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

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.

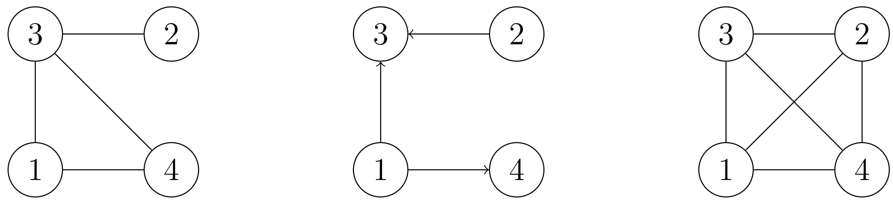
Outras definições mais específicas, como as utilizadas para construir o algoritmo para codificar e decodificar k-*trees* estão localizadas nos capítulos subsequentes.

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



(a) (b) (c)

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[1]. 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.

[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 $u = v$.

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.

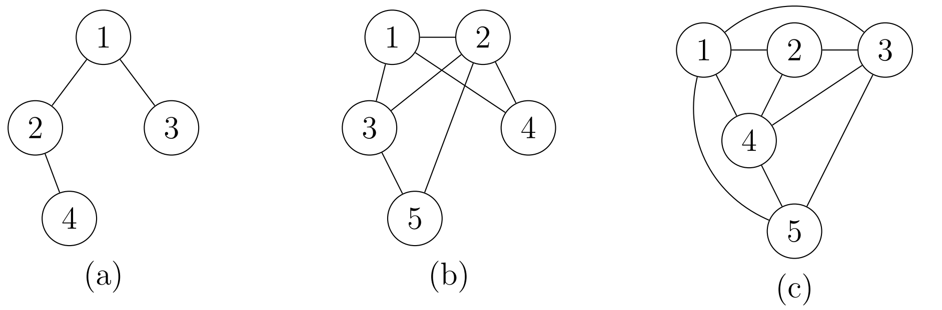


Figura 2.2: **(a)** Uma 1-*tree* (ou seja, uma árvore comum) com 4 vértices. **(b)** Uma 2-*tree* com 5 vértices. **(c)** Uma 3-*tree* com 5 vértices.

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).

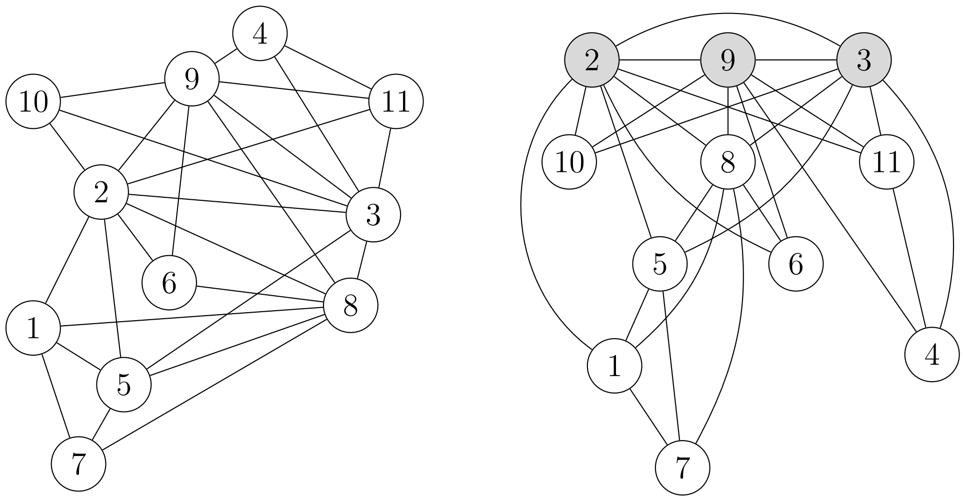
2.1.1 k-*trees*

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 $R = \{r_1, r_2, \cdots, r_k\}$ que é chamado de *raiz* da k-*tree* enraizada.



(a) (b)

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

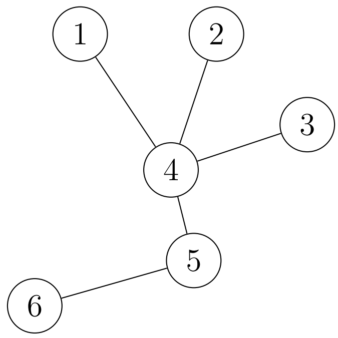


Figura 3.1: A árvore rotulada equivalente ao código de Prüfer $\{4, 4, 4, 5\}$.

> 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 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 $\{4, 4, 4, 5\}$.

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 Renýi 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 $R = \{n - k + 1, n - k + 2, \cdots, n\}$.

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:

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

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:

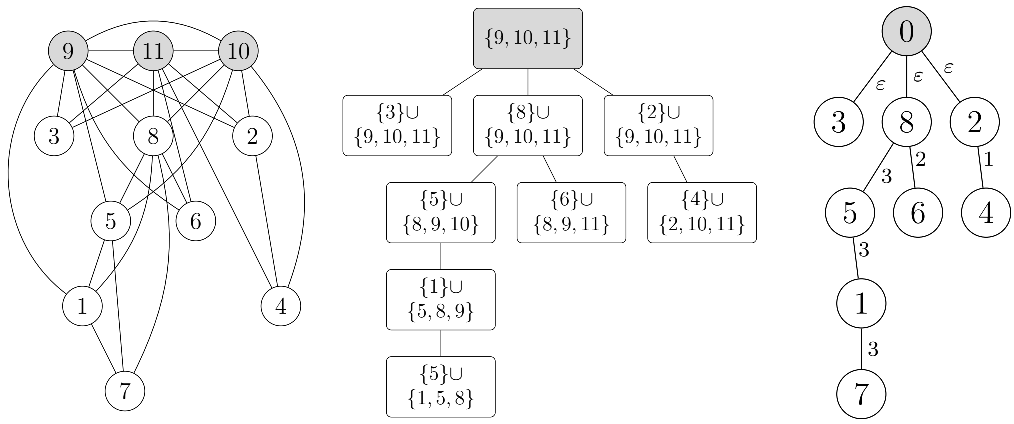
Definição 16 (esqueleto de uma k-*tree* enraizada). [4] O esqueleto de uma k-*tree* enraizada T_k com raiz R, denotado por $S(T_k, R)$, é definido da seguinte forma recursiva:

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;



(a) (b) (c)

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 ε.

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. 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 ϕ (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`.

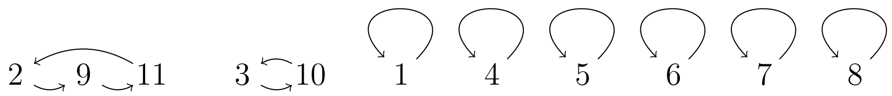


Figura 3.3: Representação gráfica da função ϕ computada para a 3-*tree* mostrada na figura 2.3.

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 ϕ, 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 ϕ 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 ϕ 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. As definições 16 e 17 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 ϕ, $\bar{q}$, 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 ϕ^{-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 ϕ, $\bar{q}$, x e l_M, os procedimentos são exatamente os mesmos usados no algoritmo de codificação.

Passo 2. Como já computamos ϕ 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 ϕ. 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):

```
C := &codec.Code{
  rand.Perm(n)[:k],
  &dandelion.DandelionCode{
    make([]int, n-k-2),
    make([]int, n-k-2),
  },
}

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 $\left(1+\frac{r-1}{k}, (r-1) \mod k\right)$:

```
for i := 0; i < n-k-2; i++ {
  r := rand.Intn((n-k)*k + 1)
  if r == 0 {
    C.S.P[i] = 0
    C.S.L[i] = characteristic.E
  } else {
    r--
    C.S.P[i] = 1 + r/k
    C.S.L[i] = r % k
  }
}
```

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]:

```
n k
m
x_1 y_1
```

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

```
...
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 2.3(a) é:

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

```
k
Q_1
...
Q_k
s
p_1 l_1
...
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 2.3(a) é:

```
3
1 2 8
6
0 -1
2 0
8 2
8 1
1 2
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)
```

```
PASS
ok    github.com/tmadeira/tcc/codec 0.017s
=== RUN   TestCodeFig2C
--- PASS: TestCodeFig2C (0.00s)
=== RUN   TestDecodeFig2C
--- PASS: TestDecodeFig2C (0.00s)
=== RUN   TestDecodeFig3
--- PASS: TestDecodeFig3 (0.00s)
PASS
ok    github.com/tmadeira/tcc/dandelion 0.002s
=== RUN   TestRandomKtree
--- PASS: TestRandomKtree (0.03s)
PASS
ok    github.com/tmadeira/tcc/generator 0.029s
=== RUN   TestGetQ
--- PASS: TestGetQ (0.00s)
=== RUN   TestComputePhi
--- PASS: TestComputePhi (0.00s)
=== RUN   TestRelabel
--- PASS: TestRelabel (0.00s)
=== RUN   TestRkFrom
--- PASS: TestRkFrom (0.00s)
=== RUN   TestTkFrom
--- PASS: TestTkFrom (0.00s)
PASS
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

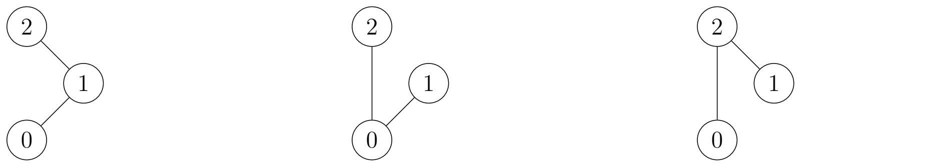


Figura 3.4: Representação das três 1-*trees* rotuladas distintas com $n = 3$ vértices.

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:

```
i=0
while [ $i -lt 10000 ]; do
  echo $N $K | generate-ktree | xargs echo
  i=$((i+1))
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:

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

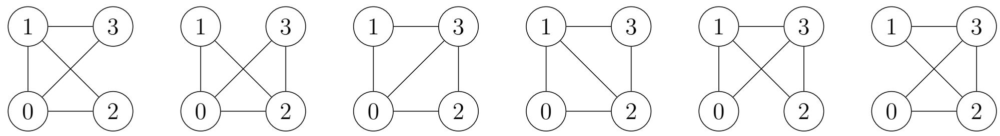


Figura 3.5: Representação das seis 2-*trees* rotuladas distintas com $n = 4$ vértices.

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:

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

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

```
 970 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4
1023 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 3 4
1009 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 4 3 4
1014 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 3 2 3 2 4 3 4
 994 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 2 1 4 2 3 2 4 3 4
1019 5 3 9 0 1 0 2 0 3 0 4 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
1008 5 3 9 0 1 0 2 0 3 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
1000 5 3 9 0 1 0 2 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
 978 5 3 9 0 1 0 3 0 4 1 2 1 3 1 4 2 3 2 4 3 4
 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

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.