המאמר היומי של מייק: 06.05.25

Graph Generative Pre-trained Transformer

אנו רגילים לראות מודלי שפה המאומנים בצורה בלתי מפוקחת(בד״כ נקרא אימון מקדים) על טקסטים. המאמר הזה מרחיב את הקונספט של אימון מקדים של מודל גנרטיבי על הגרפים. המאמר למעשה הופך גרף לסוג של טקסט כלומר סדרת טוקנים חד מימדית ומאמן טרנספורמר על הסדרה הזו. אולם להבדיל מטקסט הגרף הוא יצור לא חד מימדי באופן אינהרנטי וזה לא לגמרי טריוויאלי לייצג אותו בתור סדרה.

הדרך שהמחברים בחרו לעשות את זה נראית די אינטואיטיבית: הגרף מיוצג על ידי סדרה של קודקודים וקשתות. כל קודקוד מיוצג על ידי זוג של הקטגוריה שלו (דיסקרטי) והאינדקס שלו. הקשת מיוצגת על ידי שלישיה שמכיל את שני הקודקודים שהיא מחברת וסוג הקוד. הסדר בין הקודקודים יכול להיות כלשהו (כלומר אינווריאנטי לפרמוטציה) אך סדר הקודקודים נבחר על ידי אלגוריתם פשוט: קודם בוחרים קודקוד בעלת דרגה הקטנה ביותר ומבין הקשתות שלו בוחרים זו שמוביל לקודקוד בעלת הדרגה המינימלית בין אלו שהוא מחובר אליהם. לאחר מכן מורידים את הקשת הזו ומתחילים את התהליך מחדש עד שמורידים את כל הקשתות.

אז אחרי שרשמנו את הגרף בתור סדרה של קודקודים וקשתות (יש טוקן מיוחד המפריד ביניהם) מגיעים לקידוד מיקומי ( positional encoding או PE. המאמר משתמש בקידוד מיקומי אבסולוטי כאשר כל קודקוד וקשת מקודדים עם המיקום שלהם בסדרה (המאמר לא מרחיב על איזו צורה של PE הם בחרו). לאחר מכן מבצעים אימון דומה לזה של מודל שפה כלומר אוטו-רגרסיבי - חיזוי טוקן (קודקוד או קשת) בהינתן העבר (כלומר וקודקודים/קשתות הקודמות בייצוג). בקיצור אימון מודל גנרטיבי רגיל.

לאחר אימון מקדים המאמר מציע גישה מבוססת rejection sampling לפיין טיון. נגיד אנו רוצים לגנרט גרף מסוים המקיים איזשהו תנאי. נניח שבאימון מקדים היה לנו כמה גרפים המקיימים תנאי זה. אז מתחילים לגנרט גרפים ובונים דאטהסט מכאלו שמקיימים את התנאי. אחרי שאספנו כמה עושים פיין טיון של המודל. ממשיכים לגנרט וחוזרים על התהליך הזה המשלב סינון ופיין טיון.

המחברים גם מציעים שיטה לעשות אימון המשלב Proximal Policy Optimization או PPO לגרפים לפונקציה reward נתונה. המאמר מציע לשלב את הלוס של PPO עם הלוס על הקריטיק (שערוך של פונקציית value) עם הלוס של של האימון המקדים שהסברנו עליו קודם.

המאמר די נחמד אבל מה שקצת מטריד אותי בגישה הזו היא אינווריאנטיות של הייצוג הזה עבור כל פרמוטציה של קודקודים בייצוג שלהם. לדעתי זה מחייב אימון מאוד אינטנסיבי חישובית על מספר ענקי של פרמוטציות של הקודקוד במיוחד על גרפים גדולים. אחרת הייצוג של הקודקודים יהיה רגיש לסדר ולא כזה טוב …

https://arxiv.org/abs/2501.01073