



EPITA
École d'Ingénieurs pour l'Informatique et les
Techniques Avancées



Majeure SCIA-G
Sciences Cognitives, Intelligence Artificielle
& Graphes

Projet Graph Neural Network

Implémentation et amélioration de la prédiction de liens d'aliments

RAPPORT DE PROJET

Auteurs

Erwann Lesech - Aymeric Le Riboter

Encadrant

Marc Plantevit

Lyon, le 12 novembre 2025

Promo 2026 SCIA-G

1 Introduction

Les Graph Neural Networks (GNNs) offrent un cadre puissant pour modéliser les relations complexes entre entités inter-connectées. Ce projet explore leur application à la prédiction de liens dans le domaine culinaire, en s'appuyant sur le FlavorGraph, un graphe hétérogène reliant des ingrédients entre eux selon leurs affinités gustatives. L'objectif est d'approfondir notre compréhension des GNNs tout en démontrant notre capacité à adapter et améliorer un modèle existant.

2 Approche Initiale

Le tutoriel de base¹ implémente une tâche de prédiction de liens sur le FlavorGraph, un réseau de 1 561 ingrédients reliés par 111 355 arêtes pondérées représentant leurs compatibilités gustatives. L'approche utilise un GCN (Graph Convolutional Network) à deux couches avec des features initiales simples (identifiants des nœuds) en comparaison d'un GraphSage. Les modèles sont entraînés pour prédire l'existence d'arêtes entre ingrédients, en utilisant l'AUC comme métrique d'évaluation.

Les résultats de base montrent des performances correctes mais limitées par la simplicité des features et l'absence de métriques avancées pour évaluer la qualité des prédictions au-delà de la classification binaire.

3 Améliorations Proposées

Notre contribution se décline en trois axes majeurs : l'enrichissement des features, la diversification des architectures et l'ajout de métriques d'évaluation pertinentes.

3.1 Enrichissement des Features

Nous avons enrichi la représentation des nœuds avec trois types de features :

Features structurelles : Le degré de chaque nœud capture son importance dans le réseau. Une normalisation par z-score standardise les valeurs pour améliorer la convergence.

Features chimiques : En exploitant les relations entity-compound du FlavorGraph complet, nous ajoutons pour chaque ingrédient le nombre de composés chimiques associés. Cette information permet de capturer les similarités moléculaires entre ingrédients compatibles.

Features catégorielles : Un encodage one-hot répartit les 1 561 ingrédients en 7 catégories (viandes, poissons, légumes, fruits, épices, produits laitiers, autres) via une classification par mots-clés. Ceci introduit des informations sémantiques sur la nature des ingrédients. Evidemment, cet ajout d'information devrait être fait via une base de données externe dans un contexte réel.

3.2 Nouveaux Modèles Testés

Au-delà du GCN de base ainsi que du Sage, nous avons implémenté et testé quatre architectures supplémentaires :

- **GAT (Graph Attention Network)** avec 4 têtes d'attention pour pondérer dynamiquement l'importance des voisins

¹<https://medium.com/stanford-cs224w/whats-cooking-using-gnns-to-redefine-culinary-boundaries-1184319653c3>

- **GIN (Graph Isomorphism Network)** basé sur le test de Weisfeiler-Lehman
- **DeeperGCN** avec connexions résiduelles pour capturer des dépendances à longue portée
- **EnrichedNet** et **EnrichedGAT** combinant respectivement GCN et GAT avec les features enrichies

3.3 Métriques d'Évaluation Avancées

L'AUC seul ne suffit pas à évaluer la qualité des recommandations. Nous avons ajouté : **Precision@K**, **Recall@K** pour mesurer respectivement la précision et la couverture des top-K prédictions, ainsi que la **Diversity@10** pour quantifier la variété des catégories d'ingrédients dans les recommandations grâce à l'ajout des features catégorielles.

4 Résultats et Analyse

4.1 Performances Comparatives

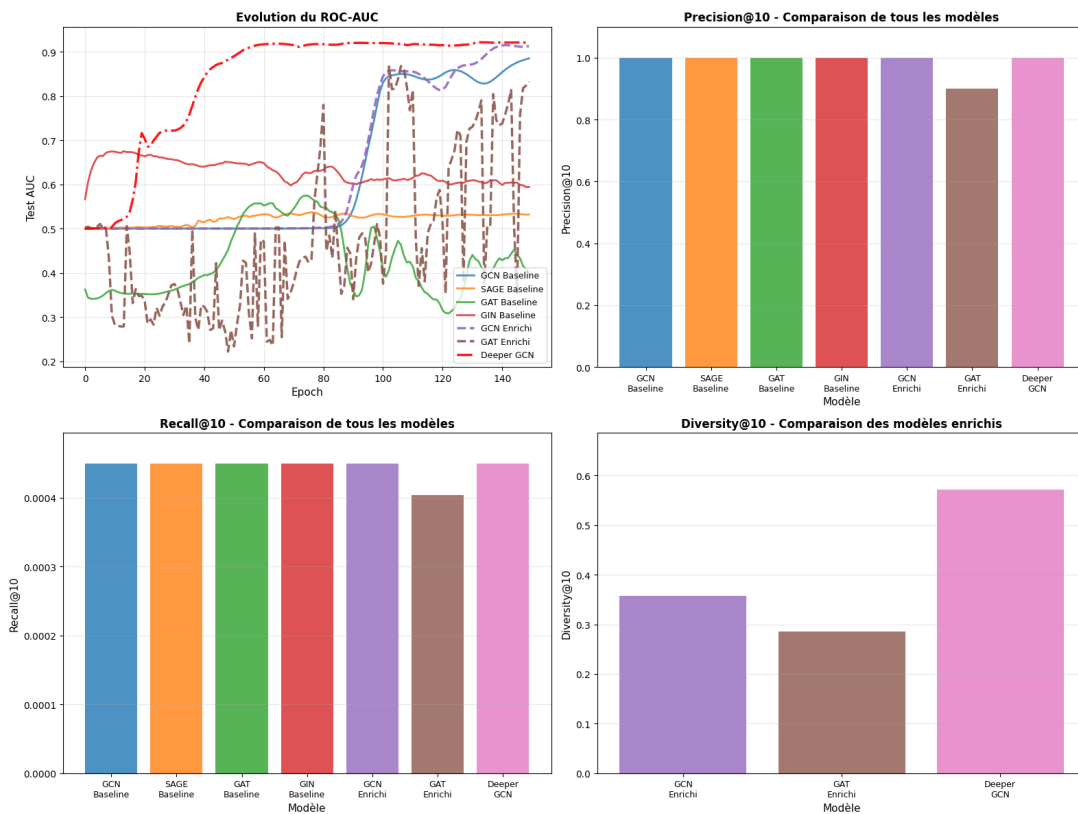


Figure 1: Visualisation comparative des métriques d'évaluation pour tous les modèles testés.

| Modèle | AUC | P@10 | R@10 | D@10 |
|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| GCN Baseline | 0.8852 | 1.0000 | 0.0004 | – |
| SAGE Baseline | 0.5318 | 1.0000 | 0.0004 | – |
| GAT Baseline | 0.5000 | 1.0000 | 0.0004 | – |
| GIN Baseline | 0.5000 | 1.0000 | 0.0004 | – |
| GCN Enrichi | 0.9132 | 1.0000 | 0.0004 | 0.3571 |
| GAT Enrichi | 0.8329 | 0.9000 | 0.0004 | 0.2857 |
| Deeper GCN | 0.9209 | 1.0000 | 0.0004 | 0.5714 |

Table 1: Comparaison des performances des différents modèles sur l’ensemble de test.

4.2 Analyse des Résultats

Impact de l’enrichissement des features : L’enrichissement apporte une amélioration certaine. Le GCN initial sans les features enrichies atteint un AUC de 0.8852, tandis que le GCN enrichi atteint 0.9132 (+3.3%) et le Deeper GCN 0.9209. Ceci confirme l’importance des features dans les GNNs pour capturer les compatibilités entre ingrédients.

Comparaison des architectures : Le Deeper GCN obtient les meilleures performances globales (AUC: 0.9209, Diversity: 0.5714), suivi du GCN enrichi (0.9132). Le GAT enrichi, avec son mécanisme d’attention, atteint un AUC de 0.8329 mais présente une Precision@10 légèrement inférieure (0.9000) et une diversité plus faible (0.2857).

Limitations observées : Le Recall@10 reste très faible (0.0004) pour tous les modèles, reflétant l’impossibilité à couvrir l’ensemble des arêtes positives dans les top-10 prédictions étant donné le grand nombre d’ingrédients (1 561).

4.3 Exemple Qualitatif : Génération de Recettes

Pour illustrer concrètement les différences entre modèles, considérons une génération de recette à partir de *cheese* :

- **GAT Baseline :** cheese → chai_tea_mix → arm_roast → beef_gravy_mix → bird_seed (combinaisons incohérentes)
- **GCN Enrichi :** cheese → egg → baking_powder → bay_leaf → brown_sugar → all_purpose_flour (séquence cohérente pour une préparation)
- **Deeper GCN :** cheese → apple_cider → apple → american_cheese → baking_powder → almond_butter (combinaison créative et équilibrée)

Ces exemples illustrent clairement l’avantage des modèles enrichis : le GAT baseline génère des associations absurdes (thé chai avec fromage, graines pour oiseaux), tandis que les modèles enrichis proposent des combinaisons culinairement cohérentes et créatives.

5 Conclusion

Ce projet démontre l’importance de l’ingénierie des features et du choix de métriques d’évaluation adaptées pour les GNNs. Les métriques de ranking pour de la recommandation (Precision@K, Recall@K, Diversity@K) offrent une vision plus complète que l’AUC seul.

Il demeure intéressant d’augmenter les informations disponibles (par exemple via des embeddings pré-entraînés d’ingrédients) ou encore d’y faire intervenir des features culturelles avec des informations géographiques ou saisonnières.