UFRJ / COPPE / Programa de Engenharia Elétrica – Primeiro Período de 2018
CPE-723 – Otimização Natural (Parte I - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 10 de abril de 2018

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*) Mostre como podem ser avaliadas, *de forma eficiente*, pelo método de Monte Carlo, as três integrais indicadas a seguir:

   a) $\int_0^\infty axe^{-ax}dx$ e $\int_0^a axe^{-ax}dx$, com $a = 2$. Resolver usando $a = 1$ vale metade deste item.

   b) $\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 xyze^{-(x+y+z)}dxdydz$

2. (*Algoritmo de Metropolis* e *Simulated Annealing*) Considere o pseudo-código apresentado a seguir:

```
% INÍCIO
integral = 0; x_atual = 4;
for n = 1:100000,
     x̂ = x_atual + 0.5 * (rand(1) - 0.5);
     if x̂ < 3, x̂ = x̂ + 2; end; if x̂ > 5, x̂ = x̂ - 2; end; % Limites 3 e 5;
     if rand(1) < (x_atual^2 + 1)/(x̂^2 + 1), x_atual = x̂; end;
     if n > 90000,
          integral = integral + x_atual^2;
     end;
end;
integral = integral/10000;
% FIM
```

   a) Simplifique a expressão `exp (( -J(x̂) + J(x_atual) )/T)`, considerando $J(x) = T\ln(x^2 + 1)$, e indique qual é a forma da densidade de probabilidade com a qual os números x_{atual} são gerados.

   b) Mostre como este pseudo-código deve ser modificado, de modo a avaliar $(1/Z)\int_3^5 x/(x^2 + 1)dx$, sendo $Z = tan^{-1}(5) - tan^{-1}(3) = 0.1244$ a constante de normalização tal que $(1/Z)\int_3^5 1/(x^2 + 1)dx = 1$.

   c) Escreva um pseudo-código de *simulated annealing* básico, a ser utilizado para a minimização de uma função-custo $J(\mathbf{x})$ qualquer, com $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$. Indique as diferenças entre o seu pseudo-código e o pseudo-código dado no enunciado desta questão.

3. (*Simulated Annealing*) Considere a matriz de transição dada a seguir (calculada usando $T = T_0 = 0.1$):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} (1/2)(1-e^{-2}) & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ (1/2)e^{-2} & 0 & (1/2)e^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & (1/2)(1-e^{-1}) & (1/2)e^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & (1/2)(2-e^{-1}-e^{-2}) & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & (1/2)e^{-1} & 0 \end{bmatrix}$$

   a) Considerando um grafo com cinco estados (estado 1 conectado aos estados 2 e 5; 2 conectado a 1 e 3; 3 conectado a 2 e 4; 4 conectado a 3 e 5; 5 conectado a 4 e 1) e considerando que o custo associado ao estado 1 é igual a 0.2, calcule os custos associados aos estados 2, 3, 4 e 5.

   b) Calcule o vetor invariante da matriz $\mathbf{M}$.

   c) Escreva a menor das probabilidades da matriz $\mathbf{M}$ em função dos valores máximo e mínimo de $J(x)$, da temperatura T e do número N das transições possíveis para cada estado. Recalcule esta probabilidade para $T = T_0/\log_2 4$.

4. (*Deterministic Annealing*) Considere um problema de "clustering" genérico com vetores de dados $\mathbf{x}(n)$, com $n = 1, 2, \ldots, N$, e centróides $\mathbf{y}_k$, com $k = 1, 2, \ldots, K$ a serem calculados pelo método de *deterministic annealing*.

   a) Usando pseudo-código, e considerando distância quadrática entre vetores ($d(x, y) = ||\mathbf{x} - \mathbf{y}||_2^2$) e temperatura T, mostre como são feitos: i) o cálculo da partição a partir de um conjunto inicial de centróides; e, após o cálculo da partição, ii) a atualização das coordenadas dos cetróides.

   b) Utilizando dados numéricos de sua escolha, ilustre a aplicação dos pseudo-códigos dos itens a.i e a.ii.

Boa prova!