Universidade de São Paulo
Instituto de Matemática e Estatística
Bacharelado 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

Este trabalho de conclusão de curso consiste num estudo sobre amostragem uniforme de *k-trees* e seu uso no aprendizado da estrutura de redes bayesianas com *treewidth* limitado. Foi implementado um algoritmo para codificar e decodificar *k-trees* de forma bijetiva em tempo linear. O trabalho mostra como aprender grafos acíclicos dirigidos cujo grafo moral é um subgrafo das *k-trees* geradas. Experimentos comparam esse método para aprender estruturas com o estado da arte.

**Palavras-chave:** *k-trees*, codificação de grafos, amostragem uniforme, redes bayesianas, aprendizado de estrutura, *treewidth* limitado

# Abstract

This work is a study about uniform sampling of $k$-trees and its use to learn Bayesian networks with bounded treewidth. We have implemented algorithms for bijective linear time coding and decoding of $k$-trees. This work shows how to learn directed acyclic graphs whose moral graph is a subgraph of the generated $k$-trees. Experiments compare this method of structure learning with the state of the art.

**Keywords:** $k$-trees, graph coding, uniform sampling, Bayesian networks, structure learning, bounded treewidth

# Sumário

# 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* limitado.

Alguns exemplos são [1]:

- 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.

Há muitas razões para estudar a geração de *k-trees* de forma aleatória, como por exemplo para testar a eficácia de algoritmos aproximados. O problema que desperta nosso interesse em *k-trees* é o aprendizado de redes bayesianas.

Uma rede bayesiana é um modelo probabilístico usado para raciocinar e tomar decisões em situações com incerteza através de técnicas de inteligência artificial e aprendizagem computacional. Ela representa de forma concisa uma distribuição de probabilidade multivariada sobre os vértices de um DAG (grafo acíclico dirigido), que representam variáveis aleatórias. As arestas do DAG correspondem, intuitivamente, a influência de uma variável sobre outra.

Segundo Koller e Friedman [8], inferência em redes bayesianas é NP-difícil; porém, se seu DAG possui *treewidth* limitado, a inferência pode ser realizada em tempo polinomial no tamanho do grafo. Daí a importância de aprender redes bayesianas que tenham *treewidth* limitado.

O aprendizado de redes bayesianas pode ser visto como o problema de encontrar um DAG que otimize algum valor que caracterize a performance dessa estrutura. Uma técnica simples consiste em gerar DAGs aleatoriamente. Isso garante que o espaço de busca é bem coberto e nos permite adicionalmente obter informações estatísticas sobre o espaço de busca, como por exemplo *score* médio e variância.

Gerar um DAG aleatoriamente e calcular seu *treewidth* é um problema difícil. Porém, Nie *et al.* [11] sugere um método aproximado para aprender redes bayesianas com *treewidth* limitado que é baseado em amostrar $k$-*trees* e encontrar DAGs cujo grafo moral é um subgrafo dessas $k$-*trees*.

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.

Estudamos e implementamos o algoritmo desenvolvido por Caminiti *et al.* [4] para codificar e decodificar $k$-*trees*. Com base nele, geramos $k$-*trees* uniformemente e usamos as $k$-*trees* geradas para aprender a estrutura de

redes bayesianas usando o algoritmo de Nie *et al.* [11].

## 1.1 Código desenvolvido

As implementações deste trabalho foram realizadas na linguagem *Go*[1]. *Go* é uma linguagem de código aberto criada em 2007 e apoiada pelo Google. Ela é compilada e usa tipagem estática como o C, mas possui recursos avançados como *garbage collection* e bom suporte a programação concorrente.

Escolhemos *Go* porque ela oferece um bom balanço entre a agilidade de escrita de código e a eficiência computacional; tem sistemas de pacotes (`go get`), testes (`go test`) e documentação (*GoDoc*[2]) padronizados facilitando que os códigos sejam testados e reutilizados; e ajuda a gerar código limpo e padronizado: identação, espaçamento e outros detalhes de estilo são automatizados pela ferramenta `gofmt`, que vem com ela.

Todo o código desenvolvido neste trabalho está num repositório público no *GitHub*[3] cujo endereço é `https://github.com/tmadeira/tcc/`.

A documentação de todas as estruturas e funções declaradas no código está disponível em `https://godoc.org/github.com/tmadeira/tcc`.

Para baixar o código, rodar os testes e instalar os utilitários, recomenda-se usar as ferramentas da linguagem *Go*:

```
1 $ export ${GOPATH:=$HOME/go}
2 $ mkdir -p $GOPATH
3 $ go get github.com/tmadeira/tcc/...
4 $ go test -v github.com/tmadeira/tcc/...
5 $ go install github.com/tmadeira/tcc/examples/...
```

[1] *The Go Programming Language:* `https://golang.org/`
[2] *GoDoc:* `https://godoc.org/`
[3] *GitHub:* `https://github.com/`

## 1.2 Organização da monografia

No capítulo 2, apresentamos definições fundamentais de teoria dos grafos que o leitor deve conhecer para compreender o trabalho.

No capítulo 3, apresentamos o problema de codificar *k-trees*, discutimos os algoritmos lineares para codificar e decodificar *k-trees* propostos no artigo *"Bijective Linear Time Coding and Decoding for k-Trees"* [4], explicamos como eles foram implementados neste trabalho para gerar *k-trees* aleatórias uniformemente e apresentamos o resultado que obtivemos através de experimentos.

No capítulo 4, explicamos como as *k-trees* que geramos no capítulo 3 podem ser usadas para aprender redes bayesianas a partir do arcabouço desenvolvido no artigo *"Advances in Learning Bayesian Networks of Bounded Treewidth"* [11] e apresentamos os resultados obtidos.

No capítulo 5, apresentamos conclusões e apontamos possíveis desdobramentos do trabalho.

# Capítulo 2

# Fundamentos

Neste capítulo, apresentamos definições fundamentais de teoria dos grafos que o leitor deve conhecer para compreender o trabalho. Mais detalhes podem ser encontrados no livro de Bondy e Murty [3], que foi utilizado como referência.

Outras definições mais específicas, como as utilizadas para construir o algoritmo para codificar e decodificar *k-trees*, estão localizadas nos capítulos subsequentes. A definição formal de rede bayesiana é deixada para o capítulo 4.

Assumimos que o leitor conhece noções básicas de conjuntos e que está familiarizado com teoria de probabilidades discretas [8], necessária para compreender redes bayesianas.

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

[1] 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 $u = v$.

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 $v$.

Dado um grafo $G = (V, E)$, o número de arestas que incide num determinado vértice $v \in V$ é chamado de **grau** do vértice $v$.

Há diferentes estruturas de dados que podem ser usadas para representar um grafo na memória do computador. Uma das mais comuns, que usamos nas implementações deste trabalho, é a **lista de adjacência**. Suponha, sem perda de generalidade, que os vértices de um grafo $G$ sejam representados por inteiros de 0 a $|V|-1$. Então, a representação desse grafo consiste em um vetor de listas `Adj`. A lista `Adj[i]` contém os vértices adjacentes ao vértice de rótulo $i$ (para todo $i \in [0, |V|)$).

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 $b$, que há uma aresta de $a$ para $b$ ou que $b$ é filho de $a$.

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 $v$.

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.

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

Dado um grafo $G = (V, E)$ e um subconjunto $V'$ de $V$, o subgrafo de $G$

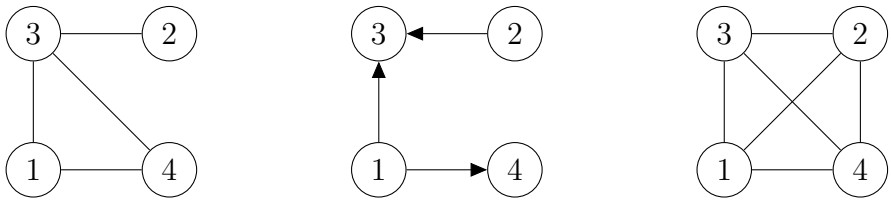



Figura 2.1: **(a)** Representação do grafo $G = (V_G, E_G)$ com $V_G = \{1, 2, 3, 4\}$ e $E_G = \{(1, 3), (1, 4), (2, 3), (3, 4)\}$. **(b)** Representação do grafo dirigido $D = (V_D, E_D)$ com $V_D = \{1, 2, 3, 4\}$ e $E_D = \{(1, 3), (1, 4), (2, 3)\}$. **(c)** Representação do $K_4$, o grafo completo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

**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, $E' = \{(u, v) \in E \mid u, v \in V'\}$.

Seja $G = (V, E)$ um grafo. Um $k$**-clique** (também chamado de **clique de tamanho** $k$) 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).

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 $P$.

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.

Dado um grafo $G = (V, E)$, um **ciclo** em $G$ é um caminho formado por vértices $x_1, \cdots, x_k \in V$ onde $x_1 = x_k$.

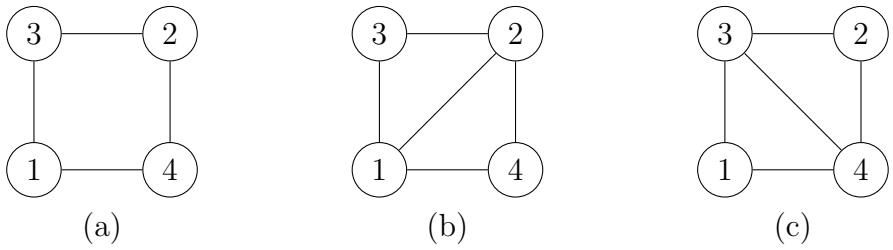



Figura 2.2: **(a)** Um grafo $G$ com um ciclo. **(b)** Um grafo cordal $G_1$ construído por meio da cordalização de $G$. **(c)** Um grafo cordal $G_2$ construído por meio da cordalização de $G$.

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.

Dizemos que um ciclo tem uma **corda** se dois vértices no ciclo são conectados por uma aresta que não está no ciclo. Um **grafo cordal** é um grafo no qual todos os ciclos com pelo menos 4 vértices têm uma corda. Qualquer grafo pode ser transformado num grafo cordal adicionando-se arestas num processo chamado de **cordalização**.

A figura 2.2 mostra um grafo e dois grafos cordais que podem ser obtidos por meio da sua cordalizaçao.

O **grafo moral** de um DAG $G = (V, E)$ é um grafo não-dirigido obtido conectando-se todo par de vértices com um filho em comum e retirando-se a direção das arestas.

Dado um grafo $G = (V, E)$, seu ***treewidth*** é um inteiro definido da seguinte forma [11]:

- 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

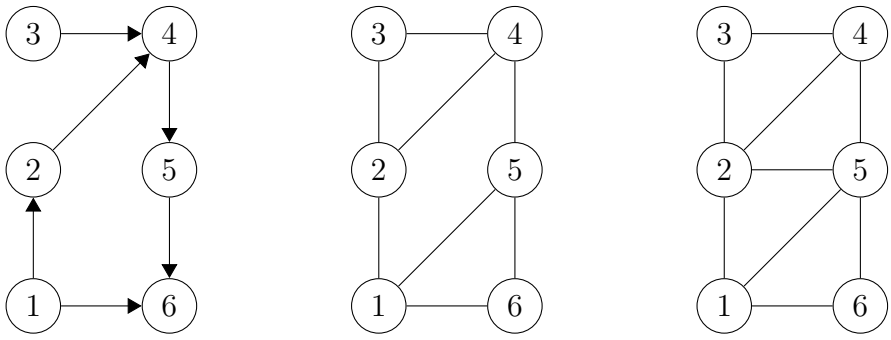



Figura 2.3: **(a)** Um grafo acíclico dirigido $G$. **(b)** Grafo moral $G'$ de $G$, obtido conectando-se todo par de vértices com um filho em comum e retirando-se a direção das arestas. **(c)** Um dos grafos cordais obtidos por meio da cordalização de $G'$. O *treewidth* dos três grafos mostrados na figura é 2.

entre os *treewidth* de todas as suas cordalizações.

- Se $G$ é um DAG, então seu *treewidth* é o *treewidth* do seu grafo moral.

A figura 2.3 mostra um grafo acíclico dirigido $G$, seu grafo moral $G'$ e uma cordalização $G''$ de $G'$. Pela definição acima, o *treewidth* de $G$, de $G'$ e de $G''$ é igual e vale 2.

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.

Dada uma árvore $T = (V, E)$, os vértices em $V$ que tem grau 1 são chamados de **folhas**.

Dada uma árvore $T = (V, E)$, às vezes é conveniente destacar um vértice $r \in V$ e chamá-lo de **raiz** da árvore $T$. Chamamos o par formado pela árvore $T$ e pela raiz $r \in V$ de **árvore enraizada**.

**Definição 1 ($k$-*tree*).** [7] Uma $k$-***tree*** é definida da seguinte forma recursiva:

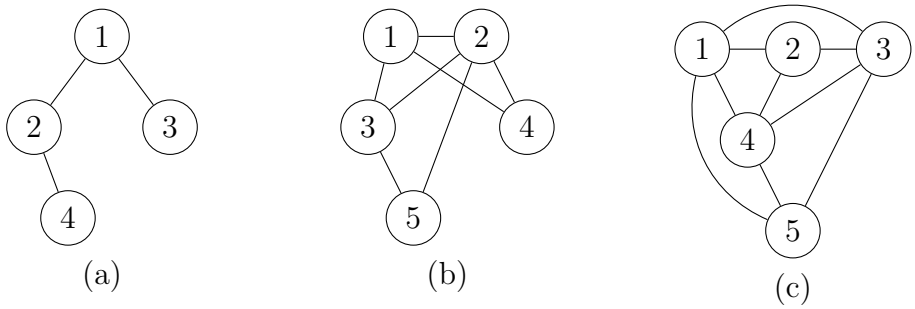



Figura 2.4: **(a)** Uma 1-*tree* (ou seja, uma árvore comum) com 4 vértices. **(b)** Uma 2-*tree* com 5 vértices. **(c)** Uma 3-*tree* com 5 vértices.

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 2.4(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 2.4(b), um exemplo de $k$-*tree* com $k = 2$ e $n = 5$ vértices rotulados com inteiros em $[1, 5]$; na figura 2.4(c), um exemplo de $k$-*tree* com $k = 3$ e $n = 5$ vértices rotulados em $[1, 5]$.

Uma ***k*-tree enraizada** [4] 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.

Na figura 2.5(a), um exemplo de uma $k$-*tree* com $k = 3$ e $n = 11$ vértices rotulados com inteiros em $[1, 11]$. Na figura 2.5(b), a mesma $k$-*tree*, dessa vez enraizada no 3-clique $R = \{2, 3, 9\}$.

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].

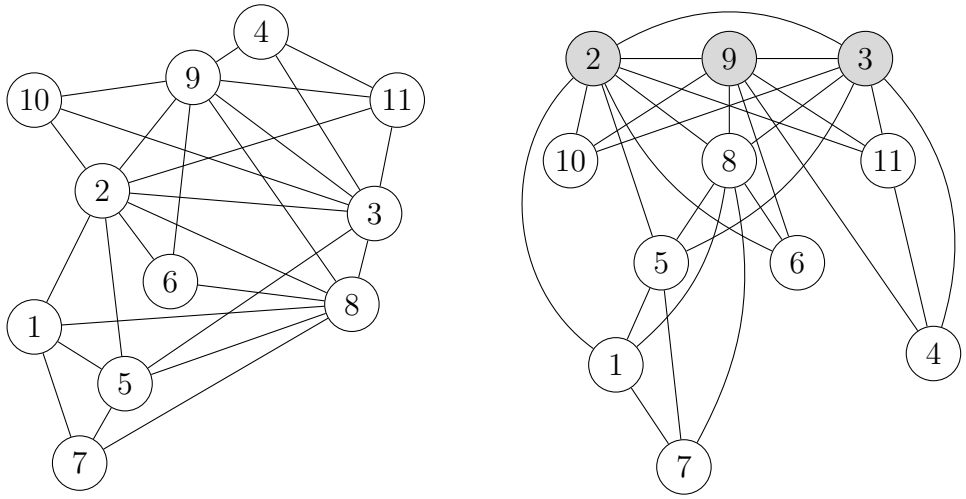



Figura 2.5: **(a)** Uma 3-*tree* $T_3$ com 11 vértices. **(b)** A mesma 3-*tree* ($T_3$) enraizada no 3-clique $\{2, 3, 9\}$.

# Capítulo 3

# Geração uniforme 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* uniformemente aleatórias para gerar $k$-*trees* uniformemente 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*

$k$-*trees* [7] 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* limitado, como destacado no capítulo 1 deste trabalho.

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 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 [12], 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 memor 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 $\{4, 4, 4, 5\}$.

Há estudos sobre a codificação de *k-trees* há pelo menos quatro décadas. Em 1970, Rényi e Renýi apresentaram uma codificação redundante (ou seja,

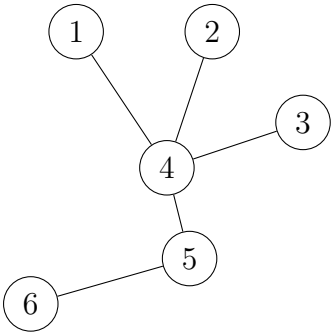



Figura 3.1: A árvore rotulada equivalente ao código de Prüfer $\{4, 4, 4, 5\}$.

não bijetiva) para um subconjunto de *k-trees* rotuladas que chamamos de *k-trees* de Rényi e que são definidas como segue:

**Definição 2 (*k-tree* de Rényi).** [13] Uma *k-tree* de Rényi $R_k$ é uma *k-tree* enraizada com $n$ vértices rotulados em $[1, n]$ e raiz $R = \{n - k + 1, n - k + 2, \cdots, n\}$.

Entretanto 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* [14], 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:

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

Caminiti *et al.* [4] mostra que a estrutura dessas *strings* que o *Dandelion Code* gera é essencial para garantir a bijetividade.

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

**Definição 3 (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 1), 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 4 (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 $v$;

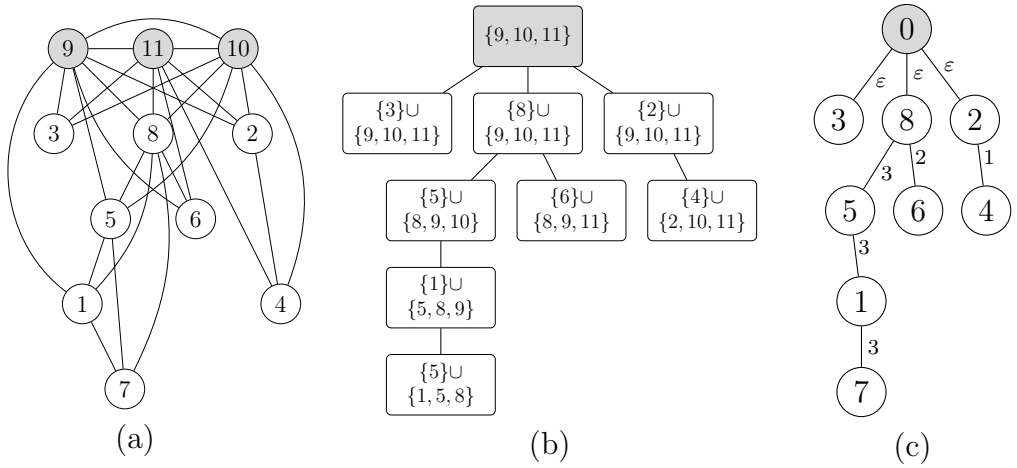



Figura 3.2: **(a)** Uma 3-*tree* de Rényi $R_3$ com 11 vértices e raiz $\{9, 10, 11\}$. **(b)** O esqueleto de $R_3$. **(c)** A árvore característica de $R_3$.

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 $\varepsilon$.

Note que a existência de um único vértice em $K' \setminus K$ é garantida pela definição 3. 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. O *Dandelion Code* generalizado correspondente a essa árvore é $[(0, \varepsilon), (2, 0), (8, 2), (8, 1), (1, 2), (5, 2)]$. A forma como codificamos e decodificamos árvores características usando esse código será vista a seguir, nos algoritmos de codificação e decodificação.

### 3.2.1 Codificação

O algoritmo para codificar uma $k$-*tree* rotulada consiste em cinco passos e tem complexidade $O(nk)$. Aqui apresentamos esse algoritmo indicando onde

cada um dos passos pode ser encontrado na nossa implementação.

ALGORITMO DE CODIFICAÇÃO

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

**Saída:** um código $(Q, S)$ 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`).

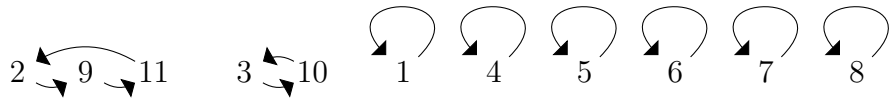



Figura 3.3: Representação gráfica da função $\phi$ computada para a 3-*tree* mostrada na figura 2.5.

*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 $\{n-k+1, n-k+2, \cdots, n\}$. 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 $q \notin Q \cup \{n-k+1, \cdots, n\}$, fazemos $\phi(q) = q$;
3. O restante dos valores são usados para fechar os ciclos de permutação, ou seja, para cada $q \in \{n-k+1, \cdots, n\} \setminus Q$, 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 2.5 com $Q = \{2, 3, 9\}$ produzindo a $k$-*tree* de Rényi mostrada na figura 3.2(a).

*Passo 3.* As definições 3 e 4 sugerem algoritmos triviais para gerar a árvore característica $T$ para a $k$-*tree* de Rényi $R_k$ obtida no passo anterior por meio do seu esqueleto (o processo visto na figura 3.2).

Para garantir tempo linear, no entanto, o artigo de Caminiti *et al.* [4] sugere evitar a construção explícita do esqueleto $S(R_k)$ e construir os conjuntos de vértices e arestas de $T$ separadamente.

Para computar o conjunto de vértices, identifica-se cliques maximais em $R_k$ através da poda sucessiva das $k$-folhas de $R_k$. Esse processo pode ser visto na função `pruneRk` do pacote `characteristic`. Para cada vértice $v$ podado, essa função guarda uma lista $K_v \subseteq Adj(v)$ dos exatamente $k$ vértices adjacentes a $v$ que ainda não foram podados.

Ao fim desse processo, que tem complexidade $O(nk)$, a *$k$-tree* de Rényi é reduzida apenas à sua raiz $R = \{n-k+1, \cdots, n\}$.

A partir das listas $K_i$ $(i \in V)$ e da ordem em que os vértices foram podados, constrói-se o conjunto das arestas num processo de complexidade $O(nk)$ detalhado no programa 7 do artigo [4] cuja implementação encontra-se na função `addEdges` do pacote `characteristic`.

Na nossa implementação, as arestas são representadas por duas listas (vetores), $p(v)$ e $l(v)$. Elas indicam para cada $v \in V(T)$, respectivamente, o pai de $v$ na árvore e o rótulo da aresta $(p(v), v)$.

*Passo 4.* A ideia do *Dandelion Code* é enraizar a árvore $T$ no vértice 0 e transformá-la para garantir a existência da aresta $(0, x)$. Por meio dessa transformação, o vetor de pais da árvore (transformada) vai conter duas informações inúteis (os pais de 0 e $x$), cuja eliminação leva a uma representação da árvore com $n-2$ rótulos.

Escolhemos $x = \phi(\bar{q})$ onde $\bar{q} = min\{v \notin Q\}$ e, enquanto $p(x) \neq 0$, fazemos sucessivas trocas $p(x) \leftrightarrow p(w)$, $l(x) \leftrightarrow l(w)$ escolhendo $w$ como o vértice de maior rótulo no caminho entre 0 e $x$.

A implementação desse processo pode ser vista na função `Code` do pacote `dandelion`.

Ao final, o código $S$ é dado por uma lista ordenada de pares $(p(v), l(v))\ \forall v \in V(T) \setminus \{0, x\}$.

*Passo 5.* Como $l_M$ foi escolhida como a folha de maior rótulo adjacente a $Q$, ela não é $\bar{q}$ (porque $\bar{q} = min\{v \notin Q\}$ e $n \geq k+2$). A prova formal desse fato pode ser encontrada no Lema 1 do artigo [4]. Além disso, $\phi(l_M)$ não estava no caminho de 0 a $x = \phi(\bar{q})$ em $T$ (porque é uma folha).

Como $l_M$ é adjacente a $Q$, $\phi(l_M)$ é adjacente a 0. Portanto $(p(\phi l_M), l(\phi l_M)) = (0, \varepsilon)$ pode ser removido da lista $S$ de forma que o tamanho do código passe a ser $n - k - 2$. Isso é crucial para o código ser bijetivo.

O algoritmo retorna o par $(Q, S)$.

### 3.2.2 Decodificação

O algoritmo para decodificar um par $(Q, S) \in \mathcal{A}_k^n$ em uma *k-tree* rotulada $T_k$ com $n$ vértices consiste numa sequência de transformações inversas às transformações usadas no algoritmo de codificação. Aqui apresentamos esse algoritmo, de complexidade $O(nk)$, indicando onde cada um dos passos pode ser encontrado na nossa implementação.

Algoritmo de decodificação
**Entrada:** um código $(Q, S)$ em $\mathcal{A}_k^n$
**Saída:** uma *k-tree* $T_k$ com $n$ vértices

1. Computar $\phi$, $\bar{q}$, $x$ e $l_M$ (definidos como no algoritmo de codificação);
2. Inserir o par $(0, \varepsilon)$ correspondente a $l_M$ em $S$ e decodificar $S$ para obter a árvore característica $T$;
3. Reconstruir a *k-tree* de Rényi $R_k$ a partir de $T$;
4. Aplicar $\phi^{-1}$ a $R_k$ para obter $T_k$.

O algoritmo de decodificação é implementado pela função `DecodingAlgorithm` do pacote `codec`. A seguir, detalhamos os quatro passos.

*Passo 1.* Para computar $\phi$, $\bar{q}$, $x$ e $l_M$, os procedimentos são exatamente os mesmos usados no algoritmo de codificação.

*Passo 2.* Como já computamos $\phi$ e $l_M$ no passo anterior, inserimos o par $(0, \varepsilon)$ na posição $\phi(l_M)$ do vetor $S$.

O procedimento para decodificar o *Dandelion Code* numa árvore característica, implementado na função `Decode` do pacote `dandelion`, consiste em:

1. Construir o grafo a partir do código $S$, gerando vetores $p$ (de pais) e $l$ (de rótulos das arestas $(p(v), v)$);

2. Identificar todos os ciclos do grafo e guardar num vetor $m$, para cada ciclo, o vértice com maior rótulo;

3. Ordenar o vetor $m$ em ordem crescente e iterar nele fazendo trocas $p(x) \leftrightarrow p(m_i)$, $l(x) \leftrightarrow l(m_i)$ (para $i = 1, \cdots, |m|$).

A árvore característica $T$ é dada pelo par $(p, l)$ resultante desse processo.

*Passo 3.* A reconstrução da *k-tree* de Rényi $R_k$ a partir de $T$ foi implementada na função `RenyiKtreeFrom` do pacote `characteristic`.

O processo consiste em inicializar $R_k$ com o $k$-clique $\{n-k+1, \cdots, n\}$ e percorrer $T$ na ordem da busca em largura (a partir dos filhos do vértice de rótulo 0) para inserir vértices em $R_k$.

O programa 8 do artigo de Caminiti *et al.* [4] detalha esse passo.

*Passo 4.* Para transformar a *k-tree* de Rényi $R_k$ na *k-tree* rotulada $T_k$, basta aplicar o inverso da permutação $\phi$. Esse processo foi implementado na função `TkFrom` do pacote `ktree`.

## 3.3 Geração uniforme

Como comentamos no início deste capítulo, se temos uma codificação bijetiva que associa *k-trees* a *strings*, basta gerar *strings* aleatórias para gerar *k-trees* aleatórias.

Para gerar *k-trees* aleatórias de forma uniforme, usamos o código de Caminiti *et al.* [4] e o algoritmo linear para decodificar uma *string* em uma *k-tree* rotulada que apresentamos na seção 3.2.

As *strings* que estamos interessados em gerar são elementos do conjunto:

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

A função que implementamos para gerar tais *strings* é `randomCode`, que recebe `n` e `k` como parâmetros e pertence ao pacote `generator`.

Primeiramente, ela sorteia $Q$ em $\binom{[1,n]}{k}$ (e inicializa um *Dandelion Code* vazio):

```
1  C := &codec.Code{
2    rand.Perm(n)[:k],
3    &dandelion.DandelionCode{
4      make([]int, n-k-2),
5      make([]int, n-k-2),
6    },
7  }
8
9  sort.Ints(C.Q)
```

Depois, ela gera $S$ sorteando $n-k-2$ pares em $\{(0,\varepsilon)\} \cup ([1,n-k] \times [1,k])$. Para gerar um par nesse intervalo de forma uniforme, gera-se um inteiro $r$ no intervalo $[0,(n-k)k+1)$. Se $r=0$, então o par é $(0,\varepsilon)$. Caso contrário, o par é dado por $\left(1+\frac{r-1}{k}, (r-1) \mod k\right)$:

```
1  for i := 0; i < n-k-2; i++ {
2    r := rand.Intn((n-k)*k + 1)
3    if r == 0 {
4      C.S.P[i] = 0
5      C.S.L[i] = characteristic.E
6    } else {
7      r--
8      C.S.P[i] = 1 + r/k
9      C.S.L[i] = r % k
10   }
11 }
```

Decodificamos o código usando o algoritmo de decodificação apresentado na seção 3.2 para transformar essa string $(Q, S) \in \mathcal{A}_k^n$ em uma *k-tree* rotulada.

## 3.4 Utilitários

Para exemplificar como se usa a biblioteca desenvolvida nas seções anteriores, foram desenvolvidos três utilitários que se encontram no pacote `examples`: `code-ktree`, `decode-ktree` e `generate-ktree`.

Eles permitem codificar/decodificar *k-trees* e gerar *k-trees* aleatórias.

### 3.4.1 code-ktree

O utilitário `code-ktree` serve para codificar *k-trees* usando o algoritmo da subseção 3.2.1. Sua entrada deve ser dada no formato[1]:

```
1 n k
2 m
3 x_1 y_1
```

[1] A leitura da entrada despreza espaços e quebras de linha.

```
4 ...
5 x_m y_m
```

Onde:

- `n` é o número de vértices;
- `k` é o parâmetro $k$ da *k-tree*;
- `m` é o número de arestas;
- `x_i y_i` corresponde à $i$-ésima aresta ($0 \leq$ `x_i, y_i` $< n$).

Um exemplo de entrada equivalente à *k-tree* da figura 2.5(a) é:

```
1  11 3
2  27
3  0 1 0 4 0 6 0 7
4  1 2 1 4 1 5 1 7 1 8 1 9 1 10
5  2 3 2 4 2 7 2 8 2 9 2 10
6  3 8 3 10 4 6
7  4 7
8  5 7 5 8
9  6 7
10 7 8
11 8 9 8 10
```

A saída desse utilitário é um par $(Q, S)$ no formato de entrada esperado pelo utilitário `decode-ktree`, que será descrito a seguir.

### 3.4.2 decode-ktree

O utilitário `decode-ktree` serve para decodificar um código $(Q, S)$ numa *k-tree* usando o algoritmo da subseção 3.2.2. Sua entrada deve ser dada no formato:

```
1 k
2 Q_1
3 ...
4 Q_k
5 s
6 p_1 l_1
7 ...
8 p_s l_s
```

Onde:

- `k` é o tamanho de $Q$;
- `Q_i` corresponde ao $i$-ésimo valor em $Q$;
- `s` é o tamanho do *Generalized Dandelion Code*, $|S|$;
- `p_i l_i` corresponde ao $i$-ésimo valor em $S$.

Um exemplo de entrada equivalente ao código gerado pela *k-tree* da figura 2.5(a) é:

```
1 3
2 1 2 8
3 6
4 0 -1
5 2 0
6 8 2
7 8 1
8 1 2
9 5 2
```

A saída desse utilitário é uma *k-tree* no formato de entrada esperado pelo utilitário `code-ktree`.

### 3.4.3 generate-ktree

O utilitário `generate-ktree` serve para gerar uma *k-tree* aleatória usando o algoritmo desenvolvido na seção 3.3.

Sua entrada deve ser dada no formato:

```
n k
```

Sua saída é uma *k-tree* com $n$ vértices no formato de entrada esperado pelo utilitário `code-ktree`.

## 3.5 Testes, experimentos e resultados

### 3.5.1 Testes unitários e cobertura

Como escrevemos na introdução deste trabalho, um dos motivos pelos quais escolhemos a linguagem *Go* para a implementação foi a facilidade para escrever testes.

Todos os pacotes desenvolvidos neste trabalho possuem testes unitários que podem ser executados usando o utilitário `go test`:

```
$ go get github.com/tmadeira/tcc/...
$ go test -v github.com/tmadeira/tcc/...
=== RUN   TestTreeFrom
--- PASS: TestTreeFrom (0.00s)
=== RUN   TestRenyiKtreeFrom
--- PASS: TestRenyiKtreeFrom (0.00s)
PASS
ok    github.com/tmadeira/tcc/characteristic  0.002s
=== RUN   TestCodingAlgorithm
--- PASS: TestCodingAlgorithm (0.00s)
=== RUN   TestDecodingAlgorithm
--- PASS: TestDecodingAlgorithm (0.00s)
```

```
13 PASS
14 ok    github.com/tmadeira/tcc/codec 0.017s
15 === RUN   TestCodeFig2C
16 --- PASS: TestCodeFig2C (0.00s)
17 === RUN   TestDecodeFig2C
18 --- PASS: TestDecodeFig2C (0.00s)
19 === RUN   TestDecodeFig3
20 --- PASS: TestDecodeFig3 (0.00s)
21 PASS
22 ok    github.com/tmadeira/tcc/dandelion 0.002s
23 === RUN   TestRandomKtree
24 --- PASS: TestRandomKtree (0.03s)
25 PASS
26 ok    github.com/tmadeira/tcc/generator 0.029s
27 === RUN   TestGetQ
28 --- PASS: TestGetQ (0.00s)
29 === RUN   TestComputePhi
30 --- PASS: TestComputePhi (0.00s)
31 === RUN   TestRelabel
32 --- PASS: TestRelabel (0.00s)
33 === RUN   TestRkFrom
34 --- PASS: TestRkFrom (0.00s)
35 === RUN   TestTkFrom
36 --- PASS: TestTkFrom (0.00s)
37 PASS
38 ok    github.com/tmadeira/tcc/ktree 0.002s
```

Com efeito, 96% das linhas do código são cobertas por testes, como mostra o relatório da ferramenta *Coveralls*[2].

[2]Esse relatório pode ser visto em: `https://coveralls.io/github/tmadeira/tcc?branch=master`

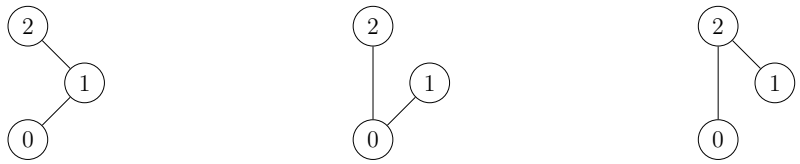



Figura 3.4: Representação das três 1-*trees* rotuladas distintas com $n = 3$ vértices.

### 3.5.2 Experimentos e resultados

#### Corretude e uniformidade

Para mostrar que nossa implementação gera $k$-*trees* aleatórias corretamente e uniformemente, realizamos dezenas de milhares de testes com $n$ e $k$ pequenos.

Escrevemos um pequeno *script* em Bash para nos auxiliar nesse experimento. Ele usa o utilitário `generate-ktree` para gerar 10000 $k$-*trees* com parâmetros $(n, k)$ constantes e imprime quantas vezes cada $k$-*tree* diferente foi gerada:

```
1 i=0
2 while [ $i -lt 10000 ]; do
3   echo $N $K | generate-ktree | xargs echo
4   i=$((i+1))
5 done | sort | uniq -c
```

Com $n = 3$ e $k = 1$, existem 3 $k$-*trees* rotuladas distintas, como mostra a figura 3.4.

Ao executar o *script* com `N=3 K=1` esperamos portanto que as três 1-*trees* apareçam com uma frequência similar. O resultado que obtivemos foi:

```
1 3320 3 1 2 0 1 0 2
2 3345 3 1 2 0 1 1 2
3 3335 3 1 2 0 2 1 2
```

O primeiro inteiro que aparece em cada linha é a quantidade de vezes que a $k$-*tree* apareceu e o restante é a $k$-*tree* gerada no formato de saída do

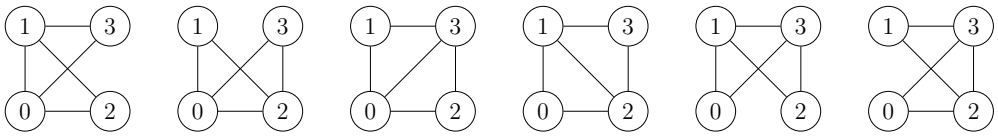



Figura 3.5: Representação das seis 2-*trees* rotuladas distintas com $n = 4$ vértices.

utilitário `generate-ktree` (sem quebras de linha).

Como a frequência de cada uma das 3 $k$-*trees* com $n = 3$ e $k = 1$ está similar, o experimento mostra que o algoritmo gera $k$-*trees* aleatórias de forma uniforme.

Testes com outros pares $(n, k)$ também mostram frequências similares, comprovando a uniformidade. Por exemplo, existem 6 2-*trees* com $n = 4$ vértices, como pode-se ver na figura 3.5. Rodando o *script* com `N=4 K=2` obtivemos:

```
1 1703 4 2 5 0 1 0 2 0 3 1 2 1 3
2 1627 4 2 5 0 1 0 2 0 3 1 2 2 3
3 1573 4 2 5 0 1 0 2 0 3 1 3 2 3
4 1709 4 2 5 0 1 0 2 1 2 1 3 2 3
5 1717 4 2 5 0 1 0 3 1 2 1 3 2 3
6 1671 4 2 5 0 2 0 3 1 2 1 3 2 3
```

E com `N=5 K=3` obtivemos:

```
1   970 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4
2  1023 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 3 4
3  1009 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 4 3 4
4  1014 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 2 3 2 4 3 4
5   994 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 4 2 3 2 4 3 4
6  1019 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
7  1008 5 3 9 0 1 0 2 0 3 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
8  1000 5 3 9 0 1 0 2 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
9   978 5 3 9 0 1 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
10  985 5 3 9 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
```

# Capítulo 4

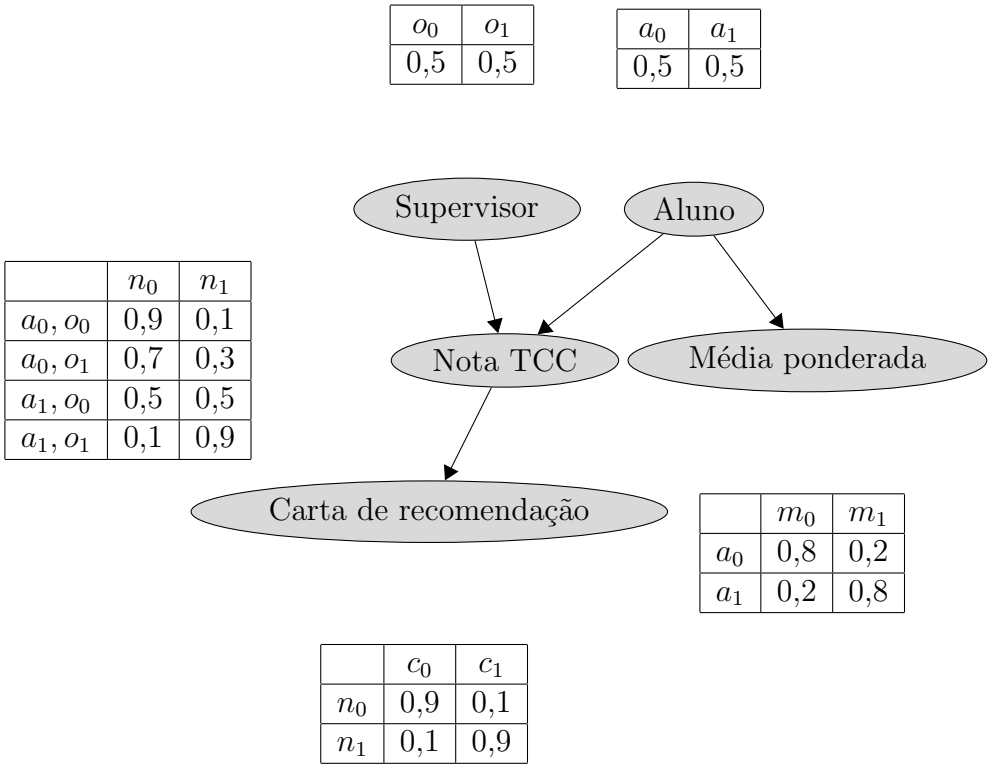
# Aprendizado de redes bayesianas

Neste capítulo apresentamos o problema de aprender redes bayesianas e descrevemos um método desenvolvido por Nie *et al.* [11] para resolvê-lo que é baseado na amostragem de *k-trees*. Mostramos como a geração uniforme de *k-trees* desenvolvida no capítulo 3 foi utilizada nesse processo e comparamos os resultados obtidos com os resultados de outros trabalhos.

## 4.1 Motivação

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

Formalmente [11], 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 $(X, G, \theta)$, onde $G = (V, E)$ é um DAG (que chamamos de **estrutura** da rede bayesiana) cujos vértices correspondem a




| $o_0$ | $o_1$ |
|---|---|
| 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 4.1: Exemplo de rede bayesiana com distribuições de probabilidade condicional.

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 $x_{\pi_i}$ para os pais $\pi_i$ de $X_i$ (em $G$).

Um exemplo de rede bayesiana é mostrado na figura 4.1. As arestas codificam nossa intuição sobre a forma como o mundo funciona: as performances do aluno e do supervisor são determinadas independentemente; a nota do TCC (trabalho de conclusão de curso) depende desses dois fatores; a média ponderada do aluno depende apenas da sua performance no curso; a carta de recomendação escrita pelo supervisor sobre o aluno depende da nota do TCC.

Redes bayesianas são geralmente usadas para fazer inferências como computar a probabilidade de alguma variável depois que alguma evidência é observada. Por exemplo, uma rede bayesiana pode representar as relações de probabilidade entre doenças e sintomas. Observados alguns sintomas, a rede pode ser usada para computar a probabilidade da presença das doenças.

Para dar um exemplo mais concreto, com a rede bayesiana mostrada na figura 4.1 pode-se modificar a crença sobre a performance do aluno ou do supervisor com base na nota do TCC.

Aprender uma rede bayesiana se refere ao processo de inferir a estrutura (ou seja, o DAG) dela a partir de dados. Como mostra Chickering [6], este é um problema NP-completo.

O aprendizado de redes bayesianas costuma servir para realizar inferências em situações com incerteza. O artigo de Nie *et al.* [11] mostra que tais inferências são NP-difíceis até mesmo aproximadamente e todos os algoritmos conhecidos (exatos e comprovadamente bons) têm uma complexidade de pior caso exponencial no *treewidth*.

Além disso, resultados empíricos sugerem que limitar o *treewidth* pode melhorar a performance dos modelos e há evidências de que limitar a *treewidth* da estrutura de uma rede bayesiana não causa perdas significativas na expressividade do modelo para conjuntos de dados reais (também visto em [11]).

Por isso, estamos interessados em fixar $k$ e aprender redes bayesianas cuja estrutura tem *treewidth* limitado a $k$.

A fim de identificar o "melhor" DAG para um determinado conjunto de dados, vamos supôr que há uma função de *score* $s(G)$ que atribui uma

pontuação para cada DAG $G$ em tempo constante. Segundo [10], as funções de *score* costumam poder ser escritas como a soma de funções de *score* locais, ou seja,

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

Para cada variável, sua pontuação só depende do seu conjunto de pais. Ou seja, 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 maiores que $k$.

Mesmo esse problema é NP-difícil, como mostram Korhonen e Parviainen [9]. Entretanto, o artigo [11] mostra um método aproximado para aprender redes bayesianas com *treewidth* limitado que é baseado em amostrar *k-trees* e encontrar DAGs cujo grafo moral é um subgrafo dessas *k-trees*.

Tal método funciona com domínios grandes e *treewidth* alto. No artigo é mostrado empiricamente que ele tem um desempenho muito bom numa coleção de conjuntos de dados públicos.

## 4.2 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 $\sigma$ dos vértices e fazer com que o DAG $G$ seja consistente com ela e com $T_k$.

Como explica [11], *"$\sigma$ restringe as ordenações topológicas válidas para os vértices de $G$"* (de forma que garante que ele não tenha ciclos). Por outro lado, fazer com que $G$ seja subgrafo de $T_k$ garante que seu *treewidth* não

exceda $k$.

A continuar.

Algoritmo para aprender estrutura

**Entrada:** número de variáveis $n$, a *treewidth* desejada $k$ e uma função de *score* $s_i$ para cada $i \in [0, n)$

**Saída:** um DAG $G^{\text{melhor}}$

1. Inicializar $G^{\text{melhor}}$ como um grafo vazio com $s(G^{\text{melhor}}) = -\infty$.
2. Repetir até atingir um determinado número de iterações:
   (a) Gerar $(Q, S) \in \mathcal{A}_k^n$ conforme seção 3.3;
   (b) Decodificar $(Q, S)$ na árvore característica $T$ usando o algoritmo da subseção 3.2.2;
   (c) *TODO: Descrever processo para construir DAG G consistente com T*
   (d) Se $\left(\sum_{i\in[0,n)} s_i(\pi_i^G)\right) = s(G) > s(G^{\text{melhor}})$, atualiza $G^{\text{melhor}} = G$.

A continuar.

## 4.3 Experimentos e resultados

O algoritmo descrito na seção 4.2 foi implementado por João de Santana Brito Junior[1] e seu código, que usa o código para gerar *k-trees* que foi desenvolvido no capítulo 3, está disponível em `https://github.com/britojr/bn`.

A continuar.

[1] E-mail: joaojr@ime.usp.br

# Capítulo 5

# Conclusão

O principal produto deste trabalho de conclusão de curso é a biblioteca implementada em *Go* para codificação e geração uniforme de *k-trees* em tempo linear desenvolvida no capítulo 3. Os experimentos realizados no capítulo 4 mostram como essa biblioteca pode ser usada na prática no aprendizado da estrutura de redes bayesianas com *treewidth* limitado a partir da amostragem de *k-trees*. O método usado é eficiente e funciona com grandes domínios e limite alto de *treewidth*.

Aprendizagem computacional é uma área muito contemporânea e fértil, cuja aplicação é cada vez mais difundida. Muitos dos conceitos estudados aqui são recentes e ainda pouco explorados. De fato, os dois principais artigos usados para embasar a codificação de *k-trees* (Caminiti *et al.*, [4]) e o aprendizado de redes bayesianas por meio da amostragem de *k-trees* (Nie *et al.*, [11]) são de 2010 e 2014, respectivamente. O segundo ressalta, na sua conclusão, que simultaneamente ao seu desenvolvimento foram publicados independentemente outros trabalhos intimamente relacionados.

Se por um lado o artigo [11] diz que *"amostragem uniforme é uma propriedade desejada, já que garante uma boa cobertura do espaço e é superior*

*a outras opções se não há informação prévia sobre o espaço de busca"*, há outras amostragens que podem ser testadas em trabalhos futuros.

Com efeito, o artigo [10], de 2015, diz que *"amostragem uniforme gera cada amostra independentemente e ignora totalmente amostras anteriores, o que faz com que seja possível que ela gere exatamente a mesma amostra duas vezes, ou ao menos amostras que são muito parecidas uma com a outra"*. Ele define e sugere que se use uma *Distance Preferable Sampling* que descarte amostras que sejam muito parecidas às geradas anteriormente durante o processo de geração.

A linguagem escolhida para fazer as implementações, *Go*, se mostrou bastante satisfatória. Embora nova, ela é bastante madura e acreditamos que suas convenções (destacadas no capítulo 1) facilitem o reaproveitamento futuro de código.

# 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] David Maxwell Chickering. *Learning Bayesian Networks is NP-Complete*, pages 121–130. Springer New York, New York, NY, 1996.

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

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

[9] Janne H. Korhonen and Pekka Parviainen. Exact learning of bounded tree-width bayesian networks. In *Proceedings of the Sixteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, AISTATS 2013, Scottsdale, AZ, USA, April 29 - May 1, 2013*, volume 31 of *JMLR Workshop and Conference Proceedings*, pages 370–378. JMLR.org, 2013.

[10] Siqi Nie, Cassio P. de Campos, and Qiang Ji. *Learning Bounded Tree-Width Bayesian Networks via Sampling*, pages 387–396. Springer International Publishing, Cham, 2015.

[11] Siqi Nie, Denis Deratani Mauá, Cassio Polpo de Campos, and Qiang Ji. Advances in learning bayesian networks of bounded treewidth. *CoRR*, abs/1406.1411, 2014.

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

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

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