Relatório Científico Final – Iniciação Científica

Processo FAPESP 2014/23564-0

Estudos de estruturas de dados eficientes para abordar o problema de otimização U-curve

Beneficiário: Gustavo Estrela de Matos

Responsável: Marcelo da Silva Reis

Relatório referente aos trabalhos desenvolvidos entre 1 de janeiro e 31 de julho de 2015

Laboratório Especial de Toxinologia Aplicada, Instituto Butantan

São Paulo, 6 de Novembro de 2015

Marcelo da Silva Reis

Gustavo Estrela de Matos

Relatório Científico Final – Iniciação Científica

Processo FAPESP 2014/23564-0

Estudos de estruturas de dados eficientes para abordar o problema de otimização U-curve

Beneficiário: Gustavo Estrela de Matos

Responsável: Marcelo da Silva Reis

Relatório referente aos trabalhos desenvolvidos entre 1 de janeiro e 31 de julho de 2015

Laboratório Especial de Toxinologia Aplicada, Instituto Butantan

São Paulo, 6 de Novembro de 2015

Conteúdo

1 Resumo do Projeto Proposto

O problema de otimização U-curve pode ser utilizado para modelar problemas em diversas áreas; por exemplo, o problema de seleção de características em Reconhecimento de Padrões. Um algoritmo ótimo para abordar o problema U-curve é o U-Curve-Search (`UCS`). Esse algoritmo alcançou resultados promissores na solução desse problema, pois computa poucas vezes a função custo; porém, em sua atual implementação, `UCS` tem problemas de escalabilidade, o que se deve em grande medida à utilização de listas duplamente encadeadas para armazenar o controle do espaço de busca já percorrido pelo algoritmo. Dessa forma, propomos neste projeto de Iniciação Científica a investigação do uso de diagramas de decisão binária reduzidos e ordenados (ROBDDs) como solução de estrutura de dados para controlar o espaço de busca já percorrido pelo algoritmo `UCS`. Utilizamos ROBDDs para desenvolver o algoritmo `UCSR`, uma nova versão do `UCS` que foi implementada e testada utilizando o arcabouço featsel. Realizamos testes com instâncias artificiais e, em breve, utilizaremos também dados de problemas reais, tais como a etapa de seleção de características durante o desenho de W-operadores. Resultados iniciais mostraram que `UCSR` é mais eficiente do que `UCS` do ponto de vista de consumo de tempo computacional, o que sugere que o novo algoritmo é mais competitivo para resolver problemas práticos que possam ser descritos como um problema de otimização U-curve.

2 Atividades Realizadas

As seções a seguir apresentam as atividades realizadas ao longo do projeto. Na seção 2.1 apresentamos conceitos fundamentais que foram estudados no início das atividades. Na seção 2.2 mostramos as principais características da estrutura de dados ROBDD implementada no arcabouço `featsel`. Na seção 2.3 descrevemos as simplificações da busca em profundidade do `UCS` implementadas no `UCSR3, UCSR4, UCSR5` e `UCSR6`. Na seção 2.4 explicamos o ajuste feito, entre tempo de execução e número de chamadas da função custo, implementados no algoritmo `UCSR6`. Na seção 2.5 apresentamos os resultados da implementação desses algoritmos, comparando-os também com `UCS` e com Exhaustive Search (`ES`), uma implementação de busca exaustiva do espaço de busca. Finalmente, na seção 2.6 apresentamos uma tentativa de melhoramento do desempenho do uso de ROBDDs através da reordenação de variáveis; para este fim, estudamos e implementamos no arcabouço `featsel` uma versão de algoritmo genético. A nova versão do algoritmo, `UCSR7`, teve seu desempenho comparado com o dos melhores algoritmos desenvolvidos ao longo deste trabalho.

2.1 Estudo do algoritmo `UCS` e de ROBDDs

Para criar novos algoritmos para solucionar o problema U-Curve, baseamo-nos na dinâmica do algoritmo `U-Curve-Search` (`UCS`), conforme apresentado em Reis [1]. Este algoritmo estrutura o espaço de busca como um reticulado Booleano e, através de uma busca em profundidade e com o auxilio de restrições ao espaço de busca, determina uma solução ótima para o problema.

No algoritmo `UCS` as restrições do espaço de busca são representadas por duas listas de restrições: inferior e superior. Essas listas armazenam vários elementos do espaço de busca, e cada elemento representa um intervalo que está restrito (i.e., um intervalo de elementos que foram removidos do espaço de busca corrente). Se um elemento X pertence a lista inferior (no caso dual, superior), temos que o intervalo $[\emptyset, X]$ ($[X, S]$) não está no espaço de busca. Estas

listas foram implementadas com o uso de listas duplamente encadeadas, e para consultar se um elemento está no espaço de busca é necessário verificar se algum dos intervalos das listas cobre (i.e. contém) este elemento. Mais informações sobre o `UCS` podem ser encontradas em Reis [1], [2].

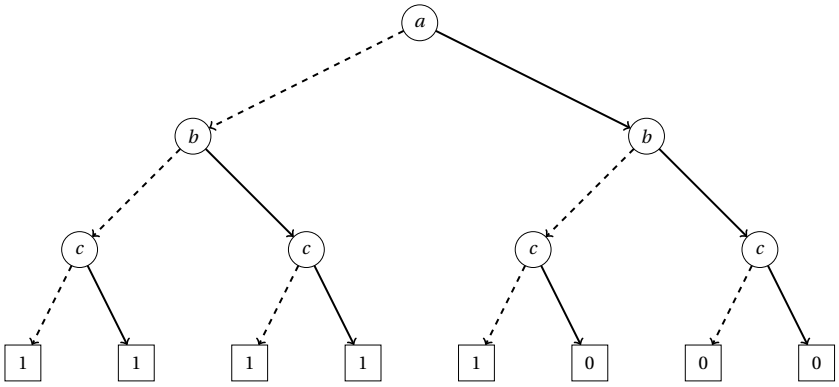
Visando melhorar o controle de espaço de busca, desenvolvemos novos algoritmos para o problema U-Curve utilizando diagramas de decisão binária ordenadas e reduzidas (*Reduced Ordered Binary Decision Diagrams* – ROBDDs [3]). Esses diagramas representam, através de árvores, funções Booleanas $f : B^n \to B$ ($B = \{0, 1\}$); portanto, podemos controlar o espaço de busca utilizando um ROBDD tal que $f(X)$ vale 1 se X está fora do espaço de busca e 0 caso contrário. Além disso, consultar se um elemento pertence ao espaço de busca em um ROBDD é linear em relação a n (cardinalidade do conjunto de características) como pode ser visto na figura 1.

2.2 Implementação de ROBDDs no arcabouço `featsel`

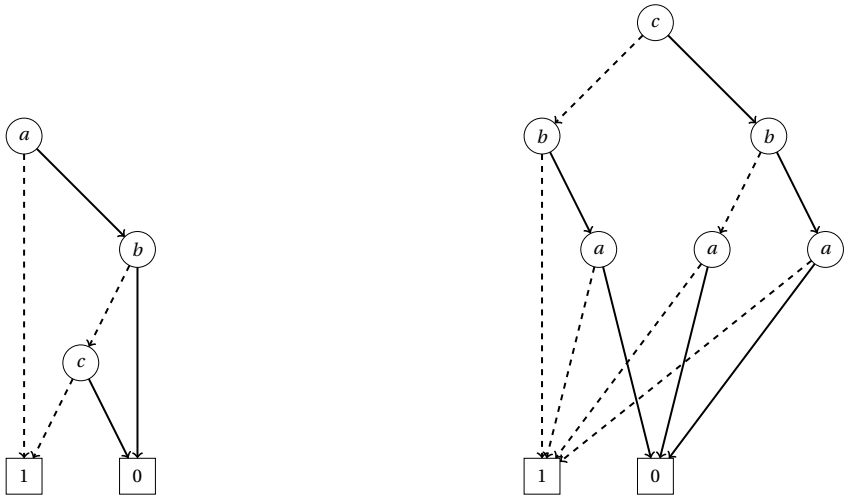
A implementação do ROBDD foi feita utilizando o `featsel`, um arcabouço orientado a objetos desenvolvido em C++ que permite, entre outras funcionalidades, implementar algoritmos que utilizam elementos de um reticulado Booleano. A classe ROBDD possui métodos que permitem mudar o espaço de busca representado e é definida pela raíz da árvore, um objeto da classe Vértice.

A classe Vértice possui uma estrutura que guarda um elemento do reticulado Booleano, para nós internos da árvore, ou um valor Booleano, para as folhas da árvore. Os elementos dos vértices são instâncias da classe ElementSubset do arcabouço `featsel`; os detalhes de implementação desta última podem ser encontradas em Reis [1]. Além disso, os vértices possuem duas referências para outros vértices permitindo a criação da árvore em si.

Para mudar a função que representa o espaço de busca atual no ROBDD, criamos o método *add_interval*, que recebe como parametro um elemento X e uma variável indicadora que decide qual intervalo será restrito, $[\emptyset, X]$ ou $[X, S]$. Neste método cria-se uma árvore



(a)



(b) (c)

Figura 1: exemplo do uso de ROBDDs para representar o espaço de busca corrente durante a execução do algoritmo `UCS`. Figura 1(a): árvore binária que representa um espaço de busca arbitrário; um arco sólido (pontilhado) representa que o elemento da ponta superior está (não está) presente no subconjunto considerado. Uma folha tem valor 1 se um subconjunto está fora do espaço de busca corrente e 0 caso contrário. Figura 1(b): ROBDD obtido através da redução da árvore de decisão binária da figura 1(a). Figura 1(c): ROBDD obtido através da redução de uma árvore de decisão binária cuja raiz é o elemento c ao invés de a; a redução dessa árvore produz um ROBDD com mais elementos do que o exibido na figura 1(b).

temporária que representa o intervalo adicionado e une-se a ela o ROBDD original. Para realizar a união entre a árvore que descreve o espaço de busca corrente e a árvore temporária, implementamos o algoritmo proposto por Bryant e Randal [3].

A partir destas classes e também de outras existentes no arcabouço, criamos vários algoritmos que utilizam ROBDDs para gerenciar o espaço de busca corrente: por exemplo, o `UCSR2`, que possui a mesma dinâmica que o algoritmo `UCS`, mas utiliza um ROBDD ao invés de duas listas de restrições. Também criamos os algoritmos `UCSR3, UCSR4, UCSR5` e `UCSR6` que, além do uso de ROBDDs, têm em comum o fato de utilizarem uma dinâmica simplificada da busca em produndidade, que será explicada a seguir.

2.3 Simplificação da busca em profundidade (*DFS*) feita pelo algoritmo original

O algoritmo `UCS` possui uma busca em profundidade complexa que depende do uso de estruturas de dados para grafos. Essas estruturas armazenam elementos já visitados do espaço de busca mas que ainda não podem definir a ponta de um intervalo a ser removido do espaço de busca, sob o risco de perder o mínimo global. Tal risco ocorre em situações onde ocorrem empates no custo de dois elementos adjacentes entre si na cadeia do reticulado [1]. Todavia, o uso desse grafo resulta num consumo alto tanto de memória quanto de processamento.

Todavia, em instâncias de problemas de interesse prático que podem ser modelados como um problema U-curve, empates de custo entre elementos adjacentes é uma situação que raramente ocorre. Ademais, nas instâncias "difíceis"que utilizamos para realizar os testes, para cada cadeia do reticulado, é possível a ocorrência de no máximo um empate entre elementos adjacentes. Chamamos essa situação de "empate simples". Por conta disso, passamos a inverstigar simplificações na busca em profundidade.

A primeira solução nova nos levou ao algoritmo `UCSR3`, que possui uma dinâmica bem parecida com a do UCS, porém sem guardar elementos visitados em um grafo, estratégia útilizada no `UCS` para determinar a sequência da busca em casos de empates. Neste novo algoritmo, no caso em que dois elementos $X \subset Y$ são adjacentes e possuem o mesmo custo, olhamos para um elemento $Z \subset X$ e se seu custo foi maior (menor) que o de X, restringimos o intervalo $[\emptyset, X]$ ($[X, S]$). O caso em que haja empate de custo entre Z e X (i.e., empate

entre três ou mais elementos adjacentes dois a dois) não é tratado neste algoritmo.

Ainda com a hipótese de que há no máximo empates simples, elaboramos uma outra dinâmica, presente nos algoritmos `UCSR4, UCSR5` e `UCSR6`. Nesta nova dinâmica fazemos um passeio pelo espaço de busca seguindo as seguintes regras, partindo de um elemento X do espaço de busca, com Y adjacente a X:

i. Se Y é adjacente superior (inferior) e tem custo menor que X, restringimos o intervalo $[\emptyset, X]$ ($[X, S]$) e passamos a avaliar Y;

ii. Se Y é adjacente superior (inferior) e tem custo maior que X, podemos restringir, ou não, como será discutido na próxima sessão, o intervalo $[Y, S]$ ($[\emptyset, Y]$);

iii. Se Y é adjacente superior (inferior) e tem custo igual a X não fazemos nada;

iv. Paramos quando não houverem mais elementos adjacentes a X.

No algoritmo `UCSR4`, dado um nó X e o conjunto de características $S = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$, o i-ésimo elemento adjacente a X visitado será Y_i tal que $(Y_i \cup X) \setminus (Y_i \cap X) = x_i$. Por exemplo, se $X = 00101$ então os vizinhos de X visitados (assumindo que todos serão visitados) serão, na ordem: 10101, 01101, 00001, 00111 e 00100. Note que, dependendo da composição de X, podemos visitar muitos elementos adjacentes superiores sem visitar nenhum elemento adjacente inferior, o que pode causar mais cálculos do que o necessário para visitar um elemento adjacente de menor custo.

Visando melhorar o percorrimento de elementos adjacentes, formulamos o `UCSR5`, que percorre os elementos adjacentes intercalando as visitas entre vizinhos superiores e inferiores, enquanto possível. Por exemplo, se $X = 00100$, uma possível sequência de vizinhos visitados (assumindo que todos serão visitados) é, na ordem: 10100, 00000, 00110, 01100 e 00101. Podemos ver na tabela 1, essa mudança no percorrimento de vizinhos trouxe melhorias no tempo de execução em relação ao `UCSR4`.

2.4 Ajuste entre tempo de execução e número de chamadas da função custo

Como vimos na seção 2.3, a nova dinâmica não especifica se devemos restringir um elemento Y adjacente a X e com custo maior. Se não restringirmos esse elemento corremos o risco de ter que recomputar seu custo, pois, diferentemente do `UCS`, os algoritmos `UCSR4`, `UCSR5` e `UCSR6` não possuem estrutura que guarda o custo dos elementos visitados. Porém, o elemento Y pode estar contido em algum intervalo que será restrito em futuras iterações, tornando desnecessário restringir Y logo no momento que o visitamos.

Portanto, temos um *tradeoff* entre atualizações do ROBDD e cálculo de função de custo. Uma atualização nas restrições implica na construção de um ROBDD temporário, que representa o novo intervalo restrito, e sua união com o ROBDD que representa as novas restrições. Como visto em Randal e Bryant [3], essa operação tem complexidade $O(|R_1| * |R_2|)$, em que $|R_1|$ e $|R_2|$ são as quantidades de nós das árvores que representam os ROBDDs atual e temporário, respectivamente. Por outro lado, não restringir um elemento de custo maior pode fazer com que calculemos o custo de um mesmo nó do reticulado mais de uma vez, o que, dependendo da função de custo, pode levar a um grande número de cálculos desnecessários.

Com o intuito de comparar as duas escolhas possíveis, desenvolvemos os algoritmos `UCSR5`, que não restringe todo elemento adjacente com custo maior visitado, e o `UCSR6`, que restringe esses elementos. Como podemos verificar na tabela 1 o algoritmo `UCSR5` teve desempenho em tempo um pouco melhor do que o `UCSR6`, que por sua vez teve menos cálculos da função custo, fato que podemos constatar na tabela 2.

2.5 Resultados dos primeiros experimentos

Para testar os primeiros algoritmos criados neste projeto, do `UCSR2` ao `UCSR6`, tendo como *benchmarking* os algoritmos `UCS` original e `ES`, utilizamos um programa em Perl que foi desenvolvido para esse fim. Nesse programa, diversas instâncias do problema de tamanho

$|S|$ foram geradas aleatóriamente a partir de reduções polinomiais do problema subset sum, que é NP-difícil [1]. Para cada instância e para cada algoritmo, o arcabouço `featsel` era chamado, guardando ao final da execução o tempo computacional que foi exigido e o número de chamadas da função custo. Os resultados foram então agrupados por tamanho de instância e tiveram suas médias calculadas. Nas tabelas 1 e 2 mostramos os resultados em termos de tempo e de número de chamadas da função custo, respectivamente..

Instância		Tempo (segundos)						
$\|S\|$	$2^{\|S\|}$	UCSR6	UCSR5	UCSR4	UCSR3	UCSR2	UCS	ES
1	2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	16	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
5	32	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
6	64	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
7	128	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01
8	256	0.02	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.02
9	512	0.04	0.05	0.04	0.04	0.06	0.07	0.04
10	1024	0.08	0.09	0.08	0.08	0.13	0.13	0.09
11	2048	0.14	0.15	0.14	0.16	0.27	0.27	0.18
12	4096	0.44	0.47	0.44	0.61	0.99	0.71	0.36
13	8192	0.70	0.74	0.75	1.25	2.03	1.44	0.73
14	16384	2.42	2.37	2.47	4.60	6.90	4.82	1.52
15	32768	3.27	3.23	3.17	6.94	11.07	7.06	3.11
16	65536	27.11	25.75	26.73	57.83	83.44	44.56	6.46
17	131072	61.17	56.54	56.64	142.34	174.26	108.07	13.49
18	262144	293.86	262.42	273.24	699.01	740.60	366.96	27.93
19	524288	645.57	578.95	589.50	1335.98	1632.08	907.94	58.80

Tabela 1: resultado de tempo dos testes dos algoritmos desenvolvidos neste projeto para instâncias difícieis do problema U-curve. Cada linha i representa o tempo médio obtido rodando cada algoritmo sobre 20 instâncias diferentes de tamanho 2^i.

Como podemos observar nas tabelas 1 e 2, o algoritmo `UCSR2` possui desempenho próximo ao `UCS`, provavelmente por apresentarem dinâmica muito similar entre si. Por conta do `UCS` ter um controle muito complicado, o `UCSR2` não teve bons resultados de tempo e foi mais lento que o `UCS` na maioria dos testes. Esse fato provavelmente se deu devido ao *overhead* trazido pelo uso do ROBDD para gerenciar o espaço de busca corrente; o mesmo aconteceu

Instância		Número de chamadas da função custo						
$\|S\|$	$2^{\|S\|}$	UCSR6	UCSR5	UCSR4	UCSR3	UCSR2	UCS	ES
1	2	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2
2	4	3.80	4.00	4.20	3.80	3.80	3.90	4
3	8	6.50	7.30	7.30	6.50	6.45	6.50	8
4	16	12.85	13.70	14.05	12.80	12.60	12.85	16
5	32	19.95	21.30	21.40	21.00	19.75	19.20	32
6	64	31.25	33.40	33.35	32.50	31.25	36.40	64
7	128	50.70	58.15	62.15	53.90	50.85	56.00	128
8	256	86.50	94.85	101.70	92.90	89.60	94.45	256
9	512	170.60	191.00	203.60	179.75	171.25	174.50	512
10	1024	273.75	322.25	336.75	286.10	272.70	280.05	1024
11	2048	425.15	500.40	532.10	440.80	430.90	441.20	2048
12	4096	1119.00	1271.80	1362.35	1121.55	1096.65	1077.45	4096
13	8192	1437.10	1637.35	1692.30	1524.75	1437.00	1412.90	8192
14	16384	2710.20	3203.10	3317.95	2874.50	2791.55	2702.25	16384
15	32768	3181.60	3522.90	3764.50	3251.45	3147.50	3088.65	32768
16	65536	9637.20	11544.65	11603.25	9923.35	9613.25	9380.85	65536
17	131072	10327.90	12122.05	12301.70	10680.95	10370.95	9962.50	131072
18	262144	21838.55	25847.15	26551.45	22676.30	21562.70	20920.90	262144
19	524288	27931.55	32460.70	34011.60	28795.00	27823.70	27099.90	524288

Tabela 2: resultado de número de chamadas da função custo dos testes dos algoritmos desenvolvidos neste projeto para instâncias difícieis do problema U-curve. Cada linha i representa o número médio de chamadas da função custo obtido rodando cada algoritmo sobre 20 instâncias diferentes de tamanho 2^i.

com o algoritmo `UCSR3`, que continuando com uma dinâmica muito parecida com o `UCS`, foi melhor apenas do que o `UCSR2`, provavelmente porque o primeiro dispensa o uso do grafo para controlar os elementos visitados na busca em profundidade. O primeiro algoritmo que apresentou melhores resultados de tempo que o `UCS` foi o algoritmo `UCSR4`; porém, como foi apresentado na seção 2.3, esse algoritmo tinha possibilidades evidentes de melhorias. Ao aplicarmos a primeira dessas melhorias, criando o algoritmo `UCSR5`, obtivemos o melhor consumo de tempo entre os algoritmos desenvolvidos nesse projeto; porém, `UCSR5` calcula muitas vezes a função custo. Como apresentamos na seção 2.4, `UCSR6` possui desempenho de tempo um pouco pior do que o `UCSR5`, mas calcula menos vezes a função custo; portanto, `UCSR6` pode ser considerado o melhor algoritmo desenvolvido até esta etapa do projeto.

2.6 Implementação de ROBDDs com reordenação de variáveis

Nesta etapa do trabalho, exploramos o melhoramento no desempenho, do ponto de vista de tempo computacional, que a utilização de reordenação sobre o ROBDD potencialmente traria para os diversos algoritmos desenvolvidos até então neste projeto. Os algoritmos `UCSR2` até `UCSR6` utilizaram todos uma mesma ordem fixa de variáveis para a construção do ROBDD e, como podemos observar na figura 1, a reordenação das variáveis de um ROBDD pode diminuir drasticamente a cardinalidade de tal árvore. Decidimos então implementar uma reordenação periódica das variáveis do ROBDD a fim de reduzir o tamanho da árvore e tornar mais eficiente a manipulação do espaço de busca. Iniciamos pelo estudo de Algoritmos Genéticos, a técnica escolhida para realizar a reordenação. Em seguida, descrevemos os princípios de uma implementação de algoritmo genético; esses princípios foram utilizados para desenhar no arcabouço `featsel` o algoritmo `UCSR7`. Por fim, mostramos os resultados obtidos com o `UCSR7` em um *benchmarking* contra os melhores algoritmos desenvolvidos até então neste projeto.

2.6.1 Estudo de Algoritmos Genéticos

O problema de escolher uma boa ordenação para um ROBDD é, também, um problema de otimização, e foi provado que o mesmo é NP-difícil [9]. Portanto, sua resolução ótima não é viável, pois comprometeria a escalabilidade do nosso problema original. Dessa forma, optamos pela implementação de uma heurística, que fornece uma solução subótima em um tempo computacional factível; a heurística escolhida é baseada na ideia de algoritmos genéticos.

Um algoritmo genético simula o fenômeno da seleção natural para resolver problemas de otimização. Consideremos o problema de otimização a seguir:

$$\begin{aligned} \text{maximizar} \quad & c(x), \\ \text{sujeito a} \quad & x \in \mathcal{X} \text{ (espaço de busca).} \end{aligned}$$

Então, diremos que uma solução $y \in \mathcal{X}$ é um indivíduo e a função c, chamada função de aptidão (*fitness function*), definirá o quão apto o indivíduo y está para sobreviver e se

reproduzir no ambiente. Além disso, chamaremos um conjunto $H \subseteq \mathcal{X}$ de população. No caso específico do problema da reordenação do ROBDD, temos que um indivíduo $x \in \mathcal{X}$ é uma permutação das variáveis, $x_1, ..., x_n$ do problema U-Curve, e que a função c será escolhida de tal que indivíduos que resultem em um ROBDD maior tem menor valor aplicados a c.

Podemos dividir o algoritmo genético em três etapas: inicialização, interação entre indivíduos e término. Na etapa de inicialização, construímos uma população aleatoriamente, com um tamanho pré-definido. A fase de interação entre indivíduos é quando ocorre a simulação de um ambiente real, e fazemos isso aplicando a população operações de seleção, reprodução e mutação, gerando novas gerações de indivíduos (populações). Terminamos o algoritmo de acordo com uma condição pré-definida, e teremos como resposta o indivíduo da ultima geração com melhor valor de aptidão.

2.6.2 Implementação de Algoritmos Genéticos para reordenação de ROBDDs

O primeiro passo para implementar a reodenação da árvore foi atualizar a classe ROBDD adaptando seus métodos para trabalhar independentemente da ordem das variáveis, e também, criar métodos e estruturas que pudessem modificar e armazenar a ordem efetiva do ROBDD. Depois que concluímos as modificações necessárias à classe ROBDD, criamos mais duas classes: GeneticOrdering e OrderingNode, responsáveis, respectivamente, por controlar o algoritmo genético em si e suas respectivas soluções.

Inicialização e Função de Aptidão (*Fitness*). Na etapa de inicialização, construímos um conjunto de indivíduos aleatoriamente. Um indivíduo x solução do problema de reordenação é uma permutação das variáveis $x_1, ..., x_n$ do problema U-Curve, e possui um valor $\mathcal{F}(x)$, no qual $\mathcal{F}$ é a função de aptidão. Como já foi citado, buscamos uma função de fitness que leve ordenações boas a terem maiores valores do que ordenações ruins. Seja $R(x)$ um ROBDD qualquer representado com uma ordenação x de variáveis, e seja $|R(x)|$ o tamanho de um ROBDD; a função escolhida é tal que $\mathcal{F} = |R(x)|^{-1}$.

Indivíduo 1:	abcd.efgh
Indivíduo 2:	eacb.dfgh
Resultado do *crossover*:	abc**d**.**d**fgh

Figura 2: Exemplo de um *crossover* de indivíduos que representam soluções para o problema de reordenação de um ROBDD em que duas soluções viáveis levam a uma solução inviável do problema, já que o indivíduo resultante não é uma permutação das variáveis, uma vez que o mesmo tem uma repetição da variável d e não conta com a variável e. O ponto representa a localização do DNA que foi escolhida para que ocorra o *crossover*.

Seleção. Na fase de seleção escolhemos aleatoriamente indivíduos da população para se reproduzirem. Diferente da escolha de indivíduos da população inicial, em que ocorre uma escolha aleatória e uniforme de indivíduos, na seleção ocorre uma escolha aleatória com uma distribuição de probabilidade que, para cada indivíduo x, atribui uma probabilidade de seleção que depende de $\mathcal{F}(x)$. O método utilizado para implementação da seleção é chamado Método da Roleta [10].

Iniciamos o método somando o valor de todas as soluções, $\overline{\mathcal{F}} = \sum \mathcal{F}(x), x \in \mathcal{X}$ (população atual). Depois, calculamos a probabilidade de cada solução ser escolhida para seleção, $p(x) = \dfrac{\mathcal{F}(x)}{\overline{\mathcal{F}}}$, e também uma probabilidade acumulada para cada solução. Agora, basta gerar números aleatórios entre 0 e 1 e selecionar o primeiro indivíduo com probabilidade acumulada maior do que o número gerado.

Reprodução (*Crossover*). Na fase de reprodução tomamos dois indivíduos selecionados e fazemos uma troca em seu material genético, que no caso do nosso problema é a sequência de variáveis que solução representa para o ROBDD. Em seres vivos, um *crossover* é determinado por um ou mais pontos do DNA dos indivíduos que dividem o código genético em pedaços que podem ser trocados entre os indivíduos gerando um novo DNA. Esse procedimento não pode ser implementado em nosso problema, pois poderia nos levar a sequências de variáveis com repetições, soluções inviáveis para o problema (figura 2).

Para contornar este problema, implementamos o "Alternating Crossover"como descrito por Baier e Lenders [10] (figura 3).

Indivíduo 1:	abcd.efgh
Indivíduo 2:	dgaf.hceb
Resultado do crossover:	adbg.cfeh

Figura 3: Exemplo de uma operação "Alternating Crossover".

2.6.3 Resultados dos experimentos com reordenação de ROBDDs

Após concluirmos a implementação do algoritmo genético para reordenação do ROBDD, criamos o algoritmo `UCSR7` que utiliza a nova implementação de ROBDD e, consequentemente faz operações de reordenação no ROBDD que representa o espaço de busca atual. As reordenações são controladas por um parâmetro que determina em quantas vezes gostaríamos que uma reordenação fosse feita. Para testar o `UCSR7` utilizamos o mesmo programa em Perl empregado nos experimentos descritos na seção 2.5, com algumas poucas modificações.

Ao executar os primeiros testes, constatamos que o parâmetro para reordenação não funcionava corretamente. Pelo fato do algoritmo ser estocástico, é difícil prever quantas atualizações serão feitas no ROBDD e, consequentemente, é difícil reordenar o ROBDD em intervalos de tempos iguais e pré-determinados. Para tentar contornar esse problema, recolhemos amostras de tamnho de instâncias e a quantidade de atualizações necessárias para resolver essas instâncias para, através de redução polinomial, criarmos um polinônimo que decida a cada quantos passos devemos fazer uma reordenação. Essa abordagem mitigou o problema, embora não o tenha resolvido de forma plenamente satisfatória.

Como podemos ver na tabela 3, o algoritmo `UCSR7` apresentou resultados muito piores do que o `UCSR6`. Vale observar que no algoritmo genético precisamos calcular o *fitness* de indivíduos várias vezes para todas as gerações. Essa operação de cálculo de *fitness* envolve, dado o ROBDD que precisamos reordenar e todas as suas atualizações recebidas, recalcular do zero um ROBDD com nova ordenação, ou seja, refazemos todo o esforço de atualização e redução de ROBDD de novo, para cada um dos indivíduos.

Instância		Tempo de execução em segundos			
$\|S\|$	$2^{\|S\|}$	UCSR7	UCSR6	UCSR5	ES
1	2	0.00	0.00	0.00	0.00
2	4	0.00	0.00	0.00	0.00
3	8	0.01	0.00	0.00	0.00
4	16	0.03	0.00	0.00	0.00
5	32	0.11	0.01	0.01	0.00
6	64	0.29	0.01	0.01	0.01
7	128	1.12	0.01	0.01	0.01
8	256	1.87	0.02	0.02	0.02
9	512	10.51	0.04	0.05	0.04
10	1024	14.49	0.06	0.06	0.08

Tabela 3: Resultado para o tempo de execução dos algoritmos desenvolvidos. Neste teste, o algoritmo `UCSR7` foi executado com parâmetro de reordenação igual a 50, o que resultou entre 2 e 3 reordenações por execução do algoritmo.

3 Conclusão

Neste projeto, avaliamos o uso de diagramas de decisão binária reduzidos e ordenados (ROBDDs) como alternativa de estrutura de dados a listas duplamente encadeadas para controlar o espaço de busca já percorrido pelo algoritmo U-Curve-Search (`UCS`). Este algoritmo era, até então, a melhor solução conhecida para o problema de otimização U-curve. Todavia, o mesmo sofria de problemas de escalabilidade, em parte devido ao uso de listas duplamente encadeadas para gerenciar o espaço de busca corrente.

Dessa forma, desenvolvemos o algoritmo `UCSR`, assim como algumas variantes do mesmo, que utiliza um ROBDD para gerenciar o espaço de busca corrente durante a resolução de uma instância do problema U-curve. Implementamos todos os algoritmos projetados no arcabouço `featsel`, comparando desempenho dos mesmos contra uma implementação da busca exaustiva e o próprio algoritmo `UCS` original. Tais experimentos mostraram que algumas dos algoritmos implementados foram mais competitivos do que `UCS`, especialmente o algoritmo `UCSR6`.

Também iniciamos investigações sobre o uso de reordenações das variáveis de um ROBDD que gerencia o espaço de busca corrente. Utilizando Algoritmos Genéticos como heurística, implementamos reordenação de variáveis em ROBDD através do algoritmo `UCSR7`. Apesar dos resultados terem ficado aquém dos obtidos com o algoritmo `UCSR6`, acreditamos que com mais estudos a reordenação do ROBDD poderá trazer bons resultados; por exemplo, melhoramentos podem vir de testes de diferentes variações do algoritmo `UCSR7`, ou então de métodos mais eficientes para reordenação que não impliquem em uma reconstrução total do ROBDD, usando por exemplo técnicas de *sifting* [10].

Outras possibilidades futuras nesta linha de pesquisa incluem testar os algoritmos desenvolvidos neste projeto em instâncias de interesse prático, por exemplo na etapa de seleção de características durante o projeto de W-operadores.

Referências

[1] Reis, Marcelo S. "Minimization of decomposable in U-shaped curves functions defined on poset chains–algorithms and applications."PhD thesis, Institute of Mathematics and Statistics, University of São Paulo, Brazil, (2012).

[2] Reis, Marcelo S., Carlos E. Ferreira, and Junior Barrera. "The U-curve optimization problem: improvements on the original algorithm and time complexity analysis."arXiv preprint arXiv:1407.6067, (2014).

[3] Bryant, Randal E. "Graph-based algorithms for boolean function manipulation."IEEE Transactions on Computers, 100.8 (1986): 677-691.

[4] Brace, Karl S., Richard L. Rudell, and Randal E. Bryant. "Efficient implementation of a BDD package."Proceedings of the 27th ACM/IEEE design automation conference, (1991).

[5] Rice, Michael and Sanjay Kulhari. “A survey of static variable ordering heuristics for efficient BDD/MDD construction.”University of California, Tech. Rep., (2008).

[6] Bollig, Beate and Wegener, Ingo. “Improving the variable ordering of OBDDs is NP-complete.”IEEE Transactions on Computers, 45.9 (1996): 993–1002.

[7] Rehan, Sanisha and Bansal, Manu. “Performance Comparison among different Evolutionary Algorithms in terms of Node Count Reduction in BDDs.”International Journal of VLSI and Embedded Systems, (2013) 491–496.

[8] Mathew, Tom V. “Genetic algorithm.”Department of Civil Engineering, Indian Institute of Technology, Bombaym (2005).

[9] Bollig, Beate and Wegener, Ingo. “Improving the Variable Ordering of OBDDs Is NP-complete.”IEEE TRANSACTIONS ON COMPUTERS, VOL. 45, NO. 9, SEPTEMBER 1996

[10] Lenders, Wolfgang and Baier, Christel. “Genetic Algorithms for the Variable Ordering Problem of Binary Decision Diagrams.”University of Bonn, Bonn, Germany.