

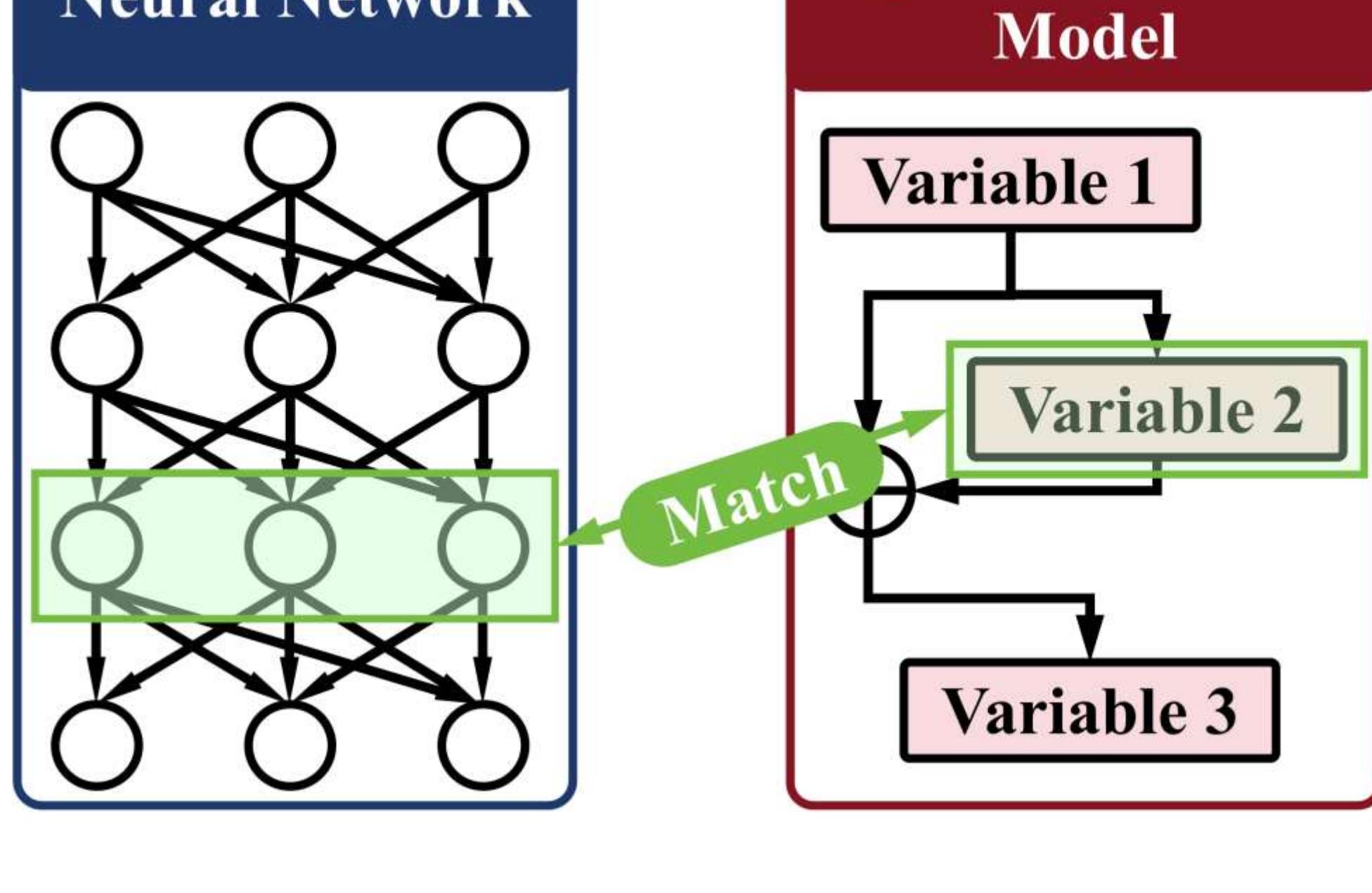
LLM Enhancers for GNNs: An Analysis from the Perspective of Causal Mechanism Identification

高航*, 黄文轩*, 吴凤鸽, 赵军锁, 郑昌文, 刘华平

✉ gaohang@iscas.ac.cn, huangwenxuan2024@iscas.ac.cn

ICML 2025

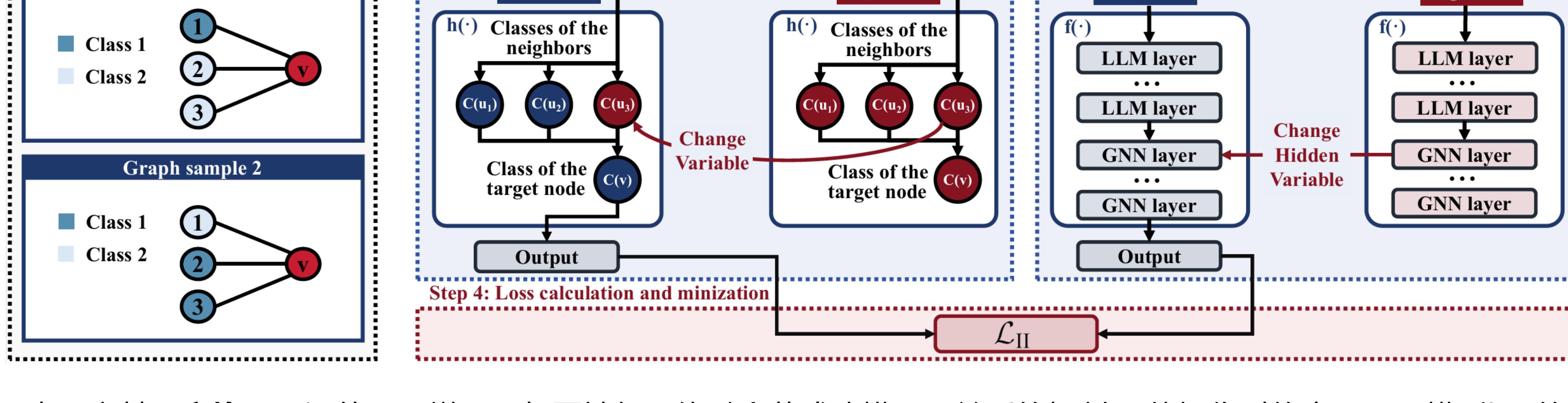
研究背景



研究背景&挑战

LLM作为特征增强器，通过其预训练知识优化节点表征从而生成更丰富且语义连贯的特征，这类特征随后输入GNN构建统一模型，该方法既能克服传统GNN的局限性又能将LLM的领域知识融入特征，同时在异构图谱表征学习中展现出强泛化能力。但目前明显缺乏对其基础框架的深入研究，该范式的深层工作机制尚未得到充分探索；同时由于LLM增强器和GNN本身均由复杂神经网络构成，二者单独进行形式化建模已存在困难，其融合架构更使得统一理论剖析变得十分困难。

研究方法



本研究基于**交换干预**评估LLM增强器与图神经网络融合范式建模因果关系的机制。具体操作时将高层因果模型 $h(\cdot)$ 的变量 Z^h 与底层神经网络 $f(\cdot)$ 的隐变量 Z^f 进行干预：

- 选取原始图样本 G^{orig} 和对照样本 G^{diff} ，通过在 $h(\cdot)$ 中置换 Z^h 变量值产生干预输出 $\text{INTINV}(h, G^{\text{orig}}, G^{\text{diff}}, Z^h)$ 。
- 对神经网络 $f(\cdot)$ 的指定变量 Z^f 实施相同操作得到 $\text{INTINV}(f, G^{\text{orig}}, G^{\text{diff}}, Z^f)$
- 进而通过量化两个干预输出差异的损失函数评估二者对应关系，最终通过最小化该损失确立底层神经网络与高层因果模型变量间的映射关联。

$$\mathcal{L}_{II} = \frac{1}{G^2} \sum_{G^{\text{orig}} \in G} \sum_{G^{\text{diff}} \in G} \mathcal{D} \left(\text{INTINV}(h, G^{\text{orig}}, G^{\text{diff}}, Z^h), \text{INTINV}(f, G^{\text{orig}}, G^{\text{diff}}, Z^f) \right),$$

实验结果

| $Z^h = \Psi_1$ | 0.006 | 0.008 | 0.075 | 0.014 | 0.124 |
|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $Z^h = \Psi_2$ | 0.003 | 0.013 | 0.901 | 0.019 | 1.792 |
| $Z^h = \Psi_3$ | 0.011 | 0.013 | 1.733 | 0.012 | 3.277 |

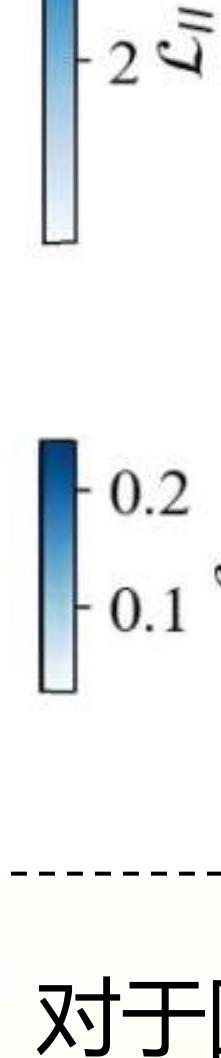
| $Z^h = \Phi_1$ | 0.638 | 0.541 | 2.483 | 1.844 | 0.790 |
|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $Z^h = \Phi_2$ | 0.060 | 0.058 | 1.520 | 0.089 | 1.113 |



我们首先构建**可控因果-语义图 (CCSG)**数据集，并设计针对**节点分类**的高阶因果模型，在节点级分析实验中，对应图表变量 $\Psi_1 - \Psi_3$ 为不同距离节点类别， $\Phi_1 - \Phi_2$ 为节点及邻居类别特征（其中 Φ_2 考虑多阶）。不同节点层级变量间的最佳对齐位置（绿色标记）出现在第0层和第1层，该处可视为GNN模型内部变量 Z^h 的映射位置；

| $Z^h = \Gamma_1$ | 0.128 | 0.060 | 0.005 | 0.016 | 0.021 |
|------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $Z^h = \Gamma_2$ | 1.029 | 0.869 | 0.137 | 0.052 | 0.228 |
| $Z^h = \Gamma_3$ | 3.086 | 4.430 | 1.113 | 1.979 | 2.260 |

| $Z^h = \Omega_1$ | 0.117 | 0.036 | 0.042 | 0.039 | 0.029 |
|------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $Z^h = \Omega_2$ | 0.243 | 0.232 | 0.225 | 0.219 | 0.217 |



我们从CCSG数据集中针对**图分类**任务构建特定的高阶因果模型。在图级分析实验中，结合拓扑结构与节点特征，对应变量 $\Gamma_1 - \Gamma_3$ 为含不同节点数的子结构， $\Omega_1 - \Omega_2$ 为因果表示学习或图论的典型拓扑类型，每样本均含两类结构。不同节点层级变量间的最佳对齐位置在浅绿色标记处

这表明LLM增强的作用在于处理节点级和原始数据级信息，对于固定参数的LLM增强，其输出的特征主要承担着表征节点层级信息与原始数据层级信息的双重功能。