Mecánica Computacional Vol. 14, páginas 25-33
compilado por Sergio Idelsohn y Victorio Sonzogni
Editado por AMCA, Santa Fe, 1994

IMPLEMENTACION DE ALGUNOS ALGORITMOS PARA LA RESOLUCION NUMERICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

Hermann Alder, Ernesto Figueroa, Marcelo Saavedra
Departamento de Ingeniería Matemática
Universidad de Concepción
Concepción, Chile

RESUMEN

La resolución de un sistema de ecuaciones no lineales constituye una de las dificultades importantes que se presentan en problemas de la Ingeniería y de las Ciencias Aplicadas. En este trabajo se realiza un estudio de los algoritmos numéricos desarrollados por Abaffy [1], Bittner [2] y Zirilli [3] aplicados a sistemas de ecuaciones algebraicas que intervienen en la modelación matemática de la combustión del propano y de la transferencia radiativa. En este estudio se han considerado el tiempo de cálculo CPU, el número de iteraciones requeridas como la magnitud del error de la solución aproximada obtenida.

ABSTRACT

The numerical solution of nonlinear equations in several variables is frecuently the last step for solving problems arriving in the Engineering and Applied Sciences. In this paper we compare the numerical methods developped by Abaffy [1], Bittner [2] and Zirilli [3] solving nonlinear systems of equations related to the combustion of propane, the radiative transfer and systems which contains trigonometric functions. We have taken into account the time CPU of the computer, number of iterations and the error of the approximate solution.

INTRODUCCION

Los sistemas de ecuaciones algebraicos no lineales intervienen en diversos problemas de aplicación como por ejemplo: en la discretización de ecuaciones diferenciales ordinarias y a derivadas parciales por medio de las diferencias finitas, en la discretización de problemas variacionales por el método de los elementos finitos, en la minimización de la energía potencial de sistemas mecánicos, en la resolución de ecuaciones integrales no lineales, etc.

Para resolver sistemas no lineales se han desarrollado una gran cantidad de software sin considerar frecuentemente una aplicación específica, lo que ha sido conveniente en muchos casos. Sin embargo, dada la necesidad de tener que resolver problemas que requieren de una compleja optimización y que deben ser resueltos por medio de computadores de alta eficiencia, se hace necesario desarrollar algoritmos que permitan resolver problemas que tienen su origen en las aplicaciones.

En base a esta reflexión se han analizado en este trabajo algunos algoritmos para resolver sistemas de ecuaciones no lineales que tienen su origen en la modelación matemática de la combustión del propano, en el estudio de la transferencia radiativa y sistemas con funciones trigonométricas.

Para resolver un sistema de ecuaciones no lineales del tipo,

$$f(x) = 0\,; \quad f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \tag{1}$$

se pueden utilizar diversos algoritmos numéricos, siendo los más conocidos aquellos que se basan en el método de Newton y de sus modificaciones.

También se han desarrollado otros algoritmos que no están basados en el algoritmo de Newton como por ejemplo los de homotopía, de continuación, los métodos simpliciales, y aquellos que se basan en la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

En este trabajo se han resuelto los problemas por el método de tipo local ABS, que es una modificación del algoritmo de Newton y que ha sido desarrollado por los autores Abaffy, Galántai y Spedicato [1], por el algoritmo de Bittner [2] que pertenece al grupo de los métodos simpliciales y por el algoritmo que se basa en la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias expuesto en la publicación de los autores Incerti, Parisi y Zirilli [3].

Los problemas que se han analizado en este trabajo son los siguientes:

- Sistemas de ecuaciones H que se presentan en el estudio de la transferencia radiativa y que conduce a tener que resolver sistemas de ecuaciones no lineales de gran tamaño [4].
- Sistemas de ecuaciones que provienen de la formulación matemática de la combustión del propano, y las que han sido sugeridos por Moré [5].
- Sistemas de ecuaciones con funciones trigonométricas.

Al respecto debe destacarse que el algoritmo de Newton no es aplicable si se pretende resolver los problemas mencionados.

En cuanto a la ejecución de los cálculos, éstos se realizaron en un computador HP-Apollo, modelo 720, con doble precisión, utilizando el lenguaje de programación Fortran. Los procesos iterativos se detuvieron utilizando como criterio de detención $||f|| < 10^{-5}$, en que la norma es la euclidiana.

DESCRIPCION DE LOS ALGORITMOS

A continuación se describirán brevemente, los fundamentos teóricos de los algoritmos mencionados.

Algoritmo *ABS*

Este algoritmo [1] es una extensión del algoritmo propuesto por Abaffy, Galántai y Spedicato para resolver sistemas de ecuaciones lineales. El algoritmo es de convergencia local con una rapidez de convergencia super-lineal por cada iteración mayor.

El algoritmo consiste en lo siguiente:

Sea a resolver un sistema de ecuaciones no lineales dado por (1), cuyas componentes son de la forma

$$f_i(x) = 0 \quad , \quad i = 1, ..., n \tag{2}$$

y sea $J(x) = f'(x)$ la matriz Jacobiana asociada que supondremos invertible en una vecindad de la solución aislada $x^* \in \mathbb{R}^n$ del sistema. Denotaremos por $a_i^T(x)$, $i = 1, ..., n$ a los renglones de la matriz jacobina.

Si $x_0 \in R^n$ es un vector suficientemente cerca de x^*, los métodos no-lineales ABS correspondiente al paso de orden m, $(m \geq 1)$ se definen del modo siguiente:

Sean $y_0 = x_{m-1}$, $H_0 = I$.
Se elige un vector parámetro z_k tal que,

$$p_k = H_{k-1}^T z_k \quad \text{con} \quad p_k^T a_k(y_{k-1}) \neq 0, \text{ para } \quad k = 1, ..., n \tag{3}$$

Por otra parte se obtienen los valores y_k por

$$y_k = y_{k-1} - f_k(y_{k-1}) p_k / (p_k^T a_k(y_{k-1})) \tag{4}$$

y se elige un segundo vector parámetro w_k tal que

$$w_k^T H_{k-1} a_k(y_{k-1}) \neq 0 \tag{5}$$

con el que se evalúa H_k por

$$H_k = H_{k-1} - H_{k-1} a_k(y_{k-1}) w_k^T H_{k-1} / (w_k^T H_{k-1} a_k(y_{k-1})) \tag{6}$$

si hacemos $x_m = y_n$, se obtienen las soluciones del sistema de ecuaciones no lineales. Debe observarse que el algoritmo descrito resuelve un sistema de ecuaciones lineales.

Algoritmo de Bittner

El algoritmo de Bittner [2] se clasifica entre los métodos simpliciales y consiste en una generalización del método de la secante modificada.
Sea

$$f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$$

una transformación contínua y D un conjunto convexo. Sean $x_0, x_1, ..., x_n$ vectores de D tal que los valores correspondientes $f_0 = f(x_0)$, $f_1 = f(x_1), ..., f_n = f(x_n)$ constituyan los vértices de un n-simplex cerrado y tal que contenga al origen.

El algoritmo para resolver el sistema (1) es el siguiente:

Para $k = 0$ se asignan los valores

$$x_i^k = x_i \quad , \quad i = 0, 1, ..., n \tag{7}$$

y se calculan los parámetros

$$\lambda_0 = \lambda_0^k, ..., \lambda_n = \lambda_n^k$$

tales que se satisfagan las condiciones

$$\sum_{i=0}^{n} \lambda_i = 1 \quad , \quad \sum_{i=0}^{n} \lambda_i f(x_i^k) = 0 \tag{8}$$

con los valores obtenidos de los parámetros se evalúan los vectores

$$x^k = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i \, x_i^k \quad , \quad f(x^k) \tag{9}$$

Si $||f|| < \epsilon$ se detiene el proceso iterativo.

Si en cambio $f(x^k) \neq 0$ se calculan los parámetros a_i, tal que se cumplen las condiciones

$$\sum_{i=0}^{n} a_i = 1 \quad , \quad \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i^k) = f(x^k) \tag{10}$$

A continuación se elige un $\sigma = \sigma_k$ de modo que

$$\frac{\lambda_\sigma}{a_\sigma} = min\{\frac{\lambda_i}{a_i} / a_i > 0\} \tag{11}$$

y se realizan las sustituciones

$$x_\sigma^{k+1} = x^k \quad , \quad x_i^{k+1} = x_i^k \quad (i \neq \sigma) \tag{12}$$

para finalmente sustituir $k+1$ por k y volver a (8).

Algoritmo de Zirilli

El algoritmo estudiado por Zirilli [3] y otros autores pertenece al grupo que se basa en los métodos llamados de las ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden los que consisten en resolver un sistema algebraico no lineal por medio de un sistema de ecuaciones diferenciales el que a su vez se resuelve por un método numérico.

Al sistema de ecuaciones (1) se le asocia una función $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, definida por:

$$F(x) = ||f(x)||^2 = \sum_{i=1}^{n} f_i^2(x) \tag{13}$$

Con la función F así definida se construye el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden:

$$\mu(t)\frac{d^2x(t)}{dt^2} + g(t)\left[a(t)I + (1-a(t))J^T(x(t))J(x(t))\right]\frac{dx(t)}{dt} = -\nabla F(x(t)) \tag{14}$$

en que:

μ , g, son funciones reales y positivas, $0 < a(t) \leq 1$,$\forall t \geq 0$

I es la matriz unidad de orden n, $J(x)$ es la matriz Jacobiana y $J^T(x)$ es la transpuesta de la Jacobiana.

La ecuación (14) representa a la segunda ley de Newton de la Mecánica Clásica ($F = ma$) referida a una partícula de masa $\mu(t)$ la que se desplaza por la acción de la fuerza $-\nabla F(x)$ correspondiente a un potencial $F(x)$ y sometida a una fuerza de tipo disipativa,

$$g(t)[a(t)I + (1-a(t))J^T(x(t))J(x(t))]\frac{dx(t)}{dt} \tag{15}$$

Si designamos por $x(t)$ a la solución del problema inicial de Cauchy dado por (14), por x^* a la solución del sistema de ecuaciones algebraicas (1) y si se satisfacen ciertas condiciones de hipótesis señaladas en el trabajo de Salvadori [6], entonces se tiene que:

$$x(t) \rightarrow x^* \quad \text{cuando} \quad t \rightarrow \infty \tag{16}$$

El sistema de ecuaciones diferenciales (14) se resuelve por un método de diferencias finitas que satisfagan la propiedad de la A-estabilidad definida por Dahlquist [7].

RESULTADOS NUMERICOS

Los problemas que se indican a continuación han sido resueltos por medio de los métodos descritos anteriormente, en que los cálculos se ejecutaron en un computador HP-Apollo, modelo 720, operando con doble precisión. Como criterio de detención de los procesos iterativos se utilizó $||f|| < 10^{-5}$ en que la norma es la euclidiana.

Problema 1: Sistema de ecuaciones H

Este sistema de ecuaciones no lineales proviene de la discretización de las ecuaciones integrales que intervienen en el estudio de la transferencia radiativa [4] y cuya estructura es la siguiente:

$$xi + \frac{1}{4}\left[w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j \frac{i}{(i+j)}\frac{i}{x_j}\right] = 1 \quad , \quad i = 1, ..., n \tag{17}$$

en que, $w_0 = w_n = \frac{h}{2}$, $w_j = h$, para $j = 1, 2, ..., n-1$

Este problema ha sido resuelto para sistemas de ecuaciones para valores de $n = 10, 100, 500$ y 700 ecuaciones. Como vector inicial se eligió a $x_0 = [-0.01, ..., -0.01]^T$ en correspondencia del cual el método de Newton diverge.

En la tabal I, se indican los resultados obtenidos para $n = 700$.

Tabla I

Método	N^0 Iter	Tiempo CPU	Error$*10^{-6}$
ABS	dv	dv	dv
Bittner	284	7:20:36.7	5.0601
Zirilli	26	20:17:36.9	4.6598

El tiempo CPU está expresado en hrs: min: seg.
El valor exacto de la componente x_{700} del sistema es 0,799142702 ; el error que se indica en la tabla corresponde a la expresión $||f|| * 10^{-6}$.

Problema 2: Combustión del propano

El problema de la combustión del propano en presencia del aire corresponde a una situación de equilibrio químico. Cada incógnita representa al número de moles de un producto generado por la combustión de cada mol de propano.
El modelo matemático que corresponde a la combustión del propano en el que se consideran diez productos está dado, de acuerdo a Meintjes y Morgan [8] y por Mordechai Shacham [9], por las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned}
f_1(x) &= x_1 + x_4 - 3 = 0\\
f_2(x) &= 2x_1 + x_2 + x_4 + x_7 + x_8 + x_9 + 2x_{10} - R = 0\\
f_3(x) &= 2x_2 + 2x_5 + x_6 + x_7 - 8 = 0\\
f_4(x) &= 2x_3 + x_9 - 4R = 0\\
f_5(x) &= K_5 x_2 x_4 - x_1 x_5 = 0\\
f_6(x) &= K_6 x_2^{1/2} x_4^{1/2} - x_1^{1/2} x_6 (\frac{p}{x_s})^{1/2} = 0\\
f_7(x) &= K_7 x_1^{1/2} x_2^{1/2} - x_4^{1/2} x_7 (\frac{p}{x_s})^{1/2} = 0\\
f_8(x) &= K_8 x_1 - x_4 x_8 (\frac{p}{x_s}) = 0\\
f_9(x) &= K_9 x_1 x_3^{1/2} - x_4 x_9 (\frac{p}{x_s})^{1/2} = 0\\
f_{10}(x) &= K_{10} x_1^2 - x_4^2 x_{10} (\frac{p}{x_s}) = 0
\end{aligned} \tag{18}$$

con $x_s = \sum_{i=1}^{10} x_i$, en que el parámetro R expresa la cantidad relativa entre el aire y el combustible; las constantes $K_5, K_6, ..., K_{10}$, corresponden a las constantes de equilibrio a $2200^0 K$[8]

Dado que las variables x_i representan cantidades de productos químicos, éstas deberán ser soluciones no-negativas, exigencias que también se requiere para evitar que la función raíz cuadrada tenga argumentos negativos.
Resolver un sistema de esta naturaleza ofrece grandes dificultades, por lo que se ha optado en este trabajo considerar la formulación reducida del modelo de la combustión del propano como se indica en la publicación preliminar de Averick, Carter y Moré [5]. El sistema tiene la forma siguiente:

$$
\begin{aligned}
f_1(x) &= x_1x_2 + x_1 - 3x_5 = 0 \\
f_2(x) &= 2x_1x_2 + x_1 + 2R_{10}x_2^2 + x_2x_3^2 + R_7x_2x_3 + R_9x_2x_4 + R_8x_2 - Rx_5 = 0 \\
f_3(x) &= 2x_2x_3^2 + R_7x_2x_3 + 2R_5x_3^2 + R_6x_3 - 8x_5 = 0 \\
f_4(x) &= R_9x_2x_4 + 2x_4^2 - 4Rx_5 = 0 \\
f_5(x) &= x_1x_2 + x_1 + R_{10}x_2^2 + x_2x_3^2 + R_7x_2x_3 + R_9x_2x_4 + R_8x_2 + R_5x_3^2 + R_6x_3 + x_4^2 - 1 = 0
\end{aligned} \tag{19}
$$

De este modo el sistema (18) se ha reducido a uno de cinco ecuaciones con cinco incógnitas. Esta reducción es posible tomando en consideración las características de las ecuaciones que rigen el equilibrio químico.

Los valores de los coeficientes $R_5, R_6, ..., R_{10}$ están dados por:

$$
\begin{array}{lcl}
R_5 = 1.930 \cdot 10^{-1} & ; & R_6 = 2.597 \cdot 10^{-3} \cdot p^{-1/2} \\
R_7 = 3.448 \cdot 10^{-3} \cdot p^{-1/2} & ; & R_8 = 1.799 \cdot 10^{-5} \cdot p^{-1} \\
R_9 = 2.155 \cdot 10^{-4} p^{-1/2} & ; & R_{10} = 3.846 \cdot 10^{-5} \cdot p^{-1}
\end{array}
$$

p representa la presión expresada en atmósferas.

Para los valores R y p se han utilizado los valores siguientes: $R = 10$, $p = 40$ atmósferas.

El problema de la combustión del propano ha sido resuelto por los métodos ABS, de Bittner y de Zirilli con los resultados que se indican en la Tabla II.

Tabla II

Método	N^0 Iter	Tiempo CPU	Error$*10^{-6}$
ABS	1800	4.9	29.7191
Bittner	45	0.0	0.0313562
Zirilli	2832	-	9.969

El sistema ha sido resuelto con diferentes vectores iniciales cuya elección depende del algoritmo utilizado.
El algoritmo de Zirilli sólo ha sido aplicable si la componente x_2 del vector inicial es un valor cercano a 34. Los parámetros utilizados han sido los siguientes: $\mu = 0.8$, $g = 1.4$, $a = 0.25$, habiéndose considerado para el paso de integración h, el valor $h = 0.01$.

En la publicación de Meintjes y Morgan [8] se encuentra la solución obtenida por otros algoritmos y cuyos fundamentos matemáticos son discutibles.

Problema 3: Sistema con funciones trigonométricas

Además de los problemas anteriores se realizó un estudio de un sistema de ecuaciones con funciones trigonométricas dado por:

$$senx_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} cosx_j = 1 - n \ , \ i = 1, 2, ..., n \tag{20}$$

Este sistema sólo ha sido posible ser resuelto para un número de ecuaciones $n = 23$, por el método ABS, para $n = 10$ por el método de Bittner y $n = 50$ por el método de Zirilli.

En la Tabla III se indican los resultados obtenidos para un vector inicial $x_0 = \left[\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}, ..., \frac{\pi}{4}\right]^T$

Tabla III

Método	N^0 Iter	Tiempo CPU	Error$*10^{-6}$
ABS	14	0.1	5.1357
Bittner	9	0.0	9.3835
Zirilli	2083	1:13:22.9	0.0000

La solución exacta del sistema trigonométrico es: $x^* = [0.0, ..., 0.0]^T$
En el caso del método de Zirilli los parámetros utilizados han sido los siguientes: $\mu = 2.0$, $g = 9.2$, $a = 1.0$, habiéndose considerado para el paso de integración el valor $h = 0.01$.

CONCLUSIONES

- El método simplicial publicado por Bittner conduce a resultados satisfactorios, sin embargo presenta el inconveniente de la determinación de n-simplex. En general se concluye que este algoritmo sólo es aplicable para resolver sistemas de ecuaciones no lineales pequeños.

- El algoritmo ABS ha dado resultados satisfactorios para resolver el sistema de ecuaciones de la combustión del propano. No presenta mayores ventajas para resolver los otros dos problemas. Debe tenerse presente que es un algoritmo de tipo local.

- El algoritmo de los autores Incerti - Parisi - Zirilli sigue siendo un algoritmo de tipo global conveniente, a pesar de las dificultades en la determinación de los parámetros μ, g, a y de su convergencia lenta. En ciertos casos sólo es utilizable como un método de tipo local como sucede en la resolución del Problema 2.

AGRADECIMIENTOS

Para el desarrollo de este trabajo, se han cconsiderado las sugerencias dadas por los profesores Jorge MORE del Laboratorio Nacional Argonne de la Universidad de Chicago y Josef STOER de la Universidad de Würzburg de Alemania, por lo que se les agradece muy sinceramente.

REFERENCIAS

1. Abaffy, Y., Galántai, A., Spedicato, E., "The local convergence of ABS methods for nonlinear algebraic equations", Num. Math., **51** , 429-439 (1987).

2. Bittner, L., "Simplicial methods for the solutions of systems of nonlinear equations", ZAMM, **56**, 65-73 (1976).

3. Incerti, S., Parisi, V., Zirilli, F., "A new method for solving nonlinear simultaneous equations", SIAM J. Num. Analysis, **16**, 779-789 (1979).

4. Frommer, A., "Comparison of Brown's and Newton's method in the monoton case", Num. Math., **52**, 511-521 (1988).

5. Averick, B., Carter, R., Moré, J., "The MINPACK-2 test problem collection", (preliminary version), Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory, University of Chicago (1991).

6. Salvadori, L., "Famiglie ad un parametro di funzioni di Liapunov nello studio della stabilitá", Symposia Mathematica, **6**, Istituto Nazionale di Alta Matematica, Roma, Italia, Academic Press (1971).

7. Dahlquist, G.G., "A special stability problem for linear multistep methods", BIT, **3**, 27-43 (1963).

8. Meintjes, K., Morgan, A., "Chemical Equilibrium Systems as Numerical Test Problems", ACM Transactions on Mathematical Software, **16**, 143-151 (1990).

9. Shacham, M., "Numerical Solution of Constrained nonlinear Algebraic Equations", International Journal for Numerical Methods in Engineering, **23**, 1455-1481 (1986).