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

Tiago Madeira
<madeira@ime.usp.br>

Supervisor: Prof. Dr. Denis Deratani Mauá

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

Novembro de 2016

No que consiste o trabalho?

Estudo sobre amostragem uniforme de *k-trees* e seu uso no aprendizado da estrutura de redes bayesianas com *treewidth* limitado.

Por que estudar *k-trees*?

Há interesse considerável em desenvolver ferramentas eficientes para manipular *k-trees*, porque **problemas NP-difíceis são resolvidos em tempo polinomial** em *k-trees* e subgrafos de *k-trees*.

Alguns exemplos[1]:

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

[1] Stefan Arnborg, Andrzej Proskurowski. Linear time algorithms for NP-Hard problems restricted to partial *k*-trees. *Discrete Applied Mathematics*, 23:11–24, 1989.

Por que gerar *k-trees?*

Há muitas razões, como por exemplo para testar a eficácia de algoritmos aproximados.

O problema que desperta nosso interesse é o **aprendizado de redes bayesianas**.

O que foi feito?

- Implementação do algoritmo de Caminiti *et al.* (2010)[2] para **codificar k-trees de forma bijetiva em tempo linear**.
- Implementação de algoritmo para **amostrar k-trees uniformemente** e testes para comprovar seu funcionamento.
- Estudo sobre **aprendizado de redes bayesianas com treewidth limitado** por meio da amostragem uniforme de k-trees conforme artigo de Nie *et al.* (2014)[3].
- **Comparação entre métodos** para aprender redes bayesianas.

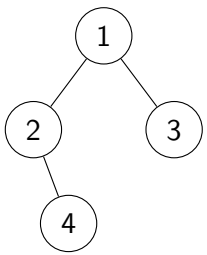
[2] Saverio Caminiti, Emanuele G. Fusco, Rossella Petreschi. Bijective linear time coding and decoding for k-trees. *Theory of Computing Systems*, 46:284–300, 2010.

[3] Siqi Nie, Denis D. Mauá, Cassio P. de Campos, Qiang Ji. Advances in learning bayesian networks of bounded treewidth. *CoRR*, abs/1406.1411, 2014.

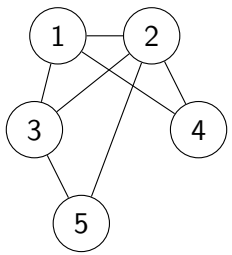
Primeiramente, o que são *k-trees*?

Uma k-**tree** é definida da seguinte forma recursiva[4]:

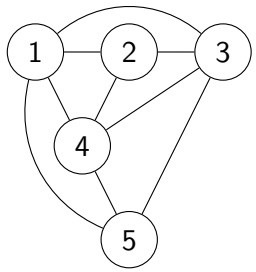
- Um grafo completo com k vértices é uma *k-tree*.
- Se $T'_k = (V, E)$ é uma *k-tree*, $K \subseteq V$ é um k-clique e $v \notin V$, então $T_k = (V \cup \{v\}, E \cup \{(v, x) \mid x \in K\})$ é uma *k-tree*.



(a)



(b)



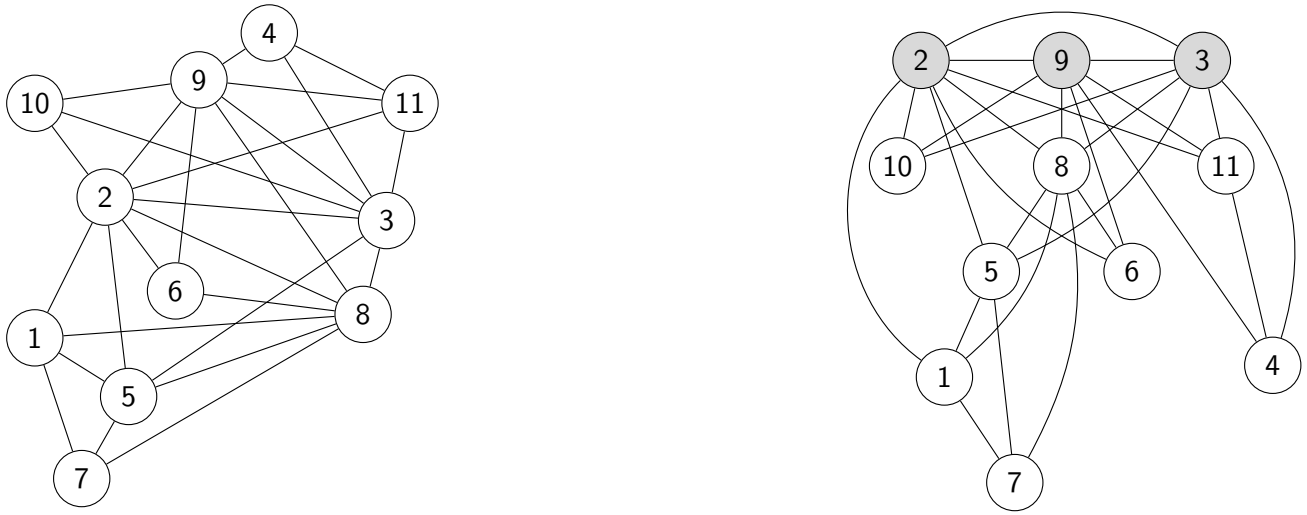
(c)

Figura: **(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.

[4] Frank Harary, Edgar M. Palmer. On acyclic simplicial complexes. *Mathematika*, 15:115–122, 1968.

k-trees enraizadas

Uma k-**tree enraizada** é uma k-*tree* com um k-clique destacado $R = \{r_1, r_2, \cdots, r_k\}$ que é chamado de **raiz** da k-*tree* enraizada.



(a) (b)

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

k-tree e *treewidth*

Dado um grafo $G = (V, E)$, seu **treewidth** é um inteiro definido da seguinte forma:

- Se G é um **grafo cordal**, então seu *treewidth* é o tamanho do seu maior clique menos 1.
- Se G é um **grafo não-dirigido arbitrário**, então seu *treewidth* é o mínimo entre os *treewidth* de todas as suas cordalizações.
- Se G é um **DAG**, então seu *treewidth* é o *treewidth* do seu grafo moral.

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[5].

[5] Hans L. Bodlaender. Treewidth: Structure and algorithms. *Structural Information and Communication Complexity*, 4474:11–25, 2007.

Ilustração de *treewidth*

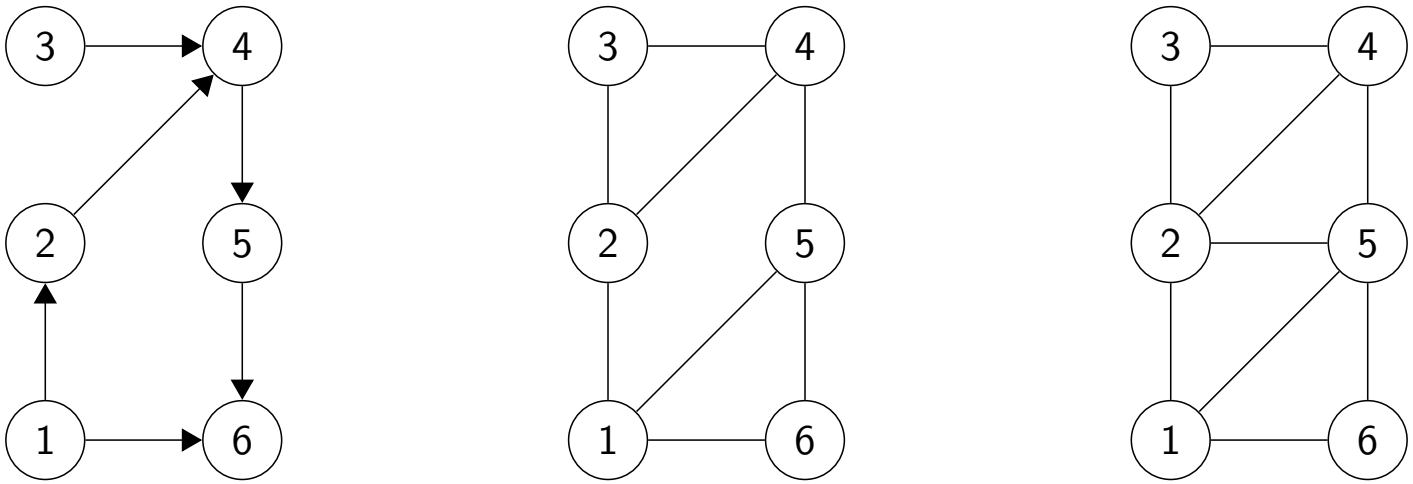


Figura: **(a)** Um grafo acíclico dirigido G. **(b)** Grafo moral G' de G, obtido conectando-se todo par de vértices com um filho em comum e retirando-se a direção das arestas. **(c)** Um dos grafos cordais obtidos por meio da cordalização de G'. O *treewidth* dos três grafos mostrados na figura é 2.

A relação entre geração e codificação

O problema de **gerar** *k-trees* está intimamente relacionado ao problema de **codificá-las e decodificá-las**.

Se há uma codificação bijetiva que associa *k-trees* a *strings*, basta gerar *strings* uniformemente aleatórias para gerar *k-trees* uniformemente aleatórias.

Codificação de *k-trees*

- Em 1889, Cayley[6] demonstrou que para um conjunto de n vértices existem n^{n-2} árvores possíveis. Desde lá, foram criados vários códigos para árvores, como o de Prüfer[7].
- Em 1970, Rényi e Renýi apresentaram uma codificação redundante (ou seja, não bijetiva) para um subconjunto de *k-trees* rotuladas que chamamos de *k-trees* de Rényi[8]. Definição: Uma *k*-**tree de Rényi** R_k é uma *k-tree* enraizada com n vértices rotulados em $[1, n]$ e raiz $\{n-k+1, \cdots, n\}$.

[6] Arthur Cayley. A theorem on trees. *Quart J. Math*, 23:376–378, 1889.

[7] Heinz Prüfer. Neuer beweis eines satzes über permutationen. *Archiv der Mat. und Physik*, 27:142–144, 1918.

[8] C. Rényi, A. Rényi. The prüfer code for *k*-trees. *Combinatorial Theory and its Applications*, 945–971, 1970.

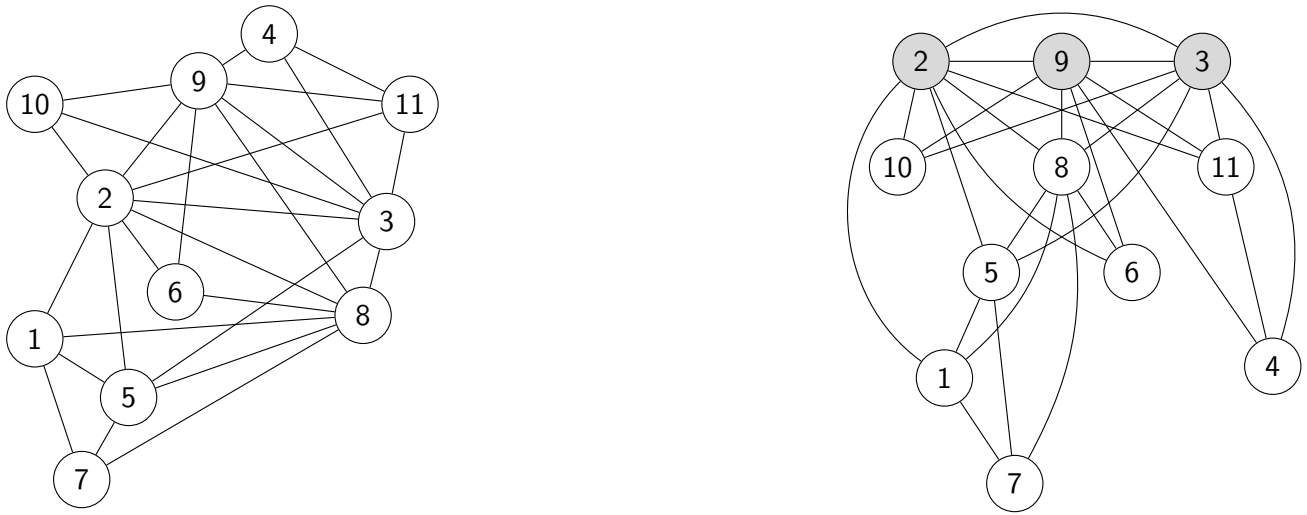
A solução de Caminiti *et al.*

- Apenas **em 2008 surgiu um código bijetivo para k-trees com algoritmos lineares de codificação e decodificação**. Esses algoritmos, propostos por Caminiti *et al.*, foram implementados neste trabalho.
- O código é formado por uma permutação de tamanho k e uma generalização do *Dandelion Code*[9]. A codificação das *k-trees* associa elementos em $\mathcal{T}_k^n$ (conjunto das *k-trees* com n vértices) com elementos em:

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

[9] Ömer Eğecioğlu, J. B. Remmel. Bijections for cayley trees, spanning trees, and their q-analogues. *Journal of Combinatorial Theory*, 42:15–30, 1986.

Transformações de Caminiti *et al.* (1/3)



(a) (b)

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

Transformações de Caminiti *et al.* (2/3)

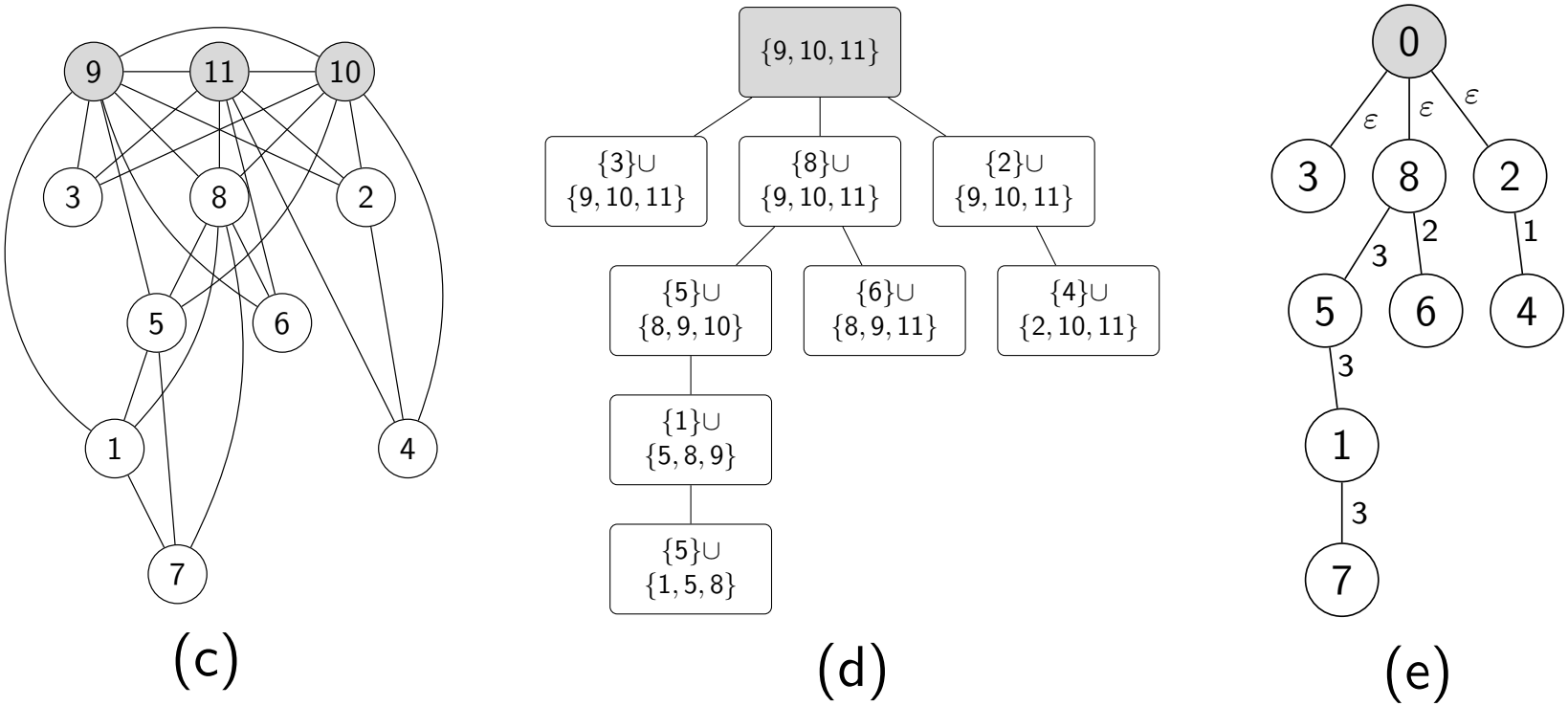


Figura: **(c)** R_3, 3-*tree* de Rényi gerada por meio da re-rotulação de T_3. **(d)** O esqueleto de R_3. **(e)** A árvore característica de R_3.

Transformações de Caminiti *et al.* (3/3)

Dandelion Code generalizado correspondente a T_3:

$$\{2, 3, 9\}, [(0, \varepsilon), (2, 0), (8, 2), (8, 1), (1, 2), (5, 2)]$$

Geração uniforme de *k-trees*

Geramos *k-trees* uniformemente por meio da geração uniforme de *strings* em:

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

A biblioteca que desenvolvemos[10] tem três utilitários que rodam na linha de comando:

- `code_ktree` (para codificar *k-trees*)
- `decode_ktree` (para decodificar *Dandelion Codes*)
- `generate_ktree` (para gerar uma *k-tree* uniformemente)

[10] Implementada em *Go* e disponível em `https://github.com/tmadeira/tcc`

Testes

- Todos os pacotes desenvolvidos neste trabalho possuem testes unitários que podem ser executados usando o utilitário go `test`. 96% das linhas do código são cobertas por testes.
- Para mostrar que nossa implementação gera *k-trees* aleatórias corretamente e uniformemente, realizamos dezenas de milhares de testes com n e k pequenos.

Testes

Exemplo: Com $n = 3, k = 1$ existem 3 *k-trees* rotuladas distintas.

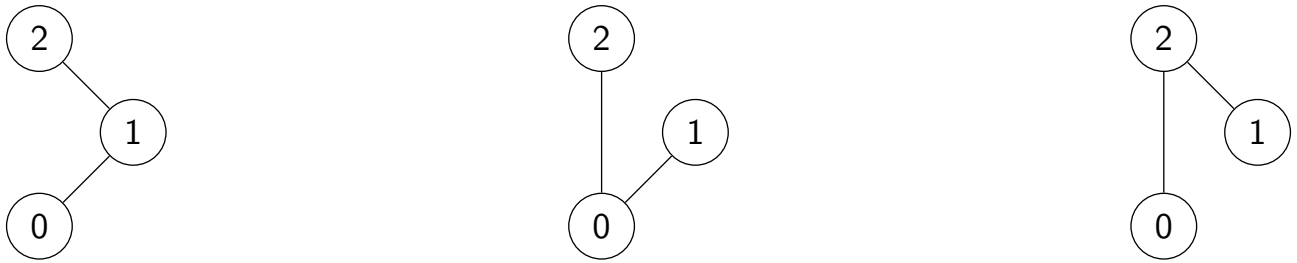


Figura: Representação das três 1-*trees* rotuladas distintas com $n = 3$ vértices.

Ao executar 10 mil gerações com $n = 3$ e $k = 1$ esperamos que as três 1-trees (árvores) apareçam com frequência similar (aprox. 3333). As frequências que obtivemos:

- 3320
- 3335
- 3345

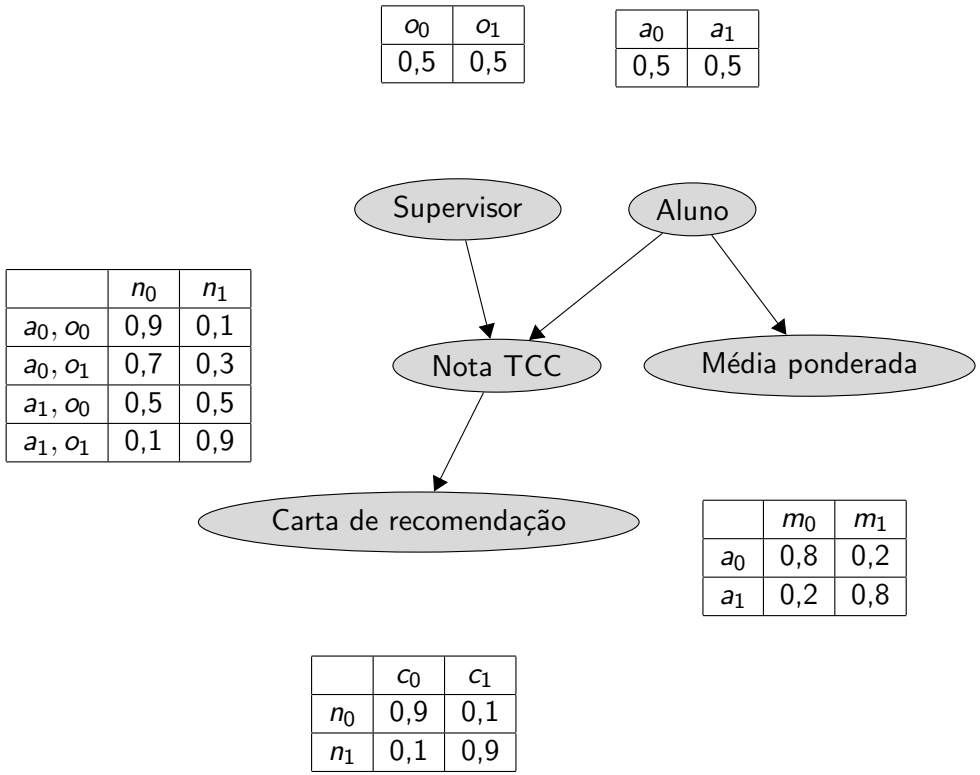
O que são redes bayesianas?

Redes bayesianas são modelos probabilísticos gráficos[11] que representam distribuições de probabilidade conjunta e são usados para raciocinar em situações com incerteza.

Formalmente: Seja $N = \{1, \cdots, n\}$ e seja $X = \{X_i : i \in N\}$ um conjunto de variáveis aleatórias X_i tomando valores em conjuntos finitos $\mathcal{X}_i$. Uma **rede bayesiana** é uma tripla (X, G, θ), onde $G = (V, E)$ é um DAG (grafo acíclico dirigido, que chamamos de **estrutura** da rede bayesiana) cujos vértices correspondem a variáveis em X e $\theta = \{\theta_i(x_i, x_{\pi_i})\}$ é um conjunto de parâmetros numéricos especificando valores de probabilidade condicional $\theta_i(x_i, x_{\pi_i}) = P(x_i | x_{\pi_i})$ para todo vértice $i \in V$, valor $x_i \in X_i$ e atribuição x_{π_i} para os pais π_i de X_i (em G).

[11] Daphne Koller, Nir Friedman. *Probabilistic Graphical Models: Principles and Techniques*. The MIT Press, 2009.

Exemplo de rede bayesiana



o_0	o_1
0,5	0,5

a_0	a_1
0,5	0,5

	n_0	n_1
a_0, o_0	0,9	0,1
a_0, o_1	0,7	0,3
a_1, o_0	0,5	0,5
a_1, o_1	0,1	0,9

	m_0	m_1
a_0	0,8	0,2
a_1	0,2	0,8

	c_0	c_1
n_0	0,9	0,1
n_1	0,1	0,9

Figura: Exemplo de rede bayesiana com distribuições de probabilidade condicional.

Aprendizado de redes bayesianas

- Aprender uma rede bayesiana se refere ao processo de inferir a sua estrutura (i.e., seu DAG) a partir de dados.
- Inferência em rede bayesiana é NP-difícil até mesmo aproximadamente e todos os algoritmos conhecidos (exatos e comprovadamente bons) têm complexidade no pior caso exponencial no *treewidth*.
- Resultados empíricos sugerem que limitar o *treewidth* pode melhorar a performance dos modelos e não causa perdas significativas na sua expressividade.
- Por isso estamos interessados em fixar k e aprender redes bayesianas cujo DAG tem *treewidth* limitado a k.

Aprendizado de redes bayesianas

Função de *score* $s(G)$ atribui pontuação para cada DAG G e pode ser escrita como soma de funções de *score* locais:

$$s(G) = \sum_{i \in N} s_i(X_{\pi_i}).$$

Para cada variável, sua pontuação só depende do seu conjunto de pais. Portanto, nosso problema é encontrar G^* tal que

$$G^* = \arg\max_{G \in \mathcal{G}_{n,k}} \sum_{i \in N} s_i(\pi_i),$$

onde $\mathcal{G}_{n,k}$ é o conjunto de todos os DAGs de *treewidth* não maior que k. Esse problema é NP-difícil[12].

[12] Janne H. Korhonen, Pekka Parviainen. Exact learning of bounded tree-width bayesian networks. *Proceedings of the 16th International Conference on AISTATS*, 2013.

Aprendizado por amostragem de *k-trees*

A ideia para aprender um DAG por meio da amostragem de *k-trees* baseia-se em, para cada *k-tree* T_k amostrada, construir uma ordem parcial σ dos vértices e fazer com que o DAG G seja consistente com ela e com T_k.

Construímos a ordem parcial σ a partir do enraizamento da *k-tree* num k-clique qualquer. Em particular, podemos escolher usar a raiz da *k-tree* de Rényi que aparece durante a decodificação de um *Dandelion Code* em uma *k-tree*.

Algoritmo para aprender estrutura

Entrada: n, k e função de *score* s_i para cada $i \in [0, n)$
Saída: um DAG G^{melhor}

1. Inicializar G^{melhor} como um grafo com $s(G^{\text{melhor}}) = -\infty$.
2. Repetir até atingir um determinado número de iterações:
   1. Gerar $(Q, S) \in \mathcal{A}_k^n$ e decodificar na árvore característica T;
   2. Sortear ordem pros vértices do k-clique raiz e usar função de *score* para calcular os melhores pais para cada um deles;
   3. Percorrer T a partir dos vértices ligados ao k-clique raiz: para cada v, é sorteado um lugar para ele em σ e selecionado seu melhor conjunto de pais dentre os vértices predecessores adjacentes, assim como são atualizados os melhores pais dos vértices sucessores adjacentes;
   4. Se $\left(\sum_{i \in [0,n)} s_i(\pi_i^G)\right) = s(G) > s(G^{\text{melhor}})$, atualiza $G^{\text{melhor}} = G$.

Experimentos

Conclusão

Agradecimentos

Perguntas?