**UFRJ / COPPE / Programa de Engenharia Elétrica – Primeiro Período de 2017**
**CPE-723 – Otimização Natural (Parte I - *Simulated Annealing*)**
Prova Parcial – 06 de abril de 2017

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 $X$ com função densidade de probabilidade $f_X(x) = 1/(x^2+1)$.

   a) Apresente uma implementação do algoritmo de Metropolis (pseudo-código) capaz de gerar amostras de $X$ e execute, manualmente, cinco iterações deste algoritmo. Para a execução manual, use os dez números a seguir, que foram sorteados de uma densidade uniforme entre 0 e 1: 0.9501, 0.2311, 0.6068, 0.4860, 0.8913, 0.7621, 0.4565, 0.0185, 0.8214, 0.4447.

   b) Explique como o algoritmo pode ser usado para avaliar a expressão $\int_a^b x/(x^2+1)dx$.

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma função custo definida sobre quatro estados discretos, chamados de estados $a$, $b$, $c$ e $d$, com os seguintes valores: $J(a) = 0$, $J(b) = 2$, $J(c) = 1$ e $J(d) = 2$. Os estados são vizinhos conforme a ordem alfabética, sendo que o estado $a$ também é vizinho do estado $d$. Considere temperatura $T = 1/\ln 2$.

   a) Calcule, na temperatura dada, o vetor com fatores de Boltzmann/Gibbs normalizados $(1/Z)\exp(-J(x)/T)$.

   b) Calcule as matrizes de transição entre estados dos três processos de Markov definidos a seguir: i) processo no qual os destinos de cada estado podem ser três: o próprio estado, e os seus dois vizinhos em ordem alfabética; ii) processo no qual os destinos de cada estado podem ser somente dois, sendo um dos destinos o próprio estado e o outro destino o estado seguinte em ordem alfabética (isto é, o estado anterior não pode ser sorteado como candidato a destino). Neste caso (ii), considere que o vizinho seguinte ao estado $d$ continua sendo o estado $a$; e iii) processo de Markov semelhante ao processo (i) do item (b), só que sem relação de vizinhança entre os estados $a$ e $d$. Em outras palavras, no caso (iii) assuma que os destinos possíveis para o estado $a$ são somente o próprio estado $a$ e o estado $b$, e que os destinos possíveis para o estado $d$ são somente o próprio estado $d$ e o estado $c$.

   c) Para cada uma das três matrizes de transição calculadas no item (b), verifique se o vetor calculado no item (a) é um autovetor associado a um autovalor igual a 1.

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

   a) Apresente, usando pseudo-código, uma implementação do algoritmo Simulated Annealing básico, usada para encontrar o estado para o qual o valor da função custo é mínimo. Defina e utilize todos os parâmetros que você considerar necessários.

   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).

4. (*Deterministic Annealing*) Considere um conjunto de dados $\mathbf{X}$ composto por quatro vetores equiprováveis e com coordenadas $(0,0)$, $(0,2)$, $(2,2)$ e $(2,0)$. Considere uma partição suave do $\mathbb{R}^2$ realizada através de dois centróides $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$. As distâncias quadráticas entre cada vetor $\mathbf{x}$ e cada vetor $\mathbf{y}$ são dadas a seguir:

| | $\mathbf{x}_1$ | $\mathbf{x}_2$ | $\mathbf{x}_3$ | $\mathbf{x}_4$ |
|---|---|---|---|---|
| $\mathbf{y}_1$ | 1 | 5 | 5 | 1 |
| $\mathbf{y}_2$ | 5 | 1 | 1 | 5 |

   a) Considerando $T = 5$, calcule a matriz de probabilidades condicionais $p_{\mathbf{Y}|\mathbf{X}}$ que minimiza $J = D - TH = \sum_x p_{\mathbf{X}}(x) \sum_y p_{\mathbf{Y}|\mathbf{X}}(y|x) + T \sum_x p_{\mathbf{X}}(x) \sum_y p_{\mathbf{Y}|\mathbf{X}}(y|x) \log p_{\mathbf{Y}|\mathbf{X}}(y|x)$.

   b) Também considerando $T = 5$, calcule vetores $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$ atualizados. Compare o erro médio quadrático $D_2$, associado aos vetores $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$ atualizados, com o erro médio quadrático $D_1$, associado aos vetores $\mathbf{y}_1$ e $\mathbf{y}_2$ anteriores à atualização.

---

Boa prova!