OTIMIZAÇÃO NATURAL

LISTA DE EXERCÍCIOS 2 COMPILADA

1. Considere um processo de Markov $X(t)$ que tem três estados possíveis: 0, 1, e 2. A evolução temporal deste processo é dada pela matriz de transição a seguir:

$$M = \begin{bmatrix} 0.50 & 0.25 & 0.25 \\ 0.25 & 0.50 & 0.25 \\ 0.25 & 0.25 & 0.50 \end{bmatrix}$$

   a) Considerando que a distribuição de probabilidade de $X(0)$ é dada pelo vetor $\mathbf{p}_0 = [0.3\ 0.4\ 0.3]^T$, calcule a distribuição de probabilidade de $X(3)$ (ou seja, do processo de Markov no instante $t = 3$).

   b) Iniciando em $X(0) = 1$, e usando um gerador de números aleatórios (são necessários apenas três números aleatórios equiprováveis), calcule manualmente uma amostra do processo $X(t)$ até $t = 3$.

   c) Usando um computador, execute 100 repetições do item (b). Em cada uma das 100 repetições, comece a simulação com um valor diferente de $X(0)$, assumindo que os eventos $X(0) = 0$, $X(0) = 1$, e $X(0) = 2$ são equiprováveis. Armazene as 100 cadeias obtidas em uma matriz $\mathbf{X}$, com 4 colunas ($t = 0$ até $t = 3$) e 100 linhas.

   d) Fazendo histogramas de cada uma das 4 colunas, calcule as distribuições de probabilidade do processo $X(t)$ em cada um dos 4 instantes: $t = 0, 1, 2, 3$. Comente os resultados obtidos.

2. Considere um sistema em que só há 5 estados possíveis: $x = 1$, $x = 2$, $x = 3$, $x = 4$, $x = 5$. Os custos $J(x)$ de cada um dos estados são indicados na tabela abaixo:

x	$J(x)$
1	0.5
2	0.2
3	0.3
4	0.1
5	0.4

   a) Considere um processo de Markov gerado pela aplicação do algoritmo de Metropolis aos dados da tabela acima, com temperatura fixa $T = 0.1$. Calcule a matriz de transição M que define o processo $X(t)$.
   Obs.: note que o estado $X(t)$ é unidimensional, e portanto a matriz M é 5×5.

   b) Iniciando em $X(0) = 1$, calcule manualmente 4 amostras do processo $X(t)$.

   c) Qual é o vetor invariante da matriz M do item (a) ?
   Obs.: para facilitar os cálculos, pode-se usar o computador neste item.

   d) Calcule os fatores de Boltzmann (ou seja, $e^{-(J(x))/T}$) associados aos dados da tabela acima, e compare-os com o resultado do item (c). Use $T = 0.1$.

   e) *Simulated Annealing:* Usando um computador, execute 1000 iterações do algoritmo de Metropolis em cada uma das 10 temperaturas a seguir. Na passagem de uma temperatura para a outra, use o estado atual. Comente as distribuições de probabilidade obtidas no final de cada temperatura.

T_0	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6	T_7	T_8	T_9
0.1000	0.0631	0.0500	0.0431	0.0387	0.0356	0.0333	0.0315	0.0301	0.0289

3. Proponha uma função $J(\mathbf{x})$, sendo $\mathbf{x}$ um vetor com 10 dimensões, cujo ponto mínimo você conheça. Evite propor funções que tenham um só ponto mínimo. Encontre o ponto mínimo global utilizando S.A.
   Obs.: neste exercício, entregue o código utilizado e alguns comentários sobre o resultado obtido.

2. (*Simulated Annealing*) Considere um problema de otimização representado pela função custo a seguir:

x	$J(x)$
1	0.3
2	0.1
3	0.1
4	0.2

   a) Calcule os fatores de Boltzmann $e^{-J(\mathbf{x})/T}$, para $T = 1.0$ e para $T = 0.1$.

   b) Considerando $T = 0.1$, execute manualmente cinco iterações do algoritmo de Metropolis. Use as sequências de números aleatórios apresentadas no item (c) da Questão 1.

   c) Calcule as matrizes de transição $\mathbf{M}$ para $T = 1.0$ e para $T = 0.1$. Calcule os vetores invariantes destas matrizes e compare-os com os resultados do item (a).

2. (*Simulated Annealing*) Considere a função custo $J(x_1, x_2)$ definida pela tabela a seguir:

x_1	x_2	$J(x)$
0	0	0.2
0	1	0.3
1	0	0.3
1	1	0.1

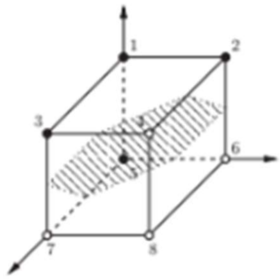
a) A aplicação do Algoritmo de Metropolis a um vetor inicial $\mathbf{x}(0)$ qualquer, alterando uma componente (x_1 ou x_2) de cada vez, define um processo de Markov com duas matrizes de transição: $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$. Calcule estas matrizes de transição, considerando $T = 0.5$. Note que o número de estados possíveis é 4.

b) Calcule, para temperatura $T = 0.5$, a distribuição de Boltzmann/Gibbs do vetor aleatório X. Verifique que esta distribuição de probabilidades define um vetor invariante para ambas as matrizes de transição calculadas no item (a).

e) Quando um número suficientemente grande de iterações do algoritmo do item (c) tiver sido calculado à temperatura $T = 0.1$, com que probabilidade teremos a ocorrência do evento $J = 0.3$?

Opcional/Desafio:

3. (*Simulated Annealing*) Considere uma situação em que gostaríamos de dividir os oito vértices de um cubo unitário em dois agrupamentos, de modo que o erro quadrático total entre os centros dos agrupamentos e os membros dos agrupamentos seja minimizado. Considere que os vértices são numerados da seguinte forma:



e também que os agrupamentos são definidos através de um vetor $\mathbf{x}$ binário de comprimento oito. A i-ésima componente de $\mathbf{x}$ é igual a zero se o vértice i pertencer ao agrupamento zero. E é igual a um no caso contrário. Por exemplo, o estado $\mathbf{x} = 11101000$ corresponde ao caso da figura, em que os centróides são $(3/4, 3/4, 1/4)$ (agrupamento 0) e $(1/4, 1/4, 3/4)$ (agrupamento 1) e o custo $J(\mathbf{x})$ é 4.50.

a) Baseando-se em um esquema de perturbação que consiste em sortear uma posição do vetor $\mathbf{x}$ e invertê-la, escreva um algoritmo SA básico para a minimização do erro quadrático total. Defina quaisquer parâmetros que você julgar necessários.

b) Assumindo $T = 1.0$ e o mesmo esquema de perturbação do item (a), calcule a probabilidade de transição do estado 11101000 para o estado 11100000, e também a probabilidade de transição do estado 11100000 para o estado 11110000.

c) A contagem dos estados conforme os seus custos é dada pela tabela a seguir:

Custo	4.00	4.50	4.53	4.67	5.00	5.14	5.33	5.50	5.60	6.00
Número de Estados	6	8	48	24	24	16	24	24	64	18

Calcule qual é a probabilidade de $\mathbf{x} = 00001111$ ser gerado, quando o SA básico atinge $T = 0.1$.

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma execução do algoritmo de Metropolis à temperatura fixa $T = 1$, com estados $[X_1 X_2]$ (X_1 e X_2 são variáveis aleatórias binárias) e as duas matrizes de transição dadas a seguir. A matriz $\mathbf{M}_1$, à esquerda, modela as probabilidades de transição entre estados no caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre X_1. A matriz $\mathbf{M}_2$, à direita, é para o caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre X_2.

$$
\begin{array}{c|cccc}
\mathbf{M}_1 & 00 & 01 & 11 & 10 \\
\hline
00 & 2/3 & 0 & 0 & 1 \\
01 & 0 & 2/3 & 1 & 0 \\
11 & 0 & 1/3 & 0 & 0 \\
10 & 1/3 & 0 & 0 & 0
\end{array}
\qquad
\begin{array}{c|cccc}
\mathbf{M}_2 & 00 & 01 & 11 & 10 \\
\hline
00 & 2/3 & 1 & 0 & 0 \\
01 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\
11 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \\
10 & 0 & 0 & 1 & 2/3
\end{array}
$$

a) Considerando $J(00) = 1$, calcule os valores de $J(01)$, $J(11)$ e $J(10)$ de forma que $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$ tenham os valores dados acima.

b) Calcule uma matriz de transição $\mathbf{M}$ que modele transições de qualquer um dos quatro estados para qualquer um dos quatro estados.

c) Calcule o vetor invariante da matriz $\mathbf{M}$ do item (b). Verifique que ele é um vetor invariante também de $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$, apesar de estas matrizes terem diferentes autovetores correspondentes aos autovalores que têm valor igual a 1.

3. (*Simulated Annealing*) Considere uma função custo dada pela tabela a seguir:

x	1	2	3	4
$J(x)$	7	1	10	4

a) Descreva, usando pseudo-código, a implementação do algoritmo S.A. básico aplicado à minimização da função custo acima. Na sua descrição, leve em consideração os seguintes parâmetros: temperatura inicial T_0, temperatura mínima T_{min}, e o número de iterações N a serem executadas em temperatura fixa.

b) Calcule as matrizes de transição do processo de Markov que corresponde ao S.A. à temperatura $T = 10$ e à temperatura $T = 5$ (chamadas de $\mathbf{M}_{10}$ e $\mathbf{M}_5$) e os seus respectivos vetores invariantes.

c) (0.25 ponto extra) Observe o menor dos números em $\mathbf{M}_{10}$ e o menor dos números em $\mathbf{M}_5$. Qual é a relação entre estes números e T, J_{max}, J_{min} e o número de estados possíveis?

3. (*Simulated Annealing*) Considere uma função custo definida sobre cinco estados discretos, chamados de estados $1, 2, \dots 5$, com os seguintes valores: $J(1) = J(5) = 4$, $J(2) = 1$, $J(3) = 3$ e $J(4) = 2$.

b) Calcule uma matriz de transição entre estados à temperatura $T_1 = 1/\ln 2$ e uma matriz de transição entre estados à temperatura $T_2 = 1/\ln 3$.

c) Calcule os vetores invariantes das matrizes encontradas no item (b).

3. (*Simulated Annealing*) Considere a matriz de transição dada a seguir (calculada usando $T = T_0 = 0.1$):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} (1/2)(1-e^{-2}) & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ (1/2)e^{-2} & 0 & (1/2)e^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & (1/2)(1-e^{-1}) & (1/2)e^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & (1/2)(2-e^{-1}-e^{-2}) & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & (1/2)e^{-1} & 0 \end{bmatrix}$$

a) Considerando um grafo com cinco estados (estado 1 conectado aos estados 2 e 5; 2 conectado a 1 e 3; 3 conectado a 2 e 4; 4 conectado a 3 e 5; 5 conectado a 4 e 1) e considerando que o custo associado ao estado 1 é igual a 0.2, calcule os custos associados aos estados 2, 3, 4 e 5.

b) Calcule o vetor invariante da matriz $\mathbf{M}$.

c) Escreva a menor das probabilidades da matriz $\mathbf{M}$ em função dos valores máximo e mínimo de $J(x)$, da temperatura T e do número N das transições possíveis para cada estado. Recalcule esta probabilidade para $T = T_0/\log_2 4$.