

Todos os itens da prova têm o mesmo valor: 1.0 ponto cada (total de 10 pontos). Tempo de prova: 2 horas.

1. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere a avaliação da expressão a seguir pelo método de Monte Carlo:

$$\int_0^{\infty} x e^{-2x} dx$$

- a) Explique como um gerador de números aleatórios com densidade uniforme entre zero e um pode ser utilizado para a avaliação desta expressão.
- b) Como esta mesma expressão pode ser avaliada, se pudermos utilizar um gerador de números aleatórios com densidade exponencial no intervalo $[0, +\infty]$, com variância igual a 1.0?
- c) Se, ao usarmos o gerador de números aleatórios apresentado no item (b), fizermos a média da expressão $f(x) = x e^{-2x}$ avaliada para cada número gerado, que resultado encontraremos?

2. (*Simulated Annealing*) Considere a minimização, no intervalo da função custo a seguir:

$$J(x) = 40(x - 0.2)^2(x - 0.8)^2$$

- a) Esboce, utilizando pseudo-código, um algoritmo para a solução deste problema através de S.A.
- b) Se o algoritmo de Metropolis for executado com base nesta função custo e com uma temperatura T fixa, os estados serão gerados segundo qual densidade de probabilidade $f_X(x)$? E à medida em que T tende a zero, como ficará esta densidade de probabilidade?
- c) Considere, neste item, a discretização do problema representado pela função custo dada, de forma que ela seja avaliada somente nos pontos 0.00, 0.25, 0.50, 0.75 e 1.00. Calcule a matriz de transição do processo de Markov associada em execução do algoritmo de Metropolis com temperatura $T = 1$.
- d) Calcule o vetor de probabilidades de Boltzmann associado ao problema do item (c) e mostre que ele é um vetor invariante da matriz de transição calculada no mesmo item.

3. (*Deterministic Annealing*) Considere um problema de agrupamento 1-D (sobre a reta real) em que os dados são $x_0 = 0$, $x_1 = 1$ e $x_2 = 2$. Inicialmente, os centróides são posicionados em $y_1(0) = 0.5$ e $y_2(0) = 1.5$.

- a) Considerando a execução do D.A. básico, com temperatura $T = 1$, calcule as probabilidades $p(y|x)$ de associação de cada ponto x_j a cada centróide y_i .
- b) Usando a matriz $p(y|x)$ do item (a), calcule o custo $J = \sum_x p(x) \sum_y p(y|x)(x-y)^2 + \sum_x \sum_y p(x,y) \log p(x,y)$.
- c) Usando a matriz $p(y|x)$ do item (a), calcule valores atualizados para os centróides y_1 e y_2 .
- d) (0.5 ponto extra) Se a temperatura T for reduzida para 0.5, em quantos bits é reduzida a entropia associada à distribuição conjunta $p(x,y)$?