Universidade Federal do Rio de Janeiro
Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia

Programa de Engenharia de Sistemas e Computação

CPS767 - Algoritmos de Monte Carlo e Cadeias de Markov

Prof. Daniel Ratton Figueiredo

4ª Lista de Exercícios

Luiz Henrique Souza Caldas
email: lhscaldas@cos.ufrj.br

22 de maio de 2025

Questão 1: Sequências binárias restritas

Considere uma sequência de dígitos binários (0s e 1s) de comprimento s. Uma sequência é dita válida se ela não possui 1s adjacentes. Considerando a distribuição uniforme, queremos determinar o valor esperado do número de 1s de uma sequência válida, denotado por μ_s.

- Considerando $s = 4$, determine todas as sequências válidas e calcule μ_4.

As sequências válidas de comprimento 4 são: 0000, 0001, 0010, 0100, 1000, 0101, 1010, 1001. Portanto, temos um total de 8 sequências válidas. O valor esperado de 1s nessas sequências é dado por:

$$\mu_4 = \frac{1}{8} \times 0 + \frac{4}{8} \times 1 + \frac{3}{8} \times 2 = \frac{10}{8}$$

Assim,

$$\boxed{\mu_4 = \frac{10}{8} \approx 1.25}$$

- Construa uma cadeia de Markov sobre o conjunto de sequências válidas, deixando claro como funcionam as transições de estado. Argumente que a cadeia é irredutível.

A cadeia de Markov pode ser construída considerando os estados como as sequências válidas (ou seja, aquelas de comprimento $s = 4$ que não possuem dígitos 1 adjacentes). As transições entre estados ocorrem ao flipar um único dígito da sequência, desde que o resultado continue sendo uma sequência válida.

Por exemplo, a sequência 0010 pode transitar para 0000 (flipando o terceiro dígito) ou para 1010 (flipando o primeiro dígito), pois ambas são válidas. Por outro lado, flipar o segundo dígito resultaria em 0110, que não é válida (pois possui 1s adjacentes), portanto essa transição não é permitida.

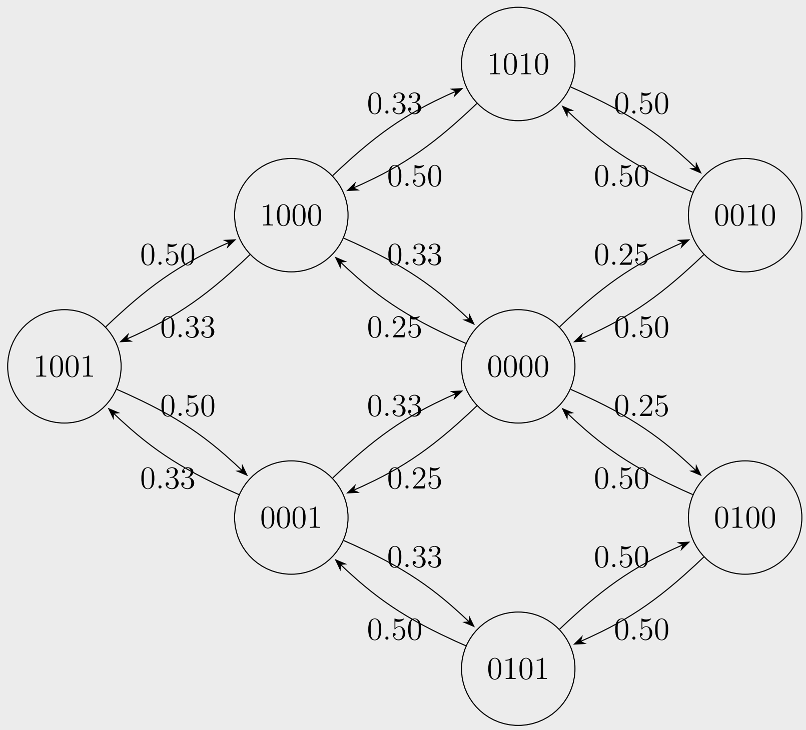
A probabilidade de transição do estado i para j é dada por:

$$P_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{d_i} & \text{se } j \text{ é obtido de } i \text{ por flip válido de um dígito} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde d_i é o número total de transições válidas a partir do estado i.

A cadeia é irredutível porque, para qualquer par de estados válidos, é possível transformar um no outro através de uma sequência finita de flips de dígitos (desde que se respeite a restrição de não criar 1s adjacentes). Como todas as sequências válidas estão conectadas por essas transições, a cadeia é conexa e, portanto, irredutível.

- Desenhe a cadeia de Markov para o caso de $s = 4$, mostrando todas as transições.



- Mostre como aplicar Metropolis-Hastings para resolver o problema de estimar μ_s. Deixe claro as probabilidades de aceite e o funcionamento do estimador.

Partindo da cadeia de Markov construída anteriormente, podemos aplicar o algoritmo de Metropolis-Hastings para modificar suas probabilidades de transição, de modo que a nova cadeia tenha como distribuição estacionária a distribuição uniforme sobre o conjunto de sequências válidas. A nova matriz de probabilidade de transição P' é dada por:

$$P'_{ij} = \begin{cases} P_{ij} a(i,j) & \text{se } j \text{ é obtido de } i \text{ por flip válido de um dígito} \\ 1 - \sum_{k:k \neq i} P_{ik} a(i,k) & \text{se } i = j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde $a(i,j)$ é a probabilidade de aceitar a transição de i para j. Essa probabilidade pode ser encontrada pela equação da condição de reversibilidade:

$$\pi_i P_{ij} a(i,j) = \pi_j P_{ji} a(j,i)$$

Como temos uma equação é duas incógnitas($a(i,j)$ e $a(j,i)$), precisamos arbitrar um valor para uma delas. Arbitrando $a(i,j) = 1$ se $\pi_i P_{ij} \leq \pi_j P_{ji}$ e, consequentemente, $a(i,j) = \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i P_{ij}}$ se $\pi_i P_{ij} > \pi_j P_{ji}$, temos que:

$$a(i,j) = \min\{1, \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i P_{ij}}\}$$

Como a distribuição estacionária é uniforme ($\pi_i = \pi_j$) podemos simplificar a equação para:

$$a(i,j) = \min\{1, \frac{P_{ji}}{P_{ij}}\} = \min\{1, \frac{\frac{1}{d_j}}{\frac{1}{d_i}}\} = \min\{1, \frac{d_i}{d_j}\}$$

A nova matriz de probabilidade de transição P' fica:

$$P'_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{d_i} \min\{1, \frac{d_i}{d_j}\} & \text{se } j \text{ é obtido de } i \text{ por flip válido de um dígito} \\ 1 - \sum_{k:k \neq i} P_{ik} a(i,k) & \text{se } i = j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Assim, podemos amostrar de forma uniforme as sequências válidas seguindo o seguinte procedimento:

1. Descobrir os d_i vizinhos do estado atual i;
2. Escolher de forma uniforme um vizinho j e contar os seus d_j vizinhos;
3. Gerar um número aleatório u entre 0 e 1;
4. Aceitar a transição se $u < a(i,j) = \min\{1, \frac{d_i}{d_j}\}$. Caso contrário, repetir estado i;
5. Repetir o processo a partir do novo estado.

Após gerar um número suficiente de amostras, o teorema de ergodicidade garante que a média das amostras converge para o valor esperado μ_s. Assim, podemos estimar μ_s como:

$$\hat{\mu}_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_i$$

onde X_i é o número de 1s na amostra i e N é o número total de amostras geradas.

Implementando o procedimento acima em Python (link para o código no final do relatório), obtemos os seguintes resultados para $N = 10^5$ e diferentes valores de s:

s	n° estados	$\hat{\mu}_s$
4	8	1.2479
8	55	2.3695
12	377	3.4821
16	2584	4.5997

Questão 2: Amostras de Modelos de Mistura

Considere a seguinte função de probabilidade:

$$p(x) = \alpha p_B(x; n, p_1) + (1 - \alpha)p_B(x; n, p_2),$$

onde $p_B(x; n, p)$ é a probabilidade associada ao valor x da binomial com parâmetros n e p, e $\alpha \in [0, 1]$ é um peso. Trata-se de um modelo de mistura de duas binomiais com diferentes valores de p, com pesos dados por α e $1 - \alpha$. Considere duas variáveis aleatórias X e K, representando o valor de $X \in [0, n]$ e a binomial utilizada $K \in \{1, 2\}$. Queremos gerar amostras de acordo com $p(x)$.

- Determine as distribuições de probabilidade condicionais $P(X|K)$ e $P(K|X)$. Dica: utilize a regra de Bayes no segundo caso.

A distribuição de X dado K é simplesmente uma binomial com parâmetro p_k, para $k \in \{1, 2\}$:

$$P(X = x|K = k) = p_B(x; n, p_k)$$

$$\boxed{P(X = x|K = k) = \binom{n}{x} p_k^x (1 - p_k)^{n-x}}$$

A distribuição de K dado X é obtida pela regra de Bayes:

$$P(K = k|X = x) = \frac{P(X = x|K = k) \cdot P(K = k)}{p(x)}$$

Como $P(K = 1) = \alpha$ e $P(K = 2) = 1 - \alpha$, temos:

$$\boxed{P(K = k|X = x) = \frac{p_B(x; n, p_k) \cdot p(K = k)}{\alpha p_B(x; n, p_1) + (1 - \alpha)p_B(x; n, p_2)}}$$

- Determine a distribuição de probabilidade conjunta $P(X, K)$.

A distribuição conjunta é dada pela regra do produto:

$$P(X = x, K = k) = P(X = x|K = k) \cdot P(K = k)$$

Como $P(X = x|K = k) = p_B(x; n, p_k)$, $P(K = 1) = \alpha$, $P(K = 2) = 1 - \alpha$, temos:

$$\boxed{P(X = x, K = k) = p_B(x; n, p_k) \cdot P(K = k)}$$

- Utilize a técnica de Gibbs Sampling para gerar amostras de X. Mostre como construir a cadeia de Markov e determine a transição entre os estados.

  Cada estado da cadeia de Markov é representado por um par $V = (X, K)$, onde $X \in [0, n]$ é o valor da variável aleatória e $K \in \{1, 2\}$ indica qual das duas binomiais foi utilizada.

  As transições entre os estados ocorrem por meio da atualização de uma única variável por vez, mantendo a outra fixa:

  - Para transições em que apenas X é atualizado (com K fixo), a probabilidade de transição para o novo estado (X', K) é dada por:

  $$P_{(X,K),(X',K)} = \frac{1}{2} \cdot p_B(X'; n, p_K)$$

  - Para transições em que apenas K é atualizado (com X fixo), a probabilidade de transição para o novo estado (X, K') é dada por:

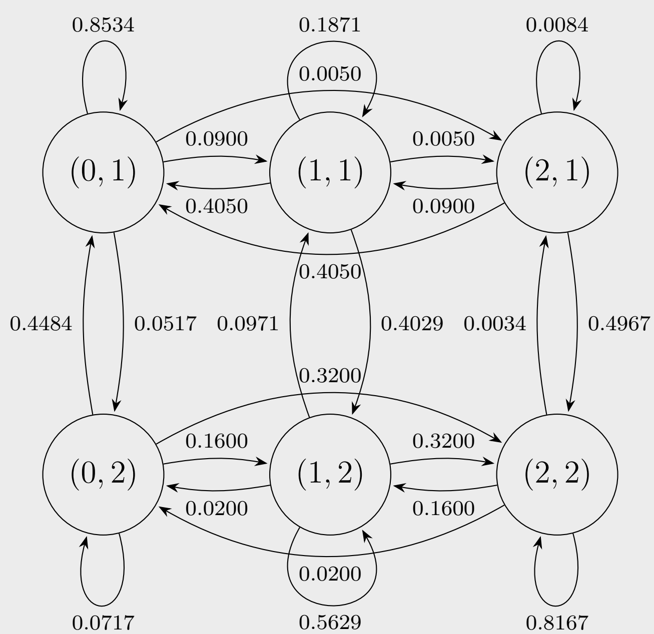
  $$P_{(X,K),(X,K')} = \frac{1}{2} \cdot \frac{p_B(X; n, p_{K'}) \cdot P(K')}{\alpha \cdot p_B(X; n, p_1) + (1 - \alpha) \cdot p_B(X; n, p_2)}$$

    onde $P(K' = 1) = \alpha$ e $P(K' = 2) = 1 - \alpha$.

  Dessa forma, a cadeia se move no espaço de pares (X, K), com transições definidas pelas distribuições condicionais do modelo de mistura. A estrutura garante que a cadeia seja reversível e tenha como distribuição estacionária a distribuição conjunta $P(X, K)$.

- Para $n = 2$, $p_1 = 0{,}1$, $p_2 = 0{,}8$, $\alpha = 0{,}3$, desenhe a cadeia de Markov com todas as transições.

Probabilidade	Valor	Valor/2
$P(X = 0 \mid K = 1)$	0.8100	0.4050
$P(X = 1 \mid K = 1)$	0.1800	0.0900
$P(X = 2 \mid K = 1)$	0.0100	0.0050
$P(X = 0 \mid K = 2)$	0.0400	0.0200
$P(X = 1 \mid K = 2)$	0.3200	0.1600
$P(X = 2 \mid K = 2)$	0.6400	0.3200
$P(K = 1 \mid X = 0)$	0.8967	0.4484
$P(K = 2 \mid X = 0)$	0.1033	0.0517
$P(K = 1 \mid X = 1)$	0.1942	0.0971
$P(K = 2 \mid X = 1)$	0.8058	0.4029
$P(K = 1 \mid X = 2)$	0.0067	0.0034
$P(K = 2 \mid X = 2)$	0.9933	0.4967



OBS: os valores das probabilidades dos selfloops são a soma das probabilidades de transição mantendo X fixo e mantendo K fixo, ou seja, $P(X = x|K = k) + P(K = k|X = x)$.

- Descreva como utilizar a cadeia de Markov para gerar amostras.

1. Inicializar a cadeia em um estado arbitrário (X, K), por exemplo $(0, 1)$.
2. Escolher aleatoriamente qual variável será atualizada:
   - Com probabilidade $\frac{1}{2}$, atualizar X;
   - Com probabilidade $\frac{1}{2}$, atualizar K.
3. Atualizar a variável escolhida:
   - Se for X, sorteie X' da distribuição binomial $P(X \mid K)$ com parâmetro p_K;
   - Se for K, sorteie K' da distribuição $P(K \mid X)$, calculada pela regra de Bayes.

   A variável não escolhida permanece inalterada.
4. Atualizar o estado da cadeia para o novo par (X', K').
5. Repitir o processo. Após τ_ϵ passos (tempo de mistura), o valor de X pode ser considerado uma amostra da distribuição desejada.
6. Repitir os passos acima para obter quantas amostras forem necessárias, aguardando sempre pelo menos τ_ϵ passos entre duas amostras consecutivas.

O tempo de mistura τ_ϵ pode ser limitado superiormente por:

$$\tau_\epsilon \leq \frac{\log 1/(\pi_o \epsilon)}{\delta}$$

onde π_o é a probabilidade do estado menos provável na distribuição estacionária da cadeia de Markov, ϵ é a tolerância desejada e δ é o vão espectral, definido por:

$$\delta = 1 - |\lambda_2|$$

onde λ_2 é o segundo maior autovalor da matriz de transição da cadeia de Markov.

Questão 3: Amostrando triângulos

Considere um grafo conexo qualquer. Desejamos gerar amostras de triângulos deste grafo (cliques de tamanho 3), tal que todo triângulo tenha igual probabilidade de ser amostrado — ou seja, uma distribuição uniforme sobre o conjunto de triângulos do grafo.

- Mostre como gerar amostras de forma direta, utilizando a distribuição uniforme. Dica: pense em amostragem por rejeição. Determine a eficiência desse método.

- Mostre como gerar amostras utilizando Metropolis-Hastings. Determine os estados da cadeia de Markov, as transições da cadeia base (que deve ser irredutível) e a probabilidade de aceitação na cadeia modificada pelo método Metropolis-Hastings.

- Intuitivamente, discuta quando a abordagem via Metropolis-Hastings é mais eficiente (do ponto de vista computacional) do que a abordagem via amostragem por rejeição.

Questão 4: Quebrando o código

Você encontrou uma mensagem cifrada com o código de substituição (neste código, cada letra é mapeada em outra letra de forma bijetiva). Você deseja encontrar a chave do código para ler a mensagem. Repare que a chave é um mapeamento σ entre as letras, por exemplo $\sigma(a) = x$, $\sigma(b) = h$, $\sigma(c) = e$, etc. Considere uma função $f : \Omega \to [0, 1]$ que avalia a capacidade de uma pessoa entender a mensagem cifrada dado um mapeamento $\sigma \in \Omega$. Repare que $f(\sigma) = 1$ significa que é possível entender por completo a mensagem decifrada com o mapeamento σ, e $f(\sigma) = 0$ se o mapeamento não revela nenhuma informação sobre a mensagem. Mostre como a técnica de Simulated Annealing pode ser utilizada para ler a mensagem cifrada. Mostre todos os passos necessários para aplicar a técnica neste problema (não é necessário implementar).

Códigos

Os códigos utilizados para a resolução dos exercícios estão disponíveis no repositório do GitHub: `https://github.com/lhscaldas/CPS767_MCMC/`