

>>> Um seminário sobre aprendizagem

>>> Seminário de Coisas Legais

Name: Lucas Giraldi Almeida Coimbra

Date: 29 de setembro de 2023

# Grafos

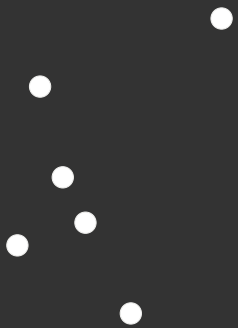
```
>>> Grafos
```

```
Grafos:
```

```
>>> Grafos
```

```
Grafos:
```

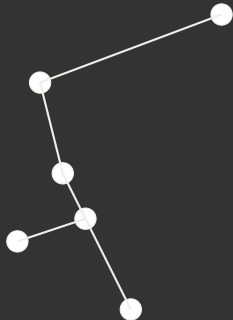
```
* vértices
```



>>> Grafos

Grafos:

\* vértices e arestas;

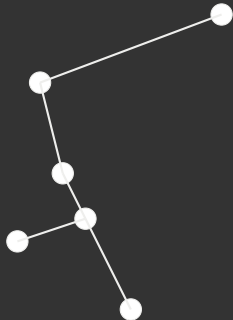


# >>> Grafos

Grafos:

- \* vértices e arestas;

Podem representar:



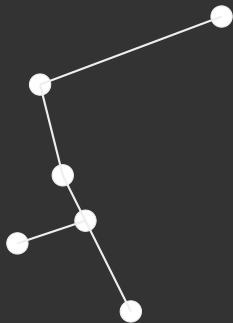
## >>> Grafos

Grafos:

- \* vértices e arestas;

Podem representar:

- \* Substâncias químicas;



## >>> Grafos

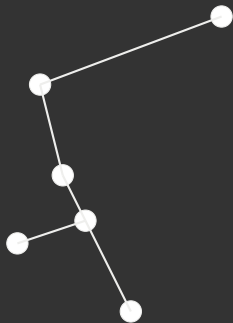
Grafos:

- \* vértices e arestas;

Podem representar:

- \* Substâncias químicas;

- \* Redes sociais;





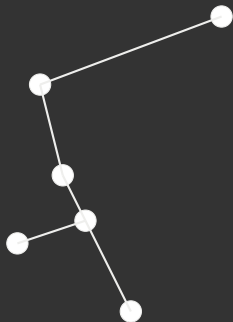
## >>> Grafos

Grafos:

- \* vértices e arestas;

Podem representar:

- \* Substâncias químicas;
- \* Redes sociais;
- \* Cidades interligadas;



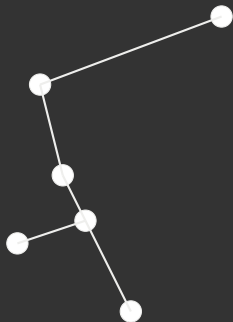
## >>> Grafos

Grafos:

- \* vértices e arestas;

Podem representar:

- \* Substâncias químicas;
- \* Redes sociais;
- \* Cidades interligadas;
- \* Artigos que referenciam um ao outro;



# Redes Neurais



```
>>> Neurônios
```

```
Neurônios:
```

>>> Neurônios

Neurônios:

- \* Função: recebe coisas e devolve coisas;

## >>> Neurônios

Neurônios:

- \* Função: recebe coisas e devolve coisas;
- \* Recebe: sinal elétrico (número) de outros neurônios;

>>> Neurônios

Neurônios:

- \* Função: recebe coisas e devolve coisas;
- \* Recebe: sinal elétrico (número) de outros neurônios;
- \* Devolve: um sinal elétrico (número).



## >>> Neurônios

Neurônios:

- \* Função: recebe coisas e devolve coisas;
- \* Recebe: sinal elétrico (número) de outros neurônios;
- \* Devolve: um sinal elétrico (número).

**IMPORTANTE**

## >>> Neurônios

Neurônios:

- \* Função: recebe coisas e devolve coisas;
- \* Recebe: sinal elétrico (número) de outros neurônios;
- \* Devolve: um sinal elétrico (número).

### IMPORTANTE

Algumas ligações são mais importantes do que outras.

>>> Ligações



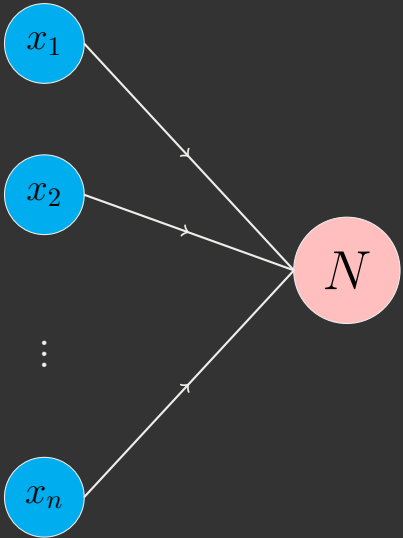
>>> Ligações



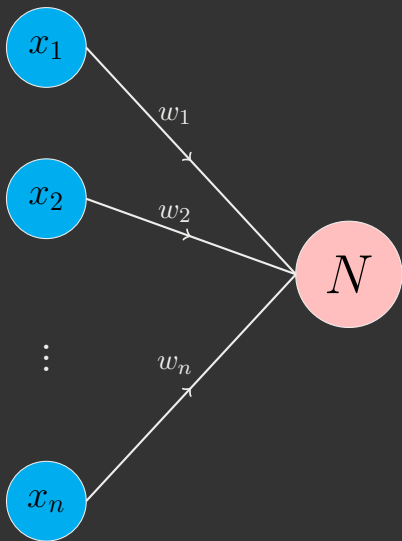
⋮



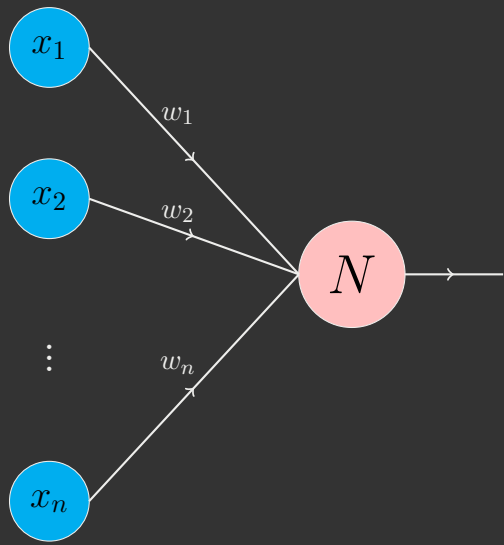
>>> Ligações



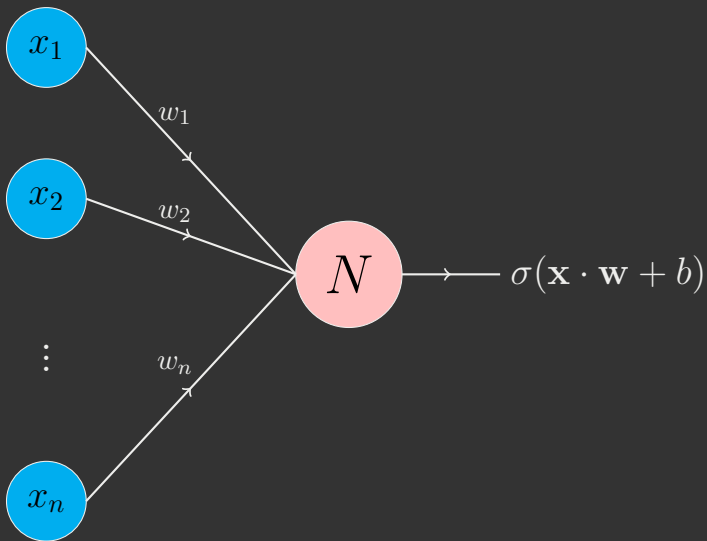
>>> Ligações



>>> Ligações



## >>> Ligações





>>> Explicando

$$\sigma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + b)$$

>>> Explicando

$$\sigma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + b)$$

\*  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  - sinais;

>>> Explicando

$$\sigma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + b)$$

\*  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  - sinais;

\*  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  - pesos;

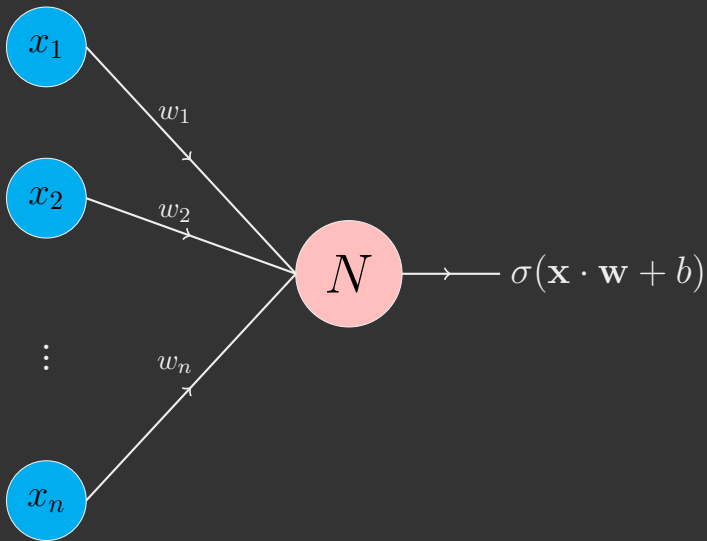
$$\sigma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + b)$$

- \*  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  - sinais;
- \*  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  - pesos;
- \*  $b \in \mathbb{R}$  - bias;

$$\sigma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{w} + b)$$

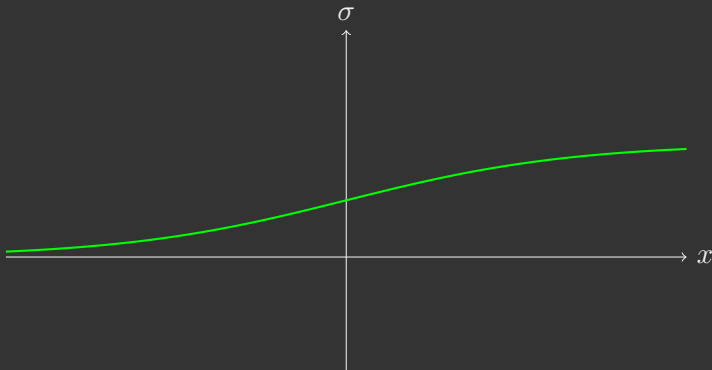
- \*  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  - sinais;
- \*  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  - pesos;
- \*  $b \in \mathbb{R}$  - *bias*;
- \*  $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  - função de ativação.

>>> Neurônio (de novo)



## >>> Função de ativação

$$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$



>>> Aprendendo

Por que aprender?



## >>> Aprendendo

Por que aprender?

- \* Dado  $x$ , queremos que o neurônio transmita um valor  $t$ ;

## >>> Aprendendo

Por que aprender?

- \* Dado  $x$ , queremos que o neurônio transmita um valor  $t$ ;
- \* Com os pesos  $w$  e o *bias*  $b$ , o neurônio está transmitindo um valor  $y$ .

## >>> Aprendendo

Por que aprender?

- \* Dado  $x$ , queremos que o neurônio transmita um valor  $t$ ;
- \* Com os pesos  $w$  e o *bias*  $b$ , o neurônio está transmitindo um valor  $y$ .

O que é aprender?

## >>> Aprendendo

Por que aprender?

- \* Dado  $x$ , queremos que o neurônio transmita um valor  $t$ ;
- \* Com os pesos  $w$  e o *bias*  $b$ , o neurônio está transmitindo um valor  $y$ .

O que é aprender?

- \* Calcular erro:  $E(y) = |y - t|$ ;

## >>> Aprendendo

Por que aprender?

- \* Dado  $x$ , queremos que o neurônio transmita um valor  $t$ ;
- \* Com os pesos  $w$  e o *bias*  $b$ , o neurônio está transmitindo um valor  $y$ .

O que é aprender?

- \* Calcular erro:  $E(y) = |y - t|$ ;
- \* Mudar  $w$  e  $b$  para diminuir  $E(y)$ .

>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;

>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;

>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;
- \* Urgência: número entre 0 e 1.



>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;
- \* Urgência: número entre 0 e 1. Se for 0, não é urgente, se for 1, precisa de atendimento rápido;

>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;
- \* Urgência: número entre 0 e 1. Se for 0, não é urgente, se for 1, precisa de atendimento rápido;
- \* Sabemos: os dados da pessoa  $x$  e qual a urgência dela;

## >>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;
- \* Urgência: número entre 0 e 1. Se for 0, não é urgente, se for 1, precisa de atendimento rápido;
- \* Sabemos: os dados da pessoa  $x$  e qual a urgência dela;
- \* Treinamos o neurônio para que, ao receber  $x$ , retorne a sua urgência;

>>> Aprendi, e agora?

- \* Situação: queremos ordenar pessoas para atendimento em um pronto-socorro;
- \* Cada pessoa é representada por um vetor  $x$  que contém dados numéricos da ficha médica, como pressão, temperatura e peso;
- \* Urgência: número entre 0 e 1. Se for 0, não é urgente, se for 1, precisa de atendimento rápido;
- \* Sabemos: os dados da pessoa  $x$  e qual a urgência dela;
- \* Treinamos o neurônio para que, ao receber  $x$ , retorne a sua urgência;
- \* Esperamos que, ao receber uma pessoa  $x'$ , o neurônio retorne como seu sinal, mais ou menos corretamente, a urgência de  $x'$ .

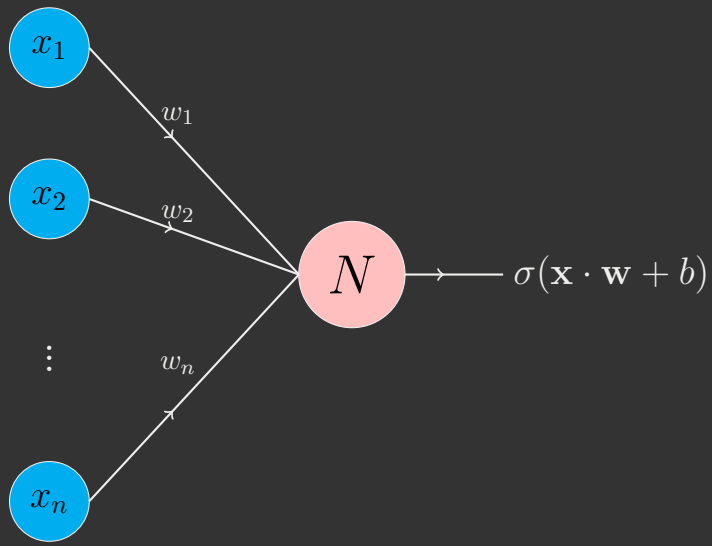
>>> Só um?

Neurônios são poderosos sozinhos.

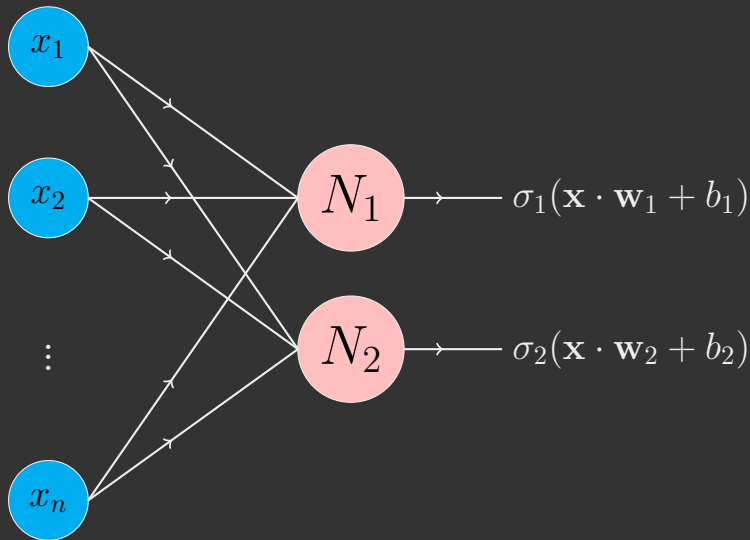
>>> Só um?

Neurônios são poderosos sozinhos.  
E se pegarmos vários?

>>> Rede Neural

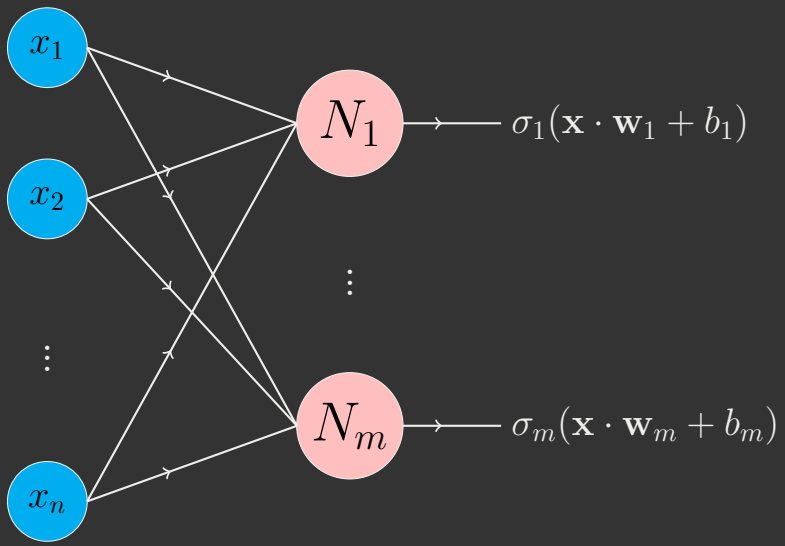


>>> Rede Neural

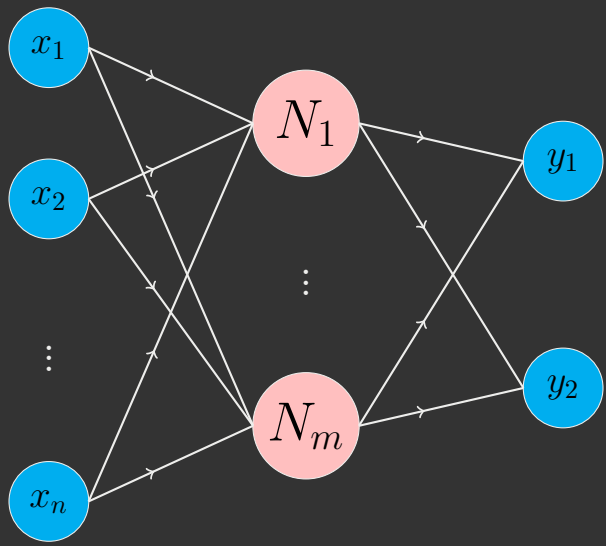




>>> Rede Neural



>>> Rede Neural





>>> Aprendendo (de novo)

A ideia é a mesma, mas agora temos  $\mathbf{y} = (y_1, y_2)$ ,  $\mathbf{t} = (t_1, t_2)$  e o erro

$$E(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{t}\|.$$

>>> Aprendendo (de novo)

A ideia é a mesma, mas agora temos  $\mathbf{y} = (y_1, y_2)$ ,  $\mathbf{t} = (t_1, t_2)$  e o erro

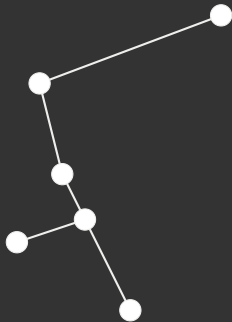
$$E(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{t}\|.$$

## PROBLEMA

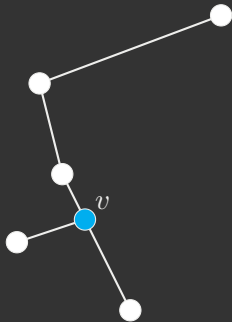
Ligações de uma camada interferem no valor de neurônios de outras camadas: treinamento é mais difícil.

# Convolução

```
>>> Vizinhos e Grau
```

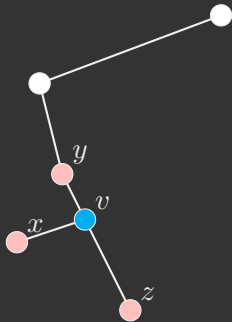


```
>>> Vizinhos e Grau
```

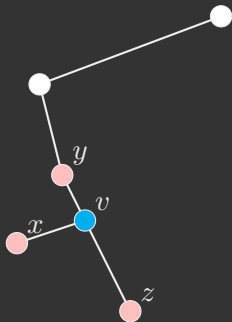




```
>>> Vizinhos e Grau
```

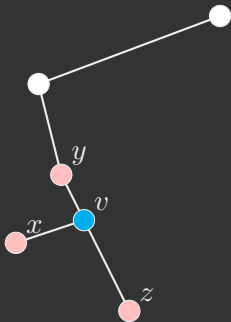


```
>>> Vizinhos e Grau
```



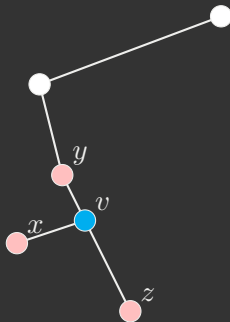
Vizinhança: pontos rosas.

## >>> Vizinhos e Grau



Vizinhança: pontos rosas. Nesse caso,  $\mathcal{N}(v) = \{x, y, z\}$ .

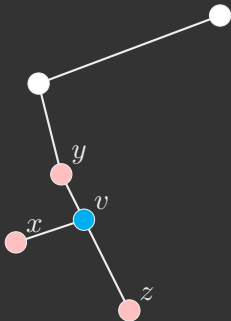
## >>> Vizinhos e Grau



Vizinhança: pontos rosas. Nesse caso,  $\mathcal{N}(v) = \{x, y, z\}$ .

Grau: número de vizinhos.

## >>> Vizinhos e Grau



Vizinhança: pontos rosas. Nesse caso,  $\mathcal{N}(v) = \{x, y, z\}$ .

Grau: número de vizinhos. Nesse caso,  $\deg(v) = 3$ .

## >>> Convolução

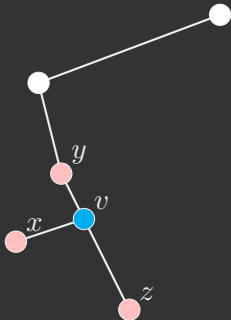
### PROBLEMA

O número  $\text{deg}(v)$  só contém informação sobre o vértice  $v$ .

## >>> Convolução

### PROBLEMA

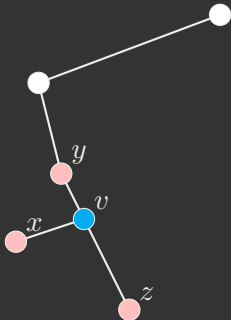
O número  $\text{deg}(v)$  só contém informação sobre o vértice  $v$ .



## >>> Convolução

### PROBLEMA

O número  $\text{deg}(v)$  só contém informação sobre o vértice  $v$ .



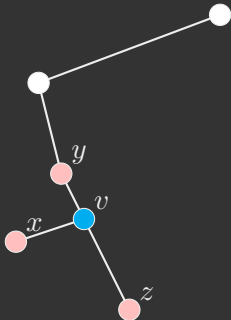
$$\text{deg}_2(v) = \frac{\text{deg}(v) + \text{deg}(x) + \text{deg}(y) + \text{deg}(z)}{4}$$



## >>> Convolução

### PROBLEMA

O número  $\text{deg}(v)$  só contém informação sobre o vértice  $v$ .



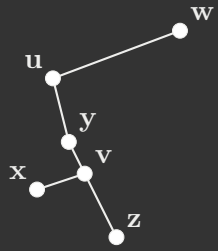
$$\text{deg}_2(v) = \frac{\text{deg}(v) + \text{deg}(x) + \text{deg}(y) + \text{deg}(z)}{4}$$

O número  $\text{deg}_2(v)$  contém informação sobre  $v$  e seus vizinhos.

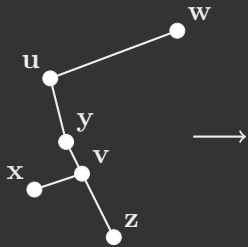
# GNNs – Graph Neural Networks

Redes Neurais em Grafos

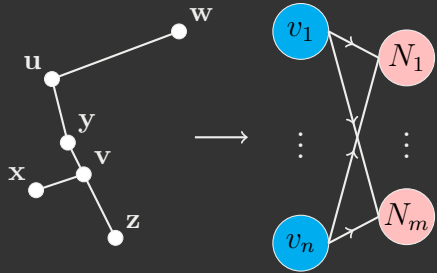
>>> GNNs - Primeiro passo



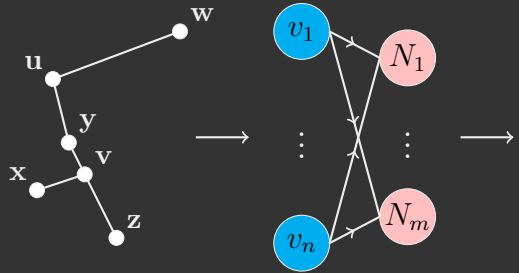
# >>> GNNs - Primeiro passo



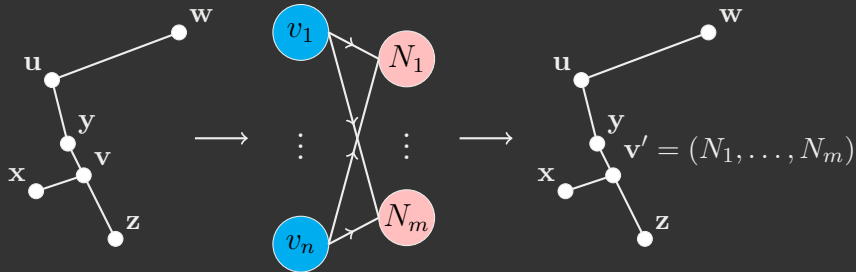
# >>> GNNs - Primeiro passo



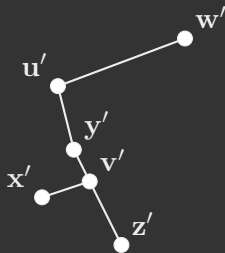
# >>> GNNs - Primeiro passo



# >>> GNNs - Primeiro passo

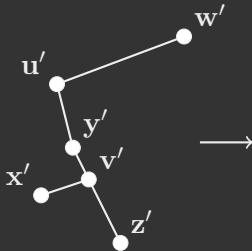


## >>> GNNs - Segundo passo

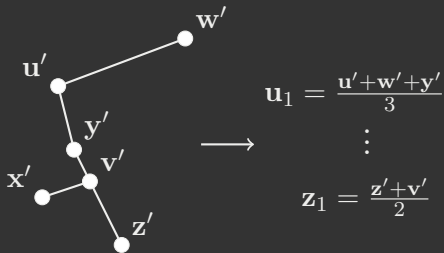




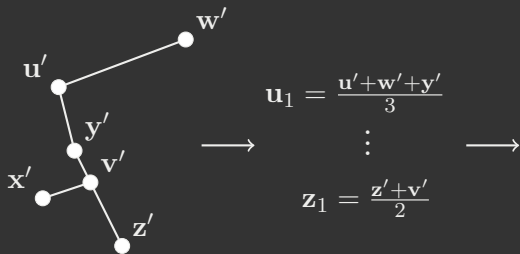
## >>> GNNs - Segundo passo



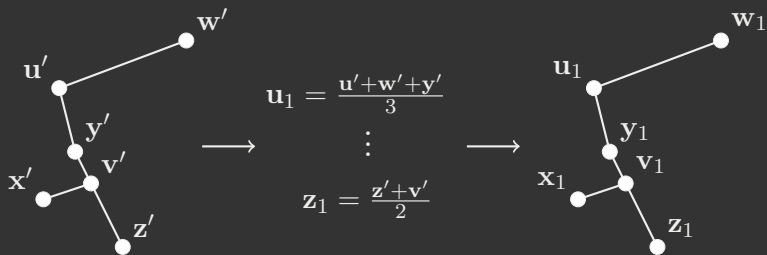
## >>> GNNs - Segundo passo



## >>> GNNs - Segundo passo



## >>> GNNs - Segundo passo

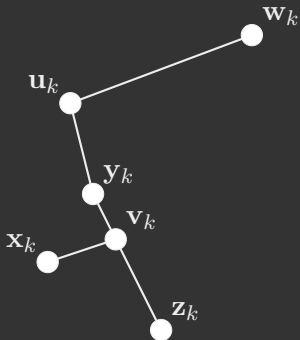


>>> Conclusão

Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos

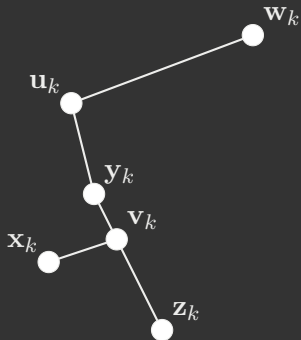
## >>> Conclusão

Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos



## >>> Conclusão

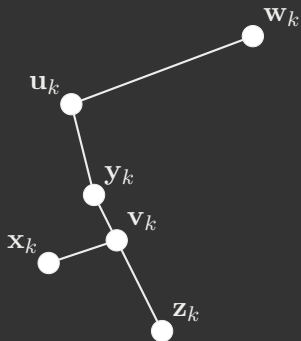
Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos



\* Todas as listas tem o mesmo tamanho;

## >>> Conclusão

Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos

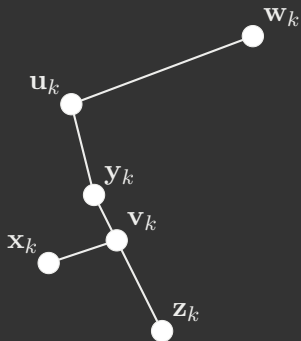


- \* Todas as listas tem o mesmo tamanho;
- \* São listas de números;



## >>> Conclusão

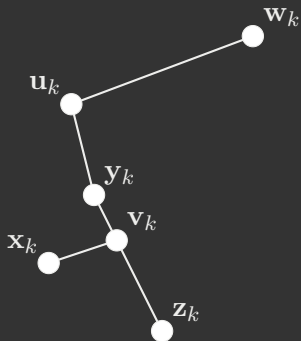
Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos



- \* Todas as listas tem o mesmo tamanho;
- \* São listas de números;
- \* Podem ser interpretadas como elementos de algum  $\mathbb{R}^d$ !

## >>> Conclusão

Repetindo o processo  $k$  vezes, obtemos



- \* Todas as listas tem o mesmo tamanho;
- \* São listas de números;
- \* Podem ser interpretadas como elementos de algum  $\mathbb{R}^d$ !
- \* Mergulhamos o grafo!!!!



## >>> Aplicações

Com o poder da álgebra linear, podemos:

## >>> Aplicações

Com o poder da álgebra linear, podemos:

- \* Classificar vértices;

## >>> Aplicações

Com o poder da álgebra linear, podemos:

- \* Classificar vértices;
- \* Novas arestas;

## >>> Aplicações

Com o poder da álgebra linear, podemos:

- \* Classificar vértices;
- \* Novas arestas;
- \* Classificar grafos;

## >>> Aplicações

Com o poder da álgebra linear, podemos:

- \* Classificar vértices;
- \* Novas arestas;
- \* Classificar grafos;
- \* Agrupamento.



## >>> Referências I

- [1] *Graph Neural Networks - a perspective from the ground up - YouTube*. Acessado: 29-09-2023. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=GXhBEj1ZtE8>.
- [2] William L. Hamilton. *Graph Representation Learning (Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning, 46)*. Morgan & Claypool Publishers, 2020. ISBN: 9781681739649.
- [3] *Introduction to Machine Learning | MIT Open Learning Library*. Acessado: 29-09-2023. URL: <https://openlearninglibrary.mit.edu/courses/course-v1:MITx+6.036+1T2019/about>.
- [4] *Learn PyTorch for deep learning in a day. Literally. - YouTube*. Acessado: 29-09-2023. URL: [https://www.youtube.com/watch?v=Z\\_ikDlimN6A&](https://www.youtube.com/watch?v=Z_ikDlimN6A&).

## >>> Referências II

- [5] *Perceptron Learning Algorithm: A Graphical Explanation Of Why It Works* | by Akshay L Chandra | Towards Data Science. Acessado: 25-09-2023. URL: <https://towardsdatascience.com/perceptron-learning-algorithm-d5db0deab975>.
- [6] *Training Deep Neural Networks. Deep Learning Accessories* | by Ravindra Parmar | Towards Data Science. Acessado: 25-09-2023. URL: <https://towardsdatascience.com/training-deep-neural-networks-9fdb1964b964>.