

doi: 10.7690/bgzdh.2026.04.015

# 基于 GNN-LLM 的复杂系统抽象网络根因分析方法

刘雪峰, 刘家豪, 范波, 谢佳, 刘治红

(中国兵器装备集团自动化研究所有限公司长沙分公司, 长沙 410000)

**摘要:** 针对传统因果推断方法在根因分析中难以有效建模多维指标间的非线性依赖, 且可解释性低等问题, 提出一种融合图神经网络 (graph neural network, GNN) 与大语言模型 (large language model, LLM) 的因果溯源框架。将复杂装备和系统等对象建模为对等抽象网络, 通过单节点与全图级别的因果分析策略, 结合 GNN 的结构建模能力与 LLM 的知识推理能力, 构建自系统级到干预级的多层次解释体系。仿真网络数据集结果显示: 在无需先验知识的情况下, 该方法实现了具有竞争力的预测性能与更强的解释能力, 其中全图因果溯源在保持高精度 (MSE=0.042 8) 的同时提供全局关系视角, 结合真实先验的模型在误差指标上最优。结果表明, 该方法不仅拓展了大模型在复杂系统根因分析中的应用边界, 而且为智能运维与异常诊断提供了一条可扩展且具备解释性的技术路径。

**关键词:** 复杂系统; 因果溯源; 图神经网络; 大语言模型; 根因分析

**中图分类号:** TP183 **文献标志码:** A

## Root Cause Analysis Method for Abstract Network of Complex Systems Based on GNN-LLM

Liu Xuefeng, Liu Jiahao, Fan Bo, Xie Jia, Liu Zhihong

(Changsha Branch, Automation Research Institute Co., Ltd. of China South Industries Group Corporation, Changsha 410000, China)

**Abstract:** In order to solve the problem that the traditional causal inference method is difficult to effectively model the nonlinear dependence between multi-dimensional indicators in root cause analysis, and the interpretability is low, a fusion of graph neural network (GNN) and large language model (LLM) causal traceability framework are proposed. Complex equipment and systems are modeled as peer-to-peer abstract networks, and a multi-level explanation system from system level to intervention level is constructed through the causal analysis strategy of single node and full graph level, combined with the structural modeling ability of GNN and the knowledge reasoning ability of LLM. The results of simulation network datasets show that the proposed method achieves competitive prediction performance and stronger explanatory power without prior knowledge, in which the full graph causal traceability provides a global relationship perspective while maintaining a high accuracy (MSE = 0.042 8), and the model combined with the true prior is optimal in the error index. The results show that this method not only expands the application boundary of large model in the root cause analysis of complex systems, but also provides an extensible and interpretable technical path for intelligent operation and maintenance and anomaly diagnosis.

**Keywords:** complex systems; causal tracing; graph neural networks; large language models; root cause analysis

## 0 引言

随着信息技术的发展, 现代复杂系统在规模、结构和功能上日益庞大, 如无人机集群、电力物联网和智慧交通系统。这类系统涉及多源异构数据与高动态环境, 具有强耦合和非线性特征, 局部异常易引发级联故障, 导致整体性能退化甚至失效<sup>[1]</sup>; 因此, 实现高效、精准且可解释的根因分析至关重要。

传统方法多依赖经验或相关性建模 (如规则关联、聚类、时间序列预测), 难以揭示潜在因果机制。因果推断通过因果图可直观刻画变量间关系, 追踪

故障传播路径并定位根因, 但在真实应用中面临统计假设难满足、高维计算复杂、因果方向判别不可靠等挑战。

近年来, 大语言模型 (LLM) 展现出跨领域知识推理与解释生成优势, 可辅助因果图构建并生成专家可理解的诊断解释, 但其在结构化数据建模与因果强度量化方面仍存在不足。相比之下, 图神经网络 (GNN) 擅长捕捉复杂系统中的结构依赖关系, 却缺乏可解释性。二者具有互补性: LLM 侧重知识与语义解释, GNN 侧重模式挖掘与结构建模。笔者提出一种融合 LLM 与 GNN 的复杂系统因果溯源框

收稿日期: 2024-12-02; 修回日期: 2025-01-15

基金项目: 国防科工局基础科研项目 (JCKY2023009C004); 四川省科技计划项目 (2024NSFTD0049); 四川省科技成果转化示范项目 (2024ZHCG0002)

第一作者: 刘雪峰 (1999—), 男, 山西人, 硕士。

架，探索大模型驱动的因果推理方法，推动复杂系统智能运维的高效诊断与发展。

### 1 研究现状

在复杂系统智能运维的研究中，因果推断与大模型的结合正受到越来越多的关注。相关研究可分为：1) 基于因果推断理论的方法，强调利用图结构与统计检验揭示变量之间的因果关系；2) 基于大模型的方法，强调利用 LLM 的语言理解与知识推理能力提升诊断的智能化与解释性。

在因果推断方面，Pearl<sup>[2]</sup>提出的结构因果模型 (structural causal model, SCM) 为因果分析奠定了理论基础，随后 PC、GES 与 LiNGAM 等方法<sup>[3-5]</sup>被广泛应用于因果发现。这些方法在大规模、噪声复杂的场景下效率和适用性不足。目前，因果推断逐渐结合时序建模，如 Granger 因果扩展及因果图与贝叶斯网络的融合<sup>[6-7]</sup>，但仍依赖严格的统计假设，难以直接适应复杂系统。

在大语言模型方面，从 BERT 到 GPT 系列<sup>[8]</sup>再到 LLaMA3<sup>[9]</sup>，LLM 展现出强大的语言理解与推理能力。研究者尝试将其引入因果推理：或通过提示工程与专门训练提升因果关系识别能力<sup>[10-11]</sup>，或在应用层面用于多变量时序诊断，结合 GNN 实现结构建模与自然语言解释<sup>[12-13]</sup>。部分研究进一步探

讨了其因果知识学习的潜力与不足<sup>[14]</sup>，并总结了与图方法融合的发展趋势<sup>[15]</sup>。

在复杂系统应用中，已有工作探索 LLM 与图技术结合，如 Think-on-Graph 框架用于关系建模与推理<sup>[16]</sup>，Data-Juicer 则面向多源异构数据处理<sup>[17]</sup>。这些研究显示了 LLM 与图方法融合的可行性，但也存在挑战：LLM 处理结构化数据的能力有限，GNN 虽能捕捉因果结构却缺乏语义解释，二者融合机制尚不完善。

综上，因果推断方法与 LLM 各具优势却难以独立满足复杂系统根因分析需求。融合 LLM 的语义推理与 GNN 的结构建模，是当前亟待解决的方向。

### 2 基于大模型的复杂系统根因分析

#### 2.1 算法总体架构

笔者提出一种融合图神经网络与大语言模型的分层因果溯源框架在方法上支持单节点与全局因果分析，识别直接与间接因果路径；在机制上通过 LLM 增强 GNN 结果的知识推理与解释生成，构建多层次解释体系；在应用上无需严格先验假设即可实现可扩展、可解释的根因诊断。

整体系统主要由数据处理层、因果发现层、知识融合层和应用层 4 个层次构成，如图 1 所示。

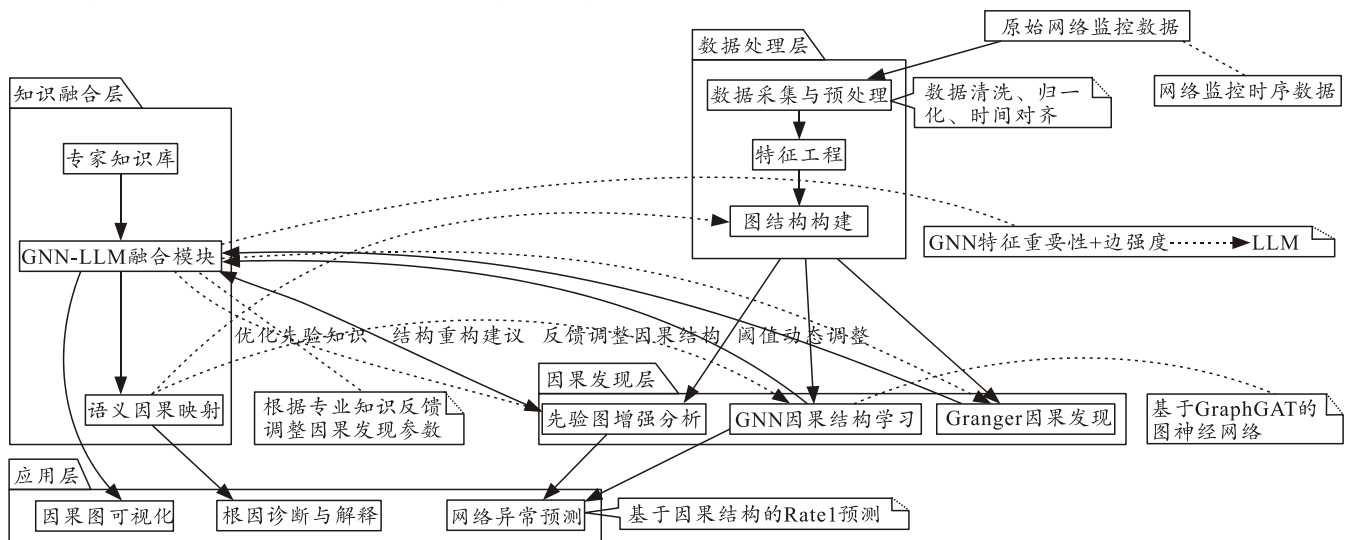


图 1 基于 LLM 的复杂系统因果溯源算法架构

数据处理层负责对监测数据进行清洗、标准化与归一化，并构建适合图建模的拓扑结构，保证后续因果建模的可信性。因果发现层融合 Granger 因果检验与图神经网络方法，识别变量间的时序依赖与非线性关系，并结合先验知识提升因果图的鲁棒性与精度。知识融合层是将 GNN 输出的因果关系

转化为提示输入 LLM，借助其语义理解与推理能力生成自然语言解释，并通过反馈机制修正因果发现结果，实现因果—解释的协同优化。应用层是面向运维需求，提供根因诊断、因果可视化与预测功能，将复杂因果网络转化为直观、可操作的决策信息。

该分层设计实现了从数据预处理、因果建模到

知识解释与应用的完整链条，为复杂系统的根因分析提供了可扩展且可解释的解决方案。

### 2.2 单节点因果溯源算法设计

单节点因果溯源旨在识别目标变量的直接与间接因果来源，并揭示异常产生机制及潜在干预路径。算法建立在结构因果模型与图表示学习的理论上，将系统变量建模为有向图节点，边表示因果关系。通过对该图结构的学习，模型能够有效区分真实根因与伪相关，避免误判。单节点因果溯源算法架构如图 2 所示。

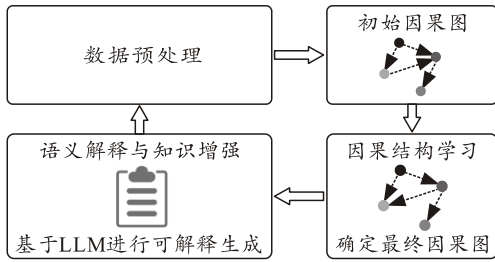


图 2 单节点因果溯源算法架构

由图 2 可见，整体流程包括 4 个核心步骤：1) 数据预处理，完成特征归一化与标准化；2) 初始因果图构建，基于时序相关性筛选潜在因果边；3) 因果结构学习，采用多层多头 GAT 提取因果强度并捕捉非线性依赖；4) 语义解释与知识增强，利用 LLM 将因果结果转化为可理解的解释，并通过反馈机制优化因果图。

与传统方法相比，该算法具备优势为：能够捕捉复杂非线性因果关系，提供语义化可解释输出，并通过解释—发现闭环提升因果识别的稳定性。

### 2.3 全图因果溯源算法设计

全图因果溯源是复杂系统根因分析中最具挑战性的一环。与单节点因果溯源不同，它不再局限于对某个目标变量的局部因果剖析，而是要求对系统中所有节点之间的相互作用进行整体建模与推理。整体算法框架，由初始图构建、图注意力学习、因果图生成与多维解释层 4 个核心环节组成。

#### 2.3.1 初始图构建

初始图构建是全图因果溯源的基础步骤，其任务是从原始多变量时序数据中挖掘潜在因果关联，并以图的形式表示出来。在复杂系统中，节点之间的相互作用隐含在观测数据的统计关系之中。笔者通过相关性分析与自适应阈值策略筛选潜在因果边，以保证因果结构的稀疏性与合理性。设系统中共有  $n$  个变量，观测时长为  $T$ ，其多变量时间序列

数据记为  $X \in R(T \times n)$ 。对于任意 2 个变量  $x_i$  与  $x_j$ ，首先通过皮尔逊相关系数衡量其统计依赖：

$$r_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^T (x_i(t) - \bar{x}_i)(x_j(t) - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{t=1}^T (x_i(t) - \bar{x}_i)^2} \sqrt{\sum_{t=1}^T (x_j(t) - \bar{x}_j)^2}} \quad (1)$$

采用自适应阈值方法对其进行稀疏化，剔除噪声边和弱相关边，仅保留显著的候选因果关系。不仅减少了后续计算的开销，而且避免了过拟合。值得注意的是，相关性本身并不能完全代表因果关系，因此初始图仅作为候选结构，需要在后续的图神经网络学习中进一步修正和细化。

#### 2.3.2 图注意力学习

在初始图的基础上，笔者使用图注意力网络 (graph attention network, GAT) 对候选因果结构进行进一步建模与优化。注意力机制的引入，使得模型能够为不同邻居分配差异化的权重，从而更准确地捕捉复杂系统中非均匀的依赖关系。在第  $l$  层网络中，节点  $i$  与其邻居节点  $j$  的注意力系数计算为：

$$\alpha_{ij}^{(l)} = \frac{\exp(\text{LeakyReLU}(\mathbf{a}^T [\mathbf{W}h_i^{(l)} \parallel \mathbf{W}h_j^{(l)}]))}{\sum_k \exp(\text{LeakyReLU}(\mathbf{a}^T [\mathbf{W}h_i^{(l)} \parallel \mathbf{W}h_k^{(l)}]))} \quad (2)$$

式中： $\alpha_{ij}^{(l)}$  为注意力系数； $\mathbf{a}$  为注意力权重向量； $T$  为转置； $\mathbf{W}$  为权重矩阵； $l$  为网络层索引。

节点特征通过加权聚合进行更新：

$$h_i^{(l+1)} = \sigma \left( \sum_j \alpha_{ij}^{(l)} \mathbf{W}h_j^{(l)} \right) \quad (3)$$

式中  $\sigma(\cdot)$  为非线性激活函数。通过多层堆叠与多头注意力机制，GAT 能够学习到跨越多跳的因果依赖关系，并生成一个全局的因果强度矩阵。

#### 2.3.3 因果图生成

在得到注意力强度矩阵后，需要进一步提取显著因果边并构建最终的因果图。笔者采用阈值化方法：

$$w_{ij} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \alpha_{ij} > \theta \\ 0 & \alpha_{ij} \leq \theta \end{cases} \quad (4)$$

式中： $\theta$  为自适应阈值； $\alpha_{ij}$  为学习得到的注意力权重。若  $\alpha_{ij} > \theta$ ，则判定存在从节点  $j$  到节点  $i$  的因果边，并将  $\alpha_{ij}$  作为其因果强度。将复杂的注意力矩阵转化为具有明确边权的因果图结构。

#### 2.3.4 多维解释层

在因果图构建完成之后，笔者进一步设计了多

维解释层，将数值化的因果关系转化为人类可理解的自然语言解释。多维解释包括系统级、节点级、路径级和干预级 4 个层次。

系统级，模型能够总结整体因果网络的结构特征，如关键团簇、核心节点与全局稳定性；节点级，能够解释某特定变量的入度与出度因果强度，从而定位关键因子；路径级，能够揭示异常从源节点传播到目标节点的完整链条，为理解复杂传播机制提供依据；干预级，模型通过反事实推理回答“如果对某个节点施加干预，系统将如何变化”的问题。

在结构因果模型框架下，若对变量施加外部干预  $[\cdot]_{is} \cdot \delta$ ，其对目标变量  $x_t$  的效应可表示为：

$$\Delta x_t = [(I - W^T)^{-1}]_{ts} \cdot \delta. \quad (5)$$

式中： $W$  为因果邻接矩阵； $(I - W^T)^{-1}$  为因果效应在全图中的传播机制。通过结合大语言模型的自然语言生成能力，这一反事实分析能够转化为直观、可解释的因果解释，并用于因果发现过程的反向优化。

### 3 实验测试与结果评估

笔者对上述提出的基于 GNN 与 LLM 融合的复杂系统因果溯源方法进行实验与评估。实验设计分为：1) 单节点因果溯源实验，主要用于验证方法在局部场景下的有效性和可解释性，为全图分析提供基准与对照；2) 全图因果溯源实验，重点刻画系统范围内的因果结构与复杂依赖关系，并评估算法在全局层面的扩展性与解释能力。通过 2 类实验的对比，可以全面展示所提框架从局部到整体、从因果发现到多维解释的多层次优势。

#### 3.1 数据集说明

为验证所提方法的有效性与普适性，笔者选择天地空一体化网络 (space-air-ground integrated network, SAGIN) 作为实验场景，并基于 NS3 仿真平台构建包含 10 个节点组的多层级通信系统。仿真过程中设计了多频段、多链路和复杂拓扑交互，采

集了超过 1 000 个时间点的多维时序数据。主要指标涵盖处理能力 (P 系列)、负载 (G 系列)、时延 (d 系列)、链路可用性 (la 系列)、邻接关系 (Nb 系列) 及吞吐率 (Rate 系列)。这些数据不仅反映了节点性能，而且揭示了物理层与逻辑层之间的因果传播路径 (如带宽和功率影响信噪比，进而影响速率)，并可通过因果图进行层次化映射。

#### 3.2 试验步骤

实验总体流程包括数据预处理、因果发现、因果图构建与解释生成 4 阶段。数据预处理主要完成原始特征经归一化并按时间序列划分为训练集和测试集以保证量纲一致和验证的独立性。因果发现是通过相关性分析与自适应阈值策略筛选潜在因果边，并利用 3 层多头 GAT 学习非线性依赖关系与因果强度。其中，单节点实验聚焦于目标变量构建局部因果图，全图实验则扩展至系统范围，形成全局依赖建模。因果图构建是对 GAT 输出的注意力权重应用分位数阈值筛选，生成最终的因果拓扑结构，包括局部和全局 2 类因果图。多维解释与知识增强实现因果图转化为结构化提示输入 LLM，生成系统级、节点级、路径级与干预级的自然语言解释，并通过反向修正机制增强因果图的准确性与可解释性。

#### 3.3 单节点因果溯源实验结果分析

以 Rate1 为例，模型准确识别了其因果源 (P 系列、G 系列、la 系列)，并恢复出与拓扑先验一致的关键边 (如 la1 → Rate1，因果强度约 0.67，如图 3—4 所示)，验证了方法在局部因果发现上的有效性。在预测任务中，3 种方法对比结果显示：纯数据驱动方法效果最差，GNN+真实图方法最优，而 GNN+LLM 方法在无需先验拓扑的情况下仍保持中等精度与较强的鲁棒性，如表 1 所示。整体而言，单节点实验表明所提方法能够在局部场景下稳定恢复因果关系并具备一定预测能力。

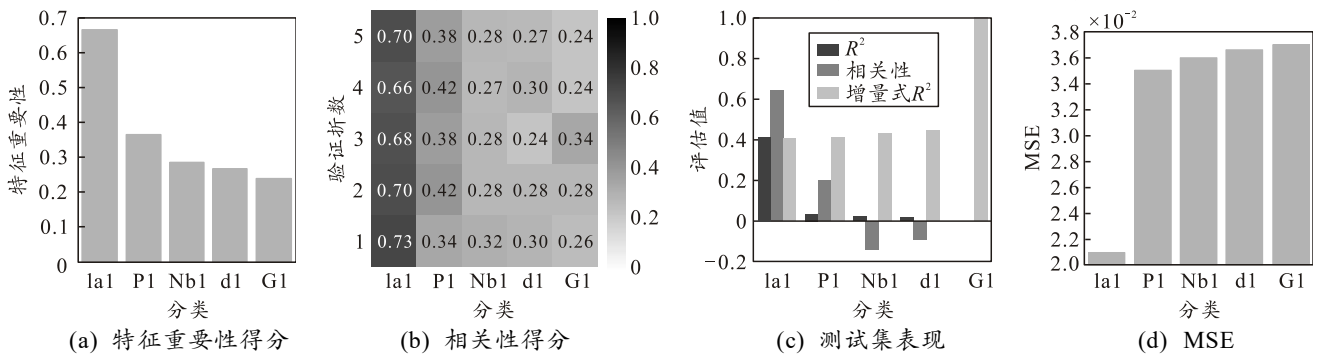


图 3 Rate1 节点因果分析结果

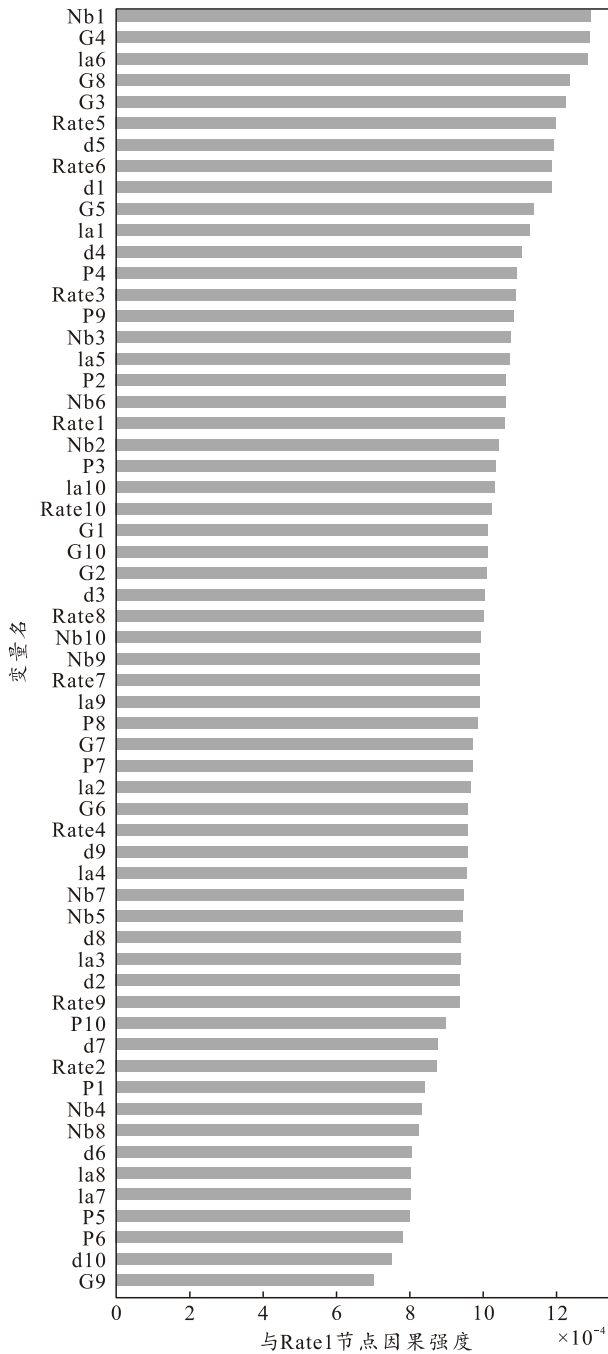


图 4 Rate1 节点因果强度矩阵分析结果

表 1 3 种不同方法实现结果数据对比

评估指标	MSE	R <sup>2</sup>	RMSE
纯数据驱动	91.10	-2 361.00	9.54
GNN+真实图	0.04	0.07	0.18
GNN+LLM	1.70	-0.70	1.30

评估指标	MAE	MAPE	Raw MSE
纯数据驱动	9.33	-	-
GNN+真实图	0.15	0.100 9	-
GNN+LLM	0.93	0.154 5	0.065 6

### 3.4 全图因果溯源实验结果分析

全图因果溯源实验结果表明，模型在训练过程中损失函数迅速下降并最终收敛，如图 5 所示。

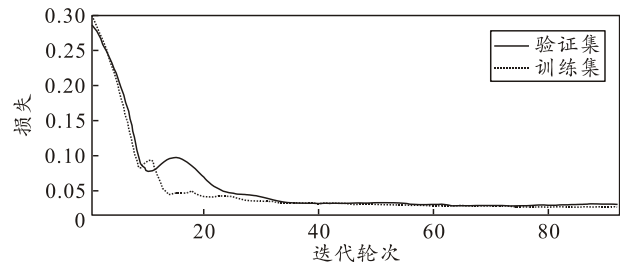


图 5 损失函数变化趋势

说明多目标 GAT 能够有效捕捉全局因果模式并保持稳定学习。因果对比如图 6—7 所示。

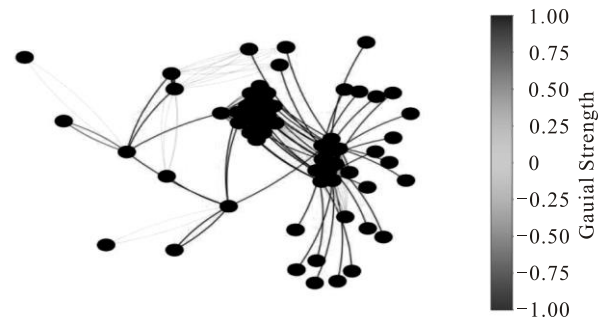


图 6 模型预测的因果图

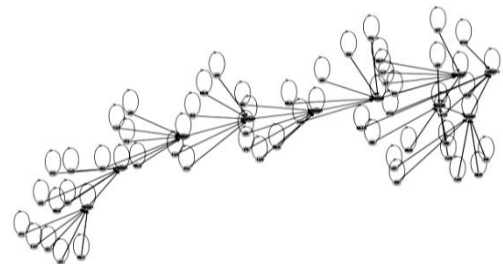


图 7 真实因果图

图 6—7 因果图对比结果显示：模型不仅准确恢复了关键因果边，而且能识别部分潜在的间接关系，其原因在于注意力机制能够刻画复杂的非线性依赖。节点预测性能进一步验证了：如 Rate3 和 Rate5 的 R<sup>2</sup> 分别达到 0.524 9 和 0.517 1，表现良好；而长链或受多上游变量共同影响的节点预测精度较低，反映出因果链复杂性对模型性能的制约如表 2 所示。

表 2 不同节点预测性能比较

目标变量	MSE	RMSE	R <sup>2</sup>
Rate1	0.042 8	0.207 0	-0.110 7
Rate2	0.319 1	0.564 9	0.048 9
Rate3	0.072 9	0.270 1	0.524 9
Rate4	0.113 4	0.336 7	0.261 4
Rate5	0.074 1	0.272 3	0.517 1
Rate6	0.086 0	0.293 3	0.439 7
Rate7	0.107 3	0.327 6	0.300 8
Rate8	0.082 7	0.287 6	0.461 3
Rate9	0.088 0	0.296 7	0.426 7
Rate10	0.085 4	0.292 2	0.443 7

在解释层面，多维解释机制能够从系统、节点、路径及干预 4 个层次提供因果解析，并结合 LLM 识

别瓶颈节点、揭示物理机制、提出干预建议。

综上，实验结果验证了所提全图因果溯源方法在复杂系统中的有效性、可解释性及抗干扰能力，为多维因果分析提供了坚实基础。

总体而言，单节点实验表明：该方法能够准确识别关键性能指标的直接与间接因果源，并通过 LLM 提供可理解的解释；全图实验进一步验证了方法在全局因果结构重建、复杂依赖关系捕捉及多层次解释能力上的有效性。综合来看，GNN 与 LLM 的融合不仅提升了因果发现的精度和鲁棒性，而且实现了从数据驱动分析到知识化解释的闭环，为复杂系统的根因分析提供了可扩展、可操作的解决方案。

#### 4 结束语

随着复杂系统规模和异构性的提升，其运行机制呈现多维度、多层次和强耦合特征，使异常根因分析面临巨大挑战。针对这一问题，笔者提出一种基于图神经网络与大语言模型融合的因果溯源方法，构建了从单节点到全局、从因果发现到多层解释的完整分析框架。该方法通过图注意力网络捕捉非线性因果关系，并结合 LLM 的语义推理能力生成可操作的因果解释，实现发现解释闭环；全图方法进一步识别系统级因果拓扑，支持多层次干预分析。实验结果表明：该方法在因果识别精度、解释能力和系统级分析方面均表现出良好性能，证明了 GNN 与 LLM 融合策略在复杂系统智能运维中的可行性与有效性，为复杂系统根因分析提供了一种可解释、可扩展的技术路径。未来工作可在计算效率优化、领域知识引入及真实系统验证等方向拓展，以进一步提升方法的实用价值和适用范围。

#### 参考文献：

- [1] 王晓庆, 陈伟, 韩彬, 等. 因果推断在网络故障诊断中的应用研究进展[J]. 软件学报, 2022, 33(2): 658-683.
- [2] PEARL J. Causality: Models, reasoning, and inference[M]. Cambridge University Press, 2009.
- [3] SHIMIZU S. LiNGAM: Non-Gaussian methods for estimating causal structures[J]. Behaviormetrika, 2014, 41(1): 65-98.
- [4] LE T D, HOANG T, LI J, et al. A fast PC algorithm for high dimensional causal discovery with multi-core PCs[J]. IEEE/ACM transactions on computational biology and bioinformatics, 2016, 16(5): 1483-1495.
- [5] GAO T, FADNIS K, CAMPBELL M. Local-to-global Bayesian network structure learning[C]//International Conference on Machine Learning. PMLR, 2017: 1193-1202.
- [6] WANG Q, RIOS J, JHA S, et al. Fault injection based interventional causal learning for distributed applications[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. AAAI, 2023, 37(13): 15738-15744.
- [7] 尹进田, 谢永芳, 陈志文, 等. 基于故障传播与因果关系的故障溯源方法及其在牵引传动控制系统中的应用[J]. 自动化学报, 2020, 46(1): 47-57.
- [8] OpenAI. OpenAI-ChatGPT [EB/OL]. [2025-02-25]. <https://chatgpt.com>.
- [9] GRATTAFIORI A, DUBEY A, JAUHRI A, et al. The llama 3 herd of models[J/OL]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2407.21783>, 2024.
- [10] ZHANG J W. Graph-toolformer: To empower llms with graph reasoning ability via prompt augmented by chatgpt[J/OL]. [2023-4-10]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.11116>, 2023.
- [11] KICIMAN E, NESS R O, SHARMA A, et al. Causal Reasoning and Large Language Models: Opening a New Frontier for Causality[J/OL]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.00050>.
- [12] JIA F, WANG K, ZHENG Y X, et al. Gpt4mts: Prompt-based large language model for multimodal time-series forecasting[C]//the AAAI Conference on Artificial Intelligence. AAAI, 2024: 23343-23351.
- [13] LI Z, TU Y, MA Z. Root cause analysis of anomalies based on graph convolutional neural network[J]. Software Engineering and Knowledge Engineering, 2022, 32(8): 1155-1177.
- [14] KHATIBI E, ABBASIAN M, YANG Z Q, et al. Alcm: Autonomous llm-augmented causal discovery framework[J/OL]. [2024-5-2] <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.01744>.
- [15] LI Y, LI Z, WANG P, et al. A survey of graph meets large language model: Progress and future directions[C]//the 33 International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI -24). IJCAI, 2024: 8123-8131..
- [16] SUN J, XU C, TANG L, et al. Think-on-graph: Deep and responsible reasoning of large language model on knowledge graph[C]//ICLR2024. Vienna, Austria, 2024.
- [17] CHEN D Y, HUANG Y L, MA Z J, et al. Data-Juicer: a one-stop data processing system for large language models[C]//Companion of the 2024 International Conference on Management of Data: SIGMOD '24. Santiago, Chile: Association for Computing Machinery, 2024: 120-134.