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 alguns **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] ARNBORG S., PROSKUROWSKI A. 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** tratáveis, que consiste em escolher um DAG G que maximize uma função de *score* $s(G)$ sujeito à restrição $\text{treewidth}(G) \leq k$ dados s e k.

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 deste método** para aprender redes bayesianas com o estado da arte.

[2] CAMINITI S., FUSCO E. G., PETRESCHI R. Bijective linear time coding and decoding for k-trees. *Theory of Computing Systems*, 46:284–300, 2010.

[3] NIE S., MAUÁ D. D., CAMPOS C. P., JI Q. 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*.

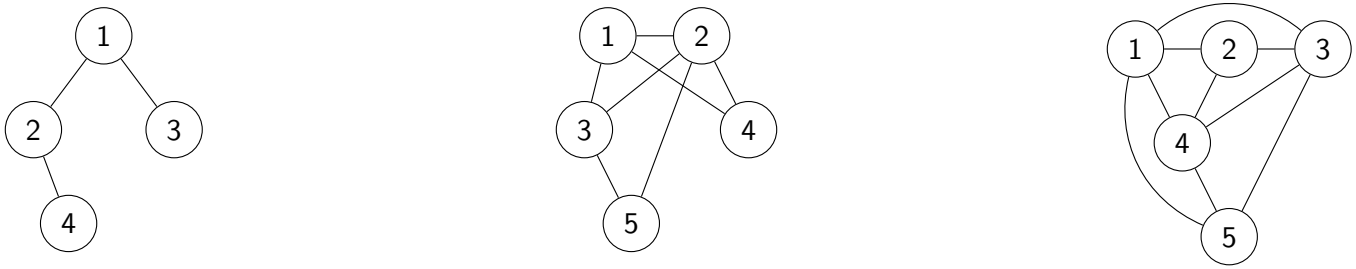
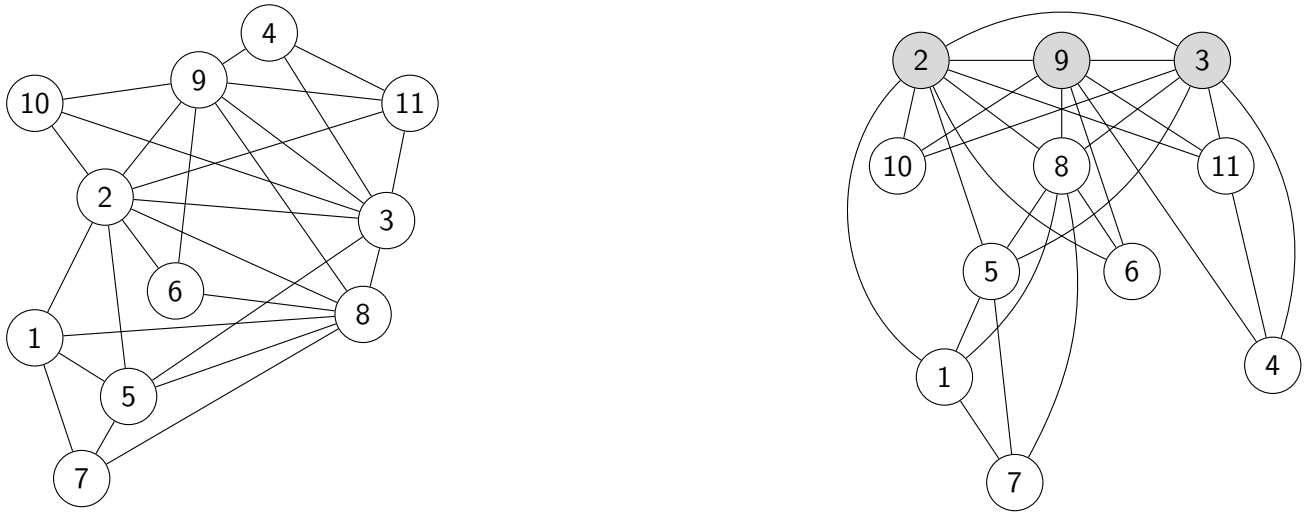


Figura: **(a)** Uma 1-*tree* (ou seja, uma árvore comum) com 4 vértices. **(b)** Uma 2-*tree* com 5 vértices. **(c)** Uma 3-*tree* com 5 vértices.

[4] HARARY F., PALMER E. M. 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 $\{2, 3, 9\}$.

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[5] 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[6].
- Em 1970, Rényi e Rényi apresentaram uma codificação redundante (ou seja, não bijetiva) para um subconjunto de *k-trees* rotuladas que chamamos de *k-trees* de Rényi[7].
  Definição: Uma *k*-**tree de Rényi** R_k é uma *k-tree* enraizada com n vértices rotulados em $[1, n]$ e raiz $\{n-k+1, \cdots, n\}$.

[5] CAYLEY, A. A theorem on trees. *Quart J. Math*, 23:376–378, 1889.

[6] PRÜFER, H. Neuer beweis eines satzes über permutationen. *Archiv der Mat. und Physik*, 27:142–144, 1918.

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

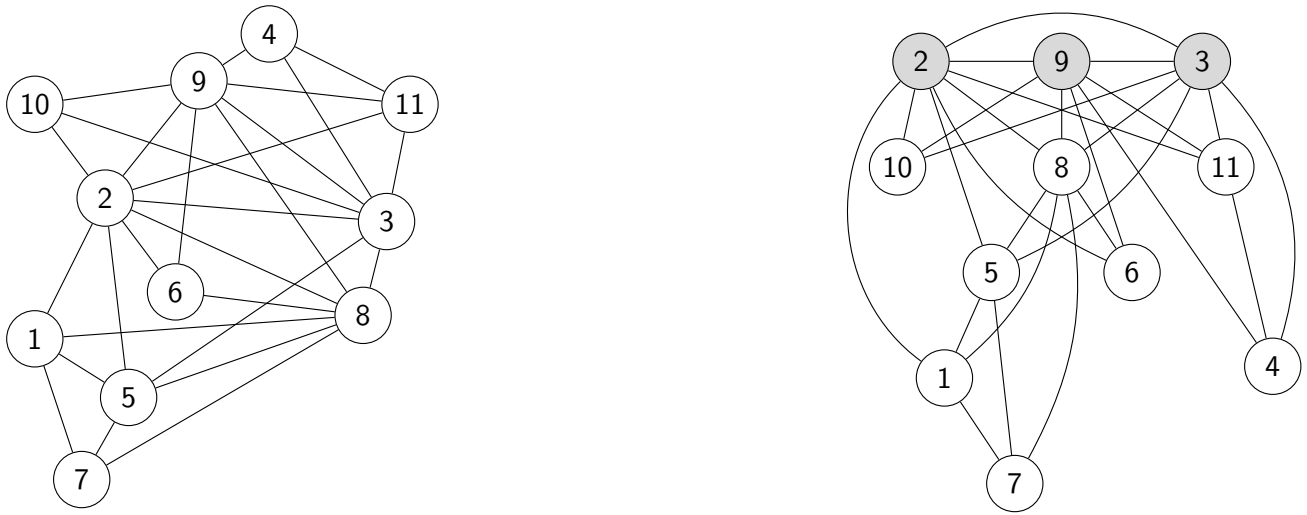
A solução de Caminiti *et al.*

- 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*[8]. A codificação das *k-trees* associa elementos em $\mathcal{T}_k^n$ (conjunto das *k-trees* com n vértices) com elementos em:

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

[8] EĞECIOĞLU Ö., REMMEL J. B. Bijections for cayley trees, spanning trees, and their q-analogues. *Journal of Combinatorial Theory*, 42:15–30, 1986.

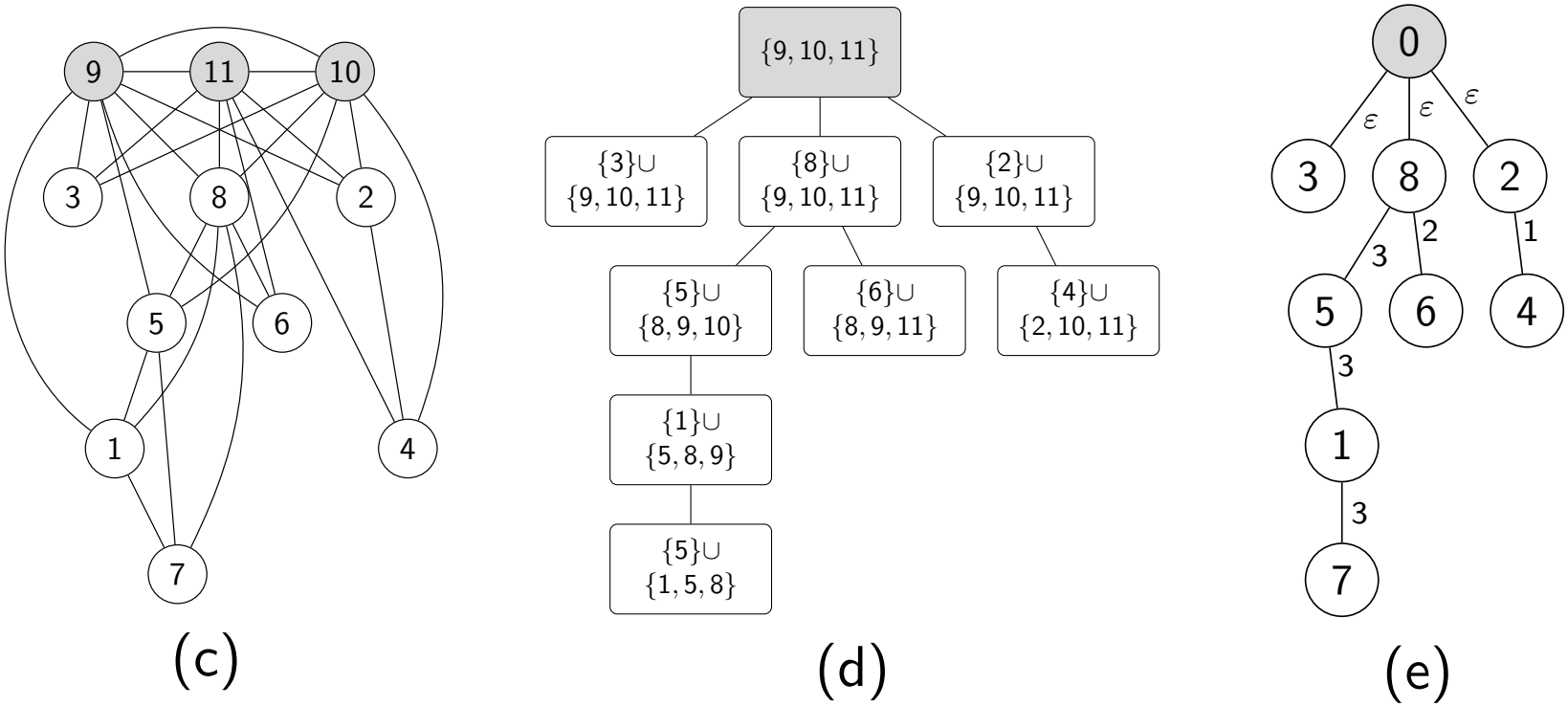
Transformações de Caminiti *et al.* (1/3)



(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)



(c) (d) (e)

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[9] 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)

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

Testes (1/2)

- 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**[10].
- Para mostrar que nossa implementação gera *k-trees* aleatórias **corretamente e uniformemente**, realizamos dezenas de milhares de testes com n e k pequenos.

[10] O relatório de cobertura da ferramenta *Coveralls* pode ser visto em: `https://coveralls.io/github/tmadeira/tcc?branch=master`

Testes (2/2)

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

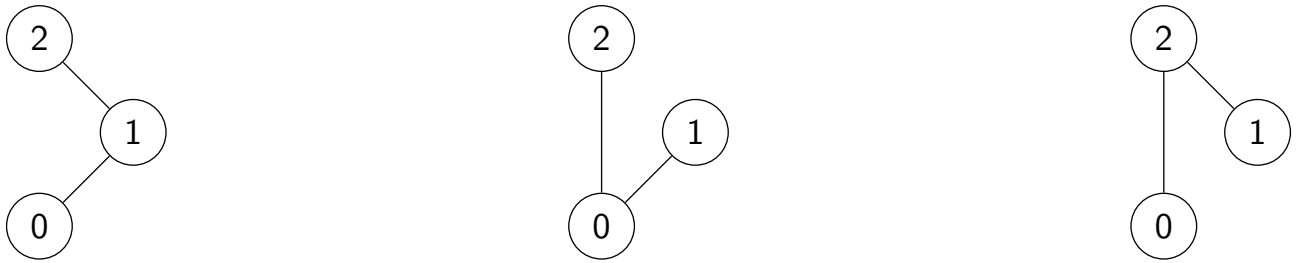


Figura: Representação das três 1-*trees* rotuladas distintas com $n = 3$ vértices.

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

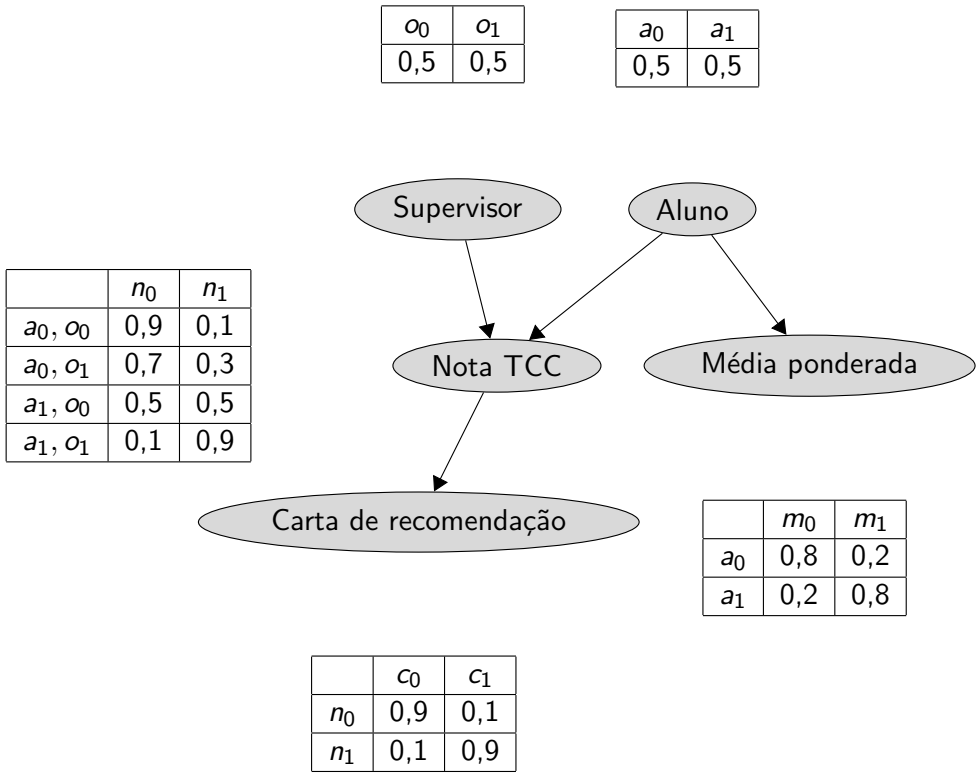
O que são redes bayesianas?

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] KOLLER D., FRIEDMAN N. *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.

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[12].

[12] BODLAENDER, H. L. Treewidth: Structure and algorithms. *Structural Information and Communication Complexity*, 4474:11–25, 2007.

Ilustração de *treewidth*

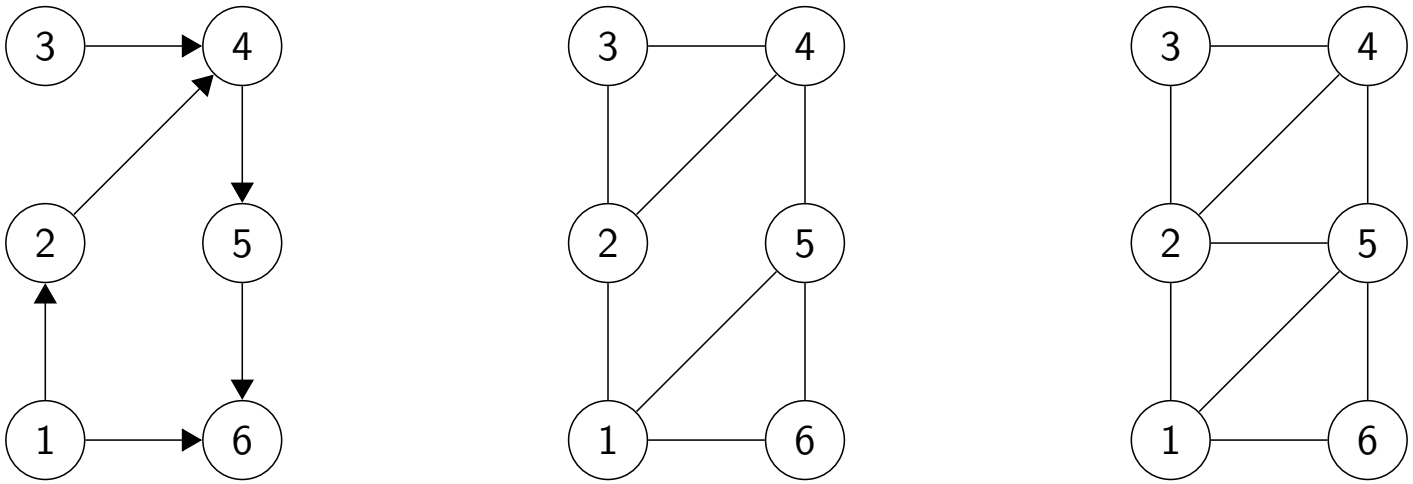


Figura: **(a)** Um grafo acíclico dirigido G. **(b)** Grafo moral G' de G, obtido conectando-se todo par de vértices com um filho em comum e retirando-se a direção das arestas. **(c)** Um dos grafos cordais obtidos por meio da cordalização de G'. O *treewidth* dos três grafos mostrados na figura é 2.

Aprendizado de redes bayesianas (1/2)

- Aprender uma rede bayesiana se refere ao processo de **produzir 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 (2/2)

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

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

onde $\mathcal{G}_{n,k}$ é o conjunto de todos os DAGs de *treewidth* não maior que k. Esse problema é NP-difícil[13].

[13] KORHONEN J. H., PARVIAINEN P. 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 uniformemente uma *k-tree* T_k
   2. Encontrar um DAG G cuja moralização é T_k e maximize $s(G)$
   3. Se $\left(\sum_{i \in [0,n)} s_i(X_{\pi_i^G})\right) = s(G) > s(G^{\text{melhor}})$, atualiza $G^{\text{melhor}} = G$.

Experimentos

- Algoritmo foi **implementado por João de Santana Brito Junior**, aluno de mestrado do Prof. Denis. Faz uso da biblioteca desenvolvida neste trabalho para amostrar *k-trees*.
- Usamos implementação para testar aprendizado por amostragem uniforme de *k-trees* com **cinco conjuntos de dados reais** contendo de 64 a 1556 variáveis.
- **Comparamos resultados** com os obtidos por Perez e Mauá[14] para o *Acyclic Selection Order-Based Search (ASOBS)* com *Best First-Based initialization heuristic (BFT)*, abordagem com resultados comparáveis ao estado da arte.

[14] PEREZ W., MAUÁ, D. D. Improving acyclic selection order-based bayesian network structure learning. *XIII Encontro Nacional de Inteligência Artificial e Computacional (ENIAC)*, 169–180, 2016.

Conjuntos de dados

Dataset	n	N
kdd	64	234954
tretail	135	29387
cr52	889	9100
bbc	1058	2225
ad	1556	3279

Tabela: Características dos conjuntos de dados utilizados; n é o número de variáveis e N é o número de instâncias.

Resultados obtidos

	$k = 4$		$k = 10$		Perez e Mauá	
Dataset	Máx.	Média	Máx.	Média	Máx.	Média
kdd	0,0755	0,0691 ± 0,0022	0,1037	0,1007 ± 0,0016	0,1468	0,1447 ± 0,0007
tretail	0,0188	0,0156 ± 0,0019	0,0289	0,0249 ± 0,0017	0,0447	0,0444 ± 0,0002
cr52	0,0203	0,0171 ± 0,0011	0,0439	0,0333 ± 0,0028	0,1617	0,1598 ± 0,0010
bbc	0,0059	0,0054 ± 0,0002	0,0128	0,0102 ± 0,0005	0,0777	0,0770 ± 0,0004
ad	0,0448	0,0400 ± 0,0023	0,0905	0,0781 ± 0,0045	0,7114	0,7089 ± 0,0013

Tabela: Performance do aprendizado de redes bayesianas por amostragem de *k-trees* e comparação dele com os resultados obtidos por Perez e Mauá.

Considerações finais (1/2)

- **Principal produto do trabalho:** biblioteca para codificação e geração uniforme de *k-trees* em tempo linear. Experimentos no aprendizado de redes bayesianas mostram como pode ser usada na prática. O método é eficiente e funciona com grandes domínios e limite alto de *treewidth*.
- Muitos dos **conceitos estudados são recentes e pouco explorados**. Os dois principais artigos (Caminiti *et al.* e Nie *et al.*) foram publicados respec. em 2010 e 2014. O segundo ressalta que simultaneamente ao seu desenvolvimento foram publicados independentemente outros trabalhos intimamente relacionados.

Considerações finais (2/2)

- Extensão interessante deste trabalho seria estudar a **geração de DAGs de treewidth limitado de maneira uniforme**. A geração uniforme de *k-trees* não resolve esse problema.
- Há **outras amostragens (não uniformes)** que podem ser testadas e comparadas em trabalhos futuros. Outro artigo de Nie *et al.* (2015)[15] sugere um *Distance Preferable Sampling*.
- Embora nova, a linguagem *Go* se mostrou satisfatória. Acreditamos que suas convenções facilitem o **reaproveitamento futuro do código desenvolvido**.

[15] NIE S., CAMPOS C. P., JI Q. *Learning Bounded Treewidth Bayesian Networks via Sampling*, 387–396. Springer International Publishing, Cham, 2015.

Obrigado.

Esta apresentação, a monografia e os códigos desenvolvidos estão disponíveis em `https://github.com/tmadeira/tcc/`

Perguntas?