

Universidade de São Paulo  
Instituto de Matemática e Estatística  
Bachalerado em Ciência da Computação

Tiago Madeira

**Geração uniforme de  $k$ -trees para  
aprendizado de redes bayesianas**

Supervisor: Prof. Dr. Denis Deratani Mauá

São Paulo  
Novembro de 2016



# Resumo

O resumo ainda não foi escrito.

**Palavras-chave:** sem, resumo, por, enquanto.



# Abstract

The abstract has not been written yet.

**Keywords:** no, abstract, yet.



# Sumário

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>                              | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Fundamentos</b>                             | <b>3</b>  |
| 2.1      | Grafos . . . . .                               | 3         |
| 2.1.1    | <i>k-trees</i> . . . . .                       | 6         |
| 2.2      | Probabilidade . . . . .                        | 7         |
| 2.3      | Redes bayesianas . . . . .                     | 7         |
| <b>3</b> | <b>Geração aleatória de <i>k-trees</i></b>     | <b>9</b>  |
| 3.1      | Codificando árvores e <i>k-trees</i> . . . . . | 9         |
| 3.2      | A solução de Caminiti et al. . . . .           | 11        |
| 3.2.1    | Codificação . . . . .                          | 13        |
| 3.2.2    | Decodificação . . . . .                        | 15        |
| 3.3      | Experimentos e resultados . . . . .            | 16        |
| <b>4</b> | <b>Aprendizado de redes bayesianas</b>         | <b>17</b> |
| <b>5</b> | <b>Conclusão</b>                               | <b>19</b> |





# Capítulo 1

## Introdução

Em teoria dos grafos, *k-trees* são consideradas uma generalização de árvores. Há interesse considerável em desenvolver ferramentas eficientes para manipular essa classe de grafos, porque todo grafo com *treewidth*  $k$  é um subgrafo de uma *k-tree* e muitos problemas NP-completos podem ser resolvidos em tempo polinomial quando restritos a grafos com *treewidth* limitada.

Com efeito, o artigo de Arnborg e Proskurowski [1] apresenta algoritmos para resolver em tempo linear problemas como, dado um grafo com *treewidth* limitada:

- Encontrar o tamanho máximo dos seus conjuntos independentes;
- Computar o tamanho mínimo dos seus conjuntos dominantes;
- Calcular seu número cromático; e
- Determinar se ele tem um ciclo hamiltoniano.

O problema que desperta nosso interesse em *k-trees* é a inferência em redes bayesianas.

Uma rede bayesiana é um modelo probabilístico em grafo usado para raciocinar e tomar decisões em situações com incerteza através de técnicas de inteligência artificial e aprendizagem computacional. Ela representa uma distribuição de probabilidade multivariada num DAG (grafo acíclico dirigido) no qual os vértices correspondem às variáveis aleatórias do domínio e as arestas correspondem, intuitivamente, a influência de um vértice sobre outro.

Segundo Koller e Friedman [7], a inferência em redes bayesianas em geral é NP-difícil; porém, se seu DAG possui *treewidth* limitado, a inferência pode ser realizada em tempo polinomial. Daí a importância de aprender redes bayesianas que tenham *treewidth* limitada.

A partir dessa motivação, este trabalho de conclusão de curso consistiu em estudar os conceitos de teoria dos grafos relacionados a *k-trees* e implementar um algoritmo para gerar *k-trees* de forma uniforme que possam ser usadas no aprendizado de redes bayesianas.

A continuar: citar algoritmos usados, falar do artigo de Caminiti, justificar a escolha de Go para implementações, apresentar a organização da monografia.

# Capítulo 2

## Fundamentos

Neste capítulo, apresentamos definições fundamentais de teoria dos grafos, teoria da probabilidade e redes bayesianas que o leitor deve conhecer para compreender o trabalho.

Outras definições mais específicas, como as utilizadas para construir o algoritmo para codificar e decodificar *k-trees* estão localizadas nos capítulos subsequentes.

Partimos do pressuposto de que o leitor conhece notações básicas de conjuntos.

### 2.1 Grafos

Nesta seção apresentamos de forma breve apenas os conceitos de teoria dos grafos necessários para a compreensão deste trabalho. Mais detalhes podem ser encontrados no livro de Bondy e Murty [3], que foi utilizado como referência.

**Definição 1 (grafo).** Um grafo é um par ordenado  $G = (V, E)$ . Os elementos de  $V$  são chamados de vértices de  $G$ . Os elementos de  $E$  são chamados de

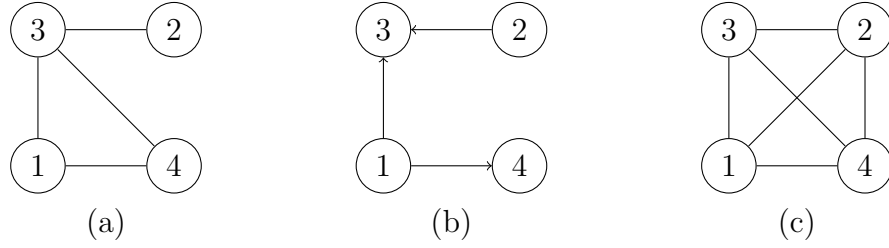


Figura 2.1: **(a)** Representação do grafo  $G = (V_G, E_G)$  com  $V_G = \{1, 2, 3, 4\}$  e  $E_G = \{(1, 3), (1, 4), (2, 3), (3, 4)\}$ . **(b)** Representação do grafo dirigido  $D = (V_D, E_D)$  com  $V_D = \{1, 2, 3, 4\}$  e  $E_D = \{(1, 3), (1, 4), (2, 3)\}$ . **(c)** Representação do  $K_4$ , o grafo completo com 4 vértices.

arestas de  $G$  e consistem em pares (não-ordenados) de vértices distintos<sup>1</sup>. Dados  $u, v \in V$ , se  $(u, v) \in E$  dizemos que  $u$  e  $v$  são adjacentes em  $G$ .

A figura 2.1(a) mostra como costuma ser representado um grafo. Os vértices são representados pelos círculos e as arestas são representadas pela ligação entre eles. Se  $(u, v) \in E$ , há uma linha ligando os vértices  $u$  e  $v$ .

**Definição 2 (grafo dirigido).** Um grafo  $G = (V, E)$  é dito dirigido se  $E$  consiste em pares *ordenados* de vértices. Se  $(a, b) \in E$ , dizemos que  $a$  aponta para  $b$  ou que há uma aresta de  $a$  para  $b$ .

A figura 2.1(b) mostra como costuma ser representado um grafo dirigido. Como o conjunto de arestas consiste em pares ordenados, elas são representadas por setas. Se  $(u, v) \in E$ , então a seta aponta de  $u$  para  $v$ .

**Definição 3 (grafo completo).** Um grafo  $G = (V, E)$  é dito completo se  $(u, v) \in E$  para todo  $u, v \in V, u \neq v$ . Um grafo completo com  $n$  vértices é geralmente denotado  $K_n$ .

Na figura 2.1(c), a representação de um grafo completo com 4 vértices.

<sup>1</sup>A rigor, por causa da palavra “distintos”, essa é a definição do que a literatura costuma chamar de *grafo simples*. Tal definição é utilizada porque neste trabalho não temos interesse em grafos que possuam arestas  $(u, v)$  com  $u = v$ .

**Definição 4 (subgrafo).** Um grafo  $F = (V_F, E_F)$  é chamado de subgrafo de  $G = (V_G, E_G)$  se  $V_F \subseteq V_G$  e  $E_F \subseteq E_G$ .

**Definição 5 (subgrafo induzido).** Dado um grafo  $G = (V, E)$  e um subconjunto  $V'$  de  $V$ , o subgrafo de  $G$  induzido por  $V'$ ,  $G' = (V', E')$ , é o grafo formado pelos vértices  $V' \subseteq V$  e arestas que só contém elementos de  $V'$ , ou seja,  $E' = \{(u, v) \in E \mid u, v \in V'\}$ .

**Definição 6 (caminho).** Dado um grafo  $G = (V, E)$ , um caminho em  $G$  é um subgrafo de  $G$  cujos vértices podem ser arranjados numa sequência linear de forma que dois vértices são adjacentes se eles são consecutivos na sequência e não-adjacentes caso contrário. Se  $u, v \in V$  pertencem a um caminho  $P$ , dizemos que eles estão conectados pelo caminho  $P$ .

**Definição 7 (distância).** Dado um grafo  $G = (V, E)$  e dois vértices  $(u, v) \in V$ , a distância entre  $u$  e  $v$  é o número de arestas num menor caminho que os conecte.

**Definição 8 (ciclo).** Dado um grafo  $G = (V, E)$ , um ciclo em  $G$  é um subgrafo de  $G$  cujos vértices podem ser arranjados numa sequência cíclica de forma que dois vértices são adjacentes se eles são consecutivos na sequência e não-adjacentes caso contrário.

**Definição 9 (DAG).** Um grafo  $G = (V, E)$  é chamado de DAG (do inglês *directed acyclic graph*: grafo dirigido acíclico) se ele é dirigido e não possui ciclos.

**Definição 10 (árvore).** Dado um grafo  $G = (V, E)$ , dizemos que ele é uma árvore se cada dois vértices  $u, v \in V$  são conectados por exatamente um caminho.

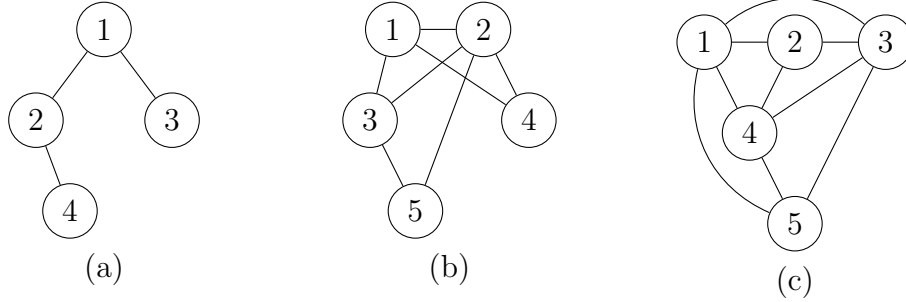


Figura 2.2: **(a)** Uma 1-*tree* (ou seja, uma árvore comum) com 4 vértices. **(b)** Uma 2-*tree* com 5 vértices. **(c)** Uma 3-*tree* com 5 vértices.

**Definição 11 ( $k$ -clique).** Seja  $G = (V, E)$  um grafo. Um  $k$ -clique é um subconjunto dos vértices,  $C \subseteq V$ , tal que  $(u, v) \in E \forall u, v \in C, u \neq v$  (ou seja, tal que o subgrafo induzido por  $C$  é completo).

### 2.1.1 $k$ -trees

**Definição 12 ( $k$ -tree).** [6] Uma  $k$ -tree é definida da seguinte forma recursiva:

1. Um grafo completo com  $k$  vértices é uma  $k$ -tree.
2. Se  $T'_k = (V, E)$  é uma  $k$ -tree,  $K \subseteq V$  é um  $k$ -clique e  $v \notin V$ , então  $T_k = (V \cup \{v\}, E \cup \{(v, x) \mid x \in K\})$  é uma  $k$ -tree.

Na figura 2.2(a), um exemplo de  $k$ -tree com  $k = 1$  (ou seja, uma árvore comum) e  $n = 4$  vértices rotulados com inteiros em  $[1, 4]$ ; na figura 2.2(b), um exemplo de  $k$ -tree com  $k = 2$  e  $n = 5$  vértices rotulados com inteiros em  $[1, 5]$ ; na figura 2.2(c), um exemplo de  $k$ -tree com  $k = 3$  e  $n = 5$  vértices rotulados em  $[1, 5]$ .

**Definição 13 ( $k$ -tree enraizada).** [4] Uma  $k$ -tree enraizada é uma  $k$ -tree com um  $k$ -clique destacado  $R = \{r_1, r_2, \dots, r_k\}$  que é chamado de *raiz* da  $k$ -tree enraizada.

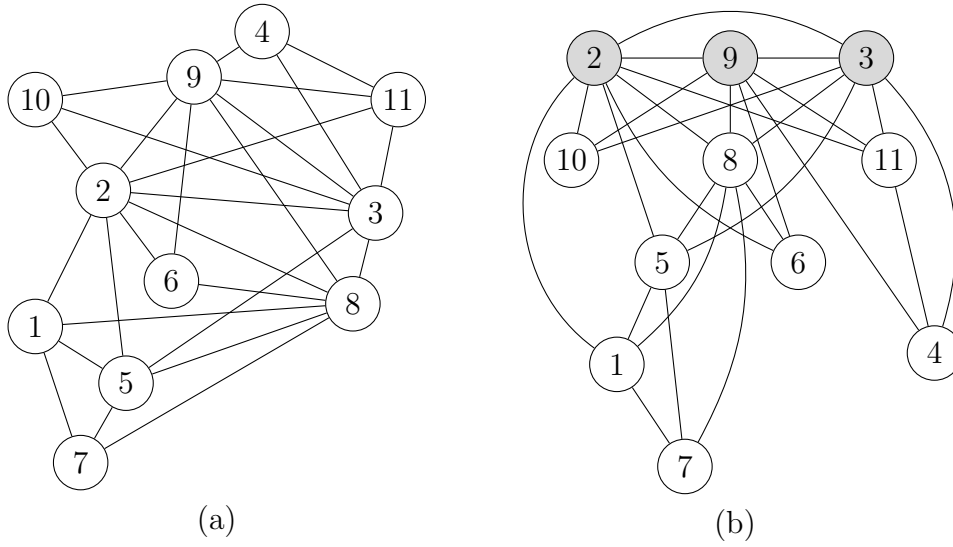


Figura 2.3: **(a)** Uma 3-tree  $T_3$  com 11 vértices. **(b)** A mesma 3-tree ( $T_3$ ) enraizada no 3-clique  $\{2, 3, 9\}$ .

Na figura 2.3(a), um exemplo de uma  $k$ -tree com  $k = 3$  e  $n = 11$  vértices rotulados com inteiros em  $[1, 11]$ . Na figura 2.3(b), a mesma  $k$ -tree, dessa vez enraizada no 3-clique  $R = \{2, 3, 9\}$ .

**Definição 14 (*partial k-tree*).** [2] Um subgrafo de uma  $k$ -tree é chamado de *partial k-tree*. Um grafo é uma *partial k-tree* se e só se ele tem *treewidth* menor ou igual a  $k$ .

## 2.2 Probabilidade

A escrever. [7]

## 2.3 Redes bayesianas

A escrever. [7]





# Capítulo 3

## Geração aleatória de $k$ -trees

O problema de gerar  $k$ -trees está intimamente relacionado ao problema de codificá-las e decodificá-las. De fato, se há uma codificação bijetiva que associa  $k$ -trees a *strings*, basta gerar *strings* aleatórias para gerar  $k$ -trees aleatórias.

Neste capítulo, apresentamos o problema de codificar  $k$ -trees, discutimos a solução linear para codificar e decodificar  $k$ -trees de forma bijetiva proposta por Caminiti et al. [4], explicamos como ela foi implementada neste trabalho para gerar  $k$ -trees aleatórias e mostramos os resultados obtidos.

### 3.1 Codificando árvores e $k$ -trees

O problema de codificar árvores já foi amplamente estudado na literatura. Como destaca Caminiti et al. [4]:

Codificar árvores rotuladas por meio de *strings* de rótulos de vértices é uma alternativa interessante à representação usual de estruturas de dados de árvore na memória e tem muitas aplicações práticas (por exemplo, algoritmos evolucionários sobre árvores, geração aleatória de árvores, compressão de dados e computação

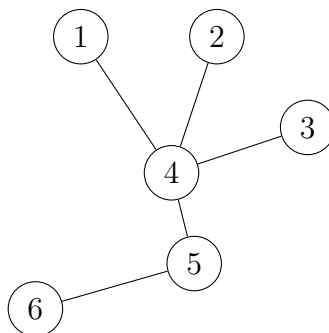


Figura 3.1: A árvore rotulada equivalente ao código de Prüfer  $\{4, 4, 4, 5\}$ .

do volume de floresta de grafos). Diversos códigos bijetivos diferentes que realizam associações entre árvores rotuladas e *strings* de rótulos foram introduzidas. De um ponto de vista algorítmico, o problema foi cuidadosamente investigado e algoritmos ótimos de codificação e decodificação desses códigos são conhecidos.

Em 1889, Cayley [5] demonstrou que para um conjunto de  $n$  vértices distintos existem  $n^{n-2}$  árvores possíveis. Desde lá, foram criados vários códigos para associar *strings* e árvores.

Um dos mais conhecidos é o código de Prüfer [8], que surgiu em 1918 e é bijetivo, associando cada árvore (rotulada) de  $n$  vértices a uma lista distinta de comprimento  $n - 2$  no alfabeto dos rótulos da árvore.

Codificar uma árvore usando o código de Prüfer é trivial: basta remover iterativamente as folhas da árvore até que apenas dois vértices sobrem, escolhendo sempre a folha de menor rótulo. Quando uma folha é removida, adiciona-se ao código o rótulo do seu vizinho.

A figura 3.1 exemplifica a codificação de Prüfer mostrando uma árvore cujo o código resultante do algoritmo é  $\{4, 4, 4, 5\}$ .

$k$ -trees [6] são consideradas uma generalização de árvores. Há interesse

considerável em desenvolver ferramentas eficientes para manipular essa classe de grafos, porque todo grafo com *treewidth*  $k$  é um subgrafo de uma  $k$ -tree e muitos problemas NP-completos podem ser resolvidos em tempo polinomial quando restritos a grafos com *treewidth* limitada, como destacado na **Introdução** deste trabalho.

Há estudos sobre a codificação de  $k$ -trees há pelo menos quatro décadas. Em 1970, Rényi e Renyi apresentaram uma codificação redundante (ou seja, não bijetiva) para um subconjunto de  $k$ -trees rotuladas que chamamos de  $k$ -trees de Rényi e que são definidas como segue:

**Definição 15 ( $k$ -tree de Rényi).** [9] Uma  $k$ -tree de Rényi  $R_k$  é uma  $k$ -tree enraizada com  $n$  vértices rotulados em  $[1, n]$  e raiz  $R = \{n - k + 1, n - k + 2, \dots, n\}$ .

Entretanto, até onde sabemos, apenas em 2008 surgiu um código bijetivo para  $k$ -trees com algoritmos lineares de codificação e decodificação. Foram esses algoritmos, propostos por Caminiti et al. [4], que implementamos neste trabalho.

## 3.2 A solução de Caminiti et al.

O artigo “*Bijective Linear Time Coding and Decoding for  $k$ -Trees*” [4] apresenta um código bijetivo para  $k$ -trees rotuladas, juntamente a algoritmos lineares para realizar a codificação e a decodificação.

O código é formado por uma permutação de tamanho  $k$  e uma generalização do *Dandelion Code* [10], que consiste em  $n - k - 2$  pares (onde  $n$  é o número de vértices) definidos no conjunto  $\{(0, \varepsilon)\} \cup ([1, n - k] \times [1, k])$ . Portanto, dizemos que a codificação das  $k$ -trees associa elementos em  $\mathcal{T}_k^n$  (conjunto das  $k$ -trees com  $n$  vértices) com elementos em:

$$\mathcal{A}_k^n = \binom{[1, n]}{k} \times (\{(0, \varepsilon)\} \cup ([1, n - k] \times [1, k]))^{n-k-2}$$

Os algoritmos consistem em uma série de transformações. Para compreendê-los, é necessário definir esqueleto de uma  $k$ -tree enraizada e árvore característica:

**Definição 16 (esqueleto de uma  $k$ -tree enraizada).** [4] O esqueleto de uma  $k$ -tree enraizada  $T_k$  com raiz  $R$ , denotado por  $S(T_k, R)$ , é definido da seguinte forma recursiva:

1. Se  $T_k$  é apenas o  $k$ -clique  $R$ , seu esqueleto é uma árvore com um único vértice  $R$ .
2. Dada uma  $k$ -tree enraizada  $T_k$  com raiz  $R$ , obtida por  $T'_k$  enraizada em  $R$  através da adição de um novo vértice  $v$  conectado a um  $k$ -clique  $K$  (ver definição 12), seu esqueleto  $S(T_k, R)$  é obtido adicionando a  $S(T'_k, R)$  um novo vértice  $X = \{v\} \cup K$  e uma nova aresta  $(X, Y)$ , onde  $Y$  é o vértice de  $S(T'_k, R)$  que contém  $K$  com uma distância mínima da raiz. Chamamos  $Y$  de pai de  $X$ .

**Definição 17 (árvore característica).** [4] A árvore característica  $T(T_k, R)$  de uma  $k$ -tree enraizada  $T_k$  com raiz  $R$  é obtida rotulando os vértices e arestas de  $S(T_k, R)$  da seguinte forma:

1. O vértice  $R$  é rotulado 0 e cada vértice  $\{v\} \cup K$  é rotulado  $v$ ;
2. Cada aresta do vértice  $\{v\} \cup K$  ao seu pai  $\{v'\} \cup K'$  é rotulada com o índice do vértice em  $K'$  (visualizando-o como um conjunto ordenado) que não aparece em  $K$ . Quando o pai é  $R$  a aresta é rotulada  $\varepsilon$ .

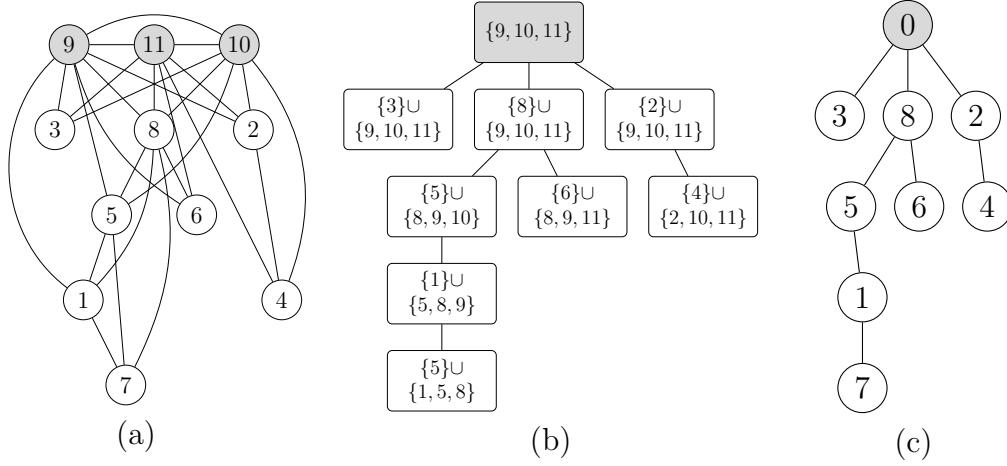


Figura 3.2: (a) Uma 3-tree de Rényi  $R_3$  com 11 vértices e raiz  $\{9, 10, 11\}$ . (b) O esqueleto de  $R_3$ . (c) A árvore característica de  $R_3$ .

Note que a existência de um único vértice em  $K' \setminus K$  é garantida pela definição 16. De fato,  $v'$  precisa aparecer em  $K$ , caso contrário  $K' = K$  e o pai de  $\{v'\} \cup K'$  contém  $K$ . Isso contradiz o fato de que cada vértice em  $S(T_k, R)$  é ligado à distância mínima da raiz.

A figura 3.2 mostra uma  $k$ -tree de Rényi com 11 vértices, seu esqueleto e sua árvore característica.

### 3.2.1 Codificação

O algoritmo para codificar uma  $k$ -tree rotulada consiste em cinco passos. Aqui apresentamos esse algoritmo detalhando nossa implementação.

ALGORITMO DE CODIFICAÇÃO

**Entrada:** uma  $k$ -tree  $T_k$  com  $n$  vértices

**Saída:** um código em  $\mathcal{A}_k^n$

1. Identificar  $Q$ , o  $k$ -clique adjacente à folha de maior rótulo  $l_M$  de  $T_k$ ;

2. Através de um processo de re-rotulação  $\phi$  (computado a partir de  $Q$  e detalhado a seguir), transformar  $T_k$  numa  $k$ -tree de Rényi  $R_k$ ;
3. Gerar a árvore característica  $T$  para  $R_k$ ;
4. Computar o *Dandelion Code* generalizado  $S$  para  $T$ ;
5. Remover da *string* obtida  $S$  o par correspondente a  $\phi(l_M)$ ;

O algoritmo retorna o par  $(Q, S)$  computado durante esse processo.

Na nossa implementação, uma  $k$ -tree (estrutura definida no pacote `ktree`) é representada através de uma lista de adjacências (`Adj`) e um inteiro  $k$  (`K`).

O algoritmo de codificação é implementado pela função `CodingAlgorithm` do pacote `codec`. A seguir, detalhamos os cinco passos.

*Passo 1.* Primeiramente precisamos encontrar  $l_M$ , a folha de  $T_k$  com maior rótulo. Uma folha em uma  $k$ -tree consiste em um vértice de grau  $k$ , portanto basta iterar na lista de adjacências em ordem decrescente nos rótulos até encontrar um vértice com grau  $k$ . Isso foi implementado na função `FindLm`, localizada no pacote `ktree`.

Encontrado  $l_M$ , atribuímos a  $Q$  a lista `Adj[l_M]` (ver função `GetQ` do pacote `ktree`).

*Passo 2.* Queremos transformar  $T_k$  numa  $k$ -tree de Rényi enraizada em  $Q$ . Para isso, precisamos definir uma permutação que associe os vértices de  $Q$  a  $\{n - k + 1, n - k + 2, \dots, n\}$ . A função de permutação, que chamamos de  $\phi$ , é definida da seguinte forma:

1. Se  $q_i$  é o  $i$ -ésimo menor vértice em  $Q$ , fazemos  $\phi(q_i) = n - k + i$ ;
2. Para cada  $q \notin Q \cup \{n - k + 1, \dots, n\}$ , fazemos  $\phi(q) = q$ ;

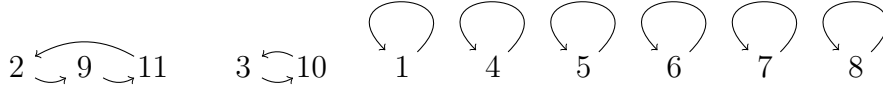


Figura 3.3: Representação gráfica da função  $\phi$  computada para a 3-*tree* mostrada na figura 2.3.

3. O restante dos valores são usados para fechar os ciclos de permutação, ou seja, para cada  $q \in \{n - k + 1, \dots, n\} \setminus Q$ , fazemos  $\phi(q) = i$  tal que  $\phi^j(i) = q$  e  $j$  é maximizado.

Essa computação é implementada pela função `ComputePhi` no pacote `ktree`.

Usamos a função  $\phi$  para re-rotular os vértices de  $T_k$ , obtendo a  $k$ -*tree* de Rényi  $R_k$ . A implementação desse processo foi realizada na função `Relabel` do pacote `ktree`.

A figura 3.3 mostra uma representação gráfica da função  $\phi$  usada para re-rotular a 3-*tree* mostrada na figura 2.3 com  $Q = \{2, 3, 9\}$  produzindo a  $k$ -*tree* de Rényi mostrada na figura 3.2(a).

*Passo 3.* A escrever (gerar a árvore característica  $T$  para  $R_k$ )

*Passo 4.* A escrever (computar o *Dandelion Code* generalizado  $S$  para  $T$ )

*Passo 5.* A escrever (remover da *string* obtida  $S$  o par correspondente a  $\phi(l_M)$ )

A concluir.

### 3.2.2 Decodificação

A escrever.

### 3.3 Experimentos e resultados

A escrever.



# Capítulo 4

## Aprendizado de redes bayesianas

A ser escrito.



# Capítulo 5

## Conclusão

Ainda não foi escrita.



# Referências Bibliográficas

- [1] Stefan Arnborg and Andrzej Proskurowski. Linear time algorithms for np-hard problems restricted to partial k-trees. *Discrete Applied Mathematics*, 23:11–24, 1989.
- [2] Hans L. Bodlaender. Treewidth: Structure and algorithms. *Structural Information and Communication Complexity*, 4474:11–25, 2007.
- [3] John A. Bondy and Uppaluri S. R. Murty. *Graph Theory*. Springer, 2008.
- [4] Saverio Caminiti, Emanuele G. Fusco, and Rossella Petreschi. Bijective linear time coding and decoding for  $k$ -trees. *Theory of Computing Systems*, 46:284–300, 2010.
- [5] Arthur Cayley. A theorem on trees. *Quart J. Math*, 23:376–378, 1889.
- [6] Frank Harary and Edgar M. Palmer. On acyclic simplicial complexes. *Mathematika*, 15:115–122, 1968.
- [7] Daphne Koller and Nir Friedman. *Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques*. The MIT Press, 2009.
- [8] Heinz Prüfer. Neuer beweis eines satzes über permutationen. *Archiv der Mat. und Physik*, 27:142–144, 1918.

- [9] C. Rényi and A. Rényi. The prüfer code for  $k$ -trees. *Combinatorial Theory and its Applications*, pages 945–971, 1970.
- [10] Ömer Eğecioğlu and J. B. Remmel. Bijections for cayley trees, spanning trees, and their  $q$ -analogues. *Journal of Combinatorial Theory*, 42:15–30, 1986.