

METODO DE BAIRSTOW Y SU USO EN ALGUNOS PROBLEMAS DE INGENIERIA

Jaime Jaramillo
Profesor Auxiliar
Dep. de Procesos Químicos y Biológicos
Universidad del Valle
Cali - Colombia

RESUMEN

El método de Lin-Bairstow establece que se pueden obtener raíces de un polinomio X , de grado n , factorizándolo por un trinomio. Con el objeto de hacer el método más eficiente se busca acelerar la convergencia usando el criterio de Newton-Raphson.

El presente artículo desarrolla el aspecto teórico e implementa la técnica computacional para obtener **todas** las raíces de un polinomio, aplicándolo al caso de encontrar los volúmenes molares con la ecuación de Benedict-Webb-Rubin y las raíces características de un sistema de control "feedback".

ABSTRACT

Lin-Bairstow's method define the way to obtain the roots of an n degree polynomiun in X , factorizing by a trinomial. The Newton-Raphson method was used in order to obtain a more efficient convergency. In this work it has been developed the theoretical aspects of the method. The Benedict-Webb-Rubbin's method was coupled with the above methodology for the particular case of finding the molar volume of a gaseous hydrocarbon and the characteristics roots of a control "feedback" system.

1. INTRODUCCION

El cálculo de las raíces de un polinomio de grado N es un problema matemático que requiere de ciertas

técnicas iterativas. Algunas de estas técnicas sólo son capaces de encontrar raíces reales de dichos polinomios, pero en algunas ramas de la Ingeniería es indispensable encontrar todas las raíces de un polinomio, reales e imaginarias, si las hay.

El problema más común donde aparece el cálculo de las raíces de un polinomio, es el siguiente:

Considere una ecuación diferencial ordinaria de orden n (que incluye como caso especial la de primer orden)

$$a_0 \frac{d^n Y}{dX} + a_1 \frac{d^{n-1} Y}{dX^{n-1}} + a_2 \frac{d^{n-2} Y}{dX^{n-2}} + \dots + a_{n-1} \frac{dY}{dX} = Z(X) \quad (1.0)$$

La función de transferencia, que se define como la relación entre la transformada de Laplace de la salida y la transformada de Laplace de la entrada, se puede obtener tomando transformadas de Laplace a cada lado de la **ecuación 1**, con:

$$Y(0) = Y'(0) = Y''(0) = \dots = Y^{(n)}(0) = 0,$$

y se obtiene:

$$a_0 S^n \bar{Y}(S) + a_1 S^{n-1} \bar{Y}(S) + a_2 S^{n-2} \bar{Y}(S) + \dots + a_{n-1} S \bar{Y}(S) + a_n \bar{Y}(S) = \bar{Z}(S) \quad (2.0)$$

Si se reordena la **ecuación 2**, se obtiene la función de transferencia correspondiente a la ecuación diferencial ordinaria del sistema descrito por ella.

$$G(S) = \frac{\bar{Y}(S)}{\bar{Z}(S)}$$

$$G(S) = \frac{1}{a_0 S^n + a_1 S^{n-1} + a_2 S^{n-2} + \dots + a_{n-1} S + a_n} \quad (3.0)$$

La ecuación:

$$a_0 S^n + a_1 S^{n-1} + a_2 S^{n-2} + \dots + a_{n-1} S + a_n = 0 \quad (4.0)$$

recibe el nombre de ecuación característica y las raíces de esta ecuación se utilizan en el estudio de la estabilidad del sistema. Si se generaliza la función de entrada $Z(X)$, para incluir derivadas de $Z(X)$, aparecerá un polinomio en el numerador de la función de transferencia.

En este artículo se describe un método para calcular las raíces de un polinomio $P(S)$ por el método de los factores cuadráticos (1).

2. PLANTEAMIENTOS

Una raíz de un polinomio de grado N es un valor S tal que $P(S) = 0$; se puede demostrar sin mayor dificultad que el número de raíces del polinomio es numéricamente igual al grado del polinomio. Dichas raíces pueden ser reales, imaginarias, o una combinación.

Un polinomio de grado N puede ser escrito en la forma:

$$P(S) = a_0 S^N + a_1 S^{N-1} + a_2 S^{N-2} + \dots + a_{N-1} S + a_N$$

$$P(S) = \sum_{i=0}^N a_i S^{N-i} \quad (5.0)$$

y el problema se puede plantear así:

$$P(S) = \sum_{i=0}^N a_i S^{N-i} = 0 \quad (6.0)$$

Este polinomio puede ser factorizado como:

$$P(S) = (S^2 - r^* S - q^*) \sum_{i=0}^{N-2} b_i^* S^{N-i-2} = 0 \quad (7.1)$$

ó

$$P(S) = (S^2 - rS - q) \sum_{i=0}^{N-2} b_i S^{N-i-2} + RS + Q = 0 \quad (7.2)$$

En la **ecuación 7.2** el término $RS + Q$ representa el residuo e indica que los valores de r y q escogidos para factorizar el polinomio no son adecuados; mientras que en la **ecuación 7.1** r^* y q^* son los valores que factorizan exactamente el polinomio y por lo tanto $RS + Q = 0$. Se puede concluir que R y Q son funciones de r , q lo que se escribe como:

$$R = f(r, q) \quad (8.1)$$

$$Q = g(r, q) \quad (8.2)$$

Es posible entonces calcular dos raíces del polinomio de grado N por hacer que las funciones R y Q se vuelvan cero.

3. DESARROLLO DEL METODO

El desarrollo de la **ecuación 7.2** da como resultado:

$$\begin{aligned} & b_0 S^N + (b_1 - rb_0) S^{N-1} + (b_2 - rb_1 - qb_0) S^{N-2} + \\ & (b_3 - rb_2 - qb_1) S^{N-3} + \dots + (b_{N-2} - rb_{N-3} - qb_{N-4}) S^2 + \\ & (-rb_{N-2} - qb_{N-3} + R) S + (-qb_{N-2} + Q) = 0 \quad (9.0) \end{aligned}$$

para que los polinomios dados por la **ecuación 6** y la **ecuación 9** sean iguales se deben igualar los coeficientes de las mismas potencias de S , así que:

$$\text{Para } i = 0 \quad a_0 = b_0 \quad (10.1)$$

$$\text{Para } i = 1 \quad a_1 = b_1 - rb_0 \quad (10.2)$$

$$\text{Para } i = 2 \quad a_2 = b_2 - rb_1 - qb_0$$

$$\text{Para } i = k \quad a_k = b_k - rb_{k-1} - qb_{k-2} \quad (10.3)$$

$$\text{Para } i = N-1 \quad a_{N-1} = -rb_{N-2} - qb_{N-3} + R$$

$$\text{Para } i = N \quad a_N = -qb_{N-2} + Q$$

Por inducción se demuestra que:

$$R = b_{N-1}$$

$$Q = b_N - r b_{N-1}$$

Entonces existen dos raíces del polinomio cuando:

$$b_{N-1} = b_N = 0 \quad (11)$$

O sea:

$$a_{N-1} + r b_{N-2} + q b_{N-3} = 0$$

$$a_N + q b_{N-2} = 0$$

El resultado de esto es:

$$\tilde{q} = - \frac{a_N}{b_{N-2}} \quad (12)$$

$$\tilde{r} = \frac{a_N b_{N-3} - a_{N-1} b_{N-2}}{(b_{N-2})^2} \quad (13)$$

Este procedimiento es conocido como método de Lin y se usa de la siguiente forma:

Paso 1: Se asumen valores de r y q

Paso 2: Se calculan los valores de b_k ($0 \leq k \leq N$), teniendo en cuenta que:

$$b_0 = a_0, \quad k = 0$$

$$b_1 = a_1 + r b_0, \quad k = 1$$

$$b_k = a_k + r b_{k-1} + q b_{k-2}, \quad 2 \leq k \leq N$$

Paso 3: Si b_N y b_{N-1} son iguales a cero, termina el proceso iterativo

Paso 4: Si b_N y/o b_{N-1} son diferentes de cero, se calculan muchos valores de r y q de acuerdo con las ecuaciones 12 y 13.

Paso 5: Si el número de iteraciones excede un máximo, aborte el procedimiento.

Paso 6: Repita desde el paso 2.

Es importante, también, comparar el valor de b_{N-2} con cero, pues en caso de tomar este valor el proceso falla.

4. ACELERACION DE LA CONVERGENCIA

Con la ecuación 11 se plantea que los valores de b_N y b_{N-1} deben ser cero para que los valores de r y q generen un factor cuadrático del polinomio. Según las ecuaciones 10.1, 10.2, 10.3, los valores b_k son funciones de r y q así que:

$$R = b_{N-1} = f(r, q) = 0 \quad (14.1)$$

y

$$Q = g(r, q) = a_N + q b_{N-2} - b_N - r b_{N-1} \quad (14.2)$$

Si se aplica el criterio de Newton-Raphson para la búsqueda de raíces de un sistema de ecuaciones trascendentales se obtiene:

$$-R = \frac{\partial R}{\partial r} \Delta r + \frac{\partial R}{\partial q} \Delta q \quad (15.1)$$

$$-Q = \frac{\partial Q}{\partial r} \Delta r + \frac{\partial Q}{\partial q} \Delta q \quad (15.2)$$

$$\text{Con } \Delta r = r_{j+1} - r_j$$

$$\Delta q = q_{j+1} - q_j$$

Para obtener la derivada de b_N y b_{N-1} respecto a r se procede así:

$$b_0 = a_0 \quad \frac{\partial b_0}{\partial r} = 0 \quad \text{Por definición}$$

$$b_1 = a_1 + r b_0 \quad \frac{\partial b_1}{\partial r} = b_0 = C_0$$

$$b_2 = a_2 + r b_1 + q b_0 \quad \frac{\partial b_2}{\partial r} = r C_0 + b_1 = C_1$$

$$b_3 = a_3 + r b_2 + q b_1 \quad \frac{\partial b_3}{\partial r} = r C_1 + b_2 + q C_0 = C_2$$

$$b_4 = a_4 + rb_3 + qb_2 \quad \frac{\partial b_4}{\partial r} = rC_2 + b_3 + qC_1 = C_3$$

Con lo que se obtiene que:

$$C_0 = b_0 \quad k = 0$$

$$C_1 = b_1 + rC_0 \quad k = 1$$

$$C_k = b_k + rC_{k-1} + qC_{k-2} \quad 2 \leq k \leq N$$

$$\frac{\partial b_{k+1}}{\partial r} = C_k$$

Para obtener las derivadas de b_N y b_{N-1} respecto a q :

$$b_0 = a_0 \quad \frac{\partial b_0}{\partial q} = 0$$

$$b_1 = a_1 + rb_0 \quad \frac{\partial b_1}{\partial q} = 0$$

$$b_2 = a_2 + rb_1 + qb_0 \quad \frac{\partial b_2}{\partial q} = b_0 = \frac{\partial b_1}{\partial r} = C_0$$

$$b_3 = a_3 + rb_2 + qb_1 \quad \frac{\partial b_3}{\partial q} = rC_0 + b_1 = C_1$$

$$b_4 = a_4 + rb_3 + qb_2 \quad \frac{\partial b_4}{\partial q} = rC_1 + qC_0 + b_2 = C_2$$

Se puede concluir que:

$$\frac{\partial b_{k+2}}{\partial q} = \frac{\partial b_{k+1}}{\partial r} = C_k \quad (16)$$

Se aplican las ecuaciones 14.1, 14.2 y 16 al sistema de ecuaciones planteado en 15.1 y 15.2, y se obtiene:

$$-b_{N-1} = C_{N-2}\Delta r + C_{N-3}\Delta q \quad (17.1)$$

$$-b_N = (C_{N-1} - b_{N-1})\Delta r + C_{N-2}\Delta q \quad (17.2)$$

Ahora bien, la solución de este sistema de ecuaciones da como resultado:

$$\Delta r = r_{j+1} - r_j = \frac{C_{N-3}b_N - b_{N-1}C_{N-2}}{D}$$

$$\Delta q = q_{j+1} - q_j = \frac{(C_{N-1} - b_{N-1})b_{N-1} - C_{N-2}b_N}{D}$$

$$\text{Con } D = C_{N-2}C_{N-2} - (C_{N-1} - b_{N-1})C_{N-3}$$

Donde el subíndice j se refiere al proceso iterativo de cálculo.

5. SISTEMATIZACION DEL METODO

Se escribió un programa de computador en lenguaje Pascal, el cual opera básicamente así:

- El procedure ULTINO degrada el polinomio
- El procedure IMPRIME escribe las raíces
- El procedure LINBAIR calcula las raíces teniendo en cuenta todas las restricciones dadas por el método Lin-Bairstow
- Adicionalmente, se limita el uso del programa a que el valor del coeficiente a_0 del polinomio sea igual a 1.

6. APLICACIONES

EJEMPLO 12:

El sistema mostrado en la figura 1, el cual consiste de tres reactores en serie, será controlado en "feedback" con un controlador Proporcional-Derivada-Integral (PDI). Se piden las raíces de la ecuación característica.

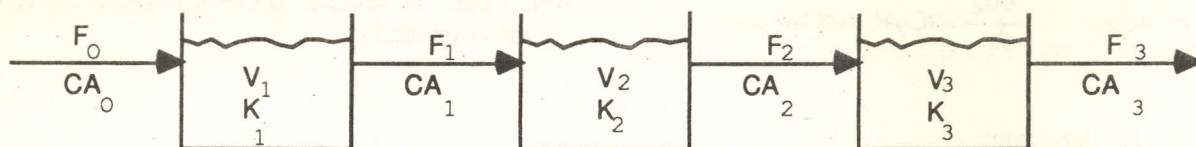


FIG.1. SISTEMA DE TRES REACTORES EN SERIE, QUE OPERAN EN FORMA ISOTERMICA.

SOLUCION

Las ecuaciones diferenciales que representan el comportamiento del sistema, cuando $F_1 = F_2 = F_3 = F$, $V_1 = V_2 = V_3 = V$ y $k_1 = k_2 = k_3 = k$, son:

$$\frac{dC_{A1}}{dt} + (K + 1/\tau) C_{A1} = (1/\tau) C_{A0}$$

$$\frac{dC_{A2}}{dt} + (K + 1/\tau) C_{A2} = (1/\tau) C_{A1}$$

$$\frac{dC_{A3}}{dt} + (K + 1/\tau) C_{A3} = (1/\tau) C_{A2}$$

Con $\tau = V/F$

Ahora bien, este sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden conduce a:

$$\frac{d^3 C_{A3}}{dt^3} + 3(K + 1/\tau) \frac{d^2 C_{A3}}{dt^2} + 3(K + 1/\tau) \frac{d C_{A3}}{dt} + (K + 1/\tau)^3 C_{A3} = (1/\tau)^3 C_{A0}$$

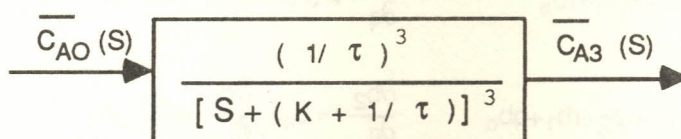
en notación de operadores:

$$[D^3 + 3(K + 1/\tau) D^2 + 3(K + 1/\tau) D + (K + 1/\tau)^3] C_{A3} = (1/\tau)^3 C_{A0}$$

La aplicación de las transformadas de Laplace hace que:

$$G(S) = \frac{C_{A3}}{C_{A0}} = \frac{(1/\tau)^3}{[S + (K + 1/\tau)]^3}$$

Este nuevo criterio nos permite representar el proceso como:



Cuando se agrega el elemento controlador PID la nueva representación del proceso es (figura 2):

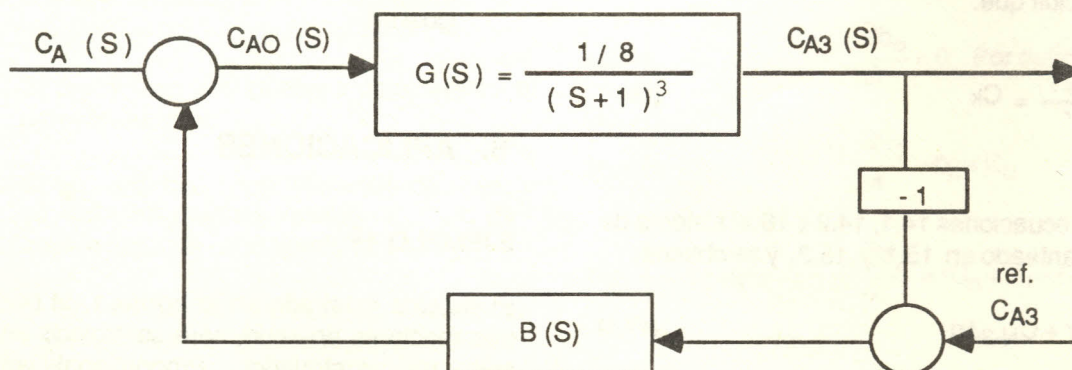


FIGURA 2

Donde:

$$B(S) = K_c \cdot \frac{\tau_I S + 1}{\tau_I S} \cdot \frac{\tau_D S + 1}{(\tau_D/20) S + 1}$$

Con lo que la ecuación característica del sistema controlado es:

$$1 + B(S) G_M(S) =$$

$$1 + K_c \frac{S + 1/\tau_I}{S} \cdot \frac{\tau_D S + 1}{(\tau_D/20) S + 1} \cdot \frac{1/8}{(S+1)^3} S^5$$

$$+ (3 + \frac{20}{\tau_D}) S^4 + (3 + \frac{60}{\tau_D}) S^3 + (1 + \frac{60}{\tau_D} + \frac{20K_c}{8}) S^2$$

$$\left[\frac{20}{\tau_D} + \frac{20K_c}{8} \left(\frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_I} \right) \right] S + \frac{20K_c}{8\tau_D\tau_I} = 0$$

Los tres casos que plantea el autor de la referencia 2 son:

I	$\tau_D = 0.45$	$\tau_I = 1.82$	$K_c = 17$
II	$\tau_D = 0.90$	$\tau_I = 1.82$	$K_c = 30$
III	$\tau_D = 1.80$	$\tau_I = 1.82$	$K_c = 22$

Cuyas raíces son: (encontradas con el método de Lin-Baird y con error de b_N y b_{N-1} aceptado como 10^{-16}).

CASO I	
PARTE REAL	PARTE IMAGINARIA
- 0.17748	1.10189
- 0.17748	- 1.10189
- 0.42220	0.00000
- 2.21993	0.00000
- 44.44735	0.00000

CASO II	
PARTE REAL	PARTE IMAGINARIA
- 0.48779	0.54676
- 0.48779	- 0.54676
- 0.93064	1.71573
- 0.93064	- 1.71573
- 22.38536	0.00000

CASO III	
PARTE REAL	PARTE IMAGINARIA
- 0.42397	0.00000
- 0.62796	0.00000
- 0.73085	2.20080
- 0.73085	- 2.20080
- 11.59747	0.00000

EJEMPLO 2³:

Calcule el factor de compresibilidad (Z) del n-butano, el cual está sometido a 5 atm abs de presión y 250 °C. Asuma que el comportamiento del gas puede ser descrito por la ecuación de estado de Benedict-Weeb-Rubin:

$$P = \frac{RT}{v} + \frac{A}{v^2} + \frac{B}{v^3} + \frac{C}{v^6} + \frac{D}{v^3} (1 + \gamma/v^2) e^{-\gamma/v^2}$$

$$\text{Con: } A = RTB_0 - A_0 - \frac{C_0}{T^2} \quad B = RTb - a$$

$$C = a\alpha \quad D = \frac{C}{T^2}$$

Los valores de $A_0, B_0, C_0, a, b, c, \alpha,$ y γ son constantes que se encuentran tabulados en (1).

$$\begin{aligned} A_0 &= 10.0847 & a &= 1.88231 \\ B_0 &= 0.124361 & b &= 0.0399983 \\ C_0 &= 0.99283 \times 10^6 & c &= 0.3164 \times 10^6 \\ \alpha &= 1.10132 \times 10^{-3} & \gamma &= 3.4 \times 10^{-2} \end{aligned}$$

Las unidades de P, V, T deben ser atm, l/gmol, K.
El valor de $R = 0.08206$ atm l/gmol K.

SOLUCION

El factor de compresibilidad, Z se expresa como:

$$Z = \frac{PV}{RT}$$

Para el caso del gas ideal $Z = 1$ y $V = 8.586$ l/gmol.

Así que esto permite suponer que:

$$\exp(-\gamma/v^2) \cong 1$$

lo cual transforma la ecuación de Benedict-Webb-Rubin en:

$$\begin{aligned} V^6 - 8.5859378 V^5 + 1.6747092 V^4 - 0.1981748 V^3 \\ - 7.86127 \times 10^{-3} V - 4.15312 \times 10^{-4} = 0 \end{aligned}$$

y el programa da los resultados que se muestran en el siguiente cuadro.

De los cuales sólo es aceptado el valor de $v = 8.39913$ l/gmol dado que los demás valores son imaginarios o negativos.

El valor aceptado da como resultado el valor de:

$$Z = \frac{PV}{RT} = 0.977077$$

y además comprueba que el valor de $\exp(-\gamma/v^2)$ es aproximadamente igual a 1.

PARTE REAL	PARTE IMAGINARIA
- 0.05140	0.13111
- 0.05140	- 0.13111
0.17405	0.14557
0.17405	- 0.14557
8.38913	0.00000
- 0.04849	0.00000

CONCLUSIONES

1. El método es muy eficiente puesto que permite encontrar todas las raíces de un polinomio, reales e imaginarias.
2. El grado de precisión con que se maneja el residuo puede ser alterado de acuerdo al problema de aplicación.
3. La ejecución del programa en Turbo-Pascal es rápida, lo que permite probar diferentes valores en la precisión.

BIBLIOGRAFIA

1. CARNAHAN, B., LUTHER, H.A., WILKES, J.O. *Applied numerical methods*. John Wiley and Sons, N.Y. (1969).
2. LUYBEN, W.L. *Process modeling, simulation, and control for chemical engineers*. Mc Graw-Hill (1973).
3. BALZHISER, R.E., SAMUELS, M.R., ELIASSEN J.D. *Termodinámica Química para Ingenieros*. Prentice Hall Hispanoamericana, S.A., (1980).