0 : concentração de A na alimentação do sistema = 1,6 mol/L;

C_1 : concentração de A na saída do primeiro reator [mol/L];

C_2 : concentração de A na saída do segundo reator [mol/L].

Calcule o volume dos reatores sabendo-se que a conversão global de A é igual a 80%. Generalize seus resultados para n reatores iguais em série e compare o volume de um PFR que conduz à mesma conversão.

2) A equação de estado de Van der Waals é descrita por:

$$\left(P + \frac{a}{v^2} \right) \cdot (v - b) = R \cdot T$$

onde P é a pressão (atm);

v é o volume específico molar (L/mol);

T é a temperatura absoluta (K);

R é a constante universal dos gases = 0,082054 L.atm/mol/K;

a é uma constante dependente do gás (L².atm/mol²)

b é uma constante dependente do gás (L/mol)..

Os valores das constantes a e b para diferentes gases são tabelados abaixo:

Gás	a (L ² .atm/mole ²)	b (L/mol)
Gás carbônico	3,592	0,04267
Anilina dimetílica	37,49	0,1970
Hélio	0,03412	0,02370
Óxido nítrico	1,340	0,02789

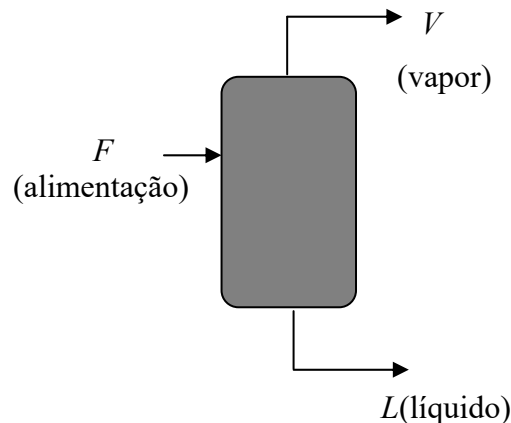
Sabendo-se que a temperatura crítica do gás (temperatura acima da qual o gás não pode se liquefazer) é dada por: $T_c = \frac{8}{27} \cdot \frac{a}{R \cdot b}$, resolva o problema adotando $T > T_c$ e neste caso mostre

que para qualquer pressão há apenas uma solução da equação. Adotando $T < T_c$ adote valores de P em que há apenas 1 solução e valores de P em que a equação apresenta três soluções,

neste último caso: $v_1 < v_2 < v_3$ sendo v_1 o volume específico molar da fase líquida, v_3 o volume específico molar da fase gás e v_2 não apresenta significado físico. Mostre também como calcular a faixa de pressão dentro da qual o sistema apresenta três soluções.

3) Em problemas de transferência de calor é importante calcular as raízes reais positivas da equação: $\frac{\text{tg}(\lambda)}{\lambda} = K$, onde K é uma constante conhecida, note que, exceto no caso em que $K = 1$, $\lambda = 0$ **não é raiz desta equação**. Para evitar as descontinuidades da função tangente reescreve-se a equação original na forma: $f(\lambda) = \text{sen}(\lambda) - K \cdot \lambda \cdot \cos(\lambda) = 0$. Apresente o procedimento iterativo que traduz o método de *Newton-Raphson* aplicado a esta equação e aplique-o para determinar a primeira raiz positiva, com uma precisão até a quarta casa decimal, da equação com $K = 2$, mostrando claramente em seu procedimento como evitou o valor $\lambda = 0$. Sugira uma metodologia para determinar as 10 primeiras raízes desta equação.

4) F moles por hora de gás natural são alimentados continuamente em um vaso de *flash*, em acordo com o esquema abaixo:



A operação estacionária deste vaso é descrita pelos balanços:

Balanco global: $F = L + V$

Balanco do componente i : $F \cdot z_i = V \cdot y_i + L \cdot x_i$ para $i = 1, 2, \dots, n$

Relação de equilíbrio: $y_i = K_i \cdot x_i$ para $i = 1, 2, \dots, n$.

Além destas equações as restrições algébricas, decorrentes da definição de fração molar, devem também ser respeitadas: $\sum_{i=1}^n x_i = 1$ e $\sum_{i=1}^n y_i = 1$

Mostre como manipulando estas equações se obtém a equação não-linear:

$$\sum_{i=1}^n \frac{K_i \cdot z_i}{\phi \cdot (K_i - 1) + 1} = 1, \text{ onde } \phi = V/F.$$

Sabendo-se que as composições de alimentação e constantes de equilíbrio, à temperatura do vaso, são conhecidas e tabeladas abaixo, determine os valores de ϕ , x_i e y_i , $i = 1, 2, \dots, n$.

Componente	z_i	K_i
Gás carbônico	0,0046	1,650
Metano	0,8345	3,090
Etano	0,0381	0,720
Propano	0,0163	0,390
Isobutano	0,0050	0,210
n-Butano	0,0074	0,175
Pentanos	0,0287	0,093
Hexanoss	0,0220	0,065
Heptanos ⁺	0,0434	0,036
	$\Sigma=1,0000$	

5) Uma reação química de primeira ordem, irreversível e em fase líquida é conduzida em um reator tanque operando de forma cíclica. Assim, conduz-se uma batelada por um tempo t e, depois de transcorrido este tempo, esvazia-se e se limpa o reator, levando esta última operação um tempo igual a t_c . Após passar pela etapa de esvaziamento/limpeza conduz-se novamente uma batelada por um tempo t , e assim sucessivamente. Pode-se demonstrar que o tempo ótimo da fase batelada que maximiza a taxa de produção do processo é obtido através da equação não-linear:

$$\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right] \cdot e^{-k \cdot t} - 1 = 0 \quad (1)$$

ou na forma logarítmica:

$$k t - \ln\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right] = 0 \quad (2)$$

Sendo k : constante de velocidade da reação = $2,5 \text{ h}^{-1}$

t_c : tempo da operação de esvaziamento/limpeza = $0,5 \text{ h}$.

Para calcular t tentam-se dois procedimentos iterativos:

(a) de (1) tem-se: $t = \frac{e^{k \cdot t} - 1}{k} - t_c$ sugerindo a seguinte forma recursiva:

$$t^{(j+1)} = \frac{e^{k \cdot t^{(j)}} - 1}{k} - t_c \quad \text{para } j = 0, 1, \dots \quad \text{com } t^{(0)} = t_c$$

(b) de (2) tem-se: $t = \frac{\ln\left[1 + k \cdot (t + t_c)\right]}{k}$, sugerindo a seguinte forma recursiva:

$$t^{(j+1)} = \frac{\ln\left[1 + k \cdot (t^{(j)} + t_c)\right]}{k} \quad \text{para } j = 0, 1, \dots \quad \text{com } t^{(0)} = t_c$$

O procedimento (a) não converge, enquanto que o procedimento (b) converge à solução do problema (para o conjunto de parâmetros utilizados) $t = 0,50155 \text{ h}$ após 6 iterações. Explique porque isto ocorre.

6) Os balanços de massa de reagente e de energia em um reator de mistura perfeita onde é conduzida uma reação de segunda ordem, irreversível e exotérmica são expressos pelas seguintes equações (em forma adimensional):

$$\text{Balanço de massa do reagente: } 1 - x = Da \cdot x^2 \cdot \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{\theta}\right)\right] \quad (1)$$

$$\text{Balanço de Energia: } \theta - 1 = \beta \cdot Da \cdot x^2 \cdot \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{\theta}\right)\right] \quad (2)$$

Onde x é a concentração adimensional do reagente e θ é a temperatura adimensional da mistura reacional no interior do reator; Da , β e γ são parâmetros adimensionais que tem os seguintes valores numéricos: $Da = 0,02381$, $\beta = 0,6$ e $\gamma = 20$.

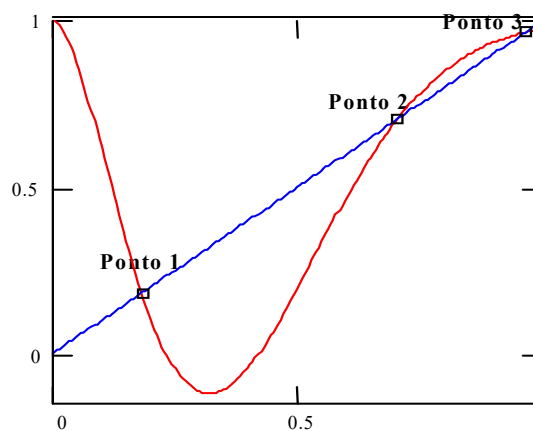
Multiplicando a Eq. (1) por β e subtraindo esta nova equação de (2), chega-se a:

$$\theta - 1 = \beta \cdot (1 - x) \Rightarrow \theta = 1 + \beta \cdot (1 - x),$$

substituindo esta última expressão em (1), chega-se finalmente a:

$$1 - x = Da \cdot x^2 \cdot \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{1 + \beta \cdot (1 - x)}\right)\right] \quad \text{ou} \quad x = 1 - Da \cdot x^2 \cdot \exp\left[\gamma\left(1 - \frac{1}{1 + \beta \cdot (1 - x)}\right)\right] = g(x)$$

Esta função $g(x)$ é plotada na figura abaixo assim como a bissetriz do primeiro quadrante, $y = x$.



os três pontos de interseções destas curvas são: 0,182249 [ponto 1]; 0,705667 [ponto 2] e 0,96563 [ponto 3].

a) Mostre porque quando se utiliza o procedimento iterativo:

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}) \quad \text{para } k=0, 1, 2, \dots, \text{ apenas o ponto 3 é obtido.}$$

b) Sugira um procedimento iterativo que assegure a convergência do processo de busca das três raízes do problema. Mostre claramente em seu procedimento a condição inicial a ser adotada na determinação de cada solução.

7) Sugere-se o seguinte procedimento para determinar iterativamente as raízes de uma simples função não-linear, $f(x) = 0$:

Busca-se o mínimo de $g(x) = [f(x)]^2$ isto é os valores de x que anulam a derivada de $g(x)$:
 $\frac{dg(x)}{dx} = 2 \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx}$, ou seja, buscam-se as raízes de uma nova função:

$$F(x) = \frac{dg(x)}{dx} = 2 \cdot f(x) \cdot \frac{df(x)}{dx}.$$

Aplique o método de Newton-Raphson a esta nova função $F(x)$ e mostre o algoritmo recursivo correspondente e compare-o com o obtido aplicando-se diretamente o método de Newton-Raphson à função original.

Ilustre o processo iterativo, em ambos os casos, aplicando-o a uma função simples de sua escolha, por exemplo: $f(x) = x^2 - 2$ ou $f(x) = e^{-x} - x$. Analise e comente os resultados obtidos.

8) Determinar todas as raízes dos seguintes polinômios:

$$P_{10}(x) = 184756x^{10} - 923780x^9 + 1969110x^8 - 2333760x^7 + 1681680x^6 - 756756x^5 + \\ + 210210x^4 - 34320x^3 + 2970x^2 - 110x + 1$$

$$P_6(x) = x^6 - 2x^5 + 2x^4 + x^3 + 6x^2 - 6x + 8$$

$$P_4(x) = x^4 + 3x^3 - 3x^2 + 32x + 180$$

$$P_7(x) = x^7 + 4x^6 + 10 \cdot x^5 - 8 \cdot x^4 - 21 \cdot x^3 + 56 \cdot x^2 + 10 \cdot x - 52$$

9) Sendo ASC o número de Algoritmos Significativos Corretos,

(a) Resolva $x = \cos x$ por substituições sucessivas, tomando $x^{(0)} = 1$. (6 ASC)

(b) Mostre que $x = \cos x$ pode ser transformado em $x = 1 - (\sin^2 x) / (1 + x)$, verificando em quantos passos obtém-se a mesma solução do problema anterior.

(c) Mostre que $x = \cos x$ pode ser transformado em $x = (x \cos x)^{1/2}$, verificando em quantos passos obtém-se a mesma solução do problema anterior.

(d) Esboce o gráfico da função $\sin x = \cotg x$ e resolva pelo método de Newton, tomando como $x^{(0)} = 1$. (6 ASC)

(e) Formule as iterações de Newton para calcular raízes cúbicas e calcule $x = \sqrt[3]{7}$, tomando como $x^{(0)} = 2$. (6 ASC)

(f) Resolva o problema (d) usando o método da secante, tomando como pontos de partida $x^{(0)} = 0,5$ e $x^{(1)} = 1$, e compare os resultados. (6 ASC)

(g) Resolva $e^x + x^4 + x = 2$ pelo método da bisseção no intervalo $[0, 1]$. (4 ASC)

(h) Encontre a solução real da equação $x^3 = 5x + 6$ pelos métodos da regra falsi e da regra falsi modificado. (4 ASC)

10) No desenvolvimento de uma modificação do método de Weigstein se utiliza uma nova parametrização do intervalo de busca de acordo com a expressão:

$$x = \left(\frac{a+b}{2}\right) + \lambda \cdot \left(\frac{b-a}{2}\right) \text{ com } -1 \leq \lambda \leq +1$$

Nessa nova forma se verifica:

- (i) com $\lambda = -1 \Rightarrow x = a$ (extremidade inferior do intervalo de busca);
- (ii) com $\lambda = 0 \Rightarrow x = \left(\frac{a+b}{2}\right)$ (ponto médio do intervalo de busca);
- (iii) com $\lambda = +1 \Rightarrow x = b$ (extremidade superior do intervalo de busca).

Para determinar o valor de λ em cada iteração se utiliza uma interpolação quadrática inversa fundamentada nos 3 pontos:

x	a	$\frac{a+b}{2}$	b
$y = f(x)$	$f(a) = y_a$	$f\left(\frac{a+b}{2}\right) = y_m$	$f(b) = y_b$
λ	-1	0	+1

Essa interpolação quadrática inversa é descrita por:

$$p_2(y) = \frac{(y-y_b) \cdot (y-y_m)}{(y_b-y_a) \cdot (y_a-y_m)} + \frac{(y-y_a) \cdot (y-y_m)}{(y_b-y_a) \cdot (y_b-y_m)}, \text{ calculando o valor de } \lambda \text{ na iteração por:}$$

$$\lambda_{\text{iteração}} = p_2(0) = \frac{y_b \cdot y_m}{(y_b-y_a) \cdot (y_a-y_m)} + \frac{y_a \cdot y_m}{(y_b-y_a) \cdot (y_b-y_m)}$$

Este novo procedimento é traduzido através do algoritmo:

Dados: a, b ($b > a$), ε, δ e k_{MAX} , calcule: $y_a \leftarrow f(a)$ e $y_b \leftarrow f(b)$, caso $y_a \cdot y_b > 0$ ENTÃO entrar com novos valores de a e b . $k \leftarrow 0$

FAÇA

$$y_m \leftarrow f\left(\frac{a+b}{2}\right) \text{ e } \lambda = \frac{y_b \cdot y_m}{(y_b-y_a) \cdot (y_a-y_m)} + \frac{y_a \cdot y_m}{(y_b-y_a) \cdot (y_b-y_m)}$$

$$x \leftarrow \left(\frac{a+b}{2}\right) + \lambda \cdot \left(\frac{b-a}{2}\right)$$

$$y \leftarrow f(x)$$

SE $y \cdot y_a > 0$ ENTÃO $y_a \leftarrow y$ e $a \leftarrow x$

SENÃO $y_b \leftarrow y$ e $b \leftarrow x$

$$\Delta \leftarrow |b-a|; k \leftarrow k+1$$

ENQUANTO ($|y| > \delta$ ou $\Delta > \varepsilon$) e $k < k_{MAX}$

- (a) Existe alguma limitação à aplicação deste novo procedimento? Qual? Justifique sua resposta.
- (b) Aplique o procedimento na determinação da raiz real positiva da função: $f(x) = e^{-x} - 2 \cdot x^2$, considerando o primeiro intervalo de busca: $0 < x < 1$. Compare a velocidade de convergência do método com a obtida no método da bisseção. (Considere em sua explanação apenas as cinco primeiras iterações).