

# Transport Optimal entre Graphes exploitant la Diffusion de la Chaleur

Amélie Barbe<sup>1,2,3</sup>, Pierre Borgnat<sup>2</sup>, Paulo Gonçalves<sup>2</sup>, Marc Sebban<sup>3</sup>, and Rémi Gribonval<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univ Lyon, Inria, CNRS, ENS de Lyon, UCB Lyon 1, LIP UMR 5668, F-69342, Lyon, France

<sup>2</sup>Univ Lyon, ENS de Lyon, UCB Lyon 1, CNRS, Laboratoire de Physique, F-69342 Lyon, France

<sup>3</sup>Univ Lyon, UJM-Saint-Etienne, CNRS, Institut d'Optique Graduate School,, Laboratoire Hubert Curien UMR 5516, F-42023, Saint-Etienne, France

**Abstract.** Le Transport Optimal entre données structurées pour l'apprentissage a fait l'objet de nombreuses études, notamment pour traiter des tâches de classification ou d'apprentissage par transfert entre graphes. Dans cet article, nous introduisons la distance de Wasserstein de diffusion ( $DW$ ) qui généralise la distance classique de Wasserstein aux graphes attribués non-orientés connexes.  $DW$  exploite la diffusion de la chaleur sur le laplacien du graphe pour capturer de l'information non seulement au niveau des attributs des noeuds mais également sur la structure du graphe. Nous étudions le comportement asymptotique de  $DW$  et montrons que cette distance peut être directement exploitée dans la distance Fused Gromov Wasserstein, récemment proposée dans la littérature, donnant ainsi naissance à une nouvelle famille de distances entre graphes, appelée Diffused Gromov Wasserstein. Nous montrons que ces dernières permettent de significativement améliorer l'état de l'art sur des tâches d'adaptation de domaine sur graphes par transport optimal.

**Keywords:** Transport Optimal · Laplacien de Graphes · Diffusion de la chaleur.