

# 针对混杂效应的鲁棒因果图表示学习

高航\*, 李江梦\*, 强文文, 司凌宇, 徐冰, 郑昌文, 孙富春

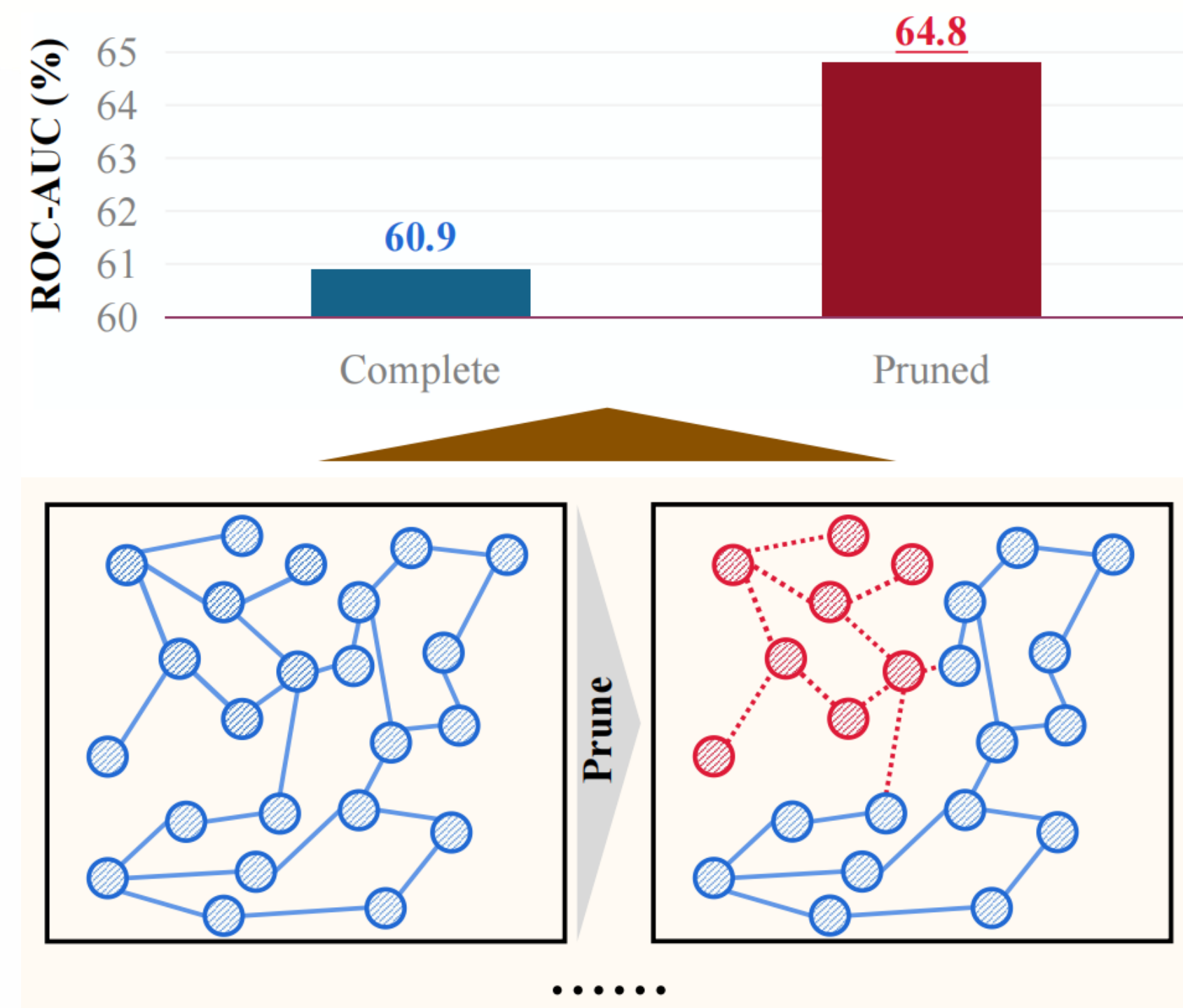
论文题目: Robust Causal Graph Representation Learning against Confounding Effects, 会议名称: AAI 2023, 会议时间: 2023年2月7日 - 2023年2月14日

联系人: 高航 电话: 15210538743 邮箱: gaohang@iscas.ac.cn

## 方法概述

流行的图神经网络模型在图表示学习方面取得了重大进展。然而, 在本文中, 我们发现了一个被忽视的现象: 用完整图测试的预训练图表示学习模型的性能不如用修剪良好的图测试的模型。这一观察表明, 图中存在混杂因素, 可能会干扰模型学习语义信息, 而目前的图表示学习方法并没有消除它们的影响。为了解决这个问题, 我们提出了鲁棒因果图表示学习 (RCGRL) 来学习针对混杂效应的鲁棒图表示。RCGRL 引入了一种主动方法以在无约束限制下生成工具变量, 这使图表示学习模型能够消除混杂因素, 从而捕获与下游预测因果关系的判别信息。我们提供了定理和证明来保证所提出方法的理论有效性。

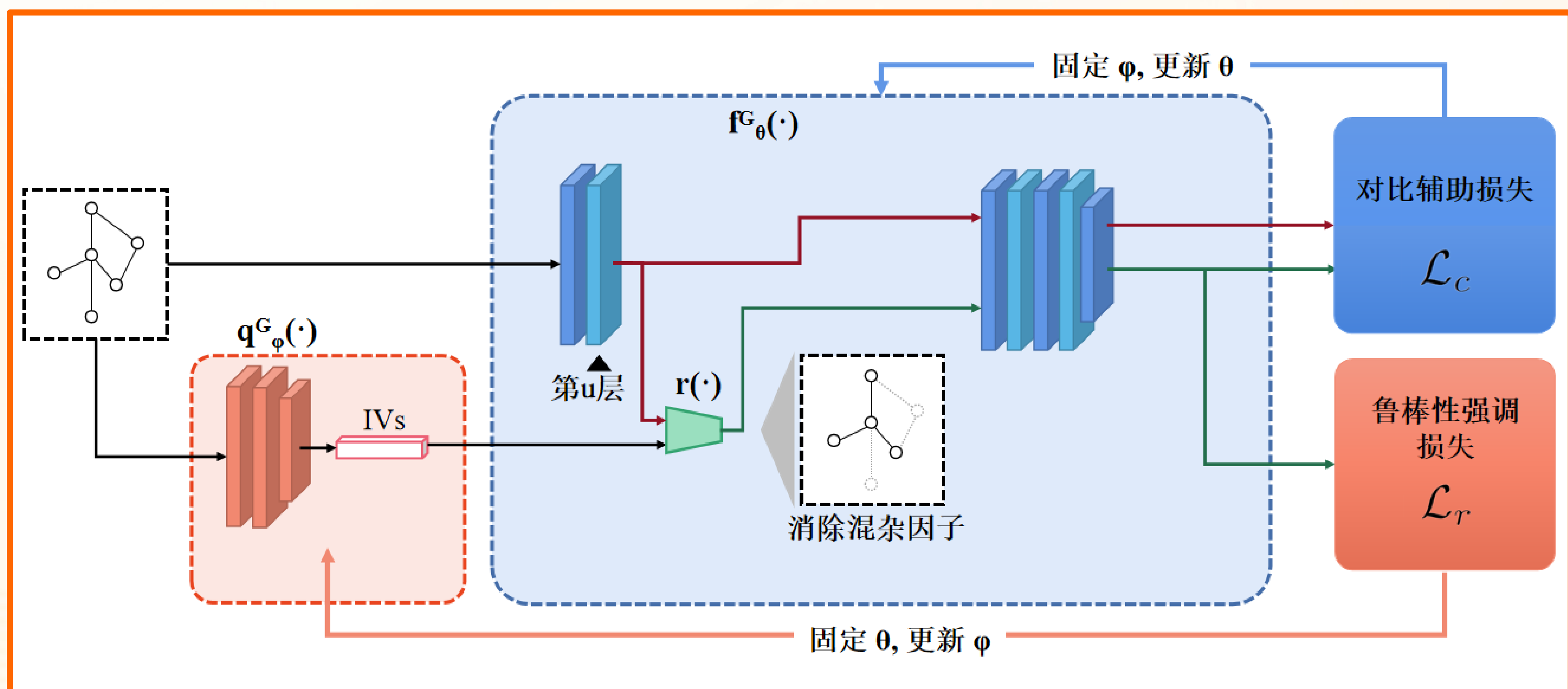
## 研究动机



我们通过实验发现, 在图数据上去掉一些节点和边, 反而可以提升图神经网络对于图的分类效果。如下图所示, 在图上, 我们进行了特定的剪枝操作, 结果发现同一个图神经网络模型在剪枝后的图数据上可以取得更好的效果。因而我们提出, 图数据上的模型部分, 实际上对于分类任务没有好处, 是干扰任务的混杂因素。基于这样的分析, 我们使用了工具变量法来去掉这些混杂因素。然而, 传统的工具变量法是基于条件约束的, 然而在我们的任务场景中使用了端到端的图神经网络, 因而很难满足这种约束。所以, 我们基于图神经网络来生成工具变量, 进而把条件约束转变为非条件约束, 进而消除混杂因子。

## 具体实现

我们提出了可以使用一个图神经网络 $q^G(\cdot)$ 来根据图数据 $G$ 输出相应的工具变量 $q^G(G)$ , 并且通过理论对于该方法进行了合理性证明。我们所实现的网络模型如下图所示:



从图中可以看到, 图神经网络 $q^G(\cdot)$ 可以基于输入信息来生成工具变量 (IV)。同时, 使用, 模型使用图神经网络 $f^G(\cdot)$ 对于处理后的数据与标签信息进行学习。我们借助工具变量在 $q^G(\cdot)$ 的第 $u$ 层进行多余信息的消除。我们使用两种不同的损失函数分别计算标签学习的训练损失以及工具变量生成效果的损失。