Algoritmos e Modelação Computacional
Projecto

Paulo Mateus

Campos de Markov Aleatórios - Árvores

LEBiol – LEBiom - LMAC

2022-23

Objetivo

- O objetivo do projeto é implementar um algoritmo de aprendizagem baseado em Campos de Markov Aleatórios (Markov Random Fields)- um bloco constituinte das Deep Belief Networks (quando se usam variáveis escondidas).
- Vamos implementar o algoritmo de Chow-Liu para aprender MRFs ótimas no contexto de classificação.
- O dados Biomédicos são públicos e fornecidos na página da disciplinas e provêm do UCI machine learning repository - http://archive.ics.uci.edu/ml/

Classificador

Um *classificador* sobre um domínio D é simplesmente um mapa $f : D \to C$ onde C é chamado o *conjunto de classes*. Por exemplo, para o caso da base da dados *Cancer*, o conjunto de classes é $C = \{\text{benign, malignant}\}$ e um elemento em D corresponde a um tuplo de dez medições sobre o tumor. Nos casos de interesse, o domínio é sempre estruturado da seguinte forma: $D = \prod_{i=1}^{n} D_i$ onde n é o número de medições e D_i é o domínio da i-ésima medição. Assim, um elemento $d \in D$ é da forma $d = (d_1, \ldots, d_n)$.

Dados

O classificador é construído (ou aprendido) a partir de um conjunto de dados T. Os dados são uma amostra de elementos do domínio e respectiva classe ou seja $T = \{T_1, \ldots, T_m\}$ e $T_j = (d_{1j}, \ldots, d_{nj}, c_j)$ onde m é a dimensão dos dados, $d_{i,j} \in D_i$, $c_j \in C$ para todo o $1 \leq i \leq n$ e $1 \leq j \leq m$. Como os dados são discretizados, isto é $D_i \subseteq \mathbb{N}$, podemos ver os dados como uma matriz $m \times (n+1)$ de entradas naturais.

Classificar

Uma maneira simples de classificar consiste em inferir a distribuição que gera os dados (há muitas outras maneiras). Sejam $X_1 \ldots X_n$ e C variáveis aleatórias para as quais os dados T são uma amostra multinomial do vector aleatório $\vec{V} = (X_1 \ldots, X_n, C)$. O objectivo de classificar pode-se reduzir a inferir a distribuição deste vector da seguinte forma

$$f(d_1, \ldots, d_n) = c$$

tal que $\Pr(\vec{V} = (d_1, \ldots, d_n, c)) > \Pr(\vec{V} = (d_1, \ldots, d_n, c'))$ para $c' \neq c$.

Por outras palavras, sabendo a distribuição do vector $\vec{V}$, classificar um elemento do domínio reduz-se a escolher o elemento da classe que maximiza a probabilidade de observar o elemento do domínio com este elemento da classe (ou seja f é o estimador de máxima verosimilhança para a classe dado o elemento do domínio).

Lei dos grandes números

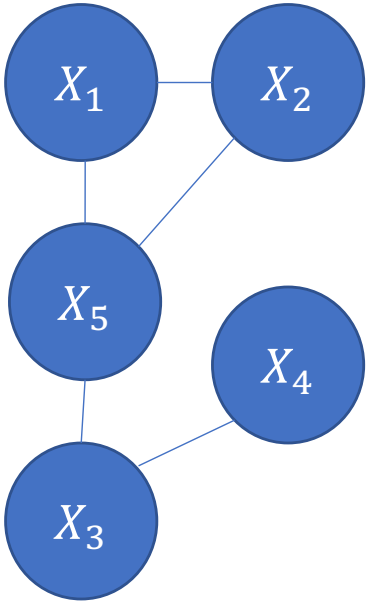
Note que a dimensão do domínio D cresce exponencialmente com o número de variáveis, e portanto inferir a distribuição (multinomial) do vector V utilizando a lei dos grandes números[1] requer dados de dimensão exponencial no número de variáveis para obter distribuições próximas das distribuições reais. Nestas condições, quando se utilizam dados pequenos, a distribuição obtida fica muito enviesada aos dados, fenómeno a que se dá o nome de *overfitting*.

[1] $\mathrm{Prob}(\vec{V} = (d_1, \ldots, d_n, c)) = \lim_{m\to\infty} \frac{|\{i \leq m : T_i = (d_1, \ldots, d_n, c)\}|}{m}$ e T é uma amostra arbitrariamente grande.

Vamos ter de restringir as dependências de variáveis!

Campo de Markov Aleatório

Um Campo Aleatório de Markov
ou *Markov Random Field* (MRF) é



1) Vetor aleatório **X**=$(X_1, \dots, X_n)$
2) G= (**X**,E) onde **X**=$\{X_1, \dots, X_n\}$
   Dito o *suporte do MRF*
3) Seja A e B conjuntos disjuntos de nós

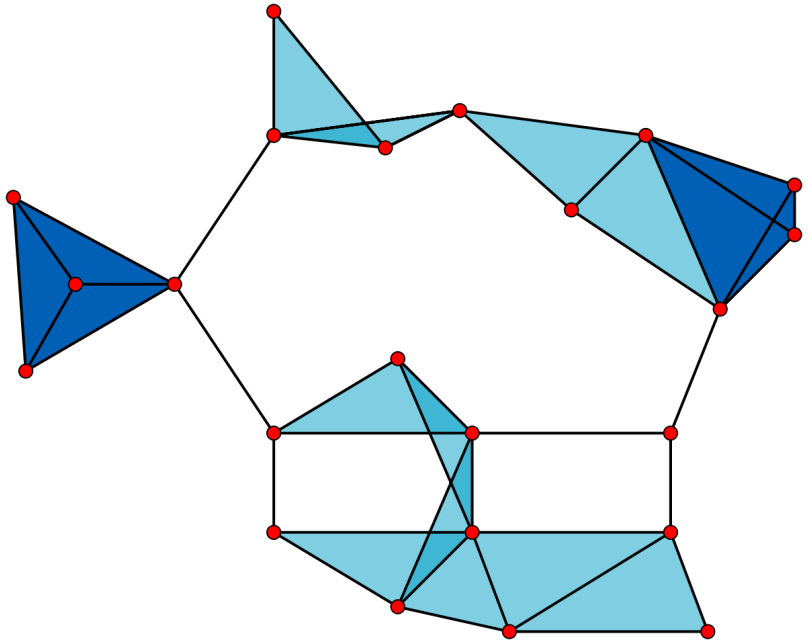
Pr($X_A X_B | X_S) = Pr(X_A|X_S) Pr(X_B|X_S)$

desde que para ir de um nó de A para um nó de B se passe por S em G

4) Pr(**X**=**x**)>0 para todo o **x**

Clique de um grafo

Um *clique* de um grafo é um subgrafo fortemente conexo maximal.



Teorema de Hammersley–Clifford

Seja cl(G) o conjunto de cliques do grafo

então

$$P(X = x) = \prod_{C \in \mathrm{cl}(G)} \phi_C(x_C)$$

e que a distribuição é de Boltzmann

$$P(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\mathrm{Energy}(\mathbf{x})}}{Z},$$

$$Z = \sum_{\mathbf{x}} e^{-\mathrm{Energy}(\mathbf{x})}$$

Dificuldade de aprender MRF

- Note que quando mais esparso for o grafo mais assunções de independência são feitas sobre a distribuição. No caso do grafo ser totalmente esparso (sem arestas) vamos cair no chamado *Naive Bayes Classifer* em que todas as variáveis são independentes entre si exceto com a classe

- Se o grafo for completo, estamos na situação de não ser possível obter (e até guardar) dados suficientes para aprender a distribuição!

- Não há algoritmos eficientes para aprender o melhor MRF para um conjunto de grafos esparsos. Apenas se conhece um **algoritmo eficiente para árvores**!

Algoritmo de Chow-Liu

Árvores

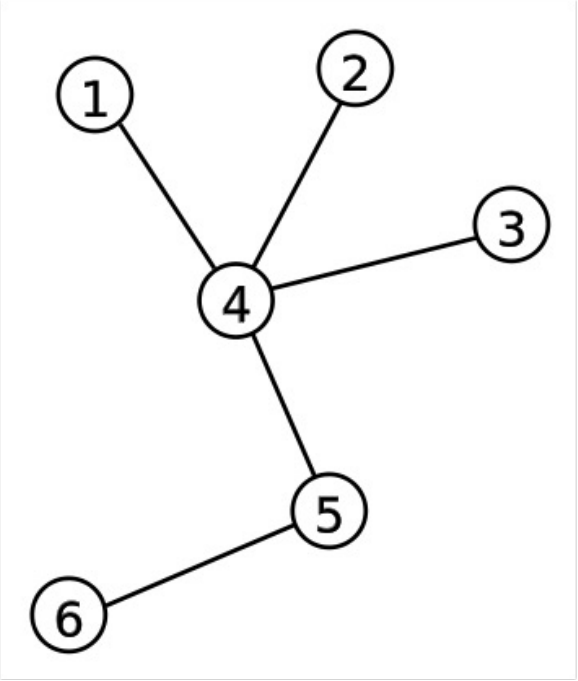
Uma árvore é um grafo:

1) Acíclico
2) Dois nós são acessiveis por um e só um caminho

Os cliques de árvores são só **pares de nós** adjacentes.

MRF baseado em árvores é tal que

$$Pr(\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}) = \prod_{\{i,j\} \in E} \phi(x_i, x_j)$$



MRF baseado em árvores

Fixado um conjunto de dados e uma MRF com suporte de uma árvore há uma e só uma distribuição que **maximiza a verosimilhança** dos dados:

1) Escolhe-se um nó *r* ao acaso (ou fixa-se o primeiro) como raiz e uma aresta *e* com esse nó (à direita *r* é 4 e a aresta e é (4,1))

2) Esta escolha da raiz induz uma direção nas arestas (ver a vermelho) i→ j

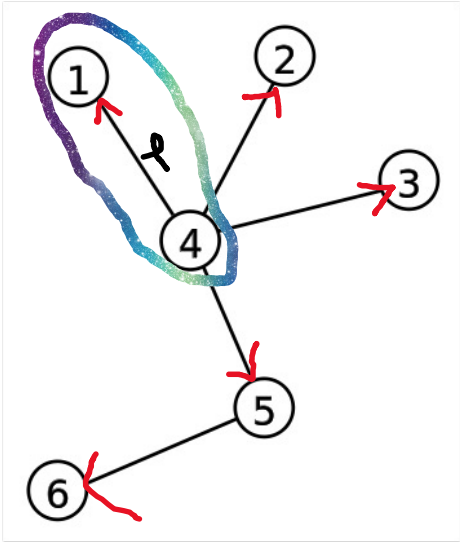
3) Se i→ j **não é** a aresta *e então*

$$\phi(x_i, x_j) = \frac{Count(T,(i,j),(x_i,x_j))}{Count(T,i,x_i)}$$

Se i→ j **é** a aresta *e* então

$$\phi(x_i, x_j) = \frac{Count(T,(i,j),(x_i,x_j))}{m}$$

Onde $Count(T,(i,j),(x_i,x_j))$ é o número de vezes no dataset T que as variáveis i e j tomam **simultaneamente** os valores (x_i, x_j) e m é o tamanho do dataset T.



MRF em árvores

1) Quando se fixa uma árvore e um dataset T sabemos qual é o melhor MRF cuja distribuição é mais próxima da frequência dos dados.
2) Ao escolhermos uma árvore estamos a considerar um conjunto de independências (condicionais) entre as variáveis que evita o *overfitting.*
3) Falta saber como **escolher a melhor árvore**, para tal temos de entender o que é um grafo pesado!

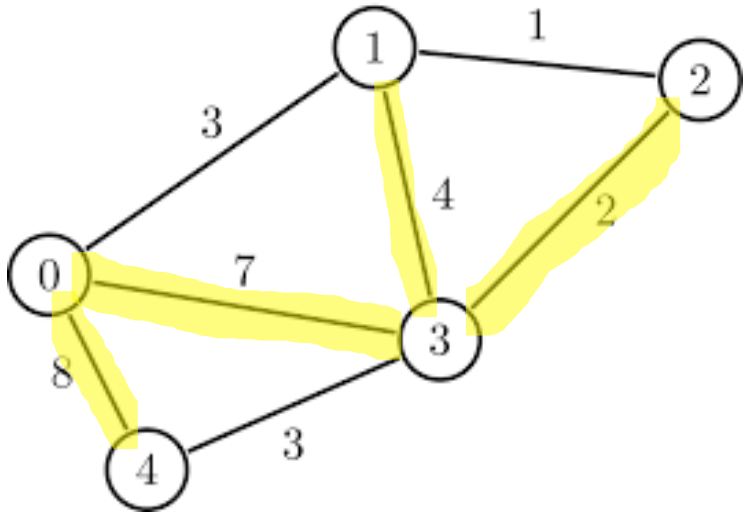
Grafos pesados

Um grafo pesado é um grafo que cada aresta é etiquetada com um peso, ou seja, G=(N,E,w) onde

1) N é um conjunto de nós
2) E é um conjunto de arestas
3) w:E→ $\mathbb{R}$

Uma **árvore de extensão de peso maximal** (MST) é um subgrapho de G que é um árvore (com todos os nós) e cuja soma dos pesos das arestas é maximal entre todos os subgrafos que formam uma árvore.

Vamos aprender a calcular MST eficientemente nas aulas



Chow-Liu algorithm

- Input Data T de tamanho m para variáveis **X**=(X_1,…,X_n)

1. Constuir o **grafo completo** e pesado G com **X**
2. Pesar a aresta entre $i\ e\ j$ com a informação mútua de $\mathrm{I}(i\colon j)$ com base na frequência de T, para todo i e j
3. Retornar MST(G)

onde $I(i\colon j) = \sum_{x_i \in D_i} \sum_{x_j \in D_j} \Pr(\mathrm{x}_i, \mathrm{x}_\mathrm{j}) \log(\frac{Pr(x_i,x_j)}{Pr(x_i)Pr(x_j)})$ (1)

$$\Pr(\mathrm{x}_i, \mathrm{x}_\mathrm{j}) = \frac{count\left(T,(i,j),(x_i,x_j)\right)}{m}\ e\ \Pr(\mathrm{x}_i) = \frac{count(T,i,x_i)}{m}$$

Nas fórmulas acima toma-se que 0*log(0) = 0

Classificador

E como classificar usando MRF's?

1) Particionam-se os dados originais T para cada valor possível da classe C

T=$\{T_0, \dots T_{|D_c|-1}\}$ (no caso do cancro separam-se os dados nos caso com tumores benignos e malignos) cada T_c é chamado uma fibra de T

2) Aprende-se um MRFT M_c **usando cada fibra** T_c

3) $\Pr\left(\vec{V} = (x_1, \dots, x_n, c)\right) = \Pr(C = c)\, P_{M_c}(x_1, \dots, x_n)$

onde $\Pr(C = c) = \frac{count(T,C,c)}{m}$

Pseudo-contagens

Recorde que para cada MRF M_c

$P_{M_c}(x_1, \dots, x_n) = \prod_{\{i,j\} \in E} \phi_{ij}(x_i, x_j)$

Onde de acordo com o algoritmo do MRF para árvores

$$\phi_{ij}(x_i, x_j) = \frac{Count(T_c, (i,j), (x_i, x_j))}{Count(T_c, i, x_i)} \quad \text{ou}$$

$$\phi_{ij}(x_i, x_j) = \frac{Count(T_c, (i,j), (x_i, x_j))}{m_c} \quad e\ m_c \text{ é a dimensão de } T_c$$

No entanto (raramente) $Count\left(T_c, (i,j), \left(x_i, x_j\right)\right)$ pode ser 0 e neste caso temos uma probabilidade nula (o que contradiz a def de MRF)

Assim, assume-se uma pseudo-contagem de $\delta = 0.2$ para todos os dados.

Pseudo-contagens

Ficando então a probabilidade

$$Pr_{M_c}(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{\{i,j\} \in E} \phi\left(x_i, x_j\right)$$

mas faz-se a seguinte alteração para que se tenham probabilidades positivas

$$\phi_{ij}\left(x_i, x_j\right) = \frac{Count\left(T_c,(i,j),\left(x_i,x_j\right)\right)+\delta}{Count(T_c,i,x_i)+\delta\,|D_j|} \qquad (2) \qquad \text{ou}$$

$$\phi_{ij}\left(x_i, x_j\right) = \frac{Count\left(T_c,(i,j),\left(x_i,x_j\right)\right)+\delta}{m_c+\delta\,|D_j||D_i|} \qquad (3)$$

$e\ m_c$ é a dimensão de T_c (para a aresta especial)

Entrega

Classes

- Dataset
  - Count: recebe uma lista de variáveis e valores destas e retorna o número de vezes que estas variáveis tomam simultaneamente os esses valores no dataset.
  - Add: adiciona um vetor ao dataset.
  - Fiber: dado um valor da classe retorna a fibra (Dataset) associada a esse valor da classe.

- MRFT (Markov Random Field Tree)
  - Construtor que recebe uma árvore, e um dataset e coloca os $\phi_{ij}(x_i, x_j)$ em cada aresta da árvore (que podem ser vistos como uma matriz).
  - Prob: dado um vetor de dados $(x_1, \dots, x_n)$ retorna a probabilidade destes dados no dataset.

Entrega

Classes

- Weighted Graph (não direcionado)
  - Add – recebe dois nós e uma peso e adiciona uma aresta entre os nós com este peso.
  - MST.
- Classifier
  - Construtor que recebe um *array* de MRFT's, um para cada valor da classe, e um *array* com a frequência das classes.
  - Classify: dados valores $(x_1, \dots, x_n)$ das variáveis retorna o valor da classe mais provável.

Entrega

- Algoritmo de aprendizagem: Chow Liu (que será feita para cada fibra)
- Interface gráfica
  - Ler os dados, aprende o classificador e grava o dito (classificador) num ficheiro
  - Outra que lê o classificador e classifica observações/pacientes

Aplicação de aprendizagem

- Lê os dados e separa os dados em fibras (uma fibra para cada classe)
- Para cada fibra cria um MRF
  - Gera um grafo pesado completo cujas arestas são pesadas com a Informação Mútua - Eq. (1)
  - Aplica o algoritmo de Maximum Spanning Tree e cria uma árvore
  - Da àrvore constroi um MRF usando Eq. (3) e (4)
- Os MRF’s geram um array de MRF, que calcula a probabilidade de observar um dado com Eq. (2)
- Guarda o array de MRF’s no disco

Aplicação de Classificação

- Lê o array de MRF’s do disco
- Colocam-se valores de atributos com o objectivo de ser classificado
- Classifica de acordo com as probabilidade do array de MRF’s.

Cotação final

- Dataset (1.5 val)
- MRFT e Classifier (2.0 val)
- Input/output de dados e resultados (2.5 val)
- Algoritmo de aprendizagem e inicialização (3 val)
- Aplicações gráficas (1 val)

Será entregue uma ficha de autoavaliação a preencher antes de cada oral.