

Quantile-Free Uncertainty Quantification in Graph Neural Networks

CNU-UNIST 교류 워크샵



Index

I. Problem

II. Solution

III. Results

IV. Conclusion

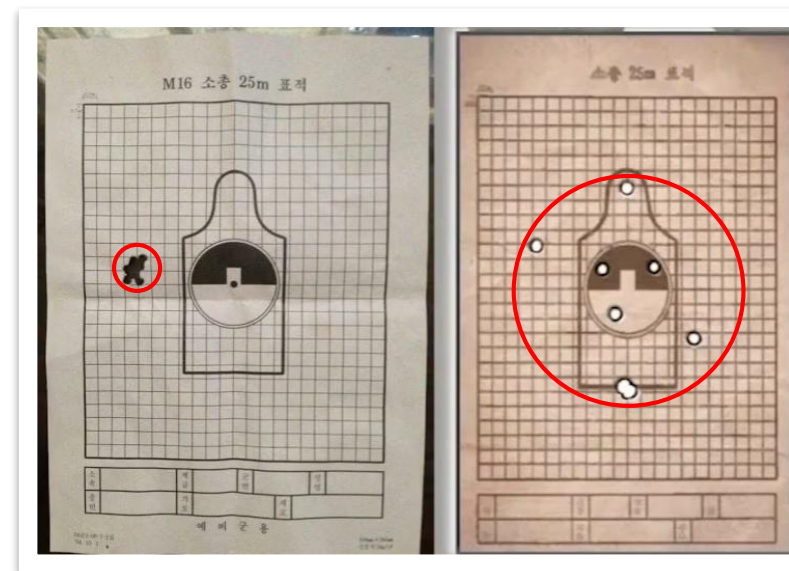
Problem

Quantile-Free Uncertainty Quantification in Graph Neural Networks

Problem

불확실성의 중요성

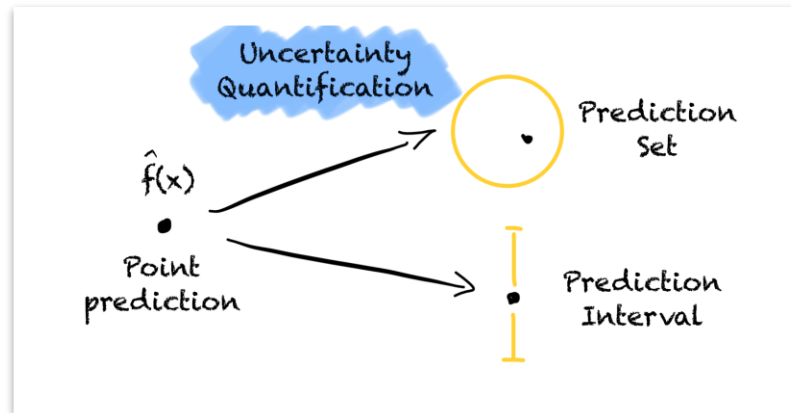
- 유용한 모델이란?
 - 정확도와 불확실성을 동시에 고려하는 모델
- 정확도 (Accuracy)
 - 예측값이 실제값에 얼마나 가까운가 → 예측의 **정확성**
- 불확실성 (Uncertainty)
 - 정보의 한계로 인해 시스템의 결과를 정확히 예측할 수 없는 상태
 - 해당 예측을 얼마나 믿을 수 있는가 → 예측의 **신뢰도**



Problem

불확실성 정량화

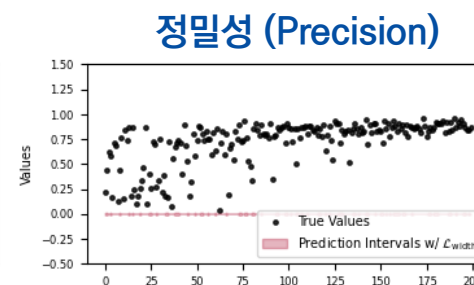
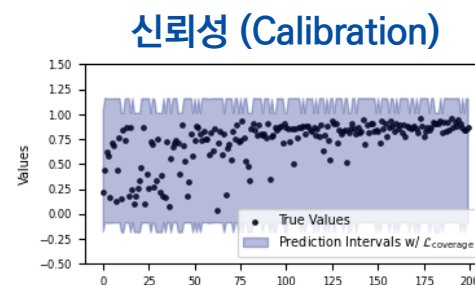
- 불확실성 정량화 (Uncertainty Quantification, UQ)
 - 존재하는 불확실성이 예측 결과에 미치는 영향을 확률이나 수치로 표현하는 과정
 - 고위험(high-stakes) 응용 분야에서 모델의 과신(overconfidence)을 방지하기 위한 필수적 방법
 - 신뢰 구간, 예측 분포, 분산, 표준편차 등으로 정량화



Problem

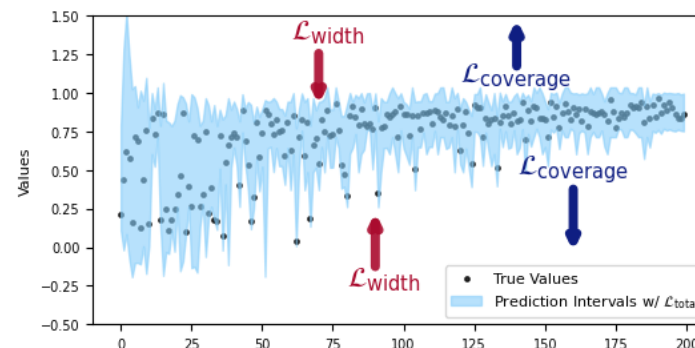
불확실성 정량화 목표

- 커버리지 (Coverage) = $\frac{1}{|\mathcal{D}_{\text{test}}|} \sum_{i \in \mathcal{D}_{\text{test}}} \mathbb{I}(y_i \in \mathcal{C}(\mathbf{x}_i))$
- 구간 폭 (Interval Width) = $|\mathcal{C}(\mathbf{x}_i)|$



UQ 목표: 신뢰성과 정밀성 모두 만족

- UQ 목표
 - 커버리지가 넓으면서 구간 폭이 좁은 예측 구간 $\hat{\mathcal{C}}(\mathbf{x}_i)$ 추정
 - $P(y_{\text{test}} \in \hat{\mathcal{C}}(\mathbf{x}_{\text{test}})) \geq 1 - \alpha$ (= target coverage)



Problem

그래프 신경망에서 불확실성 정량화 핵심 과제

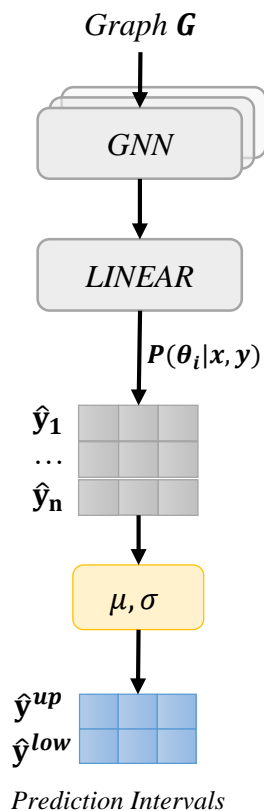
- Graph Dependency
 - 메시지 패싱으로 인해 노드 예측 간 독립성 및 교환가능성 가정이 성립하지 않음
- Node Regression
 - 회귀에서 넓은 커버리지와 좁은 예측 구간을 동시에 달성하기 어려움
- QR for GNNs
 - 최근 QR의 한계를 극복하는 SQR[1], RQR[2]이 제안되었으나, GNN에 적용된 사례는 없음
 - 분위수 추정에 의존하지 않는(quantile-free) GNN기반 UQ 프레임워크가 아직 존재하지 않음

[1] Tagasovska & Lopez-Paz, "Single-model Uncertainties for Deep Learning," NeurIPS, 2019.

[2] Pouplin et al., "Relaxed Quantile Regression: Prediction Intervals for Asymmetric Noise," ICML, 2024.

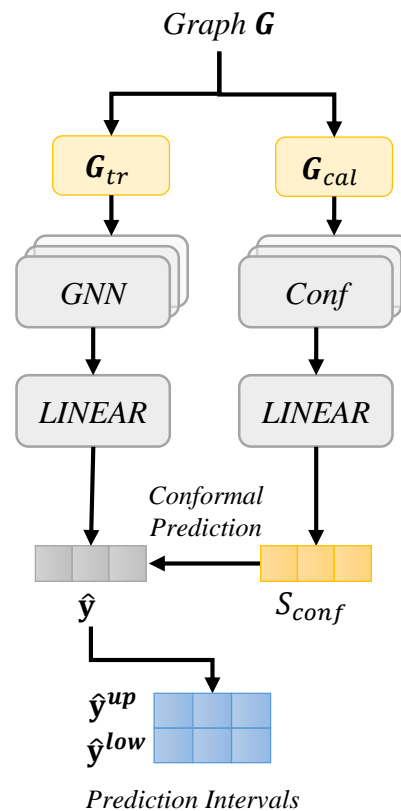
Problem

그래프 신경망에서 불확실성 정량화 방법



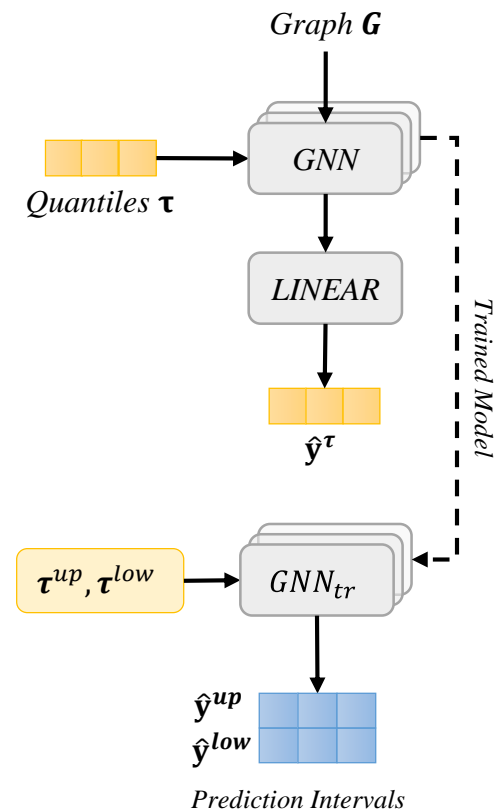
Bayesian Methods

모델 파라미터를 확률 변수로 두고
예측 분포를 직접 추정



Conformal Prediction (CP)

데이터 기반 보정(calibration) 기법을
통한 예측 구간 생성



Quantile Regression (QR)

조건부 분포의 분위수(quantile)을
직접 예측하여 구간 생성

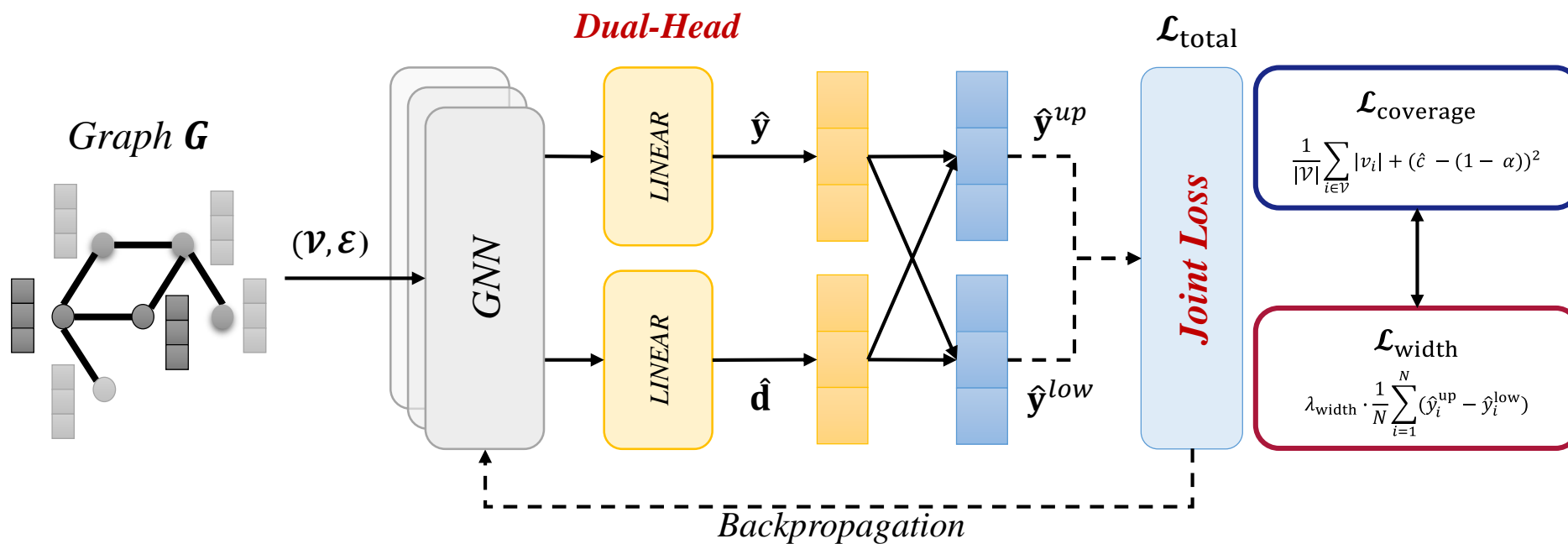
Solution

Quantile-Free Uncertainty Quantification in Graph Neural Networks

Solution

제안 방법 개요

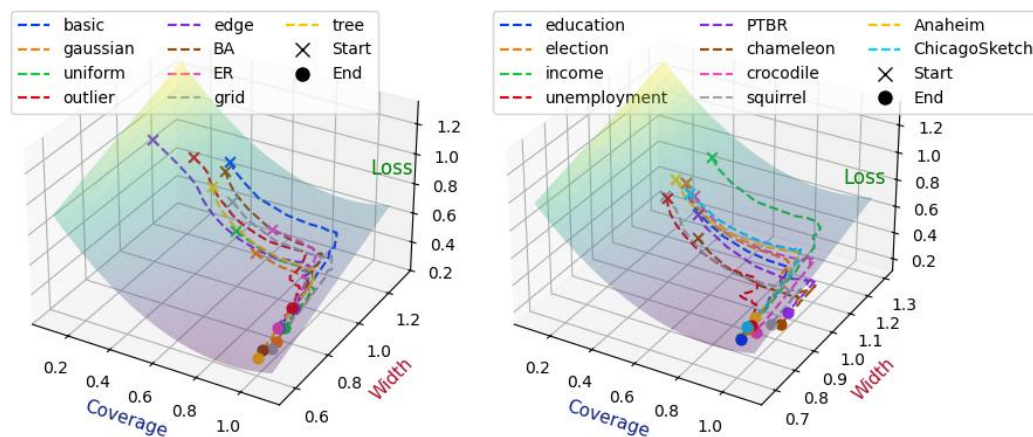
- QpiGNN: Quantile-free Prediction Interval GNN



Solution

제안 방법 핵심 구성

- **Dual-Head Architecture**
 - 예측(prediction)과 불확실성(Uncertainty) 추정을 분리하여 각자의 역할에 집중하도록 함
- **Quantile-Free Joint Loss**
 - 분위수(quantile) 입력없이 오직 레이블만으로 커버리지와 구간 폭을 직접 최적화



Results

Quantile-Free Uncertainty Quantification in Graph Neural Networks

Results

정량적 평가 결과

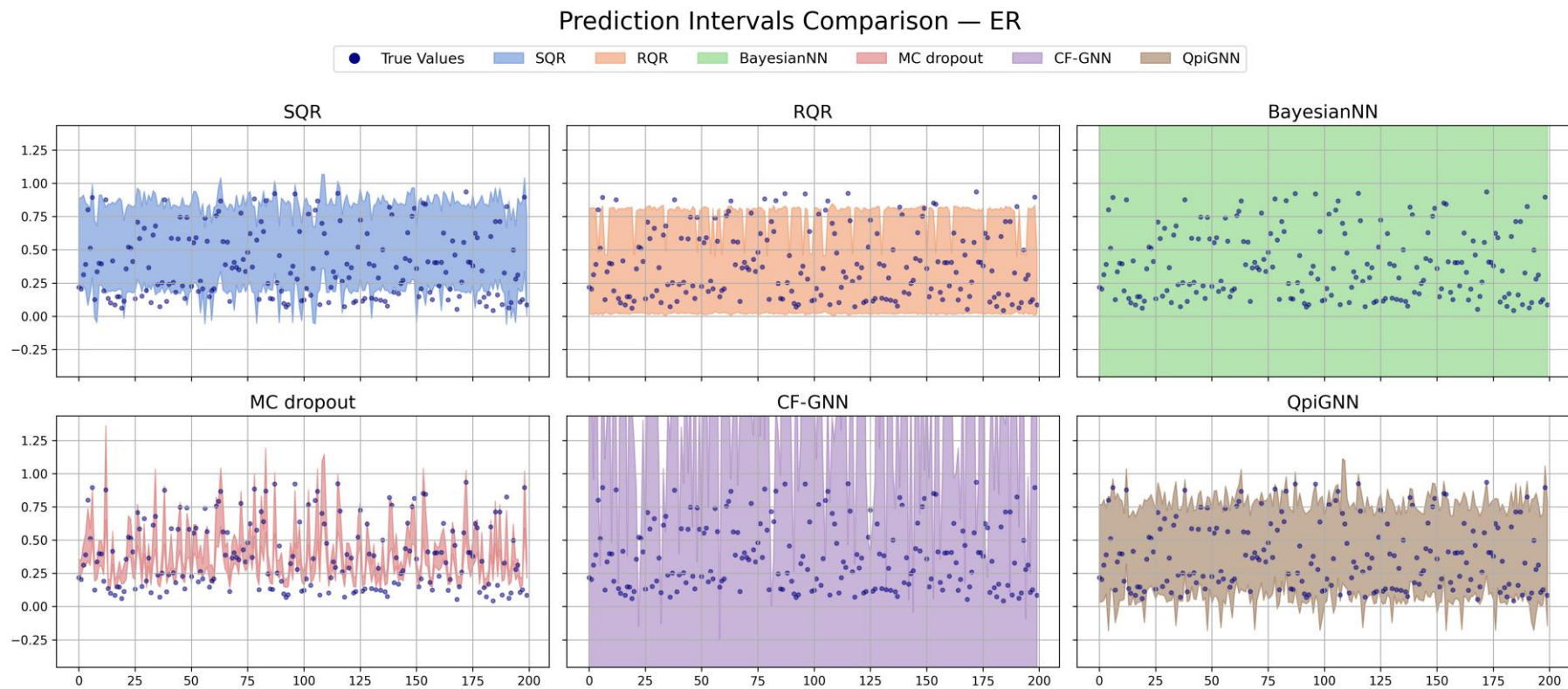
Table 1. Prediction intervals performance (PICP/MPIW) on 19 synthetic and real datasets. Models are grouped by dataset and evaluated on test splits. **Bold** indicates coverage above the 90% target ($1-\alpha$), and underline marks the lowest MPIW among those. This highlights models achieving both calibration and compactness. $\lambda^{opt.}$ denotes the width penalty selected via Bayesian optimization.

Model	Basic		Gaussian		Uniform		Outlier		Edge		BA		ER		Grid		Tree	
	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW
SQR-GNN	0.85	0.33	0.88	0.50	0.88	0.51	0.90	<u>0.10</u>	0.91	0.32	0.81	0.72	0.75	0.60	0.78	0.53	0.80	0.26
RQR ^{adj.} -GNN	0.90	0.82	0.88	0.53	0.90	0.68	0.90	0.36	0.93	0.83	0.78	0.75	0.88	0.77	0.72	0.48	0.85	0.68
ER-GNN	1.00	1.24	1.00	1.85	1.00	1.53	0.97	0.88	1.00	1.07	1.00	6.89	0.72	1.86	1.00	11.92	1.00	11.21
BayesianNN	1.00	3.01	1.00	2.98	1.00	3.00	1.00	2.95	1.00	3.06	1.00	3.08	1.00	3.01	1.00	3.01	1.00	3.00
MC Dropout	0.99	0.32	0.55	0.20	0.65	0.26	0.58	0.06	1.00	<u>0.30</u>	0.67	0.26	0.76	0.23	0.33	0.16	0.64	0.20
CF-GNN	0.92	1.90	0.91	2.90	0.90	3.04	0.93	1.92	0.92	1.78	0.90	68.27	0.90	17.15	0.94	3.18	0.93	0.97
QpiGNN ($\lambda^{0.5}$)	0.89	0.30	0.92	<u>0.55</u>	0.88	0.43	0.89	0.47	0.94	0.39	0.98	0.49	0.98	<u>0.63</u>	0.98	<u>0.87</u>	0.96	<u>0.39</u>
QpiGNN ($\lambda^{0.1}$)	0.98	0.93	0.99	0.84	0.99	0.89	0.99	0.75	1.00	0.97	0.98	1.01	0.99	0.92	0.98	0.98	1.00	0.59
QpiGNN ($\lambda^{opt.}$)	0.90	<u>0.30</u>	0.95	0.64	0.93	<u>0.62</u>	0.90	0.49	0.94	0.54	0.98	<u>0.48</u>	0.98	<u>0.63</u>	0.99	0.93	0.96	<u>0.39</u>

Model	Education		Election		Income		Unemploy.		Twitch		Chameleon		Crocodile		Squirrel		Anaheim		Chicago	
	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW	PCIP	MPIW
SQR-GNN	0.88	0.32	0.89	0.47	0.86	0.22	0.87	0.33	0.30	0.03	0.37	0.01	0.44	0.01	0.22	0.01	0.88	0.32	0.87	0.21
RQR ^{adj.} -GNN	0.87	0.49	0.89	0.54	0.89	0.36	0.90	<u>0.38</u>	0.91	0.42	0.86	0.15	0.87	0.08	0.89	0.15	0.85	0.50	0.88	0.30
ER-GNN	1.00	4.37	1.00	6.90	1.00	3.12	1.00	4.80	0.99	1.33	0.97	1.08	1.00	1.56	0.97	0.80	1.00	2.09	1.00	3.06
BayesianNN	1.00	2.96	1.00	2.98	1.00	2.97	1.00	2.98	1.00	3.07	1.00	2.95	1.00	3.07	1.00	2.97	1.00	2.94	1.00	2.99
MC Dropout	0.40	0.11	0.48	0.18	0.45	0.09	0.41	0.09	0.91	<u>0.15</u>	0.47	0.02	0.46	0.01	0.31	0.02	0.50	0.11	0.34	0.07
CF-GNN	0.88	2.78	0.89	1.08	0.92	3.48	0.90	3.16	0.92	3.53	-	-	-	-	-	-	0.90	3.22	0.90	3.12
CF-GNN ^{opt.}	0.90	3.10	0.91	0.94	0.91	2.92	0.89	2.61	0.89	2.34	-	-	-	-	-	-	0.90	2.82	0.91	2.26
QpiGNN ($\lambda^{0.5}$)	0.99	<u>0.57</u>	0.98	<u>0.77</u>	0.99	<u>0.41</u>	1.00	0.74	0.59	0.08	0.51	0.03	0.92	<u>0.08</u>	0.73	0.07	0.92	<u>0.39</u>	0.97	<u>0.36</u>
QpiGNN ($\lambda^{0.1}$)	0.99	0.90	1.00	0.97	1.00	0.72	1.00	0.93	0.98	0.54	0.98	0.40	1.00	0.54	0.99	0.47	0.99	0.74	0.99	0.60
QpiGNN ($\lambda^{opt.}$)	0.99	0.59	0.98	<u>0.77</u>	0.99	0.44	1.00	0.73	0.94	0.36	0.96	<u>0.23</u>	0.97	0.16	0.96	<u>0.18</u>	0.93	0.40	0.98	<u>0.36</u>

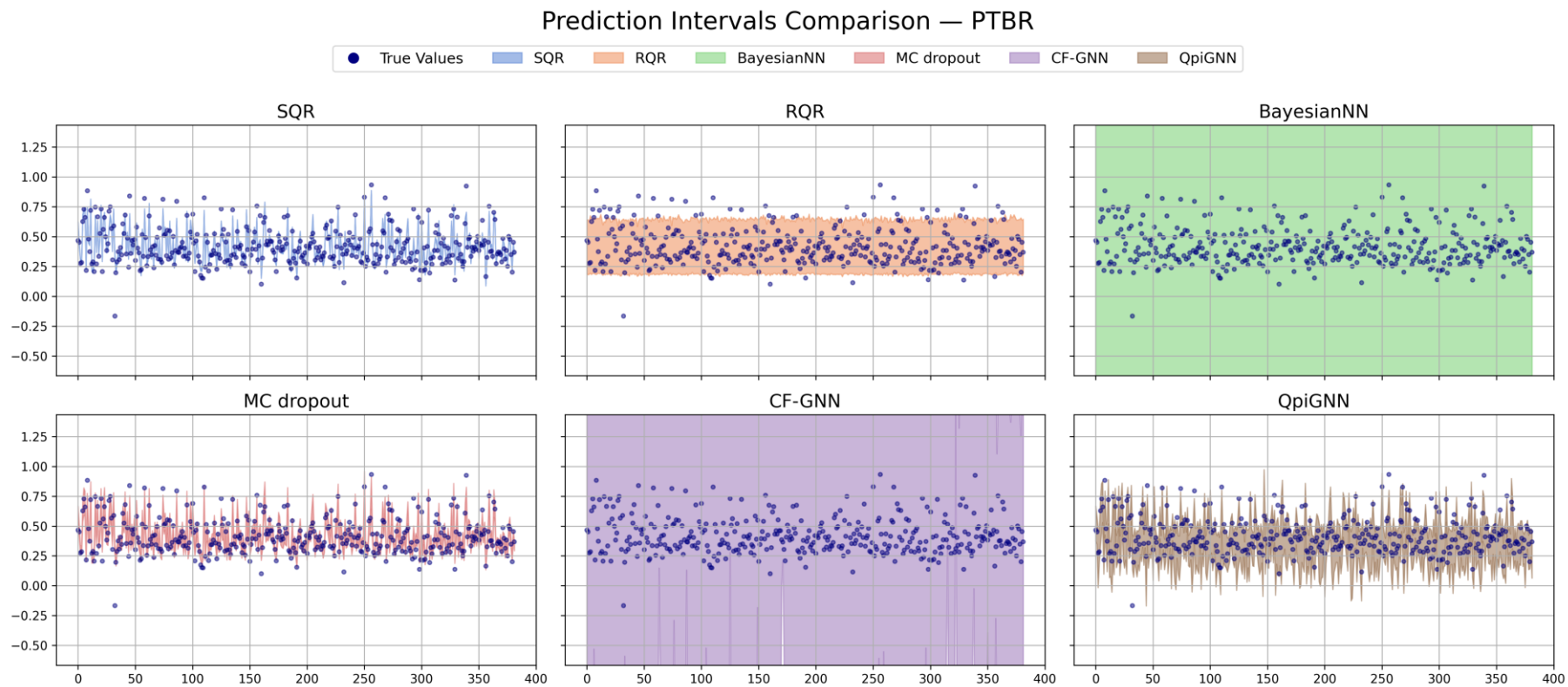
Results

정성적 평가 결과 – 가상 데이터셋



Results

정성적 평가 결과 – 실제 데이터셋



Results

강건성 및 교환가능성 실험

Table 2. Robustness analysis on ER graphs with feature/target noise and edge dropout. We compare QpiGNN, SQR-GNN, and RQR^{adj} -GNN, reporting average PICP and MPIW over 5 runs.

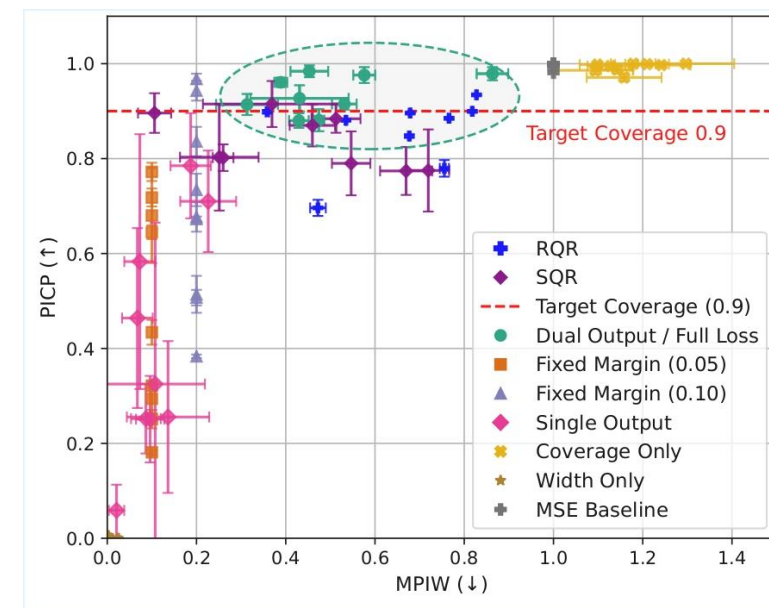
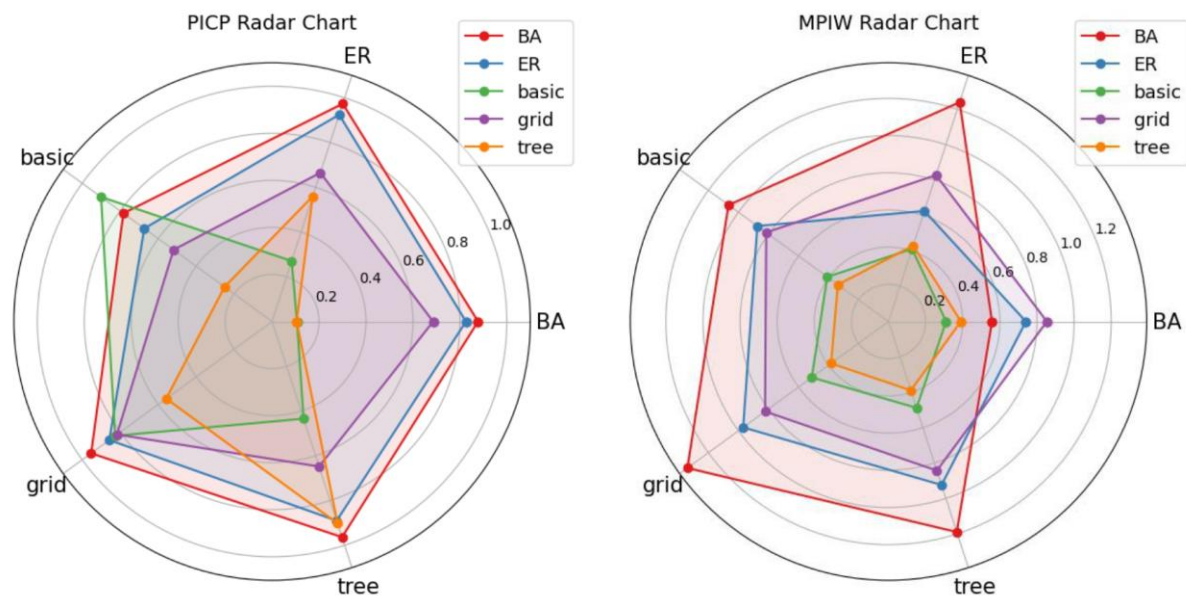
Perturbation Type	Level	QpiGNN		SQR-GNN		RQR^{adj} -GNN	
		PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW
Feature Noise (σ)	0.1	0.89	0.66	0.76	0.78	0.85	0.78
	0.2	0.90	0.80	0.65	0.69	0.85	0.78
	0.3	0.92	0.83	0.71	0.81	0.84	0.76
Target Noise (σ)	0.1	0.96	0.44	0.49	0.52	0.95	0.87
	0.2	0.99	0.71	0.95	0.84	0.97	1.05
	0.3	1.00	1.05	0.98	0.99	0.98	1.32
Edge Dropout (p)	0.2	0.84	0.21	0.53	0.44	0.86	0.80
	0.4	0.88	0.23	0.60	0.44	0.89	0.84
	0.6	0.91	0.21	0.82	0.50	0.89	0.84

Table 3. Exchangeability analysis on real-world datasets. We report average PICP and MPIW over 5 runs under three split types.

Split Type	Education		Election		Income		Unemploy.		Twitch	
	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW
Random	0.99	0.90	1.00	0.97	1.00	0.72	1.00	0.93	0.98	0.54
Degree	0.99	0.75	0.99	0.87	0.99	0.44	0.99	0.93	0.94	0.68
Community	0.99	0.54	0.99	0.86	1.00	0.46	0.97	0.84	0.99	0.49
Split Type	Chameleon		Crocodile		Squirrel		Anaheim		Chicago	
	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW	PICP	MPIW
Random	0.98	0.40	1.00	0.54	0.99	0.47	0.99	0.74	0.99	0.60
Degree	0.97	0.57	1.00	0.72	0.97	0.45	0.95	0.58	0.96	0.46
Community	0.95	0.58	0.98	0.74	0.97	0.47	0.97	0.60	1.00	0.53

Results

일반화 및 구성 요소 제거 실험



Results

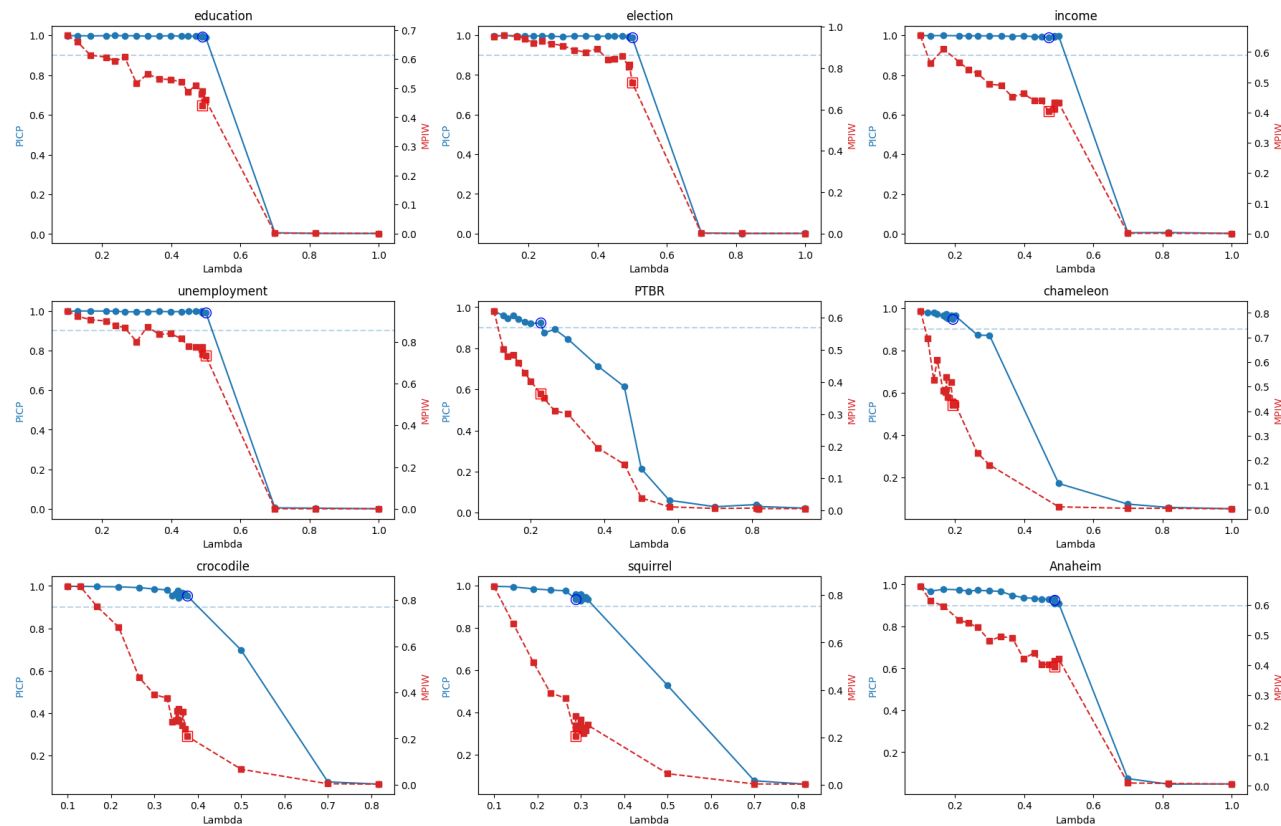
하이퍼파라미터 민감도 실험

- Joint Loss의 λ 에 따른 PICP-MPIW 변화
 - $\lambda \leq 0.5$ 에서 PICP 안정적
 - $\lambda > 0.5$ 이후 성능 급격히 저하
 - 적정 λ 범위: 0.2-0.5
 - 일부 baseline은 커버리지 제어에 한계



목표 커버리지를 엄격하게 제어할 수 있는

새로운 메커니즘이 필요함을 시사



Conclusion

Quantile-Free Uncertainty Quantification in Graph Neural Networks

Conclusion

Summary of Contributions

- 새로운 프레임워크 제안
 - 분위수 입력이나 후처리 없이 end-to-end 예측 구간 추정하는 GNN을 위한 최초의 QR 기반 UQ 프레임워크
- 독창적 설계와 이론 기반
 - 정확도와 불확실성을 분리한 Dual-head와 coverage-width를 최적화하는 Quantile-free joint loss 제안
 - 목표 커버리지에 대한 이론적 수렴성 증명
- 우수한 실험 성능 입증
 - 19개의 벤치마크 그래프 데이터셋에서 기존 대비 평균 22% 높은 커버리지 및 50% 좁은 폭 달성
 - 노이즈와 분포 이동에도 강건함을 실험적 입증

Conclusion

Key Insights & Future Directions

- Key Insights

- 정확도와 불확실성 추정을 분리하는 것이 효과적인 UQ를 가능케 함을 확인
- UQ를 위한 coverage-width를 직접 최적화하는 것이 안정적이고 효과적임을 확인
- 기존의 QR을 GNN에 적용함이 어려움을 확인하고 한계를 극복하는 방안 확인

- Future Directions

- 향후 노드 이외에도 링크-레벨, 그래프-레벨 예측 문제로의 확장 가능
- 향후 시간에 따라 변화하는 동적 그래프에서의 UQ 문제로의 확장 가능
- 데이터 불확실성(Aleatoric)과 모델 불확실성(Epistemic)을 분리 고려

감사합니다.

CNU-UNIST 교류 워크숍



2026.02.12

박소영

