Linjär algebra och numerisk analys, 2020

Laboration nummer 2: Optimering med tillämpning inom försöksplanering

Problemet gäller att placera n punkter på ytan av en sfär i R^m så långt ifrån varandra som möjligt. En tillämpning för detta problemet är inom försöksplanering där dessa punkter kan användas för att skapa en designmatris med en lämplig egenskap, nämligen att den har ortogonala kolonner.

Uppgifter.

- a. Formulera problemet som ett optimeringsproblem med bivillkor. Detta kan göras på flera sätt. En möjlighet är att som objektfunktion ta summan av alla avstånd mellan punkterna och formulera bivillkoret att ligga på sfären som ett likhetsbivillkor.
- b. Lös problemet genom ett MATLAB-program som anropar funktionen fmincon. Det kan krävas många funktionsberäkningar och iterationer i metoden så öka på dessa antal med optimset. För att få rätt lösningsmetod ska Du dessutom välja 'Algorithm', 'Interiorpoint' i optimset.
- **c.** Testa speciellt fallet n = 6, m = 3 och rita ut punkterna, se figur 1.
- **d.** Låt X vara den matris som har de erhållna punkternas koordinater som rader. X blir en bra designmatris vid försöksplanering därför att den har (nästan) ortogonala kolonner och de ingående parametrarna i aktuellt försök kan då uppskattas oberoende av varandra. Matrisen $A = X^T X$ blir alltså i hög grad diagonaldominant. En approxmativ lösning av normalekvationerna blir då enkel att beräkna. Ett mått på graden av relativ diagonaldominans är

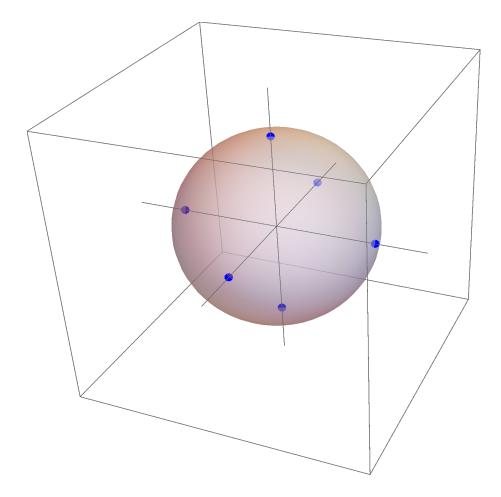
$$\alpha = \min_{i} (|a_{ii}| - \sum_{j \neq i} |a_{ij}|)/|a_{ii}|.$$

Här innebär alltså $\alpha > 0$ diagonaldominans och ju större α ju högre grad av diagonaldominans, där $\alpha = 1$ är största möjliga värde. Bestäm α för fallet i c)-uppgiften.

e. Vi vill nu närmare förklara att maximal spridning på en sfär ger denna egenskap hos matrisen. Betrakta c)-fallet igen. Transformera punkterna så att t.ex. första punkten hamnar på x_1 -axeln dvs. med koordinaterna (1,0,0) med t.ex. en Householdertransformation och rotera sedan punkterna med en lämplig vinkel kring x_1 -axeln, så hamnar alla de fem andra punkterna också på koordinataxlarna. Kontrollera att alla punkter hamnar på axlarna, se figur 1. Hur inser man av detta att A får den önskade egenskapen? En Householdertransformation ges av en matris $H = I - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T$, med en väl vald vektor \mathbf{v} med $\|\mathbf{v}\|_2 = 1$. Se avsnitt 5.10.

Vid redovisningen ska du kunna:

- 1. Presentera ett MATLAB-program för lösning av optimeringsproblemet.
- 2. Presentera lösningen för fallet i c)-uppgiften med utritning av punkterna.
- 3. Redovisa värdet av parametern α enligt d)-uppgiften för problemet i c)-uppgiften.
- 4. Redovisa transformationerna i e)-uppgiften.
- 5. Förklara att matrisen A får den önskade egenskapen enligt d)-uppgiften.



Figur 1: Sex punkter på enhetssfären i 3D, transformerade till koordinataxlarna