

CPE-723 – Otimização Natural
Lista de Exercícios #2

1. Considere um processo de Markov $X(t)$ que tem três estados possíveis: 0, 1, e 2. A evolução temporal deste processo é dada pela matriz de transição a seguir:

$$M = \begin{bmatrix} 0.50 & 0.25 & 0.25 \\ 0.25 & 0.50 & 0.25 \\ 0.25 & 0.25 & 0.50 \end{bmatrix}$$

- a) Considerando que a distribuição de probabilidade de $X(0)$ é dada pelo vetor $\mathbf{p}_0 = [0.3 \ 0.4 \ 0.3]^T$, calcule a distribuição de probabilidade de $X(3)$ (ou seja, do processo de Markov no instante $t = 3$).
 - b) Iniciando em $X(0) = 1$, e usando um gerador de números aleatórios (são necessários apenas três números aleatórios, sorteados de PDF uniforme entre 0 e 1), calcule manualmente uma amostra do processo $X(t)$ até $t = 3$.
 - c) Usando um computador, execute 100 repetições do item (b). Em cada uma das 100 repetições, comece a simulação com um valor diferente de $X(0)$, assumindo que os eventos $X(0) = 0$, $X(0) = 1$, e $X(0) = 2$ são equiprováveis. Armazene as 100 cadeias obtidas em uma matriz \mathbf{X} , com 4 colunas ($t = 0$ até $t = 3$) e 100 linhas.
 - d) Fazendo histogramas de cada uma das 4 colunas, calcule as distribuições de probabilidade do processo $X(t)$ em cada um dos 4 instantes: $t = 0, 1, 2, 3$. Comente os resultados obtidos.
2. Considere um sistema em que só há 5 estados possíveis: $x = 1, x = 2, x = 3, x = 4, x = 5$. Os custos $J(x)$ de cada um dos estados são indicados na tabela abaixo:

x	$J(x)$
1	0.5
2	0.2
3	0.3
4	0.1
5	0.4

- a) Considere um processo de Markov gerado pela aplicação do algoritmo de Metropolis aos dados da tabela acima, com temperatura fixa $T = 0.1$. Calcule a matriz de transição M que define o processo $X(t)$. Obs.: note que o estado $X(t)$ é unidimensional, e portanto a matriz M é 5×5 .
- b) Iniciando em $X(0) = 1$, calcule manualmente 4 amostras do processo $X(t)$.
- c) Qual é o vetor invariante da matriz M do item (a) ?
Obs.: para facilitar os cálculos, pode-se usar o computador neste item.
- d) Calcule os fatores de Boltzmann (ou seja, $e^{-(J(x))/T}$) associados aos dados da tabela acima, e compare-os com o resultado do item (c). Use $T = 0.1$.
- e) *Simulated Annealing*: Usando um computador, execute 1000 iterações do algoritmo de Metropolis em cada uma das 10 temperaturas a seguir. Na passagem de uma temperatura para a outra, use o estado atual. Comente as distribuições de probabilidade obtidas no final de cada temperatura.

T_0	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6	T_7	T_8	T_9
0.1000	0.0631	0.0500	0.0431	0.0387	0.0356	0.0333	0.0315	0.0301	0.0289

3. Proponha uma função $J(\mathbf{x})$, sendo \mathbf{x} um vetor com 10 dimensões, cujo ponto mínimo você conheça. Evite propor funções que tenham um só ponto mínimo. Encontre o ponto mínimo global

utilizando S.A.

Obs.: neste exercício, entregue o código utilizado e alguns comentários sobre o resultado obtido.

04) Prova de 2009 - Questão 2, itens (a) e (c).

2. (*Simulated Annealing*) Considere um problema de otimização representado pela função custo a seguir:

x	J(x)
1	0.3
2	0.1
3	0.1
4	0.2

a) Calcule os fatores de Boltzmann $e^{-J(x)/T}$, para $T = 1.0$ e para $T = 0.1$.

c) Calcule as matrizes de transição M para $T = 1.0$ e para $T = 0.1$. Calcule os vetores invariantes destas matrizes e compare-os com os resultados do item (a).

05) Prova de 2011 - Questão 2, itens (a), (b), e (e).

2. (*Simulated Annealing*) Considere a função custo $J(x_1; x_2)$ definida pela tabela a seguir:

x_1	x_2	$J(x)$
0	0	0.2
0	1	0.3
1	0	0.3
1	1	0.1

a) A aplicação do Algoritmo de Metropolis a um vetor inicial $x(0)$ qualquer, alterando uma componente (x_1 ou x_2) de cada vez, define um processo de Markov com duas matrizes de transição: M1 e M2. Calcule estas matrizes de transição, considerando $T = 0.5$. Note que o número de estados possíveis é 4.

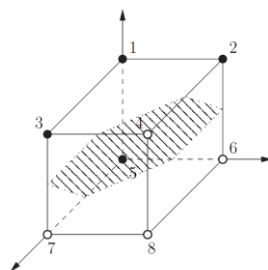
b) Calcule, para temperatura $T = 0.5$, a distribuição de Boltzmann/Gibbs do vetor aleatório X. Verifique que esta distribuição de probabilidades define um vetor invariante para ambas as matrizes de transição calculadas no item (a).

c) Utilizando um pseudo-código, descreva um algoritmo de *Simulated Annealing* para minimizar esta função $J(x_1; x_2)$. Defina e use quaisquer parâmetros (temperatura inicial, método de resfriamento etc.) que você julgar necessários.

e) Quando um número suficientemente grande de iterações do algoritmo do item (c) tiver sido calculado à temperatura $T = 0.1$, com que probabilidade teremos a ocorrência do evento $J = 0.3$?

06) (Opcional/Desafio) Prova de 2012 - Questão 3.

1. (*Simulated Annealing*) Considere uma situação em que gostaríamos de dividir os oito vértices de um cubo unitário em dois agrupamentos, de modo que o erro quadrático total entre os centros dos agrupamentos e os membros dos agrupamentos seja minimizado. Considere que os vértices são numerados da seguinte forma:



e também que os agrupamentos são definidos através de um vetor \mathbf{x} binário de comprimento oito. A i -ésima componente de \mathbf{x} é igual a zero se o vértice i pertencer ao agrupamento zero. E é igual a um no caso contrário. Por exemplo, o estado $\mathbf{x} = 11101000$ corresponde ao caso da figura, em que os centróides são $(3/4, 3/4, 1/4)$ (agrupamento 0) e $(1/4, 1/4, 3/4)$ (agrupamento 1) e o custo $J(\mathbf{x})$ é 4.50.

- Baseando-se em um esquema de perturbação que consiste em sortear uma posição do vetor \mathbf{x} e invertê-la, escreva um algoritmo SA básico para a minimização do erro quadrático total. Defina quaisquer parâmetros que você julgar necessários.
- Assumindo $T = 1.0$ e o mesmo esquema de perturbação do item (a), calcule a probabilidade de transição do estado 11101000 para o estado 11100000, e também a probabilidade de transição do estado 11100000 para o estado 11110000.
- A contagem dos estados conforme os seus custos é dada pela tabela a seguir:

Custo	4.00	4.50	4.53	4.67	5.00	5.14	5.33	5.50	5.60	6.00
Número de Estados	6	8	48	24	24	16	24	24	64	18

Calcule qual é a probabilidade de $\mathbf{x} = 00001111$ ser gerado, quando o SA básico atinge $T = 0.1$.

07) Prova de 2016 - Questão 2.

- (Algoritmo de Metropolis) Considere uma execução do algoritmo de Metropolis à temperatura fixa $T = 1$, com estados $[X1X2]$ ($X1$ e $X2$ são variáveis aleatórias binárias) e as duas matrizes de transição dadas a seguir. A matriz $\mathbf{M1}$, à esquerda, modela as probabilidades de transição entre estados no caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre $X1$. A matriz $\mathbf{M2}$, à direita, é para o caso em que a perturbação, sempre diferente de zero, é feita sobre $X2$.

$\mathbf{M1}$	00	01	1	10	$\mathbf{M2}$	00	01	1	10
			1					1	
00	2/3	0	0	1	00	2/3	1	0	0
01	0	2/3	1	0	01	1/3	0	0	0
11	0	1/3	0	0	11	0	0	0	1/3
10	1/3	0	0	0	10	0	0	1	2/3

- Considerando $J(00) = 1$, calcule os valores de $J(01)$, $J(11)$ e $J(10)$ de forma que $\mathbf{M1}$ e $\mathbf{M2}$ tenham os valores dados acima.
- Calcule uma matriz de transição \mathbf{M} que modele transições de qualquer um dos quatro estados para qualquer um dos quatro estados.
- Calcule o vetor invariante da matriz \mathbf{M} do item (b). Verifique que ele é um vetor invariante também de $\mathbf{M1}$ e $\mathbf{M2}$, apesar de estas matrizes terem diferentes autovetores correspondentes aos autovalores que têm valor igual a 1.

08) Prova de 2016 - Questão 3.

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

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

- d) 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.

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 **M10** e **M5**) e os seus respectivos vetores invariantes.

- e) (0.25 ponto extra) Observe o menor dos números em **M10** e o menor dos números em **M5**. Qual é a relação entre estes números e T , J_{max} , J_{min} e o número de estados possíveis?

09) Prova de 2017 - Questão 3, itens (b) e (c).

3. (*Simulated Annealing*) Considere uma função custo definida sobre cinco estados discretos, chamados de estados 1, 2, ... 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).

10) Prova de 2018 - Questão 3.

1. (*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 $T = T_0 / \log_2 4$.