

Vers un noyau de graphes efficace basé sur l'entropie

Aymen Ourdjini*, Abd Errahmane Kiouche**, Hamida Seba**

* Ecole nationale Supérieure d'Informatique (ESI) Oued Smar Alger Algérie
ga_ourdjini@esi.dz,
<https://www.esi.dz/>

** Université de Lyon, Université Lyon 1, LIRIS UMR 5205 F-69622 France
{abd-errahmane.kiouche, hamida.seba}@univ-lyon1.fr

1 Introduction

Les noyaux de graphes sont des algorithmes d'apprentissage automatique supervisé sur les graphes. Ils sont particulièrement appréciés pour leur efficacité en terme de précision. Cependant, la majorité des noyaux de graphes proposés dans la littérature ne sont pas assez rapides. Pour y remédier, nous proposons dans ce travail, un nouveau noyau de graphes basé sur le concept d'entropie. Notre méthode étend un noyau de graphes existant basé sur l'entropie de Rényi (Xu et al., 2021). Dans un graphe, l'entropie mesure la quantité d'information stockée dans un graphe. Ce qui revient à quantifier la complexité et le niveau d'organisation des caractéristiques structurelles de celui-ci. Le noyau qu'on propose améliore la précision du noyau de Xu et al. (2021) tout en réduisant son temps de calcul. Nos principales contributions sont :

- Nous avons remplacé l'entropie de Rényi par l'entropie de Von Neumann (Minello et al., 2019) pour tenir compte à la fois des relations de voisinage et de la distribution des degrés. Ce qui nous permet d'améliorer la précision du noyau ;
- Notre noyau tient également compte des informations auxiliaires portées par les nœuds comme les attributs ou les étiquettes (types) ;
- Nous proposons une nouvelle stratégie de calcul des scores de similarité entre deux graphes qui a la particularité d'être plus rapide ;
- Notre noyau proposé est parmi les plus rapides en terme de temps d'exécution ;

2 Notre noyau de graphes

Dans ce travail, nous proposons un nouveau noyau de graphe basé sur l'entropie de Von Neumann (Minello et al., 2019). Contrairement à la méthode de Xu et al. (2021), notre noyau est applicable sur les graphes étiquetés ou attribués. Notre méthode prend en entrée deux graphes étiquetés ou attribués. La première étape consiste à extraire le sous-graphe induit du voisinage de chaque nœud dans les deux graphes. Ensuite, nous calculons le score d'entropie de chaque nœud dans les deux graphes en appliquant l'entropie de Von Neumann (Minello et al., 2019) et en tenant compte des types (étiquettes) ou des attributs des nœuds. La dernière