UFRJ / COPPE / PEE – Primeiro Período de 2010
CPE-723 – Otimização Natural (Parte II - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 05 de maio de 2010
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 uma variável aleatória $X \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ e uma função custo definida por $J(x) = -x^2 + 8x - 7$. A temperatura é $T = 1$.

   a) Calcule os fatores de Boltzmann $\exp(-J(x)/T)$, para $x = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.

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

   c) Execute manualmente as três primeiras iterações do algoritmo proposto no item (b).

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere um vetor aleatório X com duas dimensões: $X = [X_1 \ ; \ X_2]$, sendo que $X_1 \in \{0, 1\}$ e $X_2 \in \{0, 1\}$. A função custo é $J(\mathbf{x}) = 2 - x_1 - x_2$.

   a) A aplicação do algoritmo de Metropolis ao vetor $\mathbf{x}$, 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. Considere $T = 1.0$. Note que o número de estados possíveis é 4.

   b) Calcule, para temperatura $T = 1.0$, a distribuição de Boltzmann/Gibbs do vetor aleatório X. Mostre que este vetor de probabilidades é um vetor invariante para ambas as matrizes de transição do item (a).

3. (*Simulated Annealing*)

   a) Explique, através de um pseudo-código, o uso do algoritmo S.A. básico para a solução do problema do caixeiro viajante com quatro cidades, localizadas nas coordenadas $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ e $(1, 1)$ do plano, considerando que a viagem sempre comece e termine pela cidade localizada em $(0, 0)$. Defina e use quaisquer parâmetros (por exemplo, temperatura inicial, método de resfriamento, número de iterações a temperatura fixa etc.) que possam ser necessários.

   b) Calcule os custos de cada uma das soluções possíveis para este problema.

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

4. (*Deterministic Annealing*) São dados quatro vetores: $\mathbf{x}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{x}_2 = (0, 1)$, $\mathbf{x}_3 = (1, 0)$, $\mathbf{x}_4 = (1, 1)$. Eles devem ser divididos em três conjuntos, conforme os centros de gravidade $\mathbf{y}_1$, $\mathbf{y}_2$, e $\mathbf{y}_3$. Considere a configuração inicial $\mathbf{y}_1(0) = \mathbf{x}_1$, $\mathbf{y}_2(0) = \mathbf{x}_2$, $\mathbf{y}_3(0) = \mathbf{x}_3$. Considere também $T = 0.1$.

   a) Calcule a matriz de probabilidades $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ que minimiza $J = D - TH$, sendo D e H dados por:

   $$D = \sum_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}) \sum_{\mathbf{y}} p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) ||\mathbf{x} - \mathbf{y}||^2$$

   $$H = -\sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{y}} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \log p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

   b) Calcule as novas posições dos centróides, ou seja $\mathbf{y}_1(1)$, $\mathbf{y}_2(1)$ e $\mathbf{y}_3(1)$ a partir da matriz $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ que foi calculada no item (b).

Boa prova !