⚡️🚀המאמר היומי של מייק 19.08.24: ⚡️🚀

DIGRESS: DISCRETE DENOISING DIFFUSION FOR GRAPH GENERATION

היום סוקרים קצרות מאמר לא רגיל על מודלי דיפוזיה. אתם בטח זוכרים (וסקרתי לא מעט לאחרונה) מודלי דיפוזיה עבור תמונות, וידאו, אודיו וכדומה. במאמר שנסקור אותו היום מודל דיפוזיה נבנה על גרף. אציין כי המאמר מלפני שנה וחצי ולמיטב ידיעתי יצאו כמה מאמרי המשך.

אז מה זה מודל דיפוזיה רגיל ואיך מאמנים אותו? מודל דיפוזיה גנרטיבי מאומן על ידי הוספה הדרגתית של רעש לדאטה כאשר המטרה היא לאמן מודל המסיר את הרעש הזה (כלומר משחזר את הדאטה מאיטרציה הקודמת). מודל כזה מאפשר לנו לגנרט דאטה מרעש טהור על ידי הסרתו הדרגתית.

אבל איך ניתן ״להטיל״ את הרעיון הזה על גרפים? נניח שיש לנו גרף בו כל הצומת וכל קשת שייכים לקטוריה מסיומת (קטגוריות שונות לקשתות ולצמתים). עכשיו בתהליך קדמי (הוספת רעש) אנו בעצם משנים באקראי את הלייבלים (קטגוריות) של הצמתים ושל הקשתות לקטגוריה אחרת. כלומר צומת נתונה יכולה להישאר בקטגוריה שלה בהסתברות 0.95 ובהסתברות 0.05 היא תקבל כל לייבל אחר בצורה אחיד. תהליך דומה נעשה על הקשתות. בסוף התהליך הגרף הופך להיות עם קשתות וצמתים בעלי קטגוריות רנדומליות לגמרי.

כמו במודלי דיפוזיה המטרה של המודל המאומן (על דאטהסט של גרפים מתויגים) היא לשחזר את הלייבלים מהאיטרציה הקודמת (של הצמתים ושל הקשתות). זה יאפשר שחזור גרף עם התלויות כמו בסט האימון.

כמובן שיש כאן הרבה משחק על איך מרעישים את הלייבלים בתהליך קדמי. האם יש תלות בתהליך ההרעשה בין צמתים וקשתות שונים, אולי בהתחלה משנים לייבלים רק לתת-גרפים מסוימים וכדומה.

בקיצור מאמר מאוד מעניין ואני מניח שאסקור בעתיד גם מאמרי ההמשך שלו.

https://arxiv.org/abs/2209.14734