CPE-723 – Otimização Natural

Lista de Exercícios #2

1. Considere um processo de Markov *X*(*t*) que tem trˆes estados poss´ıveis: 0, 1, e 2. A evolu¸c˜ao temporal deste processo ´e dada pela matriz de transi¸c˜ao a seguir:
   1. Considerando que a distribui¸c˜ao de probabilidade de *X*(0) ´e dada pelo vetor **p**0 = [0*.*3 0*.*4 0*.*3]*T* , calcule a distribui¸c˜ao de probabilidade de *X*(3) (ou seja, do processo de Markov no instante *t* = 3).
   2. Iniciando em *X*(0) = 1, e usando um gerador de nu´meros aleat´orios (s˜ao necess´arios apenas três números aleatórios, sorteados de PDF uniforme entre 0 e 1), calcule manualmente uma amostra do processo *X*(*t*) at´e *t* = 3.
   3. Usando um computador, execute 100 repeti¸c˜oes do item (b). Em cada uma das 100 repeti¸c˜oes, comece a simula¸c˜ao com um valor diferente de *X*(0), assumindo que os eventos *X*(0) = 0, *X*(0) = 1, e *X*(0) = 2 s˜ao equiprovaveis. Armazene as 100 cadeias obtidas em uma matriz **X**, com 4 colunas (*t* = 0 at´e *t* = 3) e 100 linhas.
   4. Fazendo histogramas de cada uma das 4 colunas, calcule as distribui¸c˜oes de probabilidade do processo

*X*(*t*) em cada um dos 4 instantes: *t* = 0, 1, 2, 3. Comente os resultados obtidos.

1. Considere um sistema em que s´o h´a 5 estados poss´ıveis: *x* = 1, *x* = 2, *x* = 3, *x* = 4, *x* = 5. Os custos *J* (*x*) de cada um dos estados s˜ao indicados na tabela abaixo:

|  |  |
| --- | --- |
| *x* | *J* (*x*) |
| 1 | 0*.*5 |
| 2 | 0*.*2 |
| 3 | 0*.*3 |
| 4 | 0*.*1 |
| 5 | 0*.*4 |

* 1. Considere um processo de Markov gerado pela aplica¸c˜ao do algoritmo de Metropolis aos dados da tabela acima, com temperatura fixa *T* = 0*.*1. Calcule a matriz de transi¸c˜ao *M* que define o processo *X*(*t*). Obs.: note que o estado *X*(*t*) ´e unidimensional, e portanto a matriz *M* ´e 5 *×* 5.
  2. Iniciando em *X*(0) = 1, calcule manualmente 4 amostras do processo *X*(*t*).
  3. Qual ´e o vetor invariante da matriz *M* do item (a) ?

Obs.: para facilitar os c´alculos, pode-se usar o computador neste item.

* 1. 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.
  2. *Simulated Annealing:* Usando um computador, execute 1000 itera¸c˜oes 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 distribui¸c˜oes 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 |

1. Proponha uma fun¸c˜ao *J* (**x**), sendo **x** um vetor com 10 dimens˜oes, cujo ponto m´ınimo vocˆe conhe¸ca. Evite propor fun¸c˜oes que tenham um s´o ponto m´ınimo. Encontre o ponto m´ınimo global utilizando S.A.

Obs.: neste exerc´ıcio, entregue o c´odigo utilizado e alguns coment´arios 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.

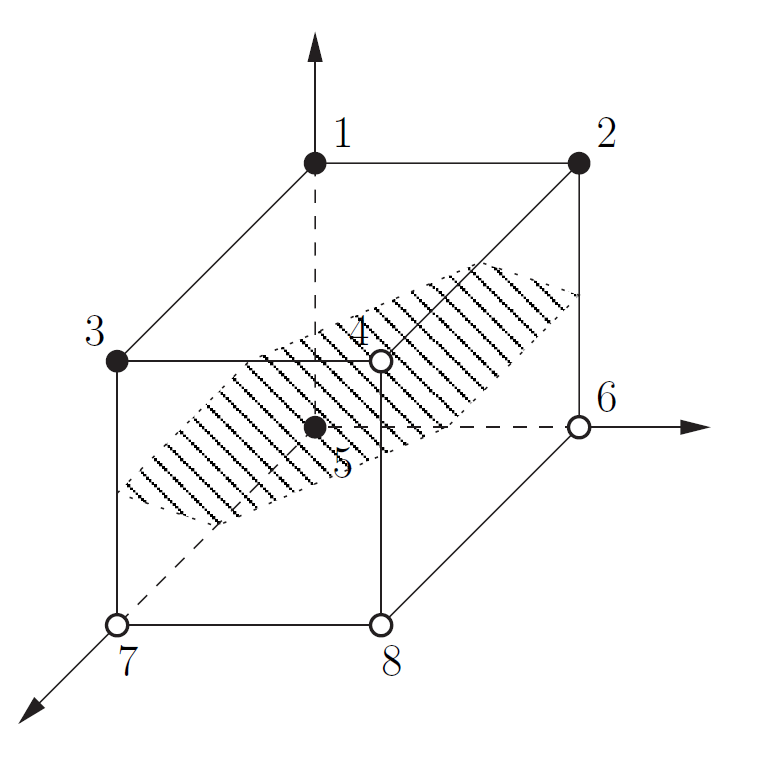
b) Calcule, para temperatura *T* = 0*.*5, a distribuição de Boltzmann/Gibbs do vetor aleatório *X*. Verifique que esta distribuição de probabilidades define um vetor invariante para ambas as matrizes de transição calculadas no item (a).

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 situa¸c˜ao em que gostar´ıamos de dividir os oito v´ertices de um cubo unit´ario em dois agrupamentos, de modo que o erro quadr´atico total entre os centros dos agrupamentos e os membros dos agrupamentos seja minimizado. Considere que os v´ertices s˜ao numerados da seguinte forma:



e tamb´em que os agrupamentos s˜ao definidos atrav´es de um vetor **x** bin´ario de comprimento oito. A *i*-´esima componente de **x** ´e igual a zero se o v´ertice *i* pertencer ao agrupamento zero. E ´e igual a um no caso contr´ario. Por exemplo, o estado **x** = 11101000 corresponde ao caso da figura, em que os centr´oides s˜ao (3*/*4*,* 3*/*4*,* 1*/*4) (agrupamento 0) e (1*/*4*,* 1*/*4*,* 3*/*4) (agrupamento 1) e o custo *J* (**x**) ´e 4.50.

* 1. Baseando-se em um esquema de perturba¸c˜ao que consiste em sortear uma posi¸c˜ao do vetor **x** e invertˆe-la, escreva um algoritmo SA b´asico para a minimiza¸c˜ao do erro quadr´atico total. Defina quaisquer parˆametros que vocˆe julgar necess´arios.
  2. Assumindo *T* = 1*.*0 e o mesmo esquema de perturba¸c˜ao do item (a), calcule a probabilidade de transi¸c˜ao do estado 11101000 para o estado 11100000, e tamb´em a probabilidade de transi¸c˜ao do estado 11100000 para o estado 11110000.
  3. A contagem dos estados conforme os seus custos ´e 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 |
| Nu´mero de Estados | 6 | 8 | 48 | 24 | 24 | 16 | 24 | 24 | 64 | 18 |

Calcule qual ´e a probabilidade de **x** = 00001111 ser gerado, quando o SA b´asico atinge *T* = 0*.*1.

07) Prova de 2016 - Questão 2.

1. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma execu¸c˜ao do algoritmo de Metropolis `a temperatura fixa *T* = 1, com estados [*X*1*X*2] (*X*1 e *X*2 s˜ao vari´aveis aleat´orias bin´arias) e as duas matrizes de transi¸c˜ao dadas a seguir. A matriz **M**1, `a esquerda, modela as probabilidades de transi¸c˜ao entre estados no caso em que a perturba¸c˜ao, sempre diferente de zero, ´e feita sobre *X*1. A matriz **M**2, `a direita, ´e para o caso em que a perturba¸c˜ao, sempre diferente de zero, ´e feita sobre *X*2.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **M**1 | 00 | 01 | 11 | 10 | **M**2 | 00 | 01 | 11 | 10 |
| 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 |

* 1. Considerando *J* (00) = 1, calcule os valores de *J* (01), *J* (11) e *J* (10) de forma que **M**1 e **M**2 tenham os valores dados acima.
  2. Calcule uma matriz de transi¸c˜ao **M** que modele transi¸c˜oes de qualquer um dos quatro estados para qualquer um dos quatro estados.
  3. Calcule o vetor invariante da matriz **M** do item (b). Verifique que ele ´e um vetor invariante tamb´em de **M**1 e **M**2, apesar de estas matrizes terem diferentes autovetores correspondentes aos autovalores que tˆem valor igual a 1.

08) Prova de 2016 - Questão 3.

1. (*Simulated Annealing*) Considere uma fun¸c˜ao custo dada pela tabela a seguir:

*x* 1 2 3 4

*J* (*x*) 7 1 10 4

* 1. Descreva, usando pseudo-c´odigo, a implementa¸c˜ao do algoritmo S.A. b´asico aplicado `a minimiza¸c˜ao da fun¸c˜ao custo acima. Na sua descri¸c˜ao, leve em considera¸c˜ao os seguintes parˆametros: temperatura inicial *T*0, temperatura m´ınima *Tmin*, e o nu´mero de itera¸c˜oes *N* a serem executadas em temperatura fixa.

Calcule as matrizes de transi¸c˜ao do processo de Markov que corresponde ao S.A. `a temperatura *T* = 10 e

`a temperatura *T* = 5 (chamadas de **M**10 e **M**5) e os seus respectivos vetores invariantes.

* 1. (0.25 ponto extra) Observe o menor dos nu´meros em **M**10 e o menor dos nu´meros em **M**5. Qual ´e a rela¸c˜ao entre estes nu´meros e *T* , *Jmax*, *Jmin* e o nu´mero de estados poss´ıveis?

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.

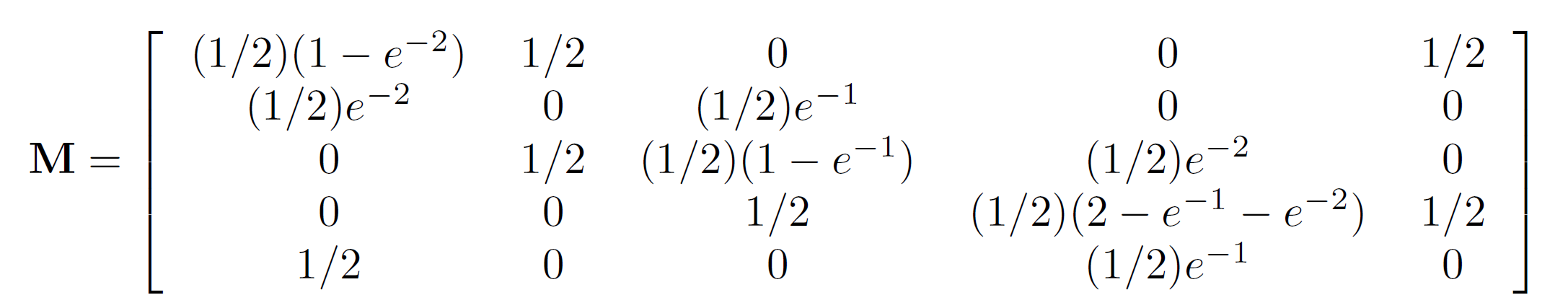
a) Apresente, usando pseudo-código, uma implementação do algoritmo Simulated Annealing básico, usada para encontrar o estado para o qual o valor da função custo \_e mínimo. Defina e utilize todos os parâmetros que você considerar necessários.

b) Calcule uma matriz de transição entre estados à temperatura *T*1 = 1/ln2 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 transi¸c˜ao dada a seguir (calculada usando *T* = *T*0 = 0*.*1):



* 1. 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 ´e igual a 0.2, calcule os custos associados aos estados 2, 3, 4 e 5.
  2. Calcule o vetor invariante da matriz **M**.
  3. Escreva a menor das probabilidades da matriz **M** em fun¸c˜ao dos valores m´aximo e m´ınimo de *J* (*x*), da temperatura *T* e do nu´mero *N* das transi¸c˜oes poss´ıveis para cada estado. Recalcule esta probabilidade para *T* = *T*0*/* log2 4.