

Projeto de Algoritmos Baseados em Florestas de Posets para o Problema de Otimização U-curve

MONOGRAFIA APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
APROVAÇÃO EM MAC499 – TRABALHO
DE
CONCLUSÃO DE CURSO

Aluno: Gustavo Estrela de Matos

Orientador: Marcelo da Silva Reis

Centro de Toxinas, Resposta-imune e Sinalização Celular (CeTICS)

Laboratório Especial de Ciclo Celular, Instituto Butantan

São Paulo, 27 de Novembro de 2017

Resumo

O problema U-curve é uma formulação de um problema de otimização que pode ser utilizado na etapa de seleção de características em Aprendizado de Máquina, com aplicações em desenho de modelos computacionais de sistemas biológicos. Não obstante, soluções propostas até o presente momento para atacar esse problema têm limitações do ponto de vista de consumo de tempo computacional e/ou de memória, o que implica na necessidade do desenvolvimento de novos algoritmos. Nesse sentido, em 2012 foi proposto o algoritmo Poset-Forest-Search (PFS), que organiza o espaço de busca em florestas de posets. Esse algoritmo foi implementado e testado, com resultados promissores; todavia, novos melhoramentos são necessários para que o PFS se torne uma alternativa competitiva para resolver o problema U-curve. Neste projeto propomos a construção de uma versão paralelizada e escalável do algoritmo PFS, utilizando diagramas de decisão binária reduzidos e ordenados. Além disso, propomos a criação de um novo algoritmo para o problema U-curve que se baseia na estratégia de divisão e conquista para particionar o espaço e achar a solução do problema de forma paralela. Os algoritmos desenvolvidos serão implementados e testados em instâncias artificiais e também em conjuntos de dados próprios para experimentos comparativos entre diferentes algoritmos de seleção de características.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Objetivos do Trabalho	3
1.2	Organização do Trabalho	3
2	Conceitos Fundamentais	5
2.1	O problema de seleção de características	5
2.2	Funções de custo	5
2.3	O problema U-curve	7
2.4	Funções de custo artificiais	7
2.4.1	Soma de subconjuntos	8
2.4.2	Violação da curva U	9
3	Melhoramentos no algoritmo Poset-Forest-Search (PFS)	10
3.1	Descrição do algoritmo	10
3.1.1	O caso simples: o algoritmo U-curve-Branch-and-Bound (UBB)	10
3.1.2	Princípios de funcionamento do algoritmo PFS	12
3.1.3	Pseudo-código e detalhes de implementação do PFS	15
3.2	Melhoramentos na escolha de raiz	20
3.2.1	Escolha equiprovável	20
3.2.2	Escolha de maior árvore	21
3.2.3	Experimentos com instâncias artificiais	21
3.2.4	Comentários sobre experimentos	23
3.3	Melhoramentos no controle de raízes	23
3.3.1	Escolha de raiz	23
3.3.2	Testes com instâncias artificiais	24
3.4	Paralelização do código	25
3.4.1	Testes com instâncias artificiais	27
3.4.2	Comentários sobre experimentos	28
3.5	O algoritmo UBB-PFS	28
3.5.1	Descrição	28
3.5.2	Paralelização	30
3.5.3	Experimentos com instâncias artificiais	30
3.5.4	Comentários sobre os experimentos	31
4	O algoritmo Parallel-U-Curve-Search (PUCS)	33
4.1	Princípios teóricos do algoritmo	33
4.2	Dinâmica do algoritmo	34
4.2.1	Condições de poda	34
4.2.2	Passeio aleatório no reticulado externo	36

4.2.3	Solução das partes	37
4.3	Parâmetros de funcionamento	37
4.4	Implementação do algoritmo	40
4.4.1	Controle do espaço de busca	40
4.4.2	Paralelização do código	40
4.5	Ajuste de parâmetros	41
4.6	Experimentos com instâncias artificiais	43
4.6.1	Experimentos ótimos	43
4.6.2	Experimentos sub-ótimos	43
4.6.3	Comentários sobre os experimentos	45
5	Exemplos de aplicação em aprendizado de máquina	46
5.1	Seleção de características em aprendizado de máquina	46
5.2	Support Vector Machine com kernel linear	47
5.3	Validação de modelos	47
5.4	Experimentos com problemas de classificação	47
5.4.1	Descrição dos conjuntos de dados	48
5.4.2	Resultados	49
6	Conclusão	50
6.1	Revisão do trabalho	50
6.2	Trabalhos futuros	51

Capítulo 1

Introdução

Seleção de características é uma técnica que pode ser utilizada em uma das etapas da construção de um modelo de aprendizado de máquina. Ela consiste em, dado o conjunto de características observadas nas amostras, escolher um subconjunto que seja ótimo de acordo com alguma métrica. Devemos considerar o uso de seleção de características quando a quantidade de características é muito grande, o que pode tornar o uso do modelo muito caro do ponto de vista computacional. Outra aplicação dessa técnica é em situações nas quais a quantidade de amostras é pequena comparada à complexidade do modelo original, em outras palavras, quando ocorre sobreajuste (do inglês, *overfitting*).

Mais formalmente, o problema de seleção de características consiste em um problema de otimização combinatória em que, dado um conjunto S de características, procuramos por um subconjunto $X \in \mathcal{P}(S)$ ótimo de acordo com uma função de custo $c : \mathcal{P}(S) \rightarrow \mathbb{R}_+$. É comum nas abordagens do problema explorar o fato de que o espaço de busca $\mathcal{P}(S)$ junto a relação \subseteq define um reticulado Booleano [Rei12; AG+18]. No geral, a função de custo c deve ser capaz de medir quão informativas as características X são em respeito ao rótulo Y do problema de aprendizado; portanto c costuma depender da estimação da distribuição de probabilidade conjunta de (X, Y) .

Quando ocorre a estimação da distribuição de probabilidade conjunta de (X, Y) , o custo das cadeias do reticulado Booleano reproduzem um fenômeno conhecido em aprendizado de máquina, o das “curvas em U”. Para entender intuitivamente esse fenômeno, devemos observar que conforme subimos uma cadeia do reticulado estamos aumentando o número de características sendo consideradas, portanto existem mais possíveis valores de X , permitindo descrever melhor os valores de Y ; por outro lado, também precisaríamos de mais amostras para estimar bem $\mathbb{P}(X, Y)$, e, quando isso não é possível, erros de estimação fazem com que $c(X)$, isto é, o custo de X , aumente.

Podemos então considerar um caso particular do problema de seleção de características em que a função de custo descreve “curvas em U” em todas as cadeias do reticulado Booleano. Esse caso particular é conhecido como problema U-curve e existem na literatura algoritmos ótimos para esse problema como o **U-Curve Branch and Bound (UBB)**, **U-Curve-Search (UCS)** e **Poset Forest Search (PFS)** [RFB14; Rei12]. A solução do problema U-curve tem aplicações em problemas de aprendizado de máquina tais como como projeto de W-operadores [JCJB04] e preditores na estimação de Redes Gênicas Probabilísticas [Bar+07].

O problema U-Curve é NP-difícil [Rei12]; por conta deste fato, os algoritmos apresentados até então na literatura têm limitações tanto do ponto de vista de tempo de computação quanto do uso de memória. Dentre estes algoritmos, destacamos o PFS, que foi criado como um melhoramento do algoritmo UBB.

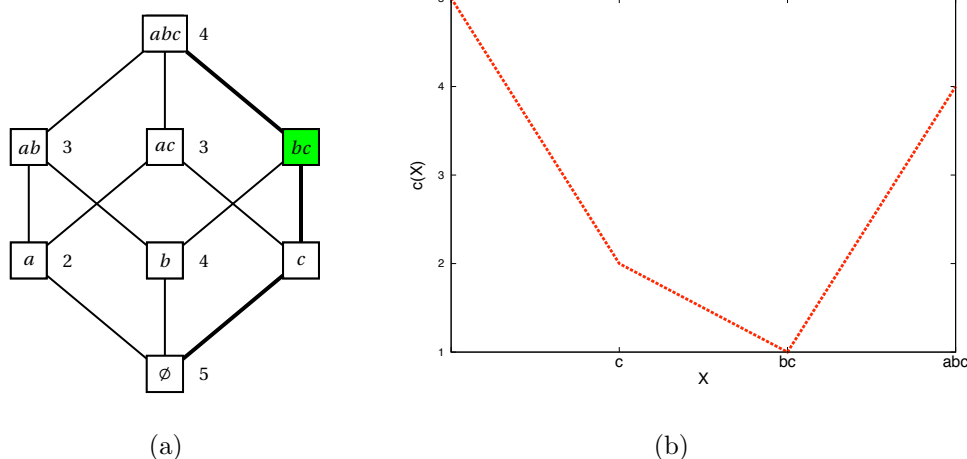


Figura 1.1: Exemplo de instância do problema U-curve em que o conjunto de características é $S = \{a, b, c\}$. A figura 1.1(a) representa o diagrama de Hasse do reticulado Booleano $(\mathcal{P}(S), \subseteq)$, anotando ao lado de cada conjunto de características o seu custo. Os custos dos elementos da cadeia $\{\emptyset, c, bc, abc\}$, marcada em negrito, são apresentados na figura 1.1(b). O subconjunto $\{b, c\}$, marcado em verde, tem custo mínimo na cadeia em negrito e também no reticulado inteiro e, portanto é a solução ótima para esta instância. Imagem retirada de [Rei12] com permissão do autor.

O UBB é um algoritmo *branch-and-bound* que, a partir de uma enumeração, representa o espaço de busca como uma árvore e procura pelo mínimo global fazendo uma espécie de busca em profundidade que percorre as cadeias da árvore do espaço de busca, podando nós (e consequentemente seus descendentes) sempre que a função de custo cresce. Este algoritmo é unidirecional no sentido de que a busca em profundidade percorre as cadeias da árvore de baixo para cima, portanto se o custo dos elementos de uma cadeia nunca crescem então todos elementos desta serão visitados. A limitação deste algoritmo é evidente quando a função de custo usada é monótona não-crescente, pois isto implica que a condição de poda nunca será verdadeira, fazendo com que todo o espaço de busca seja percorrido.

O algoritmo PFS contorna esta limitação porque é bidirecional. Para fazer isto, ele precisa representar o espaço de busca de duas maneiras diferentes: uma que é similar ao que o UBB faz, para os percorrimentos de baixo para cima, e outra que deve ser uma representação equivalente a primeira para o reticulado Booleano dual $(\mathcal{P}(S), \supseteq)$, para os percorrimentos de cima para baixo; ambas representações são feitas com florestas de posets, em uma estrutura de dados capaz de armazenar raízes e adjacências dos nós. Uma iteração do PFS é constituída das seguintes etapas: escolha de uma direção de percorrimento; escolha de uma raiz na floresta escolhida; ramificação (percorrimento de uma cadeia); poda na floresta escolhida; e por último, atualização da floresta dual a escolhida para que ambas representem o mesmo espaço de busca.

Existem pontos do algoritmo PFS que ainda não foram explorados com o intuito de melhorar seu desempenho. Dentre eles, a escolha de raízes para etapa de ramificação, que é feita de maneira arbitrária atualmente; o uso de outras estruturas de dados para representação das florestas, como por exemplo diagramas de decisão binárias ordenados (*Ordered Binary Decision Diagrams* - OBDDs) [Bry86]; e também a paralelização do código, o que parece trazer ganhos no tempo de execução do algoritmo dado que, como as árvores do espaço de busca são disjuntas, a etapa de ramificação pode ser realizada de maneira paralela com pouca informação compartilhada entre threads.

1.1 Objetivos do Trabalho

Podemos dividir os objetivos deste trabalho em objetivos gerais e específicos.

Objetivos gerais:

1. Criar algoritmos para o problema U-curve que sejam mais eficientes em consumo de tempo e/ou de memória do que as presentes soluções;
2. Verificar a qualidade das soluções encontradas no desenvolvimento de modelos de Aprendizado Computacional.

Objetivos específicos:

- Estudar o algoritmo `Poset Forest Search` (PFS);
- Modificar a etapa de ramificação do algoritmo PFS e avaliar as mudanças na dinâmica do algoritmo;
- Paralelizar o algoritmo PFS, com as modificações feitas na etapa de ramificação (se houver melhorias com tal mudança);
- Criar um novo algoritmo, de natureza paralela e facilmente combinável com outros algoritmos, para o problema U-Curve (o algoritmo PUCS);
- Avaliar o consumo de recursos computacionais dos algoritmos criados, comparando com os algoritmos já presentes na literatura como o UBB;
- Avaliar os conjuntos de características selecionados por cada algoritmo na seleção de modelos de aprendizado computacional, usando como exemplo conjuntos de dados do repositório UCI Machine Learning Repository.

1.2 Organização do Trabalho

Além deste capítulo, de introdução, este trabalho é organizado em outros cinco capítulos, que são os seguintes:

- Capítulo 2: faremos uma revisão dos conceitos fundamentais para desenvolvimento deste trabalho. Definiremos o problema de seleção de características e mostraremos uma função de custo baseada em entropia para o mesmo. Explicaremos o fenômeno das curvas em U em funções de custo utilizadas na seleção de características e definiremos o problema de otimização U-curve. Por fim, apresentaremos funções de custo usadas na criação de instâncias artificiais do problema U-Curve.
- Capítulo 3: descreveremos dois algoritmos ótimos para o problema U-curve, o `U-curve-Branch-and-Bound` (UBB) e um algoritmo semelhante e mais geral, o `Poset-Forest-Search` (PFS). Em seguida, apresentaremos modificações no PFS a fim de melhorar seu desempenho. Além disso, vamos mostrar um novo algoritmo baseado nos dois últimos que permite fácil paralelização. Faremos testes com estas modificações e novos algoritmos com instâncias artificiais do problema U-curve.

- Capítulo 4: apresentaremos o **Parallel-U-Curve-Search**, um algoritmo de divisão em conquista paralelizado para o problema U-curve. Mostraremos seu funcionamento e testaremos seu desempenho em instâncias artificiais do problema U-curve.
- Capítulo 5 aplicaremos a seleção de características na seleção de modelos de aprendizado computacional. Os modelos criados serão treinados e validados com conjuntos de dados reais de aprendizado de máquina, disponíveis no repositório UCI Machine Learning Repository.
- Capítulo 6 revisaremos o conteúdo deste trabalho, mostrando as diferentes abordagens feitas para enfrentar o problema U-curve assim como os resultados obtidos. Além disso, mostraremos possíveis linhas que podem ser tomadas em trabalhos futuros que se relacionam com este.

Capítulo 2

Conceitos Fundamentais

2.1 O problema de seleção de características

A seleção de características é um problema de otimização combinatória em que procuramos o melhor subconjunto de um conjunto de características S . O espaço de busca desse problema é o conjunto potência de S , $\mathcal{P}(S)$, que é a coleção de todos os subconjuntos possíveis de S . A função de custo desse problema é uma função $c : \mathcal{P}(S) \rightarrow \mathbb{R}_+$.

Definição 2.1.1 (Problema de seleção de características). *Seja S um conjunto de características, finito e não vazio, e c uma função de custo. Encontrar $X \in \mathcal{P}(S)$ tal que $c(X) \leq c(Y)$, $\forall Y \in \mathcal{P}(S)$.*

O espaço de busca do problema de seleção de características possui uma relação de ordem parcial definida pela relação \subseteq , portanto este conjunto é **parcialmente ordenado (poset)**.

Definição 2.1.2. *Uma **cadeia** do reticulado booleano é uma sequência X_1, X_2, \dots, X_l tal que $X_1 \subseteq X_2 \subseteq \dots \subseteq X_l$.*

2.2 Funções de custo

A função de custo utilizada na solução do problema deve, de alguma forma, refletir a qualidade do conjunto de características avaliado. Por isso, diferentes aplicações de seleção de características podem ter diferentes funções de custo. No contexto de aprendizado de máquina, uma possível função de custo é a entropia condicional média (MCE), que já foi utilizada por exemplo na construção de W-operadores [DMJ06].

Definição 2.2.1. *Dado um problema de aprendizado em que Y é o conjunto de possíveis rótulos e $W = (w_1, \dots, w_n)$, com $w_i \in A_i$, é o conjunto de variáveis. Seja $W' = (w_{I(1)}, w_{I(2)}, \dots, w_{I(k)})$ um conjunto de variáveis (características) escolhidas, \mathbf{X} uma vetor aleatório de tamanho k com $X_j \in A_{I(j)}$, e $\log 0 = 0$. Então, a **entropia condicional** de Y dado $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ é:*

$$H(Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}) = - \sum_{y \in Y} \mathbb{P}(Y = y|\mathbf{X} = \mathbf{x}) \log \mathbb{P}(Y = y|\mathbf{X} = \mathbf{x}).$$

Definição 2.2.2. *Sob o mesmo contexto definido em 2.2.1, definimos a **entropia condicional média** como:*

$$\mathbb{E}[H(Y|\mathbf{X})] = \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} H(Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}) \mathbb{P}(\mathbf{X} = \mathbf{x}).$$

A função H , em teoria da informação, mede o inverso da quantidade média de informação que uma variável tem. Esta função atinge valor máximo quando a distribuição de probabilidade da variável aleatória em questão é uniforme (todos valores que ela pode assumir são equiprováveis), e tem valores baixos quando essa distribuição é concentrada.

Problemas de aprendizado em que os rótulos tem uma distribuição concentrada são mais fáceis do que os problemas em que essa distribuição é menos concentrada. Tome como exemplo o problema de classificar o lançamento de uma moeda \mathbf{x} em y (cara ou coroa); se toda moeda \mathbf{x} é não viciada, então a distribuição de $\mathbb{P}(y|\mathbf{x})$ é pouco concentrada, por outro lado, quando a moeda é viciada, a distribuição de $\mathbb{P}(y|\mathbf{x})$ é concentrada e é mais fácil classificar este problema. Em termos mais formais, o erro do melhor classificador do problema mais fácil é menor do que o erro do melhor classificador do problema mais difícil.

Portanto, como a função H é capaz de medir a concentração da distribuição de Y dado $\mathbf{X} = \mathbf{x}$, e quanto maior esta concentração mais fácil é o modelo de aprendizado, podemos dizer que a função de custo $\mathbb{E}[H(Y|\mathbf{X})]$ pode representar a qualidade do modelo de classificação que usa o conjunto de características de \mathbf{X} .

Agora, como já entendemos o funcionamento da função de custo MCE e como ela se relaciona com a qualidade do conjunto de características avaliado, vamos entender o que acontece no modelo de aprendizado e na função de custo que usamos como exemplo quando percorremos uma cadeia do reticulado.

Uma cadeia do poset pode ser vista como uma sequência de possíveis escolhas de conjuntos de características ao qual a cada passo adicionamos uma característica. Isso significa que a cada passo dado a variável \mathbf{x} ganha uma componente a mais. Quando estamos no início da cadeia, poucas variáveis do problema são consideradas, portanto há uma grande abstração dos dados dos objetos sendo classificados, e conforme subimos uma cadeia, diminuimos a abstração dos dados e isso faz com que a distribuição de Y dado \mathbf{x} se concentre.

Essa concentração da distribuição da probabilidade indica que o custo dos subconjuntos deve diminuir conforme subimos por uma cadeia do reticulado, e este raciocínio nos leva a pensar que adicionar características sempre melhora a classificação; de fato, o valor de $\mathbb{E}[H(Y|\mathbf{X})]$ deve diminuir (até algum ponto de saturação) conforme aumentamos o número de variáveis do problema. Mas se isso é verdade, por que fazemos seleção de características? A inconsistência entre esse raciocínio e a motivação para seleção de característica é que essa linha de raciocínio negligenciou o fato de que problemas de classificação (supervisionada) dependem de uma amostra da distribuição de Y dado $\mathbf{X} = \mathbf{x}$, ou seja, não sabemos nem ao menos calcular $H(Y|\mathbf{X} = \mathbf{x})$, podemos apenas estimar o seu valor a partir da amostra.

A amostra da distribuição de Y dado $\mathbf{X} = \mathbf{x}$ é obtida do conjunto de treinamento do problema de aprendizado e quando o número de amostras não é grande o suficiente a qualidade do classificador é comprometida. Além disso, o número de amostras necessárias deve crescer conforme aumentamos a complexidade do modelo de aprendizado utilizado. Considerando que quando subimos uma cadeia do reticulado booleano estamos aumentando a complexidade do modelo, temos que, a partir de um certo ponto, a qualidade do classificador que utiliza tal conjunto de características deve piorar.

Portanto, é esperado que a função de custo descreva um formato de U nas cadeias do reticulado. No começo da cadeia, o custo deve diminuir por conta da maior granularidade dos dados de entrada, até algum ponto onde a limitação no número de amostras combinada com o aumento da complexidade do modelo causem erros de estimação que aumentam o erro do classificador criado em tal modelo.

No cálculo da entropia condicional média, o efeito do aumento da complexidade de \mathbf{X} é a estimação ruim de $\mathbb{P}(Y = y|\mathbf{X} = \mathbf{x})$. Contorna-se este problema modificando a entropia

condicional média para penalizar a entropia de Y quando \mathbf{x} foi observado poucas vezes. A função de custo utilizada é, então:

$$\mathbb{E}[H(Y|\mathbf{X})] = \frac{N}{t} \sum_{\mathbf{x} \in \mathbf{X}} H(Y|\mathbf{X} = \mathbf{x}) \mathbb{P}(\mathbf{X} = \mathbf{x}). \quad (2.1)$$

2.3 O problema U-curve

A função de custo apresentada na seção 2.2 descrevem curvas que tem um formato em U (a menos de oscilações) nas cadeias do reticulado booleano, vamos definir esta propriedade agora.

Definição 2.3.1. *Uma cadeia é dita **maximal** se não existe outra cadeia no reticulado que contenha propriamente esta cadeia.*

Definição 2.3.2. *Uma função de custo c é dita **decomponível em curvas U** se para toda cadeia maximal X_1, \dots, X_l , $c(X_j) \leq \max\{c(X_i), c(X_k)\}$ sempre que $X_i \subseteq X_j \subseteq X_k$, $i, j, k \in \{1, \dots, l\}$.*

Vamos considerar então o problema de seleção de características em que a função de custo utilizada é decomponível em curvas U. Este é o problema central deste trabalho.

Definição 2.3.3 (Problema U-Curve). *Dados um conjunto finito e não-vazio S e uma função de custo c decomponível em curvas em U , encontrar um subconjunto $X \in \mathcal{P}(S)$ tal que $c(X) \leq c(Y)$, $\forall Y \in \mathcal{P}(S)$.*

O problema U-Curve é um caso particular do problema de seleção de características com uma propriedade que nos permite achar o mínimo global sem a necessidade de avaliar cada ponto do reticulado booleano. Isso é possível porque a propriedade U-Curve (da decomponibilidade da função de custo em curvas U) nos garante que o custo dos elementos de uma cadeia não podem cair uma vez que aumentaram. Sejam por exemplo dois elementos $A \subseteq B$ de $\mathcal{P}(S)$, então:

- se $c(B) > c(A)$, então $c(X) > c(A)$ para todo X do intervalo $[B, \mathcal{P}(S)]$;
- se $c(A) > c(B)$, então $c(X) > c(B)$ para todo X do intervalo $[\emptyset, A]$.

Desta maneira, quando um problema de seleção de características tem uma função de custo decomponível em curvas U a menos de algumas oscilações, é vantajoso aproximar a solução deste problema pela solução encontrada por um algoritmo de busca do problema U-Curve. Tal abordagem não é ótima, porém, como existem poucas oscilações da função de custo, é provável que a solução encontrada ainda seja próxima da melhor solução.

2.4 Funções de custo artificiais

Para testar e comparar o desempenho de algoritmos precisamos de muitas instâncias do problema U-Curve. Usar instâncias reais para este fim pode ser inviável devido a escassez de dados e, além disso, é possível isto cause uma análise viesada para os dados usados. Por isso é necessário usar funções de custo que nos permitam criar instâncias artificiais parecidas com problemas reais e que sejam tão gerais quanto possível, evitando que a avaliação dos algoritmos seja viesada.

Nesta seção apresentamos duas funções de custo artificiais, a primeira foi utilizada na maioria dos testes de desempenho dos algoritmos, servindo de base para avaliar tempo de execução,

otimalidade e número de chamadas da função custo. A segunda não foi utilizada em testes deste trabalho, mas foi objeto de estudos pois, diferente da primeira, é capaz de simular violações da hipótese de curva U, o que é esperado que ocorra mesmo que moderadamente em instâncias reais.

2.4.1 Soma de subconjuntos

Para se avaliar o desempenho dos algoritmos criados neste trabalho, utilizamos instâncias artificiais que são reduções do problema da soma de subconjuntos. Este problema consiste em, dado um conjunto finito de inteiros não-negativos S e um inteiro não-negativo t , descobrir se há um subconjunto de S que soma t . Podemos resolver este problema com a solução de uma instância do problema de seleção de características onde o conjunto de características é S' uma cópia de S e a função de custo é c :

$$c(X) = |t - \sum_{x \in X} x|, \text{ para todo } X \in \mathcal{P}(S'). \quad (2.2)$$

Assim como a função de custo MCE, a função de custo de somas de subconjuntos também apresenta formato de curva em U nas cadeias do reticulado Booleano [Rei12]. Para toda cadeia com elementos $A \subseteq B \subseteq C$ vale que $c(B) \leq \max\{c(A), c(C)\}$, então de fato esta função é decomponível em curvas U. Vamos apresentar a prova desta propriedade, feita em [Rei12]. Começamos a demonstração definindo $D = B \setminus A$ e $E = C \setminus B$. Este problema tem dois casos disjuntos: $|t - \sum_{b \in B} b| > 0$ ou então $|t - \sum_{b \in B} b| \leq 0$.

- se $|t - \sum_{b \in B} b| > 0$, então:

$$\begin{aligned} c(B) &= |t - \sum_{b \in B} b| \\ &\leq |t - \sum_{b \in B} b + \sum_{d \in D} d| \quad (\text{pois } S \text{ contém apenas números positivos e } t - \sum_{b \in B} b > 0) \\ &= |t - \sum_{a \in B \setminus D} a| \\ &= |t - \sum_{a \in A} a| \\ &= c(A). \end{aligned}$$

Portanto, $c(B) \leq c(A)$, logo $c(B) \leq \max\{c(A), c(C)\}$.

- se $|t - \sum_{b \in B} b| \leq 0$, então:

$$\begin{aligned} c(B) &= |t - \sum_{b \in B} b| \\ &\leq |t - \sum_{b \in B} b - \sum_{e \in E} e| \quad (\text{pois } S \text{ contém apenas números positivos e } t - \sum_{b \in B} b \leq 0) \\ &= |t - \sum_{c \in B \cup E} c| \\ &= |t - \sum_{c \in C} c| \\ &= c(C). \end{aligned}$$

Portanto, $c(B) \leq c(C)$, logo $c(B) \leq \max\{c(A), c(C)\}$.

Como acabamos de provar para os dois casos possíveis, temos que $c(B) \leq \max\{c(A), c(C)\}$. Desta maneira, a função de custo de soma de subconjuntos é decomponível em curvas U. \square

2.4.2 Violação da curva U

Como vimos na seção 2.2.1, funções de custo utilizadas em problemas de seleção de características podem descrever curvas em formato de U nas cadeias do reticulado Booleano, e isto nos permite aproximar a solução destes problemas assumindo que a função de custo é decomponível em curvas U. Entretanto, é possível que as funções de custo apresentem oscilações, ou seja, mínimos locais. Por isso, é interessante estudar a robustez dos algoritmos que resolvem o problema U-Curve quando a hipótese de curva em U não é verdadeira. Apesar de não analisarmos os algoritmos deste trabalho quanto sua robustez, achamos importante citar esta métrica de qualidade.

Uma maneira de gerar funções com oscilações e violações da curva em U é adicionar uma perturbação senoidal a uma função decomponível em curvas U. Seja a seguinte função:

$$c(X|X_0, \mathbf{W}, c_{max}) = c_{max}[1 - e^{-\frac{1}{2}(X-X_0)^T \mathbf{W}(X-X_0)}],$$

em que:

$X \in \mathcal{P}(S)$ é um conjunto de características;

$X_0 \in \mathcal{P}(S)$ é o conjunto de custo mínimo;

$c_{max} \in \mathbb{R}$ é uma constante que escala o custo máximo de um subconjunto;

\mathbf{W} é uma matriz positiva-definida de pesos que dá forma a função.

A função de custo acima é decomponível em curvas em U. Podemos então adicionar à mesma um ruído senoidal, para esse fim generalizando a função com o acréscimo de um termo:

$$c(X|X_0, \mathbf{W}, c_{max}) = c_{max}[1 - e^{-\frac{1}{2}(X-X_0)^T \mathbf{W}(X-X_0)}] + A \cos(2\pi f \beta(X)), \quad (2.3)$$

onde $\beta(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X(i)$ e $A \in \mathbb{R}$ é uma constante que regula a amplitude do ruído, ou seja, a profundidade dos mínimos locais; e $f \in \mathbb{R}$ controla a frequência do ruído, isto é, qual a distância entre os mínimos locais gerados.

A função de custo da equação 2.3 foi utilizada por Atashpaz-Gargari e colegas para avaliar a robustez de um algoritmo para o problema U-curve [AG+18]. Esta função já encontra-se implementada no arcabouço featsel e será utilizada em experimentos computacionais futuros.

Capítulo 3

Melhoramentos no algoritmo Poset-Forest-Search (PFS)

Neste capítulo apresentamos o algoritmo **Poset-Forest-Search** (PFS), um algoritmo ótimo para o problema **U-curve** que foi criado para enfrentar a limitação do algoritmo **U-curve Branch and Bound** (UBB) ser unidirecional. Apesar do PFS ter solucionado tal problema com sucesso, este algoritmo apresenta pontos que ainda podem ser explorados para se criar uma modificação que tenha melhor desempenho computacional. Modificaremos então o PFS, explorando tais pontos e, além disso, vamos criar uma versão paralela do algoritmo.

Baseamos nosso trabalho no código-fonte do arcabouço **featsel** [Rei+17], que é software livre e está disponível no GitHub sob a licença de uso *GNU General Public License*. Todos os experimentos computacionais deste capítulo foram feitos utilizando algoritmos e funções de custo implementados no **featsel**, em uma servidora com 64 núcleos, 256 GB de memória RAM e sistema operacional Ubuntu server 14.04 LTS. Em todos os experimentos foi utilizada como função de custo a redução polinomial do problema da soma de subconjuntos (equação 2.2); instâncias artificiais foram geradas escolhendo aleatoriamente $n + 1$ números inteiros, onde n é o número de características.

3.1 Descrição do algoritmo

3.1.1 O caso simples: o algoritmo **U-curve-Branch-and-Bound** (UBB)

O algoritmo **U-curve Branch and Bound** (UBB), que é uma versão simplificada do PFS, percorre o espaço de busca fazendo uma busca em profundidade em uma árvore que é subgrafo do diagrama de Hasse do reticulado Booleano $(\mathcal{P}(S), \subseteq)$. Esta árvore é definida por aplicações recursivas do seguinte lema:

Lema 3.1.1. *Sejam X e Y conjuntos, X não-vazio e x_i o i -ésimo elemento de X . Seja $X_0 \supseteq X_1 \supseteq \dots \supseteq X_{|X|}$ uma cadeia tal que $X_0 = X$, $X_{|X|} = \emptyset$ e $X_i \cup \{x_i\} = X_{i-1}$ para todo $0 < i \leq |X|$. Vale que:*

$$\{Y\} \cup \bigcup_{i=1}^{|X|} \{W \cup Y \cup \{x_i\} : W \in \mathcal{P}(X_i)\} = \{W \cup Y : W \in \mathcal{P}(X)\}.$$

Demonstração. Faremos uma prova por indução no tamanho de X de maneira similar a Reis [Rei12].

- Suponha que $|X| = 1$. Então:

$$\begin{aligned}
\{Y\} \cup \bigcup_{i=1}^1 \{W \cup Y \cup \{x_i\} : W \in \mathcal{P}(X_i)\} &= \{Y\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\} \\
&= \{Y\} \cup \{Y \cup \{x_1\}\} && \text{(Como } X_1 = \emptyset\text{)} \\
&= \{Y, Y \cup \{x_1\}\} \\
&= \{W \cup Y : W \in \mathcal{P}(X)\}.
\end{aligned}$$

- Suponha que o lema é verdadeiro para todo X com $|X| < k$, então:

$$\begin{aligned}
\{Y\} \cup \bigcup_{i=1}^k \{W \cup Y \cup \{x_i\} : W \in \mathcal{P}(X_i)\} &= \\
\{Y\} \cup \bigcup_{i=2}^k \{W \cup Y \cup \{x_i\} : W \in \mathcal{P}(X_i)\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\}.
\end{aligned}$$

Seja $Z = Z_0 = X_1, Z_1 = X_2, \dots, Z_{|Z|} = X_{|X|}$, então $|Z| = k - 1$ e $z_1 = x_2, z_2 = x_3, \dots, z_{|Z|} = x_{|X|}$, e:

$$\begin{aligned}
\{Y\} \cup \bigcup_{i=2}^k \{W \cup Y \cup \{x_i\} : W \in \mathcal{P}(X_i)\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\} &= \\
\{Y\} \cup \bigcup_{j=1}^{k-1} \{W \cup Y \cup \{z_j\} : W \in \mathcal{P}(Z_j)\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\} &= \\
&\text{(Pela hipótese de indução)} \\
\{Y \cup W : W \in \mathcal{P}(Z)\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\} &= \\
\{Y \cup W : W \in \mathcal{P}(X_1)\} \cup \{W \cup Y \cup \{x_1\} : W \in \mathcal{P}(X_1)\} &= \\
\{Y \cup W : W \in \mathcal{P}(X_1 \cup x_1)\} &= \\
\{Y \cup W : W \in \mathcal{P}(X)\}.
\end{aligned}$$

□

Para representar o espaço de busca como uma árvore, devemos aplicar o lema da seguinte forma. Vamos utilizar o conjunto X_Y para determinar para cada nó Y do reticulado quais são os nós alcançáveis por ele, de maneira que um nó Y pode alcançar todo nó do intervalo $[Y, X_Y \cup Y]$. Iniciamos a construção da árvore com a base da aplicação recursiva do lema, indicando que $X_{Y=\emptyset} = S$, pois \emptyset deve ser a raiz da árvore e deve alcançar qualquer outro nó. Agora suponha que estamos em um nó Y , então definimos $X_0 = X_Y$, $X_{Y_i} \cup \{x_i\} = X_{Y_{i-1}}$, e $Y_i = Y \cup \{x_i\}$ para $x_i \in X_Y$; então para criar a sub-árvore com raiz Y basta adicionar os arcos (Y, Y_i) para cada i e aplicar o lema recursivamente para cada Y_i e X_{Y_i} . A figura 3.1 mostra uma árvore arbitrária gerada pela aplicação recursiva do lema.

A dinâmica do UBB é simples. Aplica-se o lema 3.1.1 para percorrer o espaço de busca enquanto o custo dos subconjuntos visitados se mantém ou diminui; quando o custo aumenta, podemos podar a sub-árvore que se inicia no nó onde o custo cresce. Por exemplo, em uma instância do problema U-curve com três características, se o custo do nó $Y = \{100\}$ é maior do que o custo de $\{000\}$ e, ao visitar Y , $X = \{011\}$ então podemos remover do espaço de busca todos os nós do intervalo $[100, 111]$. O funcionamento do UBB é apresentado no pseudo-código 1.

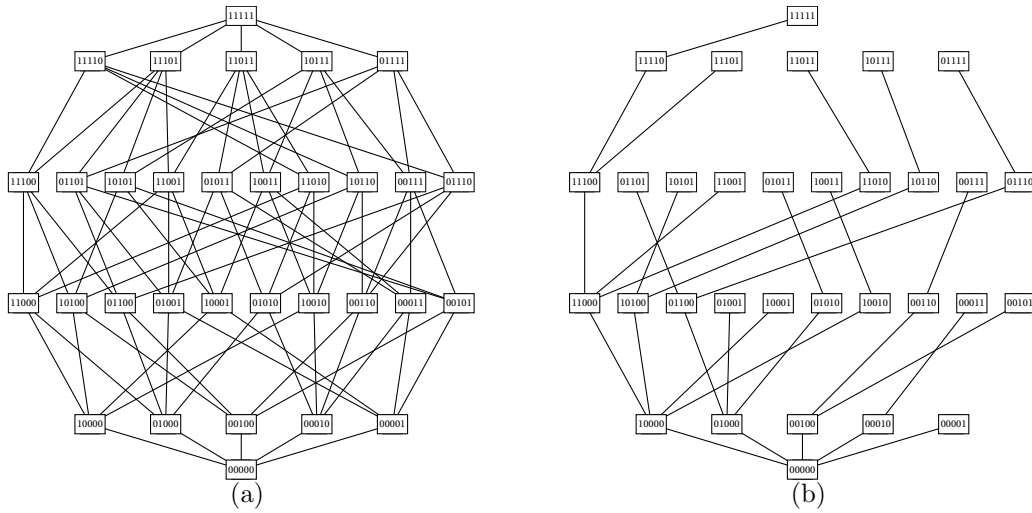


Figura 3.1: A figura 3.1(a) é o diagrama de Hasse do reticulado Booleano $(\mathcal{P}(S), \subseteq)$ e a figura 3.1(b) é uma árvore de busca definida pelo algoritmo UBB.

U-CURVE-BRANCH-AND-BOUND (S, c)

- 1: $\mathcal{M} \leftarrow \text{BRANCH}(S, \emptyset, c, c(\emptyset))$
- 2: **return** $\{M \in \mathcal{M} : c(M) \text{ is minimal}\}$

BRANCH $(X, Y, c, cost_Y)$

- 1: $\mathcal{M} \leftarrow \{Y\}$
- 2: **while** $X \neq \emptyset$ **do**
- 3: remove an element x from X
- 4: $Y' \leftarrow Y \cup \{x\}$
- 5: $cost_{Y'} \leftarrow c(Y')$
- 6: **if** $cost_{Y'} \leq cost_Y$ **then**
- 7: $\mathcal{N} \leftarrow \text{BRANCH}(X, Y', c, cost_{Y'})$
- 8: $\mathcal{M} \leftarrow \mathcal{N} \cup \mathcal{M}$
- 9: **end if**
- 10: **end while**
- 11: **return** \mathcal{M}

Algorithm 1: Pseudo-código do algoritmo UBB

Uma vez entendido como as podas acontecem, é fácil perceber que o UBB precisa percorrer uma cadeia inteira (não há podas) quando o custo nela não aumenta até o penúltimo nó da cadeia. Portanto, se a função de custo é, por exemplo, monótona não-crescente, então a condição de poda nunca será verdadeira em qualquer cadeia do reticulado, logo todo o espaço de busca será visitado, como em uma busca exaustiva. Esta é a maior limitação do algoritmo UBB e foi para enfrentá-la que o algoritmo PFS foi criado.

3.1.2 Princípios de funcionamento do algoritmo PFS

O algoritmo Poset-Forest-Search (PFS) é uma generalização do UBB capaz de percorrer o espaço de busca em duas direções, do menor para o maior elemento do reticulado (como o UBB) e também do maior elemento para o menor. Para fazer isso, o PFS inicia sua busca com

duas árvores complementares, uma gerada por aplicações recursivas do lema 3.1.1 e outra, que representa o reticulado Booleano dual $(\mathcal{P}(S), \supseteq)$, gerada por aplicações recursivas do lema a seguir.

Lema 3.1.2. *Sejam X e Y conjunto, X não-vazio e x_i o i -ésimo elemento de X . Seja $X_0 \supseteq X_1 \supseteq \dots \supseteq X_{|X|}$ uma cadeia tal que $X_0 = X$, $X_{|X|} = \emptyset$ e $X_i \cup \{x_i\} = X_{i-1}$ para todo $0 < i \leq |X|$. Vale que:*

$$\{Y \cup X\} \cup \bigcup_{i=1}^{|X|} \{(X - (W \cup x_i)) \cup Y : W \in \mathcal{P}(X_i)\} = \{W \cup Y : W \in \mathcal{P}(X)\}.$$

Na figura 3.2 mostramos duas árvores do espaço de busca geradas pelo algoritmo. Note que estas árvores permitem o percorrimto do espaço de busca em duas direções. Seja Y um conjunto da árvore da figura 3.2(a) e X o conjunto usado para aplicação recursiva do lema 3.1.1, então os nós que compõe a sub-árvore com raiz Y é exatamente o intervalo $[Y, X \cup Y]$. Na árvore dual, apresentada na figura 3.2(b), os nós da sub-árvore com raiz Y é dado por $[Y \setminus X, Y]$.

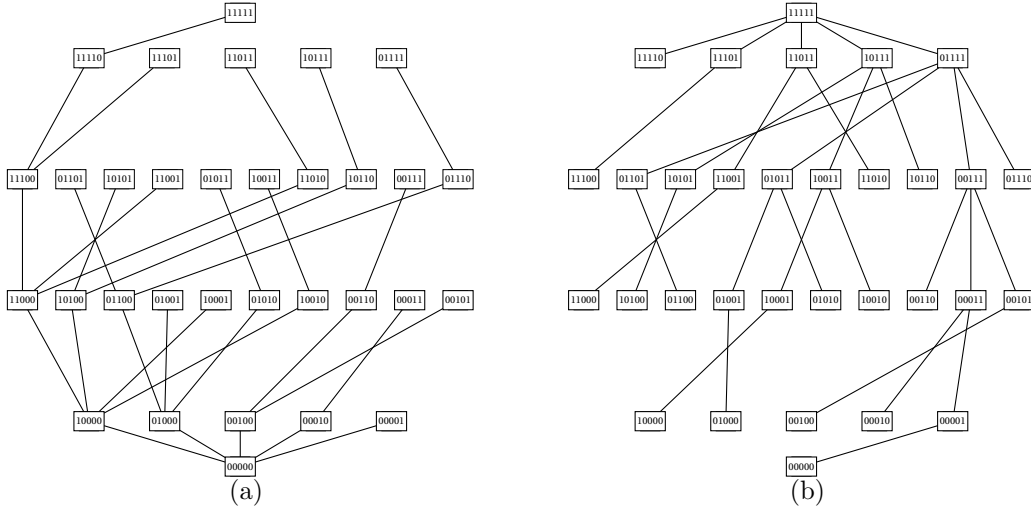


Figura 3.2: Exemplo de árvores do espaço de busca gerado pelo algoritmo PFS. A figura 3.2(a) mostra a árvore gerada por aplicações recursivas do lema 3.1.1 enquanto a figura 3.2(b) mostra a árvore gerada por aplicações recursivas do lema 3.1.2.

No algoritmo UBB o controle do espaço de busca pode ser facilmente implementado, pois este começa completo e para cada poda que ocorre basta não ramificar a sub-árvore em que a condição de poda for verdadeira, eliminando o intervalo $[Y, X \cup Y]$ do espaço de busca. No PFS, uma estratégia equivalente é capaz apenas de restringir nós da estrutura de dados que foi utilizada para o percorrimto de cadeias, ou seja, uma poda neste algoritmo implica na atualização das duas estruturas de dados que controlam o espaço de busca. Então, quando removemos um intervalo de uma árvore, precisamos remover este mesmo intervalo da árvore dual; como resultado, a árvore dual se torna uma **floresta**. Portanto, o PFS usa duas florestas para gerir o espaço de busca, uma com caminhos de conjuntos menores para maiores, \mathcal{F}_A e outra dual, \mathcal{F}_B . Um exemplo de atualização de floresta dual após uma poda na floresta primal é apresentado na figura 3.3.

O PFS inicia escolhendo arbitrariamente uma direção de percorrimto e uma raiz da floresta correspondente a direção escolhida. O passo seguinte é a ramificação, que similar ao UBB percorre uma cadeia da árvore escolhida enquanto o custo dos subconjuntos não cresce e não

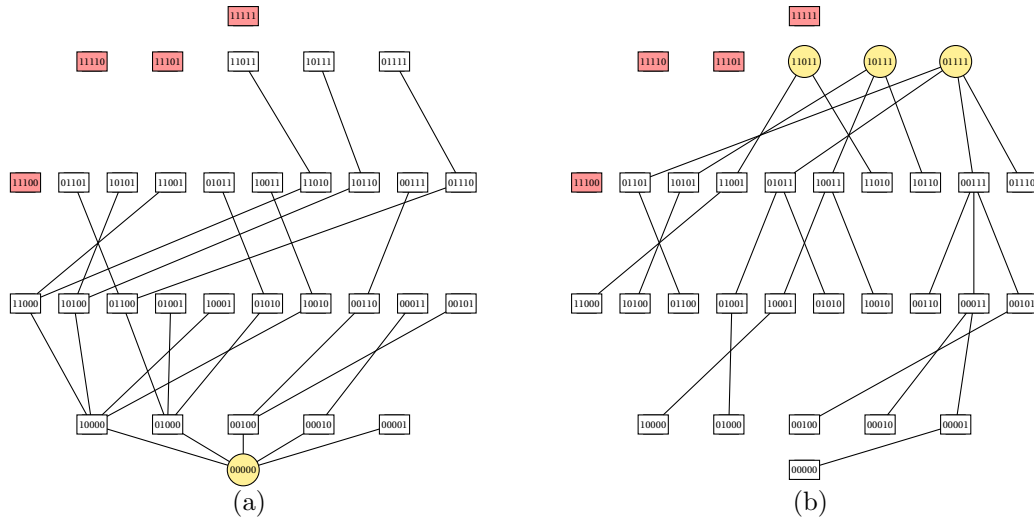


Figura 3.3: Exemplo de atualização de árvore após remoção de intervalo. Os nós em vermelho são removidos do espaço de busca enquanto os nós amarelos são raízes dos grafos. Removemos o intervalo $[11100, 11111]$ da árvore da figura 3.3(a) e ao remover este mesmo intervalo da árvore dual, o grafo perde a raiz original (11111) e ganha as três raízes em amarelo.

chegamos em uma folha da árvore. Ao fim da fase de ramificação, suponha que feita na floresta \mathcal{F}_A (\mathcal{F}_B), teremos um intervalo $[Y, X \cup Y]$ ($[Y \setminus X, Y]$) que precisa ser removido da floresta dual. Esta atualização da floresta dual é feita de acordo com as seguintes regras.

Lema 3.1.3. *Sejam T e T' duas árvores tais que T é complementar a T' . Eliminar de T' os vértices contidos no intervalo $[Y, X \cup Y]$ é equivalente a remover de T' todos os vértices do caminho P de T com extremos Y e $X \cup Y$ e também todos os vértices de T' contidos em intervalos $[Y, B]$ tais que B contém propriamente Y e B é adjacente inferior a um vértice de P .*

Lema 3.1.4. *Sejam T e T' duas árvores tais que T é complementar a T' . Eliminar de T os vértices contidos no intervalo $[Y \setminus X, Y]$ é equivalente a eliminar de T todos os vértices do caminho P em T com extremos $Y \setminus X$ e Y e também todos os vértices de T contidos em intervalos $[A, Y]$ tais que A é contido propriamente em Y e A é adjacente superior a um vértice de P .*

As demonstrações dos lemas 3.1.3 e 3.1.4 estão disponíveis em Reis [Rei12].

O funcionamento do algoritmo deve seguir as seguintes regras:

- Inicialização das florestas:* as florestas \mathcal{F}_A e \mathcal{F}_B são iniciadas com as raízes \emptyset e S respectivamente.
- Representação de árvores:* para todo nó do espaço de busca que não foi removido e não é raiz na floresta, a sub-árvore que se inicia neste nó está completa no espaço de buscas. Desta forma, para representar a floresta precisamos apenas armazenar as raízes da floresta e suas adjacências, pois sabemos que cada vértice adjacente é raiz de uma subárvore completa.
- Gerenciamento das florestas:* durante a etapa de ramificação, um vértice visitado é podado ou torna-se raiz na floresta. Com isso, temos que todas arestas de um caminho percorrido são removidas da floresta.

- d) *Condição de poda (dual)*: no percorrimento de uma cadeia, se o nó Y da floresta \mathcal{F}_A (\mathcal{F}_B) tem custo maior que o último nó visitado nesta cadeia, então removemos da floresta \mathcal{F}_A (\mathcal{F}_B) a subárvore que começa em Y , $[Y, X \cup Y]$ ($[Y \setminus X, Y]$). Se um nó Y visitado não tem conjuntos adjacentes no espaço de busca, então Y é removido do espaço de busca.
- e) *Atualização de floresta*: ao podar o intervalo $[Y, X \cup Y]$ ($[Y \setminus X, Y]$) da floresta \mathcal{F}_A (\mathcal{F}_B), devemos remover os mesmos subconjuntos da outra floresta de acordo com o lema 3.1.3 (3.1.4).

3.1.3 Pseudo-código e detalhes de implementação do PFS

Apresentamos nesta seção um pseudo-código para o algoritmo e ao mesmo tempo comentamos como algumas destas soluções foram implementadas em *C++* no arcabouço *featsel*.

Definição de árvores de busca

Os algoritmos que descrevemos neste capítulo dependem da aplicação recursiva dos lemas 3.1.1 e 3.1.2, e para cada ordem de características x_i escolhida na aplicação do lema obtemos uma árvore diferente para representar o espaço de busca (veja figura 3.4). A implementação de Reis possui uma enumeração sobre as características que nos permite fixar os resultados da aplicação recursiva destes lemas e também facilita o controle das árvores da floresta. Supomos então que o conjunto de características S é uma lista ordenada $\langle s_1, s_2, \dots, s_n \rangle$ e que é possível obter o índice de um elemento. Assim, sempre que fazemos a decomposição do espaço em uma árvore (com ambos lemas) escolhemos as variáveis do conjunto X em ordem crescente de índice.

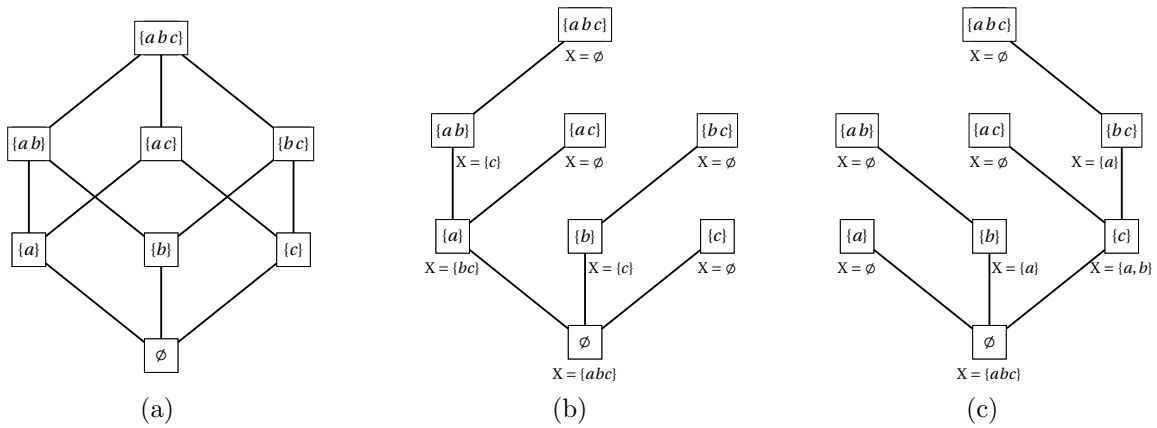


Figura 3.4: Exemplos de aplicações recursivas do lema 3.1.1 no reticulado Booleano da figura 3.4(a). O conjunto X indica para cada subconjunto Y qual é o conjunto de nós de sua sub-árvore: exatamente os nós do intervalo $[Y, X \cup Y]$. Na figura 3.4(b) a decomposição elimina de X os elementos na ordem $\langle a, b, c \rangle$ em todos os níveis de aplicação do lema, enquanto na figura 3.4(c) a ordem é $\langle c, b, a \rangle$.

Estrutura de dados

Vamos definir a estrutura de dados utilizada originalmente para representar nós das florestas. Um nó **N** é composto por quatro campos:

- **vertex**: armazena o conjunto de características que o nó representa.

- **adjacent**: armazena um conjunto de características que determina a adjacência do nó. Um nó \mathbf{N} é adjacente aos conjuntos de características $\{\mathbf{N}[\text{vertex}] \cup \{x_i\} : x_i \in \mathbf{N}[\text{adjacent}]\}$.
- **leftmost**: um inteiro que define, pelo esquema de numeração, o conjunto de características X da decomposição em árvore do espaço de busca. Isto é, se $Y = \mathbf{N}[\text{vertex}]$ então o conjunto de nós da sub-árvore com raiz Y deve ser igual ao intervalo $[Y, X \cup Y]$, se \mathbf{N} é da floresta \mathcal{F}_A , ou igual ao intervalo $[Y \setminus X, Y]$ se \mathbf{N} é da floresta \mathcal{F}_B . Lembrando que assumimos uma ordem no conjunto de características $(\langle s_1, s_2, \dots, s_n \rangle)$, X é definido como $X = \bigcup_{i=\mathbf{N}[\text{leftmost}]}^n s_i$.
- **cost**: um número em ponto flutuante que armazena o custo de $\mathbf{N}[\text{vertex}]$.

Como descrevemos na seção anterior, uma das regras do algoritmo garante que para representar as florestas precisamos apenas armazenar as raízes das florestas e suas listas de adjacências. Desta maneira, as duas florestas \mathcal{F}_A e \mathcal{F}_B são representadas por conjuntos de nós. Estes nós são armazenados na estrutura de *map* da linguagem C++.

Pseudo-código

Vamos agora apresentar um pseudo-código do PFS em uma abordagem “top down”, ou seja, começando pelo algoritmo principal (Algoritmo 2) e descrevendo funções conforme as mesmas são chamadas em um dado pseudo-código.

POSET-Forest-Search (S, c)

```

1:  $\mathcal{M} \leftarrow \emptyset$ 
2:  $\mathbf{T}[\text{vertex}] \leftarrow \emptyset$ 
3:  $\mathbf{T}'[\text{vertex}] \leftarrow S$ 
4:  $\mathbf{T}[\text{cost}] \leftarrow \mathbf{T}'[\text{cost}] \leftarrow \infty$ 
5:  $\mathbf{T}[\text{adjacent}] \leftarrow \mathbf{T}'[\text{adjacent}] \leftarrow S$ 
6:  $\mathbf{T}[\text{leftmost}] \leftarrow \mathbf{T}'[\text{leftmost}] \leftarrow 1$ 
7:  $\mathcal{F}_A \leftarrow \{\mathbf{T}\}$ 
8:  $\mathcal{F}_B \leftarrow \{\mathbf{T}'\}$ 
9: while  $\mathcal{F}_A \neq \emptyset$  do ▷ equivalent to  $\mathcal{F}_B \neq \emptyset$ 
10:    $direction \leftarrow \text{CHOOSE-DIRECTION}$ 
11:   if  $direction$  then
12:      $\langle \mathcal{N}, \mathcal{F}_A, \mathbf{N} \rangle \leftarrow \text{LOWER-Forest-BRANCH}(\mathcal{F}_A, \mathcal{F}_B, c)$ 
13:      $\mathcal{F}_B \leftarrow \text{UPPER-Forest-PRUNNING}(\mathcal{F}_B, \mathbf{N})$ 
14:   else
15:      $\langle \mathcal{N}, \mathcal{F}_A, \mathbf{N} \rangle \leftarrow \text{UPPER-Forest-BRANCH}(\mathcal{F}_A, \mathcal{F}_B, c)$ 
16:      $\mathcal{F}_A \leftarrow \text{LOWER-Forest-PRUNNING}(\mathcal{F}_A, \mathbf{N})$ 
17:   end if
18:    $\mathcal{M} \leftarrow \mathcal{M} \cup \mathcal{N}$ 
19: end while
20: return  $\{M \in \mathcal{M} : c(M) \text{ is minimum}\}$ 

```

Algorithm 2: Pseudo-código da rotina principal do algoritmo PFS.

Uma iteração qualquer do PFS começa com a inicialização das florestas do espaço de busca. A floresta \mathcal{F}_A , que permite percorrimentos de baixo para cima no reticulado, é inicializada com

a raiz \emptyset , enquanto que a floresta \mathcal{F}_B , de percorrimentos de cima para baixo, é inicializada com a raiz S . Assim que inicializadas as florestas, repetimos as etapas de escolha de direção de percorrimento, ramificação e poda das florestas até que ambas estejam vazias. Note que não importa qual floresta devemos verificar para terminar as iterações do algoritmo, já que ambas representam o mesmo espaço de busca, ou seja, quando uma floresta é vazia a outra também é.

A etapa de ramificação da floresta \mathcal{F}_A é feita pela função LOWER-FOREST-BRANCH (Algoritmo 3) e consiste no percorrimento, a partir de uma raiz Y , de uma cadeia de sua sub-árvore. Nesta etapa, para manter válida a regra c) devemos remover todas as arestas do caminho percorrido e transformar todos os nós visitados e não podados em raízes da floresta. O percorrimento termina ao atingir um nó \mathbf{N} que é folha ou que possui custo maior do que seu precedente no caminho percorrido; então o intervalo $[\mathbf{N}[\text{vertex}], \mathbf{N}[\text{vertex}] \cup \mathbf{N}[\text{adjacent}]]$ deve ser removido da floresta \mathcal{F}_A . Esta função retorna o nó \mathbf{N} , a floresta \mathcal{F}_A atualizada, e o conjunto \mathcal{M} de subconjuntos percorridos que são candidatos a mínimo.

LOWER-FOREST-BRANCH ($\mathcal{F}_A, \mathcal{F}_B, c$)

```

1:  $\mathcal{M} \leftarrow \emptyset$ 
2: remove a node  $\mathbf{R}$  from  $\mathcal{F}_A$ 
3:  $\mathbf{R}[\text{cost}] \leftarrow \text{CALC-NODE-COST}(\mathcal{F}_B, \mathbf{R})$ 
4:  $\mathbf{M} \leftarrow \mathbf{N} \leftarrow \mathbf{R}$ 
5: while  $\mathbf{N}[\text{cost}] \leq \mathbf{M}[\text{cost}]$  e  $\mathbf{N}[\text{adjacent}] \neq \emptyset$  do
6:    $\mathbf{M} \leftarrow \mathbf{N}$ 
7:   remove an element  $s_i$  from  $\mathbf{M}[\text{adjacent}]$ 
8:   insert  $\mathbf{M}$  into  $\mathcal{F}_A$ 
9:    $\mathcal{F}_A \leftarrow \mathcal{F}_A \cup \{\mathbf{M}\}$ 
10:  create node  $\mathbf{N}$ 
11:   $\mathbf{N}[\text{vertex}] \leftarrow \mathbf{M}[\text{vertex}] \cup \{s_i\}$ 
12:   $\mathbf{N}[\text{leftmost}] \leftarrow i$ 
13:   $\mathbf{N}[\text{adjacent}] \leftarrow \bigcup_{i=\mathbf{N}[\text{leftmost}]}^n s_i$ 
14:   $\mathbf{N}[\text{cost}] \leftarrow \text{CALC-NODE-COST}(\mathcal{F}_B, \mathbf{N})$ 
15:   $\mathcal{M} \leftarrow \mathcal{M} \cup \{\mathbf{N}\}$ 
16: end while
17: return  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{F}_A, \mathbf{N} \rangle$ 

```

Algorithm 3: Pseudo-código da função que faz o percorrimento da floresta \mathcal{F}_A .

Durante a execução do PFS, o custo de um subconjunto é calculado uma única vez; o recálculo é evitado com a função Calc-Node-Cost (Algoritmo 4).

CALC-NODE-COST (\mathcal{F}, \mathbf{N})

```

1: if  $\mathbf{N}[\text{cost}] = \infty$  and there is  $\mathbf{M} \in \mathcal{F}$  such that  $\mathbf{M}[\text{vertex}] = \mathbf{N}[\text{vertex}]$  and  $\mathbf{M}[\text{cost}] \neq \infty$  then
2:   return  $\mathbf{M}[\text{cost}]$ 
3: else
4:   return  $c(\mathbf{R}[\text{vertex}])$ 
5: end if

```

Algorithm 4: Pseudo-código da função Calc-Node-Cost.

A ramificação dual, da floresta \mathcal{F}_B é feita pela função UPPER-FOREST-BRANCH e é similar a função LOWER-FOREST-BRANCH ao percorrer uma cadeia da floresta de conjun-

tos maiores para conjuntos menores. A ramificação termina ao encontrar um nó \mathbf{N} que é folha da floresta ou tem custo maior que seu precedente no caminho; então o intervalo $[\mathbf{N}[\text{vertex}] \setminus \mathbf{N}[\text{adjacent}], \mathbf{N}[\text{vertex}]]$ deve ser removido da floresta \mathcal{F}_B e todos os nós visitados, menos \mathbf{N} tornam-se raízes. Esta função retorna o nó \mathbf{N} , a floresta \mathcal{F}_B atualizada e o conjunto \mathcal{M} de subconjuntos percorridos que são candidatos a mínimo.

A atualização da floresta \mathcal{F}_B após o percorrimto e poda da floresta \mathcal{F}_A é feito pela função UPPER-FOREST-PRUNNING (Algoritmo 5). Esta função recebe um nó \mathbf{N} e deve remover os nós de \mathcal{F}_B de acordo com a regra e). Para fazer isto, percorremos o caminho P que liga os nós de subconjuntos $\mathbf{N}[\text{vertex}]$ e $\mathbf{N}[\text{vertex}] \cup \mathbf{N}[\text{adjacent}]$ na floresta \mathcal{F}_B , removendo cada um dos nós deste caminho (se existirem, o que é verificado pela função descrita no algoritmo 6) e chamando a função SEARCH-LOWER-CHILDREN (Algoritmo 7) para verificar se os filhos destes nós devem ser podados ou não. Ao fim do caminho chamamos a função SEARCH-UPPER-ROOT para achar, na floresta \mathcal{F}_B , a raiz que alcança este caminho e atualizar a sua adjacência para garantir que uma ramificação não vai re-inserir os nós removidos. Esta função devolve a floresta \mathcal{F}_B atualizada.

UPPPER-FOREST-PRUNNING ($\mathcal{F}_A, \mathcal{F}_B, \mathbf{N}$)

```

1:  $M \leftarrow \mathbf{N}[\text{vertex}]$ 
2: while  $\mathbf{N}[\text{adjacent}] \neq \emptyset$  do
3:    $\mathbf{M} \leftarrow \text{GET-NODE}(\mathcal{F}_B, M)$ 
4:   if  $\mathbf{M} \neq \text{NIL}$  then
5:     remove  $\mathbf{M}$  from  $\mathcal{F}_B$ 
6:   end if
7:    $\mathcal{F}_B \leftarrow \text{SEARCH-LOWER-CHILDREN}(\mathcal{F}_B, \mathbf{M}, M, \mathbf{N}[\text{vertex}])$ 
8:   remove the element  $s_i$  from  $\mathbf{N}[\text{adjacent}]$  with greatest index  $i$ 
9:    $M \leftarrow M \cup \{s_i\}$ 
10: end while
11:  $\mathbf{M} \leftarrow \text{GET-NODE}(\mathcal{F}_B, M)$ 
12: if  $\mathbf{M} = \text{NIL}$  then
13:   SEARCH-UPPER-ROOT( $\mathcal{F}_B, M$ )
14: else
15:   remove  $\mathbf{M}$  from  $\mathcal{F}_B$ 
16: end if
17:  $\mathcal{F}_B \leftarrow \text{SEARCH-LOWER-CHILDREN}(\mathcal{F}_B, \mathbf{M}, M, \mathbf{N}[\text{vertex}])$ 
18: return  $\mathcal{F}_B$ 

```

Algorithm 5: Pseudo-código da função que faz a atualização da floresta \mathcal{F}_B depois de um percorrimto em \mathcal{F}_A .

GET-NODE (\mathcal{F}, N)

```

1: if there is  $\mathbf{N} \in \mathcal{F}$  such that  $\mathbf{N}[\text{vertex}] = N$  then
2:   return  $\mathbf{N}$ 
3: else
4:   return  $\text{NIL}$ 
5: end if

```

Algorithm 6: Pseudo-código da função Get-Node.

SEARCH-LOWER-CHILDREN ($\mathcal{F}_B, \mathbf{M}, M, Y$)

```

1:  $i \leftarrow n$ 
2: while  $i \geq 1$  e  $s_i \in M$  do
3:    $B \leftarrow M \setminus \{s_i\}$ 
4:   if  $B \supseteq Y$  then
5:      $\mathbf{B} \leftarrow \text{GET-NODE}(\mathcal{F}_B, M)$ 
6:     if  $\mathbf{B} \neq \text{NIL}$  then
7:       remove  $\mathbf{B}$  from  $\mathcal{F}_B$ 
8:     end if
9:   else
10:    create a node  $\mathbf{B}$ 
11:     $\mathbf{B}[\text{vertex}] \leftarrow B$ 
12:     $\mathbf{B}[\text{leftmost}] \leftarrow i + 1$ 
13:     $\mathbf{B}[\text{adjacent}] \leftarrow \bigcup_{i=\mathbf{B}[\text{leftmost}]}^n s_i$ 
14:     $\mathbf{B}[\text{cost}] \leftarrow \infty$ 
15:     $\mathcal{F}_B \leftarrow \mathcal{F}_B \cup \{\mathbf{B}\}$ 
16:   end if
17:    $i \leftarrow i - 1$ 
18: return  $\mathcal{F}_B$ 
19: end while

```

Algorithm 7: Pseudo-código da função Search-Lower-Children.

A atualização dual, da floresta \mathcal{F}_A , após o percorrimto e poda da floresta \mathcal{F}_B é feito pela função LOWER-FOREST-PRUNING e seu funcionamento é parecido com o de UPPER-FOREST-PRUNING. O caminho P de \mathcal{F}_A que deve ser removido tem as pontas $\mathbf{N}[\text{vertex}] \setminus \mathbf{N}[\text{adjacent}]$ e $\mathbf{N}[\text{vertex}]$, e a função SEARCH-UPPER-CHILDREN é chamada para verificar se os filhos destes nós devem ser podados ou não. Ao fim do caminho chamamos a função SEARCH-LOWER-ROOT para achar, na floresta \mathcal{F}_A , a raiz que alcança este caminho e atualizar a sua adjacência para garantir que uma ramificação não vai re-inserir os nós removidos. Esta função devolve a floresta \mathcal{F}_A atualizada.

A função SEARCH-LOWER-CHILDREN é chamada para cada nó M do caminho P , como descrito no lema 3.1.3. Esta função verifica para todos os filhos B de M se B contém propriamente o conjunto $\mathbf{N}[\text{vertex}]$; se contém, o nó de subconjunto B deve ser removido da floresta, caso contrário, um nó que representa este conjunto deve ser tornar raiz da floresta, pois o pai de B está sendo removido da floresta e isto significa que não haverá raiz que alcance B . Esta função devolve a floresta \mathcal{F}_B atualizada. SEARCH-UPPER-CHILDREN é a função dual de SEARCH-LOWER-CHILDREN e faz um procedimento similar, para cada nó \mathbf{M} do caminho P , como descrito no lema 3.1.4. Esta função verifica para todos os filhos A de M se A é contido propriamente pelo conjunto $\mathbf{N}[\text{vertex}]$; se é, o nó de subconjunto A deve ser removido da floresta, caso contrário, o um nó que representa o conjunto A deve se tornar raiz da floresta. Esta função devolve a floresta \mathcal{F}_A atualizada.

Por fim, a função SEARCH-UPPER-ROOT (Algoritmo 8) recebe um subconjunto M e a floresta \mathcal{F}_B . O objetivo desta função é remover arestas da floresta que podem levar ao conjunto M . Para isto, a função deve percorrer um caminho de M até uma raiz da floresta (de conjuntos menores para maiores), e esta raiz deve ter sua lista de adjacência atualizada, removendo a aresta que a comunica com M . Para garantir que removemos todas as arestas, devemos criar raízes para todos nós deste caminho mas sem a adjacência que os comunica com M . O funcionamento de SEARCH-LOWER-ROOT é similar, mas deve ocorrer em outra direção (de

conjuntos maiores para menores).

SEARCH-UPPER-ROOT (\mathcal{F}_B, M)

```

1:  $i \leftarrow n$ 
2: while  $i \geq 1$  e  $s_i \in M$  do
3:    $i \leftarrow i - 1$ 
4: end while
5: while  $i \geq 1$  do
6:    $m \leftarrow s_i$ 
7:    $M \leftarrow M \cup \{m\}$ 
8:    $\mathbf{M} \leftarrow \text{GET-NODE}(\mathcal{F}_B, M)$ 
9:   if  $\mathbf{M} \neq \text{NIL}$  then
10:     $\mathbf{M}[\text{adjacent}] \leftarrow \mathbf{M}[\text{adjacent}] \setminus \{m\}$ 
11:     $i \leftarrow 0$ 
12:   else
13:     create a node  $\mathbf{M}$ 
14:     while  $i \geq 1$  e  $s_i \in M$  do
15:        $i \leftarrow i - 1$ 
16:     end while
17:      $\mathbf{M}[\text{leftmost}] \leftarrow i + 1$ 
18:      $\mathbf{M}[\text{adjacent}] \leftarrow \cup_{j=\mathbf{M}[\text{leftmost}]}^n \{s_j\} \setminus \{m\}$ 
19:      $\mathbf{M}[\text{cost}] \leftarrow \infty$ 
20:     insert  $\mathbf{M}$  into  $\mathcal{F}_B$ 
21:   end if
22:   return  $\mathcal{F}_B$ 
23: end while

```

Algorithm 8: Pseudo-código da função Search-Upper-Root.

3.2 Melhoramentos na escolha de raiz

Na implementação original do PFS foi utilizada a estrutura de *map* para armazenar as raízes das florestas do espaço de busca. Como chave das raízes, utiliza-se a *string* que representa o vetor característico da raiz. A estrutura de *map* em C++, geralmente implementada com árvores binárias de busca, mantém os elementos ordenados pelo valor de sua chave, portanto as raízes são armazenadas de maneira ordenada lexicograficamente.

A estratégia adotada na implementação original para a escolha de uma raiz da floresta consiste em escolher de maneira equiprovável o primeiro ou o último elemento do *map* de raízes. Esta estratégia é aleatória, porém viesada, uma vez que escolhe apenas os primeiros ou últimos elementos de uma ordenação. Como esta estratégia de ordenação é arbitrária, não existindo fundamentação teórica que a justifique, acreditamos que novas estratégias de escolhas de raízes podem trazer melhores resultados ao algoritmo PFS.

3.2.1 Escolha equiprovável

A primeira estratégia que testamos foi uma escolha também aleatória, mas com uma distribuição de probabilidade de escolhas igual para cada raiz da floresta. Como a estratégia da implementação original de Reis é viesada, julgamos necessário investigar se este viés não leva

o algoritmo a fazer ramificações ou podas ruins, que comprometessem o tempo de execução do algoritmo. Se o tempo de execução com a nova estratégia é menor, então confirmamos esta hipótese.

Para implementar esta nova escolha, utilizamos a mesma estrutura de dados utilizada por Reis com uma pequena modificação no código. Seja \mathcal{F} a floresta de percorrimento escolhida e suponha que existe uma ordenação das raízes dessa floresta, $\langle r_1, r_2, \dots, r_{|\mathcal{F}|} \rangle$, então sorteamos um número i entre 1 e $|\mathcal{F}|$ e escolhemos a raiz r_i para o percorrimento.

3.2.2 Escolha de maior árvore

A segunda estratégia que testamos para escolha de raízes é determinística e se baseia em escolher a raiz que tem maior sub-árvore completa. Acreditamos que este critério pode acelerar o algoritmo porque árvores maiores podem fazer podas maiores e, desta maneira, é possível que o algoritmo precise visitar menos nós do reticulado e portanto fazer menos operações, incluindo menos cálculos da função custo.

A sub-árvore completa que tem como raiz o nó \mathbf{N} é composta pelos nós dos conjuntos do intervalo $[\mathbf{N}[\text{vertex}], \mathbf{N}[\text{vertex}] \cup \mathbf{N}[\text{adjacent}]]$ e portanto, o tamanho da árvore é dado por

$$\begin{aligned} |[\mathbf{N}[\text{vertex}], \mathbf{N}[\text{vertex}] \cup \mathbf{N}[\text{adjacent}]]| &= |\{\mathbf{N}[\text{vertex}] \cup W : W \in \mathcal{P}(\mathbf{N}[\text{adjacent}])\}| \\ &= |\mathcal{P}(\mathbf{N}[\text{adjacent}])| \\ &= |\mathcal{P}(\cup_{i=\mathbf{N}[\text{leftmost}]}^n S_i)| \\ &= 2^{n-\mathbf{N}[\text{leftmost}]}. \end{aligned}$$

Portanto, basta escolher a raiz com menor valor de **leftmost**. Agora note que, para as raízes da floresta \mathcal{F}_A , o valor de **leftmost** é igual ao maior índice de uma característica presente no conjunto, enquanto na floresta \mathcal{F}_B é igual ao maior índice de uma característica não presente no conjunto.

Note que este número considera que a árvore está completa, o que não é necessariamente verdade para raízes da floresta; um cálculo exato deveria considerar também o conjunto **adjacent** da raiz. Entretanto, utilizamos esse cálculo como uma aproximação do tamanho da floresta por motivos de simplicidade, pois, como explicaremos a seguir, podemos ordenar as raízes de maneira rápida utilizando este cálculo aproximado; fazer esta ordenação com um cálculo que considera as adjacências pode não ser simples.

Se ordenamos as raízes de forma lexicográfica da direita para esquerda (da característica com maior índice para característica com menor índice). Então, a menor raiz é aquela que possui mais zeros da direita para esquerda, ou seja, o menor valor para o maior índice de uma característica presente e consequentemente o menor **leftmost** da floresta \mathcal{F}_A . Já a maior raiz é aquela que possui mais uns da direita para esquerda, ou seja, o menor valor para o maior índice de uma característica não presente e consequentemente o maior **leftmost** da floresta \mathcal{F}_B .

Portanto, para implementar esta modificação devemos mudar o tipo de ordenação feito pelo *map*, que por padrão é feito lexicograficamente da esquerda para direita (ordem alfabética), e escolher para floresta \mathcal{F}_A o primeiro elemento do *map* e para a floresta \mathcal{F}_B o último elemento.

3.2.3 Experimentos com instâncias artificiais

Testamos ambas abordagens em experimentos computacionais. Analisaremos agora o desempenho dos algoritmos tanto quanto ao tempo médio de execução quanto a quantidade média de nós computados.

Tabela 3.1: Comparação entre os algoritmos PFS e PFS_RANDOM. O tempo de execução do segundo é maior do que o primeiro enquanto a quantidade de chamadas da função custo é parecida em ambos.

Instância		Tempo de execução médio (s)		Número médio de cálculos de custo	
$ S $	$2^{ S }$	PFS	PFS_RANDOM	PFS	PFS_RANDOM
10	1024	0.013 ± 0.003	0.014 ± 0.003	590.8 ± 198.5	599.5 ± 177.5
11	2048	0.019 ± 0.004	0.022 ± 0.007	1114.8 ± 331.3	1090.1 ± 350.3
12	4096	0.029 ± 0.008	0.036 ± 0.013	1848.6 ± 600.8	1835.7 ± 683.0
13	8192	0.060 ± 0.018	0.090 ± 0.039	4314.4 ± 1496.4	4201.1 ± 1580.7
14	16384	0.100 ± 0.041	0.191 ± 0.110	7323.4 ± 3318.9	7333.8 ± 3161.0
15	32768	0.180 ± 0.076	0.453 ± 0.311	12958.1 ± 5654.0	12807.5 ± 5753.7
16	65536	0.406 ± 0.185	1.715 ± 1.400	27573.8 ± 12459.5	27036.9 ± 12687.5
17	131072	0.717 ± 0.397	5.416 ± 5.266	48176.2 ± 26938.3	47852.1 ± 26427.6
18	262144	1.325 ± 0.754	15.890 ± 17.726	84417.9 ± 48587.7	84025.0 ± 48882.4
19	524288	2.771 ± 1.603	69.600 ± 82.342	167659.1 ± 99686.7	164612.1 ± 102018.3

Tabela 3.2: Comparação entre os algoritmos PFS e PFS_LEFTMOST. O tempo de execução e também o número de chamadas da função custo é maior para o PFS_LEFTMOST.

Instância		Tempo de execução médio (s)		Número médio de cálculos de custo	
$ S $	$2^{ S }$	PFS	PFS_LEFTMOST	PFS	PFS_LEFTMOST
10	1024	0.013 ± 0.002	0.023 ± 0.004	606.1 ± 133.5	665.0 ± 165.8
11	2048	0.020 ± 0.004	0.042 ± 0.010	1122.1 ± 351.2	1316.6 ± 382.2
12	4096	0.032 ± 0.008	0.078 ± 0.024	2183.7 ± 733.2	2515.8 ± 871.3
13	8192	0.054 ± 0.017	0.160 ± 0.061	3887.7 ± 1389.9	4716.8 ± 1777.8
14	16384	0.107 ± 0.034	0.345 ± 0.133	7851.2 ± 2793.0	9506.8 ± 3673.9
15	32768	0.196 ± 0.085	0.672 ± 0.274	13780.3 ± 6049.9	17071.6 ± 7005.1
16	65536	0.348 ± 0.189	1.271 ± 0.661	24106.5 ± 13159.9	30055.6 ± 15363.6
17	131072	0.785 ± 0.361	3.137 ± 1.476	52369.0 ± 24751.2	67585.6 ± 30978.4
18	262144	1.445 ± 0.657	6.146 ± 3.032	92095.9 ± 42566.6	120635.7 ± 58039.0
19	524288	3.298 ± 1.883	13.881 ± 7.595	199151.0 ± 112167.8	256078.6 ± 135958.4
20	1048576	6.141 ± 3.728	28.733 ± 18.120	356259.2 ± 218253.1	465255.8 ± 276843.3
21	2097152	10.817 ± 7.714	52.374 ± 38.565	608984.4 ± 432151.7	801620.2 ± 561000.7

A tabela 3.1 mostra os resultados dos experimentos para os algoritmos PFS e sua variante que seleciona raízes de maneira aleatória e igualmente distribuída, o que chamamos de PFS_RANDOM. Podemos perceber na tabela que o número de chamadas de função custo tem média e variância parecidas em ambos algoritmos. O tempo médio de execução, por outro lado, é maior para o algoritmo PFS_RANDOM. Portanto, podemos concluir que a esta modificação do PFS não trouxe melhorias nos quesitos que estamos avaliando.

A tabela 3.2 mostra os resultados dos experimentos para os algoritmos PFS e sua variante que seleciona a raiz com maior potencial de poda, o que chamamos de PFS_LEFTMOST. A tabela mostra que o último algoritmo teve desempenho pior em tempo de execução e fez mais chamadas da função de custo, isto é, percorreu mais nós do que o PFS. Assim, concluímos que esta modificação não foi vantajosa ao algoritmo.

3.2.4 Comentários sobre experimentos

Os experimentos mostraram que a modificação `PFS_RANDOM` teve um número parecido de chamadas da função custo. Pelo fato destes números serem parecidos, acreditamos que o percorrimento do reticulado também seja parecido, o que implica que semanticamente esta modificação é equivalente ao algoritmo original. Entretanto, observamos que o `PFS_RANDOM` teve tempo de execução médio maior. Na busca por entender como o algoritmo pode ter ficado mais caro computacionalmente se sua dinâmica é essencialmente a mesma, investigamos a estrutura de `map` do `C++` e descobrimos que a forma com que implementamos a escolha aleatória de um elemento desta estrutura, avançando um iterador por uma quantidade aleatória de passos, adiciona tempo de complexidade linear (sobre o número de raízes) ao algoritmo, justificando o aumento de tempo de execução.

A outra modificação, `PFS_LEFTMOST`, não tem adições de complexidade computacional na escolha de raízes, visto que ela é feita da mesma forma no algoritmo original, apenas com diferente regra de ordenação. Esta modificação teve um número maior de cálculos da função de custo, o que significa que mais elementos do reticulado foram percorridos (menos foram podados) e também explica o maior tempo de execução. Podemos concluir que esta modificação não é semanticamente equivalente ao `PFS` porque implica em um percorrimento diferente do espaço de busca, evidenciado por mais cálculos da função custo.

3.3 Melhoramentos no controle de raízes

A quantidade de raízes em uma floresta pode ser muito grande no decorrer do algoritmo `PFS`. Um pior caso, exagerado, é considerar que os percorrimentos foram feitos sempre em uma das florestas e que a função de custo é monótona tal que não houveram podas por conta de aumento de custo; então, esta floresta poderá ter até $2^n - n + 1$ raízes. Desta forma, a estrutura de dados utilizada para gerenciar a floresta deve ser eficiente e capaz de armazenar muitas entradas. A estrutura `map` do `C++` é implementada através de uma árvore rubro-negra, uma árvore de busca binária que é balanceada mas não ordenada. Por isso, acreditamos que outras estruturas devem ser consideradas para gerenciar as raízes das florestas do `PFS`. Desta maneira, podemos encontrar novas estruturas mais eficientes para o problema.

Introduzimos então o uso de diagramas de decisão binária ordenados (Ordered Binary Decision Diagram (OBDD)). Esta estrutura representa uma função Booleana $f : \{0, 1\}^k \rightarrow \{0, 1\}$ através de uma árvore. Para se encontrar o valor de um conjunto $X \in \{0, 1\}^n$, percorremos um caminho da árvore ramificando de acordo com a presença ou não de uma variável, e o valor deste conjunto deve ser encontrado em uma folha da árvore que é o último vértice do caminho. Em nossa implementação precisamos modificar estes diagramas para que eles permitam armazenar nós ao invés de valores Booleanos. Além disso, a nossa OBDD remove nós redundantes, assim sempre que um vértice tem dois filhos que são folhas vazias, este vértice torna-se uma folha vazia. A figura 3.5 mostra um exemplo de OBDD que representa uma floresta do algoritmo `PFS`.

3.3.1 Escolha de raiz

Ao deixar de utilizar a estrutura de `map` como era feito na implementação original do `PFS`, precisamos definir uma regra para escolha de raízes. Decidimos utilizar a regra de escolha aleatória de raízes, dado que ela se mostrou semanticamente equivalente a implementação original (veja 3.2.3).

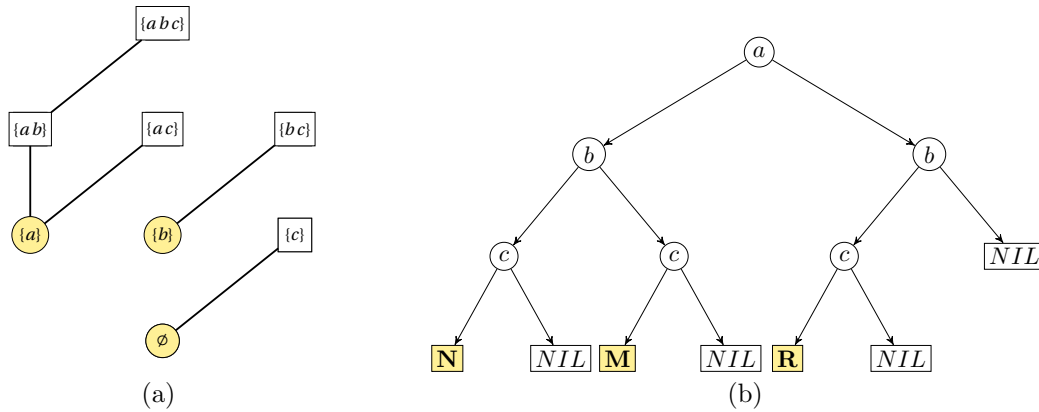


Figura 3.5: Exemplo de OBDD que representa uma floresta do PFS. Esta OBDD contém os nós **N**, **M** e **R**, que representam respectivamente os subconjuntos 000, 010 e 100. As folhas *NIL* indicam que os subconjuntos de tal caminho na OBDD não são raízes na floresta, como por exemplo os subconjuntos 11X

Para escolher uma raiz em uma OBDD precisamos apenas descer um caminho da raiz até uma folha não vazia (que contenha um nó) guardando os elementos que pertencem ao subconjunto que o caminho representa. A nossa estrutura sempre contrai folhas redundantes para apenas uma, ou seja, não existem vértices na árvore que possuam dois filhos que são folhas vazias, portanto ao descer um caminho pela árvore, é sempre possível escolher a ramificação (ir a direita ou esquerda de um nó) que nos leve a uma folha com um nó (Algoritmo 9).

GET-OBDD-NODE (X)

```

1:  $v \leftarrow root$ 
2: while  $v$  não é folha do
3:   if  $v.element \in X$  then
4:      $v \leftarrow v.right\_child$ 
5:   else
6:      $v \leftarrow v.left\_child$ 
7:   end if
8: end while
9: return  $v.node$ 

```

Algorithm 9: Pseudo-código de uma função que recebe um conjunto $X \in \mathcal{PS}$ e devolve o nó que representa este conjunto, se estiver na árvore.

Desta maneira a escolha da raiz é feita por uma sequência de escolhas de ramificação, para cada vértice da OBDD visitado, que levam da raiz da OBDD até um nó que é folha. Para fazer isto de maneira aleatória e identicamente distribuída entre os nós das folhas, basta armazenar em cada vértice da árvore quantas raízes estão a sua direita e quantos estão a sua esquerda e então dar pesos de escolhas equivalentes a quantidade de raízes para cada lado de ramificação (Algoritmo 10).

3.3.2 Testes com instâncias artificiais

Testamos experimentalmente esta variação do PFS que usa OBDDs no controle das florestas. Vamos analisar o desempenho desta variação quanto ao tempo de execução e número de cha-

GET-RANDOM-OBDD-NODE ()

```

1:  $v \leftarrow root$ 
2: while  $v$  não é folha do
3:    $W \leftarrow v.right\_child.weight + v.left\_child.weight$ 
4:   seja  $r$  um número aleatório entre 0 e  $W$ 
5:   if  $r \leq v.right\_child.weight$  then
6:      $v \leftarrow v.right\_child$ 
7:   else
8:      $v \leftarrow v.left\_child$ 
9:   end if
10: end while
11: return  $v.node$ 

```

Algorithm 10: Pseudo-código de uma função que devolve um nó aleatório da floresta de maneira identicamente provável.

Tabela 3.3: Comparação entre os algoritmos PFS e OPFS. O número de chamadas médio da função custo é parecido enquanto o tempo de execução é maior para o OBDD.

Instância		Tempo de execução médio (s)		Número médio de cálculos de custo	
$ S $	$2^{ S }$	PFS	OPFS	PFS	OPFS
10	1024	0.013 ± 0.003	0.018 ± 0.003	598.0 ± 192.8	635.5 ± 171.9
11	2048	0.020 ± 0.004	0.029 ± 0.007	1152.1 ± 314.7	1117.9 ± 336.4
12	4096	0.031 ± 0.010	0.049 ± 0.013	2024.1 ± 751.6	2048.2 ± 700.9
13	8192	0.057 ± 0.017	0.097 ± 0.033	3996.3 ± 1431.6	3973.4 ± 1462.6
14	16384	0.094 ± 0.038	0.171 ± 0.063	6634.8 ± 2944.0	6906.5 ± 2786.5
15	32768	0.182 ± 0.079	0.323 ± 0.156	13140.1 ± 6020.6	12711.2 ± 6319.7
16	65536	0.370 ± 0.169	0.660 ± 0.314	25658.2 ± 11606.7	25303.4 ± 12169.5
17	131072	0.819 ± 0.370	1.480 ± 0.665	53344.9 ± 24350.4	53217.2 ± 24154.5
18	262144	1.515 ± 0.905	2.736 ± 1.626	94677.6 ± 54496.3	94079.4 ± 55435.6
19	524288	2.612 ± 1.869	4.818 ± 3.355	156150.5 ± 107369.8	156021.8 ± 107516.8
20	1048576	6.085 ± 3.900	11.550 ± 7.661	344144.1 ± 212627.1	343229.2 ± 212624.4

madras da função de custo.

Como podemos ver na tabela 3.3, o número de chamadas da função de custo do algoritmo modificado é similar ao do PFS, o que indica que ambos são semanticamente equivalentes; o que já tinha sido constatado na variante do PFS que também escolhia raízes aleatoriamente, mas usando *map* para controle de floresta. Entretanto, a tabela também mostra que o tempo de execução da modificação é maior do que do algoritmo original. Desta maneira, o uso de OBDDs para o controle das florestas não foi vantajoso.

3.4 Paralelização do código

A dinâmica do algoritmo Poset-Forest-Search transforma o reticulado Booleano em uma floresta, ou seja, em um conjunto de árvores que são disjuntas. Por isso, o percorrimento destas árvores pode ser feito de maneira paralela sem interferências. Desta maneira, propomos uma paralelização do código de Reis utilizando a biblioteca *OpenMP*, que nos permite paralelizar blocos de instrução com anotações feitas ao compilador.

O primeiro ponto que devemos nos atentar ao paralelizar este código é que as árvores do

espaço de busca são disjuntas apenas se estamos considerando uma floresta. Ambas florestas representam o mesmo espaço de busca, portanto é possível que duas árvores de florestas diferentes se intersectem em alguns nós. Isto significa que fazer o percorrimento em ambas as direções pode causar recálculos, isto é, um nó pode ser visitado desnecessariamente por mais de uma thread por mais de uma vez; além disso, é possível que uma árvore que foi podada em uma direção ainda esteja sendo percorrida em outra direção.

Visando simplificar o trabalho, definimos que a paralelização ocorre em iterações do procedimento principal do PFS. Assim, a escolha de uma direção deve ser feita por uma thread principal e, assim cada thread deve escolher uma raiz para ser percorrida em tal direção. Desta maneira cada thread faz a ramificação e atualização da floresta dual e pausam em uma barreira, que sincroniza todas as threads para o finalização da iteração e começo da próxima.

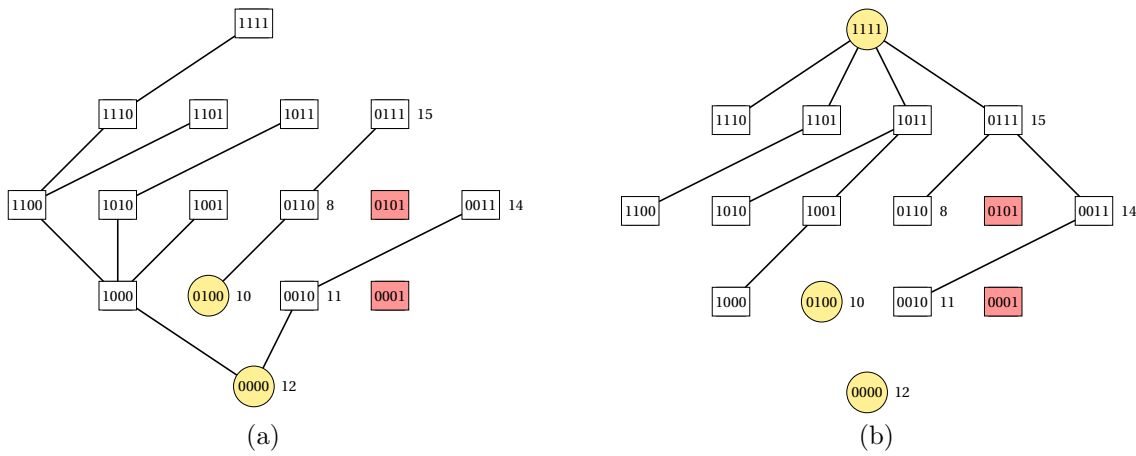


Figura 3.6: Exemplo de espaço de busca do PFS; a floresta da figura 3.6(a) é \mathcal{F}_A enquanto a da figura 3.6(b) é \mathcal{F}_B . Estas florestas representam o espaço de busca após duas iterações do algoritmo, ambas feitas na direção de baixo para cima, ou seja, ramificando a floresta \mathcal{F}_A . Na primeira iteração, seleciona-se a raiz 0000 para percorrimento e remove-se o nó 0001; na floresta dual, a atualização remove o nó 0001 e cria a raiz 0000. Na segunda iteração, escolhe-se novamente a raiz 0000 e a ramificação é feita para 0100 (que se torna raiz) e para 0101, que é removido do espaço; na floresta dual, remove-se o nó 0101 e o nó 0100 torna-se raiz.

Entretanto, apesar desta simplificação tornar a fase de ramificação quase independente entre as linhas de processamento, a fase de atualização de floresta dual pode não ser. Como resultado, condições de corrida não tratadas podem causar inconsistências na atualização da floresta. As figuras 3.6–3.7 mostram um exemplo onde duas linhas de execução podem causar este tipo de inconsistência. A figura 3.6 mostra o espaço de busca do PFS no começo de uma iteração, enquanto as figuras 3.7(a)–3.7(b) e 3.7(c)–3.7(d) mostram respectivamente os resultados ao fim de uma iteração para duas diferentes escolhas de raízes. Na figura 3.7(b), que mostra a floresta \mathcal{F}_B quando a raiz escolhida é 0100, o nó 0111 é removido do espaço de busca; na figura 3.7(d), que mostra a floresta \mathcal{F}_B quando a raiz escolhida é 0000, o nó 0111 torna-se raiz. Assuma então que esta iteração do algoritmo é feita com duas linhas de processamento P_1 e P_2 , que fazem o percorrimento, respectivamente, a partir de 0000 e 0100. Se a thread P_1 cria o nó 0111 antes de P_2 removê-lo, então não há inconsistências, entretanto se o contrário acontece, criamos uma raiz espúria na floresta \mathcal{F}_B .

Para contornar este problema, utilizamos uma outra estrutura de dados do C++ capaz de armazenar um conjunto. Neste conjunto armazenamos todos os nós que foram removidos do espaço de busca em uma iteração e assim evitamos a criação de raízes espúrias. Note que

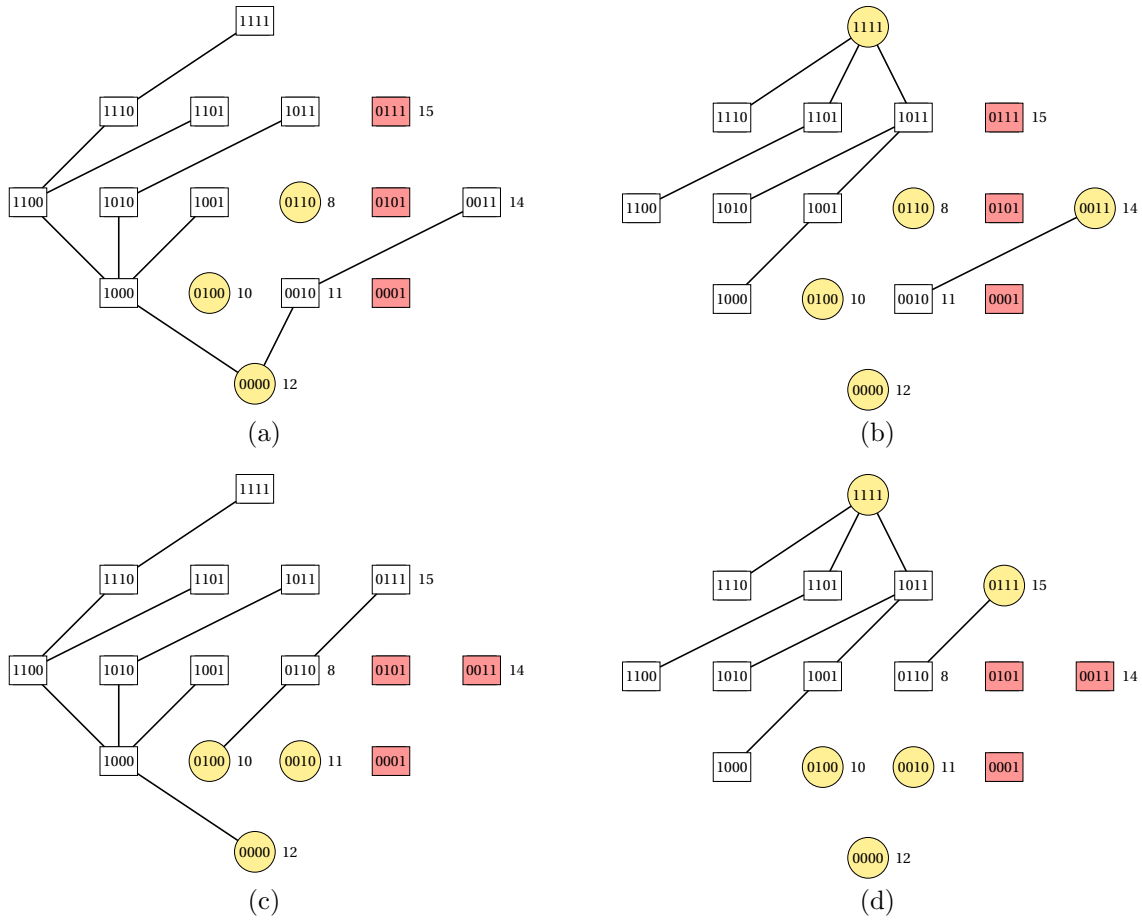


Figura 3.7: Continuação do exemplo da figura 3.6 para duas escolhas diferentes de raízes. As figuras 3.7(a) e 3.7(b) mostram o resultado da continuação da execução do algoritmo após escolha da raiz 0100 de \mathcal{F}_A em um percorrimento de baixo para cima que ramifica até o nó 0111, que é podado da floresta \mathcal{F}_A ; na floresta dual, o nó 0111 é removido e os nós 0110 e 0011 tornam-se raízes. As figuras 3.7(c) e 3.7(d) mostram a continuação da execução quando a raiz 0000 de \mathcal{F}_A é escolhida para percorrimento, que ramifica até o nó 0011, que é podado da floresta \mathcal{F}_A ; na floresta dual, o nó 0011 é removido e o nó 0010 torna-se raiz.

esse conjunto é esvaziado a cada iteração do PFS, portanto não deve ocupar grande espaço de memória; se este conjunto não fosse limpo a cada iteração ele poderia atingir tamanhos exponenciais sobre o número de características do problema, comprometendo a escalabilidade do algoritmo.

Voltando ao exemplo anterior, das figuras 3.6–3.7, com a criação do conjunto de nós deletados, se a linha de processamento P_1 deleta o nó 0111 antes da criação em P_2 , então o nó já estará no conjunto de nós deletados quando P_2 tentar adicioná-lo na floresta e assim a criação desta raiz pode ser evitada. Se a ordem é contrária, então o nó é criado e depois deletado, o que pode ser desnecessário, porém consistente.

3.4.1 Testes com instâncias artificiais

Testamos experimentalmente esta versão paralela do PFS, que chamamos aqui de PPFS. Vamos agora analisar o desempenho deste algoritmo quanto ao tempo de execução e número de chamadas da função de custo.

Tabela 3.4: Comparação entre os algoritmos PFS e PPFS. O algoritmo PPFS apresenta um número similar de média de chamadas da função custo ao PFS, mas possui tempo de execução médio maior.

Instância		Tempo de execução médio (s)		Número médio de cálculos de custo	
$ S $	$2^{ S }$	PFS	PPFS	PFS	PPFS
10	1024	0.011 ± 0.001	0.146 ± 0.027	643.6 ± 133.0	626.5 ± 151.1
11	2048	0.017 ± 0.004	0.227 ± 0.062	1151.0 ± 359.7	1135.6 ± 381.1
12	4096	0.029 ± 0.007	0.385 ± 0.113	2173.1 ± 652.5	2139.2 ± 710.3
13	8192	0.049 ± 0.015	0.640 ± 0.237	3839.8 ± 1376.6	3743.5 ± 1532.9
14	16384	0.104 ± 0.037	1.337 ± 0.513	8175.9 ± 3037.4	8026.4 ± 3303.7
15	32768	0.163 ± 0.078	2.010 ± 1.096	12459.6 ± 6164.5	12062.2 ± 6897.2
16	65536	0.360 ± 0.163	4.483 ± 2.030	27027.3 ± 12397.0	26835.7 ± 12446.9
17	131072	0.664 ± 0.362	8.072 ± 4.370	48001.9 ± 26149.2	48093.4 ± 26233.2
18	262144	1.250 ± 0.690	14.341 ± 8.062	85880.9 ± 47950.8	86050.8 ± 49186.8
19	524288	2.936 ± 1.629	34.639 ± 19.074	198503.0 ± 108116.1	197832.5 ± 110659.6
20	1048576	5.024 ± 3.097	61.038 ± 38.250	321495.8 ± 198004.3	318507.0 ± 199354.3

Podemos observar na tabela 3.4 que os números de chamadas da função custo dos algoritmos PFS e PPFS são parecidos. Isto quer dizer que a nossa paralelização não trouxe grandes modificações semânticas ao algoritmo. Entretanto, o tempo médio de execução teve diferenças na versão paralela, que gastou mais tempo do que o algoritmo original em todas as instâncias. A tabela mostra que o PPFS foi pelo menos 10 vezes mais lento que a implementação serial para as instâncias vistas.

3.4.2 Comentários sobre experimentos

Acreditamos que os resultados pobres do algoritmo PPFS se deram por conta da complexidade da atualização da floresta dual. Apesar das ramificações serem feitas em paralelo com pouco ou nenhum entrelace de linhas de processamento, esta rotina consome tempo de execução pequeno comparado com a rotina de atualização de florestas. Com a paralelização, esta atualização tornou necessária uma nova estrutura de dados ao algoritmo para tratar condições de corrida que podiam adicionar inconsistências as florestas. Além disso, a atualização depende de adições, remoções e verificações nas florestas que não podem ser feitas em paralelo, criando muitas seções críticas no código, o que deve ter sido a principal causa da piora de tempo, pois estes blocos de código implicam em uma troca constante de contextos pelos processadores, que não podem processar blocos críticos ao mesmo tempo.

3.5 O algoritmo UBB-PFS

Tendo em vista que o principal problema da paralelização do PFS foi o fato de que há muito entrelace nas linhas de execução, propomos um novo algoritmo baseado no UBB e PFS que fosse também paralelo, mas com pouca ou nenhuma interferência entre as linhas de execução, chamamos este algoritmo de UBB-PFS.

3.5.1 Descrição

Este algoritmo tem duas etapas principais. A primeira etapa é idêntica ao UBB, e faz o percorrimto de uma árvore do espaço de busca como em uma busca em profundidade, podendo os nós em que o custo cresce. Depois de um certo número de iterações, a primeira etapa é

finalizada e então se dá início a segunda etapa, que deve resolver cada sub-árvore do espaço de busca corrente utilizando o algoritmo PFS. A solução das sub-árvores deve ocorrer de maneira independente, possibilitando a paralelização mais fácil do código.

O pseudo-código do algoritmo 11 mostra como é feita a primeira etapa do algoritmo e também serve de base para a explicação da segunda etapa UBB-PFS e da corretude do algoritmo, pois possui os seguintes invariantes no final da linha 16:

- a) Para todo nó do espaço de busca que não é raiz, existem três possibilidades: ou ele foi visitado e está em \mathcal{M} , ou podado, ou está contido em uma sub-árvore tal que a raiz está na pilha \mathcal{S} . Todo nó que é raiz está em \mathcal{M} ;
- b) Todo nó na pilha \mathcal{S} é raiz de uma sub-árvore completa.

UBB-PFS (\mathcal{S}, c)

```

1:  $\mathcal{M} \leftarrow \emptyset$ 
2: inicialize a pilha  $\mathcal{S}$  vazia
3: empilhe  $(\emptyset, \mathcal{S}, c(\emptyset))$  em  $\mathcal{S}$ 
4: while  $\mathcal{S}$  não vazia do
5:   desempilhe  $(Y, X, cost_Y)$  de  $\mathcal{S}$ 
6:    $X_{Y_i} \leftarrow \emptyset$ 
7:   while  $X \neq \emptyset$  do
8:     remova  $s_i$  de  $X$ 
9:      $Y_i \leftarrow Y \cup \{s_i\}$ 
10:     $cost_{Y_i} \leftarrow c(Y_i)$ 
11:    if  $cost_{Y_i} \leq cost_Y$  then
12:      empilhe  $(Y_i, X_{Y_i}, cost_{Y_i})$  em  $\mathcal{S}$ 
13:    end if
14:     $X_{Y_i} \leftarrow s_i$ 
15:  end while
16:   $\mathcal{M} \leftarrow \mathcal{M} \cup \{Y\}$ 
17:  if FINISHSTEPONE() then
18:     $\mathcal{N} \leftarrow \text{SOLVETREES}(\mathcal{S}, \mathcal{S}, c)$ 
19:    esvazie  $\mathcal{S}$ 
20:  end if
21: end while
22:  $\mathcal{M} \leftarrow \mathcal{M} \cup \mathcal{N}$ 
23: return  $\{M \in \mathcal{M} : c(M) \text{ é mínimo}\}$ 

```

Algorithm 11: Pseudo-código do algoritmo UBB-PFS. A primeira etapa consiste no percorrimto feito nas linhas 4 - 21, de maneira idêntica ao UBB.

O invariante a) nos garante que o mínimo global já está em \mathcal{M} ou é mínimo dentro de uma das árvores que tem raiz em \mathcal{S} , portanto, quando estamos na linha do invariante, resolver o problema original é igual a achar o mínimo de cada uma das árvores e do conjunto \mathcal{M} . O invariante b) garante que toda árvore com raiz Y contém exatamente os subconjuntos do intervalo $[Y, X \cup Y]$.

Para resolver cada sub-árvore com raiz em \mathcal{S} , criamos o seguinte problema U-curve auxiliar. Seja $\langle \mathcal{S}, c \rangle$ uma instância do problema U-curve e seja Y uma raiz de uma sub-árvore do problema e X um conjunto de características tal que os nós desta sub-árvore seja exatamente o intervalo

$[Y, X \cup Y]$. Considerando que este intervalo é igual ao conjunto $\{Y \cup W : W \in \mathcal{P}(X)\}$, então, encontrar o mínimo dentro deste conjunto é exatamente resolver a instância do problema U-curve $\langle S_X, c_Y \rangle$ tal que:

$$S_X = X$$

$$c_Y(X') = c(X' \cup Y), \quad X' \in \mathcal{P}(S_X).$$

Cada uma dessas instâncias é resolvida utilizando a função **SolveTrees** (Algoritmo 12).

SOLVETREES(\mathcal{S}, S, c)

```

1:  $\mathcal{N} \leftarrow \emptyset$ 
2: while  $\mathcal{S}$  não vazia do
3:   desempilhe  $(Y, X, cost_Y)$ 
4:    $S_X \leftarrow X$ 
5:   seja  $c_Y : X' \mapsto c(X' \cup Y)$ 
6:    $N \leftarrow \text{POSET-FOREST-SEARCH}(S_X, c_Y)$ 
7:    $\mathcal{N} \leftarrow \mathcal{N} \cup N$ 
8: end while
9: return  $\mathcal{N}$ 

```

*Algorithm 12: Pseudo-código da função **SolveTrees**.*

A função **FINISHSTEPONE** determina qual é a iteração em que o algoritmo deve terminar a primeira etapa. Esta função Booleana controla, de certa forma, a maneira com que o trabalho é dividido entre etapa 1 e 2 do código. Se ela nunca for verdadeira, então o UBB-PFS deve se comportar exatamente como o UBB. Além disso, a segunda etapa deve ser rodada em linhas de processamento paralelos, portanto esta função também influencia a distribuição de trabalho e nível de paralelização.

3.5.2 Paralelização

A paralelização deste algoritmo também foi feita com a biblioteca *OpenMP*. Conseguimos paralelizar este código com apenas algumas anotações para o compilador, que indicam que a função **SOLVETREES** deve criar tarefas (*tasks*) para cada chamada do algoritmo **POSET-FOREST-SEARCH**, e também que deve haver uma barreira que só permite o retorno da função **SOLVETREES** quando todas as tarefas criadas foram resolvidas.

Para que a paralelização traga melhoras significativas é esperado que haja um número razoável de árvores na pilha \mathcal{S} . Um exemplo de número de raízes que é razoável para paralelização é a quantidade de processadores da máquina. A função **FINISHSTEPONE** deve garantir que terminamos a primeira etapa do UBB-PFS com um número razoável de raízes na pilha. Note que o número de raízes é limitado pela própria topologia do problema; se a função é, por exemplo, monótona crescente, então a única raiz empilhada é a do conjunto vazio.

Em nossa implementação, definimos que a função **FINISHSTEPONE** é verdadeira quando o número de raízes é maior que o número de cores da máquina ou quando o número de iterações é maior do que duas vezes a quantidade de características.

3.5.3 Experimentos com instâncias artificiais

Testamos o algoritmo UBB-PFS em experimentos computacionais. Analisaremos agora o desempenho dos algoritmos tanto quanto ao tempo médio de execução quanto a quantidade de nós computados.

Tabela 3.5: Comparação de tempo médio de execução entre os algoritmos UBB, PFS e UBB-PFS. Podemos observar que o PFS foi o mais lento enquanto o UBB foi o mais rápido e o UBB-PFS teve desempenho intermediário para estas instâncias. Este teste continua na tabela 3.6, que mostra apenas o UBB e o UBB-PFS já que o PFS mostrou ter desempenho pior.

Instância		Tempo de execução médio (s)		
$ S $	$2^{ S }$	UBB	PFS	UBB-PFS
10	1024	0.006 ± 0.001	0.011 ± 0.002	0.023 ± 0.004
11	2048	0.007 ± 0.001	0.017 ± 0.004	0.026 ± 0.004
12	4096	0.010 ± 0.003	0.029 ± 0.009	0.034 ± 0.006
13	8192	0.013 ± 0.006	0.047 ± 0.016	0.044 ± 0.011
14	16384	0.024 ± 0.013	0.094 ± 0.034	0.068 ± 0.023
15	32768	0.043 ± 0.026	0.186 ± 0.074	0.113 ± 0.042
16	65536	0.083 ± 0.060	0.339 ± 0.168	0.187 ± 0.082
17	131072	0.161 ± 0.122	0.650 ± 0.347	0.326 ± 0.175
18	262144	0.321 ± 0.233	1.482 ± 0.768	0.703 ± 0.380
19	524288	0.620 ± 0.447	2.711 ± 1.562	1.309 ± 0.729
20	1048576	1.312 ± 0.970	5.007 ± 3.302	2.478 ± 1.547
21	2097152	2.494 ± 1.893	11.125 ± 6.749	5.458 ± 3.294
22	4194304	4.589 ± 4.122	19.085 ± 15.147	8.832 ± 6.846
23	8388608	12.228 ± 7.922	40.323 ± 29.649	18.891 ± 12.786
24	16777216	24.273 ± 16.277	113.332 ± 76.688	67.178 ± 46.516

A tabela 3.5 mostra o tempo de execução dos algoritmos PFS, UBB-PFS e UBB. O UBB-PFS teve tempos de execuções médios menores do que o PFS, portanto precisamos investigar se ele é melhor também do que um outro algoritmo mais rápido que o PFS, o UBB. Este último mostrou ter melhor desempenho nesta tabela, entretanto, por conta da paralelização, é possível que o UBB-PFS se torne mais rápido para instâncias maiores. Investigamos isto com instâncias maiores na tabela 3.6 e constatamos que para estas instâncias o UBB ainda é mais rápido.

A tabela 3.7 mostra o número médio de nós computados pelos mesmos algoritmos. Podemos observar nesta tabela que o UBB, apesar de ser mais rápido, precisa computar mais nós que os outros algoritmos. O PFS é o algoritmo que precisa calcular menos nós, enquanto o UBB-PFS é intermediário, mas com desempenho mais próximo do PFS.

3.5.4 Comentários sobre os experimentos

Dado que o tempo de execução do UBB-PFS foi menor do que o tempo do PFS e que o número de nós computados foi menor do que o necessário pelo UBB, que é o mais rápido dos três, concluímos que existem instâncias em que o UBB-PFS é o algoritmo mais apropriado entre os três. Este tipo de instância é tal que o tempo de percorrimento é tão relevante quanto o tempo de computação da função custo, desta maneira o número maior de cálculos do UBB e o tempo maior de percorrimento do PFS tornariam o UBB-PFS a melhor opção, porque é intermediário no consumo de tempo e próximo do melhor dos três quanto ao número de cálculos da função custo.

Tabela 3.6: Comparação de tempo médio de execução entre os algoritmos UBB e UBB-PFS. O algoritmo UBB-PFS mostrou maior tempo médio de execução.

Instância		Tempo de execução médio (s)	
$ S $	$2^{ S }$	UBB	UBB-PFS
20	1048576	1.245 ± 0.861	5.106 ± 3.017
21	2097152	2.332 ± 1.900	9.178 ± 6.330
22	4194304	5.653 ± 3.904	17.405 ± 11.754
23	8388608	9.432 ± 8.938	28.746 ± 26.387
24	16777216	20.293 ± 16.147	77.392 ± 59.976
25	33554432	46.215 ± 35.837	144.196 ± 110.583

Tabela 3.7: Comparação sobre o número de chamadas de função custo entre os algoritmos UBB, PFS e UBB-PFS. Vemos nesta tabela que o número de nós computados pelo UBB é o maior enquanto o do PFS é o menor; o UBB-PFS tem desempenho intermediário, porém próximo ao do PFS.

Instância		Número médio de cálculos de custo		
$ S $	$2^{ S }$	UBB	PFS	UBB-PFS
10	1024	699.4 ± 361.3	611.3 ± 178.8	634.7 ± 209.8
11	2048	1217.2 ± 747.1	1145.4 ± 358.9	1178.8 ± 484.1
12	4096	2898.0 ± 1380.4	2103.1 ± 793.6	2363.0 ± 760.4
13	8192	4422.6 ± 3293.8	3650.9 ± 1371.9	3934.4 ± 1487.7
14	16384	10089.4 ± 6452.1	7536.3 ± 2926.1	8012.2 ± 3387.4
15	32768	19097.5 ± 12793.8	14546.5 ± 6081.0	15299.2 ± 6598.4
16	65536	37663.1 ± 28321.2	25744.0 ± 12795.4	27028.4 ± 13031.9
17	131072	73373.3 ± 55994.3	46808.9 ± 24533.5	49348.6 ± 24556.7
18	262144	150035.2 ± 108299.3	103166.6 ± 52464.7	105306.4 ± 53472.0
19	524288	292561.2 ± 210771.2	183125.7 ± 104965.4	189545.7 ± 102145.9
20	1048576	617049.5 ± 450468.2	323097.4 ± 213634.3	340694.2 ± 202389.6
21	2097152	1172641.6 ± 879148.5	691991.3 ± 413262.9	704790.2 ± 407143.8
22	4194304	2099973.2 ± 1863285.8	1133395.1 ± 874492.0	1156564.2 ± 862152.0
23	8388608	5435778.8 ± 3468245.3	2276694.5 ± 1621342.2	2345648.2 ± 1558258.5
24	16777216	10146842.9 ± 6673018.3	5527504.2 ± 3413432.3	5609052.7 ± 3337059.1

Capítulo 4

O algoritmo Parallel-U-Curve-Search (PUCS)

No capítulo anterior, vimos que a estratégia de particionar o espaço de busca utilizando o algoritmo UBB e resolvendo os casos base com o algoritmo PFS permitiu a paralelização eficiente deste último algoritmo. Nesse sentido, recentemente desenvolvemos o algoritmo **Parallel U-curve Search** (PUCS). Este algoritmo resolve o problema U-curve particionando o espaço de busca em partes que podem ser resolvidas independentemente e de forma paralela, utilizando para resolver casos base o próprio PFS ou outro algoritmo. Além disso, a dinâmica do PUCS depende de parâmetros que determinam o tempo de execução e qualidade da solução obtida, permitindo assim ao usuário adequar o algoritmo aos recursos computacionais disponíveis.

4.1 Princípios teóricos do algoritmo

Seja S o conjunto de características do problema em questão. O primeiro passo do particionamento é escolher arbitrariamente um subconjunto S' de S . Sejam $X, Y \in \mathcal{P}(S)$ e \sim a relação:

$$X \sim Y \iff (X \cap S') = (Y \cap S').$$

\sim é uma relação de equivalência, pois nela valem:

- Reflexividade:

$$X \sim X, \text{ pois } (X \cap S') = (X \cap S').$$

- Simetria:

$$\begin{aligned} X \sim Y &\iff \\ (X \cap S') = (Y \cap S') &\iff \\ (Y \cap S') = (X \cap S') &\iff \\ Y \sim X. \end{aligned}$$

- Transitividade:

$$\begin{aligned} X \sim Y, Y \sim Z &\Rightarrow \\ (X \cap S') = (Y \cap S') = (Z \cap S') &\Rightarrow \\ (X \cap S') = (Z \cap S') &\Rightarrow \\ X \sim Z. \end{aligned}$$

Portanto, o conjunto das classes de equivalência definidas por \sim é uma partição do espaço de busca original. Tome como exemplo o conjunto $S = \{a, b, c\}$; se $S' = a$, então existem duas classes de equivalência no particionamento do espaço de busca que definimos, formados pelos conjuntos $\{\emptyset, b, c, bc\}$ e $\{a, ab, ac, abc\}$.

Pela definição da relação \sim temos que a presença de cada característica de S' em uma dada parte do reticulado não muda, isto é, ou ela está presente em todos subconjuntos da parte ou não está presente em nenhum, portanto, dizemos que estas variáveis são **fixas**. De modo análogo, as variáveis de $\overline{S'} = S \setminus S'$ são **livres**. Tanto variáveis fixas quanto livres podem definir reticulados Booleanos junto a relação de ordem parcial \subseteq .

O conjunto $\mathcal{P}(S')$ induz um reticulado Booleano em que cada elemento representa uma classe de equivalência do espaço de soluções do problema original, chamamos este de **reticulado externo**. Para cada classe de equivalência (nó do reticulado externo), o conjunto $\mathcal{P}(\overline{S'})$ induz um outro reticulado Booleano (**reticulado interno**) em que cada elemento representa um subconjunto de problema original. Seja $A \in \mathcal{P}(S')$ um elemento do reticulado externo, então cada $B \in \mathcal{P}(\overline{S'})$ do reticulado interno em A representa o conjunto $X = B \cup A$ do espaço de busca do problema original. A figura 4.1 apresenta um exemplo de particionamento feito pelo PUCS em um reticulado Booleano com cinco características.

Os reticulados internos e externo elucidam a estrutura recursiva do problema de seleção de características e sugerem que podemos construir uma solução ao problema original a partir de soluções de outros problemas, sobre os reticulados externo e internos, abordagem conhecida em computação como divisão e conquista. Seja $\langle S, c \rangle$ uma instância do problema de seleção de características, S' o conjunto de variáveis fixas, $\overline{S'}$ o conjunto de variáveis livres, e $A \in \mathcal{P}(S')$ um subconjunto que é nó do reticulado externo, então podemos definir um outro problema de seleção de características $\langle \overline{S'}, c_A \rangle$ em que:

$$c_A(X) = c(X \cup A), \text{ para todo } X \in \mathcal{P}(\overline{S'}). \quad (4.1)$$

Como resolver a instância $\langle \overline{S'}, c_A \rangle$ é essencialmente achar o mínimo do problema inicial restrito a classe de equivalência de A , dizemos também que estamos resolvendo a parte A . Se soubermos em qual classe o mínimo global reside, podemos resolver apenas tal parte e garantir que a solução encontrada é a solução do problema original.

4.2 Dinâmica do algoritmo

Com as estruturas de reticulado interno e externo, o PUCS resolve uma instância do problema U-curve em duas etapas. Na primeira, o algoritmo percorre o reticulado externo, fazendo podas sempre que possível, e armazena cada parte que é candidata a conter o mínimo global do problema. Na segunda etapa, para cada parte candidata, resolve-se o problema U-curve auxiliar que é equivalente ao problema original, mas restrito à parte de interesse, utilizando para este fim a função de custo definida na equação 4.1; em seguida, escolhe-se como resposta o conjunto custo mínimo entre as soluções dos problemas parciais.

4.2.1 Condições de poda

As podas eliminam do reticulado externo intervalos da forma $[X, \mathcal{P}(S')]$ ou $[\emptyset, X]$ e são realizadas sempre que a hipótese de curva em U implica que todas as partes contidas nestes intervalos não contém o mínimo global. Para entender o critério de poda, vamos definir que a **ponta superior** de um reticulado Booleano $\mathcal{P}(A)$ é o próprio conjunto A e a **ponta inferior** deste

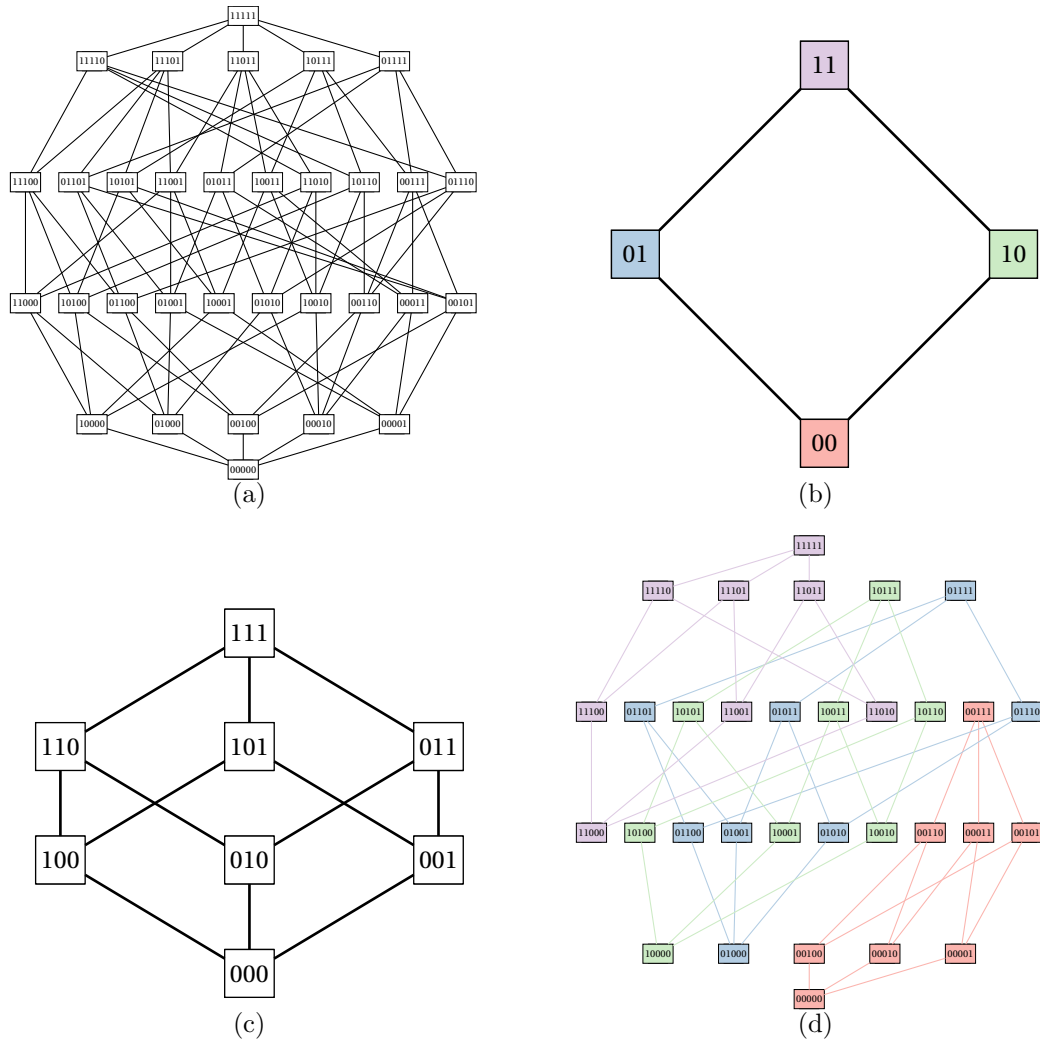


Figura 4.1: Exemplo de particionamento feito pelo algoritmo PUCS em uma instância com cinco características; o reticulado Booleano desta instância é representado na figura 4.1(a). Neste particionamento, as duas primeiras variáveis formam o conjunto de variáveis fixadas, definindo o reticulado externo (figura 4.1(b)) enquanto as outras três definem os reticulados internos, que são cópias do reticulado da figura 4.1(c). A figura 4.1(d) mostra o reticulado Booleano original, sem as arestas que ligam duas partes diferentes, e a cor de cada nó representa a qual parte tal nó pertence, de acordo com as cores do reticulado externo em 4.1(b). Note que, de fato, cada parte forma um reticulado pequeno de mesmo tamanho e com mesma estrutura que o reticulado da figura 4.1(c).

reticulado é o conjunto vazio. Note que no reticulado interno de uma parte P a ponta inferior representa o próprio conjunto de características P , enquanto que a ponta superior representa o conjunto de características $P \cup \overline{S'}$.

Teorema 4.2.1 (Critério de poda para o reticulado externo do algoritmo PUCS). *Sejam S um conjunto de características e S' um conjunto de variáveis fixas no particionamento definido pelo algoritmo PUCS. Dados $P, Q \in \mathcal{P}(S')$ dois elementos do reticulado externo com $Q \subseteq P$; se a ponta inferior do reticulado interno de P tem custo maior do que a ponta inferior do reticulado interno de Q , então todos os elementos do intervalo $[P, S']$ possuem reticulados internos cujos elementos terão custo maior do que o custo da ponta inferior do reticulado interno de Q .*

Demonstração. Se o custo da ponta inferior do reticulado interno de P é maior do que a de Q ,

então:

$$\begin{aligned} c_Q(\emptyset) &< c_P(\emptyset) \\ c(\emptyset \cup Q) &< c(\emptyset \cup P) \\ c(Q) &< c(P). \end{aligned}$$

Como $Q \subseteq P$, temos que existe uma cadeia que passa pelas pontas inferiores de Q e P . Além disso, para qualquer conjunto de características $X \in \mathcal{P}(S)$, com $P \subseteq X$, a hipótese de curva em U garante que:

$$c(P) \leq \max\{c(Q), c(X)\};$$

como $c(P) > c(Q)$, temos que $c(X) \geq c(P)$, isto é, qualquer elemento do reticulado Booleano original que cobre P tem custo estritamente maior do que o custo da ponta inferior do reticulado interno de Q . Note que para qualquer elemento R do intervalo $[P, S']$, vale que $P \subseteq R$, e como a ponta inferior do reticulado interno de P não contém nenhum elemento de $\overline{S'}$, então qualquer elemento do reticulado interno de R cobre a ponta inferior do reticulado interno de P e portanto tem custo estritamente maior do que o custo da ponta inferior do reticulado interno de Q . \square

Corolário 4.2.1 (Critério dual de poda para o reticulado externo do algoritmo PUCS). *Sejam S um conjunto de características e S' um conjunto de variáveis fixas no particionamento definido pelo algoritmo PUCS. Dados $P, Q \in \mathcal{P}(S')$ dois elementos do reticulado externo com $Q \subseteq P$; se a ponta superior do reticulado interno de P tem custo menor do que a ponta superior do reticulado interno de Q , então todos os elementos do intervalo $[P, S']$ possuem reticulados internos cujos elementos terão custo maior do que o custo da ponta superior do reticulado interno de P .*

Demonstração. Segue imediatamente da aplicação do princípio da dualidade sobre o reticulado Booleano $(\mathcal{P}(S), \subseteq)$. \square

4.2.2 Passeio aleatório no reticulado externo

O passeio do PUCS se inicia escolhendo arbitrariamente um nó inicial que pertence ao espaço de busca, então a cada passo escolhe-se aleatoriamente um vizinho do nó corrente, que também deve pertencer ao espaço de busca, e verificam-se as condições de poda. Caso elas sejam verdadeiras, o procedimento de poda elimina parte do reticulado; se o vizinho escolhido foi removido nesta etapa, então escolhe-se outro vizinho. O vizinho escolhido torna-se então o nó corrente e o procedimento é repetido até que não seja possível escolher um vizinho; quando isto ocorre e o espaço ainda não foi esgotado, escolhe-se novamente um início de passeio arbitrariamente. Todo nó visitado é automaticamente removido do espaço de busca, e os passeios aleatórios são repetidos até que o espaço de busca tenha sido esgotado, ou seja, todo nó foi ou visitado ou removido em alguma poda.

Durante a realização dos passeios aleatórios, precisamos armazenar quais são as partes candidatas a conterem o mínimo global. As podas deste algoritmo removem do espaço de busca apenas partes que obrigatoriamente não contém o mínimo global, portanto qualquer outra parte é candidata a conter tal elemento. Desta forma, como toda parte é visitada ou podada, temos que o conjunto de nós visitados e não podados é exatamente o conjunto de candidatos a conterem o subconjunto de custo ótimo.

As figuras 4.2–4.4 mostram a dinâmica do PUCS ao resolver uma instância do problema U-curve.

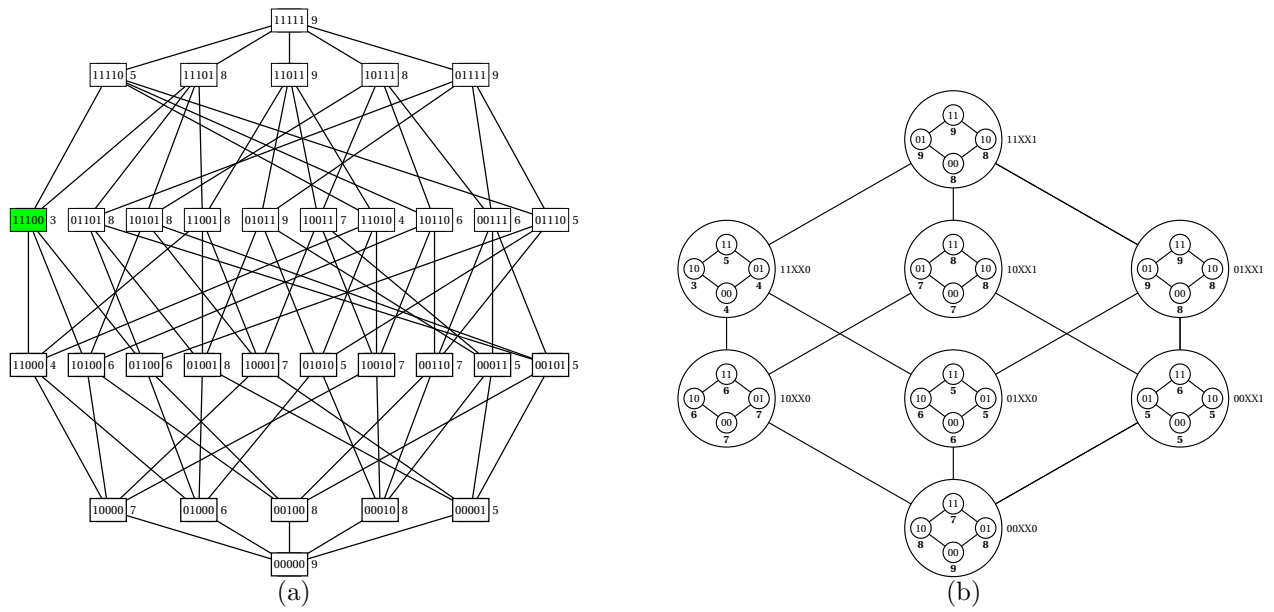


Figura 4.2: Uma instância do problema U-curve e o seu particionamento quando o conjunto de variáveis fixas S' é composto pela primeira, segunda e última variável. No reticulado externo, denotamos por X don't cares, que são as variáveis livres do particionamento. Figura 4.2(a): instância original do problema U-curve com cinco características e com a função de custo anotada ao lado dos nós do reticulado; o subconjunto colorido em verde é o elemento de custo mínimo desta instância. Figura 4.2(b): o particionamento do espaço de busca quando são fixadas a primeira, segunda e última característica.

4.2.3 Solução das partes

Ao fim do passeio aleatório, teremos uma coleção de partes que precisam ser resolvidas para se obter o conjunto de custo mínimo. Nesta etapa, o PUCS constrói para cada parte uma instância auxiliar do problema U-curve que é equivalente ao problema original, porém restrito à parte de interesse. Seja $\langle S, c \rangle$ a instância do problema original e S' o conjunto de variáveis fixas no particionamento feito pelo PUCS neste problema. Então, dada uma parte $A \in \mathcal{P}(S')$, o conjunto de custo mínimo nesta parte é exatamente a solução ótima do problema U-curve auxiliar $\langle S', c_A \rangle$ em que $c_A(X) = c(X \cup A)$ para qualquer $X \in \mathcal{P}(\overline{S'})$.

Para solucionar os problemas auxiliares, podemos chamar um outro algoritmo de seleção de características, ótimo ou sub-ótimo, e podemos inclusive chamar o próprio PUCS, tornando o algoritmo recursivo. Chamamos o último algoritmo na sequência de chamadas recursivas de **algoritmo base**; o PUCS é algoritmo base apenas no caso em que cada parte contém apenas um elemento. A escolha do algoritmo base é crítica no desempenho da chamada do PUCS no que diz respeito a uso de recursos computacionais e também na qualidade da solução obtida.

4.3 Parâmetros de funcionamento

Na seção anterior apresentamos a dinâmica básica do algoritmo PUCS, porém por simplicidade não definimos três parâmetros que regem o funcionamento do mesmo, necessários para especificar o número variáveis fixas utilizado, o número máximo de chamadas recursivas do algoritmo, e a maneira de se resolver um caso base. Apesar de ser fácil entender a dinâmica do algoritmo sem

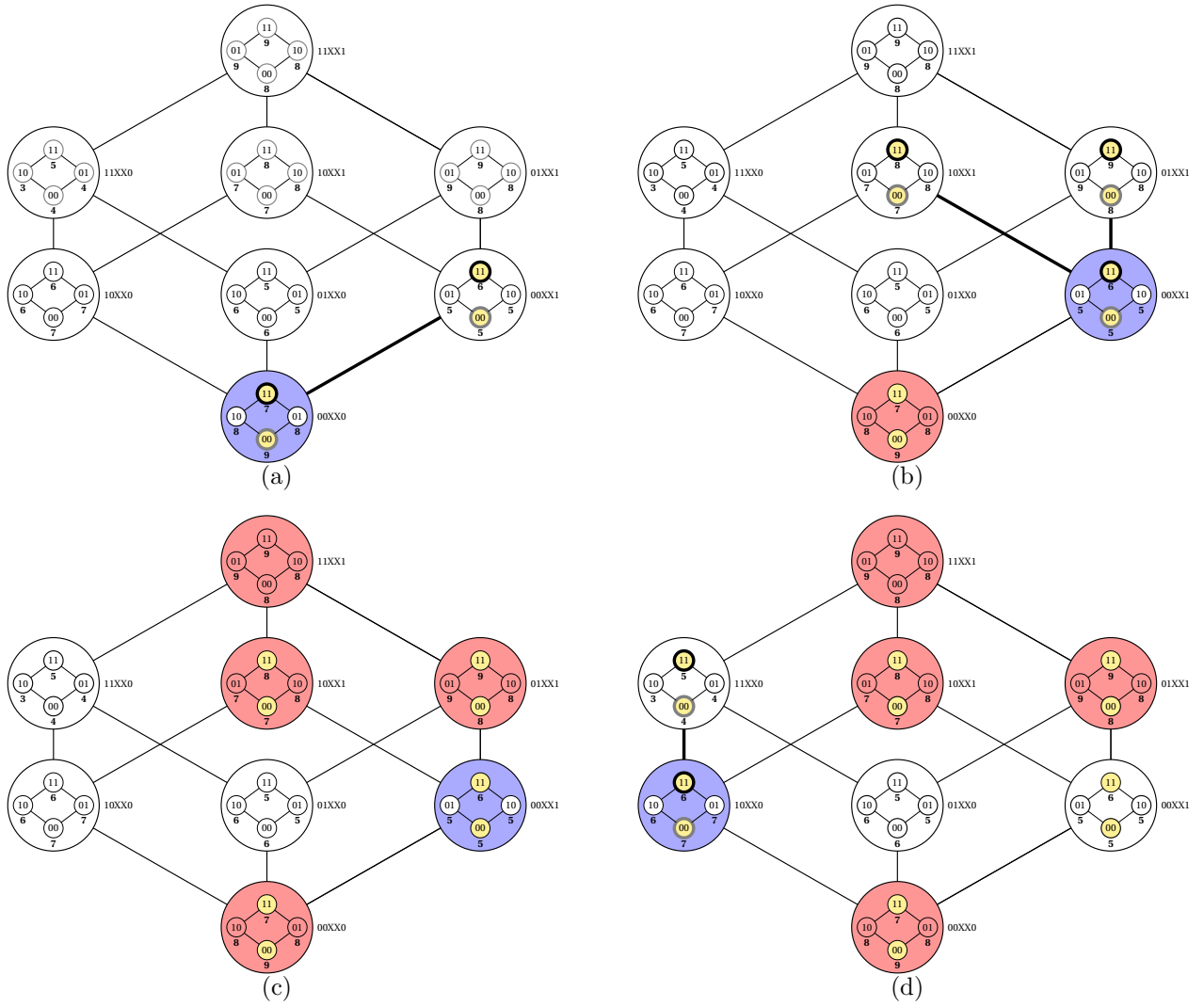


Figura 4.3: Dinâmica do algoritmo PUCS ao resolver a instância apresentada na figura 4.2. Figura 4.3(a): a parte 00XX0 é escolhida arbitrariamente para ser o início do passeio aleatório. O vizinho 00XX1 é escolhido aleatoriamente como candidato a ser o próximo nó do passeio. Como o custo da ponta superior de 00XX1 (6) é menor do que o custo da ponta superior de 00XX0 (7), o intervalo de partes $[000, 000]$ é removido do espaço de busca. Figura 4.3(b): as pontas inferiores das partes 10XX1 (7) e 01XX1 (8) têm custo maior do que a ponta inferior de 00XX1 (5), portanto os intervalos de partes $[101, 111]$ e $[011, 111]$ são removidos do espaço de busca. Figura 4.3(c): todos os vizinhos de 00XX1 foram podados, portanto esta parte torna-se candidata a conter o mínimo, e iniciamos um novo passeio. Figura 4.3(d): a parte 10XX0 é escolhida arbitrariamente como início de passeio. O custo da ponta superior de 10XX0 (6) é maior do que o custo da ponta superior de 11XX0 (5), portanto o intervalo de partes $[000, 100]$ é removido do espaço de busca.

conhecer estes parâmetros, eles têm papel crítico no desempenho do mesmo, tanto no quesito de uso de recursos computacionais quanto na qualidade da solução encontrada. Denominaremos estes parâmetros por p , l , e algoritmo base.

O parâmetro p define a quantidade de variáveis fixas no particionamento do espaço de busca. p deve estar contido no intervalo $(0, 1]$ e representa a proporção de variáveis que devem

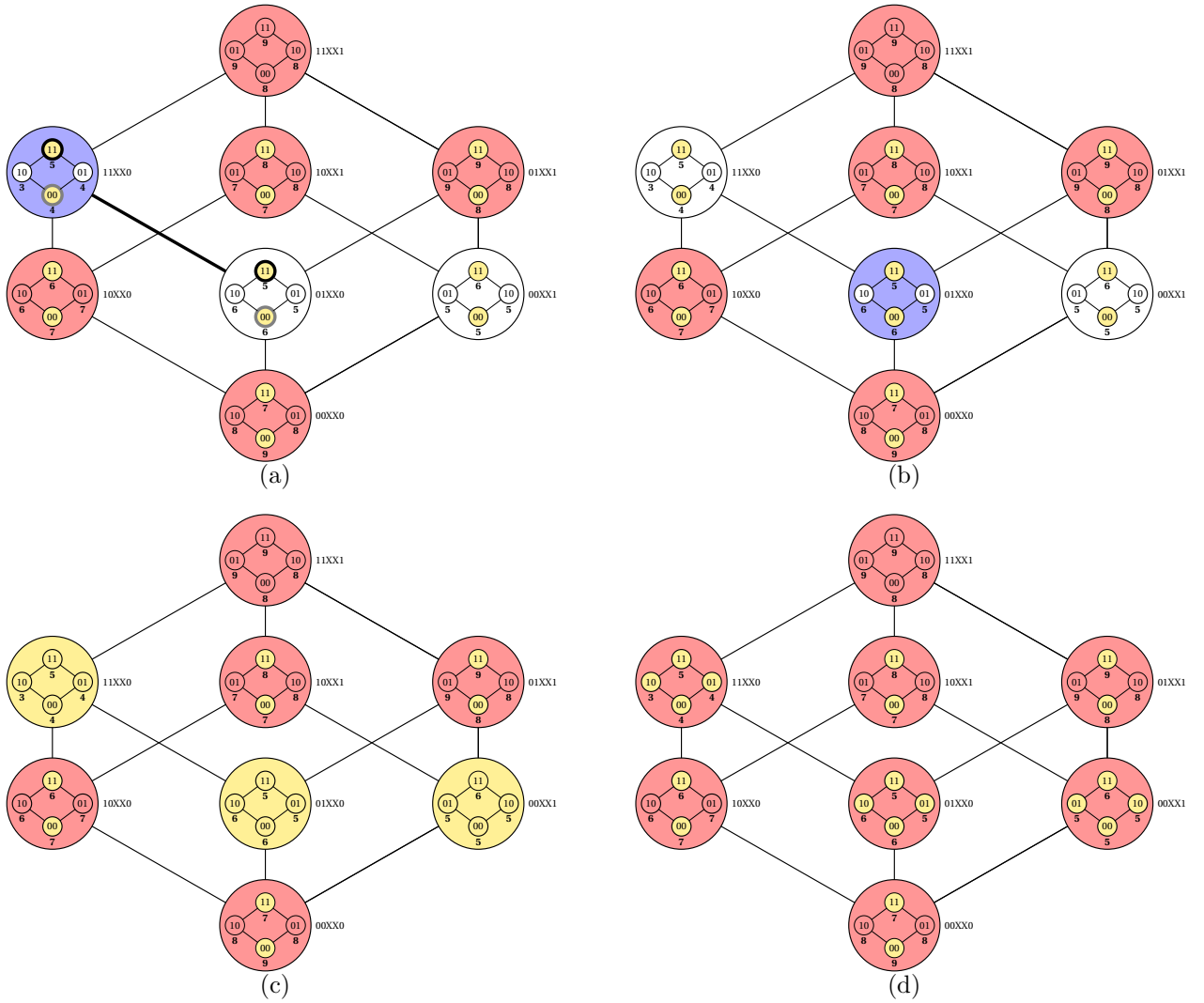


Figura 4.4: Continuação da figura 4.3. Figura 4.4(a) Nenhuma poda é realizada ao comparar 11XX0 com 01XX0, portanto a última torna-se o nó corrente e a primeira torna-se candidata a conter o mínimo. Figura 4.4(b) A parte 01XX0 torna-se o nó corrente, mas como não possui vizinho no espaço de busca é removida do espaço de busca e torna-se candidata a conter o mínimo. Figura 4.4(c) Todo nó foi removido do espaço de busca por podas ou por visitas. Resolve-se as partes candidatas a conter o mínimo. Figura 4.4(d) O elemento de custo mínimo entre as partes é 11100, que é de fato a solução ótima do problema com custo 3.

ser fixadas; desta forma, o tamanho de S' é modulado pelo valor de p da seguinte maneira:

$$|S'| = \lceil |S| * p \rceil$$

$$|\overline{S'}| = |S| - \lceil |S| * p \rceil.$$

Portanto, quanto maior o p , maior o tamanho do reticulado externo ($|\mathcal{P}(S')|$) e menor o tamanho dos reticulados internos ($|\mathcal{P}(\overline{S'})|$) e vice-versa. Note que quando p é pequeno o algoritmo PUCS deve ser semelhante ao algoritmo base, já que o tamanho das partes continua semelhante; quando o p é grande, o particionamento é mais “fino” porque as partes se tornam menores e consequentemente há mais partes.

Como vimos na seção 4.2.3, a estrutura criada no particionamento do problema nos permite

fazer chamadas recursivas do PUCS. O parâmetro l determina a quantidade de chamadas recursivas que acontecerão até que o algoritmo base seja chamado. Ao fazer chamadas recursivas estamos particionando o espaço de busca seguidas vezes e portanto, assim como o parâmetro p , quando aumentamos o valor de l , o tamanho da parte que será resolvida pelo algoritmo base diminui.

O algoritmo base determina como as partes serão resolvidas. Note que o teorema 4.2.1 e o corolário 4.2.1 garantem que se a hipótese U-curve for verdadeira, então todas as partes que foram podadas do espaço de busca não contêm o mínimo global, portanto se o algoritmo base é ótimo, então o PUCS também é ótimo. Inversamente, se o algoritmo base for uma heurística, então o PUCS também se comporta como uma heurística; entretanto, neste caso é provável que a solução encontrada pelo PUCS seja melhor do que a solução dada pelo algoritmo base. Dizemos que isto é provável porque o PUCS faz diversas chamadas ao algoritmo base, uma para cada parte candidata, portanto percorre mais nós do que uma chamada única do algoritmo base.

4.4 Implementação do algoritmo

O algoritmo PUCS foi implementado no arcabouço *featsel*, usando a linguagem C++. Nesta seção apresentaremos detalhes sobre sua implementação

4.4.1 Controle do espaço de busca

Sempre que um nó do reticulado externo é podado ou visitado ele deve ser removido do espaço de busca, e representar este espaço explicitamente não é uma boa solução devido ao seu tamanho, que é exponencial em relação a quantidade de características fixas. A estrutura de dados utilizada deve ser eficiente tanto para inserções (de intervalos e de pontos do reticulado) quanto para consultas. Escolhemos para nossa implementação usar a estrutura de dados de diagramas de decisão binária reduzidos e ordenados (*Reduced, Ordered Binary Decision Diagrams* (ROBDDs)) [Bry86].

4.4.2 Paralelização do código

Usamos a biblioteca *OpenMP* na paralelização do código. Esta biblioteca nos permite paralelizar o algoritmo de maneira fácil, com anotações que indicam ao compilador como blocos do código fonte podem ser processados paralelamente.

O PUCS foi criado com o intuito de ser um algoritmo paralelizado para resolver o problema U-curve. O particionamento do espaço foi feito exatamente para que o processo de paralelização do código fosse simples, facilitando a distribuição de trabalho entre threads e usando o mínimo de comunicação entre as mesmas. Desta forma, para paralelizar o código, basta indicar ao compilador que o particionamento e passeio pelo reticulado deve ser feito pela thread principal enquanto a solução de cada parte pode ser realizada por qualquer outra thread, usando a estrutura de *tasks* da biblioteca *OpenMP*. Desta forma, sempre que o algoritmo visita uma parte que não é podada, cria-se uma *task* que deve solucionar tal parte.

Esta abordagem pode causar cálculos supérfluos, pois partes resolvidas podem ser podadas no decorrer dos passeios aleatórios. No entanto, para evitar tais recálculos seria necessário esperar o percorrimto de todo reticulado externo antes de se resolver as partes. Esta segunda abordagem tornaria necessário armazenar e manter atualizada uma lista de partes candidatas, o que pode ser caro computacionalmente. Além disso, como o passeio é feito apenas por uma thread, todas as outras seriam subutilizadas durante o passeio.

4.5 Ajuste de parâmetros

Antes de discutir o desempenho do algoritmo, precisamos entender como os parâmetros devem ser ajustados para cada tipo de instância do problema U-curve. Consideramos instâncias pequenas aquelas que podem ser resolvidas otimamente. Estas instâncias costumam ter menos do que 30 características e algoritmos ingênuos como a busca exaustiva podem, já para estas instâncias, tornar-se muito caros computacionalmente. Já as instâncias grandes, que não podem ser resolvidas por algoritmos ótimos, costumam ter mais do que 30 características; utiliza-se para estas instâncias algoritmos sub-ótimos, isto é, heurísticas.

Instâncias pequenas

Instâncias pequenas podem ser resolvidas otimamente por algoritmos como o UBB, PFS ou até a busca exaustiva. Portanto, para estas instâncias, vamos usar parâmetros no PUCS que garantem que ele será ótimo. Para fazer isto, basta utilizar como algoritmo base um algoritmo ótimo. A decisão de qual algoritmo ótimo usar como base depende dos recursos computacionais disponíveis e da topologia do problema; se, por exemplo, a função de custo é complicada, devemos escolher um algoritmo que faz poucos cálculos de custo, como o PFS ou UBB-PFS.

Para os outros dois parâmetros, p e l , devemos escolher de forma que a granularidade da partição seja moderada. Como estas instâncias são pequenas, uma partição muito fina pode criar muitas partes pequenas, fazendo com que o trabalho de se criar e escalonar estas várias tarefas pequenas comprometa o tempo total de execução. Por outro lado, se utilizarmos valores pequenos para p e l é possível que o particionamento seja muito pouco fino, não gerando um número de tarefas que use todo o poder computacional da máquina usada.

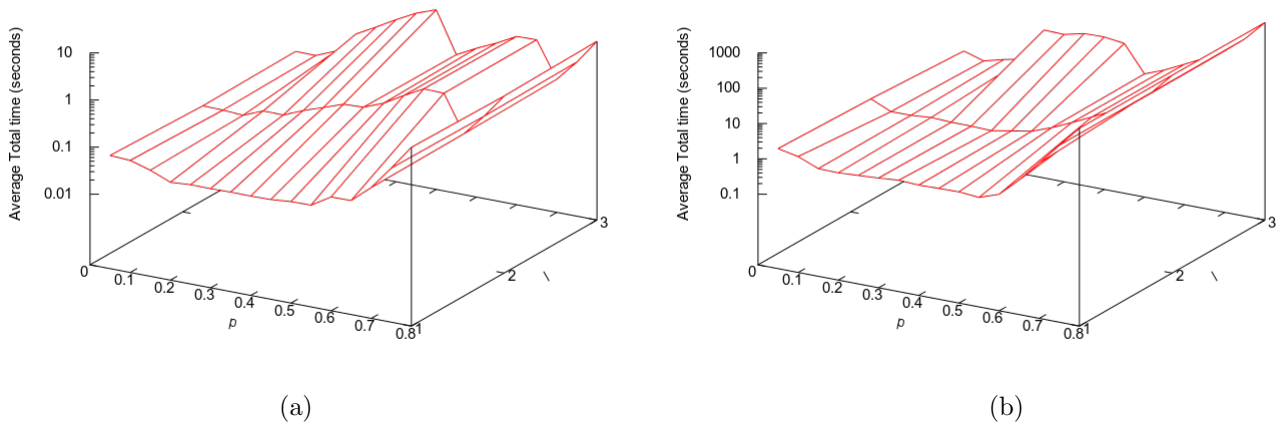


Figura 4.5: Tempo de execução médio em função dos parâmetros p e l . As figuras 4.5(a) e 4.5(b) mostram, respectivamente, resultados para instâncias com 15 e 20 características.

A figura 4.5 mostra como o tempo de execução evolui quando aumentamos o valor dos parâmetros p e l , usando como base o algoritmo UBB. Nesta figura podemos perceber que o parâmetro $l = 3$ aumenta consideravelmente o tempo de execução do algoritmo (note a escala logarítmica). Desta maneira, repetimos o experimento com valores de l sendo apenas 1 ou 2. Os novos resultados são mostrados na figura 4.6, que novamente indicam que o aumento do parâmetro l implica em um tempo de execução maior. Desta maneira, decidimos que o uso do

parâmetro $l = 1$ é o mais adequado para o computador que utilizamos. Para o parâmetro p , basta evitar valores muito pequenos e também muito altos.

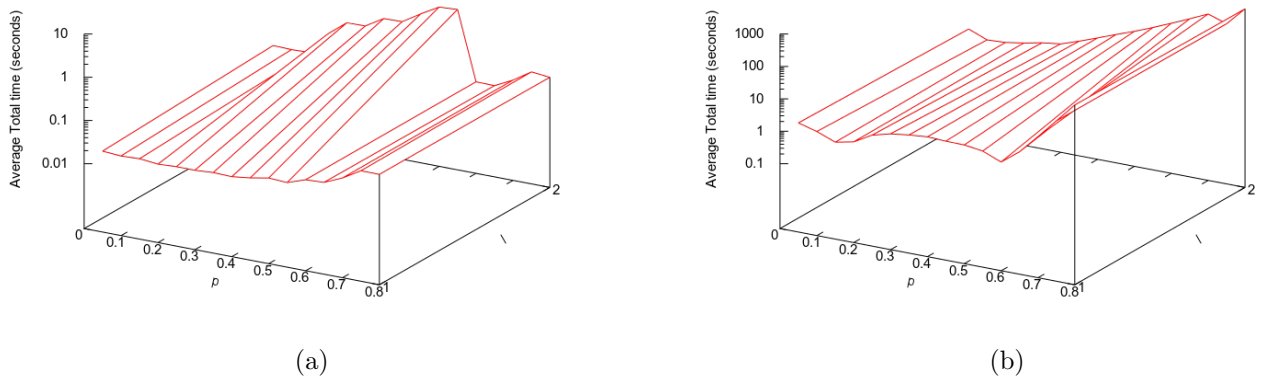


Figura 4.6: Tempo de execução médio em função dos parâmetros p e l , usando UBB como algoritmo base. As figuras 4.6(a) e 4.6(b) mostram, respectivamente, resultados para instâncias com 12 e 20 características.

Instâncias grandes

Instâncias grandes costumam não ser resolvidas por algoritmos ótimos, pois estes demandam recursos computacionais que por vezes excedem a capacidade disponível. Desta forma, resolve-se o problema U-curve com heurísticas, tais como o **Sequential Forward Floating Selection (SFFS)** [PNK94] ou o **Best-First Search (BFS)** [KJ97]. Para o PUCS se tornar uma heurística, basta utilizar um algoritmo sub-ótimo como base.

Quando o PUCS é ótimo, os parâmetros p e l interferem apenas no tempo de execução do algoritmo, mas quando tornamos este algoritmo uma heurística, estes parâmetros passam a interferir também na qualidade das soluções obtidas. Quanto mais fino é o particionamento feito, mais partes são geradas e resolvidas pelo PUCS, e como cada parte é resolvida com uma chamada do algoritmo base, temos que quanto mais granular é o particionamento, mais percorrimientos disjuntos acontecerão no reticulado. Desta maneira, quando aumentamos o p e l , mais buscas são feitas e portanto é provável que a solução encontrada seja melhor.

Entretanto, não podemos nos esquecer que estes parâmetros ainda influenciam o tempo de execução do algoritmo. Desta maneira não é possível aumentar os valores destes parâmetros arbitrariamente até atingir a solução com qualidade necessária, e sim aumentar estes parâmetros enquanto houverem recursos computacionais compatíveis.

A figura 4.7 mostra como o tempo de execução e qualidade da solução se comportam quando aumentamos os valores de p e l . Confirmando as nossas expectativas, quando aumentamos p e l a qualidade da solução encontrada é mais perto da ótima (o erro diminui no gráfico da figura 4.7(b)), e o tempo de execução aumenta.

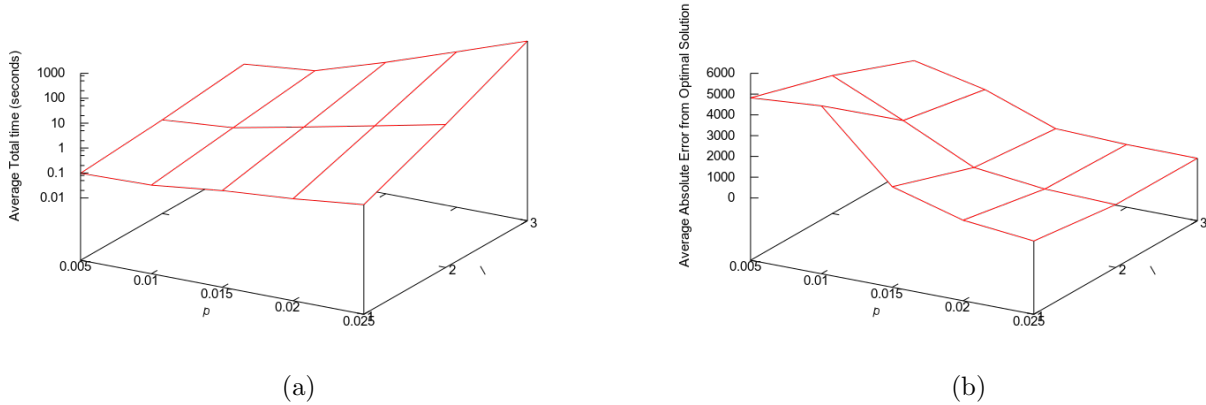


Figura 4.7: Desempenho do algoritmo *PUCS* para uma instância artificial de 200 características utilizando o *SFFS* como algoritmo base e variando os parâmetros p e l . A figura 4.7(a) mostra o tempo médio de execução, note que este aumenta quando aumentamos os parâmetros. A figura 4.7(b) mostra a diferença absoluta média entre o custo do conjunto obtido e do conjunto ótimo.

4.6 Experimentos com instâncias artificiais

Nesta seção apresentamos testes feitos com o *PUCS* ao solucionar instâncias artificiais do problema U-curve onde função de custo utilizada é a de soma de subconjuntos (equação 2.2). Estes testes foram feitos no arcabouço *featsel* e foram rodados em uma servidora Dell PowerEdge 850, com 64 núcleos e 256 GB de memória RAM.

Como parâmetro p utilizamos um valor tal que o número de variáveis fixas é sempre 10, o que não compromete a escalabilidade e deve ser o suficiente para gerar um número de partes que façam todos os cores da servidora trabalharem.

4.6.1 Experimentos ótimos

Estes experimentos são feitos em instâncias do problema U-curve de tamanho pequeno, que podem ser resolvidos por algoritmos ótimos. Comparamos o *PUCS* com o *UBB*, *PFS* e também com o algoritmo criado na seção 3.5, o *UBB-PFS*. Como parâmetros para estas instâncias utilizamos p tal que número de variáveis fixas é 10, $l = 1$, e o *UBB* como algoritmo base.

A tabela 4.1 mostra o tempo de execução médio dos algoritmos *UBB*, *PFS*, *UBB-PFS* e *PUCS*. O desempenho em tempo do *PUCS* foi similar ao *UBB-PFS*, porém só foi melhor que o *PFS*. A tabela 4.2 mostra, para os mesmos algoritmos, o número médio de chamadas da função custo. O *PUCS* computou menos nós do que o *UBB*, e computou pouco mais nós do que o *PFS* e *UBB-PFS*.

4.6.2 Experimentos sub-ótimos

Estes experimentos foram feitas em instâncias do problema U-curve que são grandes e geralmente não podem ser resolvidas por algoritmos ótimos. Comparamos o desempenho do *PUCS* contra as heurísticas *SFFS* [PNK94] e *BFS* [KJ97]. Utilizamos como parâmetros p tal que o número de variáveis fixas é 10, $l = 1$, e, como algoritmo base, utilizamos a heurística Sequential Forward Selection (SFS) [Whi71].

Instance		Total time (sec)			
$ S $	$2^{ S }$	UBB	PFS	UBB-PFS	PUCS
10	1024	0.006 ± 0.001	0.011 ± 0.002	0.022 ± 0.004	0.039 ± 0.019
11	2048	0.007 ± 0.002	0.017 ± 0.004	0.026 ± 0.005	0.045 ± 0.022
12	4096	0.009 ± 0.003	0.029 ± 0.009	0.033 ± 0.008	0.048 ± 0.024
13	8192	0.013 ± 0.006	0.054 ± 0.016	0.047 ± 0.014	0.053 ± 0.021
14	16384	0.026 ± 0.012	0.103 ± 0.035	0.074 ± 0.017	0.057 ± 0.024
15	32768	0.048 ± 0.027	0.195 ± 0.080	0.116 ± 0.044	0.056 ± 0.025
16	65536	0.097 ± 0.055	0.354 ± 0.176	0.198 ± 0.089	0.090 ± 0.080
17	131072	0.142 ± 0.120	0.676 ± 0.375	0.350 ± 0.200	0.255 ± 0.276
18	262144	0.319 ± 0.228	1.512 ± 0.764	0.751 ± 0.338	0.680 ± 0.592
19	524288	0.684 ± 0.464	2.875 ± 1.554	1.387 ± 0.707	1.492 ± 1.323
20	1048576	1.249 ± 0.975	5.295 ± 3.509	2.594 ± 1.569	2.701 ± 2.908
21	2097152	2.671 ± 1.948	11.136 ± 6.947	5.460 ± 3.392	6.118 ± 5.961
22	4194304	5.420 ± 4.202	19.825 ± 14.519	9.709 ± 7.319	11.729 ± 11.613

Tabela 4.1: Comparação de tempo de execução de algoritmos ótimos para o problema U-curve. O PUCS foi o segundo algoritmo mais lento, sendo mais rápido do que o PFS apenas.

Instance		# Calls of cost function			
$ S $	$2^{ S }$	UBB	PFS	UBB-PFS	PUCS
10	1024	668.2 ± 359.2	614.2 ± 162.7	630.3 ± 235.9	753.6 ± 493.6
11	2048	1171.5 ± 742.5	1139.2 ± 354.0	1174.8 ± 499.3	1305.0 ± 881.8
12	4096	2611.6 ± 1528.5	2137.1 ± 793.3	2271.2 ± 894.1	2370.5 ± 1615.7
13	8192	4583.2 ± 2910.2	4218.9 ± 1306.7	4308.7 ± 1732.2	4780.0 ± 2797.7
14	16384	10781.4 ± 5565.5	8211.1 ± 3054.5	9050.4 ± 2638.1	7050.8 ± 4755.7
15	32768	20891.9 ± 12757.0	15134.0 ± 6528.5	15900.7 ± 6927.4	14080.1 ± 11373.1
16	65536	43529.6 ± 25318.9	26447.0 ± 13446.1	28783.6 ± 12934.2	26001.3 ± 21699.6
17	131072	65301.0 ± 56215.8	49694.5 ± 27621.8	51032.5 ± 29984.3	50145.2 ± 46799.0
18	262144	145594.5 ± 103597.8	105603.1 ± 52652.2	110538.0 ± 51589.7	111296.6 ± 84922.4
19	524288	313096.0 ± 209913.1	194572.5 ± 104802.3	204604.5 ± 100305.4	233717.7 ± 186182.0
20	1048576	578319.0 ± 445912.2	340052.5 ± 221271.6	362007.0 ± 207411.2	387082.0 ± 389417.4

Tabela 4.2: Comparação de número de chamadas da função custo em algoritmos ótimos do problema U-curve. O PUCS faz menos chamadas da função custo que o UBB, porém faz mais chamadas do que o PFS e UBB-PFS.

A figura 4.8(a) compara o tempo de execução do PUCS com heurísticas. Apesar do desvio padrão grande, podemos observar que, com os parâmetros citados, o PUCS foi o algoritmo mais lento entre os testados. A figura 4.8(b) mostra para cada uma das três heurísticas testadas a proporção de vezes em que o algoritmo achou a solução de menor custo entre os três. Neste teste, o PUCS teve proporção de melhor solução de 100% para todos os tamanhos de instâncias testadas, isto é, a solução encontrada por este algoritmo teve custo sempre menor ou igual do que as soluções encontradas pelo SFFS e BFS.

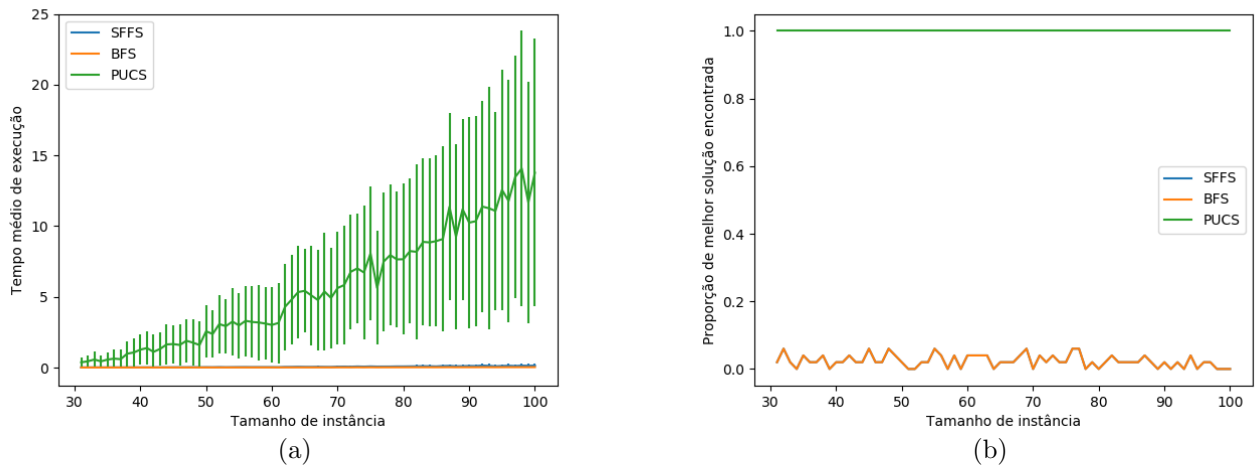


Figura 4.8: Comparação entre os algoritmos SFFS, BFS e PUCS. A figura 4.8(a) mostra o tempo médio de execução dos algoritmos. A figura 4.8(b) mostra a proporção de vezes em que cada algoritmo achou a melhor resposta entre os três.

4.6.3 Comentários sobre os experimentos

Os experimentos ótimos com o PUCS mostraram que este algoritmo possui tempo de execução menor do que o PFS e pouco maior do que UBB-PFS. Quanto ao número de chamadas da função de custo, o PUCS teve desempenho melhor do que o UBB, e um desempenho similar ao UBB-PFS. Em resumo, o PUCS é um algoritmo tão competitivo quanto o UBB-PFS para estas instâncias.

O PUCS se mostrou mais interessante quando utilizado para resolver instâncias de maneira sub-ótima. Para estes experimentos, este algoritmo teve tempo médio de execução pior do que as outras heurísticas, porém a qualidade da solução encontrada foi sempre melhor ou igual a solução dos outros algoritmos. Logo este algoritmo é recomendável para problemas em que o recurso de tempo é grande o suficiente. Além disso, o pior tempo de execução observado na figura 4.8(a) foi medido com parâmetros p e l fixos, e como vimos na seção 4.5, podemos diminuir o tempo de execução ao diminuir o valor destes parâmetros.

Por ser um algoritmo paralelo com pouco compartilhamento de memória, esperamos que o desempenho do PUCS melhore (até algum ponto de saturação) quando aumentamos os recursos de processadores da máquina utilizada. Desta maneira, respeitando os limites da paralelização na máquina, com maiores recursos de tempo e processamento é esperado que possamos aumentar os parâmetros p e l , conseguindo melhores soluções. Em uma máquina hipoteticamente tão rápida quanto necessário, podemos aumentar a qualidade das soluções ao aumentar os valores dos parâmetros até que, no limite, o PUCS se torne ótimo.

Capítulo 5

Exemplos de aplicação em aprendizado de máquina

Com o objetivo de testar os algoritmos de seleção de características em problemas reais, decidimos aplicá-los a problemas de seleção de modelos de aprendizado computacional. Usamos as características selecionadas para definir um modelo de aprendizado e calculamos o erro de classificação médio para este modelo, usando validação cruzada. Os dados utilizados estão disponíveis no University of California Irvine (UCI) Machine Learning Repository [Lic13].

5.1 Seleção de características em aprendizado de máquina

Os dados disponíveis no repositório UCI Machine Learning Repository são dados de treinamento e teste de aprendizado de máquina supervisionado. Estes dados são compostos por múltiplos exemplos de tuplas com valores de características do conjunto S e o rótulo da tupla observada, Y . Um modelo de aprendizado determina um conjunto de possíveis classificadores para o problema; quando usamos seleção de características, indicando que um conjunto de características $X \in \mathcal{P}(S)$ descreve melhor os dados, estamos escolhendo como modelo de aprendizado o conjunto de classificadores que leva em consideração apenas as características de X .

Para que o conjunto X de características selecionadas de fato determine um bom conjunto de classificadores, precisamos construir o problema de seleção de características de maneira que isto aconteça. Então, além de determinar que o conjunto de características seja S , precisamos escolher a função de custo c para o problema. Como discutido na seção 2.2, a função de custo entropia condicional média (MCE), apresentada na equação 2.1, faz bem este papel. Além disso, a função MCE induz curvas em U, com poucas violações, nas cadeias do reticulado Booleano. Por conta das violações, este problema não é o U-Curve, porém, como visto no trabalho de Reis [Rei12], podemos aproximar a solução do problema original pela solução encontrada assumindo que estamos no caso U-Curve.

A função de custo MCE que utilizamos neste trabalho, disponível no arcabouço *feature* [Rei+17], assume que os valores das características são discretos, portanto ainda é necessário discretizar os alguns dados de treinamento do UCI, que tiverem variáveis contínuas, para fazermos a seleção de características com o arcabouço. A estratégia que utilizamos para tal tarefa é de discretizar os valores de características contínuas por quartis, mapeando seus valores para um inteiro entre 0 e 3. Existem entretanto outras estratégias mais elaboradas, como a de Fayyad e Irani [FI93] que separa dados por classes minimizando uma medida de entropia média destas classes.

5.2 Support Vector Machine com kernel linear

A seleção de características é apenas uma etapa da seleção de modelo de aprendizado. Vamos então especificar mais o conjunto de possíveis classificadores para os problemas que trataremos neste capítulo. Fazemos isto ao decidir que o modelo de aprendizado que usaremos é o de Support Vector Machine (SVM) [CL11].

Mais especificamente, vamos trabalhar com classificadores SVM com kernel linear e multi-classe. O funcionamento de um classificador SVM binário (duas classes) é simples: dado um conjunto de dados de treinamento com dois rótulos possíveis, o classificador determina um hiperplano que separa no espaço os dados de treinamento, assim, para classificar um dado basta responder em qual lado do hiperplano este dado está localizado. Se houverem k classes, então podemos criar $k(k - 1)$ classificadores binários para cada par de classes e então, para rotular um dado, utilizamos um esquema de votação em que a classe mais votada dentre todos os estes classificadores dá o rótulo ao ponto.

O modelo de SVM linear tem um parâmetro C que determina como o hiperplano é posicionado no espaço de pontos de treinamento. Para valores pequenos de C o hiperplano será posicionado dando preferência a ter uma margem grande para pontos de treinamento corretamente classificados, mesmo que isto implique em pontos de treinamento mal classificados; para valores maiores de C , a preferência é dada para classificar corretamente os dados de treinamento, mesmo que a margem do hiperplano seja pequena. O efeito de um valor pequeno de C em um modelo de SVM é regularizador, isto é, ele diminui a complexidade do modelo para se obter melhores resultados com menos amostras. Entretanto, isto é o que queremos fazer também com seleção de características, portanto utilizamos neste parâmetro um valor alto ($C = 100$), o que garante que a diminuição da complexidade do modelo é feita de fato pela seleção de características.

5.3 Validação de modelos

Para fazer a validação dos modelos de aprendizado gerados, precisamos estimar o erro médio de classificadores treinados em cada um destes modelos. Para fazer isto é necessário separar os dados entre dados de treinamento e dados de teste, mas como o número de amostras é geralmente pequeno, fazemos o procedimento de classificação e estimação de erro para várias escolhas de conjuntos de treinamento e teste dentro do mesmo conjunto de dados; chamamos este tipo de validação, que usa o mesmo exemplo como teste e treinamento, de validação cruzada.

Para as instâncias em que o número de exemplos é superior a 100, usaremos a validação cruzada *10-fold*, para outras utilizaremos a validação *leave-one-out*. A validação cruzada *10-fold* separa as amostras em 10 grupos e usa cada um deles para calcular o erro do classificador treinado com os outros nove. Na abordagem *leave-one-out* separamos as n amostras em n grupos e fazemos o mesmo procedimento.

5.4 Experimentos com problemas de classificação

Nesta seção apresentamos projetos de classificadores feitos com seleção de características para conjuntos de dados do University of California Irvine (UCI) Machine Learning Repository [Lic13]. Após a fase de seleção de modelo, feita com seleção de características, fazemos a validação cruzada de modelos, como definidos na seção 5.2, utilizando a biblioteca *libsvm* [CL11].

5.4.1 Descrição dos conjuntos de dados

Iris

Este conjunto de dados é mais famoso do repositório UCI, e apresenta dados de plantas com flor do gênero *Iris*, conhecidas popularmente como lírio. Os dados descrevem cada planta com quatro variáveis, que são comprimento e largura de pétalas e sépalas, e as rotulam em três tipos: *Iris setosa*, *Iris Versicolor* e *Iris Virginica*. Este conjunto possui 150 exemplos de rotulações.

Wine

Este conjunto de dados descreve vinhos em 13 variáveis, como porcentagem alcoólica, cor, intensidade de cor, entre outros. Os 178 exemplos de vinhos são classificados entre três tipos.

Thoracic Surgery

Este conjunto de dados classifica dados de pacientes que passaram por uma ressecção pulmonar. Este procedimento é um tratamento de câncer de pulmão em que se remove do paciente os tecidos do pulmão que são cancerígenos, assim como os tecidos saudáveis das suas periferias. Os pacientes são classificados em duas classes complementares que indicam se o paciente sobreviveu por um ano após o procedimento. Os dados possuem 470 exemplos e descrevem os pacientes com 17 atributos.

Zoo

Este conjunto de dados contém exemplos de classificação de animais de zoológico. Os animais são classificados em 7 possíveis grupos e são descritos em 17 variáveis que podem ser Booleanas, como presença de pelos, ser aquático, etc., ou inteiras, como a quantidade de pernas. Este conjunto possui 101 exemplos classificados.

Breast Cancer

O objetivo deste conjunto de dados é classificar amostras de biópsia de tumores mamários. Estas amostras contém informações de 31 variáveis e são classificadas em tumores benignos ou malignos. Este conjunto possui 700 exemplos de classificação de biópsia.

Lung Cancer

Estes dados apresentam exemplos de classificação de tipos de câncer de pulmão. São utilizadas 56 características para descrever um paciente, mas nenhuma delas é especificada pelos autores deste conjunto de dados. Existem 3 possíveis rótulos para cada paciente, e um total de 32 exemplos.

Promoters

Chamamos de promotora uma sequência de nucleotídeos (A, T, C, G) do DNA que indica o começo de uma região da fita onde deve haver a transcrição. O conjunto de dados Promoters contém 106 exemplos de sequências de DNA da bactéria *E. coli*. Cada sequência é formada por 57 variáveis, que são nucleotídeos, e é rotulada em promotora ou não promotora.

5.4.2 Resultados

A figura 5.1 mostra os resultados de nossos experimentos. Na figura 5.1(a) apresentamos a quantidade média de características que são selecionadas pelo algoritmo PUCS após repetidas etapas de seleção de características. A média do número de características selecionadas é menor do que a quantidade total em todos os conjuntos de dados, ou seja, é esperado que a etapa de seleção de características defina um subconjunto menor de atributos para serem considerados no modelo; no conjunto Promoters, por exemplo, das 57 características, em média menos de 5 foram consideradas no modelo com seleção de características.

A figura 5.1(b) compara o erro de validação cruzada em cada conjunto de dados para os modelos com e sem seleção de características. Podemos notar que o erro não aumenta significativamente para estes dados; pelo contrário, no conjunto Lung Cancer, o erro de validação cruzada diminuiu de pouco menos de 60% para menos de 40%. Isto significa que a seleção de características não foi prejudicial para classificação destes conjuntos.

Estes experimentos mostram que, para estes conjuntos de dados, a seleção de características é capaz de diminuir o número de variáveis em um modelo, sem perder uma quantidade significativa de informações sobre o problema. Desta forma, diminui-se a complexidade do modelo de aprendizado, porém mantém-se ou é pouco prejudicada a qualidade dos classificadores.

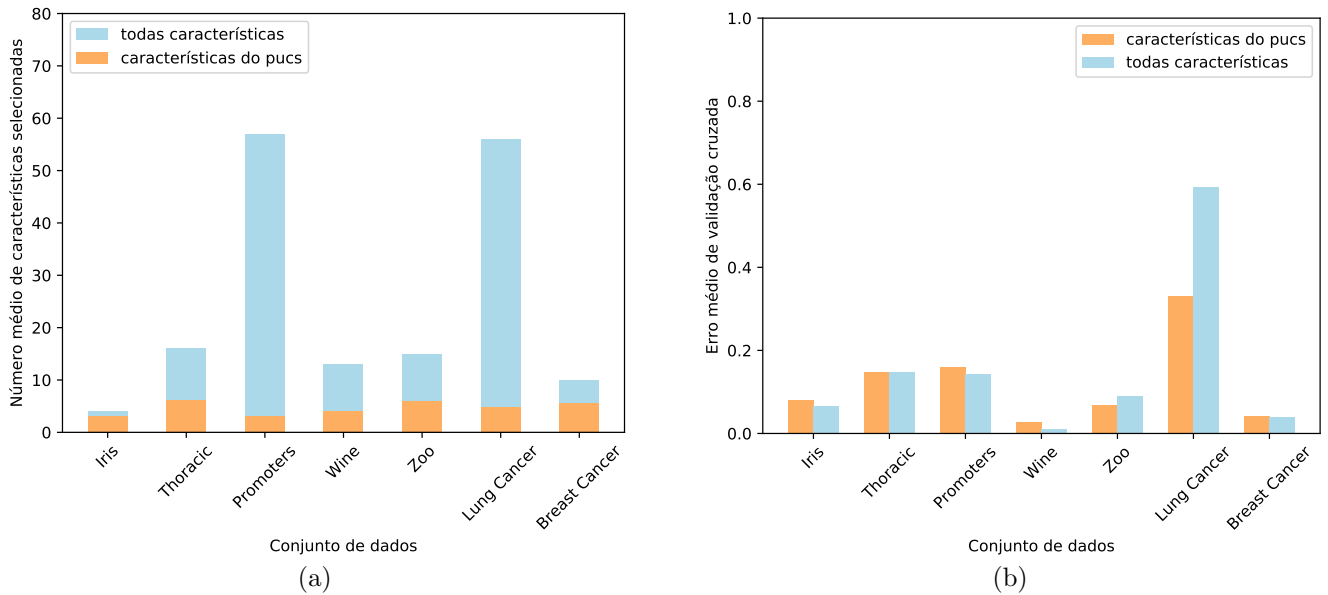


Figura 5.1: Comparações de modelos feitos com todas características e com a características selecionadas pelo PUCS. A figura 5.1(a) mostra a quantidade de atributos selecionados pelo algoritmo em cada conjunto de dados, enquanto a figura 5.1(b) mostra o erro de validação cruzada dos modelos feitos com todas características e apenas com as características selecionadas.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta seção vamos fazer uma revisão deste trabalho, apontando e discutindo os resultados obtidos. Também vamos apresentar algumas opções de linhas de pesquisa para trabalhos futuros relacionados a este.

6.1 Revisão do trabalho

Neste trabalho, definimos o problema de seleção de características e com o exemplo de sua aplicação em seleção de modelos definimos também o problema U-curve, que foi o problema principal tratado aqui. Estudamos algoritmos da literatura, investigando e sugerindo modificações a estes, visando melhorar o seu desempenho computacional. Aplicamos a seleção de características, feita como uma aproximação pelo problema U-curve, em conjuntos de dados reais e verificamos como a seleção de características pode ser benéfica na seleção de modelos de aprendizado.

Estudamos algoritmos baseados em florestas da literatura, UBB e PFS e investigamos modificações ao último. Mudamos a estratégia de escolha de raízes para ramificação assim como a estrutura de dados para armazenamento destas raízes no PFS, entretanto estas modificações não implicaram em melhoras significativas no desempenho do algoritmo. Sugerimos uma paralelização do algoritmo PFS, justificada pelo fato da etapa de ramificação poder acontecer de maneira independente, mas a etapa de atualização, que ocorre após a ramificação, mostrou-se dependente e complicada de ser paralelizada, o que implicou em um desempenho pior do que a versão sequencial do mesmo algoritmo.

Ainda no escopo de modificações do UBB e PFS, propomos o UBB-PFS, um algoritmo que utiliza o UBB para decompor o espaço de busca em sub-árvores que são intervalos do reticulado Booleano. Conseguimos reduzir a solução de cada sub-árvore a um problema de seleção de características auxiliar, em que cada um destes pode ser resolvido pelo algoritmo PFS de maneira independente e paralela. Com a criação de sub-problemas, a paralelização deste algoritmo tornou-se mais simples e menos entrelaçada do que na outra tentativa de paralelização do PFS. Como resultado, o novo algoritmo teve tempo de execução e número de chamadas da função custo intermediários, com menos nós computados do que o UBB e menor tempo de execução do que o PFS.

A criação de árvores feita no UBB-PFS determina sub-problemas que são partes do espaço de busca inteiro. Inspirados com esta estratégia, definimos um particionamento que divide o espaço de busca em partes iguais no algoritmo PUCS. Este algoritmo possui parâmetros p , l e algoritmo base, que são capazes de modificar o comportamento deste algoritmo de maneira que ele possa ser ótimo ou sub-ótimo. No caso ótimo, o PUCS não teve melhor desempenho do que

outros algoritmos, como o próprio UBB-PFS. No caso sub-ótimo notamos que, os parâmetros p e l determinam a qualidade da solução encontrada assim como o tempo de execução. Com um ajuste fino destes parâmetros, o PUCS conseguiu encontrar soluções melhores (menor custo) do que outras heurísticas como SFFS e BFS.

Finalmente, aplicamos o algoritmo PUCS na seleção de características para seleção modelos de aprendizado em problemas reais de classificação, disponíveis no UCI Machine Learning Repository. Utilizamos classificadores do tipo SVM linear, considerando todas as características e apenas as características selecionadas pelo PUCS, e comparamos os resultados fazendo a validação cruzada dos dois modelos. Os resultados mostraram que mesmo com menos características, o erro de validação não cresce significativamente. Isto é, a seleção de características nos permitiu diminuir a complexidade dos modelos sem comprometer a qualidade dos classificadores.

6.2 Trabalhos futuros

Listaremos agora possíveis trabalhos futuros nesta linha de pesquisa:

- Melhorias no UBB-PFS: este algoritmo faz na sua primeira etapa uma busca em profundidade para criar raízes que determinam uma divisão do espaço de busca em sub-árvores. Entretanto, este procedimento cria sub-árvores de tamanhos muito diferentes, o que deve causar um grande desbalanço de trabalho entre linhas de processamento na paralelização. É possível que em uma primeira etapa menos ingênua crie-se sub-árvores que possuam tamanhos parecidos. Além disso, este algoritmo, assim como o PUCS, possui uma estrutura recursiva e pode ser uma heurística, se utilizarmos um algoritmo sub-ótimo na solução das sub-árvores, o que não foi explorado neste trabalho e ainda pode ser investigado.
- Estudo de robustez dos novo algoritmos: as funções de custo que utilizamos nas instâncias artificiais neste trabalho são todas decomponíveis em curvas U. Podemos refazer os mesmos testes utilizando uma função com violações da propriedade da curva em U; por exemplo, a função da equação 2.3, que permite incluir violações da curva em U de forma controlada. Dessa forma, poderíamos estudar o que acontece com a qualidade das soluções geradas pelo PUCS e UBB-PFS. Uma observação interessante, por exemplo, é que os parâmetros p e l do PUCS devem interferir na qualidade da solução mesmo quando o algoritmo base é ótimo.
- Seleção de características em identificação de vias de sinalização celular: na área de biologia de sistemas, chamamos de modelo funcional um modelo computacional capaz de simular fenômenos celulares. Uma das etapas na construção de um modelo funcional é a escolha de um conjunto de interações químicas que participam da via de sinalização que controla predominantemente o fenômeno observado. Neste sentido, Lulu Wu apresentou em sua tese de mestrado [Wu15] uma maneira de sistematicamente modificar modelos funcionais ao adicionar interações de um banco de dados. Entretanto sua abordagem mostrou algumas limitações, e entre elas citamos a dinâmica incremental da estratégia de modificação, que não é capaz de remover interações já presentes no modelo. Desta maneira, sugerimos uma abordagem que enfrente esta limitação tratando a modificação sistemática de um modelo como um problema de seleção de características em que o conjunto S de características é formado pelo banco de interações químicas e a função custo c é uma função que mede a qualidade do modelo que possui um determinado conjunto de interações (características).

Bibliografia

- [AG+18] Esmaeil Atashpaz-Gargari, Marcelo S. Reis, Ulisses M. Braga-Neto, Junior Barrera e Edward R. Dougherty. «A fast Branch-and-Bound algorithm for U-curve feature selection». Em: *Pattern Recognition* 73.Supplement C (2018), pp. 172 –188. ISSN: 0031-3203. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2017.08.013>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031320317303254>.
- [Bar+07] J. Barrera, R. M. Cesar-Jr, D.C. Martins-Jr, R.Z.N Vencio, E. F. Merino, M. M. Yamamoto, F. G. Leonardi, C. A. B. Pereira e H. A. Portillo. «Constructing probabilistic genetic networks of *Plasmodium falciparum* from dynamical expression signals of the intraerythrocytic development cycle.» Em: *Methods of Microarray Data Analysis V* (2007), pp. 11–26.
- [Bry86] R. E. Bryant. «Graph-Based Algorithms for Boolean Function Manipulation». Em: *IEEE Transactions on Computers* C-35.8 (1986), pp. 677–691. ISSN: 0018-9340. DOI: 10.1109/TC.1986.1676819.
- [CL11] Chih-Chung Chang e Chih-Jen Lin. «LIBSVM: A Library for Support Vector Machines». Em: *ACM Trans. Intell. Syst. Technol.* 2.3 (mai. de 2011), 27:1–27:27. ISSN: 2157-6904. DOI: 10.1145/1961189.1961199. URL: <http://doi.acm.org/10.1145/1961189.1961199>.
- [DMJ06] R.M. Cesar-Jr an J. Barrera D.C. Martins-Jr. «W-operator window design by minimization of mean conditional entropy». Em: *Patter Analysis & Applications* (2006), pp. 139–153.
- [FI93] Usama M. Fayyad e Keki B. Irani. «Multi-Interval Discretization of Continuous-Valued Attributes for Classification Learning». Em: (1993).
- [JCJB04] D. C. Martins Jr, R. M. Cesar-Jr e J. Barrera. «W-operator window design by maximization of training data information». Em: *Computer Graphics and Image Processing, 2004. Proceedings. 17th Brazilian Symposium* (2004), pp. 162–169.
- [KJ97] Ron Kohavi e George H. John. «Wrappers for feature subset selection». Em: *Artificial Intelligence* 97.1 (1997). Relevance, pp. 273 –324. ISSN: 0004-3702. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0004-3702\(97\)00043-X](https://doi.org/10.1016/S0004-3702(97)00043-X). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000437029700043X>.
- [Lic13] M. Lichman. *UCI Machine Learning Repository*. 2013. URL: <http://archive.ics.uci.edu/ml>.
- [PNK94] P. Pudil, J. Novovičová e J. Kittler. «Floating search methods in feature selection». Em: *Pattern Recognition Letters* 15.11 (1994), pp. 1119 –1125. ISSN: 0167-8655. DOI: [https://doi.org/10.1016/0167-8655\(94\)90127-9](https://doi.org/10.1016/0167-8655(94)90127-9). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167865594901279>.

- [Rei+17] Marcelo S. Reis, Gustavo Estrela, Carlos Eduardo Ferreira e Junior Barrera. «feat-sel: A framework for benchmarking of feature selection algorithms and cost functions». Em: *SoftwareX* 6 (2017), pp. 193–197. ISSN: 2352-7110. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.softx.2017.07.005>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352711017300286>.
- [RFB14] M. S. Reis, C. E. Ferreira e J. Barrera. «The U-curve optimization problem: improvements on the original algorithm and time complexity analysis». Em: *ArXiv e-prints* (jul. de 2014). arXiv: 1407.6067 [cs.LG].
- [Whi71] A. W. Whitney. «A Direct Method of Nonparametric Measurement Selection». Em: *IEEE Transactions on Computers* C-20.9 (1971), pp. 1100–1103. ISSN: 0018-9340. DOI: 10.1109/T-C.1971.223410.
- [Rei12] M. S. Reis. «Minimization of decomposable in U-shaped curves functions defined on poset chains – algorithms and applications». Tese de doutoramento. University of Sao Paulo, 2012.
- [Wu15] Lulu Wu. «Um método para modificar vias de sinalização molecular por meio de análise de banco de dados de interatomas». Tese de mestrado. University of Sao Paulo, 2015.