UFRJ / Escola Politécnica / DEL – Primeiro Período de 2014
CPE-723 – Otimização Natural (Parte I - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 10 de Abril de 2014

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

1. *Método de Monte Carlo*:

   a) Efetue as três primeiras iterações do cálculo de $\int_0^1 x^2 dx$, usando os três números aleatórios a seguir, que foram sorteados de uma distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$:

   $$0.8147,\ 0.9058,\ 0.1270,\ \ldots$$

   b) Efetue as três primeiras iterações do cálculo de $\int_0^1 x^2 e^{-x} dx$, usando os três números aleatórios a seguir, que foram sorteados de uma distribuição exponencial $f_X(x) = e^{-x}$.

   $$0.1942,\ 0.3641,\ 1.1485,\ 0.0511,\ \ldots$$

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere três variáveis aleatórias binárias (X_1, X_2 e X_3) e uma função custo $J(x) = -2x_1x_2 + 3x_1x_2 + 4x_1x_3$. Considere $T = 1$.

   a) Calcule os fatores de Boltzmann $\exp(-J(x)/T)$, para os oito estados possíveis.
   b) Proponha um algoritmo para gerar uma distribuição de Boltzmann/Gibbs para a variável aleatória X, segundo os custos $J(x)$.
   c) Execute as três primeiras iterações do algoritmo que você propôs no item (b).

3. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma variável aleatória $X \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$ e uma função custo $J(x) = 2x_1 + 4x_2 + 8x_3 - x_1x_2 + x_1x_3 + 2x_2x_3$, onde x_1, x_2 e x_3 são os três bits obtidos quando o valor x é representado em notação binária comum (x_3 corresponde ao bit menos significativo).

   a) A aplicação do algoritmo de Metropolis ao valor x, considerando somente perturbações de valor ± 1, define um processo de Markov com matriz de transição $\mathbf{M}$. Calcule esta matriz de transição. Considere que $T = 10$, que a perturbação $+1$ aplicada ao estado 7 leva ao estado 0, e que a perturbação -1 aplicada ao estado 0 leva ao estado 7.
   b) Calcule, para temperatura $T = 10$, a distribuição de Boltzmann/Gibbs prevista para o estado x. Mostre que este vetor de probabilidades é um vetor invariante de $\mathbf{M}$.

4. (*Simulated Annealing*) Descreva de forma breve o algoritmo S.A. básico aplicado à minimização da função custo a seguir:

   $$J(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{N} b_i x_i - \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} w_{ij} x_i x_j,$$

   onde $\mathbf{x}$ é um vetor binário com N componentes. Na sua descrição, leve em consideração os seguintes parâmetros: temperatura inicial T_0, temperatura mínima T_{min}, e o número K de iterações a serem executadas em temperatura fixa. Para as perturbações de $\mathbf{x}$, escolha qualquer esquema de sua preferência.

5. (*Deterministic Annealing*) Seja $\mathbf{X}$ um conjunto de dados contendo quatro vetores equiprováveis: $\mathbf{x}_1 = [1; 1]$, $\mathbf{x}_2 = [1; -1]$, $\mathbf{x}_3 = [-1; -1]$, e $\mathbf{x}_4 = [-1; 1]$. Considere um conjunto de centróides, $\mathbf{Y}$, com quatro elementos. Estes quatro centróides assumem valores iniciais $\mathbf{y}_1 = [0; 1]$, $\mathbf{y}_2 = [1; 0]$, $\mathbf{y}_3 = [0; -1]$ e $\mathbf{y}_4 = [-1; 0]$. A medida de distorção entre dois vetores é $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = ||\mathbf{x} - \mathbf{y}||^2$.

   a) Considerando a execução do D.A. básico, calcule as probabilidades $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ de associação de cada vetor $\mathbf{x}_j$ a cada centróide $\mathbf{y}_i$. Para a temperatura, utilize $T = 5$.
   b) Usando a matriz $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ do item (a), calcule valores atualizados para os centróides $\mathbf{y}_1$, $\mathbf{y}_2$, $\mathbf{y}_3$ e $\mathbf{y}_4$.
   c) (Opcional) Qual é a distância do centróide atualizado $\mathbf{y}_1$ à origem, em função de T?

Boa sorte!