

基于进化集成的图神经网络解释方法

常新功, 苏敏惠*, 周志刚

(山西财经大学信息学院, 山西 太原 030006)

摘要:针对图神经网络模型普遍缺乏可解释性问题,提出一种基于进化集成的图神经网络解释方法,为模型预测提供质量更高的解释。将当前主流图神经网络解释方法 GNNExplainer 和 PGExplainer 作为初级解释器,分别为模型预测提供初级解释;基于初级解释结果设计遗传算子,采用改进遗传算法集成两种初级解释结果得到最终解释。在4个真实数据集和4个合成数据集上进行广泛试验,从定性和定量两个角度对试验结果进行评估。试验结果表明,相较于同类算法,提出算法的准确度平均提高17%,忠实度平均提高20%。与传统集成学习融合策略相比,改进遗传算法作为集成器对解释方法的优化效果更为显著,所有指标整体平均提高29%。采用进化集成策略能够显著提高图神经网络解释算法的性能。

关键词:图神经网络;进化算法;集成学习;深度学习;机器学习;可解释人工智能

中图分类号:TP391 **文献标志码:**A

引用格式:常新功,苏敏惠,周志刚. 基于进化集成的图神经网络解释方法[J].山东大学学报(工学版),2024,54(4):1-12.

CHANG Xingong, SU Minhui, ZHOU Zhigang. Explainer for GNN based on evolutionary ensemble learning algorithm[J]. Journal of Shandong University (Engineering Science), 2024, 54(4):1-12.

Explainer for GNN based on evolutionary ensemble learning algorithm

CHANG Xingong, SU Minhui*, ZHOU Zhigang

(School of Information, Shanxi University of Finance and Economics, Taiyuan 030006, Shanxi, China)

Abstract: To address the challenge of limited explainability in Graph Neural Network (GNN) models, a novel explainer employing an evolutionary ensemble learning algorithm was developed. More refined explanations for model predictions compared to existing methods were offered. Both GNNExplainer and PGExplainer, recognized as leading tools in the field, were utilized as initial explainers. Guided by the primary explanation results for the design of genetic operators, an improved genetic algorithm was employed to integrate the initial explanations into a comprehensive final explanation. Extensive experiments were conducted on four real-world and four synthetic datasets, with results evaluated from both qualitative and quantitative perspectives. The experimental results showed that the proposed approach achieved an average improvement of 17% in accuracy and 20% in fidelity over baseline methods. Compared to conventional ensemble fusion strategies, an overall average improvement of 29% across all metrics was achieved by using improved genetic algorithm as an integrator. The substantial enhancement in GNN explanation capabilities was realized through the adoption of an evolutionary ensemble strategy.

Keywords: graph neural networks; evolutionary algorithms; ensemble learning; deep learning; machine learning; explainable AI

0 引言

图神经网络(graph neural network, GNN)是用于图数据表示的机器学习算法^[1],广泛应用于股市分析、推荐系统和欺诈检测等多个领域^[2-4]。近年来,GNN在诸如图分类、节点分类和链接预测等多

类图任务上取得显著成就^[5-7],发展出多种变体如图卷积网络(graph convolutional network, GCN)、图注意力网络(graph attention network, GAT)和图同构网络(graph isomorphism network, GIN)等^[8]。与文本和图像数据不同,图数据中包含更加复杂且不规则的结构信息。针对以上特点,GNN采用消息传递机制同时汇聚节点特征信息和图拓扑结构信

收稿日期:2023-11-08

基金项目:国家自然科学基金青年资助项目(61902226);山西省基础研究计划自然科学研究面上资助项目(202203021221218);山西省研究生教育创新资助项目(2022Y534)

第一作者简介:常新功(1968—),男,山西太原人,教授,硕士生导师,博士,主要研究方向为图神经网络、数据挖掘、进化算法。

E-mail:c_x_g@126.com

*通信作者简介:苏敏惠(1995—),女,甘肃金昌人,硕士研究生,主要研究方向为图神经网络、进化算法。E-mail:suminhui8025@163.com

息,可以行之有效地学习到节点表示和图表示,数据和学习机制的复杂性导致 GNN 模型普遍缺乏可解释性^[9]。GNN 模型可解释性是一个十分具有挑战性的热点研究问题。

GNN 解释方法旨在寻找特定输入图中对模型预测产生较大影响的边、节点、特征或子图结构,现有学者针对这一问题开展了广泛的研究^[10-12]。文献[13]扩展可解释机器学习领域中基于梯度/特征的方法^[14]识别图的重要特征。文献[15]沿用 LIME^[16]的思想提出 GraphLIME,采用非线性代理模型拟合局部数据集。以上方法没有考虑图结构,不适合为 GNN 模型提供图级解释。针对这一问题,文献[17]提出 GNNExplainer,通过优化过程学习边或特征的连续掩码解释模型预测,不足以提供对训练模型的全局理解。文献[18]提出算法 PGExplainer,使用图数据概率生成模型,从模型全局视角揭示图数据的底层结构;文献[19]提出 GraphSVX,在扰动数据集上构建替代模型捕获每个特征和节点对解释预测的公平贡献,是对 PGExplainer 的进一步扩展。文献[20]提出 SubgraphX,采用蒙特卡洛树搜索算法(monte carlo tree search, MCTS)搜索单个子图结构解释 GNN 模型预测。

现有 GNN 可解释性研究通常只采用单一解释方法解释 GNN 模型预测,结果不尽如人意。众多研究表明,进化集成学习能够同时结合进化算法(evolutionary algorithms, EAs)和集成学习(ensemble learning, EL)寻优和集成两方面的优势^[21-22],能更有效地发挥和平衡子学习器的多样性和互补性^[23-24]。根据这一思路,本研究提出一种进化集成图神经网络解释方法(explainer for GNN based on ensemble learning and genetic algorithm, ELGAEExplainer),它基于 Stacking 集成策略^[22],将 GNNExplainer 和 PGExplainer 作为初级解释器,将改进遗传算法作为集成器,可获得更高质量的解释。

1 问题定义

定义 1 设图 $G=(V, E)$ 有 N 个节点和 M 条边,节点集 $V=\{v_i\}_{i=1}^N$,边集 $E=\{e_k | e_k=(v_i, v_j), v_i, v_j \in V\}_{k=1}^M$ 。每个节点有 F 维特征,特征矩阵 $X \in \mathbf{R}^{N \times F}$ 。邻接矩阵 $A \in \{0, 1\}^{N \times N}$,若 $(v_i, v_j) \in E$,则 $A_{ij}=1$,反之 $A_{ij}=0$ 。

定义 2^[1] GNN 模型 $f(\cdot)$ 包含图表示学习器 $f_0(\cdot)$ 和分类器 $f_1(\cdot)$ 。给定输入图 G , l 层的 $f_0(\cdot)$ 通过迭代聚合 $v_i \in V$ 的 l 跳邻近节点信息获得节点表示 z_i ,计算 G 中所有节点表示平均值获得图表示

Z 。将 z_i (或 Z) 输入 $f_1(\cdot)$ 获得预测标签 y_i (或 y)。

定义 3 节点分类任务^[6]。节点分类任务的目标是预测输入图 G 中每个节点 $v_i \in V$ 的标签 \hat{y}_i 。设 $f(\cdot)$ 是一个 l 层 GNN 模型,结合定义 2, $f(\cdot)$ 仅使用 l 跳邻近节点进行信息聚合,节点 v_i 的计算子图是 G_i^l ,邻接矩阵是 A_i^l 及特征矩阵 X_i^l ,则 $\hat{y}_i=f(A_i^l, X_i^l)$ 。

定义 4 图分类任务^[5]。给定一组数量为 n 的图数据集 $G=\{G_1, G_2, \dots, G_n\}$,图分类任务的目标是预测每个输入图 $G_i \in G$ 的标签 \hat{y}_i , G_i 的邻接矩阵和特征矩阵分别是 A_i 和 X_i ,设 $f(\cdot)$ 是一个 GNN 模型,则 $\hat{y}_i=f(A_i, X_i)$ 。

GNN 可解释性研究旨在回答问题——“对于输入图 G ,决定 GNN 模型 $f(\cdot)$ 产生输出 \hat{y} 原因是什么?”。基于这一目标,本研究通过预训练模型 $f(\cdot)$ 获得目标节点 v_i (或目标图 G_i) 的预测标签 \hat{y}_i ,利用 GNNExplainer 和 PGExplainer 对 \hat{y}_i 提供解释 G_α 和 G_β ,采用改进遗传算法集成 G_α 和 G_β 获得最终解释 $G_E=\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$, k 表示最终解释结果所含边数。

2 模型构建

本章以节点分类任务为例详细说明算法 ELGAEExplainer 的模型结构。ELGAEExplainer 结构设计如图 1 所示,它包括两个阶段,对应图中 Part I 和 Part II,分别在 2.1 和 2.2 节中作详细介绍。

2.1 第一阶段:初级解释结果生成过程

本阶段应用 GNNExplainer 和 PGExplainer 生成不同初级解释结果并进行集成^[17-18]。两种解释算法均训练掩码生成器生成边掩码矩阵 $M_E \in \mathbf{R}^{N_i \times N_i}$, N_i 为计算图的节点数。GNNExplainer 为单个实例提供解释,通过优化互信息 $MI(Y, (M_F, M_E))=H(Y)-H(Y|A', X')$ 生成特征掩码矩阵 M_F 和边掩码矩阵 $M_E(\alpha)$,式中 $A'=A_i^l \odot \sigma(M_E)$, $X'=X_i^l \odot \sigma(M_F)$, Y 为类别标签。本研究根据 $M_E(\alpha)$ 输出解释表示为边集合 $G_\alpha=\{e_1, e_2, \dots, e_{k_{\text{top}}}\}$, k_{top} 表示根据边重要性排序后所选择权重最高的边数。

PGExplainer 使用多层神经网络 MLP_Θ 和节点表示矩阵 Z 训练掩码生成器^[18],生成边掩码矩阵 $M_E=\text{MLP}_\Theta(G_i^l, Z)$ 。该算法基于 GNN 模型全局视角下为多实例模型预测提供通用解释。集成两种算法之前,本研究对算法 PGExplainer 应用 Bagging 方法集成。具体操作为:(1)进行 γ 次采样训练数据集,应用 PGExplainer 生成掩码矩阵集合 $\{M_{E_1}, M_{E_2}, \dots, M_{E_\gamma}\}$ 和对应的 γ 个解释模型;(2)

将 γ 个解释模型在测试数据集上进行测试, 测试精度 $\{w_1, w_2, \dots, w_\gamma\}$ 作为对应边掩码矩阵的权值, 对边掩码集进行加权组合生成边掩码 $M_E(\beta)$;

(3) 根据 $M_E(\beta)$ 输出解释表示为边集合 $G_\beta = \{e_1, e_2, \dots, e_{k_{top}}\}$ 。根据计算图合并初级解释结果 G_α 和 G_β 生成边集合 E_e 。

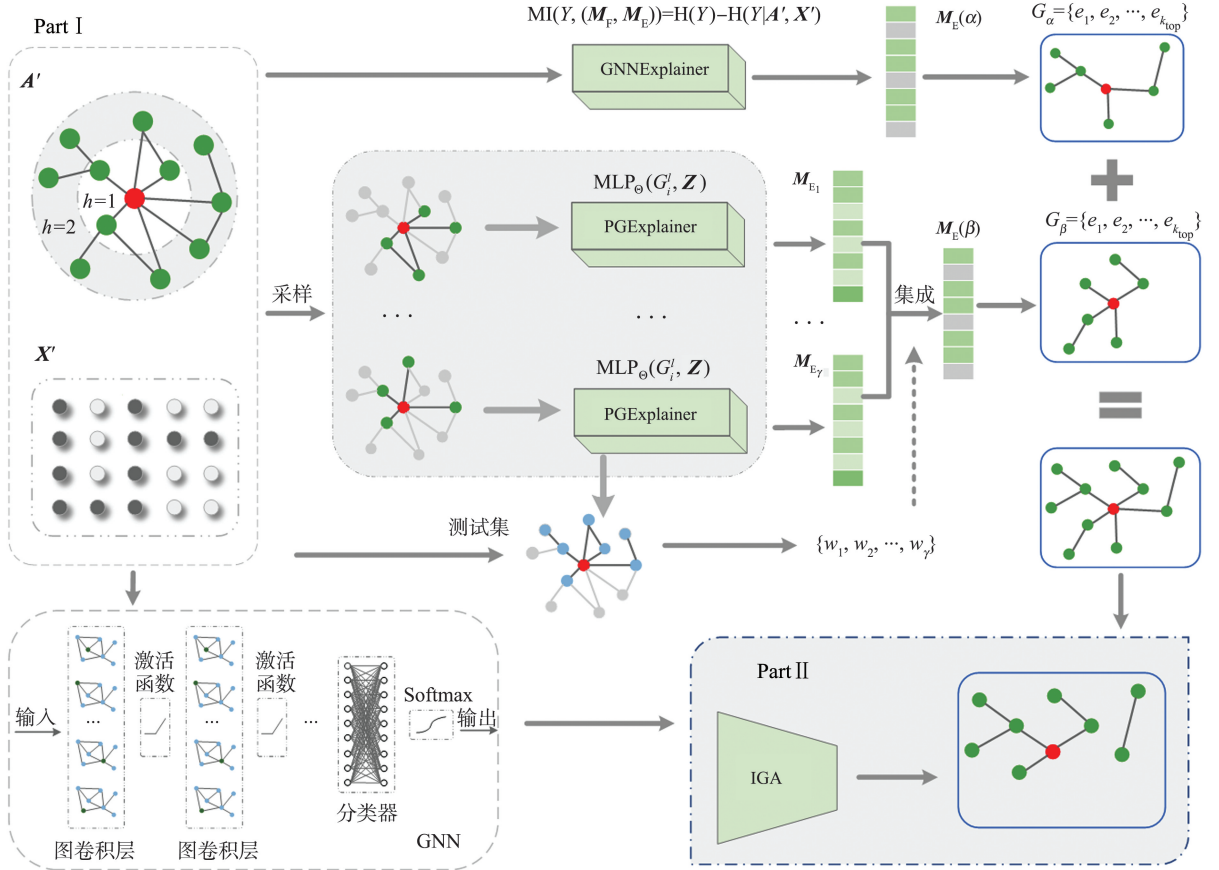


图 1 算法 ELGAExplainer 的全局结构设计
Fig.1 Global structure of algorithm ELGAExplainer

2.2 第二阶段: 改进遗传算法集成过程

遗传算法 (genetic algorithm, GA) 作为一种求解优化问题搜索算法^[25], 融合了自然选择和遗传学原理。研究表明, 当应用于不同领域时, 传统 GA 不能表现出高效适应性。鉴于此, 结合不同领域、不同场景的改进遗传算法 (improved genetic algorithm, IGA) 应运而生^[26]。本研究根据第一阶段结果对 GA 进行改进, 将边集合 E_e 作为改进遗传算法搜索空间, 根据文献[10]中 GNN 可解释性度量指标设计适应值函数, 每个个体表示目标节点 v_i 的一个解释。种群在迭代进化过程中, 采用改进遗传算子实现寻优进化。图 2 展示了第二阶段基本流程。

2.2.1 染色体编码方案

采用二进制编码方式进行编码^[25], 边集合 E_e 中每条边 e_i 是一个基因 ω , ω 使用二进制符号集 $\{0, 1\}$ 表示, 若 e_i 被选中, 则 $\omega = 1$; 反之, $\omega = 0$ 。种群 P 中每条染色体 Ω 表示一种边组合结构, 即一个解释, 染色体长度等于边集 E_e 长度。为了便于后续适应值计算, 解码时将染色体 Ω 转换为计算子图 G'_i

所对应边掩码 m_i^j 。

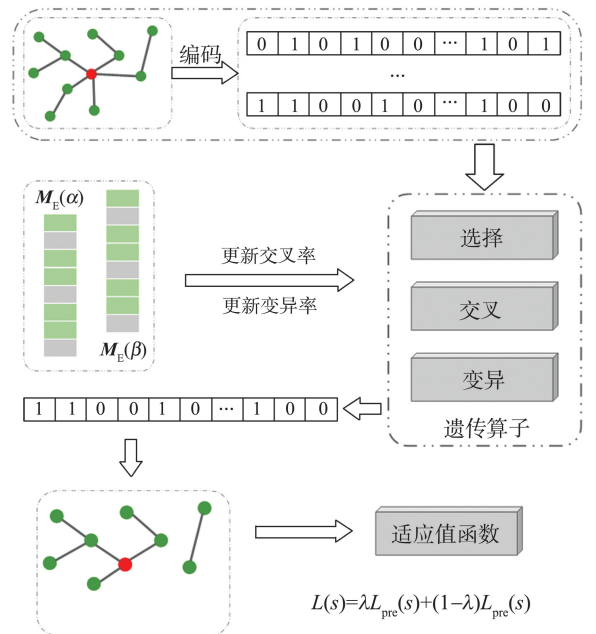


图 2 第二阶段基本流程图
Fig.2 The flowchart of the second stage

2.2.2 适应值函数设计

适应值函数衡量每个个体的生存能力,直接指导并决定种群进化行为。针对 GNN 模型,解释忠于目标预测,对种群中第 s 个染色体,其预测准确性目标设计如下:

$$L_{\text{pre}}(s) = |f(G_i)_{y_i} - f(G_i^{m_s})_{y_i}|, \quad (1)$$

式中, $f(G_i)_{y_i}$ 表示计算图 G_i 预测标签 y_i 时预测概率, m_s 是第 s 个染色体所对应边重要性指标矩阵。 $G_i^{m_s}$ 是基于 m_s 保留重要边所获新计算图, $f(G_i^{m_s})_{y_i}$ 是新计算图 $G_i^{m_s}$ 预测标签 y_i 时预测概率。 $L_{\text{pre}}(s)$ 越小,解释越忠于模型。

解释具有稀疏性,解释算法捕获重要边且忽略不重要边,稀疏性目标设计如下:

$$L_{\text{res}}(s) = \frac{|m_s|}{|A_i|}, \quad (2)$$

式中, $|m_s|$ 表示第 s 个染色体标识重要边数目, $|A_i|$ 表示节点 v_i 对应计算图 G_i 中所含边数目。 $L_{\text{res}}(s)$ 越小,解释结构越稀疏。

解释算法要识别出对 GNN 模型预测产生较大影响重要边。改进遗传算法以最小化染色体 s 适应值 $L(s)$ 为目标,寻找最优 GNN 解释。 $L(s)$ 设计如下:

$$L(s) = \lambda L_{\text{pre}}(s) + (1-\lambda) L_{\text{res}}(s), \quad (3)$$

式中, $\lambda \in (0, 1)$ 用于调节两部分目标平衡。

2.2.3 改进遗传算子

遗传算子模拟自然选择和遗传过程中繁殖、杂交和突变现象,控制和调整进化过程,构成遗传算法搜索能力核心。遗传算子一般包括选择算子、交叉算子和变异算子。(1)选择:选择算子指导种群朝最小化适应值方向进化。为避免算法陷入局部极值,本研究采用锦标赛选择算子^[25],动态控制群体中个体选择压力,保证算法具备较高寻优能力。结合精英保留策略保留每代最佳个体^[25],确保算法更快完成寻优目标;(2)自适应性交叉和变异:多样性是遗传算法搜索群体最优解的基本条件,构成进化基础,交叉和变异算子有效保证群体多样性。鉴于图数据中包含复杂结构信息,边与边之间相互关联,频繁进行交叉变异操作在一定程度上会破坏图原有结构,降低进化效率。本研究采用单点交叉和变异,结合初级解释算法所得边掩码矩阵确定交叉和变异位置。设 D_s 为染色体长度,染色体基因位 ω_i 所对应边掩码表示其权重 w_i ,第 i 个基因位置选择概率定义如下:

$$p(i) = w_i / \sum_{i=1}^D w_i. \quad (4)$$

传统遗传算子一般采用恒定交叉概率和变异概率,易导致种群进化过程中丢弃部分优秀染色体。实际进化过程中,初期需扩大算法编码空间搜索广度,找到最优解所在子空间,跳出局部极值点或欺骗陷阱;后期需提高最佳个体生存能力,使其在最优解空间逐步求精。接近最优解时,过高交叉率和变异率可能造成解“跳跃”;过低交叉率或变异率可能影响进化效率。本研究设定概率可交叉率 φ_c 和变异率 φ_m ,与当前进化代数 t 和群体进化指标相关,具体设计如下:

$$\varphi_c = \begin{cases} \varphi_{c1} - \frac{(\varphi_{c1} \times 2^{-\frac{t}{T}})(\bar{L}-L)}{(\bar{L}-L_{\min})}, & L \leq \bar{L} \\ \varphi_{c1}, & L > \bar{L} \end{cases}, \quad (5)$$

$$\varphi_m = \begin{cases} \frac{\varphi_{m1}(L-L_{\min})}{(\bar{L}-L_{\min})} \cdot \frac{t}{T}, & L \geq \bar{L} \\ \varphi_{m1}, & L < \bar{L} \end{cases}, \quad (6)$$

式中, φ_{c1} 和 φ_{m1} 分别是预设交叉率和变异率, T 是最大进化代数, t 是当前进化代数, L , \bar{L} 和 L_{\min} 分别表示当前染色体适应值、种群平均适应值和种群最小适应值。

2.2.4 终止条件

改进遗传算法终止进化条件如下:

$$\Gamma(L_{\text{best}}, t) = \text{True}, \quad (7)$$

式中, $\Gamma(L_{\text{best}}, t) = (X(L_{\text{best}}) \geq C) \text{ or } (t \geq T)$ 表示终止进化过程所需满足条件。 L_{best} 为每代种群中最佳个体适应值, $X(L_{\text{best}})$ 表示最佳个体适应值重复次数, C 为常数。

2.3 算法描述

本节以节点分类任务为例描述算法 ELGAExplainer 基本流程。

算法 1 基于进化集成的 GNN 解释算法

输入 目标 GNN 模型 $f(\cdot)$, 输入图 $G = (V, E)$, 邻接矩阵 A 和特征矩阵 X , 目标解释节点集 $V_E \subseteq V$, PGExplainer 采样批次 Q , 初级解释结果保留边 k_{top} , 改进遗传算法种群规模 S , 适应值函数 L , 锦标赛规模 q , 控制参数 λ ;

初始化 初始化预测标签 $y = \{\}$, 个体解释器解释边集合 $E_e = \{\}$, 随机化边掩码矩阵 M_E , 进化代数 $t=0$, 适应值 $L=0$, 根据式(5)(6)初始化交叉率 φ_c 和变异率 φ_m , 初始化种群 $P_0 = \{\}$;

- 1 for 目标节点 $v_i \in V_E$ do
- 2 计算图 $G_i(A_i, X_i) \leftarrow (G, f(A, X), v_i)$;
- 3 节点 v_i 预测标签 $y_i \leftarrow f(A_i, X_i)$;
- 4 $M_E(\alpha) \leftarrow \text{GNNExplainer}(G_i, A_i, X_i)$;

```

5 for sample batch  $\gamma=0$  to  $Q$  do
6    $M_E(\beta_\gamma) \leftarrow \text{PGExplainer}(G_i, A_i, X_i, \gamma)$ 
7    $w_\gamma \leftarrow (M_E(\beta_\gamma), G_i, f(A_i, X_i), y_i)$ ;
8 end for
9  $M_E(\beta) \leftarrow \sum w_\gamma \cdot M_E(\beta_\gamma)$ 
10  $G_\alpha, G_\beta \leftarrow G_i, M_E(\alpha), M_E(\beta)$ ;
11  $E_e = \{e_1, \dots, e_{k_{\text{top}}}, \dots, e_k\} \leftarrow G_\alpha, G_\beta, k_{\text{top}}$ ;
12  $P_0 = \{\Omega_1(0), \dots, \Omega_S(0)\} \leftarrow E_e$ ;
13 利用式(3)计算种群  $P_0$  适应值  $L(0)$ ;
14 While  $\Gamma \neq \text{True}$  do
15    $P_i' \leftarrow \text{选择}(P_i, q)$ ;
16   根据式(5)(6)更新  $\varphi_c$  和  $\varphi_m$ ;
17    $P_i'' \leftarrow \text{交叉}(P_i', \varphi_c)$ , 变异( $P_i', \varphi_m$ );
18   利用式(3)计算种群  $P_i''$  适应值  $L$ ;
19    $P_{i+1} \leftarrow \text{用精英保留策略更新种群 } P_i''$ ;
20 end While
21 end for.

```

算法1中,第4~11行是初级解释结果生成阶段,对应2.1节,其中第4~9行表示对算法PGExplainer进行Bagging集成,第10~11行合并两种算法结果。第12~19行是改进遗传算法集成阶段,对应2.2节,其中第12~13行将解释结果进行编码;第15~19行是种群进化过程。

时间复杂度分析。设试验样本总数 n , 计算图边数 $|E|$, 每代种群规模大小 S , 单条染色体长度 L 。第一阶段中,PGExplainer是通用解释方法,时间复杂度为 $O(n|E|)$, GNNExplainer时间复杂度为 $O(nR|E|)$, R 是每个样本训练轮次,第一阶段整体时间复杂度为 $O(nR|E|)$ 。第二阶段改进遗传算法选择、交叉和变异操作时间复杂度分别是 $O(nS)$ 、 $O(nS)$ 和 $O(n)$, 适应度值计算时间复杂度为 $O(nSL)$, 最大时间代价花费在计算适应值函数环节,其余时间代价等同于传统遗传算法。整体时间复杂度为 $O(nSL+nR|E|)$ 。

3 试验和结果分析

在合成数据集和真实数据集进行试验验证所提出算法有效性。每个数据集上重复运行解释算法10次,计算平均结果。试验环境为服务器 X620-G40, GPU 型号 TeslaA800-80GB, 操作系统 NFS China Server release4.0.220126 (RTM3), CUDA 版本 11.3, pytorch1.12 实现。

3.1 数据集

数据集包括4个合成数据集和4个真实数据

集,分别基于节点分类任务和图分类任务。

3.1.1 合成数据集

合成数据集详情如表1所示^[17-20]。BA-Shapes是文献[17]首次引入合成节点分类任务数据集。该数据集由一个具有300个节点的BA(Barabasi-Albert)基础图上随机选择节点附加80个5节点房屋结构网络图生成,并添加随机边进行扰动。数据集中每个节点标签根据其位置和结构分配,BA基础图的节点标签被标记为0,房屋结构网络图顶部/中间/底部节点分别被标记为1、2和3。BA-Community由两个BA-Shapes图组成,基于两个高斯分布对两个BA-Shapes图节点特征进行采样,节点根据结构角色和社区成员身份进行标记,总共8个类。Tree-Cycles以8级平衡二叉树作为基础图,随机选择节点附加80个6节点循环结构图。BA-2motifs将BA图作为基础图,一半基础图上附加5节点房屋结构图,另一半基础图附加5节点循环结构图。根据附加结构图类型不同,生成图被分为2类。

表1 合成数据集详情统计表
Table 1 Statistical table of synthetic datasets

数据集	节点数	边数	类别数	任务类别
BA-Shapes	700	4 110	4	节点分类
BA-Community	1 400	8 920	8	节点分类
Tree-Cycles	871	1 950	2	节点分类
BA-2motifs	25 000	51 392	2	图分类

3.1.2 真实数据集

真实数据集详情如表2所示^[27-28]。Cora和Pubmed都是引文网络数据集,用于节点分类任务。MUTAG和BBBP是分子数据集,用于图分类任务,每个图表示一个分子,节点是原子,边是键,根据分子化学功能对图进行分类。

表2 真实数据集详情统计表
Table 2 Statistical table of real-world datasets

数据集	图数目	节点数	边数	类别数	任务类别
Cora	1	2 708	10 556	7	节点分类
Pumbed	1	19 717	88 648	3	节点分类
BBBP	2 039	49 068	105 842	2	图分类
MUTAG	188	3 371	7 442	2	图分类

3.2 度量指标与试验设置

3.2.1 度量指标

对解释方法所提供解释进行定量评估至关重要,先前诸多研究已经提出一些指标,本研究采用其中三个用作度量指标,分别是:稀疏度、准确度和保真度^[10]。

准确度 M_{Accuracy} : 衡量解释方法提供解释结果输

入目标模型 $f(\cdot)$ 后,能否成功获得目标预测,计算方式如下:

$$M_{\text{Accuracy}} = \mathbb{E}_{G_i} [\mathbf{1}(f(G_i), f(G_i^{m_i}))], \quad (8)$$

式中: $f(G_i)$ 表示原始计算图的预测结果; $f(G_i^{m_i})$ 表示仅保留解释所识别重要边后模型预测结果; $\mathbf{1}(\cdot)$ 是指示函数,用于判断 $f(G_i)$ 是否等于 $f(G_i^{m_i})$; \mathbb{E} 表示期望值。 M_{Accuracy} 越大解释越准确。

保真度 M_{Fidelity} : 衡量解释结构重要程度,度量屏蔽重要边、节点或特征之后 GNN 模型预测结果概率变化,计算方式如下:

$$M_{\text{Fidelity}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f(G_i)_{y_i} - f(G_i^{1-m_i})_{y_i}), \quad (9)$$

式中, n 表示样本数, m_i 是边掩码矩阵,计算图 $G_i^{1-m_i}$ 根据 m_i 屏蔽解释获得, $f(G_i^{1-m_i})_{y_i}$ 指计算图 $G_i^{1-m_i}$ 预测标签为 y_i 时预测概率。 M_{Fidelity} 越大,表示解释越重要。

稀疏度 M_{Sparsity} : 衡量被解释方法所识别重要边所占计算图比例, M_{Sparsity} 越大,表示解释结构越稀疏。计算方式如下:

$$M_{\text{Sparsity}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{|m_i|}{|A_i|} \right), \quad (10)$$

式中, $|m_i|$ 表示 m_i 中标识重要边数量, $|A_i|$ 表示计算图 G_i 中边总数。

3.2.2 对比方法及参数设置

试验对比方法设置为算法 GNNExplainer、PGExplainer 和 SubgraphX, 以及 ELGExplainer 变体——EExplainer, EExplainer 相较于 ELGExplainer 在第二阶段中采用投票集成策略。参数设置遵循文献[17], GNNExplainer 算法互信息权重为 0.5, 迭代次数 1 000; PGExplainer 重参数化温度参数为 0.1, 其模型训练迭代次数 50; GNNExplainer 和 PGExplainer 的优化器为 ADAM, 学习率在 $\{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}\}$ 中调优, 权重在 $\{10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}\}$ 中搜索。算法 SubgraphX 中 MCTS 迭代次数为 20。变体算法 EExplainer 投票权重为 0.5。ELGExplainer 中个体解释器超参数设置遵循对比方法, PGExplainer

模型采样批次和采样比例分别在 $\{5, 10, 15\}$ 和 $\{20\%, 30\%, 50\%\}$ 中搜索最优, 解释结构边保留比例 k_{top} 为 30%。遗传算法种群规模 S 为 20, 最大进化代数 100, 最佳个体适应值最大重复次数 15, 控制参数 λ 为 0.5, 锦标赛规模 q 为 3, 设定初始交叉率 φ_{c1} 和变异率 φ_{m1} 分别是 0.8 和 0.1。

3.2.3 GNN 模型训练设置

分别对每个数据集训练一个 3 层 GCN 模型, 所有解释方法共享该模型。数据集分割比例遵循先前研究^[17], 将每个数据集按 8:1:1 的比例划分为训练、验证和测试集, 表 3 中呈现各数据集 GNN 模型训练精度。结果表明, 所设计模型对于节点分类和图分类任务都足够强大。

表 3 GNN 模型训练精度
Table 3 Accuracy performance of GNN models

任务	数据集	模型精度/%
节点分类	BA-Shapes	97.8±0.1
	BA-Community	97.7±0.3
	Tree-Cycles	99.2±1.1
	Cora	80.7±1.2
	Pubmed	78.3±1.3
图分类	BA-2motifs	99.0±0.7
	BBBBP	88.4±0.7
	MUTAG	91.2±0.6

3.3 对比试验结果分析

本节分别从定量和定性角度评估解释方法为 GNN 模型预测所提供解释。

3.3.1 定量分析

解释需要忠于模型预测同时满足稀疏性要求。高稀疏度分数代表解释方法所识别重要结构较小, 对保真度分数产生一定影响。算法 ELGExplainer 在搜索最优解过程中达成指标之间相互平衡, 为了公平比较, 定量分析根据 ELGExplainer 指标将对对比方法稀疏度分数控制在相似水平, 分析和比较所有方法其他两项指标。表 4、5 分别展示了合成数据集和真实数据集上各解释方法度量指标值。

表 4 合成数据集上本研究算法与基线算法的效果比较
Table 4 Comparisons among explainers on synthetic datasets

对比算法	BA-Shapes		BA-Community		Tree-Cycles		BA-2motifs	
	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}
GNNExplainer	64.1±2.3	50.0±3.4	82.3±0.4	69.3±0.5	95.3±2.1	2.9±0.2	17.8±0.6	54.9±0.9
PGExplainer	11.1±3.1	42.9±0.4	22.9±0.5	36.2±3.3	6.4±0.3	42.9±0.4	10.0±3.1	54.9±0.1
SubgraphX	48.7±2.2	38.1±0.6	69.8±1.2	90.1±1.3	95.9±3.2	100	44.0±3.6	54.9±0.8
EExplainer	44.3±0.6	45.2±0.1	69.7±0.2	60.0±0.4	91.8±0.1	100	0.5±0.1	55.0±0.7
ELGExplainer	48.3±1.2	84.9±1.1	80.5±0.7	95.1±0.7	95.9±1.0	100	18.9±3.4	55.1±0.9

注: 黑体内容表示在各个数据集上每个度量指标的最优值。

表5 真实数据集上本研究算法与基线算法的效果比较
Table 5 Comparisons among explainers on real-world datasets

单位: %

对比算法	Cora		Pubmed		BBBP		MUTAG	
	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}	M_{Fidelity}	M_{Accuracy}
GNNExplainer	1.3±0.2	73.8±2.9	36.0±0.6	89.6±0.9	11.4±2.7	76.7±0.9	25.7±2.8	78.3±2.4
PGExplainer	0.1±3.8	59.2±0.2	0.9±3.2	74.8±0.8	16.1±0.2	75.7±0.8	14.5±0.3	80.0±0.3
SubgraphX	1.4±2.4	84.6±2.1	24.7±1.2	90.0±0.5	55.6±5.7	69.9±0.5	41.1±1.6	62.5±21.7
ELEExplainer	1.2±0.1	79.6±0.4	19.2±0.8	87.4±0.1	5.4±0.6	76.7±0.8	17.2±0.1	80.0±0.3
ELGAEExplainer	3.6±3.9	93.2±0.8	38.3±3.2	96.1±0.7	58.0±2.7	99.1±2.1	73.1±1.9	95.0±0.6

注:黑体内容表示在各个数据集上每个度量指标的最优值。

试验结果显示:(1)在合成数据集上算法 ELGAEExplainer 准确度相较所有对比算法表现更佳,保真度指标相较于除 GNNExplainer 以外其他算法具有较强竞争力。在4个真实数据集上,ELGAEExplainer 两个指标均表现出显著优越性。(2)算法 ELGAEExplainer 在大部分数据集上指标优于 GNNExplainer 和 PGExplainer,证明该算法能够显著增强初级解释算法解释结果,验证了集成两种不同解释方法这一方式能够有效达成不同解释器之间优势互补。(3)基于投票集成策略变体算法 ELEExplainer 在少部分数据集上表现略逊于算法 GNNExplainer 和 PGExplainer,如数据集 BA-Shapes 和 BA-Community,说明当不能很好平衡集成学习系统内部个体解释器时,集成策略无法有效增强算法性能。(4)ELGAEExplainer 整体表现优于 ELEExplainer,将遗传算法引入集成学习系统能够有效平衡个体解释器,增强解释算法性能,ELGAEExplainer 与算法 SubgraphX 指标对比分析也可验证上述结论。改进遗传算法具备强大的群体搜索能力,使用改进遗传算法集成不同解释方法,能够有效保留个体解释器优势,同时改进其不足之处。(5)GNNExplainer 在 BA-Shapes 和 BA-Community 等多个合成数据集上保真度指标表现最佳,其准确性指标表现略差。合成数据集样本共享结构,该算法针对单个样本实例进行优化,所得解释中往往包含了冗余边,对于真实数据集,GNNExplainer 性能表现较差。(6)相较于其他对比方法,PGExplainer 整体表现最差,该算法是一个通用解释算法,针对整体数据集提供一般化解释模型,解释准确度方面有所欠缺。(7)ELEExplainer 在大部分数据集上表现优于上述两种算法,通过集成单个算法能有效弥补单个算法不足。(8)SubgraphX 在所有数据集上指标表现与 ELGAEExplainer 相当,该算法以连通子图为基础单位探索解释 GNN 模型预测,连通子图与图功能高度相关。

3.3.2 定性分析

定性分析时,每个数据集选择一个实例,将所

有解释方法所给出解释进行可视化表示。为了评估解释方法所提供解释,分别将合成数据集 Motif 结构与真实数据集碳环和二氧化氮(NO_2)基团作为解释结果合理近似值^[28],真实数据集根据化学领域知识评估解释结果,碳环和 NO_2 基团往往具有诱变性。对 GNNExplainer 和 PGExplainer 将边掩码进行归一化和阈值化处理,获得边重要性指示矩阵 m_i 。所有解释方法使用粗体黑边表示重要边,节点不同类别使用不同颜色表示,目标节点突出表示。

图3、4、5分别举例展示了数据集样本在预测正确时各解释算法解释结果,图3第1行样本取自数据集 Tree-Cycles,第2行样本取自数据集 BA-Shapes。ELGAEExplainer 能识别房屋结构和6节点循环结构中更多边,说明集成效果较为显著,集成不同解释方法解释结果所获得最终解释更接近实际 Motif 结构。ELGAEExplainer 保留初级解释中重要结构且去除冗余边。图5中第1行样本取自 BBBP,第2行样本取自 MUTAG。ELGAEExplainer 同时识别 MUTAG 上部分碳环和 NO_2 结构,相比 GNNExplainer,前者识别碳环结构更加完整。BBBP 上,ELGAEExplainer 能同时识别多种结构,且结构之间无需互相连接。

3.4 稳定性分析

稳定性是可解释算法一个重要指标,为了评估解释算法稳定性,本研究在输入图中随机添加噪声以量化解释差异。具体操作是对输入图 G 和其解释 G_E ,随机添加或删除图 G 中部分边生成扰动图 G' ,使 G' 与 G 预测一致。将扰动图 G' 输入解释算法,获得解释 G'_E ,计算 G'_E 和 G_E 之间差异。二者差异定义为 $d_e(G_E, G'_E)$, $d_e(G_E, G'_E)$ 表示两个解释所含边集之间的杰卡德距离(Jaccard distance)^[11], d_e 越小表示解释算法稳定性越好,扰动比例指被扰动边所占比例。图6展示了在多个数据集上进行不同强度扰动时,各解释算法稳定性变化情况。

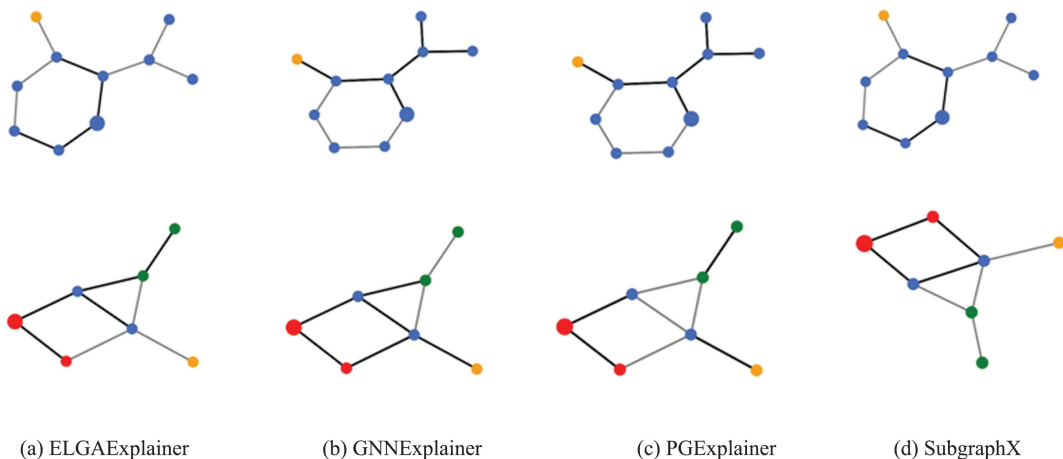


图3 合成数据集的解释结果
Fig.3 Explanation results on the synthetic datasets

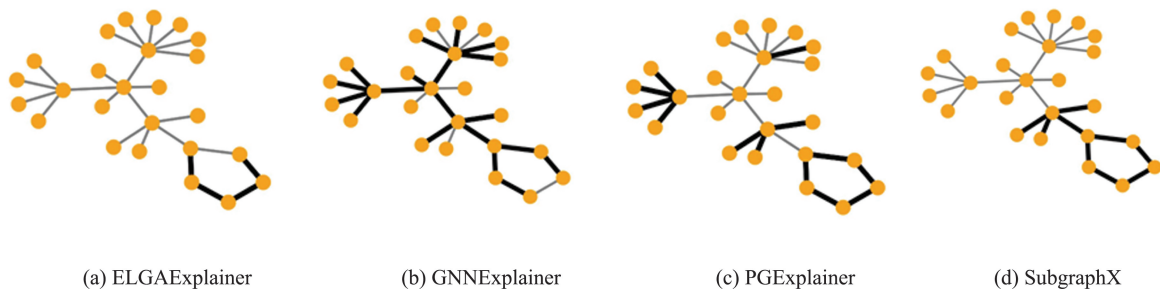


图4 BA-2motifs 数据集的解释结果
Fig.4 Explanation results on BA-2motifs

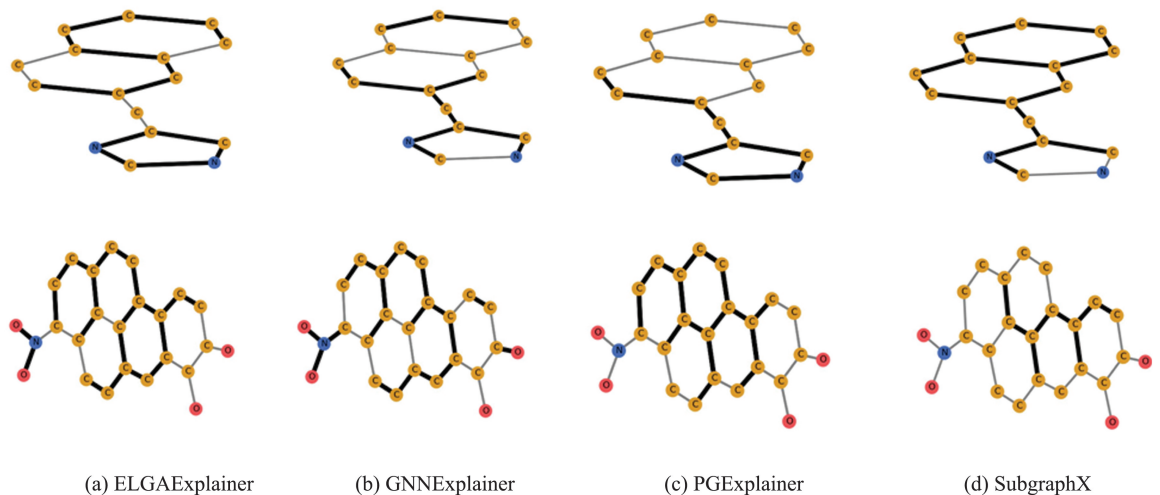


图5 真实数据集的解释结果
Fig.5 Explanation results on the real-world datasets

试验结果显示, GNNExplainer 在大多数数据集上表现最差, 该算法独立优化每个图, 不考虑整体数据集, 即使不添加噪声, 稳定性也较差, 对同一个图运行多次会产生不同解释。算法 PGExplainer 稳定性优于 GNNExplainer, 前者学习图的潜在结构作为模型解释, 抗干扰能力较后者强。ELExplainer 稳

定性略优于二者, 集成学习能够通过组合多个算法降低单个算法不确定性和随机性。ELGAExplainer 在所有数据集上表现最佳, 表明该算法面对扰动具有高度稳定性, 通过改进遗传算法集成不同解释算法结果, 能保留初级解释算法优势, 同时提高算法抗干扰能力。

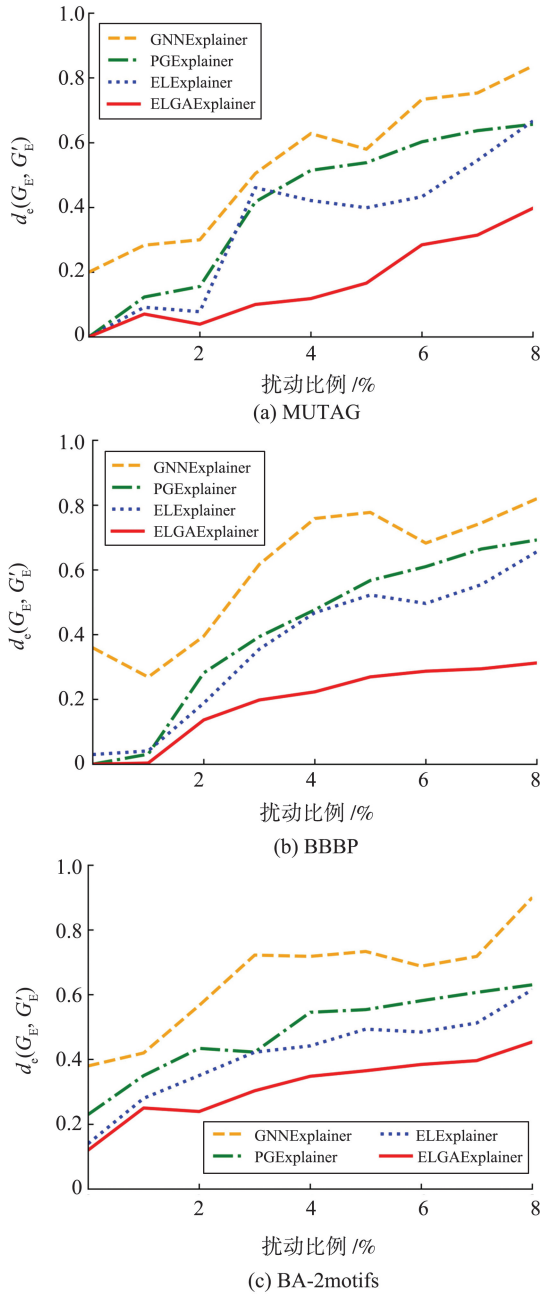


图6 不同扰动强度下各种解释算法的稳定性分析
Fig.6 Stability analysis of explainers at various levels of perturbation

3.5 模型效率

本节研究算法 ELGAEExplainer 的效率。试验选择 BBBP 数据集中 100 个图,平均节点数是 24.96。表 6 展示了解释每个图所花费平均时间。尽管 ELGAEExplainer 比 GNNExplainer 和 PGExplainer 慢,但前者获得解释保真度和准确度得分比后者高约 111%。SubgraphX 使用 MCTS 算法搜索解释子图,所获得解释保真度、准确度与 ELGAEExplainer 相近,时间代价却远高于后者,ELGAEExplainer 所得解释质量更佳,本研究认为这种时间代价合理且可接受。

表 6 数据集 BBBP 上解释方法的效率对比

Table 6 Efficiency studies of different methods on BBBP 单位:s

算法	平均时间
PGExplainer	16.37
GNNExplainer	78.08
SubgraphX	506.68
ELGAEExplainer	365.74

注:黑体内容表示本研究提出算法平均运行时间,其中算法 PGExplainer 的训练时间为 326.23 s。

4 消融试验

为验证集成两种不同解释方法的有效性,本研究结合单个解释方法与改进遗传算法得到变体算法 PGExplainer-GA 和 GNNExplainer-GA。为了探索 ELGAEExplainer 中对 PGExplainer 进行基于 Bagging 策略集成有效性,设计变体算法 ELGAEExplainer*, 去掉 ELGAEExplainer 中单独集成 PGExplainer 模块,其余部分保持不变。所有试验设计中,参数设置遵循算法 ELGAEExplainer 达到最优时状态,数据集分别选用 BA-Shapes 和 BBBP。表 7、8 展示数据集 BA-Shapes 和 BBBP 上不同试验设计下指标表现。

表 7 数据集 BA-Shapes 上的消融研究

Table 7 Ablation study on BA-Shapes 单位:%

对比算法	$M_{Sparsity}$	$M_{Accuracy}$	$M_{Accuracy}$
GNNExplainer-GA	75.4	40.2	71.4
PGExplainer-GA	80.4	46.1	57.1
ELGAEExplainer*	80.9	47.8	83.3
ELGAEExplainer	81.1	48.3	84.9

注:黑体内容表示表现最优的解释算法及其指标。

表 8 数据集 BBBP 上的消融研究

Table 8 Ablation study on BBBP 单位:%

对比算法	$M_{Sparsity}$	$M_{Accuracy}$	$M_{Accuracy}$
GNNExplainer-GA	86.4	42.2	96.1
PGExplainer-GA	90.0	4.7	74.8
ELGAEExplainer*	87.6	52.2	98.0
ELGAEExplainer	91.2	58.0	99.1

注:黑体内容表示表现最优的解释算法及其指标。

试验结果显示,ELGAEExplainer 在 2 个数据集上 3 个指标值均优于其他 3 种变体算法。集成学习中,基于 Bagging 集成策略能够有效降低初级解释方法方差,基于 Stacking 集成策略能够有效降低偏差。试验结果表明,ELGAEExplainer 中对算法 PGExplainer 进行 Bagging 集成后再集成不同解释方法,能显著提升算法性能。

5 参数敏感性分析

5.1 超参数 k_{top} 和 λ 敏感性分析

在第一阶段, GNNExplainer 和 PGExplainer 解释结果中的边按重要性进行选择, 选中的边构成改进遗传算法搜索空间, k_{top} 表示所选择边比例, λ 是第二阶段中适应值函数控制参数, 数据集选用 BA-Shapes 和 MUTAG, 两个参数变化范围均在 0~90%。图 7、8 分别展示两个数据集上, 两个超参数变化情况下指标准确度、保真度和稀疏度变化。结果显示, 随着超参数 k_{top} 增加及 λ 减小, 两个数据集

上稀疏度分数均呈现显著下降趋势, 准确度和保真度呈现出先增加后趋向平稳状态。超参数 k_{top} 直接决定 ELGAEExplainer 第二阶段改进遗传算法搜索空间大小, 搜索空间过大, 改进遗传算法计算成本较高; 搜索空间过小, 会造成信息不足, 导致算法性能较差。 λ 用于控制适应值函数中两部分目标平衡, λ 过大导致改进遗传算法一味追求准确性忽略稀疏性, 所得结果缺乏可解释性; λ 过小导致改进遗传算法一味追求稀疏性, 生成解释不忠于模型预测。如图 7、8 所示, 为了同时保证较高稀疏度、准确度和保真度, λ 为 0.4~0.6 且 k_{top} 为 20%~40% 时, 算法基本达成 3 个指标之间平衡, 整体性能表现较好。

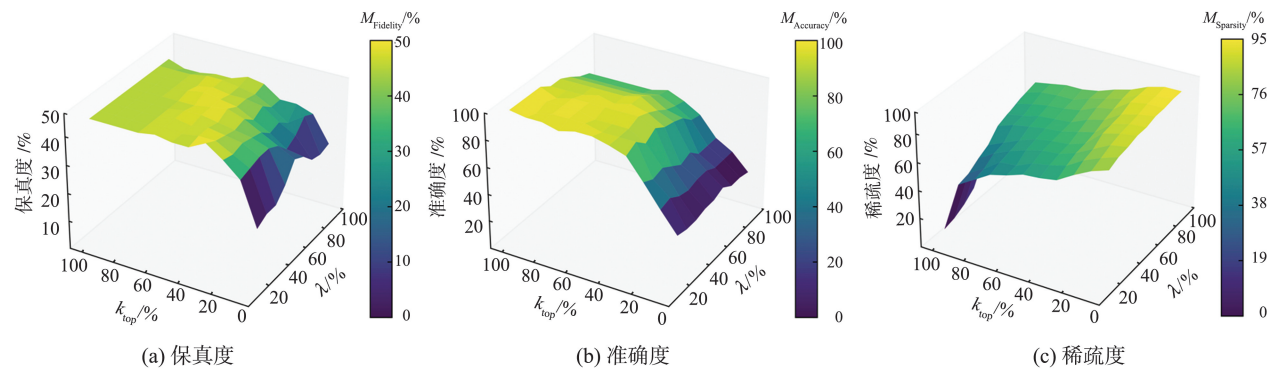


图7 数据集 BA-Shapes 上超参数敏感性分析

Fig.7 Hyperparameter sensitivity analysis on BA-Shape

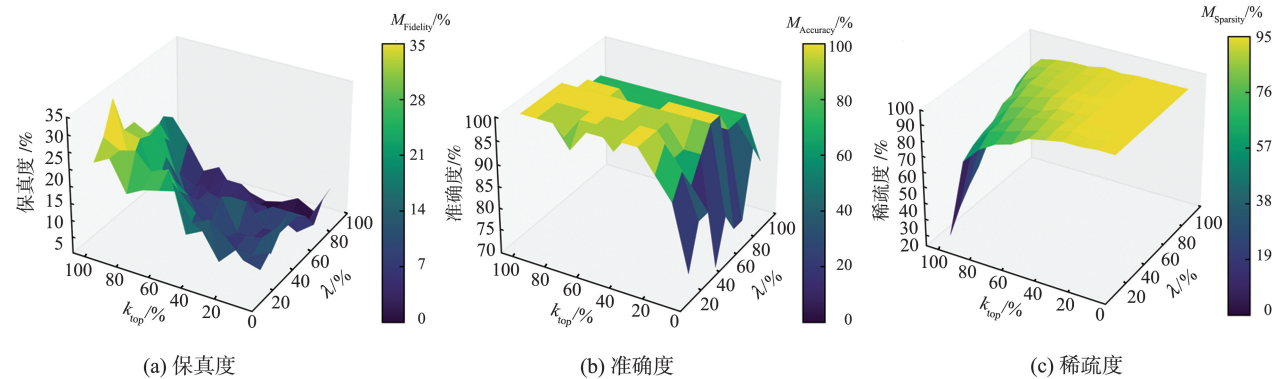


图8 数据集 MUTAG 上超参数敏感性分析

Fig.8 Hyperparameter sensitivity analysis on MUTAG

5.2 初始交叉率和变异率敏感性分析

改进遗传算法中两个关键参数交叉率和变异率直接影响算法搜索性能。较高交叉率有助于全局探查 (Exploration), 但可能利用 (Exploitation) 不足; 反之, 较低交叉率探查不足。同理, 较高变异率有助于利用和维护种群多样性, 可能导致收敛速度过慢; 较低变异率可能导致早熟收敛。从有效权衡探查和利用视角出发, 本研究采用自适应交叉和变异算子, 设计试验验证自适应算子中初始交叉率和变异率对算法性能影响。交叉率过大或过小都可

能影响算法搜索能力, 交叉率取值范围在 0.5~0.9。变异算子改善种群局部搜索能力, 取值不宜过大, 为 $\{0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1\}$, 试验数据集选用 BA-Shapes。图 9 展示两个参数在不同变化下算法指标变化情况。试验结果显示, 当初始交叉率在 0.8~0.9, 初始变异率在 0.05~0.1, 稀疏度、忠实度和准确度指标能够同时达到较高水平。当初始交叉率和变异率较低, 如交叉率在 0.5~0.6, 变异率在 0.005~0.001, 自适应算子变化范围十分有限, 算法性能也受到影

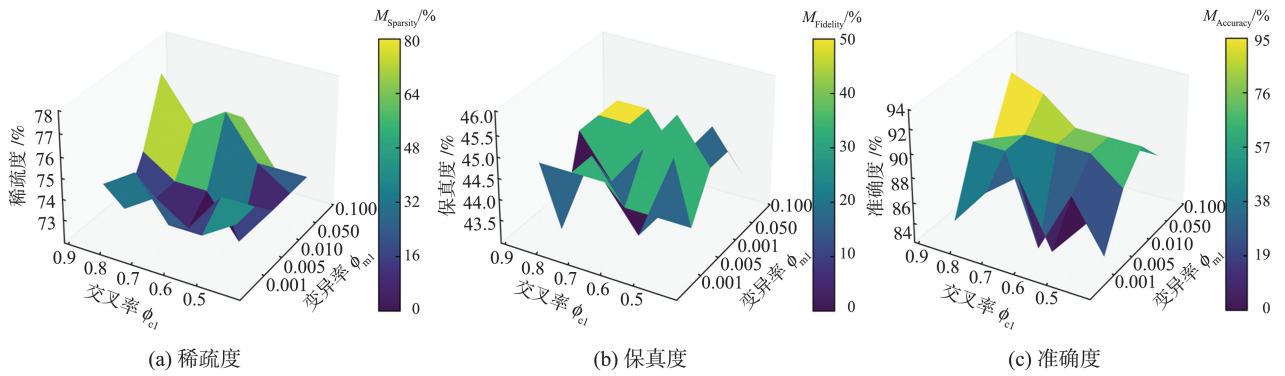


图9 遗传算法超参数敏感性分析

Fig.9 Hyperparameter sensitivity analysis in genetic algorithm

6 结束语

GNN 是一种图深度学习方法,在多种机器学习任务上表现出优越性能。该方法缺乏可解释的特点严重阻碍其广泛应用于现实问题。加上图数据本身的复杂性和不规则性,使得对 GNN 可解释性的研究成为当前一个至关重要且十分具有挑战性的问题。

现有 GNN 可解释算法大多通过单一解释模型提供解释。作为一种群体智慧,集成学习通过某种策略组合多个个体学习器以提升最终结果质量。受此启发,本研究提出基于进化集成的 GNN 解释算法,基于 Stacking 集成学习思想,利用改进遗传算法集成 GNNExplainer 和 PGExplainer 解释结果,获得解释表现更佳。本研究分别在节点分类和图分类 8 个数据集上进行多次试验,对试验结果进行定性和定量评估。定性方法从可视化角度验证算法有效性,定量指标相比同类方法表现更加优越。本研究在多个数据集上分析所提出算法的稳定性。试验结果表明,相较于对比方法,本研究具有较强抗干扰能力。本研究设计消融试验验证集成不同解释方法的有效性,设计超参数敏感性分析试验表明超参数 k_{top} 和 λ 及改进遗传算法中初始交叉率和变异率对算法性能均具有显著影响。

对 GNN 可解释性领域研究探索依然充满无限可能性。对于模型的解释要忠于模型且让人们易于理解,也要满足一致性和稳定性等多种目标,未来的研究会进一步探索多目标进化算法在该领域应用。可解释性研究有助于使用者信任 GNN 模型,如何将 GNN 解释方法有效应用于解决实际问题也是未来 GNN 可解释性领域的重要研究内容。

参考文献:

- [1] MA Y, TANG J. Deep learning on graphs [M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2021.
- [2] PILLAY K, MOODLEY D. Exploring graph neural networks for stock market prediction on the JSE [J]. Communications in Computer and Information Science, 2022, 1551: 95-110.
- [3] WU S, SUN F, ZHANG W, et al. Graph neural networks in recommender systems: a survey [J]. ACM Computing Surveys, 2022, 55(5): 1-37
- [4] DOU Y, LIU Z, SUN L. Enhancing graph neural network-based fraud detectors against camouflaged fraudsters[C]// Proceedings of the 29th ACM International Conference on Information & Knowledge Management (CIKM'20). New York, USA: Association for Computing Machinery, 2020: 315-324.
- [5] LIU M, GAO H, JI S. Towards deeper graph neural networks[C]// Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. New York, USA: ACM, 2020: 338-348.
- [6] ZHANG M, CUI Z, NEUMANN M, et al. An end-to-end deep learning architecture for graph classification [C]//Proceedings of the Thirty-Second AAAI Conference on Artificial Intelligence and Thirtieth Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference and Eighth AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence. New Orleans, USA: AAAI Press, 2018: 4438-4445.
- [7] ZHANG M, CHEN Y. Link prediction based on graph neural networks[C]// Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'18). Red Hook, USA: Curran Associates Inc, 2018: 5171-5181.
- [8] ZHANG Z, CUI P, ZHU W. Deep learning on graphs: a survey[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data

- Engineering, 2020, 34(1): 249-270.
- [9] WU Z, PAN S, CHEN F, et al. A comprehensive survey on graph neural networks [J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2020, 32(1): 4-24.
- [10] YUAN H, YU H, GUI S, et al. Explainability in graph neural networks: a taxonomic survey [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2023, 45(5): 5782-5799.
- [11] WU L, CUI P, PEI J, et al. Graph neural networks: foundations, frontiers, and applications[M]. Singapore: Springer, 2022.
- [12] HUANG Z, KOSAN M, MEDYA S, et al. Global counterfactual explainer for graph neural networks[C]// Proceedings of the Sixteenth ACM International Conference on Web Search and Data Mining (WSDM'23). New York, USA: Association for Computing Machinery, 2023: 141-149.
- [13] POPE P E, KOLOURI S, ROSTAMI M, et al. Explainability methods for graph convolutional neural networks[C]// 2019 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Long Beach, USA: IEEE, 2019: 10764-10773.
- [14] ARRIETA A B, DÍAZ-RODRÍGUEZ N, SER J D, et al. Explainable artificial intelligence (XAI): concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible AI [J]. Information Fusion, 2020, 58: 82-115.
- [15] HUANG Q, YAMADA M, TIAN Y, et al. GraphLIME: local interpretable model explanations for graph neural networks [J]. IEEE Transactions on Knowledge & Data Engineering, 2022, 35(7): 6968-6972.
- [16] RIBEIROM T, SINGH S, GUESTRIN C. "Why should I trust you?" explaining the predictions of any classifier [C]// Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'16). New York, USA: Association for Computing Machinery, 2016: 1135-1144.
- [17] YING R, BOURGEOIS D, YOU J, et al. GNNExplainer: generating explanations for graph neural networks [C]// Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. Red Hook, USA: Curran Associates Inc, 2019: 9240-9251.
- [18] LUO D, CHENG W, XU D, et al. Parameterized explainer for graph neural network[C]// Proceedings of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'20). Red Hook, USA: Curran Associates Inc, 2020: 19620-19631.
- [19] DUVAL A, MALLIAROS F D. GraphSVX: Shapley value explanations for graph neural networks [C]// Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Cham, Switzerland: Springer, 2021: 302-318.
- [20] YUAN H, YU H, WANG J, et al. On explainability of graph neural networks via subgraph explorations [C]// Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning. New York, USA: PMLR, 2021: 12241-12252.
- [21] MUENYE I D, SUN Y. A survey of ensemble learning: concepts, algorithms, applications, and prospects [J]. IEEE Access, 2022, 10: 99129-99149.
- [22] 周志华. 集成学习: 基础与算法 [M]. 北京: 电子工业出版社, 2020.
- [23] 胡毅, 瞿博阳, 梁静, 等. 进化集成学习算法综述 [J]. 智能科学与技术学报, 2021, 3(1): 18-35.
- HU Yi, QU Boyang, LIANG Jing, et al. A survey on evolutionary ensemble learning algorithm [J]. Chinese Journal of Intelligent Science and Technology, 2021, 3(1): 18-35.
- [24] 姚旭, 王晓丹, 张玉玺, 等. 基于随机子空间和 AdaBoost 的自适应集成方法 [J]. 电子学报, 2013, 41(4): 810-814.
- YAO Xu, WANG Xiaodan, ZHANG Yuxi, et al. A self-adaption ensemble algorithm based on random subspace and AdaBoost [J]. Acta Electronica Sinica, 2013, 41(4): 810-814.
- [25] KATOCH S, CHAUHAN S S, KUMAR V. A review on genetic algorithm: past, present, and future [J]. Multimedia Tools and Applications, 2021, 80: 8091-8126.
- [26] DHAL K G, RAY S, DAS A, et al. A survey on nature-inspired optimization algorithms and their application in image enhancement domain [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2019, 26: 1607-1638.
- [27] DAI E, WANG S. Towards self-explainable graph neural network [C]// Proceedings of the 30th ACM International Conference on Information & Knowledge Management (CIKM'21). New York, USA: Association for Computing Machinery, 2021: 302-311.
- [28] WU Z, RAMSUNDAR B, FEINBERG E N, et al. MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning [J]. Chemical Science, 2018, 9(2): 513-530.