未知软干预下的可扩展对比因果发现

Mingxuan Zhang[*1,2] **Khushi Desai**[*2,3] **Sopho Kevlishvili**[2,4] **Elham Azizi**[1,2,3,4,5]

[1]哥伦比亚大学系统生物学系[2]哥伦比亚大学欧文癌症动力学研究所[3]哥伦比亚大学计算机科学系[4]哥伦比亚大学生物医学工程系[5]哥伦比亚大学数据科学研究所

arXiv:2603.03411v1 [stat.ML] 3 Mar 2026

摘要

观测因果发现最多只能识别到马尔可夫等价类。虽然干预可以减少这种歧义，但在实践中，干预往往是软干预，且具有多个未知目标。在许多现实场景中，只能观测到单一干预机制。我们提出了一种可扩展的因果发现模型，用于处理观测数据与干预数据配对的设定，其中二者共享底层因果结构，且干预为目标未知的软干预。该模型聚合子集级部分有向无环图，并应用跨机制对比定向规则，在 Meek 闭包下构造全局一致的极大部分有向无环图，从而能够推广到分布内和分布外设定。理论上，我们证明该模型相对于受限Ψ 等价类是可靠的；该等价类仅由子集受限设定中可用的信息所诱导。我们进一步表明，该模型渐近地恢复相应的可识别部分有向无环图，并且与非对比式子集受限方法相比，能够定向更多边。在合成数据上的实验表明，该方法能够提升因果结构恢复效果，推广到具有留出因果机制的未见图，并扩展至更大图；消融实验也支持了理论结果。

1 引言

因果发现是各个科学领域面临的根本挑战，包括生物学 Sachs 等人 [2005], Farh 等人 [2015],Robins 等人 [2000], 、经济学 Hoover [2008],以及气候科学 Zhang 等人 [2011]。因果关系通常用有向无环图（DAG）建模，其中节点表示随机变量，有向边表示因果关系 Pearl [2009]。因果发现的目标是还原此类图结构。仅凭观测数据，因果发现模型的可识别性只能达到马尔可夫等价类（MEC）的层次。研究表明，干预数据能够提高可识别性并缩小马尔可夫等价类的规模 Hauser 和 Bühlmann [2014], Kocaoglu 等人[2017], Ghassami 等人 [2018], ，但通常假设干预是已知目标的完美（硬）干预。然而，在许多现实场景中（Smith 等人 [2013], Sachs 等人 [2005],Zhang 等人 [2019],Clarida 等人 [2000]），只有一种干预机制可用，且干预目标未知。此外，干预表现为变量机制的分布偏移，同时图结构保持不变。

Jaber 等人 [2020] 为从观测数据和目标未知的软干预数据中学习非马尔可夫系统的结构奠定了基础。他们通过在因果图中加入 F 节点来编码干预效应，并引入 Ψ-马尔可夫性质，以刻画图与目标的等价类。在此基础上，他们提出了 Ψ-FCI，这是一种基于约束的算法，并已证明在样本极限下能够可靠且完备地恢复该等价类。尽管具备这些理论保证，Ψ-FCI 仍依赖全局预言机访问，以获取干预目标所蕴含的所有机制内条件独立性和跨机制不变性。此外，它无法扩展到大型图，需要观测到多个机制的环境标签，也并非为泛化到分布外图而设计。

我们提出了 *SCONE* （未知软干预下的可扩展对比因果发现），这是一种可扩展框架，能够从两个干预目标未知的观测机制中学习因果结构，并泛化到分布外图和因果机制。SCONE 在受限信息条件下运行：它仅访问 (i) 可接受变量子集上的有限机制内子集级 PDAG，以及 (ii) 有限次经过检验的跨机制

[*]这些作者贡献相同。预印本

不变性查询。在此设定下，SCONE 分三个阶段进行：首先通过经典因果发现，在可接受节点集上估计局部子集级 PDAG；然后应用跨机制对比定向规则，重新确定仅在任一机制内仍存在歧义的边定向；最后通过轴向注意力将子集级约束汇总为全局最大定向部分有向无环图。具体而言，我们的贡献如下：

- **模型：** 我们提出了一种可扩展的对比式因果发现架构，用于处理干预目标未知的双机制数据。
- **理论结果：** 我们形式化了受子集限制的Ψ-等价性和由检验诱导的 Ψ-本质图，并证明了我们的方法在受限信息设定下的可靠性和一致性。
- **实证结果：** 我们表明，相较于先进的基线方法，我们的方法在多种基准测试中均能稳健地恢复因果结构；此外，我们通过消融实验分别考察了对比定向规则、对比特征和全局聚合模块的作用。

2 相关工作

2.1 经典因果发现

传统因果发现算法在有向无环图的组合空间中进行搜索，大致分为两类。基于约束的方法通过检验数据中的条件独立关系来推断因果结构 Glymour 等人 [2019]。例如，PC 和 FCI Spirtes 等人 [2000], 从观测数据中恢复完全部向无环图，而 JCI Mooij 等人 [2020], 则利用干预数据。基于评分的方法通过在候选有向无环图上优化拟合优度评分来识别因果结构（例如，GES Chickering [2002], 、GIES Hauser 和 Bühlmann [2012], 、CAM Bühlmann 等人 [2014], 以及 IGSP Wang 等人 [2017]）。尽管这些方法奠定了基础，但它们需要递归搜索并执行大量图操作，因此极难扩展。

2.2 可微因果发现

连续优化方法将因果发现重新表述为在参数化图上运行的可微程序，从而绕过传统方法中的组合搜索。NOTEARS Zheng 等人 [2018] 在邻接矩阵上引入代数无环约束，使得能够在有向无环图空间中进行基于梯度的优化。后续工作将这一框架扩展至表达能力更强的参数化形式，包括多项式和神经结构方程模型 Lee 等人 [2019], Lachapelle 等人 [2019], Zheng 等人 [2020],、替代无环约束 Ng 等人 [2020],Bello 等人 [2022], , 以及对干预数据的支持 Brouillard 等人 [2020]。然而，可微因果发现方法在可扩展性和数值稳定性方面仍受限，也无法泛化到分布外图结构。

2.3 可泛化且可扩展的架构

受基础模型启发的方法利用 Transformer 架构来提升泛化能力和可扩展性。AVICI Lorch 等人 [2022] 采用带有轴向注意力的变分推断模型，从观测数据或干预数据中预测因果结构。SEA Wu 等人 [2024]对变量子集进行采样，在子图上应用经典因果发现方法，并通过对全局汇总统计量进行轴向注意力处理来汇总预测结果。然而，这两种方法都假设干预是完美的且目标已知，因此在一般干预设定中的适用性有限。

2.4 Ψ-马尔可夫等价与环境不变性模型

Jaber 等人 [2020] 的理论工作为在非马尔可夫系统中利用目标未知的软干预数据进行结构学习奠定了基础，提出了用于刻画等价类的 Ψ-马尔可夫性质，以及能够保证恢复结果的 Ψ-FCI 算法。然而，Ψ-FCI 需要对所有可能的图进行递归搜索，并且需要预言机访问，以获取所有机制内条件独立关系和跨机制不变性。ICP 及其非线性扩展（Peters 等人 [2016],Heinze-Deml 等人 [2018], Gamella 和 Heinze-Deml [2020],Pfister 等人 [2019] ）利用环境间的机制不变性来识别因果父节点，但仅限于识别父节点，无法确定其他边的方向。

3 理论结果

我们证明双机制设置下的模型可靠性$c \in \{0,1\}$，其中共享有向无环图 $G = (V, E)$，且 $(P^{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$ 由一个固定图的模块化软干预结构因果模型生成，其目标未知 $I \subseteq V$。模型仅访问 (i) 针对可接受 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 的子集级机制内部分有向无环图摘要 $E_S^{(c)} = \mathcal{D}(P_S^{(c)})$，以及 (ii) 一组有限的、经检验的不变性文字 $\mathrm{Inv}(v \mid Z)$，用于 $(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$（精确定义见附录 B.2）。类比于 Ψ-马尔可夫，我们定义由这些信息诱导的受限 Ψ-像和受限 Ψ-等价类，并以相应的估计目标 $G_{\mathrm{test}}(G)$ 为目标：其最大部分有向无环图（MPDAG）在受限 Ψ-等价类上具有受迫边。利用带有制度标签 C 的双机制混合增广，我们将不变性解释为 C-条件独立，并在经检验的见证集上满足机制忠实性这一条件下，提出三个对比定向规则示例，并证明其受限-Ψ-可靠性。最后，我们表明，汇总子集模式并依据这些规则定向边，可得到一个全局 MPDAG（经过 Meek 传播后），其有向边是 $G_{\mathrm{test}}(G)$中有向边的子集，而且我们可以渐近地恢复 $G_{\mathrm{test}}(G)$。我们还表明，非对比的子集受限方法无法恢复我们学得的边的某个子集。

3.1 定义受限等价类与I-EG

传统的 Ψ-马尔可夫方法（以及 Ψ-FCI 等算法）中，Jaber 等人 [2020] 研究了目标未知的软干预，并假设满足全局预言机 约束族：(i) 所有机制内条件独立关系，以及 (ii) 由（未知）目标集蕴含的所有跨机制不变性。该预言机在增广对象 $\langle G,\ I\rangle$ 上诱导一个 Ψ-等价类，而 Ψ-FCI 是相对于这个完整信息等价类进行分析的。

我们的设定是子集受限的：模型无法观测 $P^{(0)}$或 $P^{(1)}$ 的完整条件独立结构，也无法查询任意不变性。相反，它只能访问(a) 有限多个机制内的子集层级部分有向无环图 $\{E_S^{(c)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\ c\in\{0,1\}}$ 以及(b) 有限多个跨机制、节点层级上的条件不变性检验$\{\mathrm{Inv}(v\mid Z)\}_{(v,Z)\in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}$，其中 $\mathrm{Inv}(v\mid Z):=\mathbf{1}\{P^{(0)}(X_v\mid X_Z)\ =\ P^{(1)}(X_v\mid X_Z)\}$。因此，我们引入受限 Ψ-像 $\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G;\mathcal{M})$（定义2），它将候选有向无环图 G 映射到在$(P_{(0)}\,P^{(1)})\ \in\ \mathcal{M}(G)$下可实现的查询结果元组集合，并通过这些像的相等性定义受限Ψ-等价（定义3）。等价地，模型的信息由受限约束族加以概括（定义2）

$$\mathcal{F}_{\psi}(\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}})\ :=\ \big\{\,E_S^{(c)}(\cdot)\big\}\ \cup\ \big\{\,\mathrm{Inv}(v\mid Z)(\cdot)\big\}$$

由于 $\mathcal{F}_{\psi}(\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\ \mathcal{T}_{\mathrm{a}})$ 弱于预言机族，因此诱导出的等价关系通常更粗，所以 $[G]_{\Psi}\subseteq[G]_{\Psi^{\mathrm{res}}}$。我们的估计目标是由检验诱导的 Ψ 本质图 $G_{\mathrm{test}}(G)$（定义 4）；换言之，在 $\mathcal{M}$ 且访问权限仅限于 $\mathcal{F}_{\psi}(\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\ \mathcal{T}_{\mathrm{a}})$ 的情况下，因果输出可识别至受限-Ψ 等价类 $[G]_{\mathrm{res}}$。

3.2 受限 Ψ-可靠定向规则

我们提出了三条受限的 Ψ-可靠对比规则，并证明它们能够为那些无法仅凭任何单机制子集部分有向无环图确定方向的因果边定向。我们通过将经过检验的不变关系附加到局部子集部分有向无环图模体上来构造这些规则，具体包括机制敏感边（命题 3）、候选碰撞点（命题 4）和区分路径（命题5）。为证明这些规则的可靠性，我们首先通过定义混合分布 $P^{*}(C\ =\ c,\ \ X):=\pi_c P^{(c)}(X)$，将不变性检验与图结构联系起来；该分布定义在有向无环图节点和二元标签 C 上。在这一构造下，双机制条件不变性就是C-条件独立：

$$\mathrm{Inv}(v\mid Z)=1\ \iff\ C\perp\!\!\!\perp X_v\mid X_Z\ \text{under}\ P^{*},$$

而 $\mathrm{Chg}(v\mid Z)\ =1$ 对应于 $C\not\perp\!\!\!\perp X_v\mid X_Z$（引理 1）。接下来，我们通过为干预目标 $t\in I$添加带有边 $C\to t$ 的 C，构造增广图 G^{*}，并假设经检验的见证集上的制度忠实性，这保证对于所有可接受的见证查询 $(v,\ Z)\ \in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，陈述 $C\perp\!\!\!\perp X_v\mid X_Z$ 和 $C\not\perp\!\!\!\perp X_v\mid X_Z$ 与 G^{*} 中的相应 d-分离关系 $C\perp_d v\mid Z$ 和 $C\not\perp_d v\mid Z$ 一致（假设 5）。

下面我们正式定义对比定向规则，并为每条规则给出简要证明概要。

单侧不变性 此规则针对机制内子集级部分有向无环图中仍保持无向的边，仅当节点对表现出不对称的跨机制行为时才对其定向

命题 1. 设 $S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 满足 $\{i,j\}\subseteq S$，使得 $i-j$ 在两个总体局部*PDAG* $E_S^{(0)}$ 和 $E_S^{(1)}$（定义*1*）中均为无向邻接。设 $Z:=S\setminus\{i,j\}$，使得(j,Z)、$(i,Z)\ \in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，且 $Z\ \in\ \mathcal{W}(j)$、$Z\ \in\ \mathcal{W}(i)$。此外，假设 i 和 j 在每个 $G'\in[G]_{\mathrm{res}}$ 中均邻接（等价地，$i-j$ 位于 $G_{\mathrm{test}}(G)$ 的骨架中）。如果

$$\mathrm{Chg}(j\mid Z)=1,\qquad \mathrm{Inv}(i\mid Z)=1,$$

那么 $i\to j$ 在受限的 Ψ-等价类中保持不变，因此在 $G_{\mathrm{test}}(G)$ 中定向相同。

该命题的完整证明见附录（命题 3 的证明）。概括而言，我们通过证明反向定向会以错误的方式传播机制依赖，排除了这种可能性。引入环境节点 C，使我们的不变性/变化检验可以表述为：在见证条件集 Z 下，C 是否与某个节点分离/相连（假设 5）。如果将未定向的边定向为 $j\to i$，那么任何从 C 到 j 的 Z-活跃连接都会经由 $j\to i$ 延伸，从而迫使 i 也依赖于 C。

对比 V 结构 该规则将对比比较扩展到不同机制下的无向三元组

命题 2。设 $S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 满足 $\{i,j,k\}\subseteq S$，使得 $i-j-k$ 是 S 上局部骨架中的一个未屏蔽三元组。令 $Z:=S\setminus\{i,j,k\}$，并假设 (i,Z)、(j,Z)、$(k,Z)\ \in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 满足 $Z\ \in\ \mathcal{W}(i)\ \cap\mathcal{W}(j)\cap\mathcal{W}(k)$。此外，假设 $i-j$ 和 $j-k$ 是 $[G]_{\mathrm{res}}$ 的公共骨架中的边（等价地，它们是 $G_{\mathrm{test}}(G)$ 的骨架中的边）。如果

$$\mathrm{Chg}(j\mid Z)=1,\qquad \mathrm{Inv}(i\mid Z)=1,\qquad \mathrm{Inv}(k\mid Z)=1,$$

那么，$i\to j\leftarrow k$ 在 $[G]_{\mathrm{res}}$ 中是必然存在的，因此会出现在 $G_{\mathrm{test}}(G)$中。

完整证明见附录（命题 4 的证明）。在此证明中，我们通过说明在 j处进行任何非碰撞点定向都会在 j处造成机制依赖，从而与 $\mathrm{Inv}(j\mid Z)\ =1$矛盾，来排除这种定向。我们引入环境节点 C，使不变性对应于给定见证集 Z 时 C 与 j 分离（假设 5）。如果 $i-j-k$

在 j处定向为尾端，那么任何从 C 出发并到达某个邻居的 Z-活跃连接，都会沿着该尾端延伸至 j，迫使 C 与 j 之间存在 Z-连接，因此 Chg($j \mid Z$) $= 1$。所以 j 必须是碰撞点，从而得到$i \to j \leftarrow k$；同样的论证适用于受限的 Ψ-等价类，因此 V结构是必然的，并出现在 G_{test}(G) 中。

对比判别路径 我们还可以进一步扩展该逻辑，使其能够应用于子集层级的部分有向无环图中的判别路径（定义 6）。受篇幅限制，精确表述和证明请参见附录（引理 2、引理 3、引理 4、引理5、命题5）。总而言之，证明分为三个步骤：首先，我们证明，任何会改变判别路径标记（定义 !7、定义 8）的替代重放赋值（定义 !7、定义 8），都必须在路径上存在一个首个重放分歧节点（引理 3）；接着，我们证明，在满足某些 j、Chg($j \mid Z^{\pi}$) $= 1$ 以及路径段兼容条件的情况下，这个首个不一致会继承机制依赖：将一条从机制节点 C 到 j 的未阻断路径，与判别路径上相应的未阻断路径段拼接起来，从而得到 $C \not\perp_d r \mid Z^{\pi}$（依据引理 2 和引理 4）；最后，假设 5 和引理 1 将这种图依赖转化为 Chg($r \mid Z^{\pi}$) $= 1$，这与重放节点不变性前提 Inv($r \mid Z^{\pi}$) $= 1$ 矛盾（引理5）。随后，该命题通过受限的 Ψ-等价性，将这一唯一性论证从生成DAG推广到每个 $G' \in [G]_{\text{res}}$，这意味着 (j、 k) 上的判别路径标记是必然的，因此会出现在 G_{test}(G) 中。

3.3 全局受限 ΨI-EG估计

本节通过以下两点展示模型的可靠性：（1）全局对比聚合保证，以及非对比聚合与对比聚合之间存在可证明的差距；（2）渐近恢复测试诱导的 Ψ 本质图。完整证明见附录3。对于（1），我们证明，任何不使用跨机制对比的子集聚合器，都无法恢复由对比信息所确定的额外边，因此需要采用我们的对比框架。由于非对比聚合器无法访问经过测试的方差查询，我们定义一个约化估计目标 $G_{\mathcal{S}_{\text{a}}}^{\text{test}}$，它仅基于可容许子集上的各机制局部部分定向无环图，并刻画该约化估计目标与受限测试诱导的 Ψ 本质图 G_{test}之间的差距 R。我们提出以下定理:

定理1（对比聚合保证与G_{test}-可靠性）。 对于检验族（$\mathcal{S}_{\text{a}}$、 $\mathcal{T}_{\text{a}}$），其局部部分定向无环图为 $\{E_S^{(c)}\}_{S \in \mathcal{S}_{\text{a}},\, c \in \{0,1\}}$，查询为 $\{\text{Inv}(v \mid Z)\}_{(v,Z) \in \mathcal{T}_{\text{a}}}$；在假设*5*、*6*成立且假定DirE($H_{\text{per}}$) ⊆DirE($G_{\mathcal{S}_{\text{a}}}^{\text{test}}$)的条件下：

*1.*单调增益：DirE(H_{obs})DirE(H_{per}) ⊆ ⊆ DirE(H_{ctr}).*2.* G_{test}-可靠性：DirE(H_{ctr}) ⊆ DirE(G_{test})。

3. 分离：如果 $R \neq \varnothing$则DirE($\mathcal{A}$) ⊊ DirE(G_{test})且 DirE(H_{per}) ⊊ DirE(G_{test})。

在 $G_{\mathcal{S}_{\text{a}}}^{\text{test}}$下逐机制可靠性的假设下，我们基于 MPDAG(·) 算子关于有向边 DirE(·) 上递增知识集的单调性，以及对比规则所产生的结果，证明全局观测、逐机制和对比 MPDAG 具有单调增益。随后，我们通过扩展约简后的 Ψ-像，并采用由命题 1、2 和 3 限定为 Ψ-可靠的对比规则，证明对比 MPDAG 的可靠性。最后，我们证明，任何非对比子集尊重聚合器都无法恢复 R 中的任何边（引理6、推论 1），因为仅凭逐机制信息恢复最大可靠有向边的能力受 $G_{\mathcal{S}_{\text{a}}}^{\text{test}}$限制。

接下来，我们给出G_{test}的渐近恢复定理。

定理 2（检验诱导的受限 Ψ 本质图的一致性）。 设 $\widehat{G}$ 为经过 T 个抽样子集后的模型输出：*(i)* 在每个抽样的 S 以及每个$\widehat{\ }$机制 c上估计 $\widehat{E}_S^{(c)}$，*(ii)* 估计Inv($v \mid Z$)，对象为抽样见证上所检验的(v, Z) 对，*(iii)* 利用这些估计应用定向规则，以及*(iv)* 用$\widehat{\ }$闭包Cl 聚合所有推断约束以输出 G。在假设 *1–6* 与见证覆盖（假设 *7*）下，当 n、 $T \to \infty$时，

$$Pr\Big(\widehat{G} = G_{\text{test}}\Big) \;\to\; 1.$$

完整证明见附录（4）。在该证明中，我们表明当 $n \to \infty$时，Pr($\mathcal{E}_n$) $\to 1$，其中 $\mathcal{E}_n$ 是如下事件：模型所调用的全部局部部分定向无环图与不变性检验在有限可容许族上均正确。在 $\mathcal{E}_n$上，由于经验受限 Ψ像与总体受限 Ψ像一致，估计图$\curlywedge G$ 与 G处于同一受限 Ψ等价类中。由$\curlywedge G_{\text{test}}$可靠性，这蕴含DirE($G$) ⊆ DirE(G_{test})。对任意强制边 $e \in G_{\text{test}}$，见证覆盖保证其以概率 $\to$ 1被抽样。因此，每条强制边都会在总体层面被纳入聚合。由闭包可靠性，不会引入错误定向。对有限边集应用并集界，$\widehat{\ }$给出：当 n， $T \to \infty$时，Pr($G = G_{\text{test}}$) $\to 1$。

4 模型架构

SCONE 架构通过两个流运行：边际流处理来自可容许子集的边级表示，全局流则维护所有有序节点对的稠密表示。该架构整合了经典因果发现、对比式方向偏置头和轴向注意力，以实现可扩展聚合。

与我们的架构最相似的方法是

SEA Wu 等人 [2024]；然而，我们的架构在以下方面仍有显著区别。

4.1 构建边际因果结构

设 $V = \{1, ..., N\}$ 为节点。我们构建 T 个可容许子集 $S_1, ..., S_T \subseteq V$，并固定一个由无向边组成的全局目录 $e_k = \{i, j\}$，对应 $k = 1,..., K$ 个唯一无序对。我们考虑两个机制 $c \in \{0, 1\}^N$。

4.1.1 采样可容许子集

我们通过一种贪心采样策略构建可容许子集，该策略优先考虑软干预目标，同时确保图覆盖。节点敏感度分数 $s_i \in [0, 1]$ 综合了跨机制的标准化均值偏移以及与制度标签的互信息。成对对比得分

$$\Gamma_{i,j} = |\mathrm{corr}^{(1)}(X_i, X_j) - \mathrm{corr}^{(0)}(X_i, X_j)| \qquad (1)$$

捕捉跨机制相关性偏移。二者均按访问频率衰减，$n^t_{i,j}$，针对子集 t，以抑制重采样：

$$\alpha^t_{i,j} = \alpha_{i,j}/q^{\,n^t_{i,j}}, \qquad \Gamma^t_{i,j} = \Gamma_{i,j}/r^{\,n^t_{i,j}}, \qquad (2)$$

其中 $q, r > 1$ 控制探索—利用。先按类别分布抽取一个种子节点，然后根据成对相关性$\alpha^t_{i,j}$、敏感度s_j、均值对比$\Gamma^t_{i,j}$以及覆盖奖励对候选节点打分，并以贪心方式添加节点。每形成一个子集后，更新访问计数与成对计数（完整公式见附录 H.1.1）。

4.1.2 经典因果发现集成

因果发现集成模块结合多个基学习器，为每个无序节点对 $\{i, j\}$生成四类边投票：$\{i \to j,\ j \to i,\ i - j,$无边$\}$。我们主要使用 PolyBIC 作为成对函数学习器（并提供使用 GES-BIC 作为基于结构的学习器的选项），通过比较经过温度缩放的多项式回归 BIC 分数来为任一方向的边赋权。通过有放回地对 S 个观测进行重采样，抽取自助法重复样本 $\{x^{(r)}\}_{r=1}^{R_{\mathrm{boot}}}$。每个重复样本产生的分数会通过阈值 τ_ℓ 和用于打破平局的间隔 ϵ解码为独热投票；随后汇总各学习器和重复样本的加权投票计数，最终通过多数投票确定边类别，平局时默认选择无边（完整详情见附录 H.1.2）。

4.1.3 边标记化

对于每个抽样子集 S_t，集成因果发现模块在两种机制上独立运行，生成局部部分定向无环图，其边被收集并去重，形成包含 K 条边的候选边集 K_{cand}。每条边 $e = \{i, j\}$采用6维端点编码、独热节点标识符以及逐机制成对统计量$\phi^{(c)}_{ij} \in \mathbb{R}^4$ 进行编码——其中包含相关性、偏相关，以及成对回归系数——构成$x_{e,c}$。这些被投影到维度 d，并加入正弦位置嵌入，从而得到 $H_E \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times 2\times d}$:

$$H_E[t, e, c, :] = \mathrm{MLP}(x_{e,c}) + \mathrm{PE}_T(t) + \mathrm{PE}_K(k). \quad (3)$$

与此同时，基于跨机制取平均的逆协方差矩阵构建全局流 $H_\rho \in \mathbb{R}^{B\times N\times N\times d}$，将其投影至维度 d，并与学习得到的节点位置嵌入相加（完整详情见附录 H.1.3）。

不变性／对比性重新参数化 随后，边嵌入会重新参数化为不变性通道和对比通道$z_{\mathrm{avg}} = \frac{1}{2}(H^{(1)}_E + H^{(0)}_E)$与 $z_\Delta = H^{(1)}_E - H^{(0)}_E$，它们取代原有的机制嵌入，成为两个发挥作用的~通道，并构成 H_E。这种双射重参数化将机制不变结构与机制特异性变化解耦，从而强化了定向规则可利用的对比信号。

4.2 对比定向偏置头

每条对比定向规则都会针对每个子集 S_t，为三种定向类别 $\{i \to j,\ j \to i,\ i - j\}$生成带符号的偏置。为了量化一个节点的机制在不同机制间的变化程度，我们定义一个不变性得分

$$\gamma_v = \mathrm{Norm}\left(\sum_{e\ni v} \|\Delta_e\|\right) \in [0, 1], \quad g_v := 1 - \gamma_v, \quad (4)$$

~ ~其中 $\Delta_{ij} = H_E[t, \{i, j\}, 1, :] - H_E[t, \{i, j\}, 0, :]$ 表示边 $e = \{i, j\}$的机制对比，而 g_v 表示其补集。不变性得分较高的节点更有可能具有机制不变性（即非目标节点），因此能提供更强的定向信号。

4.2.1 单侧不变性（SSI）

对于每条边 $\{i, j\}$，通过对至少出现在比例为 ρ 的子集中的相邻候选边的嵌入进行均值池化，构建父上下文 $\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j \in \mathbb{R}^d$。共享预测器 ψ 将每个端点嵌入及其父上下文映射为充分统计量向量 $\phi^{(c)}_v = \psi([\widetilde{H}_E[t, \{v, \cdot\}, c, :] \,\|\, \mathbf{p}_v \,\|\, \mathbf{m}_v])$，而 $\delta_v = \|\phi^{(1)}_v - \phi^{(0)}_v\|$衡量跨环境偏移。当 j 的偏移超过 i时，会对 $i \to j$施加偏置：

$$\begin{aligned} b^{\mathrm{SSI}}_{t,\{i,j\},c}(i \to j) &+= \kappa \cdot \mathrm{clip}(\delta_j - \delta_i, -\tau, \tau), \\ b^{\mathrm{SSI}}_{t,\{i,j\},c}(j \to i) &-= \kappa \cdot \mathrm{clip}(\delta_j - \delta_i, -\tau, \tau). \end{aligned} \qquad (5)$$

由 $\gamma_j \geq \gamma_i + \eta$ 和 $\gamma_i \leq \gamma_{\max}$ 控制，确保仅当 j 是受扰动程度更高的端点时才触发偏置（完整细节见附录 H.2.1）。

4.2.2 对比 V 结构（CVT）

对于 S_t中的每个未屏蔽三元组（i, j, k），我们使用边嵌入对碰撞点 $i \to j \leftarrow k$的似然进行评分，并

跨机制对比统计量 Δ_{ij}, Δ_{kj}:

$$s^{(1)}_{\text{vstr}}(i \to j \leftarrow k) = \sigma\Big(u^\top \big[\widetilde{H}_E[t, \{i,j\}, 1, :] \,\|\, \widetilde{H}_E[t, \{k,j\}, 1, :] \,\|\, \Delta_{ij} \,\|\, \Delta_{kj}\big]\Big) \tag{6}$$

其中， σ 是一个激活， u 是学习得到的。经不变性得分 g_j缩放后，该得分会对 j 处两条入射边上的箭头给予正偏置，从而促进碰撞定向，同时惩罚反向（完整细节见附录 H.2.2）。

4.2.3 对比式判别路径（DPT）

设 $\mathcal{G}_t$ 为子集 S_t的边图，其中节点表示边，邻接关系表示共享顶点。对于每条边 $\{i,j\}$，通过广度优先搜索枚举长度为 $m \le L$ 的前 B 条短路径 $\pi = (e_0, \ldots, e_m)$。在每个环境中，使用 DeepSets 风格的聚合器 DeepSet(·)，对边嵌入和跨环境对比进行独立编码，得到各环境的得分 $s_\pi^{(c)} \in [0,1]$。置信度较高的环境 $c^* = \arg\max_c s_\pi^{(c)}$提供定向信号，并将其应用于另一个环境 $\bar{c} = 1 - c^*$:

$$\begin{aligned} b^{\text{DPT}}_{t,\{i,j\},\bar{c}}(i \to j) &\mathrel{+}= \lambda\, s_\pi^{(c^*)}, \\ b^{\text{DPT}}_{t,\{i,j\},\bar{c}}(j \to i) &\mathrel{-}= \lambda\, s_\pi^{(c^*)}, \end{aligned} \tag{7}$$

在候选路径上进行聚合（完整细节见附录 H.2.3）。

4.3 聚合模型架构

SCONE 维护两个流：一个是来自抽样子集的边词元的边际流 $H_E \in \mathbb{R}^{T\times K\times 2\times d}$，另一个是全局流 $H_\rho \in \mathbb{R}^{N\times N\times d}$，涵盖所有有序节点对。~边嵌入 H_E 首先重新参数化为 H_E，两个流则通过消息传递在各层之间耦合（完整细节见附录 H.3）。

4.3.1 轴向聚合器

边际轴向块。每个块沿 T和 K应用轴向注意力，随后是一个带预层归一化和残差连接的前馈层。注意力之后应用对比偏置头（CVT、SSI、DPT），并由每条边的不变性分数 γ_v 进行门控，再投影回嵌入空间。

消息传递。 对于从边际流到全局的更新，在每一层中，边嵌入通过学习到的注意力权重 w_t 在各子集间进行汇聚，生成每条边的消息 $m_e \in \mathbb{R}^d$。随后，将每条候选边$e = \{i,j\}$的 $H_\rho[i,j,:] \leftarrow m_e$ 写入全局节点对表中；未观测到的节点对则默认为零。在全局模块中，填充后的节点对表会在 $N \times N$ 网格上依次进行按行和按列的轴向注意力运算，随后经过逐位置前馈层，从而实现对所有节点对的全局关系推理。对于从全局到边际流的更新则通过将相应的节点对嵌入加到每个边令牌上，把更新后的全局表示广播回边际流:

$$\widetilde{H}_E[t, e, :, :] \leftarrow H_E[t, e, :, :] + H_\rho[i, j, :] \tag{8}$$

这就闭合了局部-全局循环，确保每一层的子集级边表示都能融入完整的图上下文。

4.3.2 全局头

由于候选边可能无法涵盖定向所需的所有边，因此辅助全局头会对 H_ρ 应用线性投影，以预测所有有序节点对的边类别，从而提供候选集之外的监督信号。其损失 $\mathcal{L}_{\text{global}}$ 在所有正边和抽样的部分负样本上计算，并以 λ_{global} 的权重纳入总目标函数；在推理时，还可以将其对数几率与非候选边的边缘对数几率融合。至关重要的是，这一辅助信号促使局部子集级预测与全局成对表示保持一致（完整细节见附录 H.3.2）。

4.3.3 优化目标

模型通过对候选边进行交叉熵损失训练，标签为 $\{u \to v,\ v \to u,\ \text{无边}\}$，并辅以软 SHD 惩罚和成对排序损失:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{CE}} + \lambda_{\text{SHD}}\,\mathcal{L}_{\text{SHD}} + \lambda_{\text{rank}}\,\mathcal{L}_{\text{rank}} + \lambda_{\text{global}}\,\mathcal{L}_{\text{global}}, \tag{9}$$

其中， $\mathcal{L}_{\text{SHD}}$ 惩罚预测边概率与真实值之间的平方偏差， $\mathcal{L}_{\text{rank}}$ 是成对合页损失，用于将真实有向边排在非边之前；而$\mathcal{L}_{\text{global}}$ 是针对所有节点对的辅助全局头损失。门控正则化项鼓励对比偏置头在整个训练过程中保持活跃，避免退化为逐机制局部定向。模型使用 AdamW 优化，并采用预热和余弦学习率调度；评估时使用 EMA 权重（完整细节见附录 H.3.3）。

5 实证结果

我们在干预目标未知的合成软干预数据集上，于不同实验设置下评估 SCONE，并与最先进的基线方法进行比较。合成数据生成、评估指标、基线配置及扩展结果的详细信息见附录 I、J.1 和 J.2。

5.1 基线模型

我们考虑两类基线模型：（1）具备分布外泛化能力的可扩展因果发现学习器；（2）需要在由各个因果图生成的数据上学习的因果发现学习器。第（2）类基线模型需要

在测试数据集上训练，因此对应的是要求较低的设定。值得注意的是，这些基线方法都不是为未知软干预而设计的。支持干预数据的方法是在干预目标已知的干预设定下训练的。

分布内因果发现学习器 DCDI通过在可微无环约束下联合优化邻接矩阵和神经机制，学习非线性结构方程模型。**NOTEARS-NONLINEAR**将连续优化框架应用于非线性函数，并通过平滑无环约束确保有向无环图结构。**DCD-FG**通过将邻接矩阵分解为低秩分量，对 DCDI 进行扩展。

具备分布外泛化能力的学习器 AVICI 在因果图上执行摊销推断，学习在一组数据生成过程上逼近 $P(G|D)$。**SEA** 对变量子集进行采样，在每个子图上运行标准因果发现算法（FCI 或 GIES），并通过轴向注意力汇总局部预测，同时纳入全局统计量，以生成完整图的估计。

5.2 结果

所有设置的扩展结果见附录 J。请注意，我们在 50 节点和 100 节点实验中排除了 NOTEARS 和 DCDI，因为它们无法扩展到更大的图。在单个 NVIDIA A100（40GB）上，对于 20 节点、20 条边的图，NOTEARS 的每个图运行时间为 2 至 96 小时，DCDI 为 5 至 72 小时，具体取决于初始化和收敛行为。在 50 节点和 100 节点设置下，这两种方法的运行时间均超过实际可接受的时间限制。

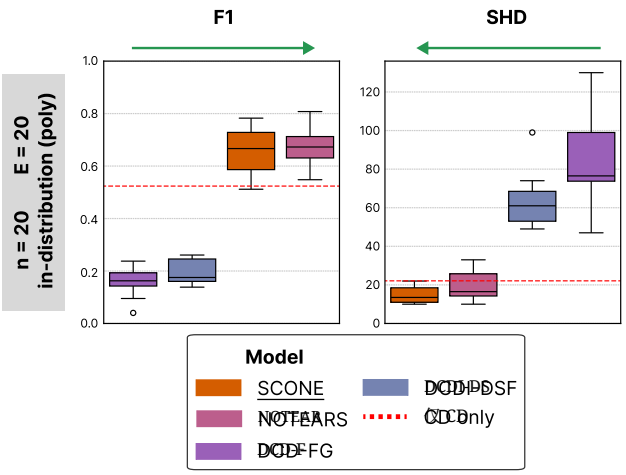

图 1：在 20 个节点、20 条边的图上，仅执行分布内图预测的最先进方法的 F1分数（精确率和召回率的调和均值）和 SHD（结构汉明距离）。使用多项式机制生成了 10 个图。水平红色虚线表示经典因果发现基线运行所得预测在 10 个图上的均值。

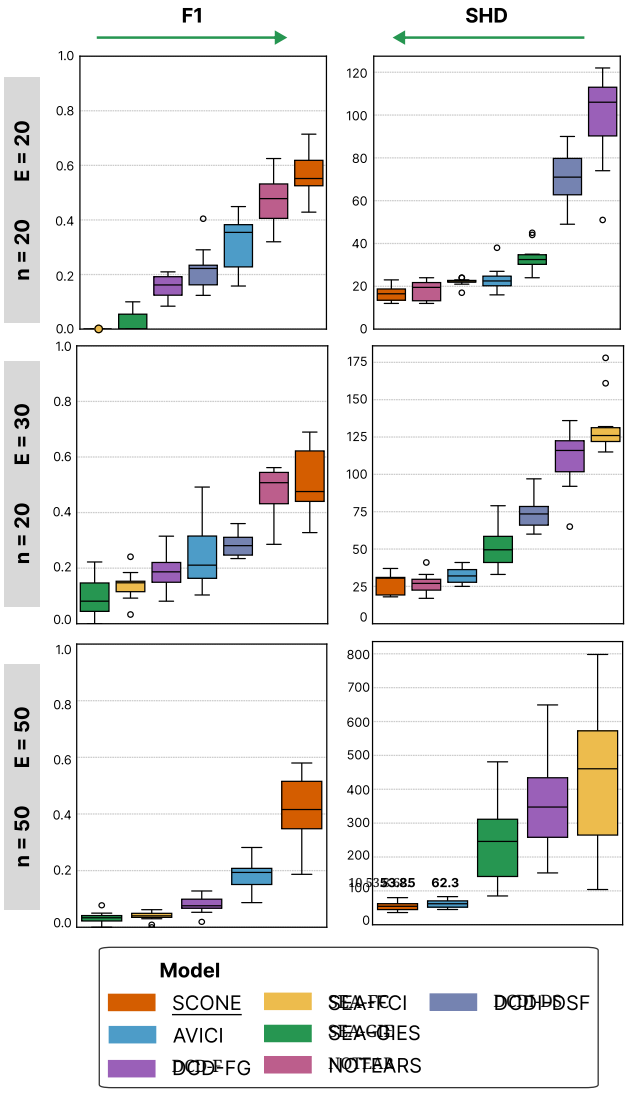

图 2：最先进方法与 SCONE 在以下图上的预测结果的 F1分数和 SHD：10 个包含 20 个节点、20 条边的图，10 个包含 20 个节点、30 条边的图，以及 20 个包含 50 个节点、50 条边的图。在包含 20 个节点、20 条边的示例中，SEA-FCI 的 F1分数为 0.0，因此在坐标轴底部以圆圈表示。

5.2.1 分布内基准测试

我们在分布内评估所有方法，其中训练、验证和测试数据均仅使用多项式机制生成，并对 10 个包含 20 个节点和 20 条边的图取平均。SCONE 在所有基线方法中取得了最低的 SHD（14.6 ± 4.4）（图 1），表明当训练机制与测试机制相匹配时，结构恢复效果有所提升（扩展结果见附录：图 3、表 4）。

5.2.2 分布外泛化基准测试

我们接下来评估分布外泛化能力：在线性、神经网络和神经网络加性机制上训练，并在未见类型（多项式、Sigmoid）上测试，同时改变图规模和边密度，以评估跨

稀疏性机制。SCONE在所有评估机制上始终优于分布内学习器和分布外基线方法，SHD更低、F1分数更高（图2），展现出对未见因果机制的强泛化能力（扩展结果见附录：图4、表5）。

5.2.3 扩展到更大图规模的可扩展性

我们在包含100个节点和100条边的图上评估可扩展性。在这一规模下，SCONE 的 SHD 最低、F1分数最高（表1）；随着图规模增大，其性能保持稳定，而 DCD-FG 和 SEA 的变体则表现出 SHD 显著增加的情况（扩展结果见表6）。

模型	SHD ↓	F1 ↑
SCONE	**126.7** $\pm$ 25.0	**0.237** $\pm$ 0.046
AVICI	131.3 $\pm$ 18.0	0.100 $\pm$ 0.042
DCD-FG	1001.3 $\pm$ 537.9	0.052 $\pm$ 0.011
SEA（FCI）	3178.8 $\pm$ 425.2	0.022 $\pm$ 0.004
SEA（GIES）	1797.2 $\pm$ 296.6	0.022 $\pm$ 0.004

表 1：在包含 $N = 100$ 个节点和 $E = 100$ 条边的图上对因果发现方法进行比较。结果为 20 个图的平均值（均值 $\pm$ 标准差）。

5.2.4 消融研究

在我们的模型架构（附录 H）中，对比定向规则被实现为由独立模块（偏置头）学习得到的偏置，这些模块利用跨机制对比信号编码相应的结构基元。我们还纳入了多种对比特征——例如重参数化、对比采样以及边嵌入的成对统计量——作为跨机制不变性的代理。因此，我们开展了消融研究，以通过实证验证这些理论主张。

消融偏置头 我们首先消融偏置头，以通过实证验证它们对定向准确率的贡献（表 2）。移除偏置头（SCONE-NB）会增加 SHD 并降低 F1分数，这表明对比规则正确识别了更多真实边。我们还观察到，在 50 个节点时差距更大，这表明对比定向在更大的图中越来越重要（扩展结果见表 7）。

消融对比特征 我们对比特征进行消融，以实证验证在我们的设定中，不变性/对比对于学习额外的边是必要的（表3）。移除这些特征（SCONE-NC）会显著增加 SHD，并降低各种图规模下的F1分数（扩展结果见表8），这表明对比不变性文字对于准确的因果结构恢复是必要的。

N	E	模型	SHD ↓	F1 ↑
20	40	**SCONE**	**39.0** $\pm$ 9.7	**0.469** $\pm$ 0.143
		SCONE-NB	39.6 $\pm$ 9.0	0.453 $\pm$ 0.123
50	50	**SCONE**	**53.85** $\pm$ 11.60	**0.424** $\pm$ 0.102
		SCONE-NB	56.60 $\pm$ 10.79	0.393 $\pm$ 0.092

表 2：使用和不使用定向规则时 SCONE 的比较。结果是对 20 个图取平均值（均值 $\pm$ 标准差）。SCONE-NB 是消融了偏置头的模型，因此不应用规则。

N	E	模型	SHD ↓	F1 ↑
20	40	**SCONE**	**39.0** $\pm$ 9.7	**0.469** $\pm$ 0.143
		SCONE-NC	48.6 $\pm$ 9.3	0.341 $\pm$ 0.136
50	50	**SCONE**	**53.85** $\pm$ 11.60	**0.424** $\pm$ 0.102
		SCONE-NC	66.55 $\pm$ 9.1	0.322 $\pm$ 0.076

表3：SCONE 使用和不使用对比特征时的比较结果。 $N = 20$ 的结果取10个图的均值，$N = 50$ 的结果取20个图的均值（均值 $\pm$ 标准差）。SCONE-NC 是移除对比特征后的模型。

6 结论

我们提出了SCONE，这是一种可扩展的对比框架，用于从具有未知软干预的两个机制中进行因果发现，目标是由可用的子集级部分有向无环图和可接受的不变性检验所诱导的受限-Ψ 本质图。我们形式化了受限的 Ψ等价及其本质图估计目标，证明对比规则（SSI、CVT、DPT）是受限-Ψ可靠的，并且只对在受限类别上必然成立的边进行定向；同时，我们建立了其与非对比、遵循子集的聚合器之间的严格区分。在局部部分有向无环图/不变性检验一致性、经检验的见证集上的机制忠实性以及见证覆盖成立的条件下，SCONE渐近地恢复受限-Ψ本质图。在实证方面，SCONE在机制转变、密度和规模变化下均能提升结构恢复效果；消融实验表明，对比偏置头以及不变性/对比重参数化对于获得超出逐机制信息的定向结果是必要的。其局限性包括依赖忠实性和正的见证质量、仅限于两个机制，以及受可接受的子集/检验族所造成的信息上限；将其扩展到更丰富的干预、自适应见证选择和不完美机制是未来的研究方向。

利益冲突

M.Z.、K.D.、S.K.、E.A. 是纽约市哥伦比亚大学受托人提交的一项临时专利申请的发明人。

致谢

我们感谢 David Blei 和 Aaron Zweig 就项目的核心构想进行的有益讨论，并提供了宝贵反馈。本研究得到了 NIH NHGRI 的 R01HG012875 资助，以及 Chan Zuckerberg Initiative DAF（由 Silicon Valley Community Foundation 管理的指定用途基金）提供的编号为 2022-253560 的资助。

参考文献

Kevin Bello、Bryon Aragam 和 Pradeep Ravikumar。Dagma：通过 M 矩阵和行列式对数无环性刻画学习有向无环图。神经信息处理系统进展，35：8226–8239，2022。

Philippe Brouillard、Sébastien Lachapelle、Alexandre Lacoste、Simon Lacoste-Julien和Alexandre Drouin。基于干预数据的可微因果发现。神经信息处理系统进展，33：21865–21877，2020。Peter Bühlmann、Jonas Peters和Jan Ernest。CAM：因果加性模型、高维顺序搜索与惩罚回归。2014。David Maxwell Chickering。基于贪心搜索的最优结构识别。《机器学习研究杂志》，3（Nov）：507–554，2002。Richard Clarida、Jordi Gali和Mark Gertler。货币政策规则与宏观经济稳定性：证据及若干理论。《经济学季刊》，115（1）：147–180，2000。Kyle Kai-How Farh、Alexander Marson、Jiang Zhu、Markus Kleinewietfeld、William J Housley、Samantha Beik、Noam Shoresh、Holly Whitton、Russell JH Ryan、Alexander A Shishkin等。自身免疫疾病因果变异的遗传与表观遗传精细定位。《自然》，518（7539）：337–343，2015。Juan L Gamella和Christina Heinze-Deml。主动不变因果预测：通过稳定性进行实验选择。神经信息处理系统进展，33：15464–15475，2020。AmirEmad Ghassami、Saber Salehkaleybar、Negar Kiyavash和Elias Bareinboim。面向因果结构学习的预算约束实验设计。见国际机器学习会议，第1724–1733页。机器学习研究论文集，2018。Clark Glymour、Kun Zhang和Peter Spirtes。基于图模型的因果发现方法综述。《遗传学前沿》，10：524，2019。

Alain Hauser和Peter Bühlmann。有向无环图的干预马尔可夫等价类的刻画与贪心学习。《机器学习研究杂志》，13（1）：2409–2464，2012。

Alain Hauser 和 Peter Bühlmann。基于干预数据主动学习因果模型的两种最优策略。《近似推理国际期刊》，55(4)：926–939，2014。

Christina Heinze-Deml、Jonas Peters 和 Nicolai Mein- shausen。针对非线性模型的不变因果预测。《因果推断杂志》，6(2)：20170016，2018。

Kevin D Hoover。经济学与计量经济学中的因果性。载于《新帕尔格雷夫经济学词典》，第1–13页。Springer，2008。

Amin Jaber、Murat Kocaoglu、Karthikeyan Shanmugam 和 Elias Bareinboim。通过目标未知的软干预进行因果发现：表征与学习。神经信息处理系统进展，33：9551–9561，2020。Murat Kocaoglu、Karthikeyan Shanmugam 和 Elias Bareinboim。利用潜变量学习因果图的实验设计。神经信息处理系统进展，30，2017。Sébastien Lachapelle、Philippe Brouillard、Tristan Deleu 和 Simon Lacoste-Julien。基于梯度的神经DAG学习。*arXiv*预印本 *arXiv:1906.02226*，2019。Hao-Chih Lee、Matteo Danieletto、Riccardo Miotto、Sarah T Cherng 和 Joel T Dudley。使用 No-BEARS 扩展结构学习，以推断因果转录组网络。载于太平洋生物计算研讨会 *2020*，第391–402页。World Scientific，2019。Lars Lorch、Scott Sussex、Jonas Rothfuss、Andreas Krause 和 Bernhard Schölkopf。用于因果结构学习的摊销推断。神经信息处理系统进展，35：13104–13118，2022。Joris M Mooij、Sara Magliacane 和 Tom Claassen。来自多个上下文的联合因果推断。机器学习研究杂志，21(99)：1–108，2020。Ignavier Ng、AmirEmad Ghassami 和 Kun Zhang。稀疏性和DAG约束在线性DAG学习中的作用。神经信息处理系统进展，33：17943–17954，2020。Judea Pearl。因果性。剑桥大学出版社，2009。Jonas Peters、Peter Bühlmann 和 Nicolai Meinshausen。利用不变预测进行因果推断：识别与置信区间。《英国皇家统计学会杂志*B*辑：统计方法论》，78 (5)：947–1012，2016。

Niklas Pfister、Peter Bühlmann 和 Jonas Peters。面向序列数据的不变因果预测。美国统计学会期刊，114(527)：1264–1276，2019。

James M Robins、Miguel Angel Hernan 和 Babette Brumback。《边际结构模型与流行病学中的因果推断》，2000年。

Karen Sachs、Omar Perez、Dana Pe'er、Douglas A Lauffenburger 和 Garry P Nolan。基于多参数单细胞数据得出的因果蛋白质信号网络。《科学》，308(5721):523–529，2005年。

Stephen M Smith、Christian F Beckmann、Jesper Andersson、Edward J Auerbach、Janine Bijsterbosch、Gwenaëlle Douaud、Eugene Duff、David A Feinberg、Ludovica Griffanti、Michael P Harms 等。人类连接组计划中的静息态功能磁共振成像。《神经影像》，80:144–168，2013年。

Peter Spirtes、Clark N Glymour 和 Richard Scheines。因果关系、预测与搜索。麻省理工学院出版社，2000年。

Yuhao Wang、Liam Solus、KarrenYang 和 Caroline Uhler。带干预的基于置换的因果推断算法。神经信息处理系统进展，30，2017。

Menghua Wu、YujiaBao、ReginaBarzilay 和 Tommi Jaakkola。采样、估计、聚合：因果发现基础模型的构建方法。*arXiv* 预印本 *arXiv:2402.01929*，2024。

David D Zhang、Harry F Lee、Cong Wang、Baosheng Li、Qing Pei、Jane Zhang 和 Yulun An。气候变化与大规模人类危机的因果关系分析。美国国家科学院院刊，108 (42)：17296–17301，2011。

HM Zhang、B Huang、J Lawrimore、M Menne 和 TM Smith。NOAA全球地表温度数据集（noaa-globaltemp）。*NOAA*国家环境信息中心。*[Google* 学术搜索*]*, 2019。

Xun Zheng、Bryon Aragam、Pradeep K Ravikumar 和 Eric P Xing。Dagswith notears：用于结构学习的连续优化。神经信息处理系统进展，31，2018。

Xun Zheng、Chen Dan、Bryon Aragam、Pradeep Ravikumar 和 Eric Xing。《学习稀疏非参数有向无环图》。发表于国际人工智能与统计学会议，第 3414–3425 页。机器学习研究论文集，2020 年。

未知软干预下的可扩展对比因果发现（补充材料）

Mingxuan Zhang[*1,2] **Khushi Desai**[*2,3] **Sopho Kevlishvili**[2,4] **Elham Azizi**[1,2,3,4,5]

[1]系统生物学系，哥伦比亚大学[2]欧文癌症动力学研究所，哥伦比亚大学[3]计算机科学系，哥伦比亚大学[4]生物医学工程系，哥伦比亚大学[5]数据科学研究所，哥伦比亚大学

A 背景

A.1 Ψ-马尔可夫与 Ψ-FCI

从具有未知目标的软干预中学习，可通过 Ψ-马尔可夫性质加以形式化；该性质将（i）标准的机制内马尔可夫/条件独立约束与（ii）跨机制不变性约束结合起来，后者的前提依赖于（未知）干预目标的对称差。具体而言，对于因果图 D 以及干预目标元组 I，Ψ-马尔可夫要求：（a）$Y \perp\!\!\!\perp Z \mid W$ 在 $D \Rightarrow P_i(y \mid w,\ z)$ 中 $= P_i(y \mid w)$（机制内条件独立）；（b）$Y \perp\!\!\!\perp K \mid W \setminus W_K$ 在适当的删改图中（其中 $K = I_i \Delta I_j$）$\Rightarrow P_i(y \mid w) = P_j(y \mid w)$（跨机制不变性）。Ψ-马尔可夫等价在对 $\langle D,\ I \rangle$ 的层面上定义，即通过所诱导的可容许分布元组集合相等来定义，并且 Ψ-FCI被证明对于所得的 Ψ-马尔可夫等价类是可靠且完备的（即在总体极限下具有最大信息量）。

A.2 贡献

我们着重将理论扩展为适用于 2 种机制的可扩展、受子集限制的流程。我们的具体理论贡献如下：

A.2.1 面向可扩展子集受限学习的估计目标

Ψ-FCI 在全局预言机下以 Ψ-等价类为目标，并输出一个 Ψ-PAG/I-MAG 对象。我们定义了一个与模型相匹配的估计目标：由我们利用模型在大规模场景下能够可靠估计的、恰好这些子集级部分有向无环图和跨机制不变性所诱导的本质图（定义 2、3、4）。模型只接收局部部分定向无环图和有限的不变性查询集，并且只估计基于这些证据可识别的部分定向。

A.2.2 受限-Ψ 可靠的对比定向规则

根据我们对估计目标的定义，我们证明了这些对比定向规则在受限-Ψ 等价意义下是可靠的，且只对受限-Ψ 本质图中必然确定方向的边进行定向（命题 3、4、5）。这些规则针对局部见证和子集聚合而设计，因此其可靠性证明也具有新意，因为现有的对齐规则是通过扩充全局图来证明的。

A.2.3 跨机制进行对比的必要性

为展示我们对比框架的必要性，我们证明了我们的表述与不含对比结构的子集聚合器之间存在严格区分：任何不使用跨机制对比的子集聚合器都无法

定向我们所确定的边中非消失比例的边（引理6）。我们还展示了可确保模型可靠性的额外聚合保证（定理3）。

A.2.4 估计目标的渐近恢复

最后，我们证明可以渐近地恢复我们的估计目标，即由检验导出的受限 Ψ 本质图（定理 4）。这也为我们的模型在子集受限设定下提供了可识别性保证。

B 设置

B.1 双机制数据与共享有向无环图。

令 $V = \{1, \ldots, p\}$ 为观测变量的索引 X_V。我们观测到两个机制 $c \in \{0, 1\}$，其分布 $P^{(c)}$ 定义在 X_V 上。假设存在一个有向无环图 $G = (V, E)$，使得每个 $P^{(c)}$ 都满足马尔可夫性，且与 G 忠实，并且两个机制共享同一个图 G，同时允许机制在未知的节点子集上发生变化。

B.2 算子与符号

总体条件不变性。令 V 索引观测变量，并令 $P^{(0)}$ 与 $P^{(1)}$ 分别表示机制 0 和机制 1 中 X_V 上的联合分布。对于 $v \in V$ 与 $Z \subseteq V \setminus \{v\}$，定义总体不变性指标

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z) := \mathbf{1}\Big\{P^{(0)}(X_v \mid X_Z) = P^{(1)}(X_v \mid X_Z)\Big\}, \qquad \mathrm{Chg}(v \mid Z) := 1 - \mathrm{Inv}(v \mid Z).$$

此处等式表示对几乎每一个 z，$\widehat{P_{(0)}}(X_v \mid X_Z = z) = \widehat{P^{(1)}}(X_v \mid X_Z = z)$。该模型使用估计量 $\widehat{\mathrm{Inv}}(v \mid Z)$ 与 $\widehat{\mathrm{Chg}}(v \mid Z) := 1 - \widehat{\mathrm{Inv}}(v \mid Z)$。

可容许子集。令 V 索引观测变量。我们定义一个由 可容许子集 构成的非空族 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}} \subseteq 2^V$。直观上，$\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 指定了若干变量集合，模型在这些集合上运行统计误差受控且计算成本可行的单环境因果发现程序。自始至终，我们规则中出现的所有局部图约束和所有条件集都必须位于某个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$之内。

可容许检验与检验族。令 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}} \subseteq 2^V$为用于估计局部环境内结构的可容许子集集合，并令

$$\mathcal{T}_{\mathrm{a}} \subseteq \big\{(v, Z) : v \in V,\ Z \subseteq V \setminus \{v\}\big\}$$

为检验的不变性查询集合。若对于每个 $(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，都至少存在一个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 使得

$$\{v\} \cup Z \subseteq S.$$

模型使用的每个不变性查询都有某个可容许子集作为支持，该子集包含所有涉及的变量。

C 定义

定义1 (局部部分有向无环图)。假设我们有一个逐机制的因果发现估计器 $\mathcal{D}^{(c)}$。若 $P_S^{(c)}$ 是某个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 上的边缘分布，则将局部部分有向无环图定义为：

$$E_S^{(c)} = \mathcal{D}^{(c)}(P_S^{(c)})$$

注意，由于对变量子集进行边缘化可能引入未观测混杂因素，我们不假设 $E_S^{(c)}$ 表示真实子图 $G[S]$ 的马尔可夫等价类。

定义2 （受限 Ψ-马尔可夫与约束族）。 固定一个有向无环图 $G = (V, E)$ 和两个机制 $c \in \{0, 1\}$。考虑一个可容许检验族（$\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$）以及定义*1*中的机制内发现算子 $\mathcal{D}^{(c)}$ 。设一个双机制固定图模块化软干预结构因果模型类 $\mathcal{M}$。令 $\mathcal{M}(G)$ 表示由具有如下基础有向无环图的模型所生成的双制度分布对集合

$\mathcal{M}$ 中的模型生成的，其基础有向无环图为 G。若对于所有 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 和 $c \in \{0,1\}$，局部总体部分有向无环图由下式给出，则称（$P^{(0)}$ $P^{(1)}$）$\in \mathcal{M}$（G）关于 G 以及（$\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$）满足受限 Ψ-马尔可夫性质。

$$E_S^{(c)} := \mathcal{D}^{(c)}(P_S^{(c)}),$$

并且，对于每个经过检验的对$(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，总体不变性指标为

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z) := \mathbf{1}\Big\{P^{(0)}(X_v \mid X_Z) = P^{(1)}(X_v \mid X_Z)\Big\}.$$

进而，我们可以将受限的 Ψ-约束族定义为

$$\mathcal{F}_\psi(\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}) := \big\{\, E_S^{(c)}(\cdot) \,:\, S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}},\, c \in \{0,1\} \,\big\} \cup \big\{\, \mathrm{Inv}(v \mid Z)(\cdot) \,:\, (v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}} \,\big\},$$

其中，对于分布对$(P_{(0)}\, P_{(1)})$，$E_S^{(c)}\,(P_{(0)}\, P^{(1)})$ 表示将$\mathcal{D}^{(c)}$ 应用于 $P_{(c)\,S}$ 后得到的总体部分有向无环图摘要，而 $\mathrm{Inv}(v \mid Z)(P_{(0)}\, P_{(1)})$ 表示由$(P_{(0)}\, P^{(1)})$定义的不变性指标。

定义3 (受限 Ψ-等价)。固定一个可容许检验族($\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$)、一个机制内发现算子$\mathcal{D}$ **(**定义*1)*，以及一个双机制固定图模块化软干预结构因果模型类 $\mathcal{M}$。令 $\mathcal{M}(G)$ 表示由 $\mathcal{M}$中以有向无环图 G为底层图的模型生成的双制度分布对集合。

将 G 在($\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$) 下的受限 Ψ-像定义为

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G; \mathcal{M}) := \Big\{\big(\{E_S^{(c)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\, c\in\{0,1\}},\, \{\mathrm{Inv}(v \mid Z)\}_{(v,Z)\in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}\big) :\, (P^{(0)}, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)\Big\},$$

其中，$E_S^{(c)} = \mathcal{D}(P_S^{(c)})$ 和$\mathrm{Inv}(v \mid Z)$ 按照定义*2*由$(P_{(0)}\, P_{(1)})$ 定义。

如果在 V 上，两个有向无环图 G 和 G' 是受限 Ψ-马尔可夫等价的 （相对于($\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$)、$\mathcal{D}$ 和 $\mathcal{M}$），则

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G; \mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G'; \mathcal{M}).$$

定义4 （检验诱导的 Ψ 本质图）。 固定一个可容许检验族($\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$)、一个机制内发现算子$\mathcal{D}$以及一个双制度结构因果模型类 $\mathcal{M}$。对于在 V 上的有向无环图 G，将其受限-Ψ 等价类定义为

$$[G]_{\mathrm{res}} := \big\{\, G' \textit{ DAG on } V : \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G'; \mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G; \mathcal{M}) \,\big\}.$$

用 $e(.)$ 表示两个节点之间的边。将检验诱导的 Ψ 本质图 $G_{\mathrm{test}}(G)$ 定义为 V 上的部分有向无环图，其骨架是等价类 $[G]_{\mathrm{res}}$ 中各图骨架的交集，即

$$e(u - v) \in G_{\mathrm{test}}(G) \quad \Longleftrightarrow \quad e(u - v) \in G', \quad \forall G' \in [G]_{\mathrm{res}},$$

其定向也取交集，即:

$$e(u \to v) \in G_{\mathrm{test}}(G) \quad \Longleftrightarrow \quad e(u \to v) \in G' \quad \forall G' \in [G]_{\mathrm{res}}.$$

骨架中所有其余边均保持无向。可选择应用闭包算子，以获得最大定向部分有向无环图。

定义5 （可容许见证族）。 固定一个可容许检验族($\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$, $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$) 以及总体局部部分有向无环图$\{E_S^{(c)} :\, S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}},\, c \in \{0,1\}\}$，其中 $E_S^{(c)} = \mathcal{D}(P_S^{(c)})$。对于节点集 S 上的部分有向无环图 H 和节点 $v \in S$，令 $\mathrm{De}_H^{\mathrm{def}}(v)$ 表示 H中 v 的确定后代集合，即

$$\mathrm{De}_H^{\mathrm{def}}(v) := \bigcap_{D \in \overrightarrow{H}} \mathrm{De}_D(v),$$

⇀其中，$H \neq \emptyset$ 是 H 的所有*DAG*扩展的集合，而$\mathrm{De}_D(v)$ 是 D中 v 的后代集合 .

对于每个 $v \in V$，将可容许见证族定义为

$$\mathcal{W}(v) := \Big\{Z :\, (v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}},\, \exists S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}} \textit{ s.t. } \{v\} \cup Z \subseteq S,\, Z \cap \mathrm{De}^{\mathrm{def}}_{E_S^{(0)}}(v) = \emptyset,\, Z \cap \mathrm{De}^{\mathrm{def}}_{E_S^{(1)}}(v) = \emptyset\Big\}.$$

换句话说，Z 不包含 *PDAG* 的有向部分中 v 的任何确定后代。

D 假设

假设1 (有限可容许范围**)**。 这些族$(\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}})$ 是有限的（或其规模足以满足一致一致性）。每个$(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 都满足 $\{v\} \cup Z \subseteq S$，其中某个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$。

假设2 (局部部分定向无环图一致性**)**。 固定一个机制内发现算子 $\mathcal{D}$ （定义*1*）。对于每个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 和$c \in \{0,1\}$, 令总体局部*PDAG*为 $E_S^{(c)} := \mathcal{D}(P_{(c)\,S})$，并令 $\widehat{E}_S^{(c)} := \mathcal{D}(\widehat{P}_S^{(c)})$ 表示其基于样本的估计。我们假设

$$\Pr\Big(\forall S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \forall c \in \{0,1\} : \widehat{E}_S^{(c)} = E_S^{(c)}\Big) \to 1 \qquad \text{as } n \to \infty.$$

其中 n 为样本数量。

假设3 (不变性检验一致性**)**。 对于每个$(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，不变性检验满足

$$\Pr\Big(\forall (v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}} : \widehat{\mathrm{Inv}}(v \mid Z) = \mathrm{Inv}(v \mid Z)\Big) \to 1 \qquad \text{as } n \to \infty.$$

$\widehat{\ }$其中$\mathrm{Inv}(v \mid Z)$ 是不变性检验的基于样本的估计，且 n 为样本数量。

假设4 (非目标不变性与非平凡可检测性**)**。 假设$(P_{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$，其中 $\mathcal{M}(G)$ 由定义*3*给出，且机制 $c = 1$中的干预目标为 $I \subseteq V$。则：

- 对于每个 $v \notin I$,
$$P^{(0)}(X_v \mid X_{\mathrm{PA}_G(v)}) = P^{(1)}(X_v \mid X_{\mathrm{PA}_G(v)}).$$
- 存在 $v \in I$ 以及某个 $Z_v \in \mathcal{W}(v)$ 使得
$$\mathrm{Chg}(v \mid Z_v) = 1.$$

  我们也用这个定义称干预目标节点 v 为可检测。

假设 5 (经检验的见证集上的机制忠实性**)**。 设$(P_{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$ 具有（未知的）干预目标集$I \subseteq V$。引入二元机制标签 $C \in \{0,1\}$，其中 π_0、$\pi_1 > 0$、$\pi_0 + \pi_1 = 1$，并定义

$$P^*(C = c, X) \;:=\; \pi_c\, P^{(c)}(X).$$

令增广图为

$$G^* \;:=\; (V \cup \{C\},\; E \cup \{C \to t :\; t \in I\}).$$

那么，对于每个可容许子集 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 以及每个满足 $Z \in \mathcal{W}(v)$ 的可容许经检验的见证查询$(v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，我们有

$$C \perp_d v \mid Z \text{ in } G^* \quad \Longleftrightarrow \quad C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z \text{ under } P^*.$$

在 2 个机制下，我们提出以下引理：

引理 1 (双机制条件不变性即 C-条件独立**)**。 设 $P^{(0)}$ 和 $P^{(1)}$ 是定义在X上的两个分布，并假设 $\pi_0, \pi_1 > 0$ 且满足 $\pi_0 + \pi_1 = 1$。引入二元机制标签 $C \in \{0,1\}$，并定义联合分布

$$P^*(C = c, X) \;:=\; \pi_c\, P^{(c)}(X).$$

那么，对于任意节点 v和条件集 Z，其中 $\mathrm{Inv}(v \mid Z) := \mathbf{1}\{P^{(0)}(X_v \mid X_Z) = P_{(1)}(X_v \mid X_Z)\}$，我们有 *e*

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z) = 1 \iff C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z, \qquad \mathrm{Inv}(v \mid Z) = 0 \iff C \not\perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z,$$

均在 P^* 下。

证明。 将混合分布写作 $P^*(C = c, X) = \pi_c P_{(c)}(X)$，其中 $\pi_c > 0$。于是，对于 $c \in \{0,1\}$,

$$P^*(X_v \mid X_Z, C = c) = \frac{P^*(X_v, X_Z \mid C = c)}{P^*(X_Z \mid C = c)} = \frac{\pi_c P^{(c)}(X_v, X_Z)/\pi_c}{\pi_c P^{(c)}(X_Z)/\pi_c} = P^{(c)}(X_v \mid X_Z).$$

因此

$$P^{(0)}(X_v \mid X_Z) = P^{(1)}(X_v \mid X_Z) \quad \Longleftrightarrow \quad P^*(X_v \mid X_Z, C=0) = P^*(X_v \mid X_Z, C=1).$$

根据条件独立的定义，

$$C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z \quad \Longleftrightarrow \quad P^*(X_v \mid X_Z, C=0) = P^*(X_v \mid X_Z, C=1),$$

由于 $\mathrm{Inv}(v \mid Z) := \mathbf{1}\{P^{(0)}(X_v \mid X_Z) = P_{(1)}(X_v \mid X_Z)\}$，我们有

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z) = 1 \iff C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z$$

$\mathrm{Inv}(v \mid z) = 0$的逆关系具有对称性。 □

备注 1(处理示例失败情况)**.** 根据引理 *1*，在双机制混合分布 P^* 下，$\mathrm{Inv}(v \mid Z) = 1$ 等价于 $C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z$，而$\mathrm{Chg}(v \mid Z) = 1$ 等价于 $C \not\perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z$。假设 *5* 对这些经检验的 C-独立性施加受限忠实性约束，使其对应于增广图 G^* 中的 *d*-分离。因此，它排除了 *(i)* 自抵消（存在 *d*-连接，但$C \perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z$）以及 *(ii)* 在可容许见证上发生贝叶斯反转（存在 *d*-分离，但 $C \not\perp\!\!\!\perp X_v \mid X_Z$）。

假设6 (闭包可靠性**)**。 令$\mathrm{Cl}(\cdot)$ 表示闭包算子。如果一组有向约束与G_{test}一致，那么$\mathrm{Cl}(\cdot)$ 不会引入与 G_{test}矛盾的定向。

E 受限 Ψ-可靠定向规则

E.1 单侧不变性

命题3 (单侧不变性（SSI）**)**。 设 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 满足 $\{i, j\} \subseteq S$，且 $i - j$ 在两个总体局部部分有向无环图 $E_S^{(0)}$ 和 $E_S^{(1)}$ 中均为无向邻接（定义*1*）。设 $Z := S \setminus \{i, j\}$，满足$(j, Z)$、$(i, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$且 $Z \in \mathcal{W}(j)$，$Z \in \mathcal{W}(i)$。此外，假设 i 和 j 在每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$中均相邻。如果

$$\mathrm{Chg}(j \mid Z) = 1, \qquad \mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1,$$

那么 $i \to j$ 在受限 Ψ-等价类中是不变的，因此在 $G_{\mathrm{test}}(G)$中具有相同的定向。

证明。 **受限 Ψ-等价性的可靠性**。 固定一个有向无环图 $G = (V, E)$，使得 $(P_{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$，并考虑假设 5 中关联的双机制混合分布 P^* 和增广图 G^*。反设 $j \to i$ 属于$G[S]$。根据引理 1，

$$\mathrm{Chg}(j \mid Z) = 1 \iff C \not\perp\!\!\!\perp X_j \mid X_Z, \qquad \mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1 \iff C \perp\!\!\!\perp X_i \mid X_Z,$$

在 P^* 条件下均成立。由于 $(j, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$且 $Z \in \mathcal{W}(j)$，假设 5 蕴含

$$C \not\perp\!\!\!\perp X_j \mid X_Z \implies C \not\perp_d j \mid Z \text{ in } G^*.$$

因此，存在一条在给定 Z 时从 C 到 j、位于 G^* 中的 d-连接路径 π。将 π 与有向边 $j \to i$ 拼接。由于$j \notin Z$，拼接后的路径在给定 Z 时从 C 到 i 不被阻断，因此 $C \not\perp_d i \mid Z$ 属于 G^*。此外，由于我们拼接了 $j \to i$，j 不可能是碰撞点。由于 $(i, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 且 $Z \in \mathcal{W}(i)$，再次应用假设 5 可得

$$C \not\perp_d i \mid Z \implies C \not\perp\!\!\!\perp X_i \mid X_Z \text{ under } P^*,$$

即 $\mathrm{Chg}(i \mid Z) = 1$，这与 $\mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1$ 矛盾。因此，$j \to i$ 不能在 $G[S]$ 中成立。

测试诱导的 Ψ 本质图中的强制定向。令 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$ 为任意值。根据定义3，

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G'; \mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G; \mathcal{M}),$$

因此，见证该规则前提的相同受限 Ψ-图像元组，也可在某个 $(Q^{(0)}, Q^{(1)}) \in \mathcal{M}(G')$ 下实现。对 G' 及其对应的混合分布 Q^* 和增广图 $(G')^*$ 重复上述矛盾论证，可排除 $j \to i$ 在 $G'[S]$中成立。假设在每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$中，$i$ 和 j 均相邻，则可得 $i \to j$ 在每个$G' \in [G]_{\mathrm{res}}$中成立，即 $i \to j$ 在受限的 Ψ-等价类中均为必然存在。根据定义4，这意味着 $i \to j$ 出现在$G_{\mathrm{test}}(G)$中。 □

E.2 对比 V 结构

命题 *4*（对比 *V* 结构（*CVT*））。设 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 满足 $\{i, j, k\} \subseteq S$，且 $i - j - k$ 是 S上的局部骨架中的一个未屏蔽三元组。令 $Z := S \setminus \{i, j, k\}$，并假设 (i, Z)、(j, Z)、$(k, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 且满足 $Z \in \mathcal{W}(i) \cap \mathcal{W}(j) \cap \mathcal{W}(k)$。此外，假设 $i - j$ 和 $j - k$ 是 $[G]_{\mathrm{res}}$ 的公共骨架中的边（等价地，它们是 $G_{\mathrm{test}}(G)$的骨架中的边）。如果

$$\mathrm{Chg}(j \mid Z) = 1, \qquad \mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1, \qquad \mathrm{Inv}(k \mid Z) = 1,$$

那么 $i \to j \leftarrow k$ 在 $[G]_{\mathrm{res}}$ 中是必然的，因此出现在 $G_{\mathrm{test}}(G)$。

证明。**受限 Ψ-等价可靠性**。固定一个有向无环图 $G = (V, E)$，使得 $(P_{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$，并考虑由假设 5 得到的相关双机制混合分布 P^* 和增广图 G^*。令 $Z := S \setminus \{i, j, k\}$。根据引理 1，在 P^* 下有

$$\mathrm{Chg}(j \mid Z) = 1 \iff C \not\perp\!\!\!\perp X_j \mid X_Z, \qquad \mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1 \iff C \perp\!\!\!\perp X_i \mid X_Z, \qquad \mathrm{Inv}(k \mid Z) = 1 \iff C \perp\!\!\!\perp X_k \mid X_Z.$$

由于 $(j, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 且 $Z \in \mathcal{W}(j)$，假设 5 意味着

$$C \not\perp\!\!\!\perp X_j \mid X_Z \implies C \not\perp_d j \mid Z \quad \text{in } G^*,$$

因此，在 G^* 中存在一条从 C 到 j 的路径 π，且给定 Z时该路径不受阻断。

反设 $j \to i$ 属于 $G[S]$。将 π 与有向边 $j \to i$ 连接起来，得到一条从 C 到 i 的路径，给定 Z时该路径不受阻断。由于 $j \notin Z$ 且新增边为 $j \to i$，节点 j 不是连接后路径上的碰撞点。因此 $C \not\perp_d i \mid Z$ 属于 G^*。由于 $(i, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 且 $Z \in \mathcal{W}(i)$，假设 5 给出

$$C \not\perp_d i \mid Z \implies C \not\perp\!\!\!\perp X_i \mid X_Z \quad \text{under } P^*,$$

这与 $\mathrm{Inv}(i \mid Z) = 1$矛盾。因此，$j \to i$ 不可能成立；又因为 i 和 j 在 $G[S]$中相邻，所以必有 $i \to j$ 在$G[S]$中。对 $\mathrm{Inv}(k \mid Z) = 1$ 运用相同的论证，同样可以排除 $j \to k$，并得到 $k \to j$ 在 $G[S]$ 中。由于 i 和 k 不相邻，这意味着 $i \to j \leftarrow k$ 在 $G[S]$中。

由检验诱导的 Ψ 本质图中的强制定向。任取 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$。根据定义3，

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G'; \mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G; \mathcal{M}),$$

因此，在某个 $(Q^{(0)},\ Q^{(1)}) \in \mathcal{M}(G')$ 下，可以实现同一个受限的 Ψ-像元组，从而满足命题的前提。对 G' 重复上述矛盾论证（使用其对应的混合分布 Q^* 和增广图 $(G')^*$），可排除 $j \to i$和 $j \to k$ 在 $G'[S]$中成立，进而迫使 $i \to j$和 $k \to j$成立。根据假设，每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$ 中都存在未屏蔽三元组 $i - j - k$，因此，在每个这样的 G'中，i和 k仍然不相邻，所以 $i \to j \leftarrow k$ 在每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$中都成立。因此，该碰撞点在 $[G]_{\mathrm{res}}$中均为强制的；根据定义4，它出现在 $G_{\mathrm{test}}(G)$中。 □

E.3 对比判别路径

我们首先给出一些对证明有用的定义。

定义 6 (局部骨架中的候选判别路径**)**。设 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$，且令 H 为定义在顶点集 S上的部分有向图。一条路径

$$\pi = \langle v_0, v_1, \ldots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

在 H 的骨架中是$(j,\ k)$ 的候选判别路径模式，当且仅当：

(i) π 是简单的（不含重复顶点）；*(ii)* v_0 在 H的骨架中与 k 不相邻；*(iii)* j 在 H 的骨架中与 k 相邻。

如果相同的骨架路径同时存在于两个局部骨架中，则称该路径为共同路径。

定义 tion 7（重放节点局部状态和重放赋值）。 固定一条候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \ldots, v_{m-1}, j, k \rangle.$$

对于每个内部节点 v_ℓ $(1 \le \ell \le m-1)$，将其局部判别路径状态 （相对于(π, k)）定义为以下元组

$$\mathrm{st}_\pi(v_\ell) \;:=\; \Big(\mathbf{1}\{v_\ell \textit{ is a collider on } \pi\}, \mathbf{1}\{v_\ell \textit{ is a parent of } k\}\Big) \in \{0,1\}^2,$$

让 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \ldots, v_{m-1}\}$ 为指定的内部节点集。在 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$ 上的重放赋值 是一个映射

$$\sigma : \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \to \{0,1\}^2, \qquad v \mapsto \sigma(v),$$

该映射指定重放节点的局部判别路径状态。

定义 8 (重放节点集)。 固定一个候选判别路径模式 π 以及 S上的环境局部图约束（骨架邻接关系和任何已知端点标记）。

集合 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \ldots, v_{m-1}\}$ 被称为充分重放节点集，如果一旦在 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$ 上固定一个重放赋值 σ （且该赋值与环境中的局部约束相容），标准判别路径逻辑便能在边(j, k)上确定唯一标记。

若它是充分的，且其任何真子集都不是充分的，则称其为最小重放节点集。

定义9 （判别路径标记）**.** 固定一条候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \ldots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

以及一个充分重放节点集 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$。

定义判别路径标记

$$\mathrm{DP}_\pi : \sigma \mapsto \mathrm{DP}_\pi(\sigma)$$

定义在与局部约束相容的重放赋值 σ 上，其中$\mathrm{DP}_\pi(\sigma)$ 是在代入 σ所指定的重放状态后，标准判别路径逻辑针对目标边 (j, k) 返回的标记。

$\mathrm{DP}_\pi(\sigma)$ 可以表示为：

(a) 一个端点标记，位于(j, k) 上（例如， j处是尾端还是箭头），或

(b) 一个完 整定向，即当局部逻辑（可能连同闭包规则）确定(j, k) 时。

我们将这两种表示统称为判别路径标记，即(j, k)上的该标记。

在此，我们表述并证明这些辅助引理和该命题。

引理 2（非碰撞点处未阻断路径的拼接）。 设 π_1 是一条从 a 到 b 的未阻断路径， π_2 是有向无环图中从 b 到 d 的一条未阻断路径，且两者都以 Z 为条件进行条件化。假设：

(i) π_1 和 π_2 仅在 b 处相交；

(ii) $b \notin Z$；

(iii) 拼接轨迹 $\pi_1 \oplus \pi_2$ 中与 b 相邻的两个边标记不会使 b 成为碰撞点 *er.*

那么，拼接路径 $\pi_1 \oplus \pi_2$ 在给定 Z 的条件下，是一条从 a 到 d 的未阻断路径。

证明。 由于给定 Z 时， π_1 和 π_2 均未被阻断，因此 π_1 和 π_2 的每个内部节点都满足通常的 d-分离条件。根据 (i)，拼接不会引入重复的内部节点； $\pi_1 \oplus \pi_2$ 中唯一新增的内部节点是连接节点 b。根据 (iii)， b 在拼接后的路径中是非碰撞点；又根据 (ii)， $b \notin Z$，因此给定 Z 时， b 也未被阻断。因此，给定 Z 时， $\pi_1 \oplus \pi_2$ 的每个内部节点都未被阻断，并且给定 Z 时， $\pi_1 \oplus \pi_2$ 与 a 之间的 d 未被阻断。 □

引理 3（第一个重放判别 在替代判别路径标记下的一致性)。 考虑一条候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \dots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

和重放节点 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \dots, v_{m-1}\}$。令 $\sigma^\star$ 为产生目标判别路径标记 $\mathrm{DP}(\pi)$ 的重放节点状态赋值，该标记位于 (j, k) 上。

若替代重放赋值 $\sigma \neq \sigma^\star$ 改变了 (j, k) 上的判别路径标记，则存在第一个重放节点 $r \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$（按从 j 到 v_0的顺序排列），使得 $\sigma(r) \neq \sigma^\star(r)$，而对于沿 π位于 j 和r 之间的所有重放节点 u，均有 $\sigma(u) = \sigma^\star(u)$。

证明。 将重放节点按从 j 到 v_0的顺序列出：

$$\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) = \{r_1, \dots, r_q\},$$

其中， r_1 是距离 j 最近的重放节点， r_q 是距离 j最远的重放节点。

假设 σ 是一个替代重放赋值，其诱导出的 (j, k) 上的判别路径标记不同于 $\sigma^\star$诱导出的目标标记。若对于每个 $a \in \{1, \dots, q\}$，均有 $\sigma(r_a) = \sigma^\star(r_a)$，那么 σ和 $\sigma^\star$向判别路径逻辑提供相同的重放信息。因此，它们在 (j, k) 上必定诱导出相同的判别路径标记，这与标记不同的假设矛盾。

因此，该集合

$$A := \{a \in \{1, \dots, q\} : \sigma(r_a) \neq \sigma^\star(r_a)\}$$

是一个非空有限集。取最小元素 $a^\star := \min A$。令 $r := r_{a^\star}$。根据构造，

$$\sigma(r) \neq \sigma^\star(r),$$

并且对于每个带有 $b < a^\star$ 的重放节点 $u = r_b$，都有

$$\sigma(u) = \sigma^\star(u).$$

因此， r 是首次重放分歧。 □

引理 4（从触发节点到首个不匹配节点的有效路径）。 固定一条候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \dots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

以及目标重放赋值 $\sigma^\star$，其定义在 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \dots, v_{m-1}\}$ 上。设 Z^π 是一个经检验的见证集，使得对于每个 $v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$，都有 $(j, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 和 $(v, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$，其中 $Z^\pi \in \mathcal{W}(j) \cap \bigcap_{v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)} \mathcal{W}(v)$。

假设在触发节点 j 处，$\mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1$。设 σ 为任意替代重放赋值，其在 (j, k) 上的判别路径标记不同于目标标记，并设 r 为引理 *3* 给出的首次重放分歧。

假设对于该 $(\pi, \sigma^\star, Z^\pi)$，以下成立：

(a) π 中从 r 到 j 的片段存在于公共骨架中。***(b)*** 在由 σ 于该片段上诱导的标记下，该片段的每个内部节点在对 Z^π 条件化时均未被阻断。***(c)*** 该片段中紧邻 j 的边在 j 处具有尾端，且 $j \notin Z^\pi$。***(d)*** 给定 Z^π 时，从 C 到 j 的未阻断路径与从 r 到 j 的片段仅相交于 j。

Then

$$C \not\perp_d r \mid Z^\pi \qquad \textit{in } G^*.$$

证明。 由引理 1 和假设 5，$\mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1$ 蕴含 G^* 中的 $C \not\perp_d j \mid Z^\pi$。因此，给定 Z^π时，存在一条从 C 到 j 的未阻断路径 π_1。

根据 (a) 和 (b)， π 从 j 到 r 的线段在以 Z^π为条件化时构成一条未阻断路径 π_2。根据 (c)，连接节点 j 在拼接后的路径中是一个非碰撞点，且 $j \notin Z^\pi$。将引理 2 应用于 π_1 和 π_2，可得一条在给定Z^π时从 C 到 r 的未阻断路径。

因此 $C \not\perp_d r \mid Z^\pi$ 在 G^*。 □

引理5（ 替代重放赋值的矛盾）。 固定 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$，一条候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \ldots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

在 S 上，以及目标重放赋值 $\sigma^\star$ 在 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \ldots, v_{m-1}\}$ 上。设 Z^π 是由 S 支持的共同检验见证集，使得

$$(j, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}, \qquad (v, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}} \ \forall v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi),$$

with

$$Z^\pi \in \mathcal{W}(j) \cap \bigcap_{v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)} \mathcal{W}(v).$$

假设

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z^\pi) = 1 \ \forall v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi), \qquad \mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1.$$

假设引理 *4* 的条件对每个替代重放赋值 σ 都成立，且其在 (j,k) 上的判别路径标记与目标标记不同。那么不存在这样的替代重放赋值。换言之， σ^* 在 (j,k) 上赋予 (j,k) 的标记，是与经检验的对比文字相容的唯一标记。

证明。 反设存在一个替代重放赋值 $\sigma \neq \sigma^*$ ，它在 (j,k) 上产生了不同的标记。根据引理 3，存在首次重放分歧 $r \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)$。
根据引理 4，$\mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1$意味着

$$C \not\perp_d r \mid Z^\pi \qquad \text{in } G^*.$$

由于 $(r, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 且 $Z^\pi \in \mathcal{W}(r)$，假设 5 给出

$$C \not\perp_d r \mid Z^\pi \implies C \not\perp X_r \mid X_{Z^\pi}.$$

根据引理1，这意味着 $\mathrm{Chg}(r \mid Z^\pi) = 1$，与 $\mathrm{Inv}(r \mid Z^\pi) = 1$ 矛盾。因此 σ 不存在 . □

命题 5 (对比判别路径 (DPT))。 设 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$，并令 (j,k) 为在两个局部部分有向无环图 $E_S^{(0)}$ 和 $E_S^{(1)}$ 中均无向的邻接关系。假设 S 上的共同局部骨架包含一个候选判别路径

$$\pi = \langle v_0, \ldots, v_{m-1}, j, k \rangle$$

（其中 v_0 与 k不相邻），且 $\mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi) \subseteq \{v_1, \ldots, v_{m-1}\}$ 中未知的重放节点状态阻止了 (j,k)上的判别路径标记。假设存在一个由 S 支持的共同测试见证 Z^π，使得

$$(j, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}}, \qquad (v, Z^\pi) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}} \ \forall v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi),$$

with

$$Z^\pi \in \mathcal{W}(j) \cap \bigcap_{v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)} \mathcal{W}(v),$$

and

$$\mathrm{Inv}(v \mid Z^\pi) = 1 \ \forall v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi), \qquad \mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1.$$

假设以下条件成立：

(i) π 的共同骨架存在于每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$中；
(ii) 对于每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$，以及任何会改变 $G'[S]$ 中（j,k）上判别路径标记的替代重放赋值，引理 *4* 的条件均成立。

因此，（j,k）上的判别路径标记在 $[G]_{\mathrm{res}}$ 中保持不变，因此会出现在 G_{test}（G）中。

证明。 **受限 Ψ-等价的可靠性**。 固定 G，其中 $(P_{(0)}\, P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G)$。根据引理5， $\{\mathrm{Inv}(v \mid Z^\pi)\}_{v \in \mathcal{V}_{\mathrm{rep}}(\pi)}$ 与 $\mathrm{Chg}(j \mid Z^\pi) = 1$ 共同决定了与路径骨架兼容的重放赋值中 (j,k) 上的判别路径标记。因此，目标标记必定在 $G[S]$中成立。

在 G_{test}中被迫确定。令 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$ 任意。根据定义3，在某个 $(Q^{(0)}, Q^{(1)}) \in \mathcal{M}(G')$ 下，可以实现见证判别路径定理前提的同一受限 Ψ-像元组。对 G' 重新应用引理5，可在 $G'[S]$中的 (j,k) 上得到相同的判别路径标记。根据假设 (i)，模体邻接关系在每个 $G' \in [G]_{\mathrm{res}}$ 中都保持不变，因此该标记在每个这样的 G' 中均成立。因此，它在 $[G]_{\mathrm{res}}$ 中是被迫确定的，并根据定义4出现在 G_{test} (G) 中。 □

F 全局受限 ΨI-EG估计

F.1 逐制度估计目标

由于非对比聚合器无法获取跨机制对比，我们基于逐机制 PDAG 信息定义受限Ψ-像以及测试诱导的 Ψ 本质图的约化，并排除这些跨机制测试得到的不变性查询。

定义10 (约化受限 Ψ-等价)。 对于 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$中的可容许子集、机制内发现算子 $\mathcal{D}$（定义*1*）以及双机制固定图模块化软干预结构因果模型类 $\mathcal{M}$，其中 $\mathcal{M}(G)$ 表示由 $\mathcal{M}$中的模型生成、底层有向无环图为 G的双制度分布对集合。

将 G在 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 下的约化 Ψ-像定义为

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G;\mathcal{M}) := \left\{ \left(\{E_S^{(0)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}, \{E_S^{(1)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}}} \right) : \, (P^{(0)},P^{(1)}) \in \mathcal{M}(G),\; E_S^{(c)} := \mathcal{D}(P_S^{(c)}) \right\}.$$

若两个有向无环图 G、G' 在 V上满足以下条件，则称它们是约化受限 Ψ-马尔可夫等价的（相对于 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$、$\mathcal{D}$和 $\mathcal{M}$）：

$$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G;\mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G';\mathcal{M}).$$

定义11(约化的检验诱导 Ψ 本质图)。 对于 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$中的可容许子集、机制内发现算子$\mathcal{D}$以及双制度结构因果模型类 $\mathcal{M}$。对于定义在 V上的有向无环图 G，将其约化受限-Ψ 等价类定义为

$$[G]^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}} := \{\, G' \textit{ DAG on } V \;:\; \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G';\mathcal{M}) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G;\mathcal{M}) \,\}.$$

将简化的测试诱导 Ψ 本质图 $G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}$（$G$）定义为 V上的 ***PDAG***，其骨架为类 $[G]^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}$的公共骨架，即

$$u - v \textit{ is an edge in } G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G) \iff u \textit{ and } v \textit{ are adjacent in every } G' \in [G]^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}},$$

其定向恰好是那些必然的定向：

$$u \to v \textit{ in } G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G) \iff u \to v \textit{ in every } G' \in [G]^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}.$$

骨架中其余所有边均保持无向。

F.2 知识集与聚合器

设 $\{E_S^{(c)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\; c\in\{0,1\}}$ 为每个 $S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 和机制 $c \in \{0,1\}$对应的各机制局部部分有向无环图，并设 H_{obs} 为全局观测部分有向无环图（通过对观测制度应用标准的基于约束或评分的算法生成）。定义逐机制背景知识，

$$\mathcal{K}_{\mathrm{per}} := \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G)), \qquad H_{\mathrm{per}} := \mathrm{MPDAG}(H_{\mathrm{obs}} \text{ subject to } \mathcal{K}_{\mathrm{per}})$$

其中 DirE(·) 表示收集图中所有有向边的算子。

令ContR(·)为用于收集对比定向规则（如SSI/CVT/DPT）所输出有向边的算子。定义对比规则背景知识，

$$\mathcal{K}_{\mathrm{rules}} := \bigcup_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}}} \mathrm{ContR}\Big(E_S^{(0)}, E_S^{(1)}, \{\mathrm{Inv}(v \mid Z)\}_{(v,Z)\in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}\Big),$$

以及相应的聚合，

$$H_{\mathrm{ctr}} := \mathrm{MPDAG}(H_{\mathrm{obs}} \text{ subject to } \mathcal{K}_{\mathrm{per}} \cup \mathcal{K}_{\mathrm{rules}}).$$

定义12 (非对比且遵循子集的聚合器)。 映射 $\mathcal{A}$：$\{E_S^{(c)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}},c\in\{0,1\}} \to$ 部分有向无环图(V) 是非对比且遵循子集的，当且仅当：

1. $\mathcal{A}$ 中的每条有向边都可由各机制的局部部分有向无环图信息和***Meek***闭包推出 ，

$$\mathrm{DirE}(\mathcal{A}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}).$$

2. $\mathcal{A}$ 对交换机制标签$(0 \leftrightarrow 1)$保持不变。

F.3 单调增强、可靠性与分离（总体）

定义13 (对比性强制边)。 令 $R := \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}) \setminus \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}})$ 表示在 G_{test} 中强制、但在 $G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}$中不强制的有向边集合。

引理6 （非对比子集聚合的不可能性）。 固定一个满足假设*1*和假设*5*的双制度结构因果模型类 $\mathcal{M}$ 。此外，假设逐机制聚合相对于约化目标是闭包可靠的，即

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}).$$

若 $R \neq \varnothing$，则对于任意 $e \in R$，任何对该模型类具有可靠性的非对比且遵循子集的聚合器 $\mathcal{A}$ 都必须使 e 保持无向。

证明。 固定 $e = (u \to v) \in R$。根据定义13， $e \in \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$ 和 $e \notin \mathbf{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}})$。

令 $\mathcal{A}$ 为任意一个非对比且遵循子集的聚合器。根据定义12,

$$\mathrm{DirE}(\mathcal{A}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}).$$

根据所假设的逐机制闭包可靠性,

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}).$$

因此 $e \notin \mathbf{DirE}(H_{\mathrm{per}})$，进而 $e \notin \mathbf{DirE}(\mathcal{A})$。所以，任何可靠的非对比、尊重子集的聚合器 $\mathcal{A}$ 都必须让 e 保持未定向。 □

推论 1 (非对比子集聚合器的约化可识别性上限)。 由引理*6*可知，任何可靠的非对比、尊重子集的聚合器 $\mathcal{A}$都无法一致保证对以下对象中的边进行定向

$$R = \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}) \setminus \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}).$$

等价地，仅凭逐机制子集信息所能获得的普遍可靠的有向边目标，其上限为 $G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}$。

定理3 (对比聚合保证与 G_{test}-可靠性)。 在逐机制部分有向无环图层面进行分析，并可获取 $\{E_S^{(c)}\}_{S\in\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\ c\in\{0,1\}}$ 和 $\{\mathrm{Inv}(v \mid Z)\}_{(v,Z)\in\mathcal{T}_{\mathrm{a}}}$；对于检验族$(\mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \mathcal{T}_{\mathrm{a}})$，在假设*5*和假设*6*成立且假设

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}),$$

以下条件成立:

1. 单调增强：$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{obs}}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{ctr}})$。
2. G_{test}-可靠性：$\mathbf{DirE}(H_{\mathrm{ctr}}) \subseteq \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$。
3. 分离： 如果 $R \neq \varnothing$，那么对于任意可靠的非对比且遵循子集的聚合器 $\mathcal{A}$,

$$\mathrm{DirE}(\mathcal{A}) \subsetneq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}) \qquad \textit{and} \qquad \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subsetneq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}).$$

证明。 (1) 根据定义， H_{obs} 是在不添加 Meek闭包之外的任何有向背景知识的情况下获得的全局最大部分有向无环图。纳入逐环境知识 $\mathcal{K}_{\mathrm{per}}$ 后得到

$$H_{\mathrm{per}} = \mathrm{MPDAG}(H_{\mathrm{obs}} \text{ subject to } \mathcal{K}_{\mathrm{per}}).$$

同样地，纳入对比规则方向后得到

$$H_{\mathrm{ctr}} = \mathrm{MPDAG}(H_{\mathrm{obs}} \text{ subject to } \mathcal{K}_{\mathrm{per}} \cup \mathcal{K}_{\mathrm{rules}}).$$

根据一致的背景知识下最大部分有向无环图$(\cdot)$算子的单调性，由于

$$\varnothing \subseteq \mathcal{K}_{\mathrm{per}} \subseteq \mathcal{K}_{\mathrm{per}} \cup \mathcal{K}_{\mathrm{rules}},$$

由此可得

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{obs}}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(H_{\mathrm{ctr}}).$$

(2) 由于 $\mathcal{K}_{\mathrm{per}} := \mathbf{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G))$，并且根据定义10和定义11，$\mathbf{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}(G)) \subseteq \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$，我们的原始等价类 $[G]_{\mathrm{res}}$ 是约化等价类 $[G]^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}$ 的细化。因此，可得 $\mathcal{K}_{\mathrm{per}} \subseteq \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$。根据命题 3 、 4 和 5，

$$\mathcal{K}_{\mathrm{rules}} \subseteq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}).$$

因此

$$\mathcal{K}_{\mathrm{per}} \cup \mathcal{K}_{\mathrm{rules}} \subseteq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}),$$

根据假设6，Meek闭包不会定向出与 G_{test}矛盾的任何边，因此

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{ctr}}) \subseteq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}).$$

(3) 若 $R \neq \varnothing$，任取 $e \in R$。根据定义13， $e \in \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$且 $e \notin \mathbf{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}})$。根据引理6，对于任意可靠的非对比、尊重子集的聚合器 $\mathcal{A}$，我们有 $e \notin \mathbf{DirE}(\mathcal{A})$。由于 $e \in \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$，这意味着

$$\mathrm{DirE}(\mathcal{A}) \subsetneq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}).$$

此外，根据假设的逐机制闭包可靠性

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subseteq \mathrm{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}}),$$

并且由于 $e \notin \mathbf{DirE}(G^{\mathrm{test}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}}})$，可得 $e \notin \mathbf{DirE}(H_{\mathrm{per}})$。结合 $e \in \mathbf{DirE}(G_{\mathrm{test}})$，可得

$$\mathrm{DirE}(H_{\mathrm{per}}) \subsetneq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}).$$

□

G 子集采样下的渐近恢复

在实践中，我们从覆盖 $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$的（可能有偏或自适应的）采样器 Q 中抽取子集 S_1、……、 S_T。对于一条边 e（或一个方向$u \to v$），将见证族 $\Omega_e \subseteq \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 定义为这样一组可容许子集：在这些子集上， e 可在总体层面通过局部部分有向无环图定向或应用定向规则得到恢复。令 $\pi_e := Q(\Omega_e)$。

引理7 （独立同分布子集采样的覆盖尾界）。 假设抽样子集 S_1、……、 S_T独立同分布地来自 Q。固定一个具有见证质量 $\pi_e > 0$ 的 e，并令 $L_e :=\sum_{t=1}^{T} \mathbf{1}\{S_t \in \Omega_e\}$。那么，对于任意整数 $r \in \{1, \dots, T\}$，

$$Pr(L_e < r) \;=\; \sum_{\ell=0}^{r-1} \binom{T}{\ell} \pi_e^{\ell} (1-\pi_e)^{T-\ell} \;\le\; \exp\Big(-\,T\ \mathrm{D}(r/T \,\|\, \pi_e) \Big),$$

其中$\mathrm{D}(a\|b) := a$ 对数 $\frac{a}{b} + (1-a)$ 对数 $\frac{1-a}{1-b}$ 为二元*KL*散度。

证明。 令 $H_t = \begin{cases} 1 & \text{if } S^{(t)} \in S_e^{\dagger} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$ 和 $\pi_e = Q(S_e^{\dagger})$，则 H_t 可表示为一次伯努利试验，其中成功对应于对 e的一次命中， $H_t \sim \mathbf{Bernoulli}(\pi_e)$。

由于 $S^{(t)}$ 是来自 Q的独立同分布样本，因此伯努利试验 H_t（其中 $t \in \{1, ..., T\}$）相互独立。

令 $L_e := \sum_{t=1}^{T} \mathbf{1}\{S^{(t)} \in \mathcal{S}_v^{\dagger}\} = \sum_{t=1}^{T} H_t$。 那么， L_e 是 T 次相互独立的伯努利试验之和，因此， $L_e \sim$ 二项分布(T， π_e)。

对于任意整数 $r_e \in \{1, ..., T\}$，我们可以将 $\mathbf{Pr}(L_e < r_e)$ 计算为所有满足 $0 \le l < r_e$ 的 $L_e = l$ 的概率之和：$\mathbf{Pr}(L_e < r_e) = \sum_{\ell=0}^{r_e-1} \binom{T}{\ell} \pi_e^{\ell} (1-\pi_e)^{T-\ell}$。

由于我们想求累积分布函数 $\mathbf{Pr}(L_e < r_e)$ 的上界，因此可以将其改写为 $\mathbf{Pr}(tL_e > tr_e)$，其中

$t < 0$ 并使用切尔诺夫界来求该分布尾端的上界。

首先，我们可以写出马尔可夫不等式：

$$\Pr(e^{tL_e} \geq e^{tr_e}) \leq \frac{\mathbb{E}[e^{tL_e}]}{e^{tr_e}}, \text{where } t < 0$$

$$\mathbb{E}[e^{tL_e}] = (1 - \pi_e + \pi_e e^t)^T$$

$$\Pr(L_e < r_e) \leq \frac{(1 - \pi_v + \pi_e e^t)^T}{e^{tr_e}} = \exp(T \log(1 - \pi_e + \pi_e e^t) - tr_e)$$

令 $f(t) = T\log(1 - \pi_e + \pi_e e_t) - tr_e)$

为了使不等式右侧最小：

$$\frac{d}{dt} f(t) = \frac{T\pi_e e^t}{1 - \pi_e + \pi_e e^t} - r_v = 0$$

$$\frac{\pi_e e^t}{1 - \pi_e + \pi_e e^t} = \frac{r_e}{T}$$

$$e^t = \frac{\frac{r_e}{T}(1 - \pi_e)}{\pi_e(1 - \frac{r_e}{T})}$$

$$t = log(\frac{\frac{r_e}{T}(1 - \pi_e)}{\pi_e(1 - \frac{r_e}{T})})$$

将这些代回 $f(t)$：

$$\begin{aligned}
f(t) &= T \log(\frac{1 - \pi_e}{1 - \frac{r_e}{T}}) - r_e \log \frac{\frac{r_e}{T}(1 - \pi_e)}{\pi_e(1 - \frac{r_e}{T})} \\
&= T \log(\frac{1 - \pi_e}{1 - \frac{r_e}{T}}) - r_e \log \frac{\frac{r_e}{T}}{\pi_e} - r_e \log \frac{1 - \pi_e}{1 - \frac{r_e}{T}} \\
&= (T - r_e) \log \frac{1 - \pi_e}{1 - \frac{r_e}{T}} - r_e(\log \frac{\frac{r_e}{T}}{\pi_e}) \\
&= -T \left((1 - \frac{r_e}{T}) \log \frac{1 - \frac{r_e}{T}}{1 - \pi_e} + \frac{r_e}{T} \log \frac{\frac{r_e}{T}}{\pi_e} \right) \\
&= -TD(\frac{r_e}{T} || \pi_e)
\end{aligned}$$

其中 $D(a||b) = a \log \frac{a}{b} + (1 - a) \log \frac{1-a}{1-b}$是二元 KL 散度。

因此，

$$\Pr(L_e < r_e) = \sum_{\ell=0}^{r_e - 1} \binom{T}{\ell} \pi_e^{\ell} (1 - \pi_e)^{T-\ell} \leq \exp(-TD(\frac{r_e}{T} || \pi_e))$$

□

假设 7（见证覆盖 G_{test}）。 对于 G_{test} 中每条必然定向的有向边 $u \to v$，都存在一个非空见证族 $\Omega_{u \to v} \subseteq \mathcal{S}_{\text{a}}$，使得对于每个 $S \in \Omega_{u \to v}$，方向 $u \to v$ 都能在总体层面通过局部部分定向无环图定向或某条定向规则恢复，并且采样器赋予正概率 $\pi_{u \to v} := Q(\Omega_{u \to v}) > 0$。

定理 4（检验诱导的（受限 Ψ）本质图的一致性）。 设 G 为经过 T 个抽样子集后的模型输出：*(i)* 在每个抽样的 S 以及每个机制 c 上估计 $\widehat{E}_S^{(c)}$，*(ii)* 在抽样见证上，对所检验的 (v, Z) 对估计 $\widehat{\text{Inv}}(v \mid Z)$，*(iii)* 利用这些估计应用定向规则，以及 *(iv)* 用闭包 Cl 聚合所有推断约束，以 $\widehat{\ }$输出 G。在假设 *1–6* 与见证覆盖（假设 *7*）下，当 n、$T \to \infty$ 时，

$$Pr\Big(\widehat{G} = G_{\text{test}}\Big) \to 1.$$

证明。 设 $\mathcal{E}_n$ 为如下事件：模型所使用的所有被调用的局部部分定向无环图和不变性检验在有限可容许族上均正确：

$$\mathcal{E}_n := \Big\{\forall S \in \mathcal{S}_{\mathrm{a}}, \forall c \in \{0,1\} : \widehat{E}_S^{(c)} = E_S^{(c)}\Big\} \cap \Big\{\forall (v, Z) \in \mathcal{T}_{\mathrm{a}} : \widehat{\mathrm{Inv}}(v \mid Z) = \mathrm{Inv}(v \mid Z)\Big\}$$

$$\Pr\big(\neg \mathcal{E}_n\big) = \sum_{S,c} \Pr(\widehat{E}_S^{(c)} \neq E_S^{(c)}) + \sum_{(v,Z)} \Pr(\widehat{\mathrm{Inv}}(v \mid Z) \neq \mathrm{Inv}(v \mid Z))$$

根据假设2和假设3，这些项各自 $\to 0$ 为 $n \to \infty$。根据假设1， $\mathcal{S}_{\mathrm{a}}$ 和 $\mathcal{T}_{\mathrm{a}}$ 均为有限的。因此，$\Pr(\neg \mathcal{E}_n) \to 0$为 $n \to \infty$。

$$\Pr(\mathcal{E}_n) = 1 - \Pr(\neg \mathcal{E}_n)$$

由于 $\Pr(\neg \mathcal{E}_n) \to 0$为 $n \to \infty$，因此 $\Pr(\mathcal{E}_n) \to 1$为 $n \to \infty$。

$\widehat{\ }$鉴于 $\mathcal{E}_n$ 成立，根据定义3，$\Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G) = \Psi^{\mathrm{res}}_{\mathcal{S}_{\mathrm{a}},\, \mathcal{T}_{\mathrm{a}}}(G)$，其中某个真实图为 G。于是， $G \in [G]_{\mathrm{res}}$。根据定理3中的$\sim_{G_{\mathrm{test}}}$-可靠性，在事件 $\mathcal{E}_n$上，$\mathrm{DirE}(G) \subseteq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})$。由于，$\Pr(\mathcal{E}_n) \to 1$ 同样为 $n \to \infty$,

$$\Pr(\mathrm{DirE}(\widehat{G}) \subseteq \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})) \to 1$$

为 $n \to \infty$。

对于 G_{test}中的任意强制边 e $(u \to v)$，根据假设 7，存在一个非空见证族 $\Omega_e \subseteq \mathcal{S}_{\mathrm{a}}$，满足 $\pi_e = Q(\Omega_e) > 0$。根据引理7，样本未命中见证的概率可表示为

$$\Pr(L_e = 0) = (1 - \pi_e)^T \to 0 \text{ as } T \to \infty$$

由于 $\pi_e > 0$。于是，采样器命中一个见证的概率为 $\Pr(L_e \geq 1) = 1 - \Pr(L_e = 0) \to 1$ ，当 $T \to \infty$ 时。

在 $\mathcal{E}_n \cap \{L_e \geq 1\}$ 上，存在某个 t，使得 $S_t \in \Omega_e$。根据见证族 Ω_e 的定义，边 e 在 S_t 上被恢复，并在总体层面被加入聚合中。根据假设6，闭包不会引入与 G_{test} 矛盾的 $\widehat{\ }$ 定向。于是， $e \in \mathrm{DirE}(G)$ 在 $\mathcal{E}_n \cap \{L_e \geq 1\}$ 上。因此，

$$\mathcal{E}_n \cap \{L_e \geq 1\} \subseteq \{e \in \mathrm{DirE}(\widehat{G})\}$$

$$e \notin \mathrm{DirE}(\widehat{G}) \subseteq \neg \mathcal{E}_n \cup L_e = 0$$

定义事件 $\mathcal{A}_e$ ，使得

$$\mathcal{A}_e := \{e \notin \mathrm{DirE}(\widehat{G})\}$$

应用并集界

$$\Pr\Big(\bigcup_{e \in \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})} \mathcal{A}_e\Big) \leq \sum_{e \in \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})} \Pr(\mathcal{A}_e) \leq \sum_{e \in \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})} \Pr(\neg \mathcal{E}_n) + \sum_{e \in \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}})} \Pr(L_e = 0)$$

由于 n， $T \to \infty$，$\Pr(\neg \mathcal{E}_n) \to 0$ 且 $\Pr(L_e = 0) \to 0$ ，因此，不等式右侧 $\to 0$。因此，$\widehat{\ }\Pr(\forall e \in \mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}) : e \in \mathrm{DirE}(G)) \to 1$。因此

$$\Pr(\mathrm{DirE}(G_{\mathrm{test}}) \subseteq \mathrm{DirE}(\widehat{G})) \to 1$$

$\widehat{\ }$因此，$\Pr(G = G_{\mathrm{test}}) \to 1$ 为 n， $T \to \infty$。 □

H 模型架构

我们在以下各节中重点介绍 SCONE 的完整架构细节。

H.1 构建边际因果结构

设 $V=\{1,...,N\}$ 为有向无环图 $G=(V,\ E)$ 中的节点。我们构造 T 个可容许子集 S_1，..... $S_T\subseteq V$，并针对构成每条边的 $k=1,$ ..... K 个互异无序节点对，固定有效候选无向边 $e_k=\{i,j\}$ 的全局目录。我们考虑两种机制 $c\in\{0,1\}^N$。

H.1.1 对节点可容许子集进行采样

我们首先构建选择得分，利用跨机制对比优先选择软干预目标，同时确保图覆盖。随后，我们提出一种采样方法，通过贪心优化选择得分，对节点的可容许子集进行采样。

选择得分设 $c\in\{0,1\}^N$ 为环境标签。我们定义节点级环境敏感度得分$s_i\in[0,1]^N$，它结合了标准化均值偏移和对环境的依赖:

$$s_i=\text{rescale}\left(w_1\frac{|\hat{\mu}_i^{(0)}-\hat{\mu}_i^{(1)}|}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_i^{(0)2}-\hat{\sigma}_i^{(1)2}\right)}}+w_2\text{MI}(X_i;c)\right),w_1,w_2\geq 0, \tag{10}$$

其中，$\hat{}\mu_i^{(c)}$ 和$\hat{}\sigma_i^{(c)}$ 分别是环境 $c\in\{0,1\}$中 X_i 的样本均值和标准差，MI是 X_i 与 c之间的互信息。我们还将成对对比得分 $\Gamma\in[0,1]^{N\times N}$ 定义为:

$$\Gamma_{i,j}:=\text{rescale}\left(\left|\text{corr}^{(0)}(X_i,X_j)-\text{corr}^{(1)}(X_i,X_j)\right|\right). \tag{11}$$

随着节点被采样，我们会更新选择得分，以降低重复配对的权重。设$n_{i,\ j}^t$为配对$(i,\ j)$在 S_1，.....，S_{t-1}中出现的次数，设 n_i^t为节点 i 出现的次数。对于子集 t，我们根据访问频率降低配对$(i,\ j)$的选择得分$\alpha_{i,\ j}^t$ 和$\Gamma_{i,\ j}^t$ 的权重，具体如下:

$$\alpha_{i,j}^t=\frac{\alpha_{i,j}}{q^{n_{i,j}^t}},q>1;\qquad \Gamma_{i,j}^t=\frac{\Gamma_{i,j}}{r^{n_{i,j}^t}},r>1,$$

其中 $\alpha_{i,\ j}$ 是全局统计量，例如逆协方差或精确率。

贪心选择 我们根据选择得分 α^t 和 Γ^t，以贪心方式抽取节点来构成子集 S_t。固定超参数$\rho\in[0,1]$ $\lambda\in[0,1]$和 $\beta_{\text{cov}}\geq 0$。我们通过以一定概率抽取单个节点作为种子节点，初始化 S_t:

$$S_t\leftarrow\{i:i\sim\text{Categorical}(\tilde{\alpha}_1^t,...,\tilde{\alpha}_N^t)\},\qquad \tilde{\alpha}_i^t:=\left[(1-\rho)\sum_{j\neq i}\alpha_{i,j}^t+\rho s_i\right]\cdot\frac{1}{(1+n_{i,j}^t)^{\beta_{\text{cov}}}}. \tag{12}$$

当 $|S_t|<k$时，我们每次添加一个节点，其概率为:

$$S_t\leftarrow S_t\cup\left\{j:j\sim\text{Categorical}(\tilde{\alpha}_{1,S_t}^t,...,\tilde{\alpha}_{N,S_t}^t)\right\}, \tag{13}$$

其中

$$\tilde{\alpha}_{j,S_t}^t\ :=\ \lambda\sum_{i\in S_t}\alpha_{i,j}^t\ +\ (1-\lambda)\left(s_j\ +\ \frac{1}{|S_t|}\sum_{i\in S_t}\Gamma_{i,j}^t\right)\quad\text{if } j\notin S_t,\qquad \tilde{\alpha}_{j,S_t}^t\ :=\ 0\text{ otherwise}, \tag{14}$$

随后加入覆盖奖励 $\tilde{\alpha}_{j,\ S_t}^t\leftarrow\tilde{\alpha}_{j,\ S_t}^t/(1+n_j^t)^{\beta_{\text{cov}}}$。构成 S_t 后，我们更新访问次数 $n_i^{t+1}\leftarrow n_i^t+\mathbf{1}\{i\in S_t\}$ 和成对计数 $n_{i,\ j}^t\leftarrow n_{i,\ j}^t+\mathbf{1}\{i,j\in S_t\}$，然后通过上述公式刷新 α^{t+1} 和 Γ^{t+1}。

H.1.2 经典因果发现集成

给定 N 个节点的节点观测 $X\in\mathbb{R}^{N\times S}$ 和 S 个样本，因果发现模块会为每个节点对 $(i,\ j)$ 生成一个边类别分布 $\{i\to j,j\to i,i-j,\text{无边}\}$。

自助法重复样本与投票解码 对于 R_{boot} 次重复中的每一次，我们通过有放回重采样 $X^{(r)} \in \mathbb{R}^{N\times M}$ 观测 M来抽取样本。每个重复样本都会输入给每个基学习器 $l \in \{1,...,L\}$，以生成一个分数矩阵$\mathbf{A}^{(l,r)} \in [0,1]^{N\times N}$，其中 $\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j]$ 用于估计 $P(i \to j)$。设超参数 ε为平局判定裕度，τ_l为每个学习器的置信度阈值。随后，将每个分数矩阵解码为一个独热投票 $v_i^{(l,r)}{}_{,\ j} \in \{0,1\}^4$ 如下：

$$v_{i,j}^{(l,r)} := \begin{cases} i \to j & \text{if } \mathbf{A}^{(l,r)}[i,j] - \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i] > \varepsilon \text{ and } \max(\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j], \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i]) \geq \tau_l, \\ j \to i & \text{if } \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i] - \mathbf{A}^{(l,r)}[i,j] > \varepsilon \text{ and } \max(\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j], \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i] \geq \tau_l, \\ i - j & \text{if } \max(\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j], \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i] \geq \tau_l \text{ and neither direction dominates}, \\ \text{no-edge} & \text{if } \max(\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j], \mathbf{A}^{(l,r)}[j,i] < \tau_l \end{cases}$$

多数　投票 加权投票计数 $\mathbf{W}[i,j] \in \mathbb{R}^4$ 在所有学习器和重复实验中累积　　s:

$$\mathbf{W}[i,j] = \sum_{l=1}^{L} w_l \sum_{r=1}^{R_{\text{boot}}} v_{i,j}^{(l,r)}$$

最终边类别由以下内容确定：

$$e_{i,j} := \begin{cases} \arg\max_{(i,j)}(\mathbf{W}[i,j]) & \text{if the argmax is unique,} \\ \text{no-edge} & \text{otherwise} \end{cases} \tag{15}$$

并以边类别的独热编码形式输出，$\hat{e}_{i,\ j} = \mathbf{1}\{e_{i,j}\} \in \{0,1\}^4$。

用于成对定向的 PolyBIC 我们主要使用 PolyBIC 作为基础因果发现学习器。对于每一对变量，PolyBIC 都会沿两个方向拟合次数为 D 的多项式岭回归，并选择在残差上贝叶斯信息准则（BIC）较低的方向作为因果方向。定向得分为：

$$\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j] = \sigma\left(\frac{\text{BIC}(X_i \mid X_j) - \text{BIC}(X_j \mid X_i)}{\mathbb{E}_b\left[|\text{BIC}^b(X_i \mid X_j) - \text{BIC}^b(X_j \mid X_i)|\right]}\right) \tag{16}$$

其中 σ 是 sig　moid 函数，且 b 是批次。更高的定向分数 $\mathbf{A}^{(l,r)}[i,j]$ 更倾向于定向 $i \to j$　　.

H.1.3 边标记化

候选边构建 对于每个图，集成因果发现模块会针对每个大小为 k 的抽样子集 S_t，分别在两个环境中独立运行，并将各环境局部 CPDAG 中的有向边和无向边映射到全局节点索引后去重。此外，还会将按相关系数绝对差排名前 K_{env} 的节点对纳入环境对比候选项：$|\text{corr}_1(i,j) - \text{corr}_0(i,j)|$。因果发现边与环境对比边的并集构成包含 K 条边的候选集 K_{cand}，并可选择将其限制在最大规模以内。

端点编码 每条候选边 $e = \{i,j\}$ 在每个环境 $c \in \{0,1\}$ 中都由一个原始特征向量 $x_{e,\ c} \in \mathbb{R}^{6+2N+F}$ 表示，该向量由三个部分拼接而成。首先，6 维端点编码 $\mathbf{o}_{e,\ c} \in \{0,1\}^6$ 将每个端点处的 CPDAG 边类型编码为三个状态的独热编码 $\{\varnothing, \bullet, \triangleright\}$，分别表示无边、尾端和箭头：

$$\mathbf{o}_{e,c} = [\mathbf{1}_{\varnothing}(i),\ \mathbf{1}_{\bullet}(i),\ \mathbf{1}_{\triangleright}(i),\ \mathbf{1}_{\varnothing}(j),\ \mathbf{1}_{\bullet}(j),\ \mathbf{1}_{\triangleright}(j)] \tag{17}$$

其次，独热节点标识符 $\mathbf{1}_N(i)$ $\mathbf{1}_N(j) \in \{0,1\}^N$提供全局节点身份。第三，逐环境成对统计量 $\phi_{ij}^{(c)} \in \mathbb{R}^F$ 与 $F = 4$ 包含：

$$\phi_{ij}^{(c)} = \left[\hat{\rho}_{ij}^{(c)},\ -\hat{\Omega}_{ij}^{(c)},\ \tanh\left(\frac{\hat{\sigma}_{ij\to i}^{(c)}}{\hat{\sigma}_i^2}\right),\ \tanh\left(\frac{\hat{\sigma}_{ij\to j}^{(c)}}{\hat{\sigma}_j^2}\right)\right] \tag{18}$$

其中，$\hat{\rho}_{ij}^{(c)}$ 是样本相关性，$\hat{\Omega}_{ij}^{(c)}$ 是由精度矩阵得到的归一化偏相关，最后两个条目分别是两个方向上的双曲正切缩放的回归系数。

边缘化边嵌入 原始特征向量经投影后维度为 d，通过两层多层感知机处理，并沿子集轴和边轴添加正弦位置嵌入：

$$H_E[b,t,e,c,:] = \mathrm{MLP}(x_{e,c}) + \mathrm{PE}_T(t) + \mathrm{PE}_K(k) \tag{19}$$

其中 PE_T 和 PE_K 分别是掩码应用于有效子集和边位置的正弦嵌入，从而得到 $H_E \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times 2\times d}$。

全局流构建 同时，全局流 $H_\rho \in \mathbb{R}^{B\times N\times N\times d}$ 由环境平均节点特征的对称化精度矩阵构建而成：

$$\bar{X} = \frac{1}{2}(X^{(0)} + X^{(1)}), \qquad \hat{\Omega} = \frac{1}{2}\left(\Sigma^{-1}(\bar{X}) + \Sigma^{-1}(\bar{X})^\top\right) \tag{20}$$

每个条目 都投影到维度 d，并与学习得到的成对节点位置嵌入相加 ：

$$H_\rho[b,i,j,:] = W_\rho\, \hat{\Omega}[b,i,j] + \mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j \tag{21}$$

其中 $W_\rho \in \mathbb{R}^{1\times d}$ 是一个学习得到的线性投影，$\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j \in \mathbb{R}^d$ 是学习得到的节点位置嵌入。投影前将 $\hat{\Omega}$ 的对角线置零。

不变性／对比性重新参数化 在第一个轴向块之前，将边缘化边嵌入 $H_E \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times 2\times d}$重新参数化为不变性与对比通道：

$$z_{\text{avg}} = \frac{1}{2}(H_E[\cdot,\cdot,\cdot,1,:] + H_E[\cdot,\cdot,\cdot,0,:]), \qquad z_\Delta = H_E[\cdot,\cdot,\cdot,1,:] - H_E[\cdot,\cdot,\cdot,0,:] \tag{22}$$

~将原始环境通道替换为两个运行通道 $[z_{\text{avg}}, z_\Delta]$ 以构成 H_E。这种双射重参数化在应用注意力之前，将机制不变结构与机制特异性变化解耦。

H.2 对比定向的偏置头

每条对比定向规则都会为每条候选边的三个定向类别 $\{i\to j, j\to i, i-j\}$ 生成带符号的偏置。为衡量一个节点的机制在不同机制间的转变程度，我们定义不变性得分：

$$\gamma_v = \mathrm{Norm}\left(\sum_{e\ni v} ||\Delta_e||\right) \in [0,1], g_v := 1-\gamma_v \tag{23}$$

~ ~其中 $\Delta_{i,\ j} = H_E[t,\{i,j\},1,:] - H_E[t,\{i,j\},0,:]$ 表示边 $e=\{i,j\}$ 的机制对比，而 g_v 表示其补集。不变性得分 g_v 较高的节点更有可能是机制不变的（非目标节点），因而能够提供更强的定向信号。

H.2.1 单侧不变性（SSI）

对于每条边 $\{i,j\}$，通过对至少出现在子集 ρ比例中的关联候选边的嵌入进行均值池化，构造父上下文 $\mathbf{p}_i,\ \mathbf{p}_j \in \mathbb{R}^d$：

$$\mathbf{p}_v := \mathrm{Pool}\{\widetilde{H}_E[t,\{v,u\},c,:] : u \in \mathrm{Pa}(v)\}$$

共享 预测器 ψ 将每个端点嵌入及其父上下文映射为一个充分统计量向量 r:

$$\phi_j^{(c)} = \psi\Big(\widetilde{H}_E[t,\{i,j\},c,:] \,||\, \mathbf{p}_j \,||\, \mathbf{m}_j\Big), \tag{24}$$

$$\phi_i^{(c)} = \psi\Big(\widetilde{H}_E[t,\{j,i\},c,:] \,||\, \mathbf{p}_i \,||\, \mathbf{m}_i\Big), \tag{25}$$

并且 $\delta_v = \|\phi_v^{(1)} - \phi_v^{(0)}\|$ 衡量跨环境偏移。当 j 的偏移大于 i时，会施加偏向 $i\to j$ 的偏置：

$$b^{\text{SSI}}_{t,\{i,j\}}(i\to j) \mathrel{+}= \kappa\cdot \mathrm{clip}(\delta_j-\delta_i,\ -\tau,\ \tau)^+, \quad b^{\text{SSI}}_{t,\{i,j\}}(j\to i) \mathrel{-}= \kappa\cdot \mathrm{clip}(\delta_j-\delta_i,\ -\tau,\ \tau)^+ \tag{26}$$

由 $\gamma_j \ge \gamma_i + \eta$ 和 $\gamma_i \le \gamma_{\max}$控制，确保仅当 j 是受扰动程度更高的端点时，偏置才会触发。

H.2.2 对比 V 结构（CVT）

对于 S_t 中的每个未屏蔽三元组（i，j，k）（即 $\{i,j\}$，$\{k,j\} \in K_{\text{cand}}$ 和 $\{i,k\} \notin K_{\text{cand}}$），根据环境 1 嵌入以及两条入射边的跨环境对比计算碰撞点分数：

$$s_{\text{cvt}}^{(1)}(i \to j \leftarrow k) = \sigma\Big(u^\top \Big[\widetilde{H}_E[t,\{i,j\},1,:] \,\|\, \widetilde{H}_E[t,\{k,j\},1,:] \,\|\, \Delta_{i,j} \,\|\, \Delta_{k,j}\Big]\Big) \tag{27}$$

其中，u 经过学习，$\Delta_{v,\,u} = H_E[t,\{v,u\},1,:] - H_E[t,\{v,u\},0,:]$。低于置信度阈值 θ_{cvt} 的分数将被置零。仅当 $\gamma_j \le \theta_\gamma$ 时，偏置才会应用于条件 0 边嵌入，即当中心节点 j 具有足够的机制不变性、可能是碰撞点时：

$$b^{\text{CVT}}_{t,\{i,j\},0}(i \to j) \mathrel{+}= \omega \cdot s^{(1)}_{\text{cvt}}, \qquad b^{\text{CVT}}_{t,\{i,j\},0}(j \to i) \mathrel{-}= \omega \cdot s^{(1)}_{\text{cvt}}, \tag{28}$$

$$b^{\text{CVT}}_{t,\{k,j\},0}(k \to j) \mathrel{+}= \omega \cdot s^{(1)}_{\text{cvt}}, \qquad b^{\text{CVT}}_{t,\{k,j\},0}(j \to k) \mathrel{-}= \omega \cdot s^{(1)}_{\text{cvt}}, \tag{29}$$

在 j 处促进碰撞点定向，同时惩罚两条入射边上的反向。

H.2.3 对比式判别路径（DPT）

对于每条候选边 $\{i,j\}$，通过候选边图且长度为 $m \le L$ 的前 B 条路径 $\pi = (e_0, \ldots\ldots, e_m)$ 会通过广度优先搜索离线枚举。每条路径在各个环境中使用 DeepSets 聚合器 $\text{DeepSet} = \text{DeepSet}_\rho \circ \text{DeepSet}_\phi$，基于拼接的边嵌入和跨环境对比进行独立编码：

$$s_\pi^{(c)} = \sigma\Big(\text{DeepSet}\Big(\Big\{\big[\widetilde{H}_E[t,e_r,c,:] \,\|\, \Delta_{e_r}\big]\Big\}_{r=0}^{m}\Big)\Big) \in [0,1] \tag{30}$$

得分较高的环境被选为胜出 环境 $c^* = \arg\max_c s_\pi^{(c)}$，并将相同的偏置反映到另一个 环境 $\bar{c} = 1 - c^*$。包含 $s_\pi^{(c^*)} < \theta_{\text{dpt}}$ 的路径将被丢弃。随后，所有者边 $\{i,j\}$ 的偏置为：

$$b^{\text{DPT}}_{t,\{i,j\},\bar{c}}(i \to j) \mathrel{+}= \lambda \cdot s_\pi^{(c^*)}, \qquad b^{\text{DPT}}_{t,\{i,j\},\bar{c}}(j \to i) \mathrel{-}= \lambda \cdot s_\pi^{(c^*)}, \tag{31}$$

在该边的所有候选路径上进行聚合。

H.3 轴向聚合器

H.3.1 轴向块

每个 L 轴向块都会依次处理两种流。给定局部流 $H_E \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times C\times d}$，我们首先将嵌入重新参数化为 H_E，然后沿 T 和 K 轴应用轴向注意力：通过重塑为 $[T, KC, B, d]$，并使用带预层归一化残差连接的逐行和逐列自注意力：

$$\widetilde{H}_E \leftarrow \widetilde{H}_E + \text{FFN}(\text{ColAttn}(\text{RowAttn}(\widetilde{H}_E))) \tag{32}$$

不变性门控。轴向注意力之后，根据更新后的局部流计算每个节点的不变性分数 $\gamma_v \in [0,1]$（见公式 4），并将其分散到边词元，得到每条边的一对分数 $[\gamma_i, \gamma_j] \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times 2}$。将这些分数输入一个经过学习的门控网络，以生成每个注意力头、每条边对应的门控值：

$$[g_{\text{cvt}}, g_{\text{ssi}}, g_{\text{dpt}}]_{t,e} = g_{\min} + (1 - g_{\min}) \cdot \sigma(\mathbf{W}_{\text{gate}}\,[\gamma_i, \gamma_j]_{t,e} / \tau_{\text{gate}}) \in [0,1]^3 \tag{33}$$

其中，$g_{\min}$ 是防止完全抑制的最小门控值，τ_{gate} 是温度。每个定向头（CVT、SSI、DPT）都会生成一个偏置 $b^{(\cdot)} \in \mathbb{R}^{B\times T\times K\times 2\times |\mathcal{C}|}$，其中 $|\mathcal{C}|$ 是边类别的数量；该偏置随后被投影回嵌入空间，并添加到局部流中：

$$\widetilde{H}_E = \widetilde{H}_E + \sum_{h \in \{\text{cvt, ssi, dpt}\}} g_h \cdot W_{\text{proj}}(b^{(h)}) \tag{34}$$

门控正则化项 $\mathcal{L}_{\text{gate}} = \frac{1}{3}\sum_h (1 - \bar{g}_h)^2$ 鼓励门控在整个训练过程中保持激活状态，其中 $\bar{g}_h$ 是跨边和子集计算的平均门控值。

边对数几率与子集　　池化。 每条边的对数几率通过线性投影从更新后的局部流中计算得出：

$$\Theta_{t,e} = W_{\text{cls}}\, \widetilde{H}_E[t, e, :, :] \in \mathbb{R}^{C\times|\mathcal{C}|} \tag{35}$$

通过对有效边使用学习到的注意力权重，对各子集中的对数几率进行汇总 T：

$$w_{t,e} = \frac{\exp(W_{\text{pool}}\, \widetilde{H}_E[t, e, :, :])}{\sum_{t':(t',e)\ \text{valid}} \exp(W_{\text{pool}}\, \widetilde{H}_E[t', e, :, :])}, \qquad \hat{\Theta}_e = \sum_t w_{t,e} \cdot \Theta_{t,e} \tag{36}$$

汇总后的对数几率 $\hat{}\Theta_e \in \mathbb{R}^{C\times|\mathcal{C}|}$ 通过为每条候选边 $e = \{u, v\}$写入 $\mathcal{N}[b, u, v] \leftarrow \hat{}\Theta_e$，分散到全局节点对表 $\mathcal{N} \in \mathbb{R}^{B\times N\times N\times 2\times|\mathcal{C}|}$ 中。

消息传递。 汇总后的边消息 $m_e \in \mathbb{R}^d$ （对 C取平均）同样分散到全局消息表$M \in \mathbb{R}^{B\times N\times N\times d}$中，未观测到的节点对默认为零。随后，全局流在 $N \times N$ 网格上进行按行和按列的轴向注意力：

$$H_\rho \leftarrow H_\rho + \text{FFN}(\text{ColAttn}(\text{RowAttn}(M))) \tag{37}$$

更新后的全局表示通过将相应的节点对嵌入添加到所有子集中每个边标记的对应位置，广播回边际流：

$$\widetilde{H}_E[b, t, e, :, :] \leftarrow \widetilde{H}_E[b, t, e, :, :] + H_\rho[b, u, v, :] \tag{38}$$

从而在每一层闭合局部-全局回路。

H.3.2 全局头

一个辅助的近邻头 $W_{\text{global}} \in \mathbb{R}^{d\times|\mathcal{C}|}$ 被应用于 H_ρ，以预测所有有序节点对上的边类别：

$$\Theta^{\text{global}}_{b,i,j} = W_{\text{global}}\, H_\rho[b, i, j, :] \tag{39}$$

在所有正边和一部分采样负样本上使用交叉熵进行监督。在推理时，全局对数几率可以通过混合参数 α，与非候选边的边缘对数几率进行可选融合：

$$\Theta^{\text{fused}}_{b,u,v} = \begin{cases} (1-\alpha)\, \hat{\Theta}^{\text{marginal}}_{b,u,v} + \alpha\, \Theta^{\text{global}}_{b,u,v} & \text{if } \{u, v\} \in K_{\text{cand}} \\ \Theta^{\text{global}}_{b,u,v} & \text{otherwise} \end{cases} \tag{40}$$

其中， K_{cand} 为候选边。

H.3.3 优化目标

完整的训练目标为：

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{CE}} + \lambda_{\text{SHD}}\, \mathcal{L}_{\text{SHD}} + \lambda_{\text{rank}}\, \mathcal{L}_{\text{rank}} + \lambda_{\text{global}}\, \mathcal{L}_{\text{global}} + \lambda_{\text{gate}}\, \mathcal{L}_{\text{gate}} \tag{41}$$

$\mathcal{L}_{\text{CE}}$ 是候选边上的交叉熵，温度为 τ，并可选择使用类别频率重加权。 $\mathcal{L}_{\text{SHD}}$ 是软 SHD 惩罚项：

$$\mathcal{L}_{\text{SHD}} = \frac{1}{|K_{\text{cand}}|} \sum_{\{u,v\}\in K_{\text{cand}}} \left[(\hat{p}_{u\to v} - \mathbf{1}[u \to v])^2 + (\hat{p}_{v\to u} - \mathbf{1}[v \to u])^2\right] \tag{42}$$

其中，$\hat{}p_{u\to v}$ 对应边 $e =$ （$u \to v$）的预测概率， $\mathcal{L}_{\text{rank}}$ 是一个成对铰链损失，用于以间隔 μ将真实有向边排在非边之前：

$$\mathcal{L}_{\text{rank}} = \frac{1}{|\mathcal{P}|} \sum_{(e^+,e^-)\in\mathcal{P}} \max(0,\ \mu - \hat{p}_{e^+} + \hat{p}_{e^-}) \tag{43}$$

其中， $\mathcal{P}$ 是一组采样得到的正负边对。门控正则化项用于鼓励门控在整个训练过程中保持激活，其中 $\bar{g}_h$ 是跨边和子集的平均门控值：

$$\mathcal{L}_{\text{gate}} = \frac{1}{3} \sum_{h\in\{\text{cvt, ssi, dpt}\}} (1 - \bar{g}_h)^2, \qquad \bar{g}_h = \frac{1}{BTK} \sum_{b,t,e} g_{h,b,t,e} \tag{44}$$

模型采用 AdamW 进行优化，并使用线性预热和余弦学习率衰减至最小比率 $r_{\min}$；评估时使用衰减率为 β 的 EMA权重。

I 合成数据生成

图生成 合成数据集通过对具有固定节点数 N 和预期边数 E 的随机有向无环图进行采样生成。图的生成步骤为：(1) 对节点进行随机拓扑排序；(2) 按照该顺序，以固定的边概率添加有向边；(3) 通过添加一条符合拓扑序的边，连接不连通分量（如果存在）。对于干预机制，以概率 p_{interv} （默认值为 0.4）独立采样一部分非根节点作为干预目标。

数据集生成 给定 一个图和干预目标，我们使用机制
- 特定的因果机制。

因果机制。 按照 DCDI 合成数据生成设置，为每个具有父节点 X 的节点 y 分配以下因果机制之一，将其父变量映射为其取值。W 表示随机初始化的权重矩阵，ε表示一个独立的噪声变量：

- **线性：** $y = XW + \varepsilon$
- **多项式：** $y = W_0 + XW_1 + X^2W_2 + \times\varepsilon$
- **Sigmoid:** $y = \sum_{i=1}^{d} W_i \cdot \text{sigmoid}(X_i) \ + \times\varepsilon$
- **随机初始化神经网络（NN）：** $y = \text{Tanh}((X, \varepsilon)W_{in})W_{out}$
- **随机初始化加性神经网络（NN additive）：** $y = \text{Tanh}(XW_{in})W_{out} + \varepsilon$

同样，根节点因果机制和噪声变量采用了 DCDI 默认设置：

- 根节点值从均匀分布（-2,2）中采样。
- 每个节点和机制的噪声变量均独立采样自 $\varepsilon \sim 0.4 \cdot \mathcal{N}(0,\ \sigma^2)$，其中 $\sigma^2 \sim$均匀分布(1，2)。

软干预。为生成两种对比机制，我们对随机选取的非根节点子集施加软干预。在观测情形下，我们仅使用没有干预的机制。
软干预通过从参数范围经过调整的同一分布中采样干预节点的机制权重来实现，同时保持噪声分布不变。非干预节点保留其原始权重分布。因此，两种机制共享相同的底层图，但条件分布有所不同。

训练和测试数据集。训练数据集由 512 个独立生成的图组成，这些图的节点数和边数各不相同，且 $S = 10,\ 000$。验证集和测试集各包含 10 个图。
在分布外设定中，训练数据集通过对每个节点的线性、神经网络和神经网络加性机制进行均匀采样生成；多项式和 Sigmoid 机制则留出，仅用于验证集和测试集。对于分布内实验，我们仅使用多项式机制生成训练、验证和测试数据集。

为确保可复现性，每个数据集均固定随机种子。

J 扩展结果

J.1 指标

在基准测试中，我们报告以下标准因果发现指标：

SHD 结构汉明距离计算将预测图转换为真实图所需的边添加、删除和反转次数，数值越低表示性能越好。我们对验证数据集中的所有图的 SHD 取平均值。

精确率、召回率和 F1分数针对有向邻接图中的每种边类型（无边、有边）分别计算，并在验证集中的所有图上取平均值。

J.2 基准测试结果

下面给出附录 J.1 中所有指标的完整实验结果。请注意，我们使用所有基线方法的公开实现，并采用其默认超参数和推荐设置。由于 AVICI 和 SEA 均声称无需额外微调，因此我们没有对这两种方法进行额外的超参数搜索或针对各数据集的微调。SEA 的公开实现包含尚未解决的运行时错误，我们在开展实验前修复了这些错误。SCONE 未进行超参数搜索。

分布内基准测试 在分布内设置中，所有训练、验证和测试图均使用多项式因果机制生成。在包含 20 个节点和 20 条边的 10 个图上评估结构恢复。对各图的结果取均值，并使用精确率、召回率、F1 分数和 SHD 进行评估（图 3、表 4）。

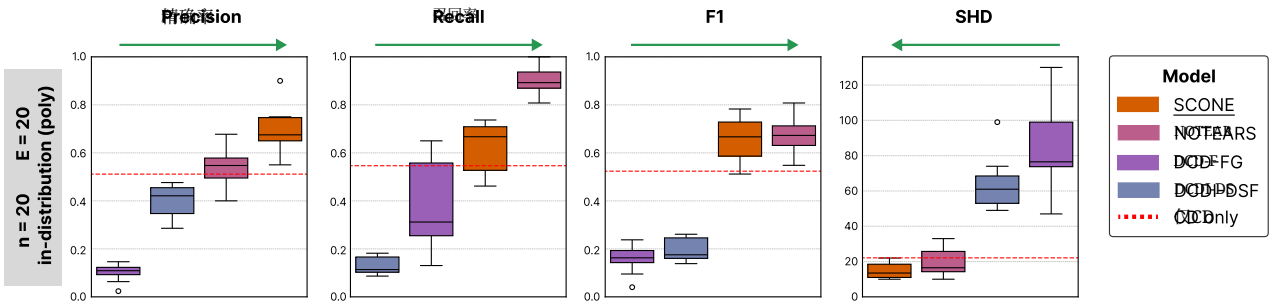

图 3：仅执行分布内图预测的最先进方法在包含 20 个节点和 20 条边的图上的精确率、召回率、F1 分数和 SHD。使用多项式机制生成了 10 个图。水平红色虚线表示仅运行 Polynomial-BIC 基线得到的预测在 10 个图上的均值。

模型	SHD ↓	F1 ↑	精确率 ↑	召回率 ↑
SCONE	**14.6** ± 4.4	0.655 ± 0.094	**0.694** ± 0.098	0.624 ± 0.106
NOTEARS	19.7 ± 7.9	**0.675** ± 0.073	0.544 ± 0.081	**0.899** ± 0.058
DCDI-DSF	63.9 ± 14.9	0.195 ± 0.048	0.396 ± 0.069	0.130 ± 0.036
DCD-FG	86.7 ± 25.1	0.157 ± 0.057	0.101 ± 0.035	0.377 ± 0.190
POLY-BIC CD	22.1	0.524	0.511	0.546

表 4：在包含 $N = 20$ 个节点和 $E = 20$ 条边的多项式分布内图上对因果发现方法的比较。结果取自 10 个图的平均值（均值 ± 标准差）。

分布外泛化基准测试 接下来，我们评估模型对未见因果机制的泛化能力。在此设置下，生成训练数据集时，节点级机制从线性、神经网络和神经网络加性族中采样；评估则在使用留出的机制 Sigmoid 和多项式生成的图上进行。此外，我们改变图密度（20 个节点，分别有 20 条和 30 条边）和图规模（50 个节点和 50 条边），以评估能够扩展至这些设置的方法在结构变化下的鲁棒性。各设置的结果见图4和表5。

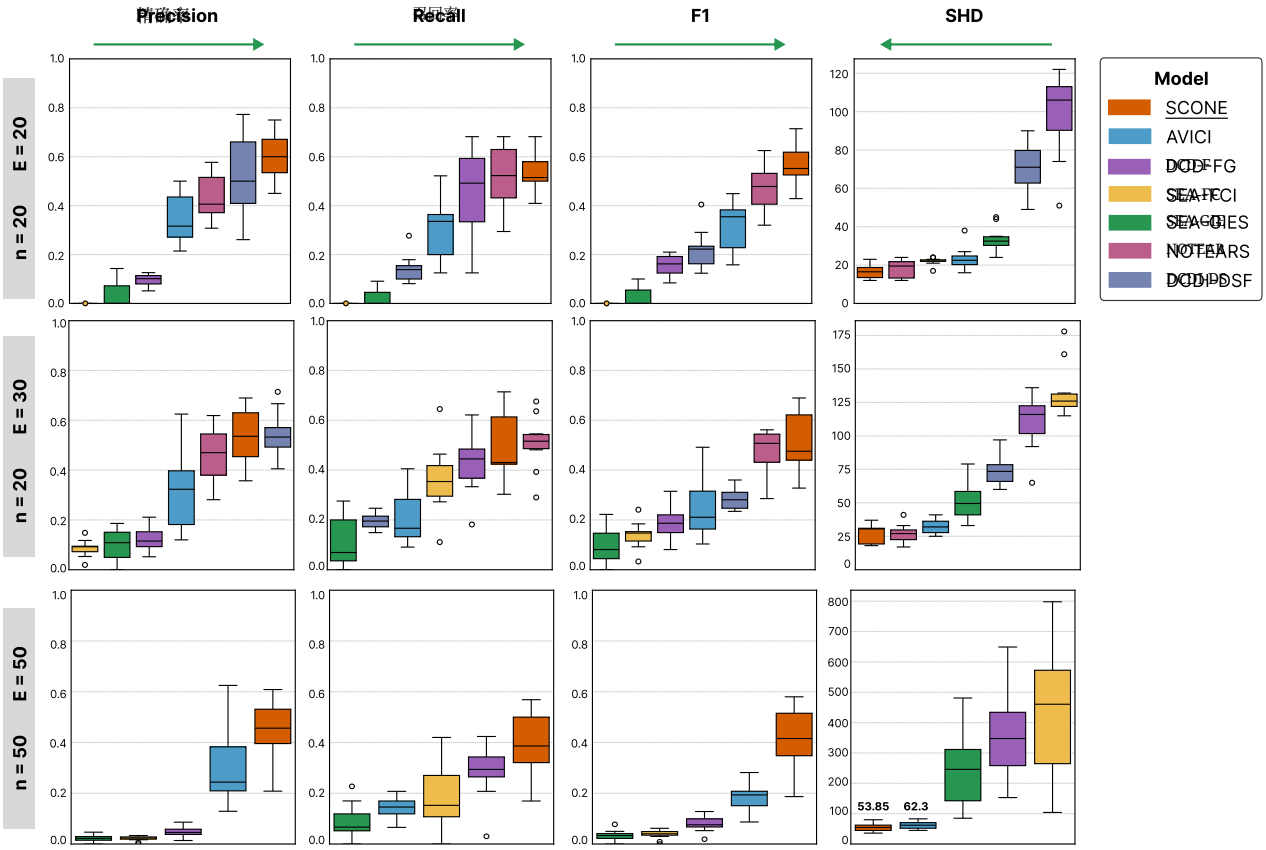

图4：最先进方法与 SCONE 在预测 10 个含 20 个节点、20 条边的图，10 个含 20 个节点、30 条边的图，以及 20 个含 50 个节点、50 条边的图时的精确率、召回率、F1分数和 SHD。对于含 20 个节点、20 条边的示例，SEA-FCI 的精确率、召回率和 F1分数均为 0.0，并以坐标轴底部的圆圈表示。

N	E	模型	SHD ↓	F1 ↑	精确率 ↑	召回率 ↑
20	20	SCONE	**16.3** $\pm$ 3.7	**0.571** $\pm$ 0.098	**0.610** $\pm$ 0.110	**0.537** $\pm$ 0.091
		AVICI	23.3 $\pm$ 6.2	0.319 $\pm$ 0.099	0.346 $\pm$ 0.098	0.310 $\pm$ 0.127
		NOTEARS	18.0 $\pm$ 4.6	0.468 $\pm$ 0.105	0.434 $\pm$ 0.091	0.517 $\pm$ 0.139
		DCD-FG	98.8 $\pm$ 22.2	0.155 $\pm$ 0.044	0.096 $\pm$ 0.024	0.450 $\pm$ 0.183
		DCDI-DSF	70.3 $\pm$ 13.5	0.221 $\pm$ 0.082	0.512 $\pm$ 0.181	0.142 $\pm$ 0.057
		SEA（FCI）	21.9 $\pm$ 2.0	0.000 $\pm$ 0.000	0.000 $\pm$ 0.000	0.000 $\pm$ 0.000
		SEA（GIES）	33.5 $\pm$ 6.7	0.027 $\pm$ 0.038	0.038 $\pm$ 0.055	0.023 $\pm$ 0.032
20	30	SCONE	**26.700** $\pm$ 7.119	**0.513** $\pm$ 0.124	0.536 $\pm$ 0.114	0.495 $\pm$ 0.137
		AVICI	32.6 $\pm$ 5.7	0.243 $\pm$ 0.119	0.312 $\pm$ 0.153	0.205 $\pm$ 0.102
		NOTEARS	26.900 $\pm$ 7.031	0.478 $\pm$ 0.090	0.462 $\pm$ 0.113	**0.509** $\pm$ 0.110
		DCD-FG	110.9 $\pm$ 20.9	0.187 $\pm$ 0.065	0.121 $\pm$ 0.047	0.425 $\pm$ 0.119
		DCDI-DSF	74.3 $\pm$ 10.985	0.284 $\pm$ 0.044	**0.545** $\pm$ 0.092	0.194 $\pm$ 0.031
		SEA（FCI）	132.7 $\pm$ 20.5	0.139 $\pm$ 0.055	0.086 $\pm$ 0.035	0.364 $\pm$ 0.139
		SEA（GIES）	51.4 $\pm$ 15.0	0.094 $\pm$ 0.077	0.096 $\pm$ 0.068	0.109 $\pm$ 0.102
50	50	SCONE	**53.85** $\pm$ 11.60	**0.424** $\pm$ 0.102	**0.455** $\pm$ 0.102	**0.398** $\pm$ 0.103
		AVICI	62.3 $\pm$ 11.9	0.188 $\pm$ 0.050	0.299 $\pm$ 0.128	0.142 $\pm$ 0.036
		DCD-FG	373.95 $\pm$ 149.6	0.082 $\pm$ 0.027	0.049 $\pm$ 0.019	0.294 $\pm$ 0.087
		SEA（FCI）	439.25 $\pm$ 198.0	0.039 $\pm$ 0.015	0.023 $\pm$ 0.008	0.184 $\pm$ 0.114
		SEA（GIES）	242.10 $\pm$ 109.3	0.033 $\pm$ 0.016	0.022 $\pm$ 0.010	0.084 $\pm$ 0.060

表5：不同图规模下因果发现方法的比较。结果分别对 $N = 20$ 个图和$N = 50$ 个图取均值（均值 $\pm$ 标准差）。

更大图的可扩展性我们在包含 100 个节点和 100 条边的图上评估可扩展性。结果取 20 个图的均值，见表6。与所有基线方法相比，SCONE 的 SHD 最低，F1分数和精确率显著更高。相比之下，DCD-FG 和 SEA（FCI）会预测出稠密图，导致召回率虚高，但精确率较低且 SHD 较大。

模型	SHD ↓	F1 ↑	精确率 ↑	召回率 ↑
SCONE	**126.7** $\pm$ 25.0	**0.237** $\pm$ 0.046	**0.345** $\pm$ 0.074	0.186 $\pm$ 0.046
AVICI	131.3 $\pm$ 18.0	0.100 $\pm$ 0.042	0.210 $\pm$ 0.082	0.068 $\pm$ 0.031
DCD-FG	1001.3 $\pm$ 537.9	0.052 $\pm$ 0.011	0.030 $\pm$ 0.008	0.230 $\pm$ 0.076
SEA（FCI）	3178.8 $\pm$ 425.2	0.022 $\pm$ 0.004	0.012 $\pm$ 0.002	**0.325** $\pm$ 0.056
SEA（GIES）	1797.2 $\pm$ 296.6	0.022 $\pm$ 0.004	0.012 $\pm$ 0.002	0.185 $\pm$ 0.044

表6：SHD 比较，结果是对20个g求平均 在具有 $N = 100$ 个节点和 $E = 100$ 条边的图上，因果发现方法的F1分数、精确率和召回率 raphs（均值 $\pm$ 标准差）。

偏置头消融 我们通过比较 SCONE 与移除偏置头后的 SCONE-NB，评估对比偏置头（SSI、CVT、DPT）的贡献。表7报告了20节点40边和50节点50边图的结果，每种设置均对20个图取平均。

N	E	模型	SHD ↓	F1 ↑	精确率 ↑	召回率 ↑
20	40	**SCONE**	**39.0** $\pm$ 9.7	**0.469** $\pm$ 0.143	**0.473** $\pm$ 0.138	**0.466** $\pm$ 0.153
		SCONE-NB	39.6 $\pm$ 9.0	0.453 $\pm$ 0.123	0.460 $\pm$ 0.126	0.449 $\pm$ 0.125
50	50	**SCONE**	**53.85** $\pm$ 11.60	**0.424** $\pm$ 0.102	**0.455** $\pm$ 0.102	**0.398** $\pm$ 0.103
		SCONE-NB	56.60 $\pm$ 10.79	0.393 $\pm$ 0.092	0.424 $\pm$ 0.094	0.368 $\pm$ 0.092

表 7：SCONE 在使用和不使用定向规则时的比较。 $N = 20$ 的结果取 10 个图的均值， $N = 50$ 的结果取 20 个图的均值（均值 $\pm$ 标准差）。SCONE-NB 消融了对比偏置头。

对比特征消融 我们对重参数化、对比采样、边嵌入成对统计量等对比特征进行消融（SCONE-NC），以通过实证验证不变性/对比对于恢复更多边的重要性。20节点40边和50节点50边图的结果均对20个图取平均，并列于表8。

N	E	模型	SHD ↓	F1 ↑	精确率 ↑	召回率 ↑
20	40	**SCONE**	**39.0** $\pm$ 9.7	**0.469** $\pm$ 0.143	**0.473** $\pm$ 0.138	**0.466** $\pm$ 0.153
		SCONE-NC	48.6 $\pm$ 9.3	0.341 $\pm$ 0.136	0.350 $\pm$ 0.136	0.335 $\pm$ 0.139
50	50	**SCONE**	**53.85** $\pm$ 11.60	**0.424** $\pm$ 0.102	**0.455** $\pm$ 0.102	**0.398** $\pm$ 0.103
		SCONE-NC	66.55 $\pm$ 9.1	0.322 $\pm$ 0.076	0.350 $\pm$ 0.076	0.300 $\pm$ 0.077

表8：比较 SCONE 在有无对比特征时的表现。 $N = 20$ 的结果取自 10 个图的均值， $N = 50$ 的结果取自 20 个图的均值（均值 $\pm$ 标准差）。SCONE-NC 消融了模型中的对比特征。