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

Tiago Madeira
<madeira@ime.usp.br>

Supervisor: Prof. Dr. Denis Deratani Mauá

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

Novembro de 2016

No que consiste o trabalho?

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

Por que estudar *k-trees*?

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

Alguns exemplos[1]:

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

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

Por que gerar *k-trees?*

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

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

O que foi feito?

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

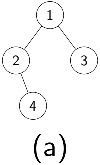
[2] Severio Caminiti, Emanuele G. Fusco, Rossella Petreschi. Bijective linear time coding and decoding for *k*-trees. *Theory of Computing Systems*, 46:284–300, 2010.

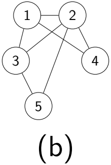
[3] Siqi Nie, Denis D. Mauá, Cassio P. de Campos, Qiang Ji. Advances in learning bayesian networks of bounded treewidth. *CoRR*, abs/1406.1411, 2014.

Primeiramente, o que são *k-trees*?

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

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





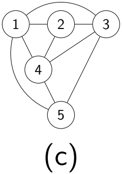
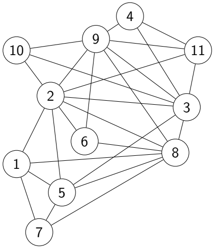


Figura: **(a)** Uma 1-*tree* (ou seja, uma árvore comum) com 4 vértices. **(b)** Uma 2-*tree* com 5 vértices. **(c)** Uma 3-*tree* com 5 vértices.

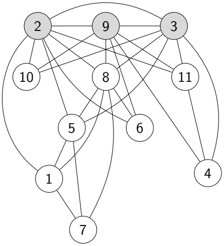
[4] Frank Harary, Edgar M. Palmer. On acyclic simplicial complexes. *Mathematika*, 15:115–122, 1968.

k-trees enraizadas

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



(a)



(b)

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

A relação entre geração e codificação

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.

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

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

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

A solução de Caminiti *et al.*

- Apenas em 2008 surgiu um código bijetivo para *k-trees* com algoritmos lineares de codificação e decodificação. Esses algoritmos, propostos por Caminiti *et al.*, foram implementados neste trabalho.
- O código é formado por uma permutação de tamanho k e uma generalização do *Dandelion Code*[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] Ömer Eğecioğlu, J. B. Remmel. Bijections for cayley trees, spanning trees, and their q-analogues. *Journal of Combinatorial Theory*, 42:15–30, 1986.

A solução de Caminiti *et al.*

Geração uniforme de *k-trees*

Testes

O que são redes bayesianas?

Redes bayesianas são modelos probabilísticos gráficos[9] que representam distribuições de probabilidade conjunta e são usados para raciocinar em situações com incerteza.

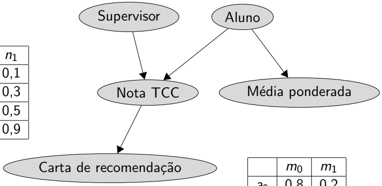
Formalmente: Seja $N = \{1, \cdots, n\}$ e seja $X = \{X_i : i \in N\}$ um conjunto de variáveis aleatórias X_i tomando valores em conjuntos finitos $\mathcal{X}_i$. Uma **rede bayesiana** é uma tripla (X, G, θ), onde $G = (V, E)$ é um DAG (que chamamos de **estrutura** da rede bayesiana) cujos vértices 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).

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

Exemplo de rede bayesiana

o_0	o_1
0,5	0,5

a_0	a_1
0,5	0,5



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

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

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

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

Aprendizado de redes bayesianas

Aprendizado por amostragem de *k-trees*

Experimentos

Conclusão

Agradecimentos

Perguntas?