

# Rede Neural em Gr

Inteligência Artificial

Professor M. Sc. Aldísio G. M

Instituto Federal de E  
Tecnologia do Ceará



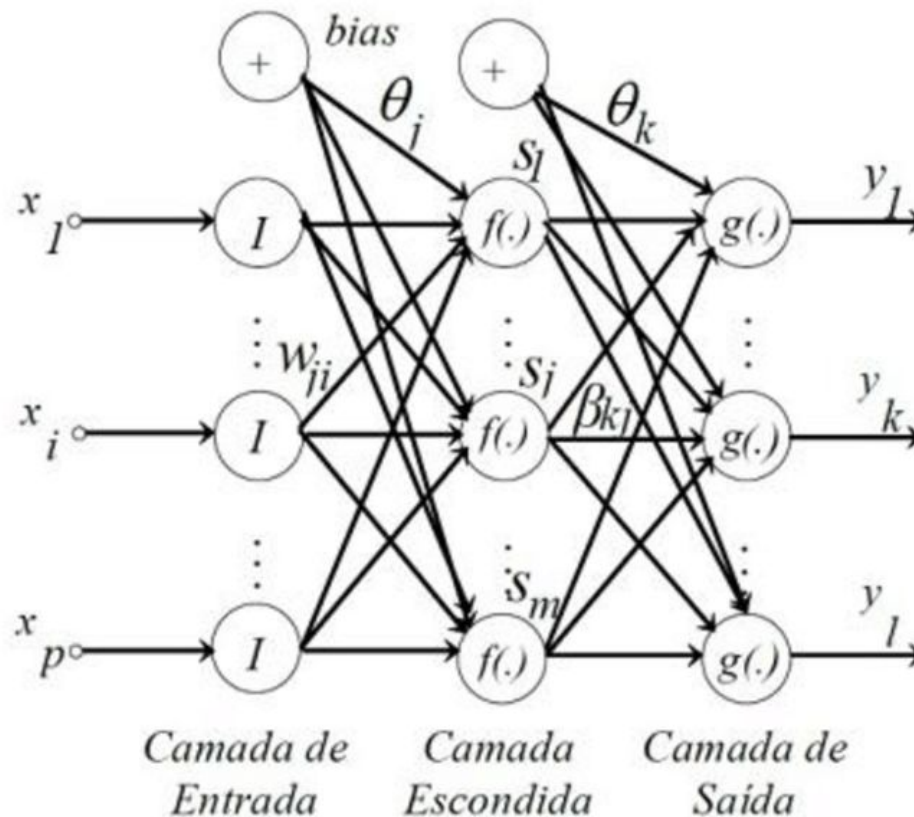
# Objetivos

1. Revisar conceitos sobre redes neurais;
2. Entender que é um grafo e como funciona em grafo;
3. Conhecer as principais operações que a rede neural e aplicações.

# Revisão

# Rede Neurais Artificiais

Como funciona uma rede neural art  
Do neurônio a rede.



# Rede Neurais Artificiais

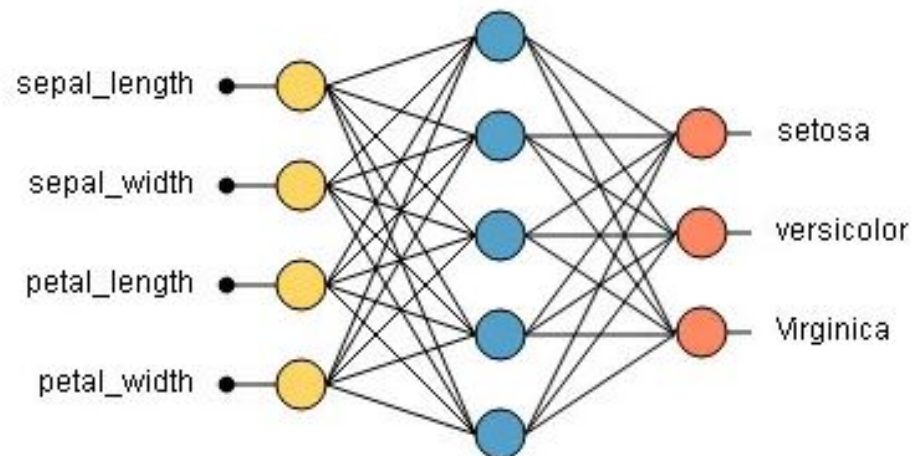
Como funciona uma rede neural art  
Do neurônio a rede.



Iris Versicolor

Iris Setosa

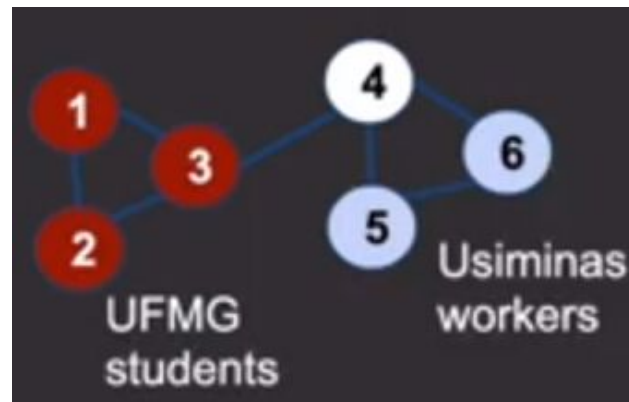
Iris Virginica



# Redes Neurais

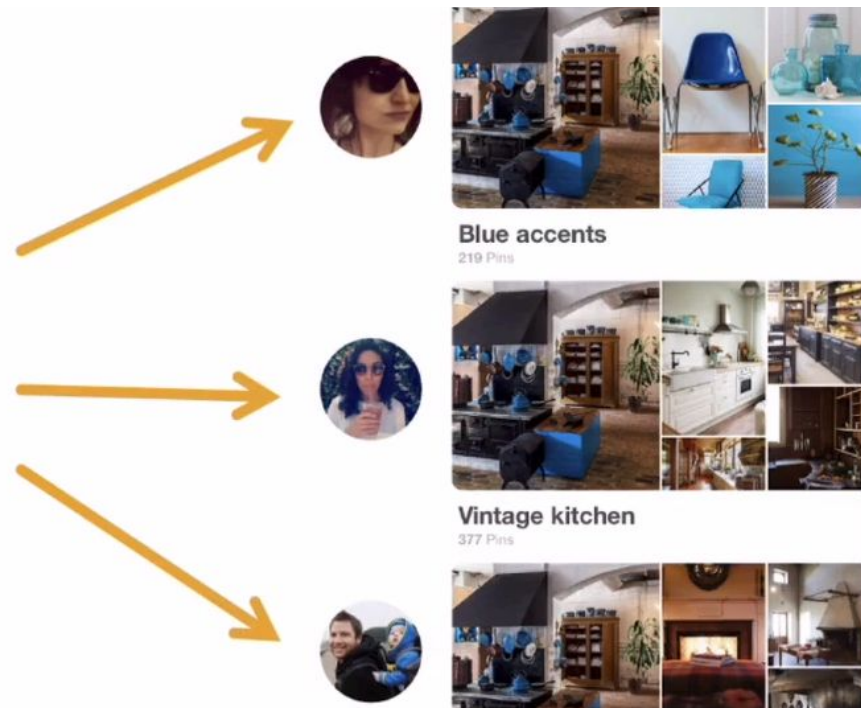
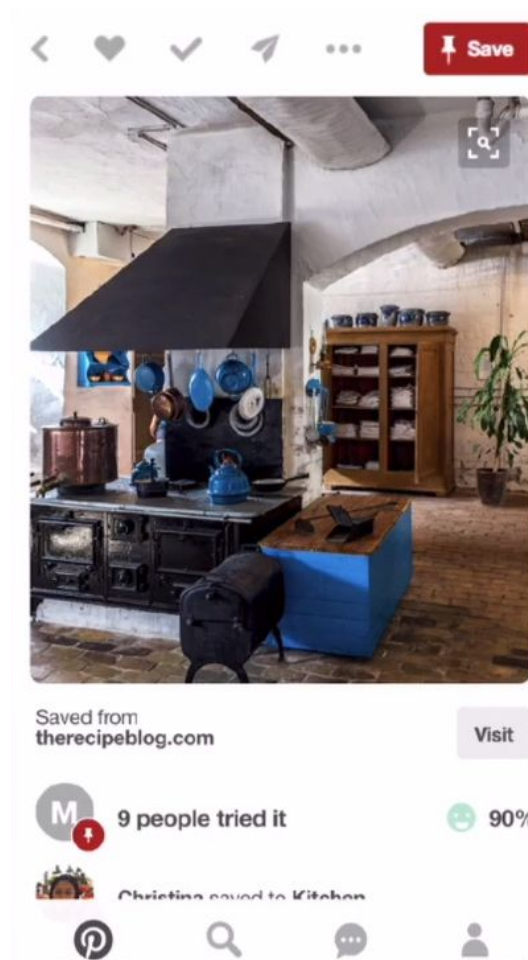
# Rede Neurais Artificiais

Aplicações: Sugestões em redes sociais



# Rede Neurais Artificiais

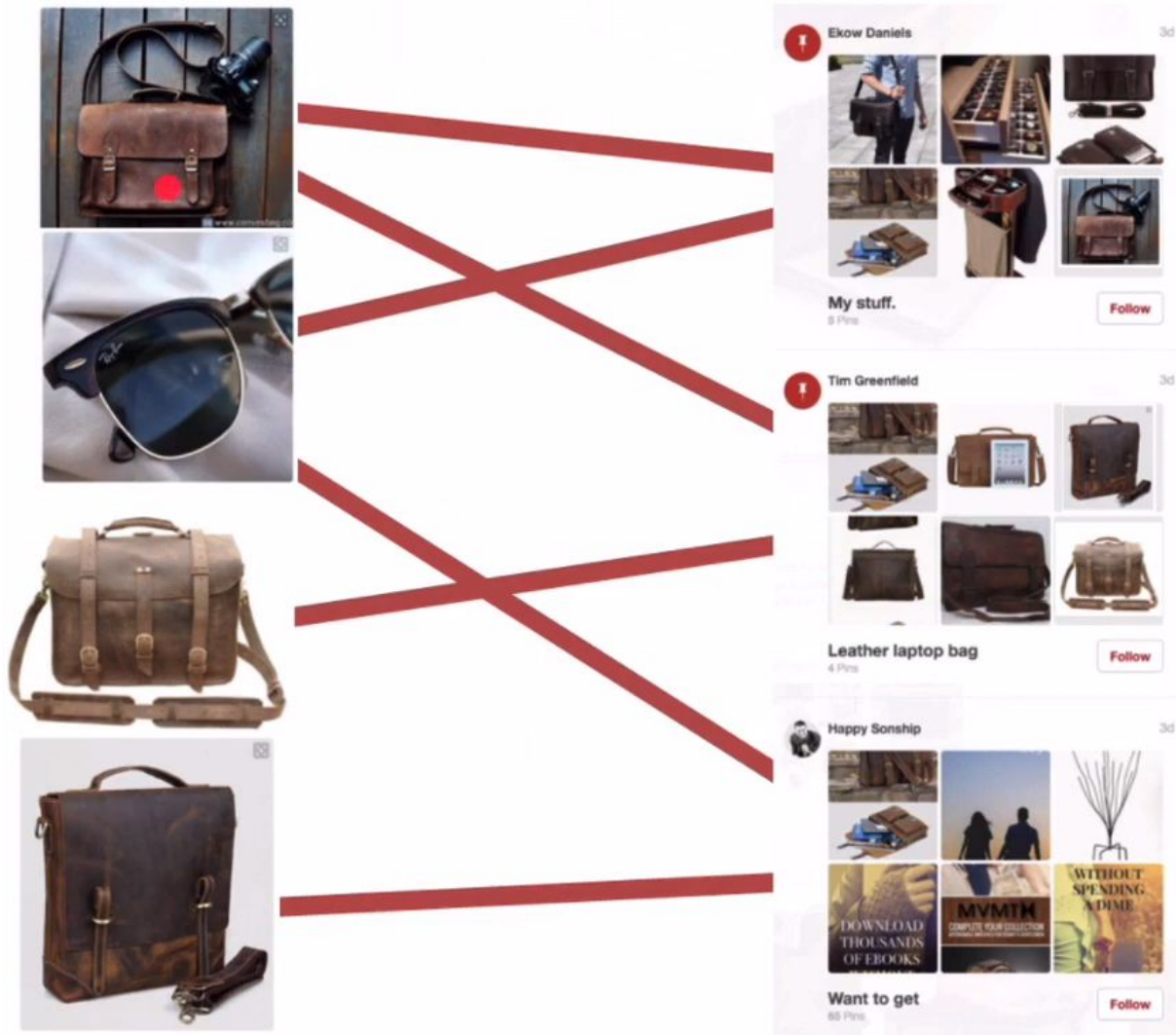
Sugestões de fotos (PinSAGE & Ying)



- 300M users
- 4+B pins, 2+B boards

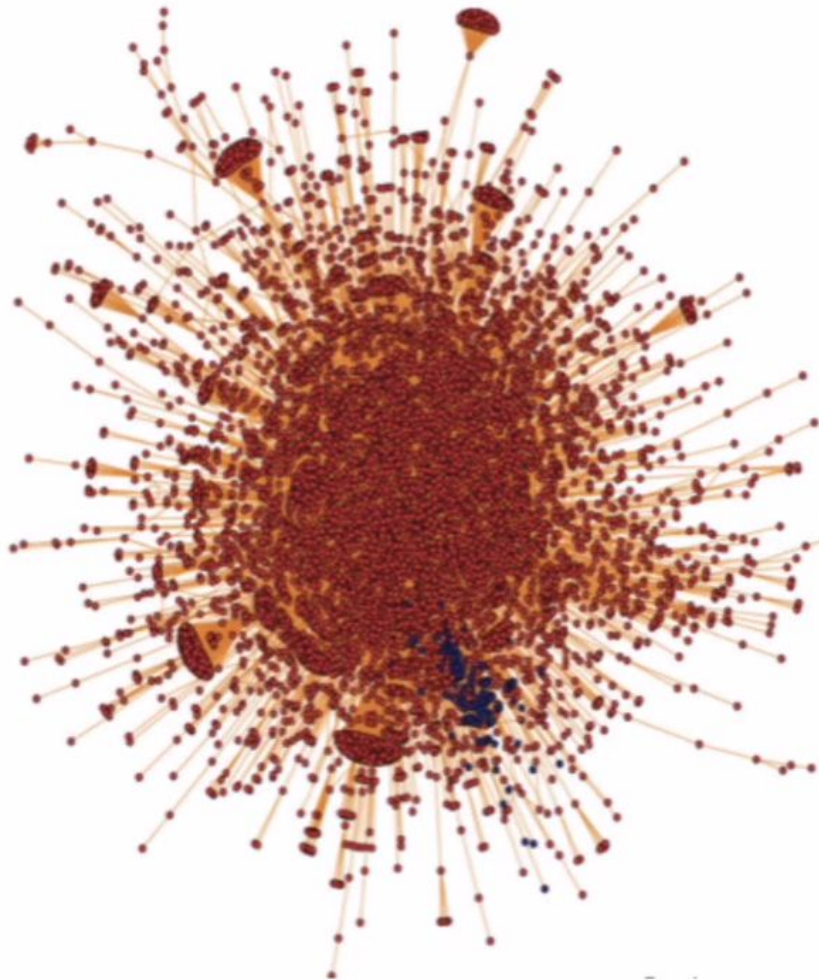
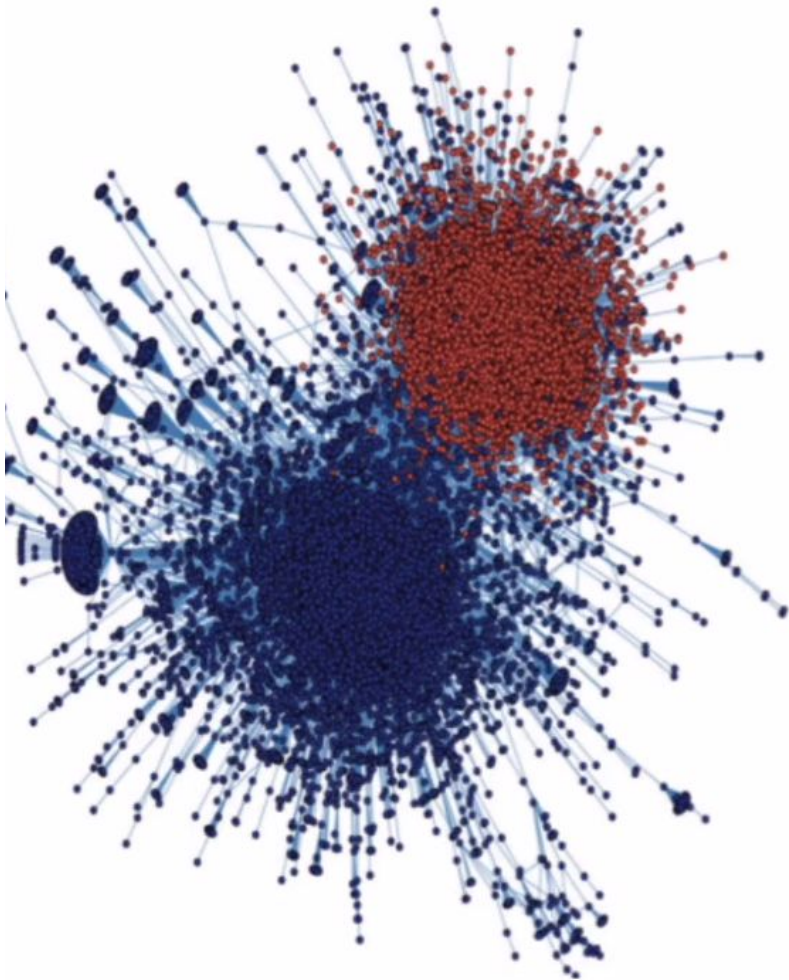


# Rede Neurais Artificiais



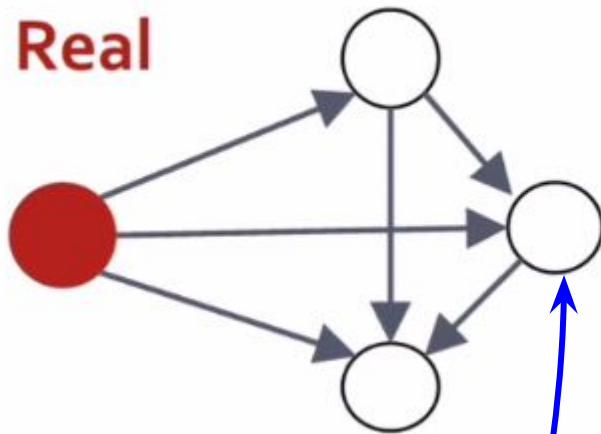
# Rede Neurais Artificiais

Identificar polarização de temas n

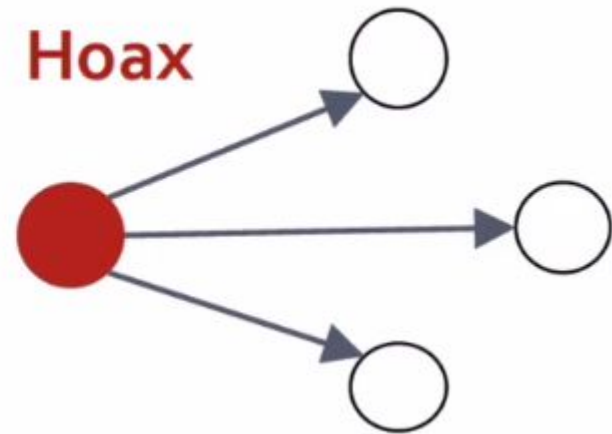


# Rede Neurais Artificiais

Identificação de Artigos Fakes vs.

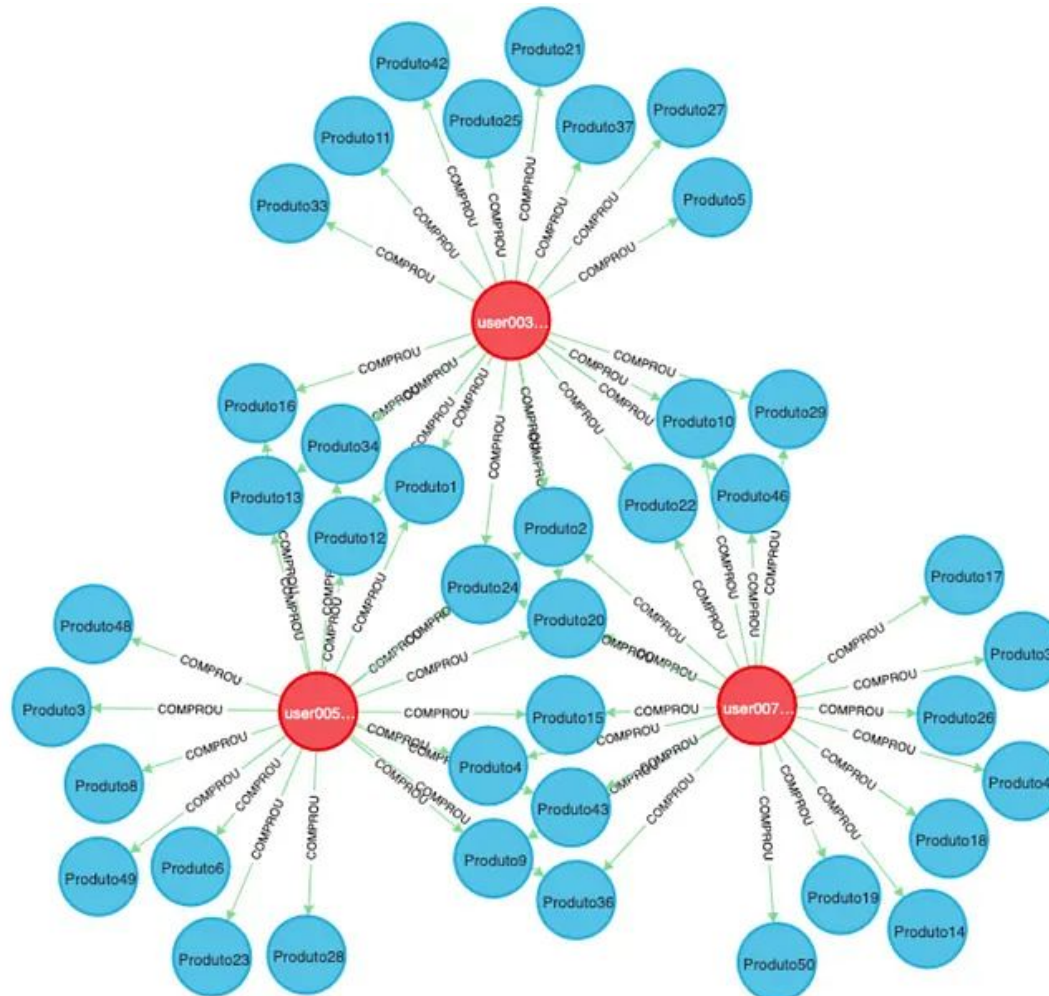


Vs.



# Rede Neurais Artificiais

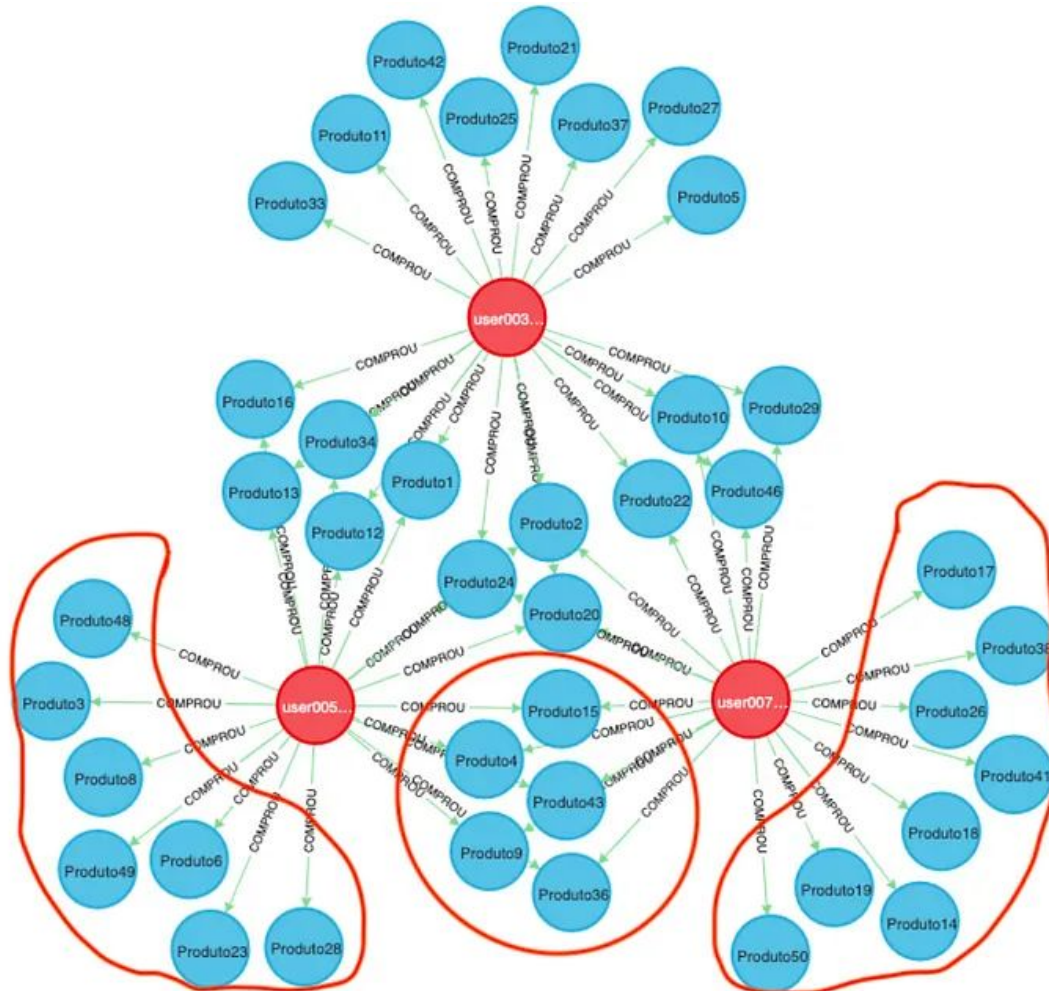
## Recomendação de produtos





# Rede Neurais Artificiais

"quem comprou X também comprou Y"



# Rede Neurais Artificiais

"quem comprou X também comprou Y"

Vértices

1	<b>Tipos</b>	<b>Atributos</b>
2	Usuário	Email; UF.
3	Produto	ID do produto.

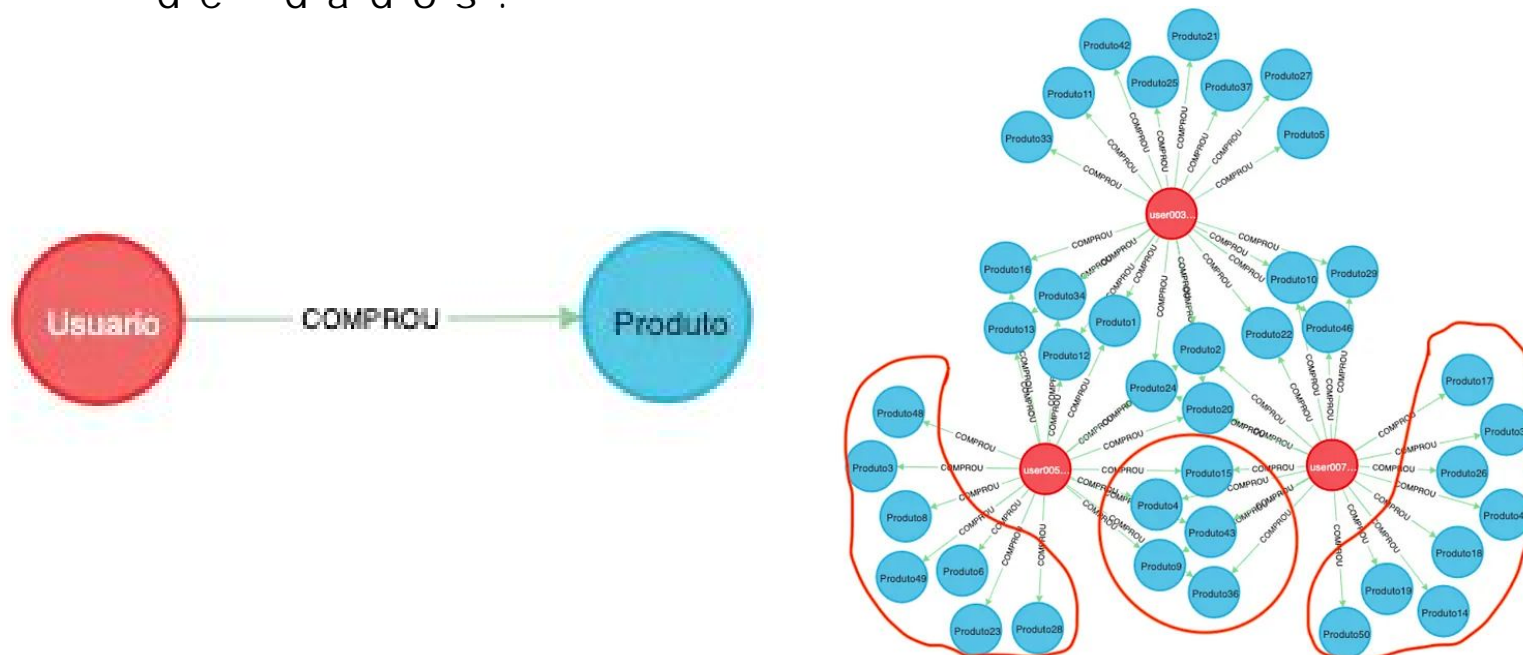
Arestas:

1	<b>Tipos</b>	<b>Atributos</b>	<b>Origem</b>	<b>Destino</b>
2	Comprou	Email do comprador; ID do produto comprado; valor pago; timestamp da compra (data e hora).	Usuário	Produto



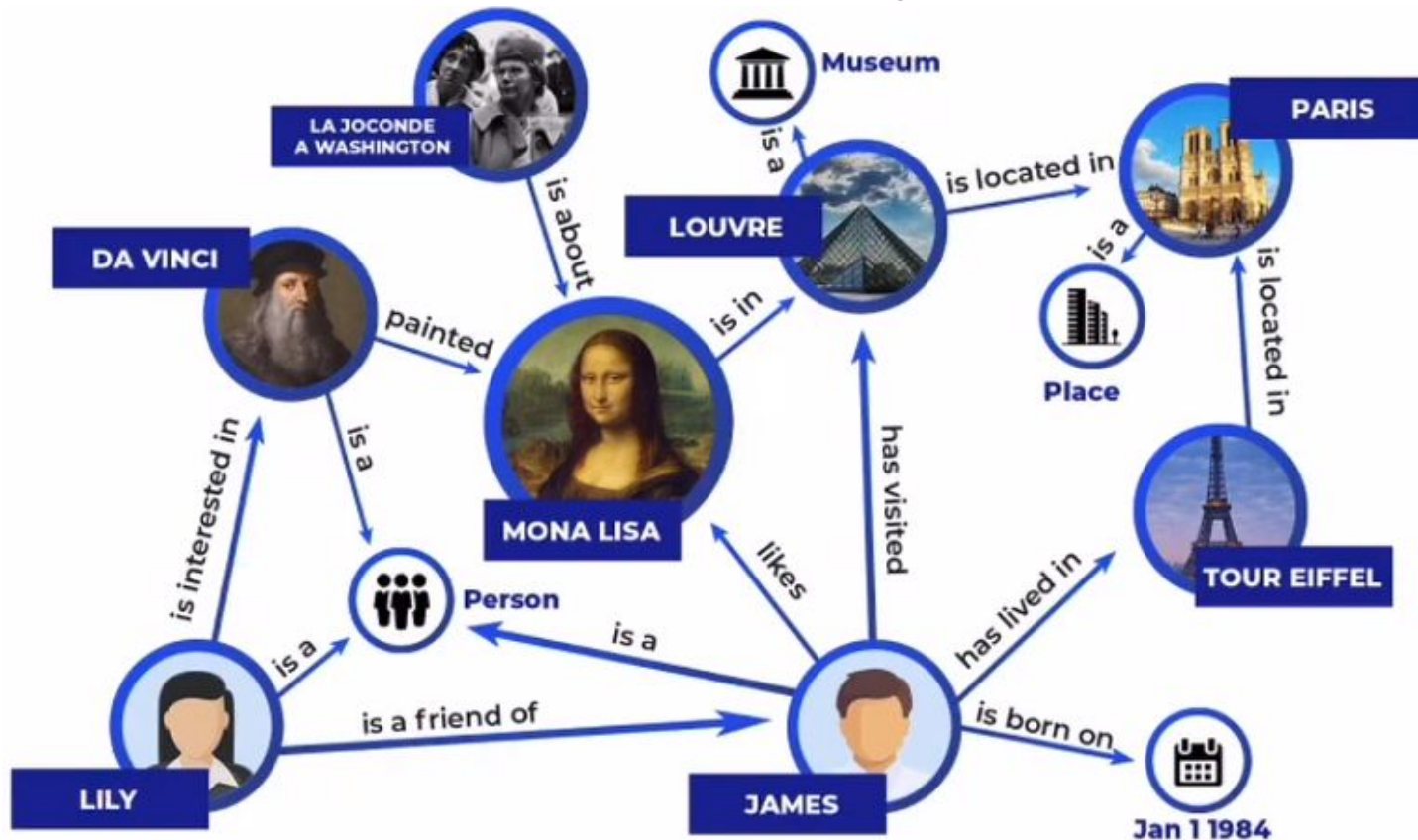
# Rede Neurais Artificiais

“ quem comprou X também comprou Y ”  
Embora o leque de técnicas para recomendação usando desde métricas de similaridade a estado-da-arte, grafos emergem como uma forma intuitiva de explorar as relações de dados.



# Rede Neurais Artificiais

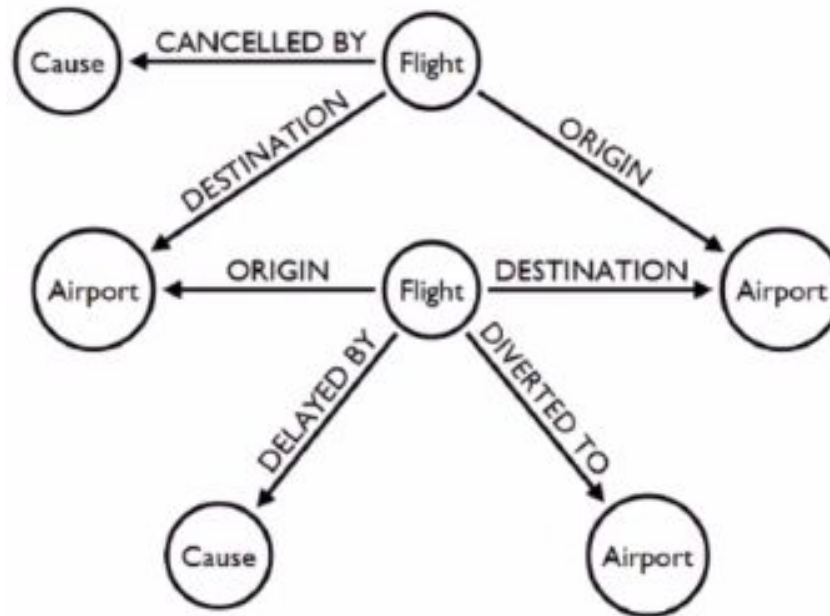
Mas pra que usar abordagens baseadas em Estrutura própria para representação de relações.  
Facilita a modelagem do problema tal





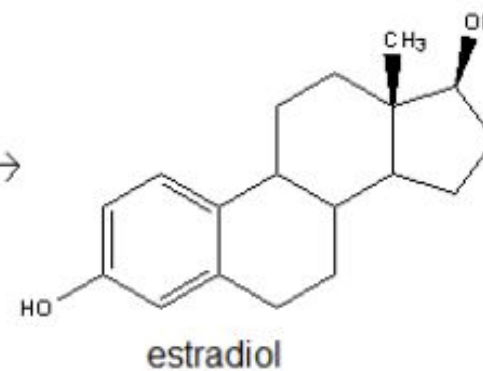
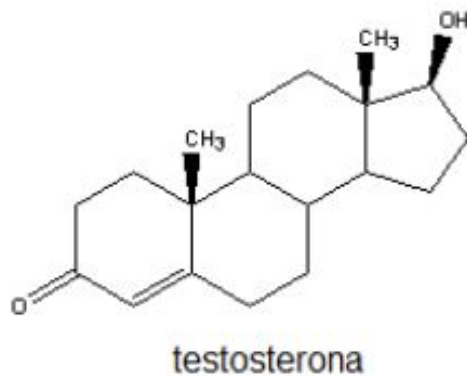
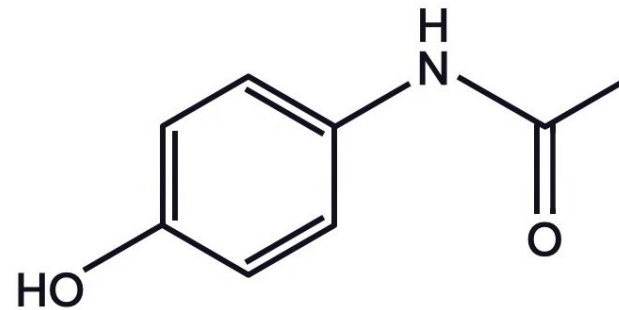
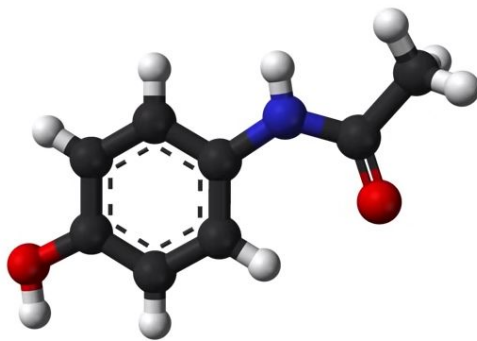
# Rede Neurais Artificiais

Mas pra que usar abordagens baseadas em  
Estrutura própria para representação das  
relações.  
Facilita a modelagem do problema tal



# Rede Neurais Artificiais

Mas pra que usar abordagens baseadas em Estrutura própria para representação de relações.  
Facilita a modelagem do problema tal

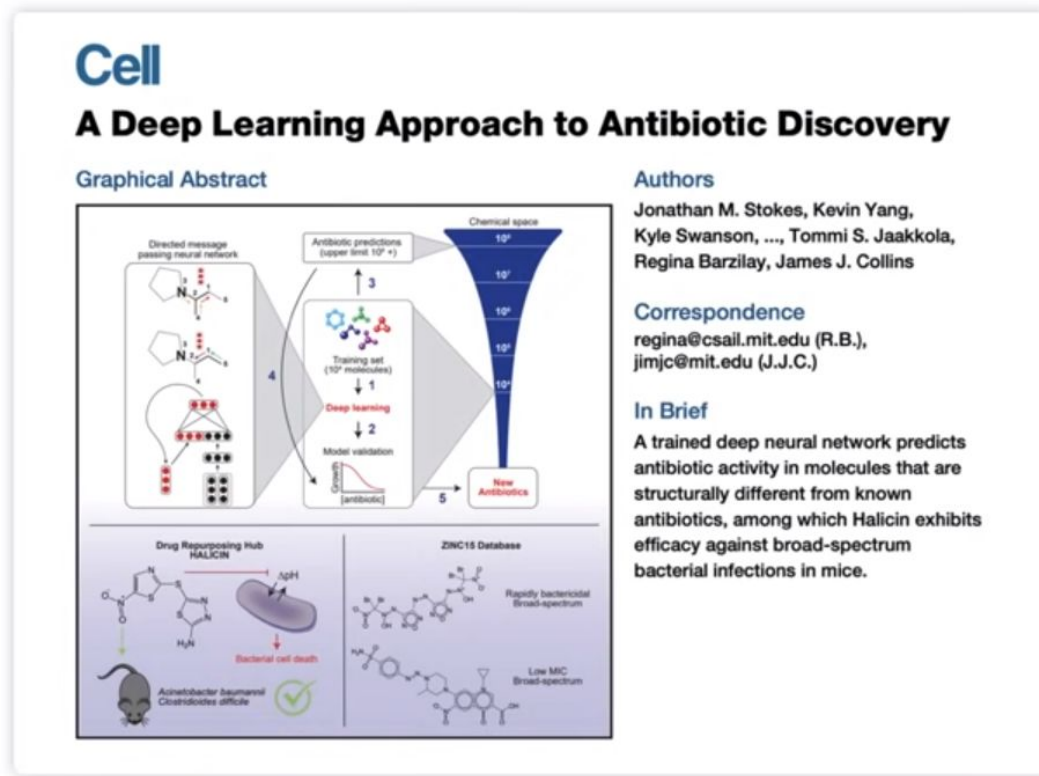


# Rede Neurais Artificiais

A descoberta de Halicin, um antibiótico combatendo as superbactérias, foi feita com GNN.

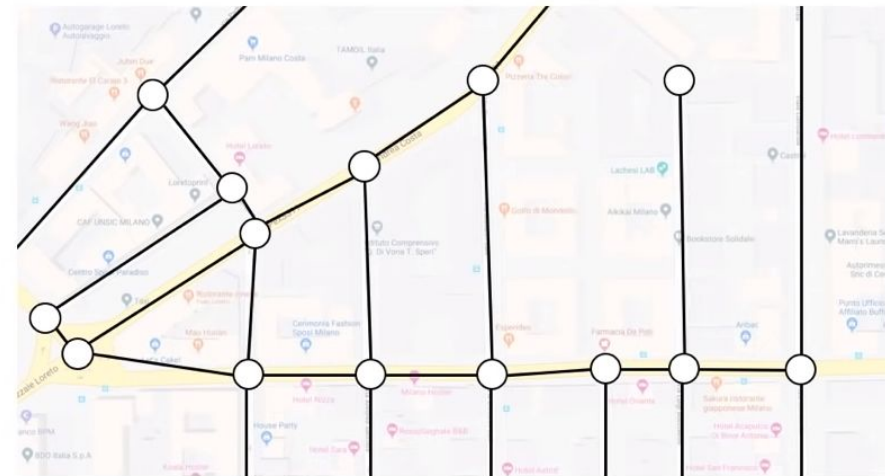
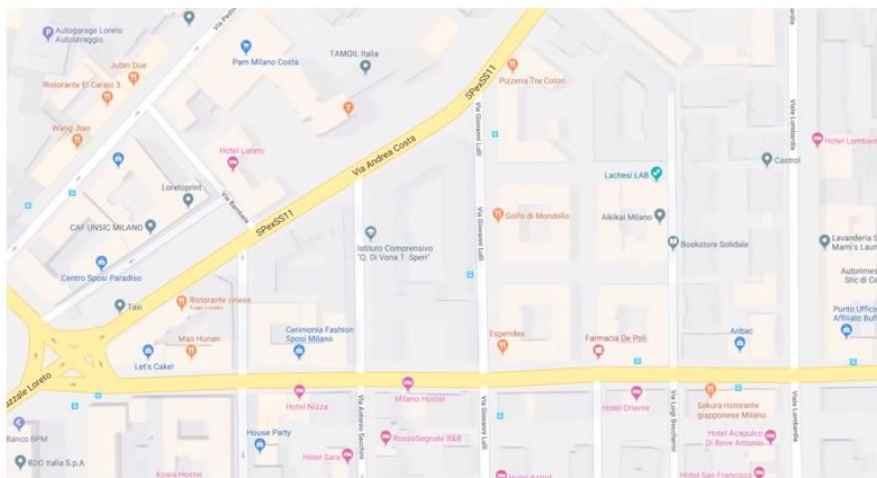
Paper

[https://www.cell.com/cell-systems/fulltext/S2405-4718\(23\)00050-8](https://www.cell.com/cell-systems/fulltext/S2405-4718(23)00050-8)



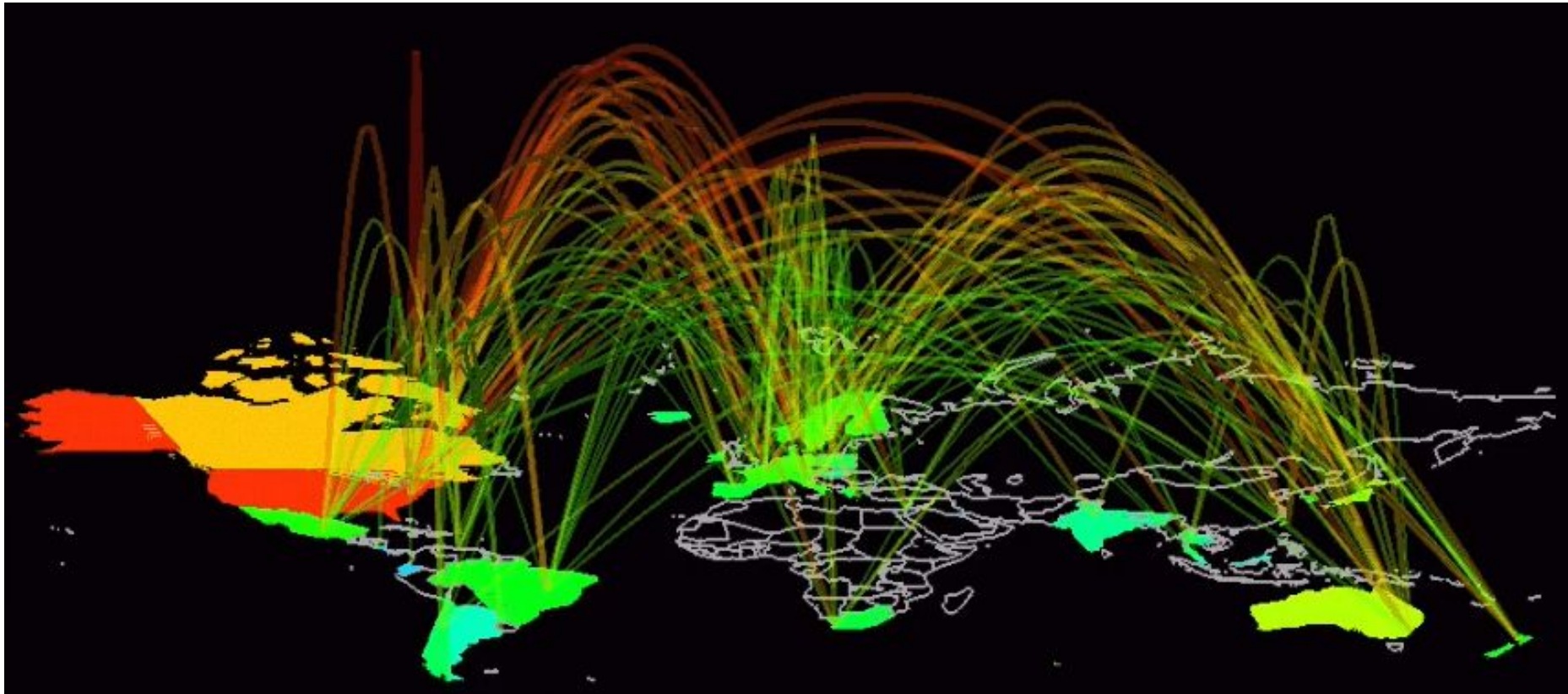
# Rede Neurais Artificiais

Aplicações para classificação ou p  
entre nós (interseções entre aven



# Rede Neurais Artificiais

Mas pra que usar abordagens baseadas  
Estrutura própria para representação  
relações.  
Facilita a modelagem do problema tal

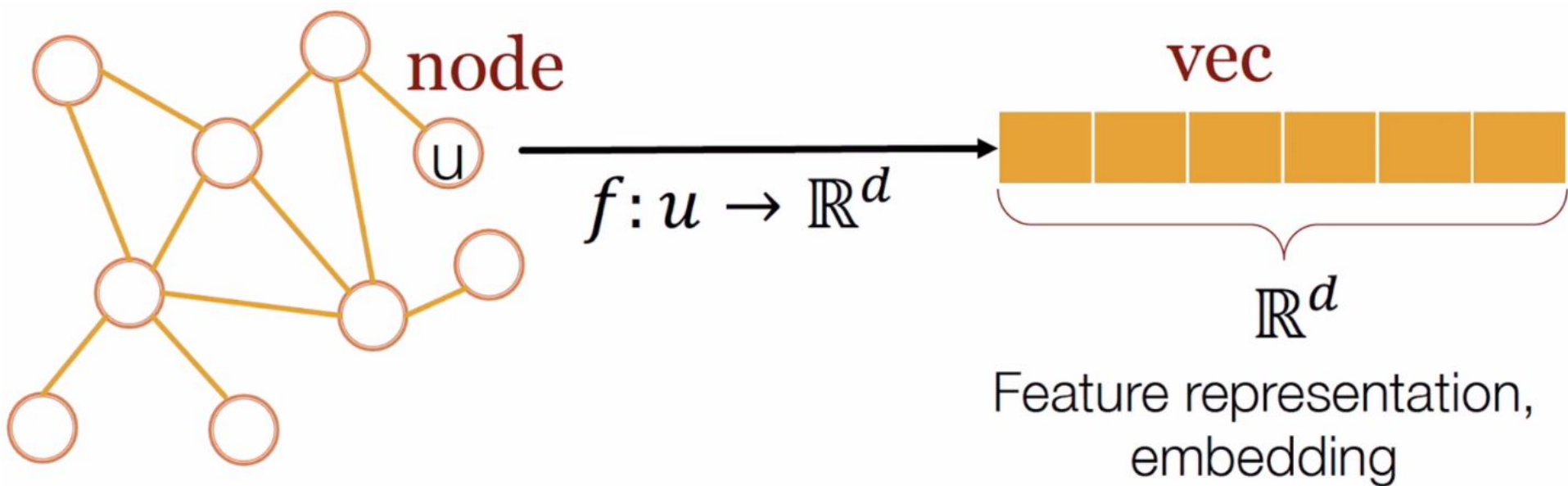


# Rede Neurais Artificiais

Portanto, a ideia de se utilizar modelagem de problemas visando matemáticas computacionais, vetoriais para o uso de algoritmos de aprendizagem no auxílio na tomada de decisão.

# Representação em Gráfico

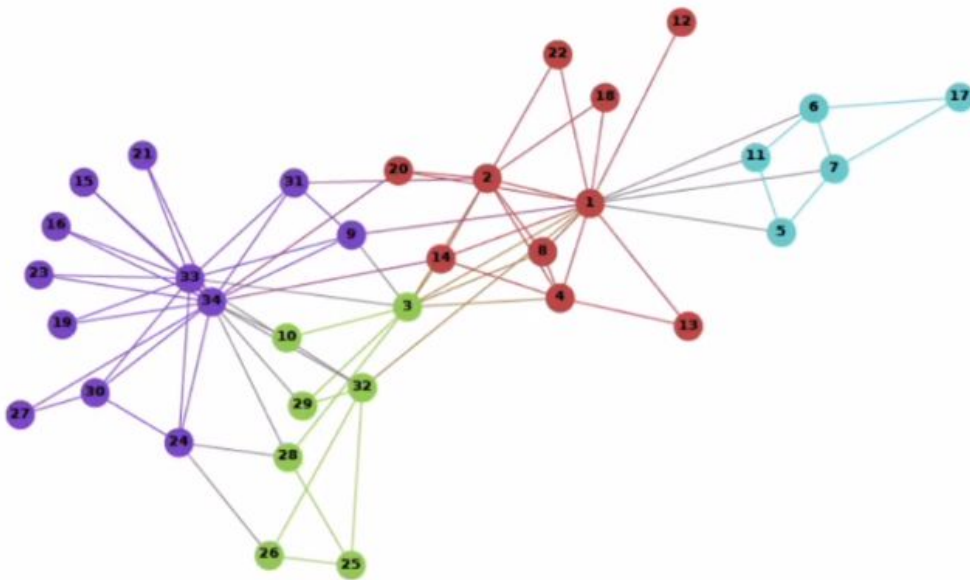
Representação em formato vetorial



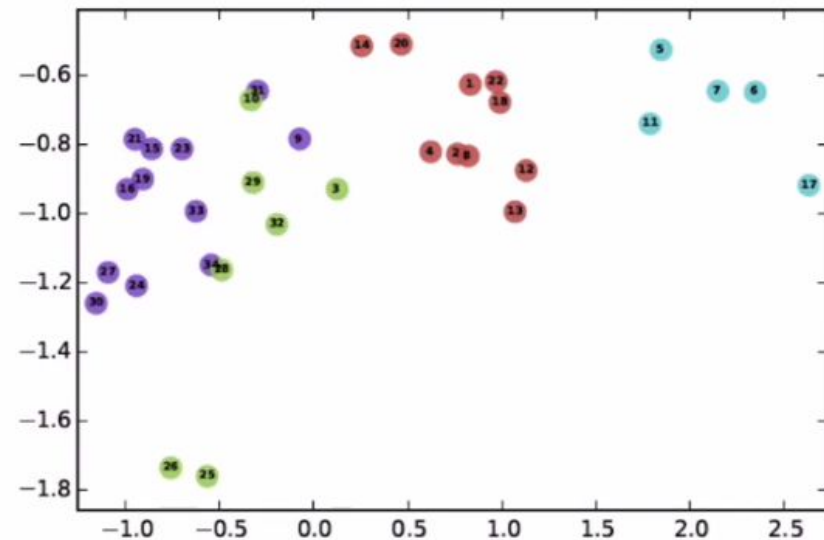


# Representação em Gráfico

Representações distribuídas dos nós  
A similaridade entre os nós indic



Gráfico

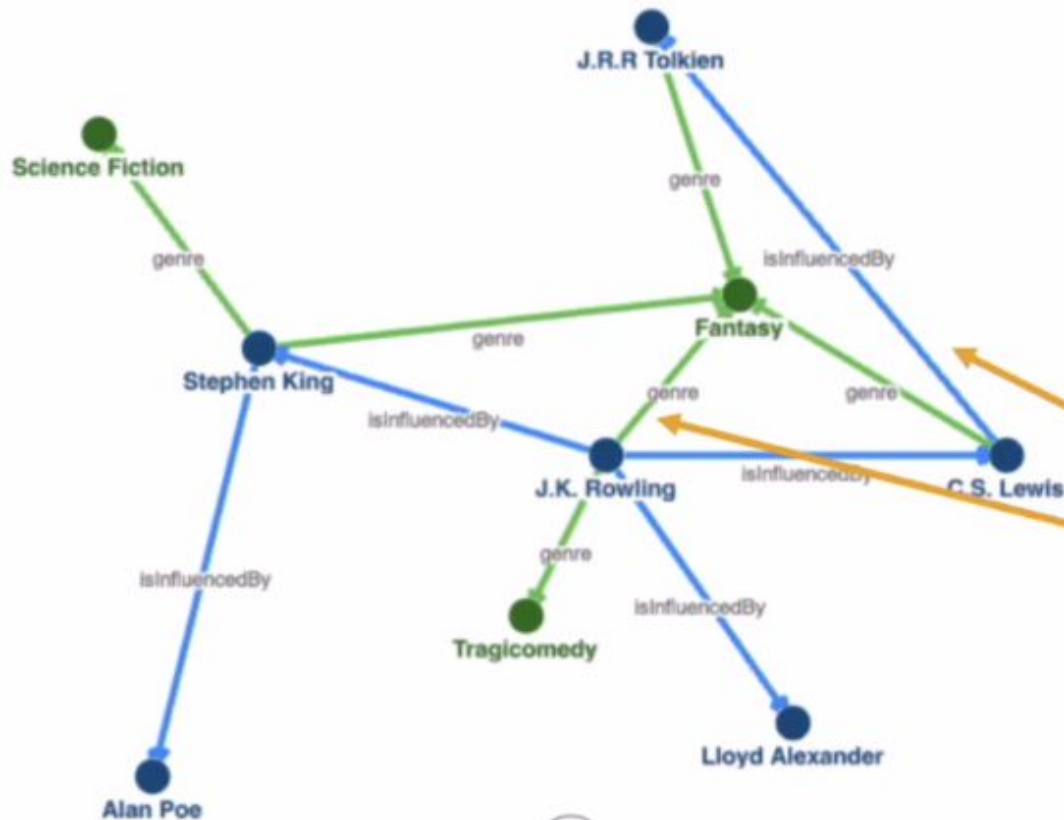


Espaço  
Euclidiano



# Predição de Arestas

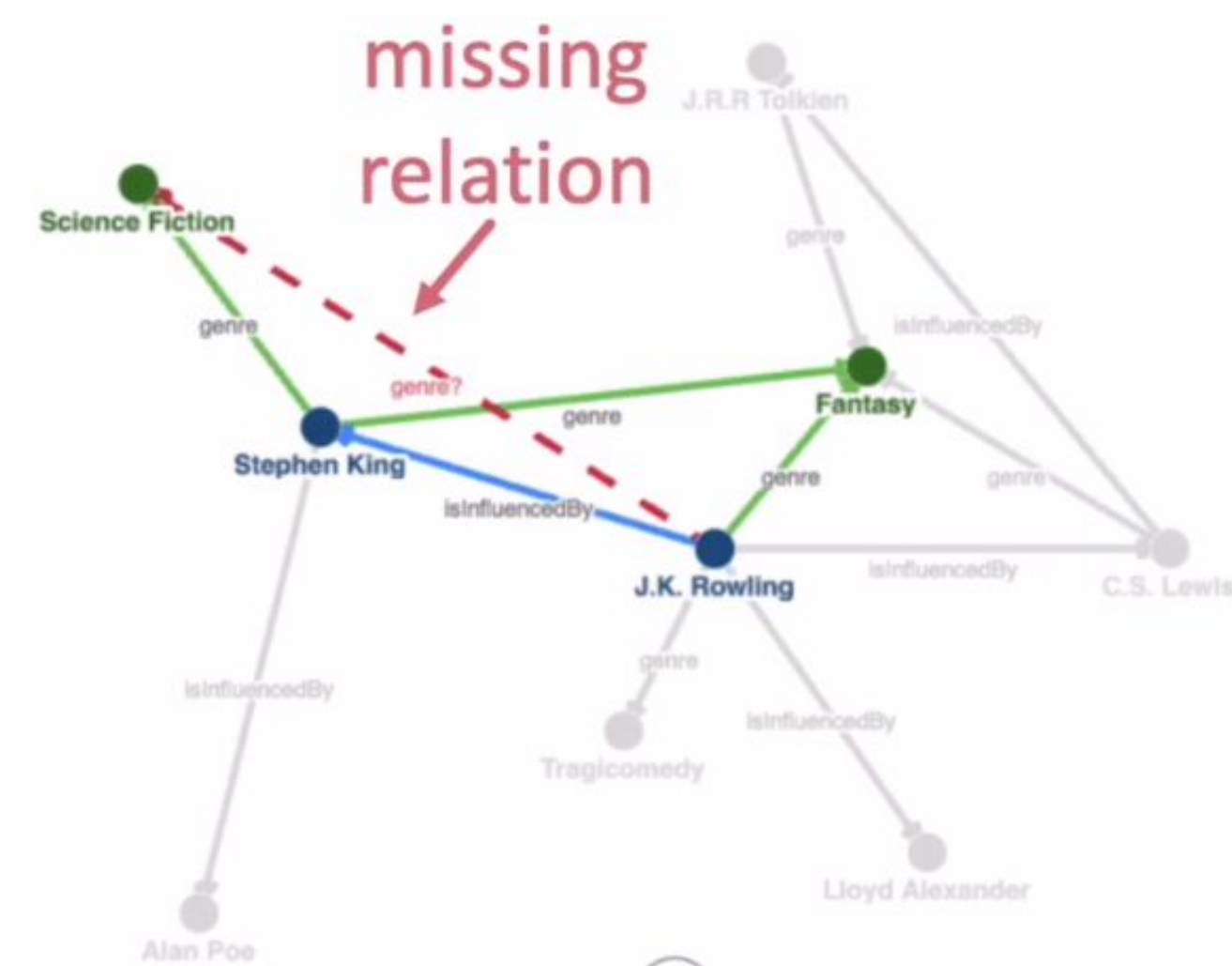
erre-Yves Vandenbussche



A knowledge graph is composed of facts/statements about inter-related entities

In KGs, edges can be of many types!

# Predição de Arestas



# Um Grafo

# Predição de Arestas

Um grafo é uma estrutura matemática conjuntos:

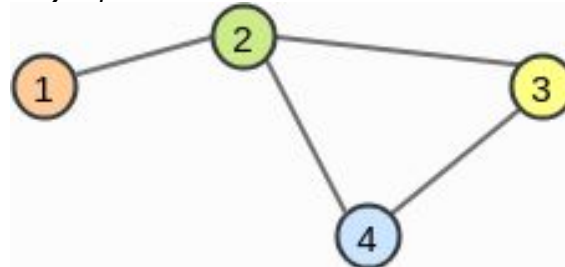
um conjunto chamado de vértices ( $V$ )

um conjunto chamado de arestas ( $E$ )

Cada aresta está associado a dois  
inicial da aresta e o segundo é a  
imaginar que um grafo é um mapa  
vértices são cidades e as arestas

Exemplo:

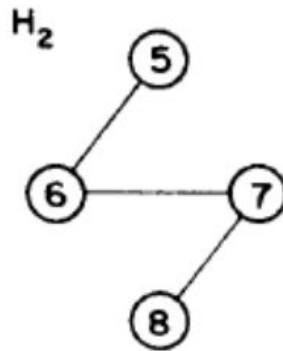
$G(V, E)$ , onde  $V = \{1, 2, 3, 4\}$  e  $E =$



# Predição de Arestas

Exemplos:

$H_2 (V, E)$ , onde  $V = \{5, 6, 7, 8\}$  e  $E =$



Exemplo de Grafo Direcionado:

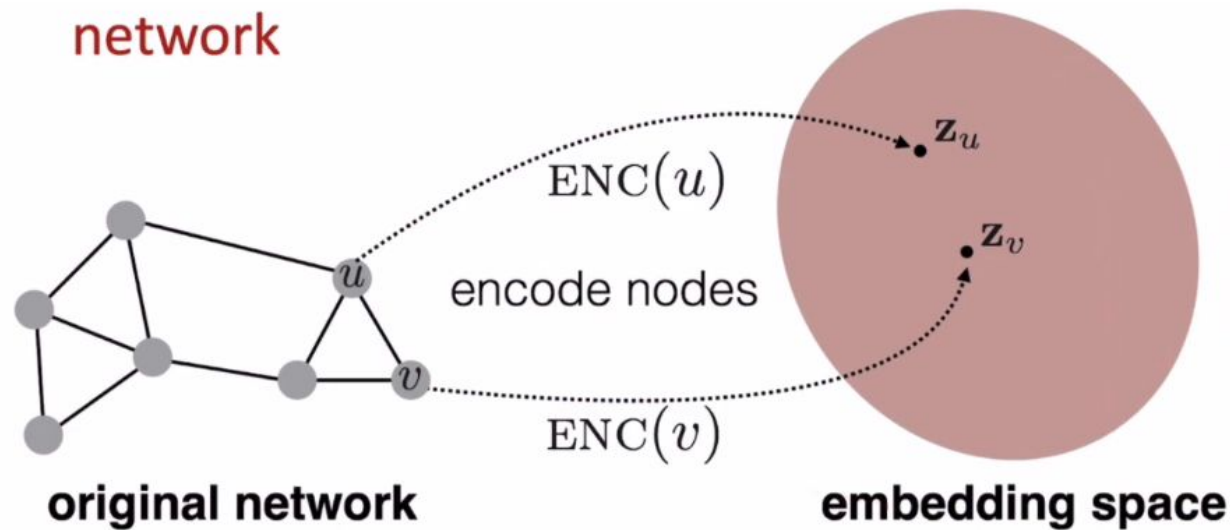
$G (V, E)$ , onde  $V = \{\text{Usuário}, \text{Produto}\}$



# A r e p r e s e n t a ç ã o e

# Representação em Gráfico

Representações distribuídas dos nós  
A similaridade entre os nós indic



$$\text{similarity}(u, v) \approx \mathbf{z}_v^\top \mathbf{z}_u$$

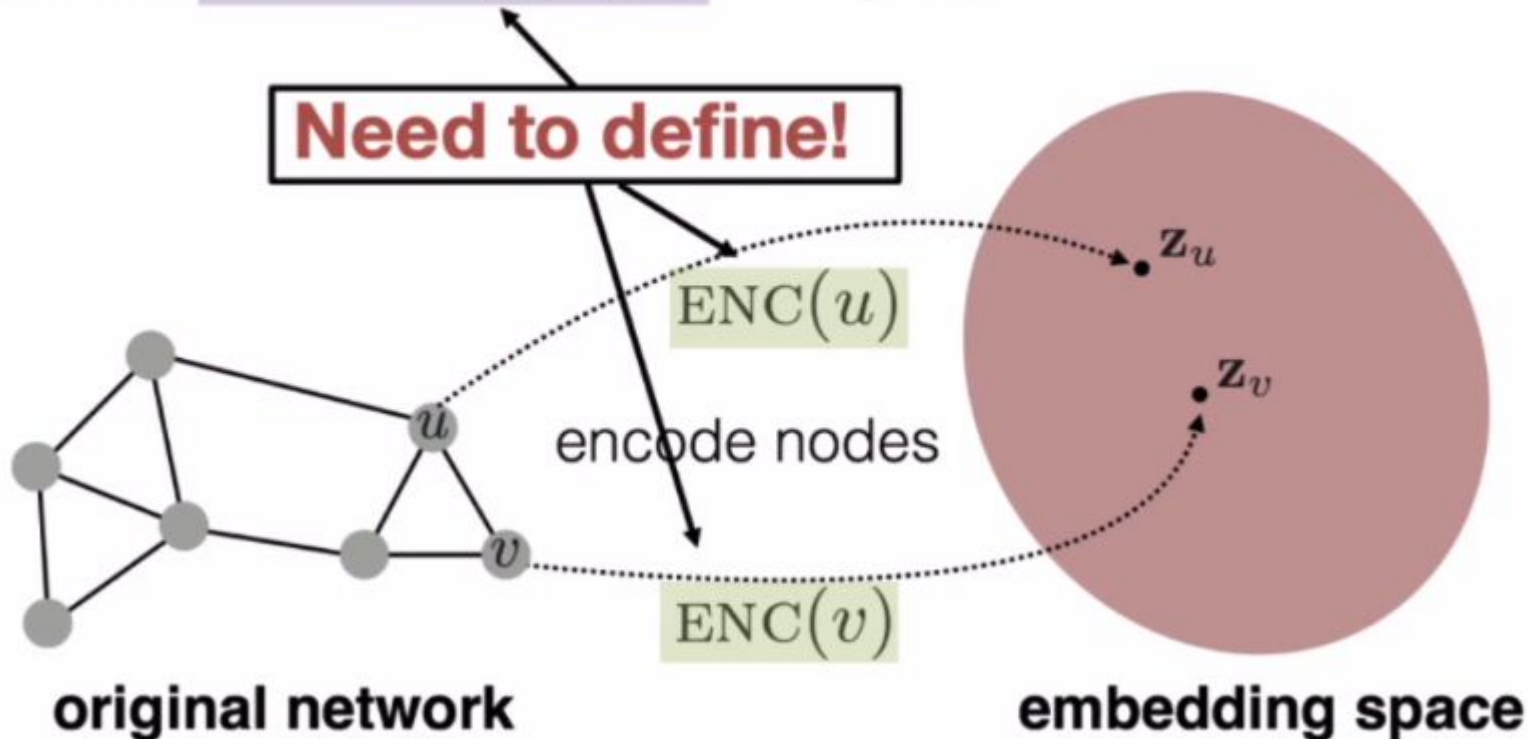
in the original network                      Similarity of the embedding

# Representação em Gráfico

Representações distribuídas dos nós  
A similaridade entre os nós indic

**Goal:**  $\text{similarity}(u, v) \approx \mathbf{z}_v^\top \mathbf{z}_u$

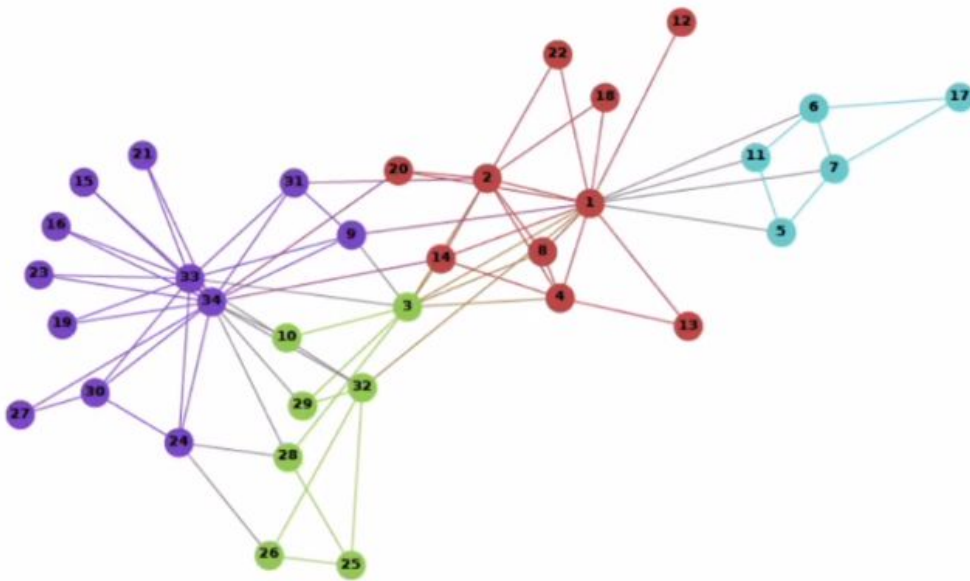
**Need to define!**



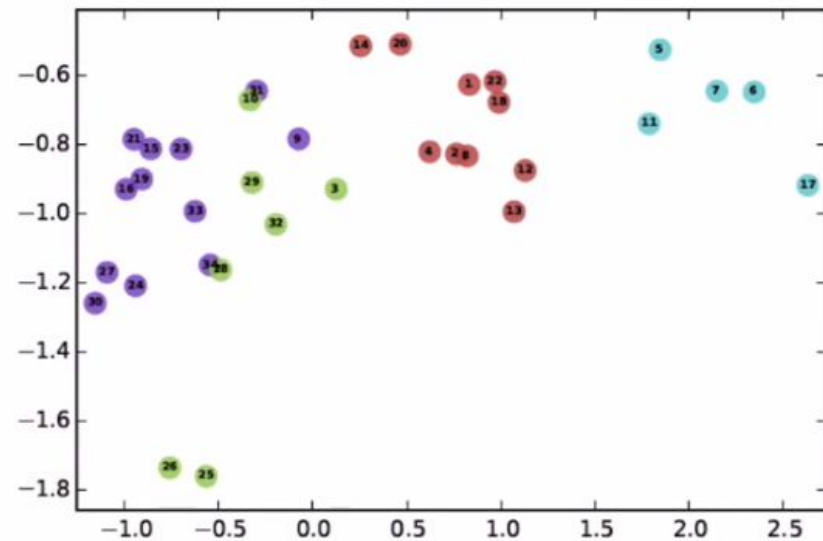


# Representação em Grafo

O objetivo é transformar os dados  
meio da codificação para um espaço



G r a f o



E s p a ç o  
E u c l i d i

# Representação em Grafo

Em geral, existem duas maneiras de a tarefa de codificação do nó em

“Shallow” Encoding (random walk)

DeepWalk

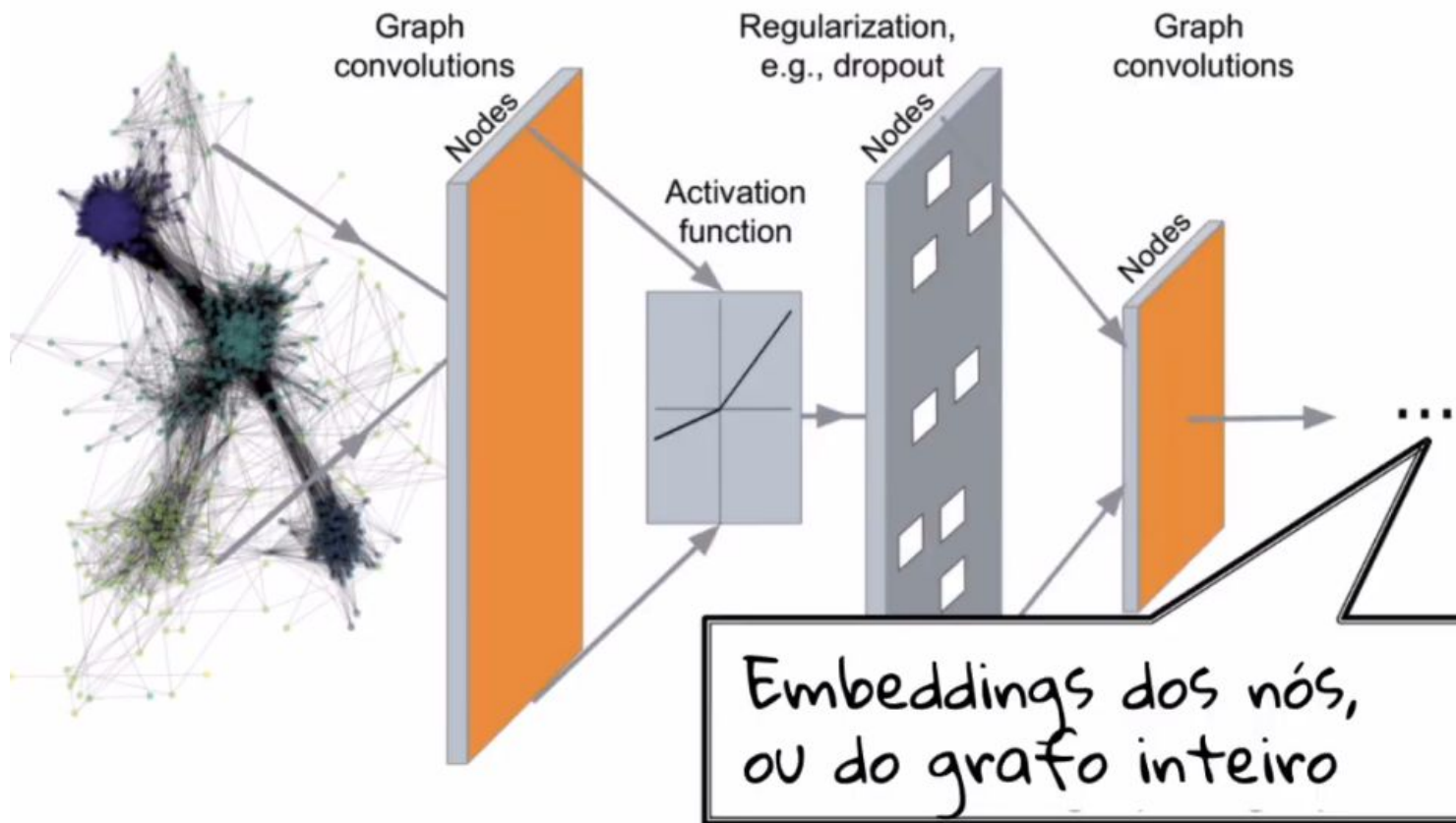
Node2vec

“Deep” Encoding (Modelos baseados  
Graph Neural Networks (GNN))

# G N N

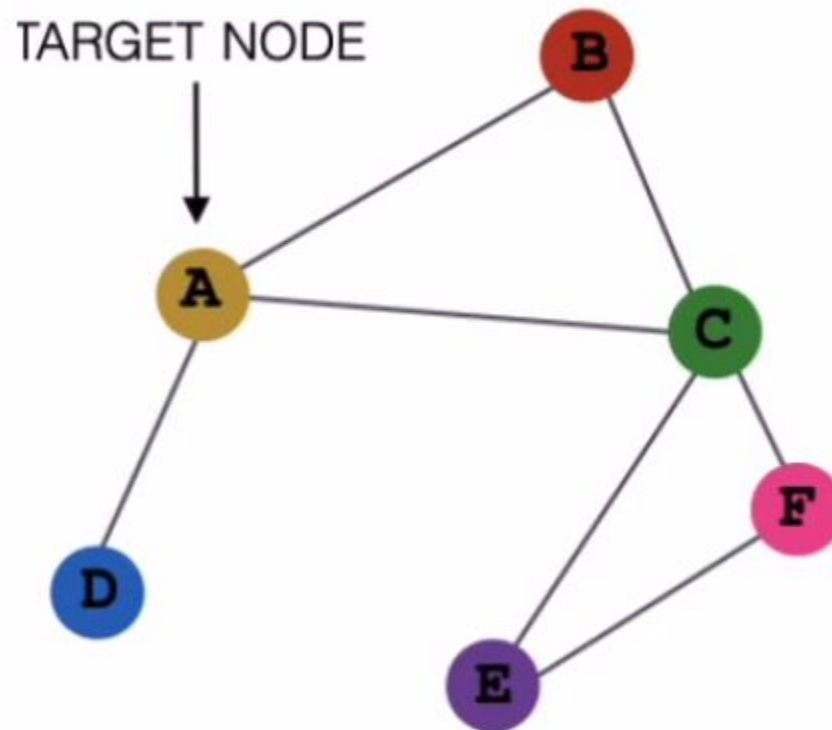
# G N N

Representações distribuídas dos n  
e representação multidimensional s  
rede neural.



# G N N

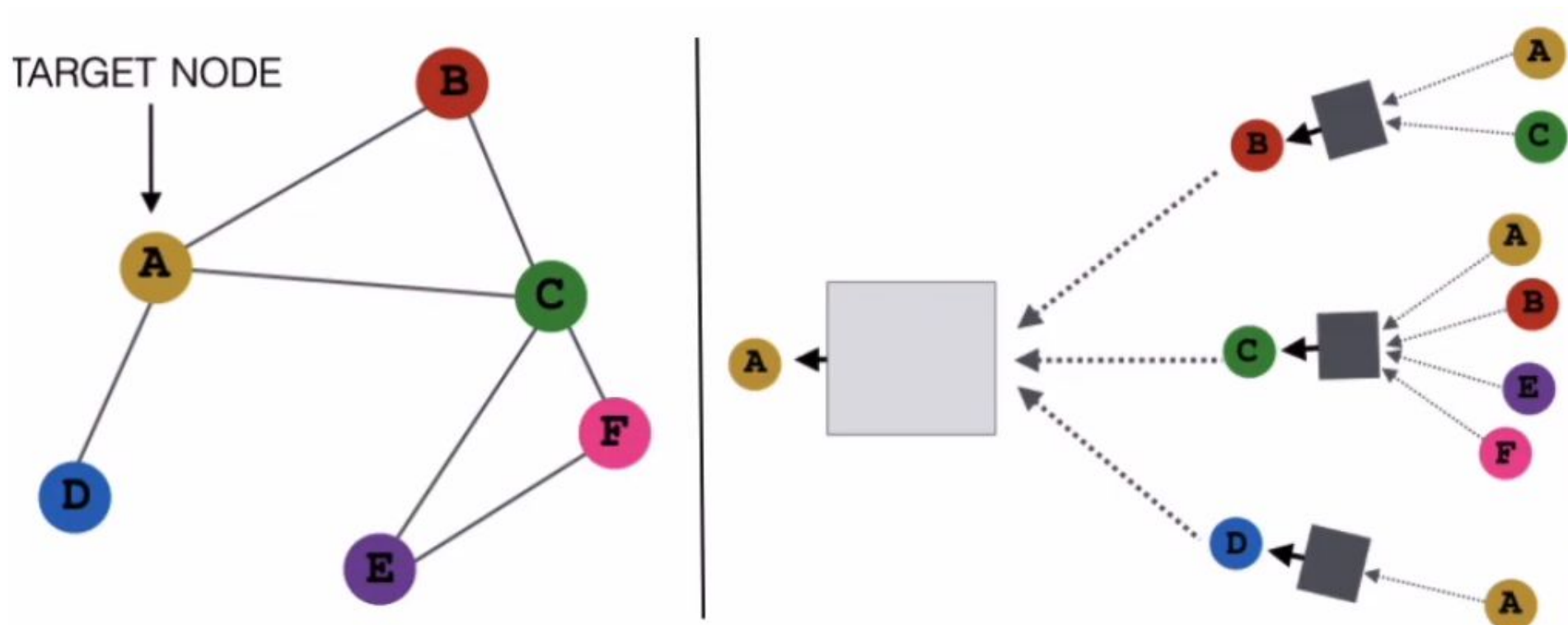
Por exemplo, se queremos representar contidas nos seus adjacentes B e consideradas.  
Ou seja, gerar representações par vizinhos.



# G N N

Por exemplo, se queremos representar contidas nos seus adjacentes B e consideradas.

Ou seja, gerar representações par vizinhos.



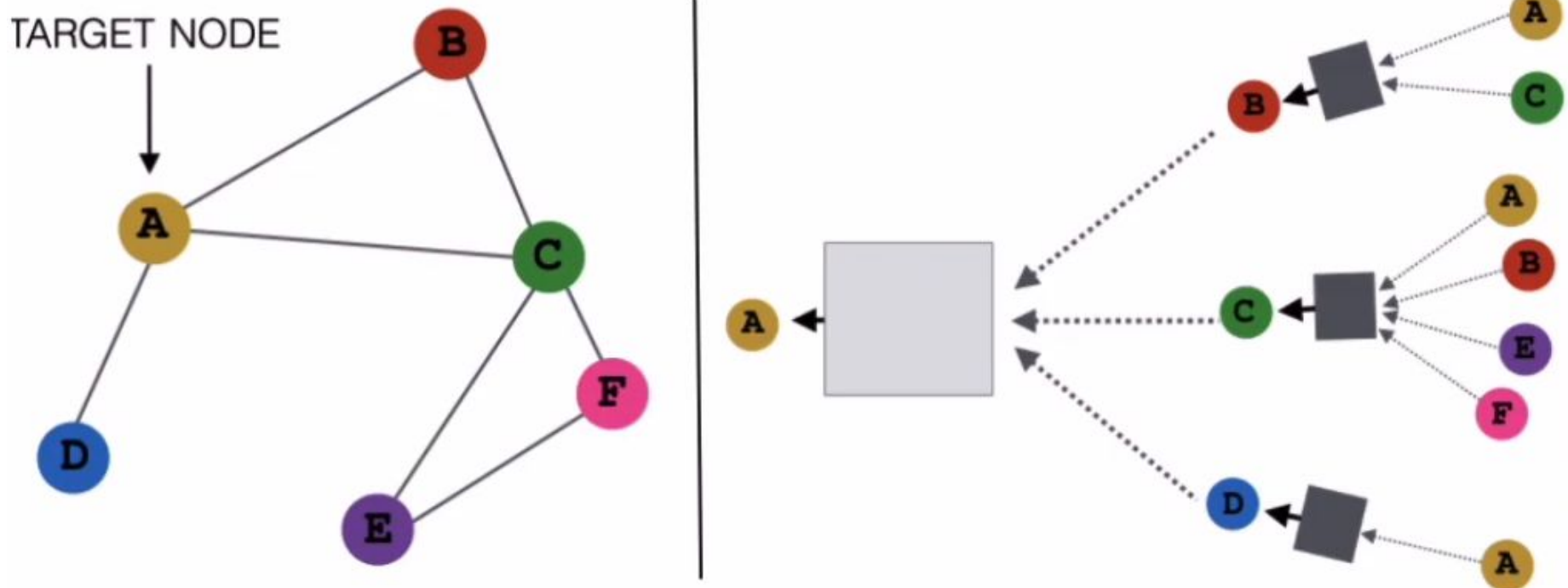
# G N N

A representação de A é dita reprehensive depende dos vizinhos imediatos (B dos "vizinhos dos vizinhos".

Vizinhos de B: C, A;

Vizinhos de C: A, B, E, F

Vizinhos de D: A

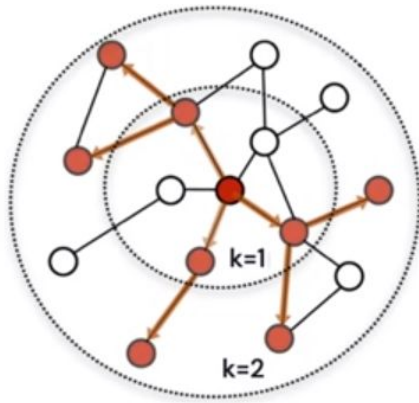


# G N N

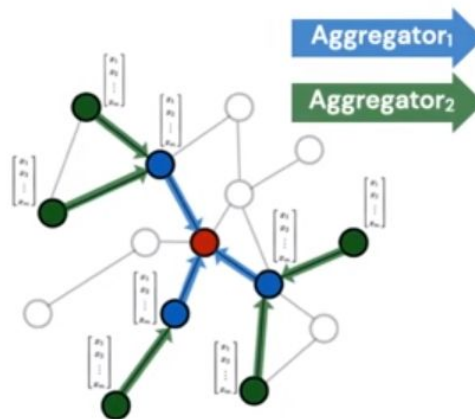
Duas operações fundamentais no contexto do "Message Passing" são:

Função de agregação.

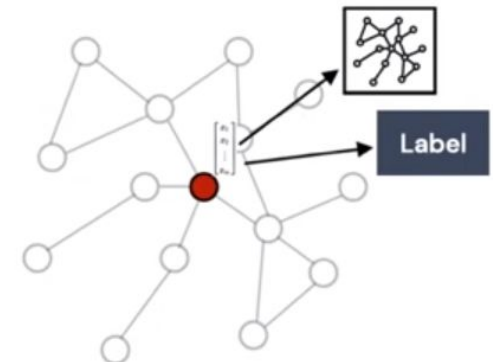
Função de atualização.



1. Sample neighborhood



2. Aggregate feature information from neighbors

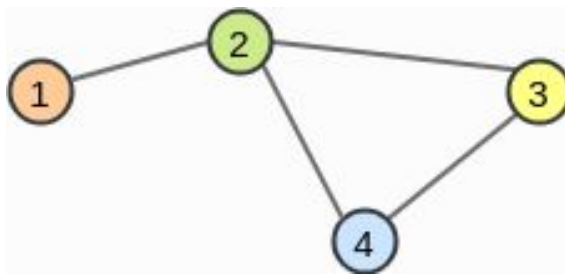


3. Predict graph context and label using aggregated information



# G N N

Visto de outro modo, um grafo onde nós / vértices, o mecanismo de re  
nós adjacentes.



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$



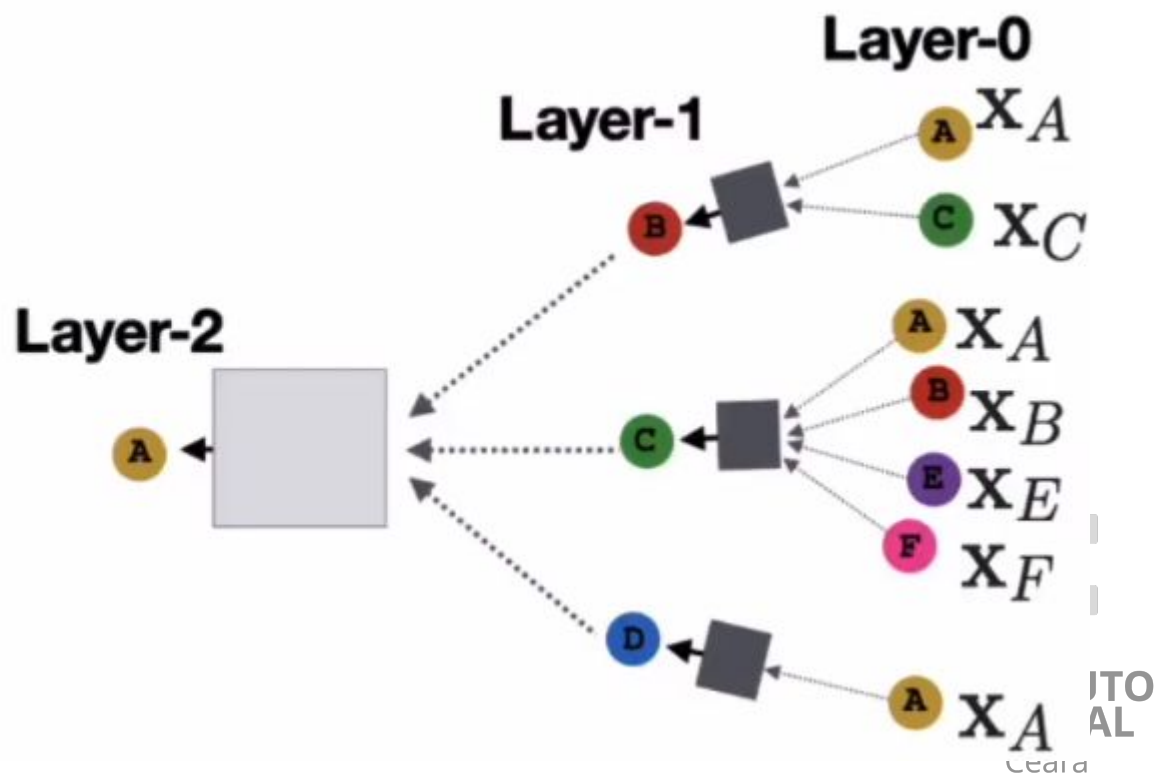
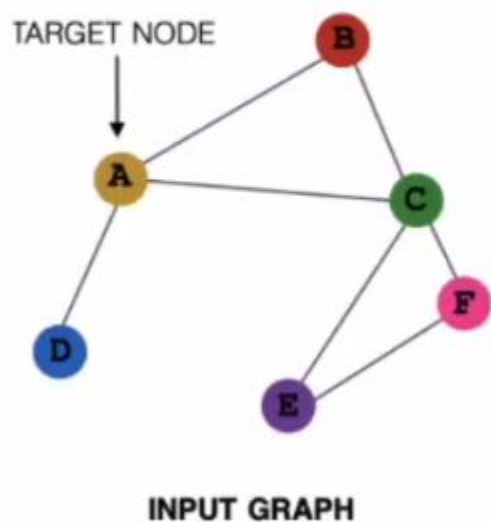
# G N N

A principal ideia do GNN é representar cada nó por meio da representação dos seus vizinhos respectivos.

A proposta é que cada nó seja representado por um vetor de informações originais e também por um vetor de informações originárias dos vizinhos, por proximidade ou conexão.

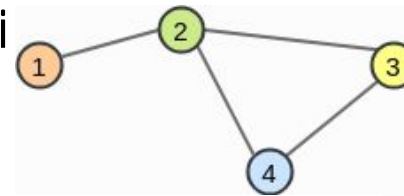
# GNN

Vizinhos de B: C, A;  
Vizinhos de C: A, B, E, F  
Vizinhos de D: A



# G N N

Assumindo que nosso grafo é não p  
podemos estabelecer sua represent  
adjacência simétrica



$$\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{A}_{ji} = \begin{cases} 1 & i \leftrightarrow j \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Nós podemos então agregar as info  
multiplicando tal matriz de adjac  
de transformação linear, além de

$$\mathbf{H}' = \sigma(\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{W})$$

# GNN - Representação na

Initial "layer 0" embeddings are equal to node features

$$\mathbf{h}_v^0 = \mathbf{x}_v$$

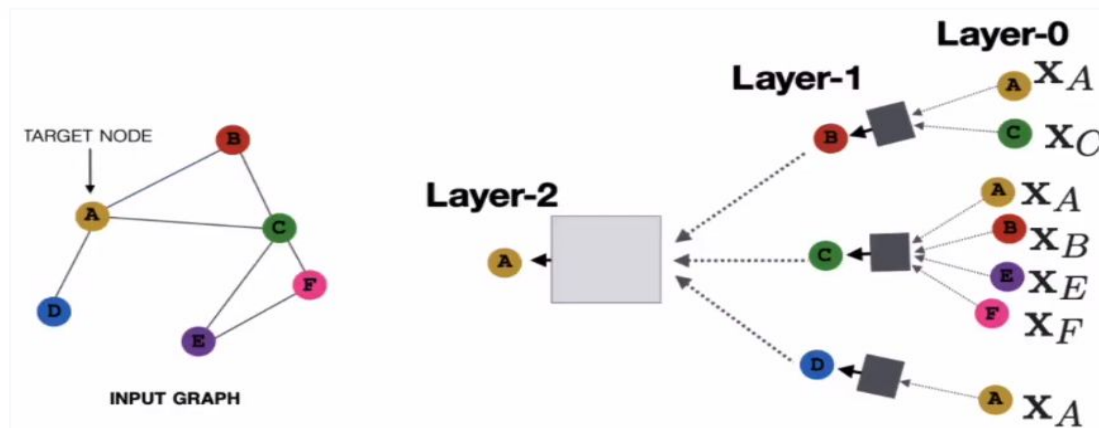
previous layer embedding of  $v$

$$\mathbf{h}_v^k = \sigma \left( \mathbf{W}_k \sum_{u \in N(v)} \frac{\mathbf{h}_u^{k-1}}{|N(v)|} + \mathbf{B}_k \mathbf{h}_v^{k-1} \right), \quad \forall k > 0$$

kth layer embedding of  $v$

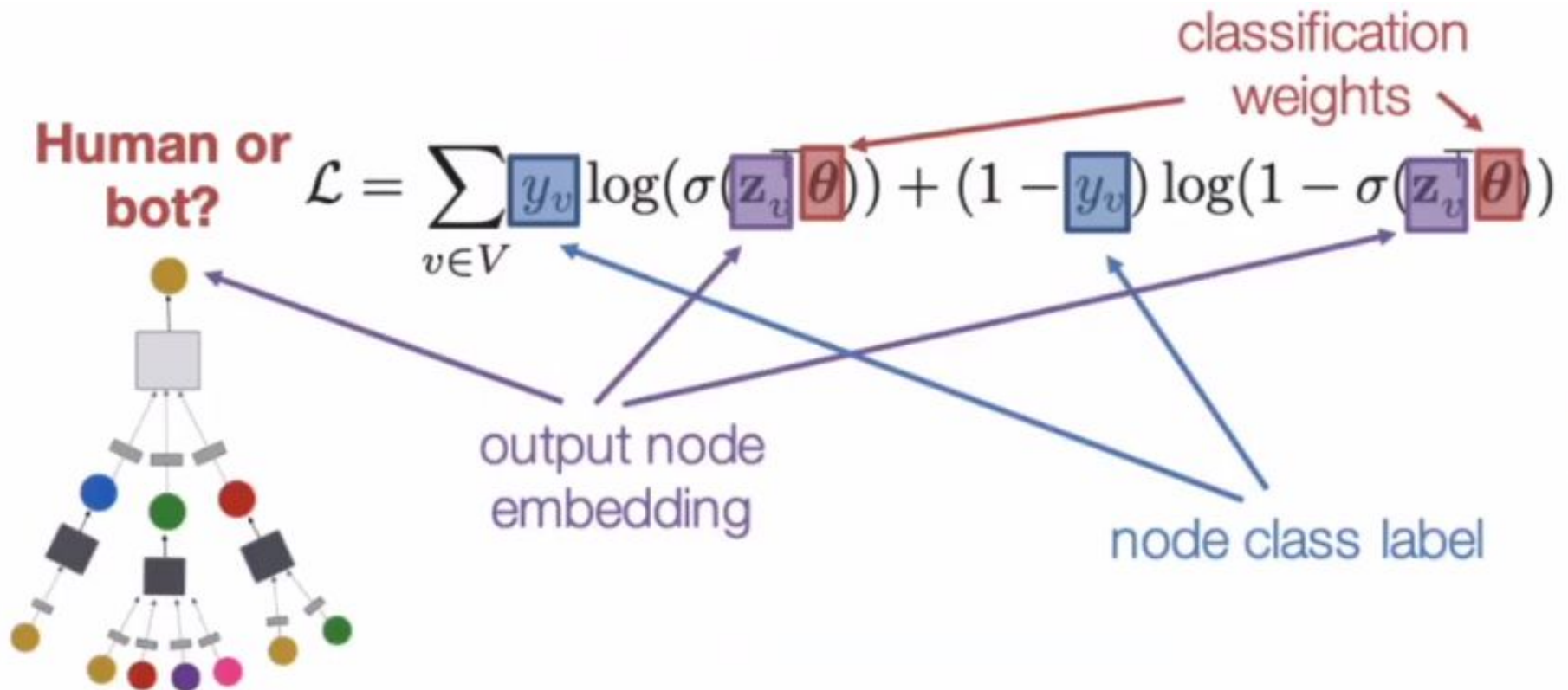
non-linearity (e.g., ReLU or tanh)

average of neighbor's previous layer embeddings



# GNN - Treinamento do m

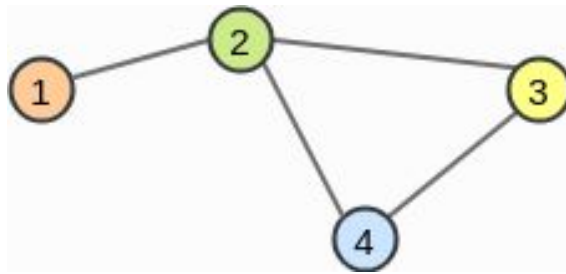
$$\text{BinaryCrossEntropy} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [y_i * \log(y_{pred}) + (1 - y_i) * \log(1 - y_{pred})]$$



# Graph Convolutional Ne

Dentro do contexto da representação de um grafo pode ser feita como sua matriz de adjacência. Considerando a representação em matriz, podemos tratar as mesmas tratativas que são dadas por imagens.

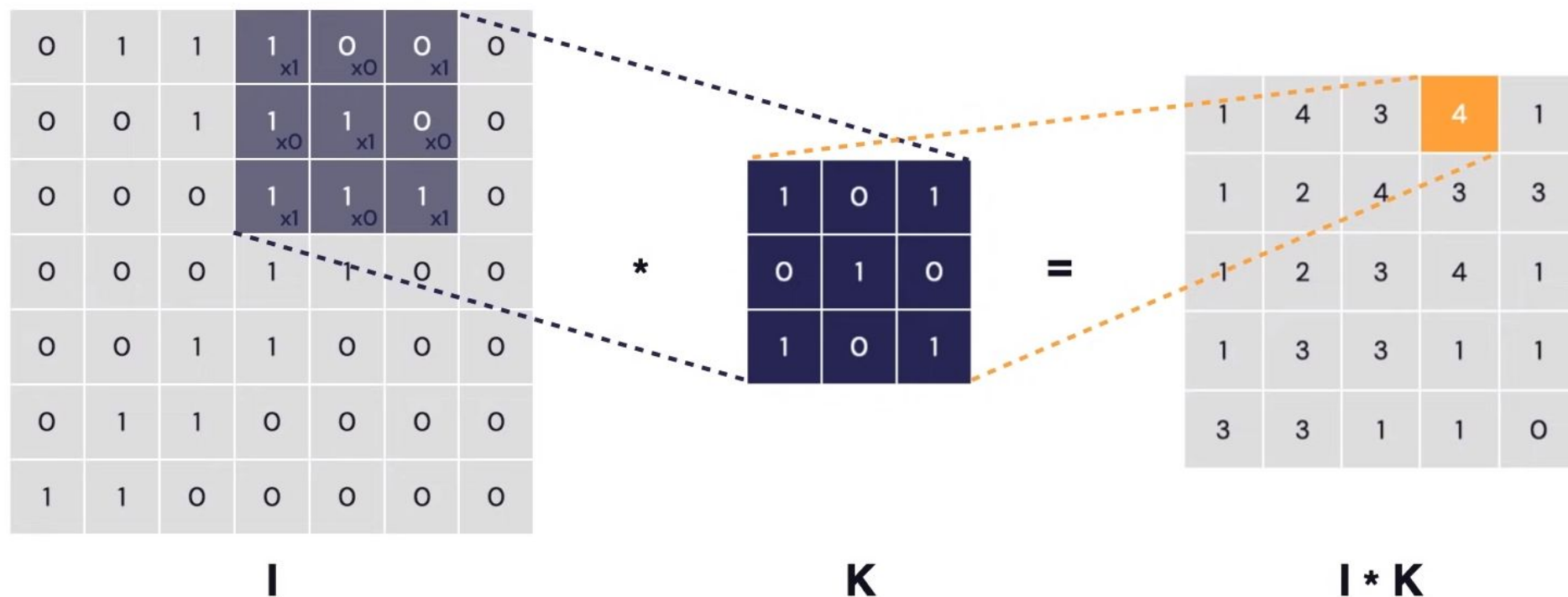
A matriz de adjacência é como se fosse a matriz de pesos do grafo. Os nós do grafo são como se fossem pixels. As relações de adjacência entre nós são como se fossem as relações de adjacência entre "pixels".



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

# G N N

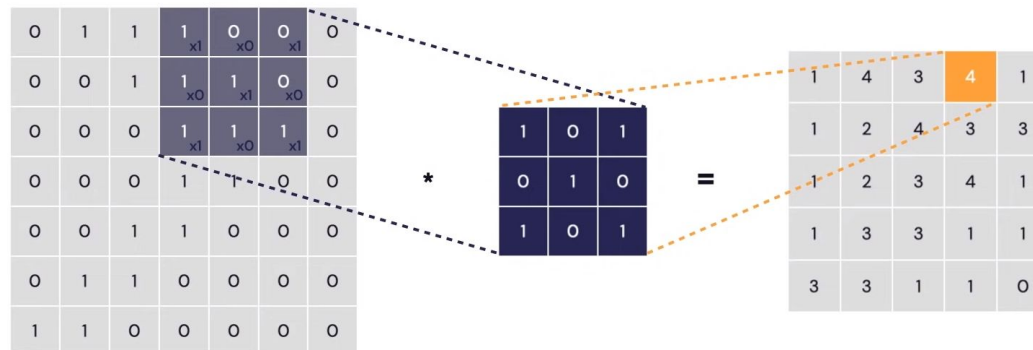
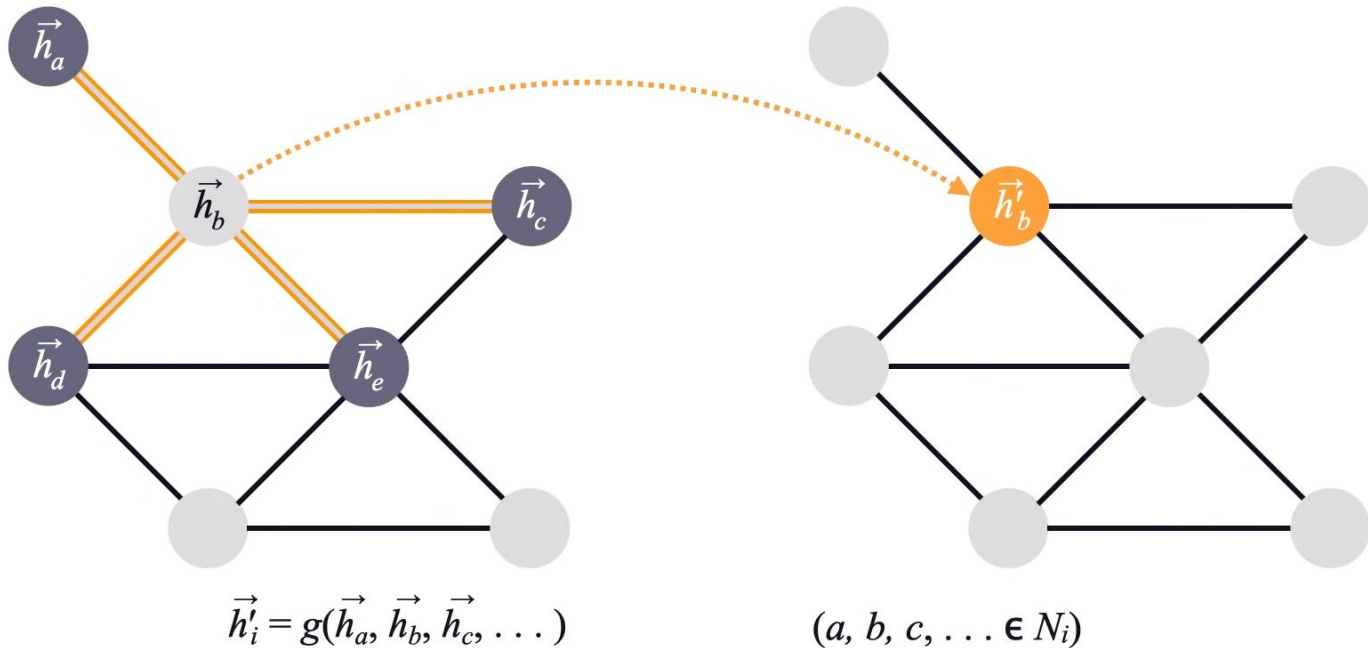
Convolções em imagem.





# G N N

## Convoluções em grafo.



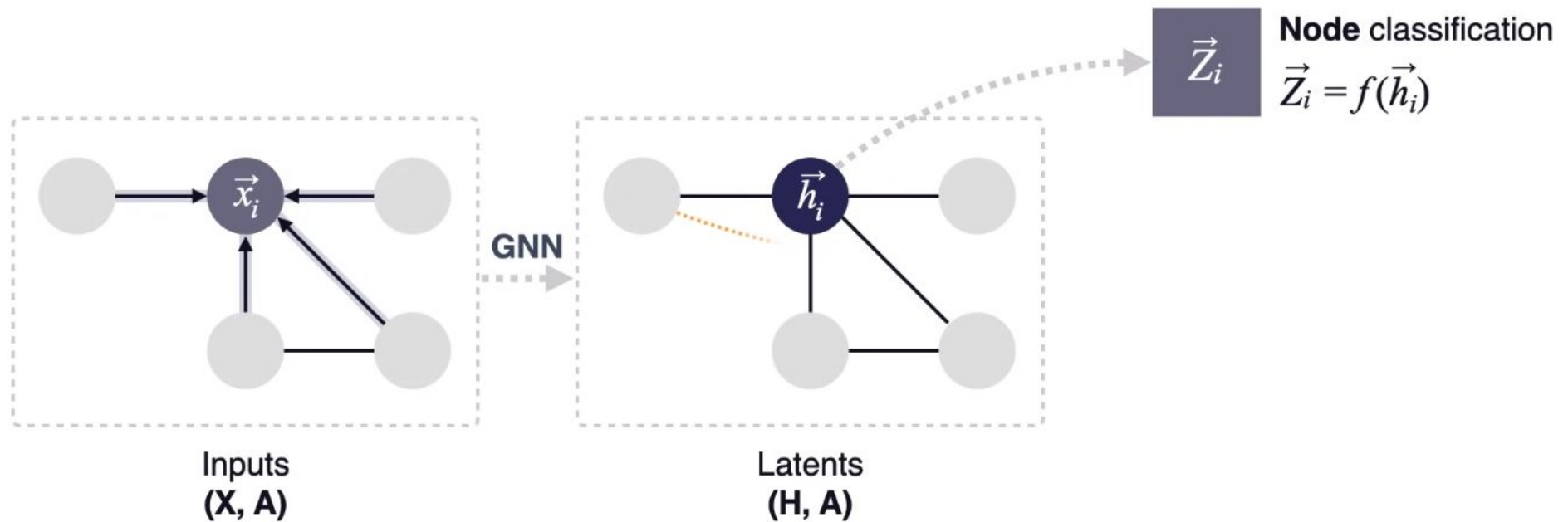
# G N N

A proposta das CNNs consideram o para extrair representações espaciais. O mesmo operador se torna apropriado para a operação de convolução para grafos. Algumas propriedades:

- Armazenamento e Custo eficiente  $O(n^2)$  na memória.
- Número fixo de parâmetros não dependentes do tamanho da entrada.
- Localização em vizinhança local do nó.
- Especificidade: os pesos são importantes, a vizinhança é vista, vizinhos próximos contribuem mais para a definição do novo valor do nó.

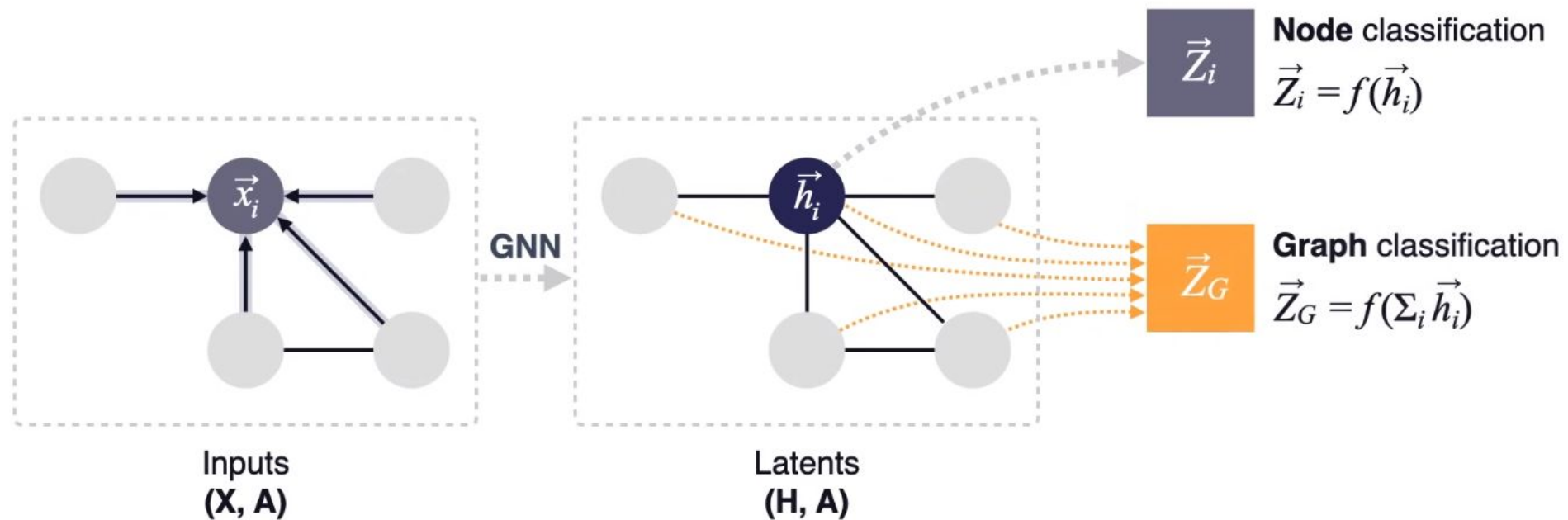
# G N N

Classificação o/ de vértices



# G N N

Classificação de nós / vértices.  
Classificação de

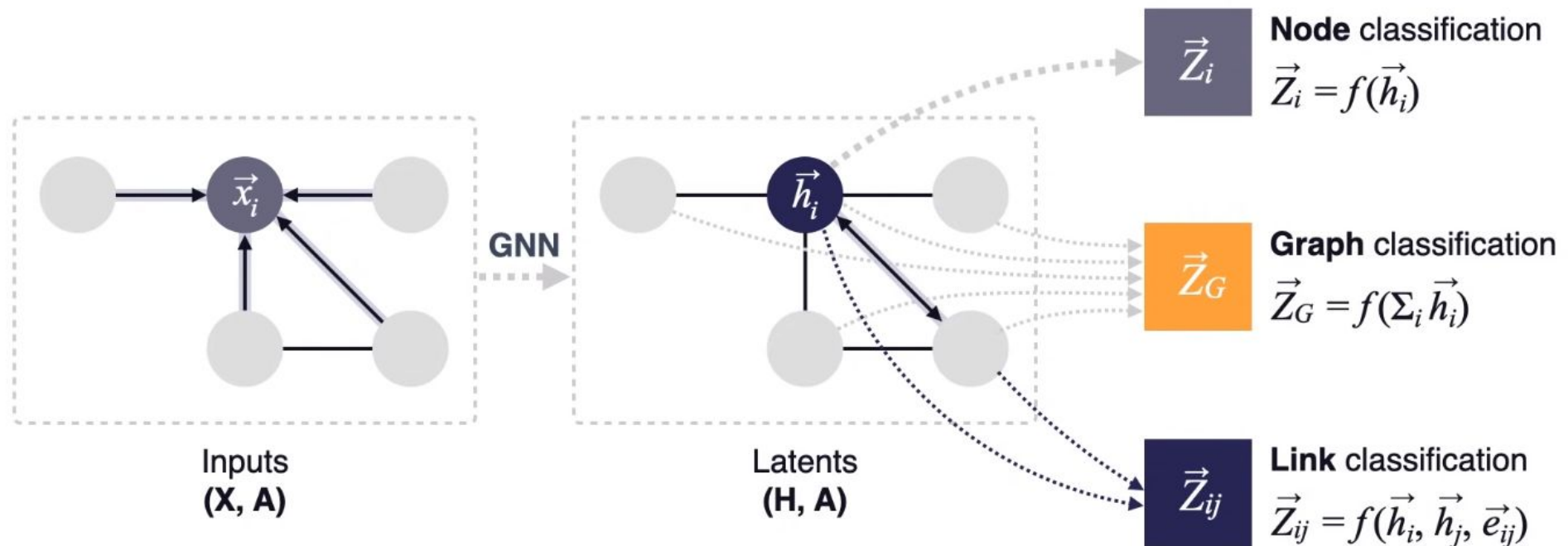


# G N N

Classificação de nós / vértices.

Classificação de grafos.

Classificação de arestas.



D ú v i d a s ?

# Prática no COL

O b r i g a d o p e l a a

D ú v i d a s ?