



# 计算机科学

COMPUTER SCIENCE

## 图扩散模型方法与应用研究综述

赵海华, 唐瑞, 莫先

### 引用本文

赵海华, 唐瑞, 莫先. [图扩散模型方法与应用研究综述](#)[J]. 计算机科学, 2026, 53(3): 115-128.

ZHAO Haihua, TANG Rui, MO Xian. [Review of Methods and Applications of Graph Diffusion Models](#)[J].

Computer Science, 2026, 53(3): 115-128.

---

## 相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

### Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

#### [基于指示词表征学习的半监督聚类方法](#)

Prompt-conditioned Representation Learning with Diffusion Models for Semi-supervised Clustering

计算机科学, 2026, 53(3): 158-165. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250600063>

#### [多尺度聚合协同轴向语义引导的实体关系联合抽取方法](#)

Joint Entity and Relation Extraction Method with Multi-scale Collaborative Aggregation and Axial-semantic Guidance

计算机科学, 2026, 53(3): 97-106. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250500095>

#### [个性化教育资源推荐综述](#)

Review of Personalized Educational Resource Recommendations

计算机科学, 2026, 53(2): 1-15. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250700184>

#### [结合超图学习的多注意力机制新闻推荐方法](#)

Multiple Attention Mechanism News Recommendation Approach with Hypergraph Learning

计算机科学, 2025, 52(11A): 250200067-7. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250200067>

#### [基于图卷积神经网络的多属性个性化航空行程推荐系统](#)

Personalized Multi-attribute Airline Itinerary Recommendation System by Graph Convolutional Neural Network

计算机科学, 2025, 52(11A): 250200088-6. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250200088>

# 图扩散模型方法与应用研究综述

赵海华<sup>1</sup> 唐瑞<sup>2</sup> 莫先<sup>1</sup>

1 宁夏大学信息工程学院 银川 750021

2 四川大学网络空间安全学院 成都 610207

(1055346404@qq.com)

**摘要** 图扩散模型作为新兴的深度生成范式,凭借其渐进式生成机制和结构灵活等优势,在复杂图结构数据建模领域展现出了显著优势。为此,系统综述了图扩散模型的方法演进及其应用进展。首先,从生成机理层面解析了去噪扩散概率模型、基于分数的扩散生成模型和基于随机微分方程的扩散模型三大核心范式。其次,针对图数据的高维离散与非欧特性,对3种基本扩散模型在图数据上的创新性技术突破进行分类总结及深入分析。在此基础上,系统性总结和分析了图扩散模型的评价体系。在应用研究层面,重点探讨了图扩散模型在推荐系统和分子建模领域的应用研究。最后,基于以上论述,分别从图数据的离散性、图扩散模型的条件生成、应用的扩展以及评价体系4个方面对图扩散模型的未来发展的挑战和潜在研究方向进行展望。

**关键词** 图扩散模型;扩散模型;图生成;推荐系统;分子建模

**中图分类号** TP183

## Review of Methods and Applications of Graph Diffusion Models

ZHAO Haihua<sup>1</sup>, TANG Rui<sup>2</sup> and MO Xian<sup>1</sup>

1 College of Information Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China

2 College of Cyberspace Security, Sichuan University, Chengdu 610207, China

**Abstract** Graph diffusion models, as an emerging paradigm in deep generative modeling, have demonstrated remarkable advantages in modeling complex graph-structured data due to their progressive generation mechanisms and structural flexibility. This paper systematically reviews the methodological evolution and application advancements of graph diffusion models. Firstly, three core paradigms are analyzed from the perspective of generative mechanisms: denoising diffusion probabilistic models, score-based diffusion generative models, and stochastic differential equation (SDE)-based diffusion generative models. Subsequently, to address the high-dimensional, discrete, and non-Euclidean nature of graph data, innovative technical breakthroughs of these three fundamental diffusion models in graph data processing are categorized, summarized, and subjected to in-depth analysis. Building on this foundation, the evaluation frameworks for graph diffusion models are systematically summarized and analyzed. At the application level, the study focuses on the applications of graph diffusion models in recommendation systems and molecular modeling. Finally, based on the above discussions, prospects for future challenges and potential research directions are proposed, encompassing four aspects: the discrete nature of graph data, conditional generation of graph diffusion models, application expansion, and evaluation frameworks.

**Keywords** Graph diffusion models, Diffusion model, Graph generation, Recommendation systems, Molecular modeling

## 1 引言

图数据(Graph-based Data)作为非欧几里德空间中复杂关系表征的数学载体,凭借其天然的拓扑建模能力,已成为人工智能领域不可或缺的研究对象。其在社交网络中的用户交互建模<sup>[1-2]</sup>、推荐系统中的高阶行为推理<sup>[3-4]</sup>、生物学领域的分子构效关系解析<sup>[5-6]</sup>等场景中展现出独特的表征优势。

然而,图数据的非结构化特性(如节点无序性、边动态连接性及多尺度拓扑特征)导致传统机器学习方法面临根本性挑战:卷积神经网络难以直接迁移至离散图空间;传统统计推断方法对图数据的高阶隐式关联缺乏显式建模能力,难以构建全局统计依赖与局部动态演化的统一表征框架。

为突破这一瓶颈,有学者提出了图神经网络(Graph Neural Networks, GNNs)框架,通过图卷积网络<sup>[7]</sup>的谱域滤波机

到稿日期:2025-02-27 返修日期:2025-05-29

基金项目:宁夏自然科学基金(2024AAC05011);国家自然科学基金(62306157, 62202320);宁夏回族自治区重点研发计划引才专项(2025BEH04048)

This work was supported by the Natural Science Foundation of Ningxia(2024AAC05011), National Natural Science Foundation of China(62306157, 62202320) and Key Research and Development Program of Ningxia(Special Program for Recruiting High-Caliber Talent)(2025BEH04048).

通信作者:莫先(mxian168@nxu.edu.cn)

制和图注意力网络<sup>[8]</sup>的动态权重分配策略,实现了对图结构化信息的有效编码。然而,随着应用场景向大规模异构图、动态演化图扩展,现有 GNNs 在生成质量、计算效率与可解释性等方面逐渐暴露瓶颈,尤其在生成符合物理规律或化学约束的分子图、保持社交网络动态演化一致性等任务中,传统方法难以平衡生成样本的真实性与多样性。

在此背景下,扩散模型(Diffusion Model, DM)因其渐进式生成范式与理论可解释性优势,为图数据生成开辟了新路径。该模型通过定义前向噪声注入与逆向去噪的马尔可夫链,在计算机视觉<sup>[9-10]</sup>、自然语言处理<sup>[11-12]</sup>和时间序列分析<sup>[13-14]</sup>等领域已实现生成质量的突破性进展。近年来,研究者将其核心思想与图结构特性相结合,提出了图扩散模型(Graph Diffusion Model, GDM),通过设计图空间噪声调度策略、构建拓扑感知的评分函数,成功将其应用于推荐系统<sup>[15]</sup>、分子结构预测<sup>[16]</sup>等科学计算任务,展现出了对复杂图数据分布的强大建模能力。

尽管图扩散模型研究已取得显著进展,现有成果仍呈现碎片化特征:1)对扩散模型基本范式数学原理的解析不充分;2)缺乏对图扩散模型框架的系统性分类与机理对比;3)缺少图扩散模型主要应用场景技术的总结。鉴于此,本文以方法论创新、技术演进与应用梳理三维视角,从以下4个方面对图扩散模型的研究进展进行系统性梳理:1)解析扩散模型的基础理论框架,包括去噪扩散概率模型、分数匹配与随机微分方程三大范式;2)从3个基本范式出发,系统地对比主流图扩散模型的技术路径和发展,阐述各个模型的扩散过程在图空间的实现形式,并且系统总结和分析了图扩散模型的评价体系;3)总结图扩散模型在推荐系统、分子建模领域的突破性应用;4)从图数据的离散性、图扩散模型的条件生成、应用的扩展以及评价体系4个方面对图上的扩散模型在未来发展的挑战和潜在研究方向进行展望。

## 2 扩散模型

扩散模型是一类概率生成模型,其通过向数据中逐步加入噪声来破坏数据的结构,然后通过逆向扩散过程从后验概

率逐步推断出先验概率分布,从而实现了对高维复杂数据的概率分布建模,学习原始数据的分布,生成与真实样本分布高度一致的高质量新样本。图1为扩散模型的框架图。

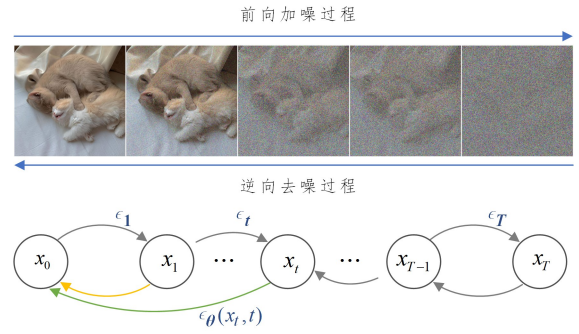


图1 扩散模型的框架

Fig. 1 Framework of diffusion model

目前,除扩散模型外,应用在图数据上的深度生成模型主要有变分自编码器(Variational Auto-Encoder, VAE)、生成对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)、归一化流模型(Normalizing Flow, NF)和自回归模型(Auto-Regressive, AR)。图2为这4种主要的深度生成模型的框架图。基于VAE模型<sup>[17-20]</sup>的潜在表征空间承载了原始数据的压缩表示,这一过程导致了数据维度的相对缩减。而扩散模型在其前向扩散的最终阶段将数据破坏成高斯噪声,因此能够保持与原始数据相同的维度。基于GAN的模型<sup>[21-23]</sup>在训练过程中不稳定,容易陷入模式崩溃。相比之下,扩散模型作为一种基于似然估计的生成模型,能够生成多样化的样本。然而,扩散模型在推理阶段需要执行多次网络评估,效率较低。基于NF的模型<sup>[24-27]</sup>与扩散模型都是将数据分布映射到高斯噪声,但基于NF的模型是通过学习一个可逆和可微的函数,以一种确定的方式进行映射,导致了对网络结构的额外约束。而扩散模型具有可学习的正逆向过程,可扩展性相对较好。基于AR的模型<sup>[28-29]</sup>将生成过程分解为一系列步骤,在生成图结构时需要逐步预测节点和边,这种生成方式导致生成速度较慢,而且由于这种方式是将图视为序列,因此在图分布设计上存在排列不变性的问题。

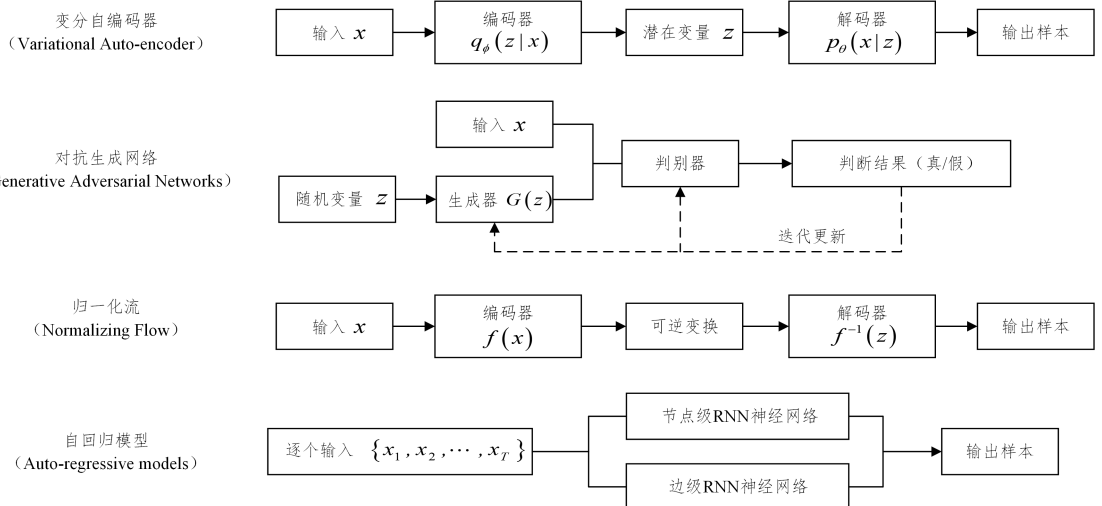


图2 4种主要的深度生成模型框架图

Fig. 2 Four primary frameworks for deep generative models

目前对于扩散模型的研究大多数基于3个主要框架:去噪扩散概率模型(Denoising Diffusion Probabilistic Model, DDPM)<sup>[30-32]</sup>、基于分数的生成扩散模型(Score-Based Generative, SGM)<sup>[33-34]</sup>以及基于随机微分方程的扩散模型(Stochastic Differential Equation, SDE)<sup>[35-36]</sup>。本章对这3种模型进行详细的介绍。

## 2.1 去噪扩散概率模型

去噪扩散概率模型(DDPM)是受到非平衡热力学<sup>[32]</sup>的启发,由两条马尔可夫链组成,一条正向马尔可夫链(简称“正向链”)逐步将数据分布转换为简单的先验分布,如高斯分布;一条逆向马尔可夫链(简称“逆向链”)将噪声转换为数据。因此,去噪扩散概率模型的训练过程包括正向加噪过程和逆向去噪过程两个阶段。图3为去噪扩散概率模型的框架图。

正向加噪过程如下:假设原始数据  $x_0$  服从分布  $q(x_0)$ , 正向链通过转移核  $q(x_t | x_{t-1})$  生成一系列服从高斯分布的噪声样本  $x_1, \dots, x_T$ 。在固定数量的扩散步长上,一步一步地引入噪声,将原始数据逐步转换为更简单的先验分布,例如高斯分布。由贝叶斯公式和链的马尔可夫性,即可得到以下的马尔可夫过程:

$$q(x_1, \dots, x_T | x_0) = \prod_{t=1}^T q(x_t | x_{t-1}) \quad (1)$$

$$q(x_t | x_{t-1}) = N(x_t; \sqrt{1-\beta_t} \cdot x_{t-1}, \beta_t \cdot \mathbf{I}) \quad (2)$$

其中,  $t \in \{1, 2, \dots, T\}$ ,  $T$  为总的扩散步骤;  $\beta_t \in (0, 1)$  是服从高斯分布的超参数,决定了每一次加噪的强度;  $\mathbf{I}$  代表与输入样本  $x_0$  具有相同维度的单位矩阵;  $N(x; \mu, \delta)$  代表均值为  $\mu$  和协方差为  $\delta$  的正态分布,且每一步的样本都只和前一步样本有关。因此,当  $t$  服从均匀分布时,就可以得到:

$$q(x_t | x_0) = N(x_t; \sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot x_0, (1-\bar{\alpha}_t) \cdot \mathbf{I}) \quad (3)$$

其中,  $\bar{\alpha}_t = \prod_{i=0}^t 1 - \beta_i$ 。因为  $q(x_t | x_0)$  是通过重参数化技巧计算的,所以,给定原始数据  $x_0$ , 根据式(2)可以很容易计算出  $x_t$ , 只需进行高斯采样  $\epsilon \sim N(0, \mathbf{I})$ , 然后根据式(4)即可得到  $x_t$ 。

$$x_t = \sqrt{\bar{\alpha}_t} \cdot x_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_t} \cdot \epsilon \quad (4)$$

通过上述处理,原始数据会被破坏,产生纯高斯噪声样本  $x_T$ 。

逆向去噪过程如下:通过一个可学习的马尔可夫链反转前向过程,从先验分布  $p(x_T) \sim N(x_T; 0, \mathbf{I})$  中逐渐生成新的数据样本。即通过  $p(x_{t-1} | x_t) = N(x_{t-1}; \mu_\theta(x_t, t), \Sigma_\theta(x_t, t))$  对  $x_T \sim N(0, \mathbf{I})$  进行去噪。但由于  $p(x_{t-1} | x_t)$  需要整条传播链中的数据,比较难以估计,故需要训练一个深度神经网络  $p_\theta(x_{t-1} | x_t) = N(x_{t-1}; \mu_\theta(x_t, t), \Sigma_\theta(x_t, t))$ , 其中  $x_t$  为每一步的噪声数据,  $\theta$  是可学习的模型参数,  $t$  为时间步长,均值  $\mu_\theta(x_t, t)$  和方差  $\Sigma_\theta(x_t, t)$  由深度神经网络参数化。逆向过程从  $x_T \sim p(x_T)$  开始采样,然后迭代地从  $p_\theta(x_{t-1} | x_t)$  中采样  $x_{t-1}$ , 直到  $t=1$ , 从而生成样本数据  $x_0$ 。

模型训练过程如下:DDPM 使用 Sohl-Dickstein 等<sup>[32]</sup>提出的最小化负对数似然的变分下界来计算逆向马尔可夫链的联合分布  $p_\theta(x_t)$  与正向过程的  $q(x_t)$  之间的损失  $L$ 。对于每个样本  $x_0 \sim q(x_0)$ , 模型训练的目标是最小化负对数似然的变分下界,通过简化和重参数化技巧,可以得出最后的损失函数,如式(5)所示:

$$\mathbb{E}_{t \sim U[1, T], x_0 \sim q(x_0), \epsilon \sim N(0, \mathbf{I})} [\lambda(t) \|\epsilon - \epsilon_\theta(x_t, t)\|^2] \quad (5)$$

其中,  $\lambda(t)$  是正权重函数,  $\mathbb{E}$  为期望值;  $U[1, T]$  是集合  $[1, 2, \dots, T]$  上的均匀分布;  $\epsilon_\theta$  是一个深度神经网络,参数为  $\theta$ , 用于预测给定  $x_t$  和  $t$  的噪声向量  $\epsilon$ 。整体的目标也等价于最小化它们之间的 KL 散度,将逆向过程  $p_\theta(x_0, x_1, \dots, x_T)$  的联合分布匹配到前向过程  $q(x_0, x_1, \dots, x_T)$ 。DDPM 使用 U-Net<sup>[37]</sup> 卷积神经网络进行此噪声参数的训练。

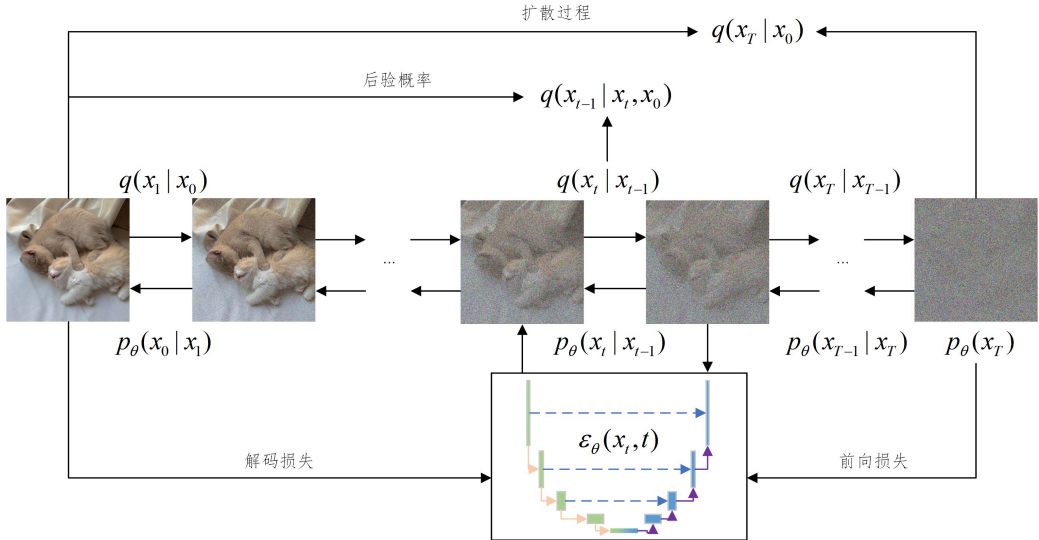


图3 DDPM 模型扩散示意图

Fig. 3 Schematic of DDPM model diffusion

## 2.2 基于分数的生成扩散模型

基于分数的生成扩散模型(SGM)是一类概率模型,其基本思想是从数据中估计与数据分布相关的梯度,即“分数函数”,并使用郎之万动力学<sup>[38]</sup>(Langevin Dynamics)的方法从

估计的数据分布中进行采样来生成新的样本。

最先提出的基于分数的生成模型的主要思想是,用一组不同强度的高斯噪声扰动数据,并训练一个深度神经网络来联合估计所有噪声数据分布的分数函数,使用具有迭代过程

的郎之万动力学采样方法从分布中生成新的样本。如图 4 所示,给定一组样本数据  $\{x_i \in \mathbb{R}^D\}_{i=1}^N$ , 其中每一个数据都是独立同分布且服从概率密度函数  $p(x)$ , 其分数函数定义为对数概率密度函数的梯度  $\nabla_x \log p(x)$ , 其指向了概率模型参数空间中最大似然估计增长最快的方向。由于概率密度函数是未知的, 因此需要训练一个神经网络  $s_\theta(x)$  来进行估计。通过最小化模型和数据之间的 Fisher 散度来训练基于分数的模型, 其表达式为:

$$\mathbb{E}_{p(x)} \|s_\theta(x) - \nabla_x \log p(x)\|_2^2 \quad (6)$$

然而, 这种方法在数据密度较低的区域存在显著的估计误差, 限制了其生成高质量样本的能力。为了解决这一缺陷, 在改进的 NCSN<sup>[34]</sup> 算法中, 提出了在低密度区域引入噪声的策略。这样就可以填满原数据分布中概率密度较低的区域, 并给数据密度小的区域提供如何抵达密度高区域的信息。使用多尺度的噪声来进行数据扰动, 例如当有  $N$  个噪声信号时, 按标准差从小到大  $\sigma_1 < \sigma_2 < \dots < \sigma_N$  进行排列, 添加扰动之后的数据  $p_{\sigma_t}(x) \approx p(x_0)$  符合标准正态分布, 之后训练一个神经网络  $s_\theta(x, \sigma_t)$  去估计分数函数  $\nabla_x \log p_{\sigma_t}(x)$ , 其表达式如下:

$$\nabla_x \log p_{\sigma_t}(x_t | x) = -\frac{x_t - x}{\sigma_t^2} \quad (7)$$

并通过最小化以下目标函数来训练  $s_\theta(x_t, \sigma_t), t \in (1, \dots, T)$ 。

$$\frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \lambda(\sigma_t) \mathbb{E}_{p(x)} \mathbb{E}_{x_t \sim p_{\sigma_t}(x_t | x_0)} \left\| s_\theta(x_t, \sigma_t) + \frac{x_t - x}{\sigma_t^2} \right\|_2^2 \quad (8)$$

其中,  $\lambda(\sigma_t)$  为权重参数, Song 等<sup>[34]</sup> 将它设置为  $\sigma_t^2$ 。得到  $s_\theta(x_t, \sigma_t)$  之后, 使用退火郎之万动力学算法完成样本的生成任务。

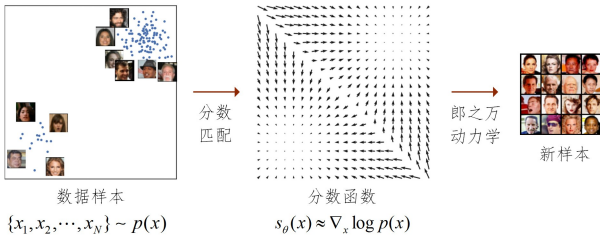


图 4 SGM 模型扩散示意图<sup>[33]</sup>

Fig. 4 Schematic of SGM model diffusion<sup>[33]</sup>

### 2.3 基于随机微分方程的生成扩散模型

基于随机微分方程的扩散模型(SDE)不是用有限数量的噪声分布来干扰数据, 而是根据扩散过程随时间变化得到的连续分布, 通过添加更多预定义的噪声数量, 来提高样本生成的质量。前文介绍的 DDPM 和 SGM 中的正向过程都是 SDE 模型的离散化。如图 5 所示, SDE 使用随机微分方程对数据进行扰动, 其表达式为:

$$dx = f(x, t)dt + g(t)d\omega, t \in [0, T] \quad (9)$$

其中,  $\omega$  是标准维纳过程, 也称为布朗运动,  $d\omega$  可以视为无穷小的白噪声;  $f(x, t): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  为随机微分方程的漂移系数;  $g(t): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  是不依赖于  $x$  的扩散系数;  $dt$  表示正无穷小的时间步长。由于扩散过程的逆向过程也是一个扩散过程, 因此对于式(9)形式的正向加噪过程, 其对应的逆向重建样本的逆过程可以建模为:

$$dx = [f(x, t) - g^2(t)\nabla_x \log p_x(x)]dt + g(t)d\bar{\omega} \quad (10)$$

其中,  $\bar{\omega}$  是时间反向的标准维纳过程;  $dt$  表示负无穷小的时间步长;  $\nabla_x \log p_x(x)$  同上一节基于分数的生成模型 SGM 一样, 需要参数化一个时间依赖的分数模型  $s_\theta(x_t, t)$  来估计分数函数。逆向 SDE 是逐渐将噪声转换为数据的扩散过程, 只是与正向 SDE 在时间上的演化是相反的。将式(8)中的目标函数推广到连续时间, 得到如下优化目标:

$$\mathbb{E}_{t \sim U[0, T], x_0, x_T} [\lambda(t) \|\nabla_x \log q_{0T}(x_t | x_0) - s_\theta(x_t, t)\|^2] \quad (11)$$

其中,  $\lambda(t)$  是一个正加权函数,  $t$  为 0 到  $T$  上的均匀分布。通过使此目标函数最小化, 估算出  $\nabla_x \log p_x(x)$  的值来进行去噪。

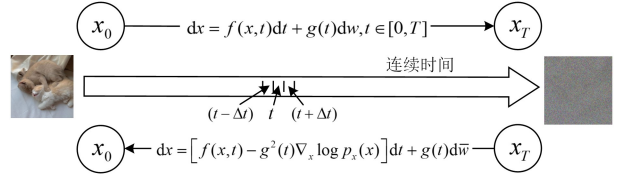


图 5 SDE 模型扩散示意图

Fig. 5 Schematic of SDE model diffusion

### 3 图扩散模型

基于对 3 种基本扩散模型范式的解析, 基本扩散模型范式难以直接应用于图数据, 其核心挑战在于以下 3 个方面。

1) 图数据具有离散性。其节点和边表示的是实体和关系, 而非连续的数据点, 这增加了图生成模型的训练和优化的复杂性。

2) 图数据样本不满足独立同分布的特性, 节点和边之间存在复杂的依赖关系。而基本范式一般假设数据样本之间是相互独立的, 这种假设使其无法直接应用于图数据。

3) 图数据具有排列不变性。在图数据中, 节点是无序的, 相同的图可以有多种等价的表示方式。传统扩散模型对节点的顺序是非常敏感的, 不同的排列会导致不同的生成结果。这种排列不变性使得扩散模型难以直接应用于图数据。

目前, 已经有多项研究改进优化了基本扩散模型范式, 将扩散模型成功地应用在图数据上, 这些模型被称为图扩散模型(GDM)。图 6 为图扩散模型的框架图。这些模型通过特定的设计来克服图数据的离散性、依赖性和排列不变性等挑战。本章将对这些图扩散模型的优化技术及其相关应用领域进行详细论述。

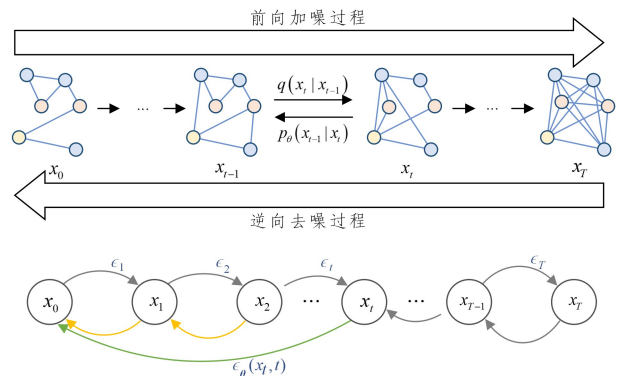


图 6 图扩散模型框架图

Fig. 6 Framework diagram of graph diffusion model

### 3.1 基于去噪扩散概率模型在图上的优化

去噪扩散概率模型(DDPM)定义了一个马尔可夫链,并缓慢地向数据中添加随机噪声,然后学习逆向扩散过程,从噪声中构建所需的数据样本。

基于 DDPM 的扩散可以确保数据在每个中间步骤保持离散,以更好地保存结构信息。本节将论述基于 DDPM 的图扩散模型的关键创新。

表 1 对这些模型进行了对比分析。

表 1 基于去噪扩散概率模型在图上的优化

Table 1 Optimization based on denoising diffusion probabilistic models on graphs

框架	模型	扩散类型	适用场景	优化目标	核心方法	局限性
DDPM	DiscDDPM <sup>[39]</sup>	离散扩散	简单小规模图	在离散空间中对图数据进行扩散	进行 one-hot 编码,并利用双随机矩阵来引入噪声	大规模图生成能力有限
	DiGress <sup>[40]</sup>	离散扩散	属性图、中小规模图	捕获图数据的结构属性	将图生成简化为节点和边的分类任务	时间复杂度较高,生成效率较低
	EDGE <sup>[41]</sup>	离散扩散	大规模稀疏图	提高大型图生成任务中的扩展性和效率	以空图为收敛分布,显式节点度数	影响模型泛化能力
	EDGE++ <sup>[42]</sup>	离散扩散	大规模稀疏图	提高生成图的效率与多样性	采用度特异噪声调度与体积保持采样	过度稀疏的中间图可能丢失重要结构信息

#### 3.1.1 离散扩散模型

Haefeli 等<sup>[39]</sup>首次提出了一种用于图生成的离散去噪扩散模型(DiscDDPM)。该模型通过设计特定的马尔可夫转移核,实现了对图数据分布的离散扰动。具体来说,在每个扩散步骤中,该模型将图的邻接矩阵的每一行进行 one-hot 编码,并利用双随机矩阵来引入噪声。在逆向过程中,该模型采用重新加权的证据下界(ELBO)作为损失函数,以确保训练过

程的稳定性和有效性。通过这一策略,模型能够高效地生成具有高质量的图数据样本。但 DiscDDPM 模型针对简单无向图,未涉及节点特征、边类型或权重,限制了其对于大规模图的生成能力。此外,为了捕获图数据中的结构信息,Vignac 等<sup>[40]</sup>提出的 DiGress 模型进一步扩展了 DDPM 算法,DiGress 是一种用于生成具有分类节点和边属性的图形的离散去噪扩散模型。图 7 展示了 DiGress 的整体模型框架。

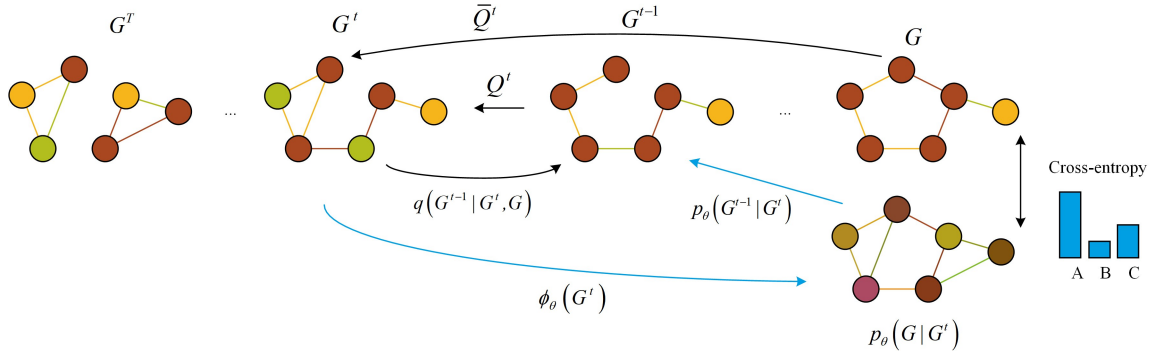


图 7 DiGress 模型的生成框架图<sup>[40]</sup>

Fig. 7 Diagram of the generative framework of the DiGress model<sup>[40]</sup>

该模型可以建模为一个马尔可夫过程:

$$\begin{aligned} q(G^t | G^{t-1}) &= (\mathbf{X}^{t-1} \mathbf{Q}_X^t, \mathbf{E}^{t-1} \mathbf{Q}_E^t) \\ q(G^t | G^t) &= (\mathbf{X} \bar{\mathbf{Q}}_X^t, \mathbf{E} \bar{\mathbf{Q}}_E^t) \end{aligned} \quad (12)$$

其中,  $G^t(\mathbf{X}^t, \mathbf{E}^t)$  为节点属性矩阵  $\mathbf{X}^t$  和边属性张量  $\mathbf{E}^t$  组成的噪声图,  $\mathbf{Q}_X^t$  和  $\mathbf{Q}_E^t$  分别是添加到节点和边上的噪声。在扩散过程中保持节点和边类型的边际分布,并在每个扩散步骤中添加从噪声图派生的辅助图论特征。这个马尔可夫过程允许在任意时间步长直接采样,不需要计算前面的步骤。在去噪阶段,DiGress 通过优化每个节点和边的预测概率与真实图之间的交叉熵损失,训练一个参数化的去噪神经网络,从而将图的分布学习简化为一系列的分类任务。DiGress 在分子和非分子数据集上都取得了先进的性能,对平面图数据集的有效性提高了 3 倍。但由于 DiGress 的图变换器网络每层的复杂度为  $O(n^2)$ , 计算复杂度高,生成效率较低。

#### 3.1.2 大规模图生成模型

针对图扩散生成模型在生成大型图时面临高计算成本的问题,Chen 等<sup>[41]</sup>设计的 EDGE 模型通过两方面创新解决了此问题:1)以空图为收敛分布,保持稀疏性;2)明确建模节点

度,以保证图相似性。显式建模节点度数虽能提升统计特征捕捉能力,但对度数分布的噪声或复杂情况敏感。若实际数据与训练分布差异较大(如长尾分布或异常度数),可能生成不符合预期的图结构,影响模型泛化能力。

Wu 等<sup>[42]</sup>在 EDGE 模型的基础上进行了改进,提出了 EDGE++ 模型。首先,引入了度特异性噪声调度策略,通过优化活跃节点数量来提高训练效率和降低内存消耗。其次,采用了体积保持采样方案,通过重新加权节点和边的分布来更精确地控制生成图与真实图的相似性。这些改进解决了 EDGE 模型计算效率低和泛化相差问题,提升了模型在生成大型图时的效率和可扩展性。度特定噪声调度通过控制活动节点数量来减少计算量,但过度稀疏的中间图可能丢失重要结构信息,影响生成图的质量。

### 3.2 基于分数的生成扩散模型在图上的优化

基于分数的生成扩散模型(SGM)通过学习数据分布的梯度场指导生成过程。研究者提出了显式结构建模以及在潜在空间扩散的方法,本节将分析这些方法,并在表 2 中对这些方法进行对比。

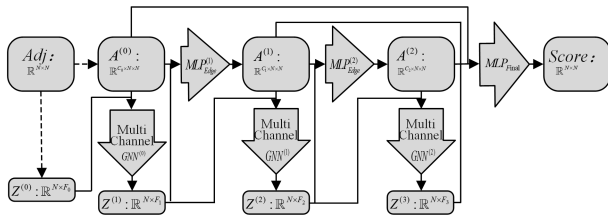
表 2 基于分数的生成扩散模型在图上的优化

Table 2 Optimization of fraction-based generative diffusion models on graphs

框架	模型	扩散类型	适用场景	优化目标	核心方法	局限性
SGM	EDP-GNN <sup>[44]</sup>	离散扩散	离散小规模图	捕捉图数据的排列不变性	使用多通道 GNN 直接建模邻接矩阵的梯度场	训练和生成时间较长
	GruM <sup>[45]</sup>	连续扩散	复杂图, 3D 图	准确捕获图的拓扑结构	创新采用显式建模与图混合方法	生成大规模图的效率较低
	SGGM <sup>[46]</sup>	连续扩散	可控多样图	充分捕获目标图集中的语义信息	将 VGAE 与 SGM 结合, 把高维转换为低维	可能导致生成图结构或语义信息的丢失
	NVDiff <sup>[47]</sup>	连续扩散	大规模通用图	提高采样速度, 降低扩散过程的维数	仅对潜在空间中的节点向量建模	不支持条件图生成

### 3.2.1 显式结构建模模型

为了解决以前在图上的深度生成模型 Graphite<sup>[43]</sup>, GraphRNN<sup>[28]</sup>在捕捉图的排列不变性方面效果欠佳的问题, Niu 等<sup>[44]</sup>提出了一种用基于分数的扩散模型生成具有排列不变性图的算法 EDP-GNN。该算法的前向过程向邻接矩阵的上三角矩阵加入独立的高斯噪声来保证加噪矩阵也是对称的, 然后使用神经网络来拟合加噪矩阵的分数函数。图 8 为 EDP-GNN 模型的生成框架图, EDP-GNN 采用了与 SGM 相似的退火郎之万动态采样方法, 使得邻接矩阵能够从采样的高斯噪声中生成。为了获取节点的特征信息, EDP-GNN 利用消息传递机制进行特征传递和聚合。但是 EDP-GNN 采用多层多通道图神经网络, 计算复杂度随节点数和通道数显著增加, 导致训练和生成时间较长。

图 8 EDP-GNN 模型的生成框架图<sup>[44]</sup>Fig. 8 Diagram of the generative framework of the EDP-GNN model<sup>[44]</sup>

针对之前图扩散模型在生成图结构数据时, 难以准确捕获图的拓扑结构, 导致生成的图结构质量差的问题, Jo 等<sup>[45]</sup>提出了一种显式拓扑建模方法 GruM。该方法通过混合一系列以最终状态为条件的扩散过程来构建生成过程。GruM 不依赖于时间反转的前向加噪过程, 而是通过直接预测生成过程的最终图结构来指导扩散过程。通过预测最终图的加权均值来显式建模图的拓扑结构, 这种预测在生成过程的早期阶段就能收敛到正确的拓扑。这种方法使得模型训练更加高效

且直接。但由于 GruM 模型采用图 Transformer 和多注意力层, 计算成本随节点数和层数显著增加, 限制了大规模图生成的效率。

### 3.2.2 潜在空间扩散模型

与直接扰动节点和邻接矩阵的方法不同, Yang 等<sup>[46]</sup>提出了一种基于分数的图生成模型 SGGM。其不是显式地对复杂离散图空间中的节点或边进行扩散, 而是首先通过对具有正态先验的 VGAE 进行预训练, 将图的扩散过程从高维离散空间转移到低维拓扑注入的潜在空间, 然后在该潜在空间中应用基于分数的模型。由于 SGGM 只需要在一个更小、更具表现力的潜在空间中优化基于分数的模型, 并学习潜在变量相对于正态先验的残差分布, 因此该扩散过程更平稳, 效率更高。但是将高维离散图空间压缩到低维潜在空间可能导致结构或语义信息的丢失, 尤其是复杂图(如大规模分子图)的细粒度特征可能无法完全保留。

基于分数的生成扩散模型在图上的另一个优化是 Chen 等<sup>[47]</sup>提出的 NVDiff 模型, 该模型通过降低扩散维数, 显著提升了采样速度, 且能生成更大规模、更高质量的图。它采用 VGAE 结构, 先对原始图潜在表示采样, 再解码节点和边缘。为保证图的排列不变性, NVDiff 提出了基于潜在节点向量的扩散过程, 降低了扩散维数, 进而提高了采样速度。此外, 模型还引入了基于注意力的评分网络来捕获图的局部和全局上下文。实验显示, NVDiff 大幅减少了计算量, 可生成更大规模的图, 但不足在于不支持条件图生成。

### 3.3 基于随机微分方程模型在图上的优化

基于随机微分方程模型通过连续时间的扩散将数据转换为高斯噪声, 再通过逆向 SDE 从噪声中恢复数据。本节将分析基于 SDE 的图扩散模型的关键创新, 表 3 总结了这些模型并进行了对比。

表 3 基于随机微分方程扩散模型在图上的优化

Table 3 Optimization of stochastic differential equation based diffusion models on graphs

框架	模型	扩散类型	适用场景	优化目标	核心方法	局限性
SDE	GDSS <sup>[48]</sup>	连续扩散	分子图生成	全面捕获图结构中的节点-边缘依赖关系	对节点属性和邻接矩阵的联合分布同时建模	训练和采样过程计算成本较高
	GSDM <sup>[49]</sup>	连续扩散	大规模稀疏图	提升图数据的生成质量	在图谱空间加噪声, 逐步扰动数据分布	对于高秩图的生成可能导致失效
	GraphGDP <sup>[50]</sup>	连续扩散	通用图生成	捕获图数据的排列不变性	将 SDE 和 PGSN 结合, 准确估计扰动图分数	位置信息的依赖导致模型的灵活性下降
	HGDM <sup>[51]</sup>	连续扩散	层次结构数据	生成具备复杂层次结构的图数据	将双曲空间与扩散模型结合	时间复杂度高, 生成开销大

### 3.3.1 联合扩散模型

为了全面捕获图结构中的节点-边缘依赖关系,GDSS<sup>[48]</sup>首次提出了一种基于连续时间的图扩散方法。为了同时生成图的邻接矩阵和节点特征,GDSS通过一个随机微分方程系统对节点属性集 $\mathbf{X}$ 和邻接矩阵 $\mathbf{A}$ 的联合分布同时建模。在前向过程中,原始数据 $(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)$ 被一个随机微分方程系统联合扰动,而生成过程使用逆向的随机微分方程系统来恢复数据结构。生成过程中需要估计联合分布 $(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)$ 的分数函数,即 $\nabla_{\mathbf{X}, \mathbf{A}_t} \log p_\theta(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)$ 。与Score SDE类似,使用线性的漂移系数且扩散系数与数据无关,这样逆向过程就可以表示为如下的随机微分方程:

$$\begin{cases} d\mathbf{X}_t = [\mathbf{f}_{1,t}(\mathbf{X}_t) - \mathbf{g}_{1,t}^2 \nabla_{\mathbf{X}_t} \log p_t(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)] dt + \mathbf{g}_{1,t} d\mathbf{w}_1 \\ d\mathbf{A}_t = [\mathbf{f}_{2,t}(\mathbf{A}_t) - \mathbf{g}_{2,t}^2 \nabla_{\mathbf{A}_t} \log p_t(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)] dt + \mathbf{g}_{2,t} d\mathbf{w}_2 \end{cases} \quad (13)$$

在扩散过程中 $(\mathbf{X}_t, \mathbf{A}_t)$ 是相互关联的,GDSS使用偏分数函数对这种关联性进行建模,使其可以表达整个图的扩散过程。另外,有两个图神经网络来估计偏分数函数,其中使用消息传递操作和注意力机制来保证图的排列不变性。GDSS同时处理节点特征和邻接矩阵的扩散过程,导致训练和采样过程计算成本较高。

### 3.3.2 谱域空间扩散模型

Luo等<sup>[49]</sup>认为,将基于SDE的全秩扩散模型应用于整个图的邻接矩阵空间会阻碍扩散模型学习图的拓扑结构和特征表示,从而降低生成图数据的质量。Luo等<sup>[49]</sup>设计了一个与图拓扑结构相适应的扩散模型,称为GSDM。该模型也是由节点特征空间和图谱空间上的扩散SDE驱动。在每个扩散步骤中,模型将高斯噪声插入限制在图谱空间,即邻接矩阵的特征值矩阵中。这种方法能以较少的计算消耗逐步扰动数据分布,同时获得更高的生成质量。实验结果表明,这种方法在通用图和分子生成任务中都是有效的。GSDM假设图的邻接矩阵是低秩的,这在稀疏图(如分子、社交网络)中有效,但对于高秩图(如密集的随机图)可能失效。此时,低秩扩散可能无法捕捉高阶结构信息,导致生成质量下降。

### 3.3.3 位置增强扩散模型

为了满足排列不变性和捕捉不断变化的图拓扑结构,Huang等<sup>[50]</sup>提出的GraphGDP模型设计了一个位置增强的图分数网络(PGSN),该网络能够从摄动图中提取结构和位置特征,并将其与密集连续邻接矩阵相结合,从而准确地估计摄动图的排列等变分数。GraphGDP模型利用优化的PGSN和逆时SDE的数值求解器,能够沿着近似轨迹获得最终图样本。实验结构表明,GraphGDP模型在图生成任务中实现了比自回归模型更好或者相当的采样质量,并显示出有效采样的强大潜力。PGSN通过随机游走提取节点位置信息,步数选择直接影响性能。步数过少可能无法捕捉全局结构,步数过多则增加计算负担。

### 3.3.4 双曲空间扩散模型

Wen等<sup>[51]</sup>提出的HGDM模型通过融合双曲空间与扩散模型,为图生成任务提供了一种新颖的解决方案。该模型缓解了传统欧几里德空间扩散模型在处理高度层次

化图数据时的局限性。HGDM采用双曲变分自编码器学习节点的连续嵌入,并结合双曲扩散模型来建模节点与邻接矩阵间的复杂依赖关系。此方法不仅保持了扩散模型的数据生成优势,还利用双曲空间更有效地捕捉了图的层次结构。实验结果显示,HGDM在通用图和分子图生成任务中均表现出色,显著提升了生成图数据的质量。这一创新性的结合为图生成领域带来了新的视角和思路。但是,双曲空间中的指数映射、对数映射及平行传输操作显著增加了计算复杂度。

## 4 图扩散模型的性能评估

本章首先总结了图扩散模型生成图任务常用的数据集以及评估方法,并将其分类。然后对图扩散生成的部分算法在Community-small数据集和Ego-small数据集上的MMD评估结果进行了对比分析。

### 4.1 数据集

本节讨论了最常用的评估数据集,如表4所列,按维度可分为二维结构图(如社交网络)和三维生物分子图(如蛋白质结构)两类。

表4 图扩散模型常用评估数据集

维度	数据集	领域	图数量	节点规模
2D	Community-small	社交网络	100	$11 < N < 20$
	Ego-small	引文网络	200	$3 < N < 18$
	Grid	网格结构	100	$N \leq 400$
3D	QM9	生物小分子	130 831	$3 < N < 29$
	ZINC250K	药物分析	249 456	$6 < N < 38$
	Enzymes	蛋白质	600	$9 < N < 125$

#### 4.1.1 二维数据集

Community-small<sup>[46]</sup>:包含100个小规模社区网络图,节点数量为12~20,每个社区内部节点连接密度显著高于跨社区连接。

Ego-small<sup>[52]</sup>:基于Citeseer引文网络构建,包含200个引用自引子图(Ego-network),节点数量为4~18。

Grid<sup>[28]</sup>:由100个标准二维网格图构成,节点规模小于等于400,遵循4邻域或8邻域连接规则,用于检验模型对刚性拓扑约束的遵守能力。

#### 4.1.2 三维数据集

QM9<sup>[53]</sup>:包含13.4万个有机小分子(原子数小于等于9),每个分子包含C/H/O/N/F这5种原子类型,用于分子生成与量子化学性质预测。其严格遵循化学价键规则(如碳原子4价),可验证生成的分子结构的合法性。

ZINC250K<sup>[54]</sup>:从ZINC化合物库精选25万类药物分子,节点数量为6~38,包含多种药效团结构(如苯环、杂环),用于药物分子生成任务。该数据集强调类药性与合成可行性,验证模型生成药理活性分子的能力。

Enzymes<sup>[48]</sup>:包含587种酶蛋白的3D结构图,节点数量为10~125。该数据集用于评估模型对复杂生物大分子拓扑的建模能力,反映了生成结构的生物功能性。

### 4.2 评价指标

图扩散模型生成图的性能评估方法主要涵盖3类,即基

于统计相似性的评估、基于分类器的评估以及基于本征质量的评估。前两类评估方法需要计算生成图和真实图之间的差异,而本征质量评估直接测量生成图的属性。

#### 4.2.1 基于统计相似性的评估

基于统计相似性的评估方法指通过最大平均差异<sup>[55]</sup>(Maximum Mean Discrepancy, MMD)对比生成图与真实图在度分布、聚类系数和轨道技术等统计量上的距离。

1) 节点度分布(Deg.): 统计节点度数分布,用于捕捉网络连接密度特性。

2) 聚类系数分布(Clus.): 量化图中节点的邻居之间相互连接的紧密程度,反映图的社区结构特征。

3) 轨道技术分布(Orb.): 节点参与的4-轨道子结构数量分布,衡量图的高阶结构生成质量。

#### 4.2.2 基于分类器的评估

基于分类器的评估方法<sup>[56]</sup>通过隐式捕捉图结构的分布特征,该方法的核心在于利用图同构网络<sup>[57]</sup>(Graph Isomorphism Network, GIN)强大的表达能力构建判别模型,其技术路径可分为以下两类。

1) 准确率评估: 首先,在训练模型时使用多类型图训练集预训练GIN。然后,对于每种类型的生成图,使用训练好的GIN对其进行分类,分类准确率即为最终评估指标。

2) FID评估: 将生成图和真实图分别输入预训练的GIN模型,获取其嵌入向量;然后分别估计两组嵌入的均值和协方

差矩阵,通过计算这两个多元高斯分布之间的距离(包括均值的范数和协方差矩阵的迹)来量化生成质量。FID值越低,表明生成图的分布越接近真实图,生成质量和多样性越高。该方法通过隐式学习图的高层语义特征,来有效评估生成模型对复杂结构的拟合能力。

#### 4.2.3 基于本征质量的评估

基于本征质量的评估主要包括有效性、唯一性和新颖性3种指标。这些指标无须依赖真实数据分布,直接反映生成图的固有属性,特别适用于领域特定任务(如分子设计)。

1) 有效性(Validity): 由于生成图有时需要保留特定属性(如化学分子的价键规则),可直接通过判断其是否满足这些要求来评估。

2) 唯一性(Uniqueness): 衡量生成图的多样性,计算去除重复图后的剩余比例。若生成100个完全相同的图,则唯一性为1%。

3) 新颖性(Novelty): 评估生成图对训练数据的泛化能力,计算未在训练集中出现的生成图比例。若所有生成图均为训练图的子图,则新颖性为0%。

### 4.3 实验结果与分析

为了对比分析图扩散模型在生成图任务上的性能,本节总结了其他深度生成模型代表性算法与图扩散模型算法并进行了对比。表5列出了这些算法在Community-small数据集和Ego-small数据集上的MMD指标的结果。

表5 各模型在Community-small和Ego-small数据集上的MMD指标的结果

Table 5 MMD metric results for each model on the Community-small and Ego-small datasets

模型	类型	Community-small				Ego-small			
		Deg.	Clus.	Orbit.	Avg.	Deg.	Clus.	Orbit.	Avg.
GraphVAE <sup>[19]</sup>	VAE	0.350	0.980	0.540	0.623	0.130	0.170	0.050	0.117
GraphDF <sup>[26]</sup>	NF	0.060	0.120	0.030	0.070	0.040	0.130	0.010	0.060
GNF <sup>[27]</sup>	NF	0.200	0.200	0.110	0.170	0.030	0.100	<b>0.001</b>	0.044
GraphRNN <sup>[28]</sup>	AR	0.080	0.120	0.040	0.080	0.090	0.220	0.003	0.104
EDP-GNN <sup>[44]</sup>	SGM	0.053	0.144	0.026	0.074	0.052	0.093	0.007	0.051
SGGM <sup>[46]</sup>	SGM	0.041	0.079	0.010	0.043	0.025	0.028	0.009	0.021
NVDiff <sup>[47]</sup>	SGM	0.021	0.035	0.018	0.025	<b>0.005</b>	0.045	<b>0.001</b>	0.017
GDSS <sup>[48]</sup>	SDE	0.045	0.086	0.007	0.046	0.021	0.024	0.007	0.017
GSDM <sup>[49]</sup>	SDE	<b>0.011</b>	<b>0.015</b>	<b>0.001</b>	<b>0.009</b>	—	—	—	—
GraphGDP <sup>[50]</sup>	SDE	0.039	0.074	—	—	0.023	0.029	—	—
HGDM <sup>[51]</sup>	SDE	0.017	0.050	0.005	0.024	0.015	<b>0.023</b>	0.003	<b>0.014</b>

基于表5的实验结果,图扩散模型在生成任务中展现出了多维度的性能优势。在Community-small数据集上,SDE类模型(如GSDM, GDSS)不仅平均MMD值显著低于其他模型,且在节点度分布和轨道统计量等细粒度指标上均实现数量级优势,如GSDM的Orbit.指标为0.001,而GraphVAE为0.540。这一现象可归因于扩散模型通过连续时间随机过程逐步去噪的生成机制,能够更稳定地捕捉全局图结构的统计规律。相比之下,基于标准化流的方法(如GraphDF)虽在Deg.指标上表现较好,但其对复杂聚类模式的建模能力有限,反映出确定性变换函数在表征图结构高阶关联性时的不足。

在Ego-small数据集上,图扩散模型的优势进一步凸显。SGM类模型(如NVDiff)通过隐式分数匹配策略,在Deg.指标上达到0.005的极低误差,表明其对局部节点中心性特征的高精度生成能力。而SDE类模型HGDM在平

均MMD上超越所有对比模型,尤其在Clus.指标(0.023)上较自回归模型GraphRNN(0.220)提升近一个数量级,验证了基于分数匹配的扩散过程在平衡全局拓扑与局部结构生成中的有效性。

总体而言,图扩散模型通过将动态扩散机制与隐式分布建模结合,在生成质量与稳定性上显著优于传统生成范式。

## 5 图扩散模型的应用

随着图扩散模型在图生成任务上不断演进与多样化方法的涌现,其具有竞争力的生成能力、泛化能力以及高度的灵活性得以凸显。这些优势特征促使图扩散模型在多个领域展示出广泛的应用潜力,尤其在推荐系统、分子建模以及蛋白质生成等领域中已经出现很多相关的研究。本章将系统性地总结和论述图扩散模型在这些领域的应用研究。

## 5.1 推荐系统

图扩散模型凭借其在处理复杂分布和避免模式崩溃方面的优势,逐渐在推荐系统中得到广泛应用。其通过模拟数据

在图结构上的扩散过程,能够有效挖掘用户与物品之间的潜在关系,从而为用户提供更精准的推荐。表6列出了图扩散模型在推荐系统中应用的代表方法。

表6 图扩散模型在推荐系统中的应用

Table 6 Application of graph diffusion models in recommendation systems

应用方向	研究工作	核心方法	优势/特点
协同过滤	CODIGEM <sup>[58]</sup>	基于DDPM框架建模用户-项目交互矩阵,通过噪声注入与去噪生成鲁棒隐式表示	首个扩散推荐模型,解决数据稀疏性问题,增强泛化能力
	CF-Diff <sup>[59]</sup>	引入多跳邻域信息,设计交叉注意力多跳自编码器指导反向去噪过程	融合高阶协作信号,提升稀疏交互下的推荐精度
	DiffGT <sup>[60]</sup>	各向异性噪声注入图节点特征,利用图神经编码器提取邻接矩阵信息引导去噪	显式建模图结构关系,增强复杂交互模式的捕捉能力
	SCONE <sup>[61]</sup>	通过扩散模型生成对比视图与困难负样本,联合优化图编码器表征学习	结合对比学习提升模型对噪声数据的鲁棒性,降低假阳性干扰
序列推荐	DCPR <sup>[62]</sup>	分离类别与位置嵌入扩散过程,结合DDIM采样与用户短期移动模式语义条件生成	高效处理时空动态性,适用于POI推荐场景
	DCRec <sup>[63]</sup>	双重条件扩散框架;历史序列嵌入拼接输入并作为反向过程条件,联合优化目标项目生成	细粒度建模兴趣演化,支持动态序列生成
	Diff4Rec <sup>[64]</sup>	两阶段数据增强;扩散模型重构用户交互序列,课程调度策略优化下游模型训练	缓解数据稀疏性,增强模型对长尾项目的覆盖能力
	DreamRec <sup>[65]</sup>	Transformer编码历史序列语义,结合ChatGPT生成用户意图描述增强条件引导	融合外部语义知识,提升推荐多样性与可解释性
多模态推荐	LD4MRec <sup>[66]</sup>	正向扩散用户交互,反向以物品的视觉和文本特征为条件去噪,并进行平滑处理	有效整合多模态特征,缓解热门物品过度推荐问题
	DiffMM <sup>[67]</sup>	跨模态扩散增强框架生成对比样本,联合优化视觉、文本与声学模态的对比学习目标	缓解模态异构性,增强跨模态语义对齐能力
	MCDRec <sup>[68]</sup>	跨模态对比损失约束生成嵌入的一致性,联合优化视觉-文本条件扩散过程	精确建模用户偏好,提升推荐的准确性和个性化程度

### 5.1.1 协同过滤

协同过滤(Collaborative Filtering, CF)依赖用户-物品交互矩阵挖掘潜在偏好,但传统矩阵分解方法面临数据稀疏性与高阶关系建模不足的双重挑战。图扩散模型通过引入噪声注入与迭代式去噪,可有效增强隐式反馈的鲁棒性。

CODIGEM<sup>[58]</sup>作为奠基性工作,首次将去噪扩散概率模型(DDPM)引入协同过滤任务。其通过正向扩散过程对用户-物品交互矩阵逐步加噪,并在反向过程中学习噪声分布以恢复原始信号,生成的隐式表示显著提升了模型泛化能力。为进一步捕捉用户兴趣传播路径,CF-Diff<sup>[59]</sup>创新性地引入多跳邻域信息,设计交叉注意力引导的多跳自编码器,通过融合2跳、3跳邻居的高阶协作信号,增强了对稀疏交互的建模精度。针对图结构特性,DiffGT<sup>[60]</sup>提出各向异性噪声注入策略,将用户与物品建模为图节点,利用图神经编码器提取邻接矩阵特征指导去噪,显式刻画复杂拓扑关系。此外,SCONE<sup>[61]</sup>通过扩散模型生成对比视图与困难负样本,结合对比学习优化图编码器表征,降低了假阳性交互对模型训练的干扰。

### 5.1.2 序列推荐

序列推荐(Sequential Recommendation, SR)旨在基于用户历史行为序列预测下一交互项目。图扩散模型通过条件生成与动态噪声调度,解决了离散推荐数据的建模难题。

典型方法DCPR<sup>[62]</sup>针对兴趣点(POI)推荐场景,分别构建类别与位置嵌入的独立扩散通道,并采用DDIM采样加速推理过程。该方法将用户短期移动模式语义作为反向去噪条件,有效融合了时空动态特征。DCRec<sup>[63]</sup>则提出双重条件扩散框架:一方面将历史序列嵌入与目标项目拼接为扩散输入,

另一方面以序列整体表征为条件引导去噪,实现细粒度的兴趣演化建模。针对数据稀疏性问题,Diff4Rec<sup>[64]</sup>设计两阶段增强策略,第一阶段利用扩散模型重构用户交互序列以提升数据密度,第二阶段通过课程调度机制优化下游模型训练,显著改善长尾项目覆盖率。对于动态兴趣建模,DreamRec<sup>[65]</sup>引入大语言模型(如ChatGPT)生成用户意图描述,将其作为扩散过程的条件信号,通过Transformer编码时序语义,在提升推荐多样性的同时增强可解释性。

### 5.1.3 多模态推荐

多模态推荐(Multi-modal Recommendation, MR)需融合视觉、文本、声学等多源信息,图扩散模型通过跨模态条件生成与联合表征学习,实现异构特征的深度对齐。

代表性工作LD4MRec<sup>[66]</sup>在反向去噪过程中引入物品的视觉与文本特征作为条件信号,并通过平滑处理降低热门物品的过度曝光,在提升推荐公平性的同时增强跨模态一致性。DiffMM<sup>[67]</sup>提出跨模态扩散增强框架,在用户交互序列上应用扩散模型生成增强数据,并结合对比学习对齐视觉、文本与声学模态特征。其核心创新在于利用扩散生成的高质量负样本优化跨模态相似性度量。进一步地,MCDRec<sup>[68]</sup>采用解耦式扩散策略,将物品嵌入扩散过程与多模态条件生成分离,通过贝叶斯个性化排序框架动态调整模态权重,精准建模用户偏好并提升个性化程度。

## 5.2 分子建模

分子建模旨在通过图学习技术深入探索分子复杂结构和性质,进而创造出具有特定功能性质的新分子。在图学习的框架中,分子自然地表示为一种图结构数据,其中原子作为图的节点,化学键则构成连接这些节点的边。很多研究者将分

子图生成与扩散模型相结合,以增强对分子的建模能力,下文将对图扩散模型在分子构象生成任务以及蛋白质生成任务中

的主要方法展开详细阐述。表 7 列举了图扩散模型在分子建模中应用的代表性方法。

表 7 图扩散模型在分子建模中的应用  
Table 7 Application of graph diffusion models in molecular modeling

应用方向	研究工作	核心方法	优势/特点
分子构象生成	ConfGF <sup>[71]</sup> DGSM <sup>[72]</sup>	通过去噪分数匹配估计原子间距离梯度,得到坐标梯度,估计原子坐标密度梯度场,利用郎之万动力学直接生成分子构象	解决多级积累错误问题,考虑原子间相互作用
	GeoDiff <sup>[74]</sup>	结合去噪扩散概率模型,模拟非平衡热力学中的扩散过程,考虑分子的旋转-平移不变性	基于 2D 分子图逐步去噪生成 3D 化合物
	EDM <sup>[75]</sup>	使用 DDPM 对不同特征添加不同噪声,通过等变网络学习去噪扩散过程,同时处理连续和分类特征	灵活处理分子特征,为分子构象生成提供新方式
	EEGSDE <sup>[76]</sup>	在 EDM 模型中加入能量函数作为指导,采用随机微分方程的生成模型	充分学习分子几何对称性,提高生成准确性和可靠性
	Torsional Diffusion <sup>[77]</sup> MDM <sup>[78]</sup>	在扭转角的空间上进行操作,即在扭转角上进行扩散,并使用了基于分数的扩散模型 引入物理相互作用力,如共价键和范德华力	每次将 3D 坐标去噪的过程转换为内部扭转角更新的过程 增强分子表征,准确模拟原子间的相互作用
蛋白质生成	ProSSDG <sup>[79]</sup>	利用等变去噪扩散概率模型,结合三角形自关注机制和不变点注意力机制	克服原子位置分布约束,提高模型准确性和泛化能力
	RFdiffusion <sup>[81]</sup>	使用迭代去噪与 RoseTTAFold 微调,用相对坐标生成高质量蛋白质结构	在蛋白质单体设计上取得出色性能
	ProteinSGM <sup>[83]</sup>	基于分数的生成模型,学习从高斯噪声中抽取并去噪、重构 6D 坐标	为全新支架生成问题提供创新解决方案
	SMCDiff <sup>[84]</sup> FoldingDiff <sup>[85]</sup>	结合等变图神经网络和基于评分的扩散生成模型 采用相对坐标表示法,结合生物信息学限制	有效设计蛋白质支架 实现高质量蛋白质结构的生成

### 5.2.1 分子构象生成

分子可以用三维几何构象来表示,其中每个原子的位置用笛卡尔坐标表示。分子构象生成是识别给定分子中有效且有用的原子坐标集的过程。在生物和化学信息领域,预测分子构象是一个基本问题。

以前基于机器学习的方法<sup>[69-70]</sup>通常首先预测原子之间的距离,然后生成满足这些距离约束的三维结构。但是,预测的距离往往带有误差,导致这类方法生成的三维结构误差较大。以经典力场为灵感,Shi 等<sup>[71]</sup>提出了一种独特的小分子构象生成方法 ConfGF,解决了多级积累错误的问题。首先通过去噪分数匹配估计原子间距离梯度,得到坐标梯度,然后估计原子坐标密度梯度场,并通过郎之万动力学直接生成分子构象。除此之外,针对过去的方法<sup>[69-70]</sup>通常忽略了远程非键原子之间的相互作用的问题,Luo 等<sup>[72]</sup>提出的 DGSM 模型继续发展了 ConfGF 的方法,采用分数匹配直接求原子坐标对数密度梯度的梯度场。

另一方面,基于变分自编码器和基于流的深度生成方法<sup>[69,73]</sup>,通过学习旋转-平移不变的中间几何变量,避免直接建模原子坐标,但受限较多。Xu 等<sup>[74]</sup>提出的 GeoDiff 模型结合去噪扩散概率模型,模拟非平衡热力学中的扩散过程,同时考虑分子的旋转-平移不变性。

在分子上使用扩散模型的另一个挑战在于,不能通过向每个特征添加相同的高斯噪声来工作。为此,Hoogeboom 等<sup>[75]</sup>提出的 E(3)等变扩散模型(EDM)使用去噪扩散概率模型对不同的特征添加不同的噪声。通过一个等变网络学习去噪扩散过程,能同时对连续特征(原子坐标)和分类特征(原子类型)进行操作。在此基础上,Bao 等<sup>[76]</sup>提出的等变能量引导的 SDE 模型 EEGSDE,在 EDM 模型中加入能量函数作为指导,充分学习分子的几何对称性,采用随机微分方程的生成模型来生成三维分子构象。

与之前在欧几里德空间上的扩散过程不同,Jing 等<sup>[77]</sup>提出的扭转扩散模型(Torsional Diffusion)在扭转角空间上进行操作,减少去噪步骤,提高生成效率。除了增加能量引导,学习分子的原子坐标和扭转角外,还可以在模型中引入其他领域的知识,增强分子表征的学习。为了模拟分子表示中原子间的相互作用,Huang 等<sup>[78]</sup>提出的 MDM 模型引入物理相互作用力(如共价键和范德华力)来增强分子表征。

### 5.2.2 蛋白质生成

蛋白质生成的目标是创造具有特定结构和功能的蛋白质,通过预训练扩散模型来学习目标蛋白质的分布特征。为克服原子位置分布的先验约束,Anand 等<sup>[79]</sup>提出了一种用等变去噪扩散概率模型生成蛋白质结构和序列的方法 ProSSDG。具体而言,ProSSDG 模型利用一个具备三角形自关注机制的 Transformer 模型<sup>[80]</sup>,以在特定的约束条件下生成特征嵌入。此外,ProSSDG 采用了不变点注意力机制来代替传统的注意过程,这种机制能够更好地捕获蛋白质结构中原子间的空间关系,提高模型的准确性和泛化能力。同样地,Watson 等<sup>[81]</sup>提出的 RFdiffusion 模型通过微调结构预测网络 RoseTTAFold<sup>[82]</sup>,在蛋白质单体设计上取得了出色性能。

传统的蛋白质设计方法受限于已知的天然蛋白质折叠形态和结构-功能关系。为克服此限制,Lee 等<sup>[83]</sup>提出了基于分数的生成模型 ProteinSGM,旨在创造全新的蛋白质结构。在训练过程中,该模型学习了一个分数函数,此函数能从高斯噪声中抽取并去噪、重构 6D 坐标。通过优化此函数,ProteinSGM 实现了从噪声到真实蛋白质结构的转化。该模型结合评分基础的扩散生成方法与图像化的蛋白质结构表示,配合 Rosetta 等工具,为蛋白质设计中的全新支架生成问题提供了创新解决方案。另外,Trippe 等<sup>[84]</sup>提出的 SMCDiff 模型则通过结合等变图神经网络和基于评分的扩散生成模型,有效设

计了蛋白质支架。Wu等<sup>[85]</sup>提出的FoldingDiff模型采用相对坐标表示法,结合生物信息学限制,实现了高质量蛋白质结构的生成。

## 6 研究工作展望

基于以上对图扩散模型的论述可以发现,图扩散模型在生成能力以及应用的灵活性等方面具有一定的优势。但是对于图扩散模型的研究尚处于起步阶段,其在理论和实证方面都有很大的改进空间。如何在图上定义一个好的扩散过程是当下图扩散模型中的一个最重要的研究热点。事实上,图扩散模型的研究仍然存在很多的困难和挑战。本章将讨论当前图扩散模型研究工作中面临的挑战,并对未来可能的研究方向进行展望。

### 6.1 图数据的离散性

在图数据分析和生成的研究领域中,离散性一直是一个固有的挑战。与连续型数据不同,图数据由节点和边组成,其元素通常是离散的,如社交网络中的用户或生物网络中的蛋白质。这种离散性使得研究人员难以直接应用基于连续空间的扩散模型。这种情况下,一种策略试图通过引入离散概率分布来模拟图数据的离散特性。这种方法在保持图数据离散性的同时,利用扩散模型捕捉节点间的相互依赖和信息交互。然而,这种方法也面临着如何有效建模节点间复杂关系和如何确保模型的可扩展性等挑战。另一种策略是将离散的图数据映射到连续的潜在空间,通过学习节点的潜在表示,将离散的图数据转换为连续的向量,从而可以应用基于连续空间的扩散模型。然而,如何设计有效的映射函数和如何确保潜在空间能够准确反映图数据的结构和性质,是这类方法需要解决的关键问题。

### 6.2 图扩散模型的条件生成

在图数据的研究中,生成符合特定条件的图样本是一个至关重要的任务。尤其在生物信息学领域,为了生成具有特定性质的分子和蛋白质,对图生成模型设置一定的条件约束是非常关键的。因此,在图扩散模型中引入额外信息作为条件已成为一个势在必行的研究方向。这些额外信息不仅有助于指导图生成过程,还能为生成的图数据提供丰富的背景知识和上下文信息。常见的额外信息类型有知识图谱、视觉信息、文本信息等。例如,在生物信息学领域,将知识图谱中的关系作为条件引入图扩散模型,可以确保生成的图数据符合已知的生物学规律。

### 6.3 图扩散应用的拓展

图扩散模型作为目前最新的深度生成模型,在各个领域的应用都处于探索阶段。目前大多数现有的图扩散技术应用在推荐系统、分子建模,对图扩散模型应用潜力的挖掘还不充分。事实上,图数据无处不在,图上的许多应用场景仍待进一步探索,例如社交网络、图异常检测和因果图生成等。探索图扩散模型与其他图数据领域之间的应用是未来一个重要的研究方向。

### 6.4 评价体系

基于前文对图扩散模型评估方法的系统性分析可以发现,现有评估方法依赖于图结构的统计先验特征以及生成图

的属性特征,其局限性表现在以下3个方面:1)在领域适应性方面,通用指标难以满足特定任务需求,需结合领域知识设计专用指标,如分子生成中的功能基因保留率等,以量化条件生成能力;2)针对生成多样性与真实性的平衡问题,应采用融合图结构相似性与语义一致性的联合评估方法,避免传统分离式指标的片面性;3)图扩散模型应在计算复杂度与可扩展性上缺乏系统评估标准,需建立动态资源消耗指标。

未来研究应构建具有多维指标、动态框架、领域自适应的评估体系,为模型优化与应用提供依据。

**结束语** 图扩散模型作为一种新兴的深度生成技术,在图生成任务上已展现出显著的优势和潜力。尽管当前图扩散模型的研究尚处于早期阶段,但其独特的扩散机制和数学原理为复杂图数据的生成和分析提供了新的视角和方法。

本文从扩散模型的基本原理出发,深入探讨了如何有效地将图数据运用到3种基本扩散模型,并且针对图的离散性、排列不变性以及不满足独立同分布的问题,现有的图扩散模型如何设计扩散过程。以此对目前图扩散模型进行全面的总结,为后续研究工作提供了丰富的参考。此外,通过对图扩散模型在推荐系统、分子建模领域代表性工作的总结,为进一步探索复杂网络数据的生成和分析提供了重要参考。最后,本文对该领域目前存在的研究挑战进行了总结,从图数据的离散性、图扩散的条件生成、图扩散应用的拓展以及评价体系的角度,对未来潜在的研究方向进行了深入分析,为研究者提供了有价值的参考。本文详实细致地总结了图扩散模型方法与应用,有助于推动该领域的进一步发展。

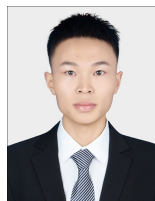
## 参考文献

- [1] YANG Q, LI P, XU X, et al. A comparative study on enhancing prediction in social network advertisement through data augmentation[C]// 2024 4th International Conference on Machine Learning and Intelligent Systems Engineering (MLISE). IEEE, 2024:214-218.
- [2] FAN W Q, DERR T, MA Y, et al. Deep adversarial social recommendation[C]// Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence. AAAI, 2019:1351-1357.
- [3] GHOSH A, MITRA S, LAN A. Dips: differentiable policy for sketching in recommender systems [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2022:6703-6712.
- [4] LUO H, MENG X, WANG S, et al. Spectral-based graph neural networks for complementary item recommendation [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2024:8868-8876.
- [5] XU M, POWERS A S, DROR R O, et al. Geometric latent diffusion models for 3d molecule generation[C]// International Conference on Machine Learning. PMLR, 2023:38592-38610.
- [6] HUANG L, XU T, YU Y, et al. A dual diffusion model enables 3D molecule generation and lead optimization based on target pockets [J]. Nature Communications, 2024, 15(1):2657.
- [7] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[C]// International Conference on Learning Representations. 2017.
- [8] HAMILTON W, YING Z, LESKOVEC J. Inductive representa-

- tion learning on large graphs[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. 2017;1025-1035.
- [9] AMIT T, SHAHARBANY T, NACHMANI E, et al. Segdiff: Image segmentation with diffusion probabilistic models[C]//Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2018.
- [10] HO J, SAHARIA C, CHAN W, et al. Cascaded diffusion models for high fidelity image generation [J]. Journal of Machine Learning Research. 2022, 23(47):1-33.
- [11] GAO Z, GUO J, TAN X, et al. Difformer: Empowering diffusion models on the embedding space for text generation[C]//Proceedings of the 2024 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics. 2024; 4664-4683.
- [12] GONG S, LI M, FENG J, et al. Diffuseq: Sequence to sequence text generation with diffusion models [C]//International Conference on Learning Representations. 2023.
- [13] TASHIRO Y, SONG J, SONG Y, et al. CSDI: Conditional score-based diffusion models for probabilistic time series imputation [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2021, 34:24804-24816.
- [14] ALCARAZ J M L, STRODTHOFF N. Diffusion-based time series imputation and forecasting with structured state space models [J]. arXiv:2208.09399, 2022.
- [15] JIANG Y, YANG Y, XIA L, et al. Diffkg: Knowledge graph diffusion model for recommendation[C]//Proceedings of the 17th ACM International Conference on Web Search and Data Mining. 2024;313-321.
- [16] WU L, GONG C, LIU X, et al. Diffusion-based molecule generation with informative prior bridges [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2022, 35:36533-36545.
- [17] KINGMA D P, WELING M. Auto-encoding variational Bayes [J]. arXiv:1312.6114, 2013.
- [18] KIPF T N, WELING M. Variational graph auto-encoders [J]. arXiv:1611.07308, 2016.
- [19] SIMONOVSKY M, KOMODAKIS N. GraphVAE: Towards generation of small graphs using variational autoencoders[C]//Artificial Neural Networks and Machine Learning-ICANN 2018; 27th International Conference on Artificial Neural Networks. Springer, 2018; 412-422.
- [20] LIU Q, ALLAMANIS M, BROCKSCHMIDT M, et al. Constrained graph variational autoencoders for molecule design [C]//Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems. Curran Associates Inc. , 2018; 7806-7815.
- [21] GOODFELLOW I, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial networks [J]. Communications of the ACM, 2020, 63(11):139-144.
- [22] DE CAO N, KIPF T. MolGAN: An implicit generative model for small molecular graphs [J]. arXiv:1805.11973, 2018.
- [23] YANG C, ZHUANG P, SHI W, et al. Conditional structure generation through graph variational generative adversarial nets [C]//Conference on Neural Information Processing Systems. 2019;1338-1349.
- [24] REZENDE D, MOHAMED S. Variational inference with normalizing flows [C] // International Conference on Machine Learning. PMLR, 2015;1530-1538.
- [25] ZANG C, WANG F. Moflow: an invertible flow model for generating molecular graphs [C] // Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. 2020;617-626.
- [26] LUO Y, YAN K, JI S. Graphdf: A discrete flow model for molecular graph generation[C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021;7192-7203.
- [27] LIU J, KUMAR A, BA J, et al. Graph normalizing flows[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. Red Hook, NY: Curran Associates Inc. , 2019;13578-13588.
- [28] YOU J, YING R, REN X, et al. Graphrnn: Generating realistic graphs with deep auto-regressive models [C] // International Conference on Machine Learning. PMLR, 2018;5708-5717.
- [29] POPOVA M, SHVETS M, OLIVA J, et al. MolecularRNN: Generating realistic molecular graphs with optimized properties [J]. arXiv:1905.13372, 2019.
- [30] HO J, JAIN A, ABBEEL P. Denoising diffusion probabilistic models [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33:6840-6851.
- [31] NICHOL A Q, DHARIWAL P. Improved denoising diffusion probabilistic models[C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021;8162-8171.
- [32] SOHL-DICKSTEIN J, WEISS E, MAHESWARANATHAN N, et al. Deep unsupervised learning using nonequilibrium thermodynamics[C] // International Conference on Machine Learning. PMLR, 2015;2256-2265.
- [33] SONG Y, ERMON S. Generative modeling by estimating gradients of the data distribution[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. Red Hook, NY: Curran Associates Inc. , 2019;11918-11930.
- [34] SONG Y, ERMON S. Improved techniques for training score-based generative models [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33:12438-12448.
- [35] SONG Y, DURKAN C, MURRAY I, et al. Maximum likelihood training of score-based diffusion models [J]. Advances in Neural Information Processing Systems. 2021, 34:1415-1428.
- [36] SONG Y, SOHL-DICKSTEIN J, KINGMA D P, et al. Score-based generative modeling through stochastic differential equations[C] // International Conference on Learning Representations. 2020.
- [37] RONNEBERGER O, FISCHER P, BROX T. U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation[C] // 18th International Conference Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI 2015). Springer, 2015; 234-241.
- [38] WELING M, THE Y W. Bayesian learning via stochastic gradient Langevin dynamics[C]//Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning. 2011;681-688.
- [39] HAEFELI K K, MARTINKUS K, PERRAUDIN N, et al. Diffusion models for graphs benefit from discrete state spaces [J].

- arXiv:2210.01549,2022.
- [40] VIGNAC C, KRAWCZUK I, SIRAUDIN A, et al. Digress: Discrete denoising diffusion for graph generation[C]// International Conference on Learning Representations, 2023.
- [41] CHEN X, HE J, HAN X, et al. Efficient and degree-guided graph generation via discrete diffusion modeling[C]// Proceedings of the 40th International Conference on Machine Learning, 2023:4585-4610.
- [42] WU M, CHEN X, LIU L. EDGE++: Improved Training and Sampling of EDGE [J]. arXiv:2310.14441,2023.
- [43] GROVER A, ZWEIG A, ERMON S. Graphite: Iterative generative modeling of graphs[C]// International Conference on Machine Learning. PMLR, 2019:2434-2444.
- [44] NIU C, SONG Y, SONG J, et al. Permutation invariant graph generation via score-based generative modeling[C]// International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. PMLR, 2020:4474-4484.
- [45] JO J, KIM D, HWANG S J. Graph generation with diffusion mixture[C]// International Conference on Machine Learning, 2024.
- [46] YANG L, ZHANG Z, ZHANG W, et al. Score-based graph generative modeling with self-guided latent diffusion[C]// International Conference on Learning Representations, 2023.
- [47] CHEN X, LI Y, ZHANG A, et al. Nvdif: Graph generation through the diffusion of node vectors [J]. arXiv:2211.10794, 2022.
- [48] JO J, LEE S, HWANG S J. Score-based generative modeling of graphs via the system of stochastic differential equations[C]// International Conference on Machine Learning. PMLR, 2022: 10362-10383.
- [49] LUO T, MO Z, PAN S J. Fast graph generation via spectral diffusion [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 46(5):3496-3508.
- [50] HUANG H, SUN L, DU B, et al. Graphgdp: Generative diffusion processes for permutation invariant graph generation[C]// 2022 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM). IEEE, 2022:201-210.
- [51] WEN L, TANG X, OUYANG M, et al. Hyperbolic Graph Diffusion Model[C]// Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2024:15823-15831.
- [52] SEN P, NAMATA G, BILGIC M, et al. Collective classification in network data [J]. AI Magazine, 2008, 29(3):93-93.
- [53] RAMAKRISHNAN R, DRAL P O, RUPP M, et al. Quantum chemistry structures and properties of 134 kilo molecules [J]. Scientific Data, 2014, 1(1):1-7.
- [54] IRWIN J J, STERLING T, MYSINGER M M, et al. ZINC: a free tool to discover chemistry for biology [J]. Journal of Chemical Information and Modeling, 2012, 52(7):1757-1768.
- [55] GRETTON A, BORGWARDT K M, RASCH M J, et al. A kernel two-sample test [J]. The Journal of Machine Learning Research, 2012, 13(1):723-773.
- [56] LIU C C, CHAN H, LUK K, et al. Auto-regressive graph generation modeling with improved evaluation methods[C]// Conference on Neural Information Processing Systems, 2019.
- [57] XU K, HU W, LESKOVEC J, et al. How powerful are graph neural networks? [J]. arXiv:1810.00826, 2018.
- [58] WALKER J, ZHONG T, ZHANG F, et al. Recommendation via collaborative diffusion generative model[C]// International Conference on Knowledge Science, Engineering and Management. Cham: Springer, 2022:593-605.
- [59] HOU Y, PARK J D, SHIN W Y. Collaborative Filtering Based on Diffusion Models: Unveiling the Potential of High-Order Connectivity [J]. arXiv:2404.14240, 2024.
- [60] YI Z, WANG X, OUNIS I. A directional diffusion graph transformer for recommendation [J]. arXiv:2404.03326, 2024.
- [61] LEE C, CHIO J, WI H, et al. Stochastic Sampling for Contrastive Views and Hard Negative Samples in Graph-based Collaborative Filtering [J]. arXiv:2405.00287, 2024.
- [62] LONG J, YE G, CHEN T, et al. Diffusion-based cloud-edge-device collaborative learning for next POI recommendations[C]// Proceedings of the 30th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, 2024:2026-2036.
- [63] HUANG H, HUANG C, CHANG X, et al. Dual Conditional Diffusion Models for Sequential Recommendation [J]. arXiv: 2410.21967, 2024.
- [64] WU Z, WANG X, CHEN H, et al. Diff4rec: Sequential recommendation with curriculum-scheduled diffusion augmentation [C]// Proceedings of the 31st ACM International Conference on Multimedia, 2023:9329-9335.
- [65] YANG Z, WU J, WANG Z, et al. Generate what you prefer: Reshaping sequential recommendation via guided diffusion [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2023, 36: 24247-24261.
- [66] YU P, TAN Z, LU G, et al. Ld4mrec: Simplifying and powering diffusion model for multimedia recommendation [J]. arXiv: 2309.15363, 2023.
- [67] JIANG Y, XIA L, WEI W, et al. Diffmm: Multi-modal diffusion model for recommendation[C]// Proceedings of the 32nd ACM International Conference on Multimedia, 2024:7591-7599.
- [68] MA H, YANG Y, MENG L, et al. Multimodal conditioned diffusion model for recommendation[C]// Companion Proceedings of the ACM Web Conference 2024, 2024:1733-1740.
- [69] SIMM G N C, HERNANDEZ-LOBATO J M. A generative model for molecular distance geometry[C]// Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning. PMLR, 2020:8949-8958.
- [70] XU M, LUO S, BENGIO Y, et al. Learning neural generative dynamics for molecular conformation generation[C]// International Conference on Learning Representations, 2021.
- [71] SHI C, LUO S, XU M, et al. Learning gradient fields for molecular conformation generation[C]// International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021:9558-9568.
- [72] LUO S, SHI C, XU M, et al. Predicting molecular conformation via dynamic graph score matching [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2021, 34:19784-19795.
- [73] XU M, WANG W, LUO S, et al. An end-to-end framework for molecular conformation generation via bilevel programming

- [C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2021;11537-11547.
- [74] XU M, YU L, SONG Y, et al. Geodiff: A geometric diffusion model for molecular conformation generation [J]. arXiv:2203.02923, 2022.
- [75] HOOGEBOOM E, SATORRAS V G, VIGNAC C, et al. Equivariant diffusion for molecule generation in 3d [C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2022;8867-8887.
- [76] BAO F, ZHAO M, HAO Z, et al. Equivariant energy-guided sde for inverse molecular design [J]. arXiv:2209.15408, 2022.
- [77] JING B, GORSO G, CHANG J, et al. Torsional diffusion for molecular conformer generation [J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2022, 35:24240-24253.
- [78] HUANG L, ZHANG H, XU T, et al. Mdm: Molecular diffusion model for 3d molecule generation [C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2023;5105-5112.
- [79] ANAND N, ACHIM T. Protein structure and sequence generation with equivariant denoising diffusion probabilistic models [J]. arXiv:2205.15019, 2022.
- [80] MOHAMED A, OKHONKO D, ZETTLEMOYER L. Transformers with convolutional context for asr [J]. arXiv:1904.11660, 2019.
- [81] WATSON J L, JUERGENS D, BENNETT N R, et al. De novo design of protein structure and function with RFDiffusion [J]. Nature, 2023, 620(7976):1089-1100.
- [82] BAEK M, DIMAIO F, ANISHCHENKO I, et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network [J]. Science, 2021, 373(6557):871-876.
- [83] LEE J S, KIM J, KIM P M. ProteinSGM: Score-based generative modeling for de novo protein design [J]. bioRxiv:2022.07.13.499967, 2022.
- [84] TRIPPE B L, YIM J, TISCHER D, et al. Diffusion probabilistic modeling of protein backbones in 3D for the motif-scaffolding problem [J]. arXiv:2206.04119, 2022.
- [85] WU K E, YANG K K, VAN DEN BERG R, et al. Protein structure generation via folding diffusion [J]. Nature Communications, 2024, 15(1):1059.



**ZHAO Haihua**, born in 1999, postgraduate, is a member of CCF (No. U6274G). His main research interests include graph learning and recommender systems.



**MO Xian**, born in 1990, Ph.D, associate professor, master supervisor, is a member of CCF (No. R6178M). His main research interests include graph learning, network representation learning and recommender system.

(责任编辑:喻黎)