

# Algoritmos e Modelação Computacional Projecto



Paulo Mateus

Campos de Markov Aleatórios - Árvores

MEBiom – LMAC

2020

# 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  $f : D \rightarrow C$  onde  $C$  é chamado o *conjunto de classes*. Por exemplo, para o caso da base de dados *Cancer*, o conjunto de classes é  $C = \{\text{benign}, \text{malignant}\}$  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  $d = (d_1, \dots, d_n)$ .

# 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  $T = \{T_1, \dots, T_m\}$  e  $T_j = (d_{1j}, \dots, d_{nj}, c_j)$  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  $X_1 \dots X_n$  e  $C$  variáveis aleatórias para as quais os dados  $T$  são uma amostra multinomial do vector aleatório  $\vec{V} = (X_1 \dots, X_n, C)$ . O objectivo de classificar pode-se reduzir a inferir a distribuição deste vector da seguinte forma

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

tal que  $\Pr(\vec{V} = (d_1, \dots, d_n, c)) > \Pr(\vec{V} = (d_1, \dots, d_n, c'))$  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<sup>1</sup> 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*.

$$^1\text{Prob}(\vec{V} = (d_1, \dots, d_n, c)) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{|\{i \leq m : T_i = (d_1, \dots, d_n, c)\}|}{m} \text{ e } T \text{ é uma amostra arbitrariamente grande.}$$

Vamos ter de restringir as dependências de variáveis!

# Campo de Markov Aleatório

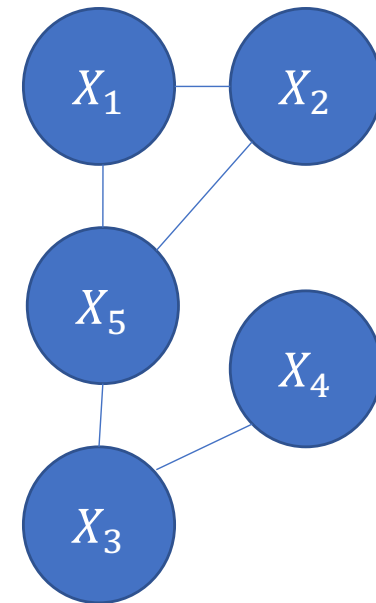
Um Campo Aleatório de Markov  
ou *Markov Random Field* (MRF) é

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

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

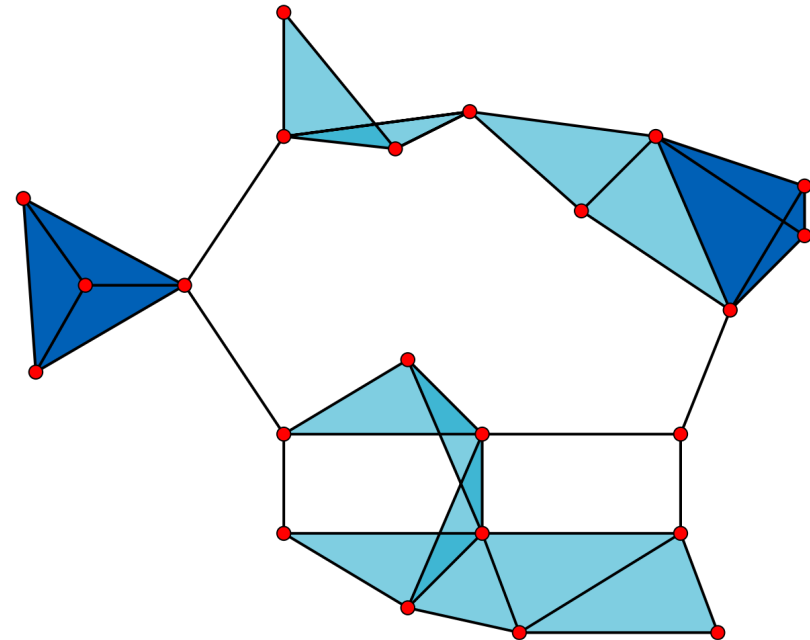
desde que para ir de um nó de A para um nó de B se passe por S em G

- 4)  $\Pr(\mathbf{X}=\mathbf{x})>0$  para todo o  $\mathbf{x}$



# Clique de um grafo

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





# Teorema de Hammersley–Clifford

Seja  $\text{cl}(G)$  o conjunto de cliques do grafo  
então

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

e que a distribuição é de Boltzmann

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

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

# Dificuldade de aprender MRF

---

- Note que quando mais esparsos for o grafo mais assunções de independência são feitas sobre a distribuição. No caso do grafo ser totalmente esparsos (sem arestas) vamos cair no chamado *Naive Bayes Classifier* 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

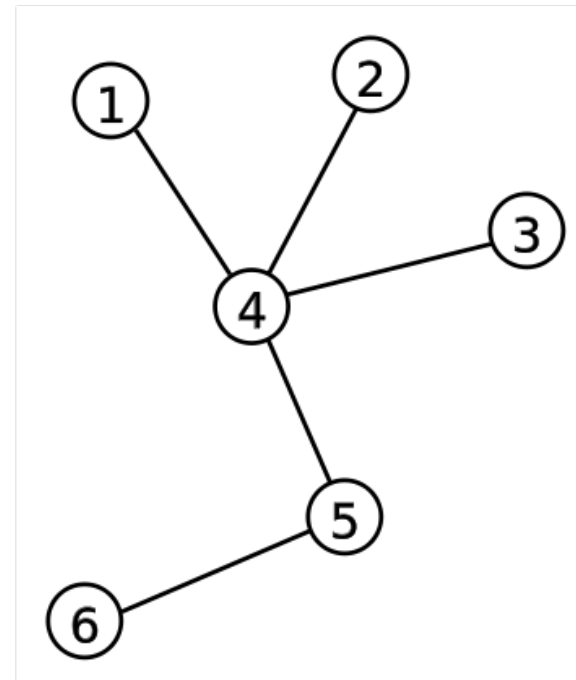
Uma árvore é um grafo:

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

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

**MRF** baseado em árvores é tal  
que

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



# 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:

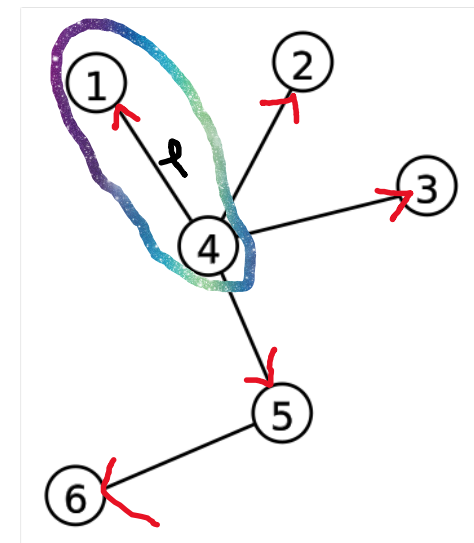
- 1) Escolhe-se um nó  $r$  ao acaso (ou fixa-se o primeiro) como raiz e uma aresta  $e$  com esse nó (à direita  $r$  é 4 e a aresta  $e$  é (4,1))
- 2) Esta escolha da raiz induz uma direção nas arestas (ver a vermelho)  $i \rightarrow j$
- 3) Se  $i \rightarrow j$  **não é** a aresta  $e$  então

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

Se  $i \rightarrow j$  **é** a aresta  $e$  então

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

Onde  $\text{Count}(T, (i, j), (x_i, x_j))$  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!

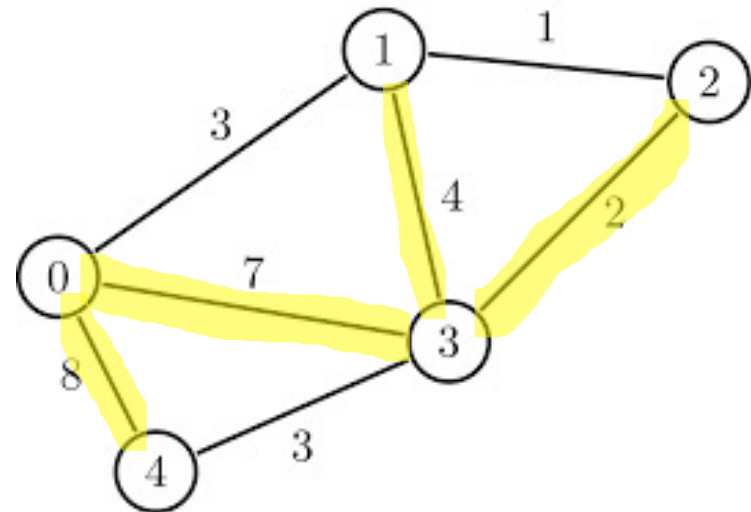
# Grafos pesados

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)  $w:E \rightarrow \mathbb{R}$

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  $\mathbf{X}=(X_1,\dots,X_n)$ 
  1. Construir o **grafo completo** e pesado G com  $\mathbf{X}$
  2. Pesar a aresta entre  $i$  e  $j$  com a informação mútua de  $I(i:j)$  com base na frequência de T, para todo  $i$  e  $j$
  3. Retornar MST(G)

$$\text{onde } I(i:j) = \sum_{x_i \in D_i} \sum_{x_j \in D_j} \Pr(x_i, x_j) \log\left(\frac{\Pr(x_i, x_j)}{\Pr(x_i)\Pr(x_j)}\right)$$

$$\Pr(x_i, x_j) = \frac{\text{count}(T, (i,j), (x_i, x_j))}{m} \text{ e } \Pr(x_i) = \frac{\text{count}(T, i, x_i)}{m}$$

Nas fórmulas acima toma-se que  $0 \cdot \log(0) = 0$

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

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



# 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

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

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

No entanto (raramente)  $\text{Count}(T_c, (i,j), (x_i, x_j))$  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

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

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

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

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

(para a aresta especial)

# Entrega da 1ª parte

## 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 da 1ª parte

## Classes

- Weighted Graph (não direcionado)
  - Add – recebe dois nós e uma peso e adiciona uma aresta entre os nós com este peso.
  - MST – não implementar na primeira parte parte.
- 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 da 2ª parte

- Algoritmo de aprendizagem: Chow Liu (que será feita para cada fibra)
- Interface gráfica
  - Ler os dados e gravar o algoritmo num ficheiro
  - Outra para classificar novos pacientes
- Relatório com 4 páginas

# Cotação final

- Dataset (1.5 val)
- MRFT e Classifier (1.5 val)
- Input/output de dados e resultados (2 val)
- Algoritmo de aprendizagem e inicialização (3 val)
- Aplicações gráficas (1 val)
- Relatório minimalista (1 val)

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