UFRJ / Escola Politécnica / DEL – Primeiro Período de 2016
CPE-723 – Otimização Natural (Parte I - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 07 de abril de 2016

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 duas variáveis aleatórias X e Y, que têm a seguinte distribuição de probabilidades conjunta:

$p(x,y)$	$X=1$	$X=2$	$X=3$
$Y=1$	0.04	0.12	0.07
$Y=2$	0.09	0.40	0.11
$Y=3$	0.03	0.08	0.06

   a) Calcule os valores de uma possível função energia (ou função custo) para o algoritmo de Metropolis, com $T = 1$, de forma que, quando este for executado a partir de valores iniciais quaisquer para X e Y, assintoticamente gere pares (X, Y) com a distribuição de probabilidades indicada.

   b) Utilizando um pseudo-código, descreva uma implementação do algoritmo de Metropolis para a geração dos pares (X, Y) do item (a).

   c) Indique como o algoritmo pode ser usado para estimar o valor esperado do produto entre X e Y, ou seja, $E[XY]$.

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma execução do algoritmo de Metropolis à temperatura fixa $T = 1$, com estados $[X_1X_2]$ (X_1 e X_2 são variáveis aleatórias binárias) e as duas matrizes de transição dadas a seguir. A matriz $\mathbf{M}_1$, à esquerda, modela as probabilidades de transição entre estados no caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre X_1. A matriz $\mathbf{M}_2$, à direita, é para o caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre X_2.

$\mathbf{M}_1$	00	01	11	10
00	2/3	0	0	1
01	0	2/3	1	0
11	0	1/3	0	0
10	1/3	0	0	0

$\mathbf{M}_2$	00	01	11	10
00	2/3	1	0	0
01	1/3	0	0	0
11	0	0	0	1/3
10	0	0	1	2/3

   a) Considerando $J(00) = 1$, calcule os valores de $J(01)$, $J(11)$ e $J(10)$ de forma que $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$ tenham os valores dados acima.

   b) Calcule uma matriz de transição $\mathbf{M}$ que modele transições de qualquer um dos quatro estados para qualquer um dos quatro estados.

   c) Calcule o vetor invariante da matriz $\mathbf{M}$ do item (b). Verifique que ele é um vetor invariante também de $\mathbf{M}_1$ e $\mathbf{M}_2$, apesar de estas matrizes terem diferentes autovetores correspondentes aos autovalores que têm valor igual a 1.

3. (*Simulated Annealing*) Considere uma função custo dada pela tabela a seguir:

x	1	2	3	4
$J(x)$	7	1	10	4

   a) Descreva, usando pseudo-código, a implementação do algoritmo S.A. básico aplicado à minimização da função custo acima. Na sua descrição, leve em consideração os seguintes parâmetros: temperatura inicial T_0, temperatura mínima T_{min}, e o número de iterações N a serem executadas em temperatura fixa.

b) Calcule as matrizes de transição do processo de Markov que corresponde ao S.A. à temperatura $T = 10$ e à temperatura $T = 5$ (chamadas de $\mathbf{M}_{10}$ e $\mathbf{M}_5$) e os seus respectivos vetores invariantes.

c) (0.25 ponto extra) Observe o menor dos números em $\mathbf{M}_{10}$ e o menor dos números em $\mathbf{M}_5$. Qual é a relação entre estes números e T, J_{max}, J_{min} e o número de estados possíveis?

4. (*Deterministic Annealing*) Considere um conjunto de dados $\mathbf{X}$ que contém quatro vetores equiprováveis, situados sobre os vértices do quadrado de lado igual a 2, centralizado na origem, e com seus lados paralelos aos eixos x e y. Considere também uma partição suave do espaço $\mathbb{R}^2$, baseada em quatro "centróides" $\mathbf{y}_1$ até $\mathbf{y}_4$, conforme a matriz de probabilidades condicionais dada a seguir:

	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$
$\mathbf{y}_1$	0.7	0.1	0.1	0.1
$\mathbf{y}_2$	0.1	0.7	0.1	0.1
$\mathbf{y}_3$	0.1	0.1	0.7	0.1
$\mathbf{y}_4$	0.1	0.1	0.1	0.7

a) Calcule vetores atualizados para os quatro centróides.

b) Recalcule as probabilidades condicionais $p(\mathbf{y}_k|\mathbf{x}_n)$, a partir dos centróides obtidos no item (a), e considerando $T = 1$.

c) (0.25 ponto extra) Calcule os valores de $H(Y|X) = -\sum_x p(x) \sum_y p(y|x) \log p(y|x)$ para as duas matrizes $p(y|x)$: a do enunciado e aquela calculada no item (b), e compare os valores encontrados.

Boa prova!