UFRJ / Escola Politécnica / DEL – Primeiro Período de 2015
CPE-723 – Otimização Natural (Parte I - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 02 de Abril de 2015

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 função energia dada por $J(x) = -\ln \frac{1}{x}$, no intervalo $x \in [2, 5]$.

   a) Utilizando um pseudo-código, implemente o algoritmo de Metropolis para gerar uma sequência de números com densidade de probabilidade proporcional a $\frac{1}{x}$ no intervalo dado.

   b) Se, ao longo das N últimas iterações do algoritmo, contarmos quantas vezes $x(n) \in [3, 4]$, obteremos uma estimativa de qual valor?

   c) Indique como o algoritmo pode ser usado para avaliar a expressão a seguir:

   $$\int_2^5 \frac{1}{x} e^{-x} dx$$

2. (*Simulated Annealing*) Considere um problema de agrupamento de dados (*clustering*), em que quatro vetores de dados estão localizados nas posições $(0, 0)$, $(0, 6)$, $(6, 0)$ e $(6, 6)$ do plano cartesiano. O objetivo é encontrar agrupamentos que minimizam o erro médio quadrático entre os quatro vetores de dados e dois centróides. As soluções possíveis são descritas por vetores discretos que descrevem as partições correspondentes. Por exemplo, o estado [1 1 2 2] descreve a partição em que $(0, 0)$ e $(0, 6)$ pertencem ao grupo 1 e $(6, 0)$ e $(6, 6)$ pertencem ao grupo 2. O erro médio quadrático correspondente é $D([1\ 1\ 2\ 2]) = 9$, um valor globalmente mínimo. Ordenando os estados de [1 1 1 1] até [2 2 2 2] (considerando as posições mais à direita como sendo menos significativas), os valores de D são:

   18, 12, 12, 9, 12, 18, 9, 12, 12, 9, 8, 12, 9, 12, 12 e 18

   a) Calcule os fatores de Boltzmann normalizados $(1/Z) \exp(-D(x)/T)$, para os 16 estados possíveis, à temperatura $T = 6$.

   b) Comece de dois vetores de probabilidade iniciais diferentes (de sua escolha) e, para cada um deles, calcule o respectivo vetor de probabilidades da iteração seguinte. Diversas matrizes de transição associadas à aplicação do algoritmo de Metropolis com $T = 6$ são dadas na página seguinte.

   c) Como fica $M_{4\text{A}}$ à temperatura $T = 3$?

   d) Observe o menor dos números em $16M_{\text{A}}$. Ele vale 0.2231/16. Expresse este número em função de T, D_{max}, D_{min}, e do número de estados possíveis.

3. (*Deterministic Annealing*) Considere um conjunto de dados $\mathbf{X}$ contendo quatro vetores equiprováveis: $\mathbf{x}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{x}_2 = (0, 6)$, $\mathbf{x}_3 = (6, 0)$ e $\mathbf{x}_4 = (6, 6)$. Considere também uma iteração do algoritmo D.A. em que a partição é especificada pela matriz de probabilidades condicionais $p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_n)$ dada a seguir:

	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$
$\mathbf{y}_1$	0.6	0.6	0.4	0.4
$\mathbf{y}_2$	0.4	0.4	0.6	0.6

   a) Calcule vetores atualizados para os centróides $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$.

   b) Calcule $D = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{4} \sum_{k=1}^{2} d(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_k) p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_n)$.

   c) Recalcule as probabilidades condicionais $p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_n)$ a partir dos vetores $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$ obtidos no item (a), considerando $T = 5$.

Boa prova!