

Capitoli

- Introduzione Vae e graphVAE
- Introduzione Diffusion e Latent Diffusion
- Dataset
 - preprocess del dataset:
 - one-hot encoding features nodi e edge
 - togli le molecole con 1 atomo solo
 - padding dei dati a 9 molecole
- Esperimenti fatti: 100 esempi 1000 esempi 5000 esempi 10000 esempi
 - Sia con GraphVAE che con Latent Diffusion
 - Per il latent diffusion viene preso il modello allenato dal GraphVAE
- Training GraphVAE
 - Encoder e decoder con MLP
 - input features dei nodi, appiattimento e passo per l'encoder
 - fuori dall'encoder ho lo spazio latente, uso le loss per l'allenamento
 - 4 loss
- Training Latent Diffusion
- risultati: ... Da vedersi:
 - per adesso sembra che il diffusion faccia peggio (novelty inferiore) rispetto al vae, probabilmente entra un po' in overfitting