Lista 1 - Otim. Natural

1. *Método de Monte Carlo*:

   a) Efetue as três primeiras iterações do cálculo de $\int_0^1 x^3 dx$, usando os três números aleatórios a seguir, que foram sorteados de uma distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$:

   $$0.9501,\ 0.2311,\ 0.6068,\ \ldots$$

   b) Efetue as três primeiras iterações do cálculo de $\int_0^1 x^2 e^{-x} dx$, usando os quatro números aleatórios a seguir, que foram sorteados de uma distribuição exponencial $f_X(x) = e^{-x}$ no intervalo $[0, +\infty]$:

   $$0.0512,\ 1.4647,\ 0.4995,\ 0.7216,\ \ldots$$

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma variável aleatória $X \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ e uma função custo $J(x) = (x-3)^2$. Considere $T = 1$.

   a) Calcule os fatores de Boltzmann $\exp(-J(x)/T)$, para $x = 1, 2, 3, 4, 5$.

   b) Proponha um algoritmo para gerar uma distribuição de Boltzmann/Gibbs para a variável aleatória X, conforme os custos $J(x)$.

3. Escrever um algoritmo para gerar números $x(n)$ com energia $J(x) = x^2$, de forma que as probabilidades dos números gerados sejam proporcionais aos fatores de Boltzmann $\exp(-J(x)/T)$, com temperatura $T = 0.1$. Começando de um valor $x(0)$ qualquer, aplique sempre perturbações ϵR ao valor $x(n)$ atual. Neste caso, R é uma variável aleatória uniforme. Considere $\epsilon = 0.1$:

   a) Execute o algoritmo proposto no computador, calculando $x(n)$ até $n = 100.000$.

4. (*Algoritmo de Metropolis*) Nos itens a seguir, considere o uso do algoritmo de Metropolis e de uma variável aleatória binária R (com dois valores equiprováveis, ou seja, $p_R(0) = p_R(1) = 0.5$) para a geração de uma variável aleatória X com função densidade de probabilidade arbitrária, dada por $f_X(x)$:

   a) Qual deve ser a função custo $J(x)$, para que a densidade de probabilidade de x seja $f_X(x)$?

   b) Utilizando um pseudo-código, descreva o algoritmo de Metropolis aplicado à geração da variável aleatória em questão. Defina e use os parâmetros (tamanho da perturbação, número de iterações, etc.) que você julgar necessários.

5. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere a seguinte expressão:

   $$\int_{|x_2|<1}\int_{|x_1|<1} (x_1^2 + x_2^2) e^{-(x_1^2+x_2^2)} dx_1 dx_2$$

   a) Escreva, utilizando um pseudo-código, um programa para a geração de vetores aleatórios (x_1, x_2) que tenham uma densidade conveniente para uma avaliação eficiente desta expressão.

   b) Explique como os vetores gerados pelo programa do item (a) podem ser utilizados para a avaliação da integral.

6. (*Algoritmo de Metropolis*) Nesta questão, consideramos o problema da descrição de todas as configurações possíveis de um sistema com 5 partículas em duas dimensões. A posição de cada partícula é definida por um vetor $\mathbf{x}_i$, $i = 1, 2, \cdots, 5$ e o estado do sistema é definido por um vetor $\mathbf{x}$ contendo todas as 10 coordenadas. Duas configurações particulares são mostradas na figura do item (b). A função custo na qual estamos interessados é uma combinação linear entre a soma das normas dos vetores $\mathbf{x}_i$ e a soma das "repulsões eletrostáticas" entre as partículas, imaginando o caso em que todas são positivas:

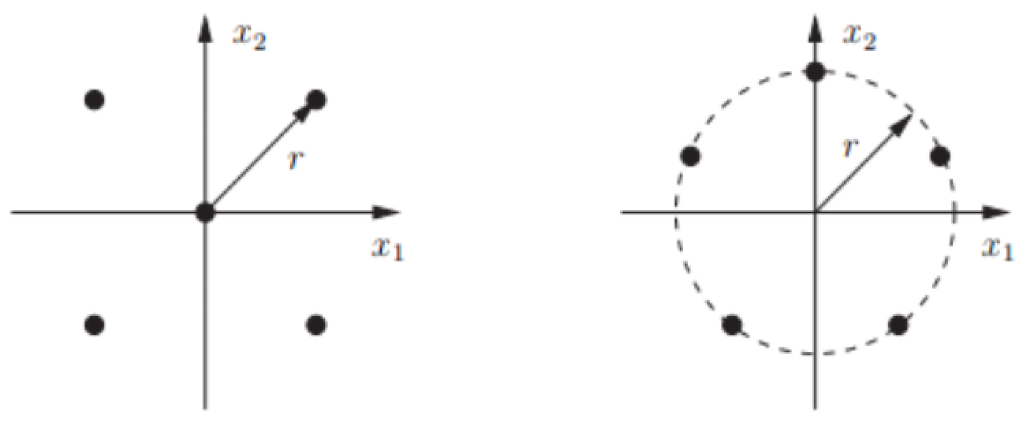
   $$J(\mathbf{x}) = \sum_i ||\mathbf{x}_i||^2 + \frac{1}{\sum_{i \neq j} ||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||^2} \qquad (1)$$

   a) Escreva, utilizando pseudo-código, uma implementação do algoritmo de Metropolis que, para temperatura T e a partir de uma configuração inicial qualquer, permita a geração de estados seguindo uma distribuição de Boltzmann em função dos seus custos J.

   b) Para as duas soluções locais a seguir, uma expressão simplificada para J pode ser calculada em função da variável escalar positiva r:

   $$J_1(r) = 4r^2 + \frac{6.5}{r^2} \quad \text{e} \quad J_2(r) = 5r^2 + \frac{5}{r^2} \qquad (2)$$

   Assumindo $T = 0.1$, calcule a proporção entre as probabilidades de um estado que tem a configuração da direita com $r = 1.0000$ e outro estado que tem a configuração da esquerda com $r = 1.1291$.

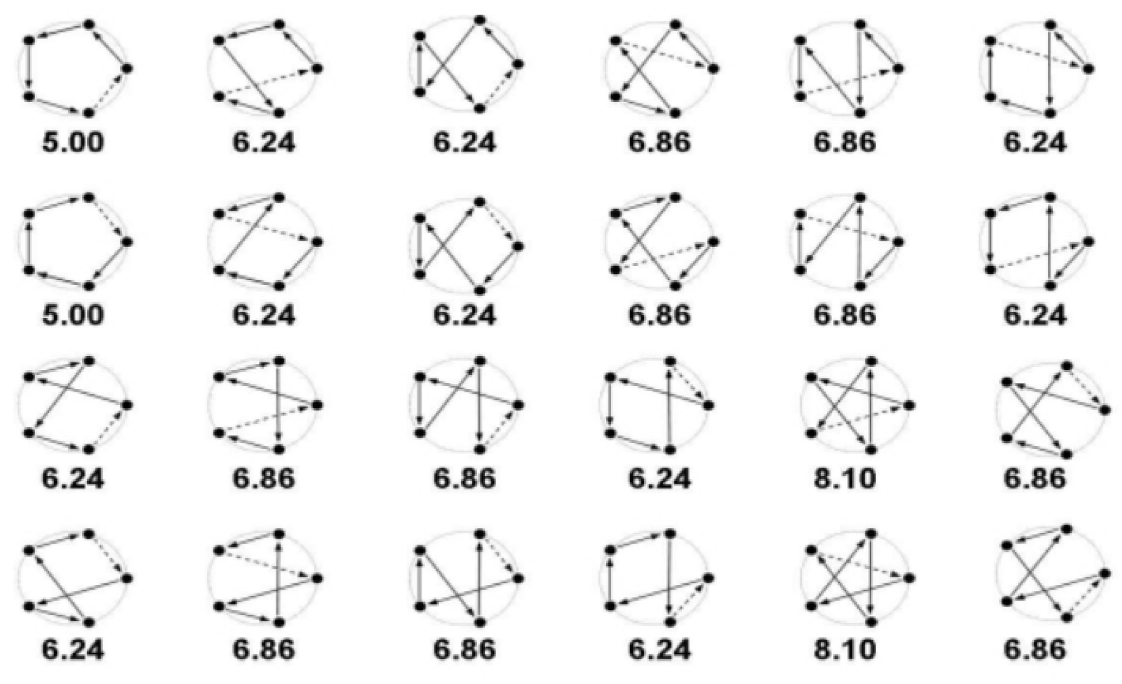
   

   c) Considere a definição da variável aleatória "distância média à origem": $L(\mathbf{x}) = (1/5)\sum_i ||\mathbf{x}_i||$. Explique como o algoritmo do item (a) é modificado, de forma que possamos calcular o valor médio de L a uma temperatura T arbitrária.

7. Escrever um programa de S.A. (pode ser pseudo-código) para minimizar a função escalar $J(x) = -x + 100(x-0.2)^2(x-0.8)^2$. Começando de $x(0) = 0$ e utilizando geradores de números aleatórios (um uniforme e outro Gaussiano), ~~calcule manualmente os 10 primeiros valores de $x(n)$ gerados pelo S.A.~~

8. Proponha uma função de até 4 variáveis cujo ponto mínimo você conheça, e encontre este ponto mínimo utilizando S.A. (neste exercício, basta entregar o código escrito).

9. (*Simulated Annealing*) A figura a seguir ilustra todas as soluções possíveis do problema do caixeiro viajante com cinco cidades, no caso em que as cinco cidades estão dispostas uniformemente sobre um círculo, e considerando que a viagem sempre começa pela cidade mais à direita. A seta pontilhada indica o caminho de retorno da última cidade visitada para a cidade inicial. Considera-se que o custo da viagem sobre um lado do pentágono formado pelas cidades é igual a 1.0. O custo total de cada solução é representado logo abaixo da mesma.

   a) Utilizando um pseudo-código, descreva um algoritmo de *Simulated Annealing* para resolver este problema. Defina e use quaisquer parâmetros (por exemplo: temperatura inicial, método de resfriamento, número de iterações a temperatura fixa, etc.) que você julgar necessários.

   b) Com temperatura fixa $T = 1$, calcule a probabilidade com que cada uma das soluções acima será gerada, após a convergência do algoritmo.