

## 논문 요약:

### Data Augmentation Using Diffusion Models to Enhance Inverse Ising Inference

Physical Review E, Vol. 111, 045302 (2025)

## 연구 목적

본 논문은 **관측 데이터가 제한된 상황에서** 이징 모델의 파라미터(스핀 간 상호작용  $w_{ij}$  및 편향  $b_i$ )를 정확하게 추정하기 위한 새로운 접근법을 제안한다. 디퓨전 모델(Diffusion Model)을 사용해 기존 데이터와 유사한 새로운 샘플을 생성하여 학습 데이터셋을 보강하고, 이를 통해 **inverse Ising inference**의 정확도를 향상시키고자 한다.

## 문제 배경: Inverse Ising Inference

- 이징 모델은 확률 분포  $P(\sigma) \propto \exp\left(\sum_{i<j} w_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_i b_i \sigma_i\right)$ 로 주어지는 통계역학 모델이다.
- 주어진 스핀 샘플  $\{\sigma^\mu\}$ 로부터 이 분포를 구성하는  $w_{ij}$ ,  $b_i$ 를 역으로 추정하는 것이 inverse Ising 문제다.
- 그러나 샘플 수가 적을 경우 파라미터 추정이 매우 불안정하고 분산이 크며, 높은 차원에서 underfitting 또는 overfitting이 발생한다.

## 제안 방식: 디퓨전 기반 데이터 증강

### 1. 디퓨전 모델 학습

- 원래의 스핀 샘플( $\pm 1$  상태)을 입력으로 하여 DDPM(Denoising Diffusion Probabilistic Model)을 훈련
- continuous-valued latent space에서 샘플의 구조적 특성을 학습

### 2. 샘플 생성 및 후처리

- 학습된 디퓨전 모델로 새로운 샘플 생성
- 연속값 샘플을 이진 형태로 threshold 처리 (0보다 크면 +1, 작으면 -1)

### 3. 파라미터 재추정

- 기존 샘플과 디퓨전 모델이 생성한 샘플을 합쳐서 inference 수행

- 사용된 추론 기법: **Erasure machine**, 최대우도 기반 근사법

## 실험 및 결과

- 데이터:

- 합성 데이터: Sherrington-Kirkpatrick(S-K) 이징 모델로부터 MCMC로 생성된 샘플
- 실제 데이터: 도롱뇽 망막 뉴런의 스파이크 패턴 (40개의 뉴런, 8000 샘플)

[DATA AVAILABILITY - The data that support the findings of this article are not publicly available because they are owned by a third party, and the terms of use prevent public distribution. The data are available from the authors upon reasonable request. → 이렇게 되어 있어 교수님께 부탁드립니다 데이터는 확보할 수 있을 것 같음]

- 성능 측정:

- 파라미터 추정의 평균제곱오차(MSE)
- 원본 데이터만 사용했을 때 대비, 증강된 데이터 사용 시 **MSE가 감소**, 성능 개선 확인

## 제안 주제 1

### “Low-Probability Region Sampling via Guided Diffusion for Physics-Based Inference”

#### 핵심 아이디어

- 학습은 기존 DDPM/score-based 방식 그대로 유지
- 하지만 **샘플링 과정에서** 역-Langevin 방향으로 이동하거나, entropy-promoting loss / negative guidance / rejection 등을 활용해 **확률 분포의 꼬리 영역(low  $p(x)$ )** 샘플을 생성

#### 주요 실험 내용

##### 실험1

- 샘플링 방법 비교:
  1. 기본 sampling (baseline)

- 2. 역-스코어 Langevin
- 3. entropy-maximized diffusion
- 4. negative classifier guidance
- 생성된 샘플의
  - 에너지 분포 /  $\log-p(x)$  / inference 성능 / diversity 등을 비교

## 실험2

- 실험 이후 augmentation 을 통한 데이터를 활용해 학습하여 어떤 데이터가 실제 물리를 더 잘 반영하는지 / generalization에러가 줄어드는 지 확인

목적 : low prob의 데이터 샘플을 잘 생성할 수 있는가? 그리고 그 데이터가 잘 생성된 경우 더 나은 학습 결과를 만들수 있나는가?

## 제안 주제 2

### “Task-Aware Data Augmentation via Diffusion and Its Effect on Adversarial Robustness in Inverse Inference”

#### 핵심 아이디어

- 기존 논문처럼 diffusion으로 생성된 샘플을 사용해 inverse Ising 또는 neural decoding task 학습
- 이후 이 모델이 **adversarial한 입력에 강한지/약한지** 평가

#### 실험 구조

- ① 원래 데이터만으로 학습된 모델
- ② diffusion augmented 샘플 포함 모델
- 각각에 대해 adversarial attack 수행 (e.g., FGSM, PGD)
- 평가 지표:
  - MSE 변화량
  - 추정된 파라미터 변화
  - attack 성공률

**목적 :** "Data augmentation이 generalization만 좋게 만들고, 오히려 robustness는 낮출 수 있는가?"