IFT870/BIN710
Forage de données

Thème 6 : Forage de données de graphe

Davy Ouedraogo
Département d'informatique

Inspiré des notes de cours de Pre Aida Ouangraoua

Données sous forme de graphes

- Réseaux sociaux
- Structures moléculaires/biochimiques (protéines, ARN, complexes moléculaires)
- Réseaux d'expression génique
- Composés chimiques
- Graphes de flot de contrôle
- Graphes d'attaques en sécurité informatique
- Réseaux de communication

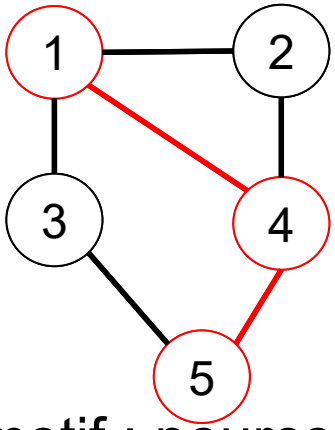
Forage de données de graphe

- Recherche de motifs
  - Fréquents
  - Discriminatifs : score de Fisher, variance
  - Recherche avec contrainte
- Classification de graphes
  - Basée sur des vecteurs d'attributs (**Exemple** : motifs fréquents)
  - Basée sur des distances (**Exemple**: distance d'édition)
- Partitionnement/Compression de graphes

Recherche de motifs fréquents

- Séquences de transactions:
  Ensemble de graphes $G_i=(V_i,E_i)$, $1<=i<=n$ tel que V_i est l'ensemble des sommets de graphe G_i et E_i est l'ensemble des arêtes du graphe

- Un motif à k-arêtes de G_i est un sous-graphe connexe de G_i contenant *k* arêtes
  - Exemple: si V_i = {1,2,3,4,5} et E_i = {(1,2),(1,3),(1,4),(2,4),(3,5),(4,5)}, G=({1,4,5}, {(1,4),(4,5)}) est un 2-arêtes de $G_i=(V_i,E_i)$



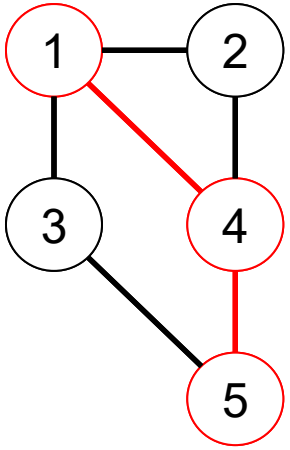
- Score d'un motif : pourcentage de graphes le contenant dans l'ensemble de graphes.
- Étant donné un seuil *min_score*, un motif est fréquent si son score est supérieur ou égal à *min_score*.

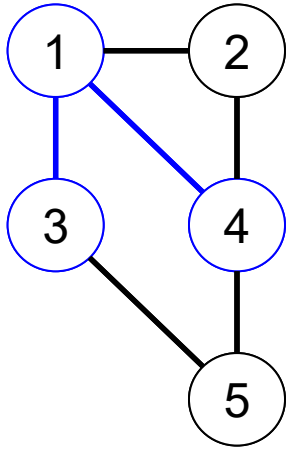
Recherche de motifs fréquents

- Algorithmes qui explorent l'espace de recherche de façon intelligente, en tenant compte de sa structure suivant différentes techniques
  - Génération des motifs candidats (k-arêtes ➔ (k+1)-arêtes)
    - A-priori ou expansion de motifs
  - Ordre d'expansion/de recherche
    - En largeur ou en profondeur
  - Suppression des candidats dupliqués
  - Ordre de découverte
    - Ordre de génération
    - Chemin, arbre, graphe

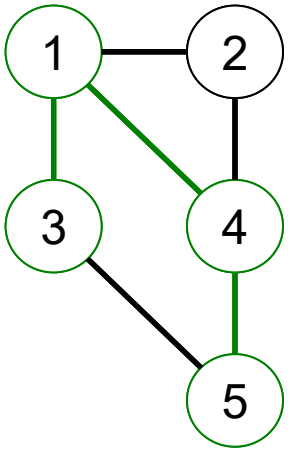
Génération des motifs candidats
(k-arêtes ➔ (k+1)-arêtes)

A-priori: si un motif est fréquent, alors tous ses sous-motifs sont fréquents.





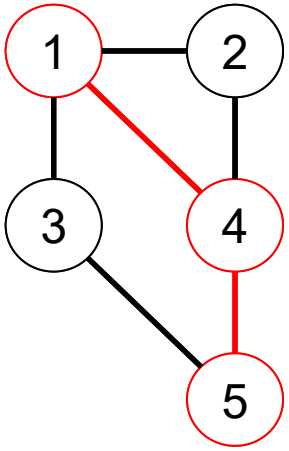
➔



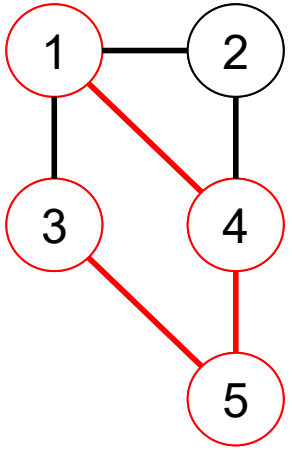
Jointure de deux k-arêtes partageant k-1 arêtes

un (k+1)-arêtes

Expansion: ajouter une arête à un k-arêtes pour obtenir un (k+1)-arêtes



➔

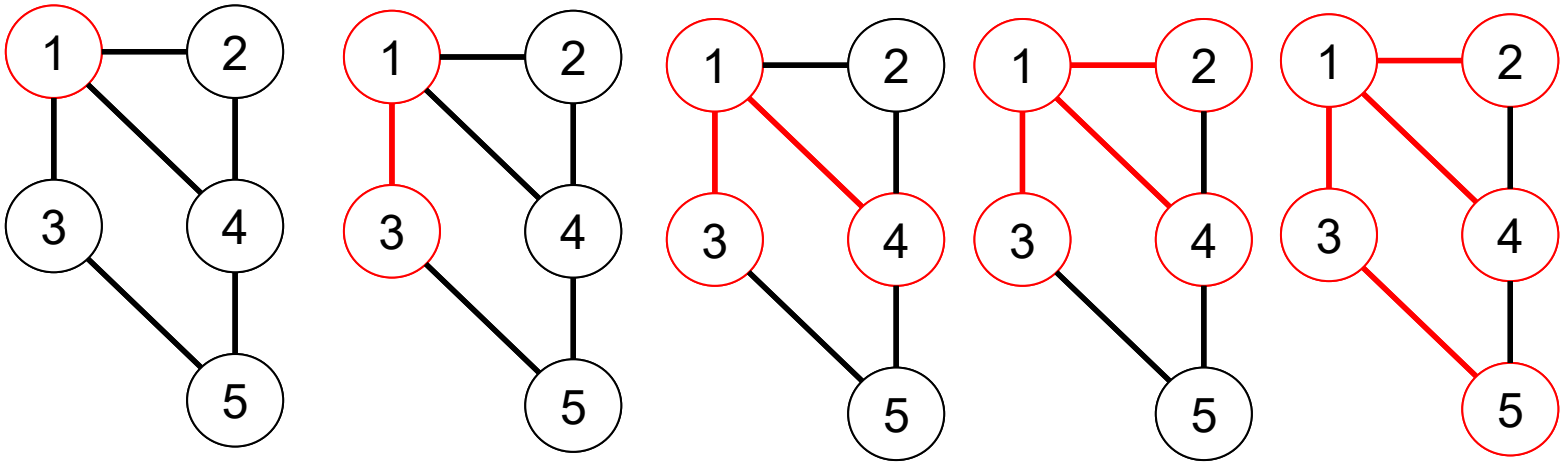


un k-arêtes partageant k-1 arêtes

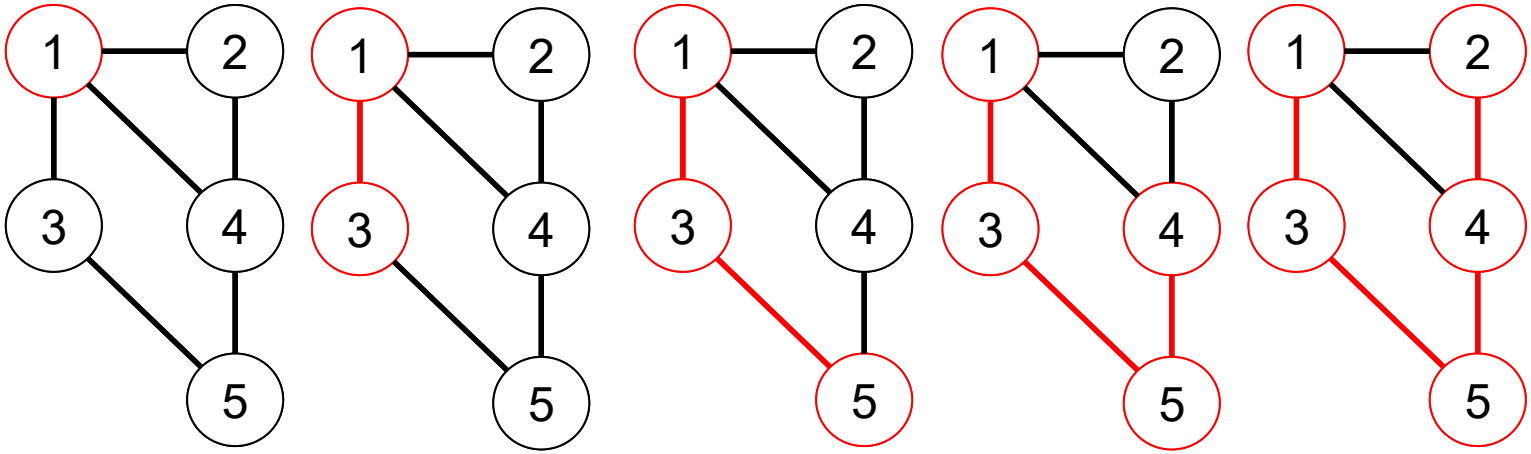
un (k+1)-arêtes

Ordre d'expansion

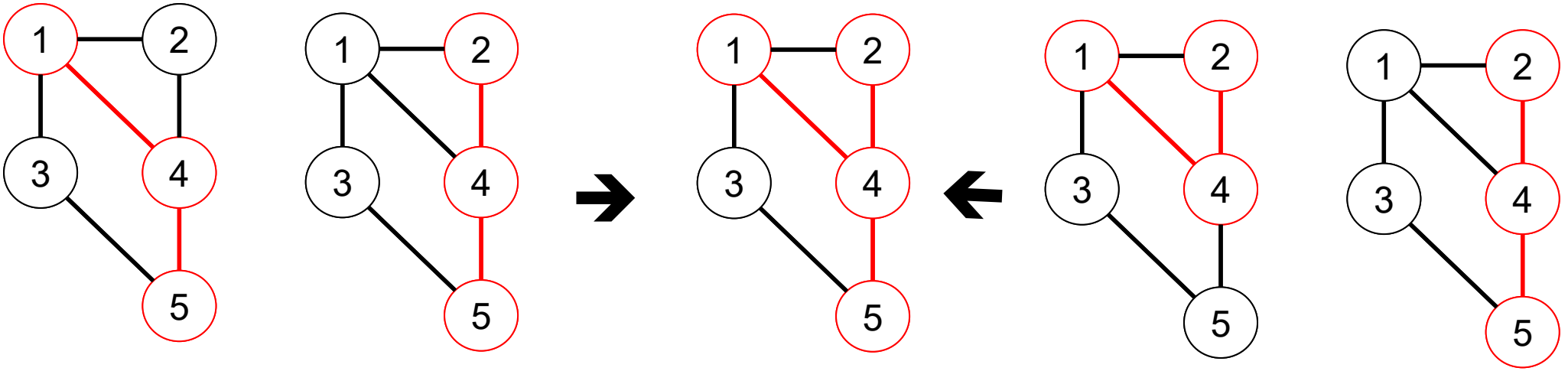
En largeur: ajouter tous les voisins d'un sommet avant d'ajouter les voisins de ces voisins



En profondeur: ajouter un voisin du dernier ajouté qui ait encore des voisins non visités

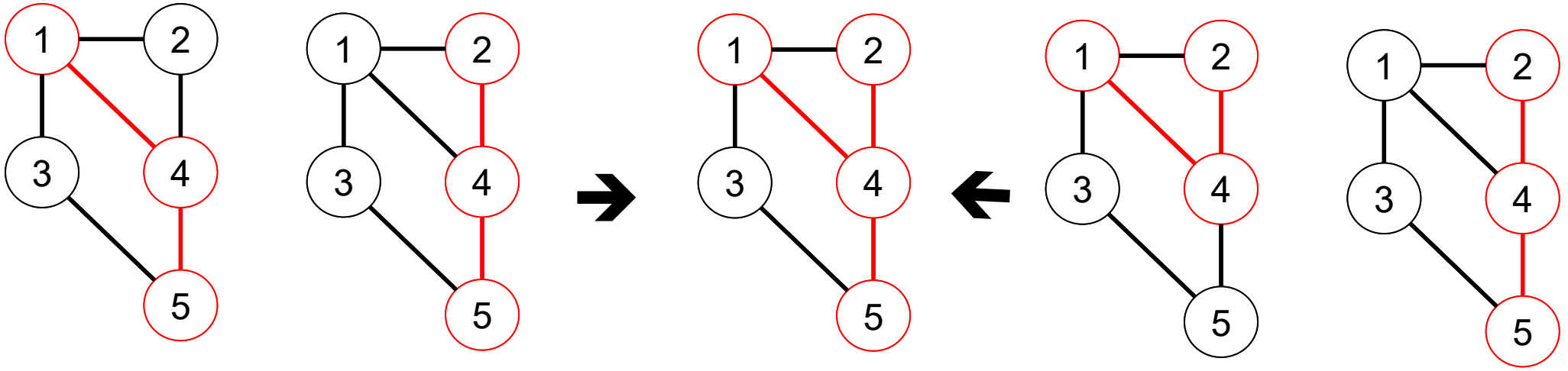


Suppression des candidats dupliqués



Un motif peut être généré plusieurs fois. Exemple: avec a-priori.
Il faut supprimer les dupliqués pour ne pas refaire les même calculs plusieurs fois

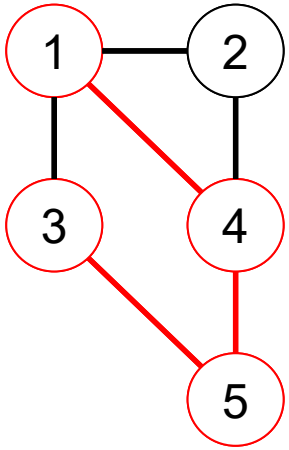
Suppression des candidats dupliqués



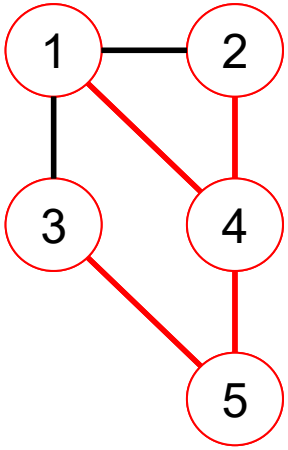
- Solution 1: comparer chaque nouveau motif à tous les motifs de même taille déjà généré (isomorphisme de graphe) ➔ couteux en temps
- Solution 2: utiliser une fonction de hachage pour associer à chaque motif un identifiant, et comparer uniquement les identifiants
- Solution 2: définir un ordre sur l'ensemble des motifs de même taille et générer les motifs dans cet ordre.

Ordre de découverte

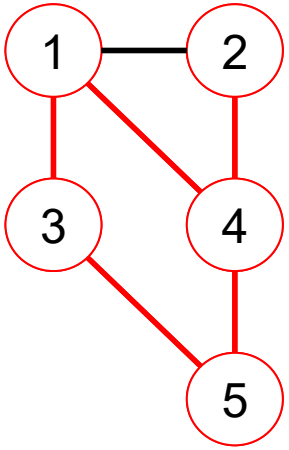
- Dans l'ordre de génération des motifs
- Suivant la structure des motifs: chemin ➔ arbre ➔ graphe



chemin:linéaire



arbre: pas de cycle



graphe

Gestion de la taille de l'espace de recherche

- Un graphe à *n* arêtes peut avoir 2^n motifs

- Problème:

  - Comment fixer le seuil de support ?
  - Quels sont les motifs conservés ?

- Solution:
  - Retenir un petit nombre de motifs représentatifs
    - Par clustering (plus pertinents)
      - Nécessite de définir une **mesure de distance entre motifs**
    - En gardant les plus fréquents (plus significatifs)

- Mesure de distance / similarité entre motifs
  - Intrinsèque, basée sur les motifs (exemple: distance d'édition)
  - Extrinsèque, basée sur les données (exemple: graphes partageant ce motifs)

Autres scores pour évaluer les motifs

- Score de Fisher
- Gain en information
- G-test
- Cosine

Recherche avec contrainte

- Degré
- Taille (#sommets, #arêtes)
- Densité (clique)
- Diamètre (plus long chemin entre deux sommets)
- Connectivité (#sommets, #arêtes)

Classification de graphes

- Basée sur des vecteurs d'attributs (Exemple: motifs fréquents)
- Basée sur des distances (Exemple: distance d'édition)

Classification basée sur des distances

- Distance d'édition entre deux graphes G_1 et G_2:
  Nombre minimum d'opérations élémentaires pour transformer un graphe en un autre.

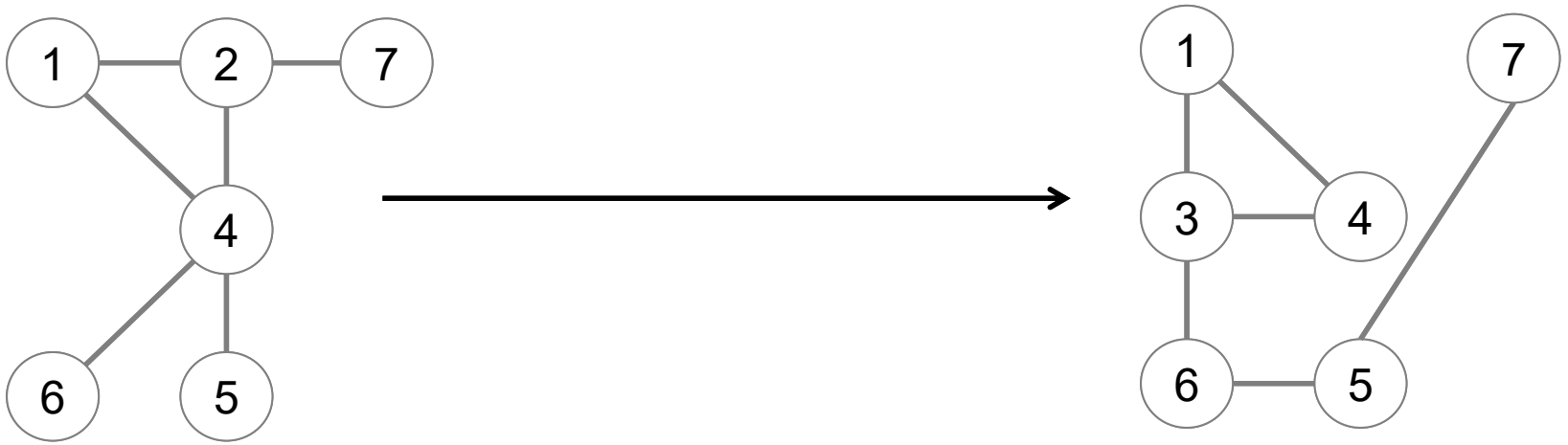
- Opérations élémentaires:
  - Insertion/Supression/Substitution de sommets
  - Insertion/Supression/Substitution d'arêtes
  - Division/Contraction d'arêtes

- Problème NP-complet, et difficile à approximer

- Solution :
  - Calcul du plus court chemin dans une collection de graphes dont les sommets sont des graphes incluant G_1 et G_2, et il existe une arête entre deux graphes G et G' si une seule opération élémentaire sépare G et G'
  - Algorithme de recherche A *

Classification basée sur des distances

- Distance d'édition simple (coûts unitaires)
- Distance d'édition pondérée (un coût par type d'opération)
- Distance d'édition généralisée (coût dépendant des étiquettes)



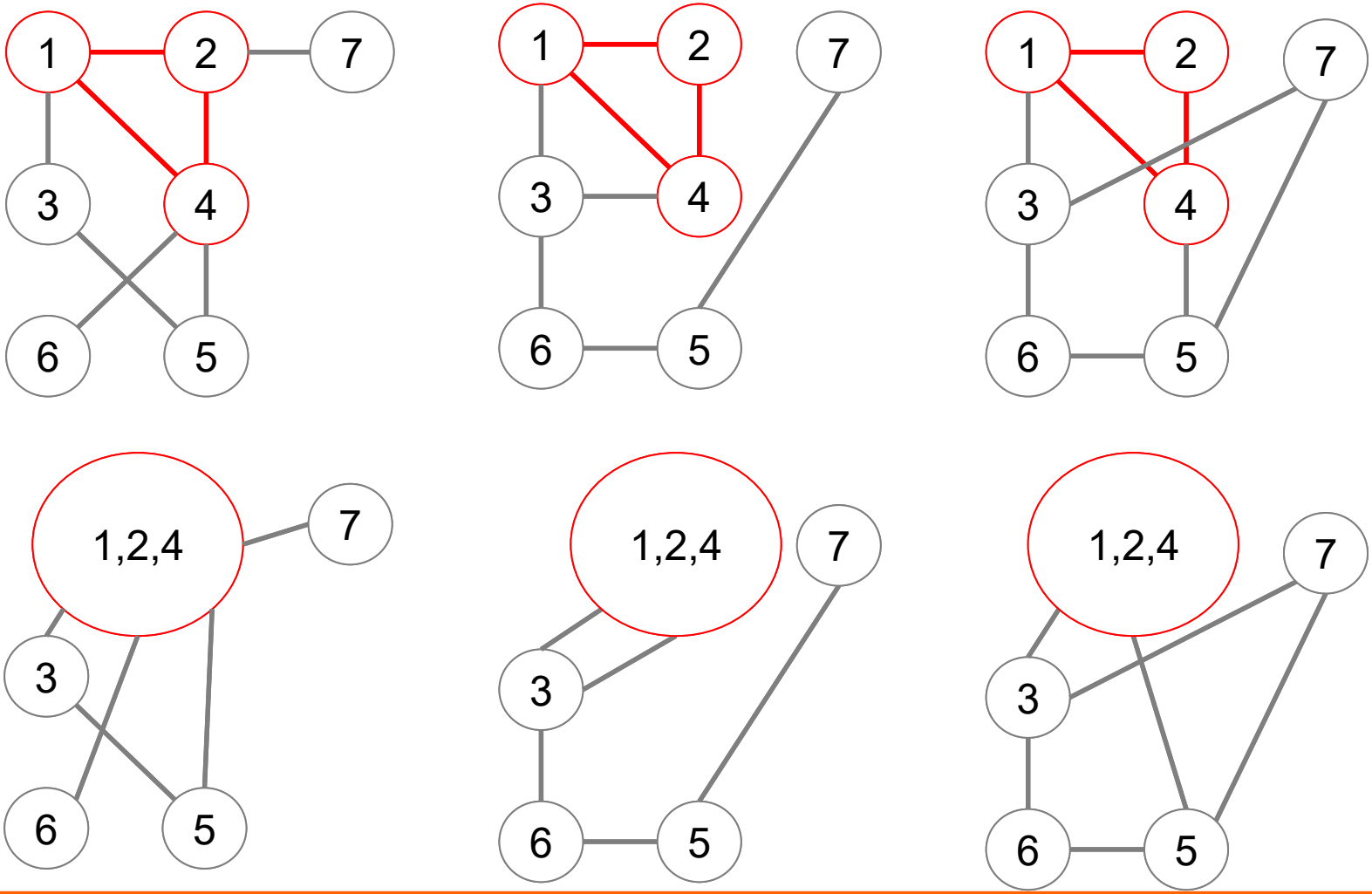
Classification basée sur des vecteurs d'attributs

- **Objectif**: une représentation vectorielle des séquences pour utiliser des méthodes de classifications usuelles comme les arbres de décision

- Vecteurs des fréquences de motifs utilisés pour représenter les graphes
  - Motifs fréquents à k-arêtes
  - Sous-structures locales. **Exemple**: chemin à k arêtes, cliques.
  - Motifs issus du domaine de connaissance

Partitionnement / Compression de graphes

- Trouver des motifs communs (ou très similaires)
- Remplacer chaque motif commun par un sommet



Cas particulier des arbres

- Problèmes plus faciles que ceux des graphes, généralisation des solutions pour les séquences
  - Recherche de sous-arbres fréquents
  - Recherche de sous-arbres communs
  - Classification d'arbres
    - Distance d'édition d'arbres (non-orientés, ordonnés, non-ordonnés semi-ordonnés) ➔ complexité $O(n^3)$
    - Modèles de covariance (extension des HMMs pour des arbres d'ARN)
  - Compression d'arbres

Références

[1] Diane J. COOK, Lawrence B. HOLDER (Eds): *Mining Graph Data*, , John Wiley & Sons, 2006.

[2] Jiawei HAN, Micheline KAMBER, Jian PEI. *DataMining: Concepts and Techniques (Third edition)*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 2011.

[3] Adreas C. MÜLLER et Sarah GUIDO : *Introduction to Machine Learning with Python*. O'Reilly Media, Inc., Sebastopol, CA, 2017.