

Diffusion方法在图数据嵌入学习中的应用

随着图神经网络（GNN）技术的迅速发展，各种**图扩散（diffusion）**方法被引入图嵌入学习领域，以捕捉更丰富的高阶结构信息或进行图结构生成。这些方法包括基于**随机游走**的扩散、**热扩散/谱扩散**、**扩散卷积**以及**生成式扩散模型**等，应用于节点分类、链路预测、图分类、动态图学习、知识图谱等多种任务和图类型。在近年的研究中，不同扩散机制的创新被证明能够提升嵌入的表达能力和下游任务的性能^{1 2}。下文按扩散机制类别对代表性工作进行分类汇总，并表格列出核心论文以供快速浏览。

随机游走扩散及其应用

随机游走扩散基于随机游走（Random Walk）或稳定随机游走思想，通过计算节点之间的扩散概率来生成邻域结构信息。Celikkanat等（2022）提出了**NodeSig**模型，该方法利用随机游走扩散概率和稳定随机投影技术，高效生成二值节点嵌入，并将节点之间的扩散概率编码到Hamming空间。实验证明，NodeSig在节点分类和链路预测任务上实现了**准确率与效率兼顾的优势**²。该方法特别适用于大规模网络，因为二值嵌入可极大加速相似度计算而仅略微牺牲精度²。

对于**动态图（时序演化图）**，Lee和Jung（2023）提出了**TiaRa（Time-aware Random Walk Diffusion）**方法³。该方法针对动态图的**时间性**引入时序亲密度：在随机游走过程中允许“跳跃”沿时间维度行走，从而获得具有时空局部性的节点相似度分数³。通过这种时序感知的随机游走，TiaRa构造了新的扩散矩阵（增强邻接），将近期边的影响权重提高。实验结果表明，TiaRa可**显著提升动态GNN模型**在节点分类和链路预测等任务上的性能³。例如，在若干动态图数据集和任务上，TiaRa均优于传统的图增强方法（如Edge Drop等），证明了时序扩散的有效性³。

示例：NodeSig（Celikkanat等, ASONAM 2022）基于稳定随机游走投影生成二值节点嵌入，兼顾准确率和计算效率²；TiaRa（Lee等, AAAI 2023）将随机游走扩散引入时间维度，提高动态图任务性能³。

热扩散与谱扩散方法

热扩散（Heat Diffusion）和**谱扩散**方法通常通过构建**扩散核**（如热核）来捕获图结构的多步影响。这类方法可在特征传播时利用图的拉普拉斯谱信息，从而获得更丰富的节点或图表示。Pham（2025）在Soft Computing期刊中提出了**SADC（Structure-enhanced Adaptive Diffusion GCN）**模型⁴。SADC结合了**自适应热核扩散**和图神经网络嵌入，通过引入结构感知的可学习扩散过程来提取全局信息。具体来说，SADC在每层网络中利用自适应学习的扩散系数，使得信息能从更远的高阶邻居传播，从而更好地捕获分子图等图结构的全局特征。实验证明，SADC在多个分子图分类数据集上大幅领先于基线模型，平均将分子分类的准确率提升了约28.5%（F1提升75.3%）⁵，表明其在图分类任务中的**显著优势**。

在面向**无监督图对齐**问题时，Qiu等（2025）提出了基于热扩散的**IterAlign**方法⁶（待发表）。该工作首次将图**热扩散过程**应用于节点表示生成，通过参数化热扩散来逐渐融合局部和全局图信息，生成稳定且鲁棒的节点表示⁶。IterAlign采用参数化热扩散的迭代策略，交替进行表示学习和节点匹配，有效提高了对齐准确率并降低了计算开销⁶（强调了**无监督纯结构图对齐中扩散优势**）。

此外，一类**谱扩散卷积**方法（Graph Diffusion Convolution）将扩散过程融入GNN层中。Liu等（2024）提出的**Graph Adversarial Diffusion Convolution（GADC）**便是谱扩散的一种扩展⁷。GADC通过对图信号去噪的对抗训练，推导出新的扩散卷积架构：相比经典的GDC（Graph Diffusion Convolution），GADC在扩散过程中额外引入了一个**对抗项**，增强了模型在图结构和节点特征受到扰动时的鲁棒性⁷。实验表明，GADC不仅

在对抗攻击场景下性能优于GDC，还在**异质性（heterophilic）图**上取得了更好的分类效果⁷。这一工作证明了在谱扩散卷积中加入稳健性项能够兼顾精度和鲁棒性。

示例： SADC（Pham, Soft Computing 2025）通过自适应热核扩散提升分子图分类性能⁵；GADC（Liu等, ICML 2024）在GDC基础上加入对抗项，增强了对异质图和攻击扰动的鲁棒性⁷。

多尺度/多视角扩散方法

多尺度扩散关注通过多层次或多种邻接关系提取信息，以克服单层次聚合的局限。Wang等（2025）针对**多视角图学习**设计了**MSD-GCN（Multi-Scale Graph Diffusion Convolutional Network）**^{8 9}。在多视角数据中，每个视角都有自己的图结构，MSD-GCN首先进行视角特征融合（契约映射），然后为每个视角构造多尺度的扩散邻接矩阵（通过多阶扩散卷积），并自适应融合不同尺度的信息⁸。这样，MSD-GCN在不增加层数的情况下获得大感受野，充分利用了视角和高阶关系信息。实验结果显示，MSD-GCN在半监督节点分类任务上显著超过了LGCN-FF、ICGCN等最新方法⁹。尤其在多视图场景下，MSD-GCN的多尺度设计带来了更稳定和准确的嵌入⁹。

此外，**多视角嵌入**中也有对扩散机制的应用。例如Pham（2025）的工作即体现了“多视角+扩散”思想⁴。其SADC方法引入全局自适应扩散机制，兼顾了不同视角下的结构表达能力。

示例： MSD-GCN（Wang等, AI Review 2025）通过多尺度扩散图融合多视角信息，在节点分类上超越了其他多视图方法⁹。

扩散生成式模型

近年来，将**生成式扩散模型（Diffusion Models）**用于图数据成为热门方向。这类方法常用来**生成图结构或节点结构**，并可用于数据增强、知识图谱补全等任务。Jiang等（2024, WSDM）提出**DiffKG**，将扩散生成模型用于知识图谱表示学习和推荐¹⁰。DiffKG利用扩散模型进行知识图增广，将KG看作生成过程并加入协同过滤信号，通过扩散过程模拟图实体的“去噪”以得到稳健嵌入。同时，他们引入“协同知识图卷积”引导扩散，使得知识图中对推荐任务有用的关系更突出¹⁰。大量实验显示，DiffKG在推荐准确度上显著优于多种基线，验证了扩散生成与增广在知识图嵌入中的作用¹⁰。

在**节点分类与图对比学习任务**中，Wang等（2025, TMLR）提出了**DoG（Diffusion on Graph）**框架^{11 12}。DoG使用图扩散模型生成**合成节点和边**来扩充原图，进而提升GNN在半监督节点分类和图对比学习上的表现¹¹。该方法引入了双层邻居解码器（BLND）以加速图结构生成，并通过低秩正则化抑制扩散噪声对训练的负面影响。实验证明，在多个数据集上，使用DoG增强后模型的分类准确率和对比学习效果都有明显提升¹¹。

Wesego（2025, arXiv）进一步将**离散扩散自编码器（DDAE）**应用于图嵌入^{13 14}。他提出在自编码框架中采用离散扩散模型作为解码器，学习图的潜在表示。即通过向图加入离散噪声后逐步去噪来训练模型，同时使用GCN作为编码器将图映射为向量。理论上，扩散解码器的迭代结构使得编码器学习到的嵌入能够捕获复杂的结构模式。实验结果表明，DDAE在图分类任务中得到的表示具有更好的表达能力^{13 14}。

Li等（2024, arXiv）则将**DDPM扩散模型**应用于链路预测¹⁵。他们将目标链路视作需要生成其覆盖子图（subgraph）的条件概率分布，并利用DDPM对子图结构和节点特征进行联合去噪建模¹⁵。这种生成式链路预测方法显示出良好的**跨数据集迁移能力**和**对有限数据的鲁棒泛化能力**，同时对抗对手攻击也表现出较强的鲁棒性¹⁵。

示例： DiffKG（Jiang等, WSDM 2024）用扩散生成增强KG嵌入，显著提升了推荐系统性能¹⁰；DoG（Wang等, TMLR 2025）通过生成合成图结构增强节点分类，验证了扩散生成对GNN训练的益处¹¹；DDAE

(Wesego, arXiv 2025) 使用离散扩散自编码器学习图嵌入, 在图分类任务中获得了更具表现力的表示¹³¹⁴; Li等 (arXiv 2024) 的扩散生成链路预测模型在小数据和攻击场景下展现了优越的泛化性¹⁵。

各方法比较优势

上述方法在使用扩散思想的同时各有侧重。**随机游走扩散** (如NodeSig、TiaRa) 侧重节点邻域关系的高阶平滑, 能够高效处理大图并在动态场景中引入时间维度。**谱/热扩散卷积** (如GADC、AGDN、SADC) 通过谱域滤波跨层次聚合信息, 解决过平滑问题并提升对异质图和对攻击的鲁棒性⁷。**多尺度/多视角扩散** (如MSD-GCN) 通过构造多阶邻接加强高阶信息融合, 在多视角数据上效果显著⁹。**生成式扩散模型** (如DiffKG、DoG、DDAE、Li等) 则利用扩散过程进行图结构生成或增强, 在数据增强、KG补全和表示学习上展现出新的泛化和鲁棒能力¹⁰¹¹¹³。

总体而言, 这些扩散方法通过不同方式提升了图嵌入的质量: 如NodeSig在二进制嵌入效率上表现优异²; TiaRa在动态任务中显著提高准确率³; GADC在攻击场景下保持较高性能⁷; SADC和MSD-GCN等在复杂图分类任务上表现更好⁵⁹; DiffKG和DoG通过扩散生成显著提升推荐和分类任务指标¹⁰¹¹。这些结果表明, 引入扩散机制往往可以在**准确率和鲁棒性**等方面超越传统方法, 同时部分方法 (如NodeSig) 也显著降低了计算开销²。

核心论文一览表

为便于快速检索, 下表列出了上述代表性工作及其关键信息:

| 论文标题 | 作者 (年份/会议) | 扩散机制 | 图类型/任务 | 核心贡献或优势 |
|--|----------------------------|-----------------|-----------------|---|
| NodeSig: Binary Node Embeddings via Random Walk Diffusion | Celikkanat等 (2022, ASONAM) | 随机游走扩散 + 稳定随机投影 | 通用图, 节点分类、链路预测 | 生成二值节点嵌入; 平衡准确率与效率 ² |
| DiffKG: Knowledge Graph Diffusion Model for Recommendation | Jiang等 (2024, WSDM) | 生成式扩散模型 (KG增广) | 知识图谱, 推荐系统 | 将扩散生成引入KG嵌入, 增强推荐性能 ¹⁰ |
| TiaRa: Time-aware Random Walk Diffusion (AAAI) | Lee等 (2023, AAAI) | 时序随机游走扩散 | 动态图, 节点分类/链路预测 | 时序感知扩散增强动态图, 提升动态GNN性能 ³ |
| Graph Adversarial Diffusion Convolution (ICML) | Liu等 (2024, ICML) | 谱扩散卷积 + 对抗训练 | 通用图, 节点分类 (异质图) | 在GDC基础上加入对抗项, 提高对异质图和扰动的鲁棒性 ⁷ |
| Adaptive Graph Diffusion Networks (AI Rev) | Sun等 (2025, AI Rev) | 可学习谱域扩散 (跳数注意力) | 图数据, 节点分类/链路预测 | 基于hop注意力可学习任意谱滤波器, 缓解过平滑, 性能优异 ¹ ¹⁶ |
| Multi-Scale Graph Diffusion Convolutional Network (AI Rev) | Wang等 (2025, AI Rev) | 多尺度扩散卷积 | 多视角图, 半监督节点分类 | 多尺度多视角融合, 提取高阶信息, 多视图分类准确率领先 ⁹ |

| 论文标题 | 作者（年份/会议） | 扩散机制 | 图类型/任务 | 核心贡献或优势 |
|---|----------------------|------------|------------------|---|
| Diffusion on Graph (DoG) for Node Classification (TMLR) | Wang等 (2025, TMLR) | 图结构生成扩散 | 通用图，半监督节点分类/对比学习 | 生成合成图结构增强训练，提升节点分类和图对比学习效果 ¹¹ |
| Structure-enhanced Adaptive Diffusion GCN (SoftComp) | Phu Pham (2025) | 自适应热核扩散 | 分子图，图分类 | 结合图嵌入与自适应扩散，显著提升分子图分类精度（准确率+28%） ⁵ |
| Discrete Diffusion Autoencoder (arXiv) | Wesego (2025, arXiv) | 离散扩散生成式自编码 | 通用图，图分类 | 利用离散扩散去噪捕获结构模式，生成有效嵌入，提升图分类效果 ¹³ |
| Subgraph Diffusion Model for Link Prediction (arXiv) | Li等 (2024, arXiv) | DDPM图扩散生成 | 通用图，链路预测 | 将链路预测视为子图生成，具备跨数据集迁移性和鲁棒性 ¹⁵ |

上述表格汇总了2020年后部分代表性工作的关键信息和优势 ² ¹⁰ ⁷。各论文均利用扩散过程捕获不同类型的高阶图信息，在准确率、计算效率或鲁棒性上优于传统方法。通过对这些方法的分析，可以看出扩散机制在图嵌入学习中具有重要作用，可结合具体任务需求进行灵活设计。

参考文献： 文中所引用的文献按照出现顺序编号，如 ² 等；表格中也包括关键的引用标注，用以指向相关论文的论述和数据。

- 1 16 Adaptive graph diffusion networks: compact and expressive GNNs with large receptive fields | Artificial Intelligence Review
<https://link.springer.com/article/10.1007/s10462-025-11114-z>
- 2 arxiv.org
<https://arxiv.org/pdf/2010.00261>
- 3 [2211.01214] Time-aware Random Walk Diffusion to Improve Dynamic Graph Learning
<https://arxiv.org/abs/2211.01214>
- 4 5 An approach of multi-viewed graph embedding with adaptive heat kernel based diffusion and global expressive learning | Soft Computing
https://link.springer.com/article/10.1007/s00500-025-10582-3?error=cookies_not_supported&code=d307623c-c597-4b2c-b991-c778cff52c76
- 6 Empowering Iterative Graph Alignment Using Heat Diffusion This manuscript has been submitted to and is currently under review for the IEEE International Conference on Data Engineering (ICDE) 2026.
<https://arxiv.org/html/2506.17640>
- 7 Graph Adversarial Diffusion Convolution
<https://arxiv.org/html/2406.02059v1>
- 8 9 Multi-scale graph diffusion convolutional network for multi-view learning | Artificial Intelligence Review
<https://link.springer.com/article/10.1007/s10462-025-11158-1>
- 10 DiffKG: Knowledge Graph Diffusion Model for Recommendation
<https://arxiv.org/html/2312.16890v1>
- 11 12 Diffusion on Graph: Augmentation of Graph Structure for Node Classification | OpenReview
<https://openreview.net/forum?id=tzW948kU6x>
- 13 14 Graph Representation Learning with Diffusion Generative Models
<https://arxiv.org/html/2501.13133v1>
- 15 Sub-graph Based Diffusion Model for Link Prediction
<https://arxiv.org/pdf/2409.08487>