UFRJ / Escola Politécnica / DEL – Primeiro Período de 2008
CPE-723 – Otimização Natural (Parte II - *Simulated Annealing*)
Prova Parcial – 30 de abril de 2008
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*) Nos itens a seguir, considere o uso do algoritmo de Metropolis e de uma variável aleatória binária R (com dois valores equiprováveis, ou seja, $p_R(0) = p_R(1) = 0.5$) para a geração de uma variável aleatória X com função densidade de probabilidade arbitrária, dada por $f_X(x)$:

   a) Qual deve ser a função custo $J(x)$, para que a densidade de probabilidade de x seja $f_X(x)$?

   b) Utilizando um pseudo-código, descreva o algoritmo de Metropolis aplicado à geração da variável aleatória em questão. Defina e use os parâmetros (tamanho da perturbação, número de iterações, etc.) que você julgar necessários.

2. (*Algoritmo de Metropolis*) Considere uma variável contínua x, à qual está associada a seguinte função custo:

$$J(x) = -\ln(6x(1-x))$$

   Nos itens a seguir, o algoritmo de Metropolis será usado para gerar seqüências $x(k)$ apenas com os valores $x = 0.25$, $x = 0.5$ e $x = 0.75$, que serão chamados de "Estado 1", "Estado 2", e "Estado 3".

   a) Complete a tabela a seguir:

Estado	x	$J(x)$	$p_X(x)$
1	0.25		
2	0.50		
3	0.75		

   A partir da coluna $J(x)$, calcule a matriz de transição $\mathbf{M}$ entre os três estados possíveis do processo aleatório $X(k)$. Calcule também os autovetores de $\mathbf{M}$ e compare-os com a coluna $p_X(x)$ da tabela.

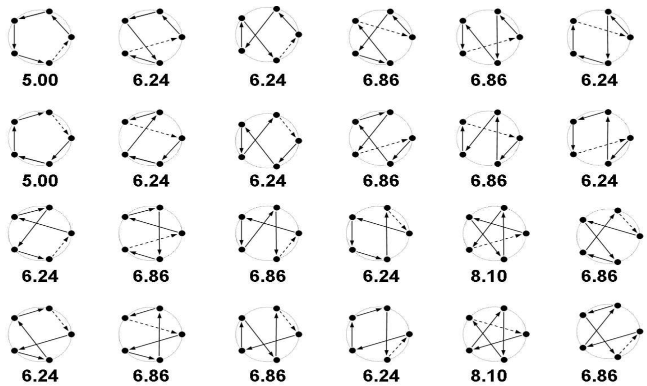
   b) Complete a tabela a seguir, que representa as 20 primeiras iterações do algoritmo de Metropolis para a geração de uma seqüência $x(k)$. Nesta tabela, o estado inicial é $x(1) = 0.5$.

V.A. Binária	V.A. Uniforme	k	$x(k)$	$\hat{x}(k+1)$
-1	0.95	01	0.50	
-1	0.23	02		
+1	0.61	03		
+1	0.49	04		
-1	0.89	05		
+1	0.76	06		
+1	0.46	07		
-1	0.02	08		
+1	0.82	09		
+1	0.44	10		
-1	0.62	11		
+1	0.79	12		
-1	0.92	13		
+1	0.74	14		
-1	0.18	15		
+1	0.41	16		
+1	0.94	17		
+1	0.92	18		
-1	0.41	19		
-1	0.89	20		

   Para a geração dos possíveis estados futuros $\hat{x}(k+1)$, use a variável aleatória binária fornecida na primeira coluna da tabela. Para a decisão sobre a aceitação de um possível estado futuro, use a variável aleatória uniforme fornecida na segunda coluna da tabela. Na utilização das variáveis aleatórias que são dadas, explique as convenções que você estiver seguindo.

   c) Usando os últimos 10 valores de $x(k)$ da tabela do item (b), estime as probabilidades de cada um dos três estados, ou seja $P(x(k) = 0.25)$, $P(x(k) = 0.50)$ e $P(x(k) = 0.75)$.

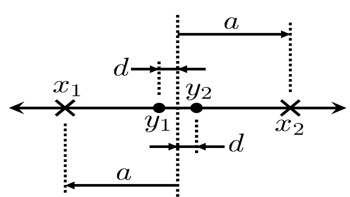
3. (*Simulated Annealing*) A figura a seguir ilustra todas as soluções possíveis do problema do caixeiro viajante com cinco cidades, no caso em que as cinco cidades estão dispostas uniformemente sobre um círculo, e considerando que a viagem sempre começa pela cidade mais à direita. A seta pontilhada indica o caminho de retorno da última cidade visitada para a cidade inicial. Considera-se que o custo da viagem sobre um lado do pentágono formado pelas cidades é igual a 1.0. O custo total de cada solução é representado logo abaixo da mesma.



a) Utilizando um pseudo-código, descreva um algoritmo de *Simulated Annealing* para resolver este problema. Defina e use quaisquer parâmetros (por exemplo: temperatura inicial, método de resfriamento, número de iterações a temperatura fixa, etc.) que você julgar necessários.

b) Com temperatura fixa $T = 1$, calcule a probabilidade com que cada uma das soluções acima será gerada, após a convergência do algoritmo.

4. (*Deterministic Annealing*) A figura a seguir representa dois números reais, $x_1 = -a$ e $x_2 = +a$, marcados sobre a reta dos números reais. O ponto central da figura é 0.0. Estes dois números reais serão agrupados em duas "classes", chamadas de "Classe y_1" e "Classe y_2", a partir dos centróides de cada classe: $y_1 = -d$ e $y_2 = +d$. A distância entre dois números é definida como $|x - y|$, e os números x_i são atribuídos às classes y_j utilizando probabilidades $p(y_j|x_i) = \exp(-|x_i - y_j|/T)$, onde $i = 1, 2$ e $j = 1, 2$. O parâmetro T ("temperatura") controla a incerteza com a qual a partição é feita. O objetivo deste problema é caracterizar a dependência entre a posição d dos centróides e a temperatura T.



a) Calcule as probabilidades $p(y|x)$ com as quais cada número x_i é associado a um centróide y_j:

$p(y\|x)$	x_1	x_2
y_1		
y_2		

Usando a matriz acima, calcule os valores atualizados para os centróides y_1 e y_2.

b) As probabilidades do item (a) são funções de d. Onde d aparece, escreva $d(k)$. Note que os valores atualizados para os centróides y_1 e y_2 são iguais a $-d(k+1)$ e $+d(k+1)$, ou seja, posições para o próximo cálculo de $p(y|x)$. Na expressão para y_2 encontrada no item (a), escreva $d(k+1)$. Mostre que:

$$d(k+1) = a \tanh\left(\frac{d(k)}{T}\right).$$

c) Considerando $a = 1$ e $d(1) = 0.5$, use a equação acima para calcular $d(10)$ com $T = 0.1$. Repita o procedimento, para $T = 0.9$, e mais uma vez para $T = 1.1$.

Boa prova !