

GEOMETRIC PROGRAMMING IN EVALUATING OF EXPERIMENTAL DATA GEOMETRICKÉ PROGRAMOVÁNÍ PŘI VYHODNOCOVÁNÍ EXPERIMENTÁLNĚ STANOVENÝCH DAT

Tomáš Mareš¹

1 Úvod

Vyhodnocování naměřených dat provedených experimentů se sebou přináší celou řadu problémů. Jedním takovým vážným problémem je například stanovení parametrů materiálových modelů z experimentálně získaných dat. Zde ve své pravé podstatě jde o problém najít takové hodnoty parametrů modelu, aby součet druhých mocnin rozdílů naměřených hodnot a hodnot odpovídajících hledanému modelu byl minimální. Tato chvalně známá metoda zvaná jako metoda nejmenších čtverců spadá mezi úlohy o nalezení minima dané funkce. Matematických metod zabývajících se problémem nalezení minima dané funkce je celá řada, ne všechny jsou však zcela vhodné k řešení konkrétních úkolů. V případě řešení naší úlohy je v drtivé většině případů hledán extrém funkce mající tvar součtu součinů mocnin hledaných parametrů.

Řešením úlohy takového tvaru se zabývá metoda zvaná *Geometrické programování*. Termín programování se z historických důvodů používá pro označení matematické formulace parametrických optimalizačních úloh a pro metody jejich řešení. Geometrické programování je jednou takovou formulací a metodou.

Již od časů Pierre de Fermata (Pierre de Fermat [-má] * 1601, Beaumont de Lomagne, † 12. I. 1665, Castres.) je známo, že jisté nerovnosti pomáhají řešit speciální optimalizační úlohy. V šedesátých letech dvacátého století pánové Peterson, Duffin a Zener precizně popsali využití vlastností nerovnosti uvádějící vztah mezi váženým aritmetickým průměrem a váženým geometrickým průměrem, které se říká *geometrická nerovnost*, k řešení parametrické optimalizační úlohy shora uvedeného tvaru. V letech sedmdesátých byl postup shora citované práce značně zobecněn panem D. J. Wildem na řešení úloh následujícího typu.

$$\min_{X_\nu} g_0, \quad g_0 = \sum_{i=1}^{m_0} c_i \prod_{\mu=1}^M X_\mu^{a_{i\mu}}, \quad M = n \cdot h, \quad (1)$$

při splnění vedlejších podmínek majících tvar

$$0 < z_k g_k^{z_k} \leq 1, \quad (k = 1, 2, \dots, q), \quad (2)$$

kde $z_k = 1$ nebo -1 a

$$g_k = \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} c_i \prod_{\mu=1}^M X_\mu^{a_{i\mu}}, \quad (3)$$

a kde q je počet vedlejších podmínek (2), m_0 počet členů cílové funkce, $(m_k - m_{k-1})$ počet členů k -té vedlejší podmínky, $m = m_q$ je celkový počet členů a M je počet návrhových veličin X_μ .

¹ing. Tomáš Mareš, Ústav mechaniky, České vysoké učení technické, Technická 4, 166 07 Praha 6, e-mail: mares@sgi.fsid.cvut.cz

2 Geometrické programování

Termín programování se z historických důvodů používá pro označení matematické formulace parametrických optimalizačních úloh a pro metody jejich řešení. Geometrické programování je jednou takovou formulací a metodou. Zmíněná formulace je, jak shora vidno, vyjádřena v třídě funkcí majících tvar součtu součinů mocnin návrhových proměnných X_μ a známých koeficientů c_i .

Již od časů Pierre de Fermata² je známo, že jisté nerovnosti pomáhají řešit speciální optimalizační úlohy. V šedesátých letech dvacátého století pánové Peterson, Duffin a Zener [Geometric Programming: Theory and Application. New York, J. Wiley 1967.] precizně popsali využití vlastností nerovnosti uvádějící vztah mezi váženým aritmetickým průměrem a váženým geometrickým průměrem, které se říká *geometrická nerovnost*, k řešení parametrické optimalizační úlohy shora uvedeného tvaru, v případě, že koeficienty c_i jsou všechny kladné a faktory z_k jsou rovny jedné. Postup řešení úlohy shora uvedené (pro koeficienty c_i obou znamének a pro hodnoty z_k rovny jedné či méně jedné) byl sestaven na základě shora citované práce panem D. J. Wildem [Globally Optimal Design. New York, John Wiley and Sons 1978.] v letech sedmdesátých.

Geometrická nerovnost říká že, vážený aritmetický průměr je nejméně tak veliký jako vážený geometrický průměr, tedy platí

$$\sum_{i=1}^m \delta_i U_i \geq \prod_{i=1}^m U_i^{\delta_i}, \quad (4)$$

kde U_i jsou libovolná nezáporná čísla a δ_i jsou libovolné kladné *váhy*, které splňují *podmínku normy*

$$\delta_1 + \delta_2 + \dots + \delta_m = 1. \quad (5)$$

Geometrická nerovnost se navíc stává rovností právě když

$$U_1 = U_2 = \dots = U_m. \quad (6)$$

Princip využití geometrické nerovnosti (4) k řešení *primární úlohy* (1), (2)³ si ukážeme na úloze nalézt minimum funkce g_0 dané vztahem (1)⁴, kde všechny vystupující koeficienty c_i jsou kladné a na kterou nejsou uvaleny žádné vedlejší podmínky vyjma podmínky kladnosti návrhových veličin X_μ .⁵

Uvažujme tedy primární úlohu

$$\min g, \quad (7)$$

$$g = u_1 + u_2 + \dots + u_m,$$

$$u_i = c_i X_1^{a_{i1}} X_2^{a_{i2}} \dots X_M^{a_{iM}}, \quad (8)$$

kde

$$c_i > 0, \quad X_\mu > 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (\mu = 1, 2, \dots, M). \quad (9)$$

Položením

$$u_i = \delta_i U_i \quad (10)$$

dostáváme geometrickou nerovnost (4) ve tvaru

$$u_1 + u_2 + \dots + u_m \geq \left(\frac{u_1}{\delta_1}\right)^{\delta_1} \cdot \left(\frac{u_2}{\delta_2}\right)^{\delta_2} \cdot \dots \cdot \left(\frac{u_m}{\delta_m}\right)^{\delta_m}. \quad (11)$$

²Pierre de Fermat [-má] * 1601, Beaumont de Lomagne, † 12. I. 1665, Castres.

³Této úloze se v teorii geometrického programování říká *primární úloha*.

⁴Funkce g_0 slove *primární funkce*.

⁵Proměnné X_μ se nazývají *primární proměnné*.

Dosažením za u_i dle (8) do posledního vztahu dostáváme

$$g \geq V(\delta_i, X_\mu) = \left(\frac{c_1}{\delta_1}\right)^{\delta_1} \cdot \left(\frac{c_2}{\delta_2}\right)^{\delta_2} \cdot \dots \cdot \left(\frac{c_m}{\delta_m}\right)^{\delta_m} \cdot X_1^{D_1} \cdot X_2^{D_2} \cdot \dots \cdot X_M^{D_M}, \quad (12)$$

kde

$$D_\mu = \sum_{i=1}^m \delta_i a_{i\mu}, \quad (\mu = 1, 2, \dots, M). \quad (13)$$

Funkci $V(\delta_i, X_\mu)$ proměnných $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_m$ a $X_1, X_2, \dots, X_M$ se říká *předduální funkce*. Lze dokázat,⁶ že minimum naší funkce g je rovno maximu duální funkce $v(\delta)$ duálních proměnných δ_i při splnění $M + 1$ lineárních vedlejších podmínek. Tedy

$$\min_{X_\mu} g = g(X'_\mu) = \max_{\delta_i, X_\mu} V(\delta_i, X_\mu) = V(\delta'_i, X'_\mu) = v_{max}, \quad (14)$$

kde

$$v_{max} = \max_{\delta_i} v(\delta_i), \quad (15)$$

$$v(\delta_i) = \left(\frac{c_1}{\delta_1}\right)^{\delta_1} \cdot \left(\frac{c_2}{\delta_2}\right)^{\delta_2} \cdot \dots \cdot \left(\frac{c_m}{\delta_m}\right)^{\delta_m},$$

při splnění lineárních vedlejších podmínek

$$\sum_{i=1}^m \delta_i a_{i\mu} = 0, \quad (\mu = 1, 2, \dots, M), \quad (16)$$

$$\sum_{i=1}^m \delta_i = 1, \quad (17)$$

$$\delta_i \geq 0^7, \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (18)$$

Této úloze se říká *úloha duální*.

Vzhledem k tomu, že funkce v má při uvažování $c_i > 0$ a $\delta_i \geq 0$ maximum ve stejném bodě jako funkce⁸ $\ln v$, hledáme maximum *konkávní*⁹ funkce $\ln v$ při splnění lineárních vedlejších podmínek (16), (17) a (18). Je-li navíc počet M primárních proměnných X_j o jednu menší nežli počet m členů u_i funkce g ,¹⁰ potom vedlejší podmínky duální úlohy mají pouze jedno řešení a duální úloha se redukuje na řešení soustavy lineárních rovnic, což je skutečnost stojící zdůraznit.

Najdeme-li bod δ'_i , v němž duální funkce $v(\delta_i)$ dosahuje svého vázaného maxima, pak minimalizační bod primární úlohy $\mathbf{X}'$ ¹¹ nalezneme užitím podmínky, že geometrická nerovnost se stává rovností jedině platí-li¹²

⁶Derivací logaritmu pravé strany výrazu (12).

⁷Je-li $\delta_i = 0$, potom uvažujeme

$$\left(\frac{c_i}{\delta_i}\right)^{\delta_i} = 1.$$

⁸Funkce $\ln x$ je konkávní na konvexní množině všech kladných čísel x . Proto pro $c_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) a $\delta_i \geq 0$ ($i = 1, 2, \dots, m$) je funkce $\ln v(\delta)$ funkcí konkávní.

⁹Přičemž si uvědomme kvalitativní rozdíl mezi problémem nalezení globálního extrému původní nekonvexní funkce, o které nevíme, kolik má lokálních extrémů, a problémem nalezení maxima konkávní funkce, kde toto maximum je maximem jediným.

¹⁰Čehož lze dosáhnout vhodnou formalizací původní úlohy funkční optimalizace a zejména vhodnou formulací konstrukčních cílů a vhodným sestavením matematického modelu, či jistými matematickými obraty v průběhu transformace funkční optimalizační úlohy na úlohu parametrické optimalizace.

¹¹Zde $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_M)$.

¹²Srvn. vyjádření (6) na str. 164.

$$\frac{u_i(\mathbf{X}')}{\delta'_i} = K, \quad (19)$$

kde K je konstanta shodná pro všechna i .

Tato podmínka vede na vztah pro nalezení minimalizujícího bodu primární úlohy X_μ ve tvaru

$$c_i X_1^{a_{i1}} X_2^{a_{i2}} \dots X_M^{a_{iM}} = v(\delta') \cdot \delta'_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m)^{13}. \quad (20)$$

Vezmeme-li v úvahu shora položené podmínky

$$c_i > 0, \quad X_\mu > 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (\mu = 1, 2, \dots, M), \quad (21)$$

potom zlogaritmováním vztahů (20) dostáváme soustavu lineárních rovnic pro proměnné $\ln X_\mu$

$$\sum_{\mu=1}^M a_{i\mu} \ln X_\mu = \ln\left(\frac{v(\delta') \cdot \delta'_i}{c_i}\right). \quad (22)$$

V případě úlohy s vedlejšími podmínkami je nutné použít metodu Lagrangeových multiplikátorů a vzniklý problém řešit opět užitím geometrické nerovnosti.

3 Obecná úloha geometrického programování

Postup řešení obecné úlohy geometrického programování (23) až (26) byl na základě shora představené filozofie využití geometrické nerovnosti a zejména na základě práce pánů Peterson, Duffin a Zener vytvořen panem Wildem v sedmdesátých letech dvacátého století.

Shodně jako v případě úlohy (7) na str. 164 je primární úloha nalezení minima funkce

$$g_0 = \sum_{i=1}^{m_0} c_i \prod_{\mu=1}^M X_\mu^{a_{i\mu}}, \quad (23)$$

při splnění vedlejších podmínek majících tvar

$$X_\mu > 0^{14}, \quad (\mu = 1, 2, \dots, M), \quad (24)$$

$$0 < z_k g_k^{z_k} \leq 1, \quad (k = 1, 2, \dots, q), \quad (25)$$

kde $z_k = 1$ nebo -1 a

$$g_k = \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} c_i \prod_{\mu=1}^M X_\mu^{a_{i\mu}}, \quad (26)$$

a kde q je počet vedlejších podmínek (25), m_0 počet členů cílové funkce, $(m_k - m_{k-1})$ počet členů k -té vedlejší podmínky a $m = m_q$ je celkový počet členů, převedena na řešení duální úlohy naléztí maximum duální funkce $v(\delta)$ dané vztahem (27) při splnění duálních vedlejších podmínek (29), (30) a (31). Tato duální úloha má tvar

$$\max_{\delta_1, \dots, \delta_m} v, \quad v = \sigma \cdot \left(\prod_{i=1}^m \left(\frac{c_i}{\delta_i} \right)^{\sigma_i \delta_i} \cdot \prod_{k=1}^q \lambda_k^{h_k} \right)^\sigma, \quad (27)$$

¹³V tomto vztahu $\delta' = (\delta'_1, \delta'_2, \dots, \delta'_m)$ značí maximalizační bod duální úlohy.

¹⁴Tato podmínka vyplývá z odvození vztahu mezi primární a duální úlohou geometrického programování. V případě proměnných X_μ nabývajících obou znamének je možné použít substituci

$$X_\mu = X_\mu^+ - X_\mu^-, \quad \text{kde } X_\mu^+ > 0, \quad X_\mu^- > 0.$$

kde

$$\lambda_k = z_k \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} \sigma_i \delta_i, \quad h_k = \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} \sigma_i \delta_i, \quad (k = 1, 2, \dots, q),$$

a

$$\sigma_i = \operatorname{sgn} c_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (28)$$

při splnění lineárních vedlejších podmínek

$$\sum_{i=1}^m \sigma_i a_{i\mu} \delta_i = 0, \quad (\mu = 1, 2, \dots, M), \quad (29)$$

$$\sum_{i=1}^{m_0} \sigma_i \delta_i = \sigma \quad (30)$$

a

$$\delta_i \geq 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (31)$$

Řešení této duální úlohy se začíná rozřešením vedlejších podmínek (29) a (30), kdy za konstantu σ se volí číslo $+1$ či -1 tak, aby byla splněna podmínka (31). Tímto dostáváme vyjádření duálních proměnných ve tvaru¹⁵

$$\delta_i = d_i + \sum_{j=1}^{m-M-1} d_{ij} r_j, \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (32)$$

kde r_j , $j = 1, 2, \dots, m - M - 1$, jsou tzv. *bázové proměnné*, které mají vyhovovat podmínce kladnosti duálních proměnných

$$d_i + \sum_{j=1}^{m-M-1} d_{ij} r_j \geq 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (33)$$

Duální funkce, jako funkce základních proměnných, má nyní tvar

$$v(\mathbf{r}) = \sigma \cdot \left(\prod_{i=1}^m \left(\frac{c_i}{\delta_i} \right)^{\sigma_i \delta_i} \cdot \prod_{k=1}^q \lambda_k^{h_k} \right)^{\sigma}, \quad (34)$$

kde

$$\lambda_k = z_k \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} \sigma_i \delta_i, \quad h_k = \sum_{i=m_{k-1}+1}^{m_k} \sigma_i \delta_i, \quad (k = 1, 2, \dots, q),$$

$$\sigma_i = \operatorname{sgn} c_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (35)$$

a

$$\delta_i = d_i + \sum_{j=1}^{m-M-1} d_{ij} r_j, \quad (i = 1, 2, \dots, m).$$

Následuje řešení úlohy najít maximum této funkce $v(\mathbf{r})$ při splnění vedlejších podmínek

$$d_i + \sum_{j=1}^{m-M-1} d_{ij} r_j \geq 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m). \quad (36)$$

¹⁵K získání tohoto řešení je vhodné použít tzv. singulárního rozkladu matice soustavy.

Duální cílová funkce však v tomto případě není obecně konkávní funkcí a ne vždy zde získáme konkávní funkci prostým zlogaritmováním funkce $v(\mathbf{r})$. Platí však poznámka o možnosti úpravy počtu primárních proměnných a za jistých okolností také počtu členů v primární funkci a primárních vedlejších podmínkách, a tím redukovat duální úlohu na řešení soustavy lineárních rovnic.

Na závěr je nutné určit hodnoty primárních proměnných X'_μ , v nichž primární funkce dosahuje svého vázaného minima. Obdobně jako v diskutovaném případě funkce s kladnými koeficienty c_i lze tyto proměnné

určit ze vztahů

$$c_i \prod_{j=1}^M X_j^{a_{ij}} = \sigma_i \delta'_i \sigma v(\delta'), \quad (i = 1, 2, \dots, m_0), \quad (37)$$

a

$$c_i \prod_{j=1}^M X_j^{a_{ij}} = \sigma_i \frac{\delta'_i}{\lambda_k(\delta')}, \quad (i = m_{k-1} + 1, m_{k-1} + 2, \dots, m_k), \quad (k = 1, 2, \dots, q), \quad (38)$$

kde δ' je vektor duálních proměnných δ'_i , v nichž duální funkce v dosahuje svého maxima.

Poslední soustavu nelineárních rovnic lze opět zlogaritmováním převést na soustavu lineárních rovnic.¹⁶

4 Závěr

Vyhodnocování naměřených dat provedených experimentů se sebou přináší celou řadu problémů. Jedním takovým vážným problémem je například stanovení parametrů materiálových modelů z experimentálně získaných dat. Zde ve své pravé podstatě jde o problém najít takové hodnoty parametrů modelu, aby součet druhých mocnin rozdílů naměřených hodnot a hodnot odpovídajících hledanému modelu byl minimální. Tato chvalně známá metoda zvaná jako metoda nejmenších čtverců spadá mezi úlohy o nalezení minima dané funkce. Matematických metod zabývajících se problémem nalezení minima dané funkce je celá řada, ne všechny jsou však zcela vhodné k řešení konkrétních úkolů. V případě řešení naší úlohy je v drtivé většině případů hledán extrém funkce mající tvar součtu součinů mocnin hledaných parametrů.

Řešením úlohy takového tvaru se zabývá metoda zvaná *Geometrické programování*. Termín programování se z historických důvodů používá pro označení matematické formulace parametrických optimalizačních úloh a pro metody jejich řešení. Geometrické programování je jednou takovou formulací a metodou. V předložené práci se rozebírá filozofie využití geometrické nerovnosti k řešení jistého (v praxi experimentátora často se vyskytujícího) typu extrémální úlohy a podává se praktický návod k postupu jejího řešení.

5 Poděkování

Autor si dovoluje na tomto místě vyjádřit své poděkování **GAČR 106/00/1477** za podporu jíž se mu dostalo.

¹⁶Vzhledem k $\sigma_i = \text{sgn } c_i$, $(i = 1, 2, \dots, m)$.