

Copula 熵：理论和应用

马健*

摘要

统计独立性是统计学和机器学习领域的基础性概念，如何表示和度量统计独立性是该领域的基本问题。Copula 理论提供了统计相关关系表示的理论工具，而 Copula 熵理论则给出了度量统计独立性的概念工具。本文综述了 Copula 熵的理论和应用，概述了其基本概念定义、定理和性质，以及估计方法。介绍了 Copula 熵研究的最新进展，包括其在统计学的十个基本问题（结构学习、关联发现、变量选择、因果发现、系统辨识、时延估计、域自适应、正态性检验、双样本检验和变点检测等）上的理论应用。讨论了理论应用之间的联系，以及其对应的深层次的相关性和因果性概念之间的联系，并将 Copula 熵的（条件）独立性度量框架与基于核函数和距离相关的同类框架进行了理论对比。通过仿真和实际数据实验评估验证了 Copula 熵方法体系相对于同类方法的实际优越性。简述了 Copula 熵在理论物理学、天体物理学、空间科学、地球物理学、理论化学、化学信息学、材料学、水文学、气候学、气象学、环境学、生态学、动物形态学、农学、认知神经学、运动神经学、计算神经学、心理学、系统生物学、生物信息学、临床诊断学、老年医学、精神病学、药理学、公共卫生学、经济学、管理学、社会学、教育学、计算语言学、新闻传播学、法学、政治学、军事学、情报学，以及能源工程、食品工程、土木建筑、交通运输、制造工程、可靠性工程、石油工程、冶金工程、化学工程、航空航天、兵器工程、车辆工程、电子工程、通信工程、高性能计算、信息安全、测绘遥感、海洋工程和金融工程等领域的实际应用。

关键词：Copula 熵；传递熵；统计独立性；条件独立性；相关性；因果性；结构学习；关联发现；变量选择；因果发现；系统辨识；时延估计；域自适应；正态性检验；双样本检验；变点检测；性能评测；交叉学科应用

*Email: majian03@gmail.com

Abstract

Statistical independence is a core concept in statistics and machine learning. Representing and measuring independence are of fundamental importance in related fields. Copula theory provides the tool for representing statistical independence, while Copula Entropy (CE) presents the tool for measuring statistical independence. This paper first introduces the theory of CE, including its definition, theorem, properties, and estimation method. The theoretical applications of CE to structure learning, association discovery, variable selection, causal discovery, system identification, time lag estimation, domain adaptation, multivariate normality test, two-sample test, and change point detection are reviewed. The relationships between the theoretical applications and their connection to correlation and causality are discussed. The frameworks based on CE, the kernel method, and distance correlation for measuring statistical independence and conditional independence are compared. The advantage of CE based on methods over the other comparable methods is evaluated with simulated and real data. The applications of CE in theoretical physics, astrophysics, space science, geophysics, theoretical chemistry, cheminformatics, materials science, hydrology, climatology, meteorology, environmental science, ecology, animal morphology, agronomy, cognitive neuroscience, motor neuroscience, computational neuroscience, psychology, system biology, bioinformatics, clinical diagnostics, geriatrics, psychiatry, pharmacy, public health, economics, management, sociology, pedagogy, computational linguistics, mass media, law, political science, military science, informatics, energy, food engineering, architecture, civil engineering, transportation, manufacturing, reliability, petroleum engineering, metallurgy, chemical engineering, aeronautics and astronautics, weaponry, automobile, electronics, communication, high performance computing, cybersecurity, remote sensing, oceanography, and finance are briefly introduced.

Keywords: copula entropy; transfer entropy; correlation; causality; structure learning; association discovery; variable selection; causal discovery; system identification; time lag estimation; domain adaptation; normality test; two-sample test; change point detection; benchmarking; interdisciplinary application

目录

1 引言	6
2 Copula 熵	7
2.1 理论	7
2.2 性质	9
2.3 估计方法	9
3 理论应用	10
3.1 结构学习	10
3.2 关联发现	11
3.3 变量选择	12
3.4 因果发现	15
3.5 系统辨识	16
3.6 时延估计	18
3.7 域自适应	19
3.8 正态性检验	19
3.9 双样本检验	20
3.10 变点检测	21
4 讨论	22
4.1 理论应用之间的联系	22
4.2 相关性和因果性	22
4.3 三种理论框架的对比	24
5 性能评测	24
5.1 概述	24
5.2 独立性检验	25
5.3 条件独立性检验	26
5.4 正态性检验	30
5.5 双样本检验	32
5.6 变点检测	36
6 实际应用	42
6.1 理论物理学	42
6.2 天体物理学	42
6.3 空间科学	44
6.4 地球物理学	44
6.5 理论化学	45

6.6 化学信息学	45
6.7 材料学	45
6.8 水文学	46
6.9 气候学	50
6.10 气象学	51
6.11 环境学	53
6.12 生态学	54
6.13 动物形态学	54
6.14 农学	55
6.15 认知神经学	56
6.16 运动神经学	57
6.17 计算神经学	58
6.18 心理学	58
6.19 系统生物学	59
6.20 生物信息学	59
6.21 临床诊断学	60
6.22 老年医学	62
6.23 精神病学	63
6.24 药学	64
6.25 公共卫生学	64
6.26 经济学	65
6.27 管理学	66
6.28 社会学	67
6.29 教育学	67
6.30 计算语言学	67
6.31 新闻传播学	68
6.32 法学	68
6.33 政治学	68
6.34 军事学	69
6.35 情报学	69
6.36 能源工程	69
6.37 食品工程	74
6.38 土木建筑	74
6.39 交通运输	75
6.40 制造工程	76
6.41 可靠性工程	77
6.42 石油工程	78
6.43 冶金工程	78

目 录	5
6.44 化学工程	78
6.45 航空航天	79
6.46 兵器工程	80
6.47 车辆工程	81
6.48 电子工程	81
6.49 通信工程	81
6.50 高性能计算	82
6.51 信息安全	82
6.52 测绘遥感	83
6.53 海洋工程	83
6.54 金融工程	83
7 总结	86
A 软件实现	87
参考文献	88

1 引言

统计独立性是统计学和机器学习领域的基础性概念，如何表示和度量统计独立性是统计学的基本问题。在统计学早期的 19 世纪，就有 Pearson [1] 提出了相关系数的概念来度量统计独立性，并应用于优生学的研究。上个世纪，在对相关性的研究中 Copula 函数理论被提出，提供一种统一表示随机变量之间统计关联关系的理论工具 [2,3]。根据 Sklar 定理 [4]，通俗地讲，任何一个多变量之间的关联关系都对应着一个用于表示这种关系的函数，称为 Copula 函数。Copula 函数表示了多变量之间全部的关联关系，且与单个变量的性质是无关的。

2008 年，马健和孙增圻提出了 Copula 熵 (Copula Entropy: CE) 的概念 [5]。CE 的概念由 Copula 密度函数定义而来，本质上是一种香农熵的形式。我们也证明了它与信息论 [6] 中的互信息概念是等价的。事实上，CE 的提出是受到了这样的启发，Copula 函数被认为包含了全部的关联关系，而互信息一直被认为度量了全部的关联关系的信息，那么我们认为这二者之间必然有某种联系。对这种必然联系的研究的结果，就是提出了 CE 的理论。

CE 是一种多变量之间关联关系度量的理论，与关联关系表示理论——Copula 函数理论相对应。Copula 函数表示关联关系，而由之得到的 CE 度量了关系中的信息量。CE 是一个理想的统计独立性度量的概念，具有很多优美的属性，包括对称性、非正性、单调变换不变性、以及在高斯变量时与相关系数等价等。

CE 是一种理想的统计相关性度量工具，同时它又可以用来表示和度量另一个重要的统计学概念——条件独立性 (Conditional Independence: CI)。这样，我们就得到了一个基于 CE 的 (条件) 独立性度量理论框架，将相关性和因果性这两个基本概念统一起来。

CE 是一个基础性的统计工具，可以用来解决多个统计学的基本问题。我们在 2008 年就将其应用到结构学习问题上 [7]，用来学习统计变量之间的关联关系结构。最近，我们又先后将其应用到关联发现 [8]、变量选择 [9]、因果发现 [10]、域自适应 [11]、正态性检验 [12]、时延估计 [13]、系统辨识 [14]、双样本检验 [15] 和变点检测 [16] 等问题上，都取得了良好的应用效果。

我们由此提出了一个基于 CE 理论的统计学方法论体系，包括独立性检验、条件独立性检验、多元正态性检验、双样本检验和变点检测等方法。在统计学领域已有针对这些问题的大量同类方法，而 CE 方法由于具有坚实的理论基础和非参数的估计算法，较已有方法具有理论上的优势。为了评估 CE 方法的实际性能，我们调研了以上五大方法的同类方法，设计了仿真对比实验 [17]，实验验证了 CE 方法体系性能上的优越性。

作为一种基础性的数据分析工具，CE 被提出以来，在各个不同学科领域都得到了实际应用，包括理论物理学 [18]、天体物理学 [19]、空间科学 [20]、地球物理学 [21]、理论化学 [22]、化学信息学 [23]、材料学 [24,25]、水文学 [26–53]、气候学 [54,55]、气象学 [10,56–59]、环境学 [60–63]、生态学 [64]、动物形态

学 [65,66]、农学 [67–69]、认知神经学 [70–77]、运动神经学 [78–82]、计算神经学 [83–85]、心理学 [86]、系统生物学 [87,88]、生物信息学 [89–93]、临床诊断学 [9,94–100]、老年医学 [101–104]、精神病学 [105,106]、药学 [107]、公共卫生学 [66,94]、经济学 [108–114]、管理学 [115–117]、社会学 [11]、教育学 [118]、计算语言学 [119]、新闻传播学 [120]、法学 [121]、政治学 [122]、军事学 [123]、情报学 [124]，以及能源工程 [13,125–144]、食品工程 [145,146]、土木建筑 [147,148]、交通运输 [149–152]、制造工程 [153–159]、可靠性工程 [160,161]、石油工程 [162]、冶金工程 [163]、化学工程 [164–169]、航空航天 [170–174]、兵器工程 [175]、车辆工程 [176]、电子工程 [177]、通信工程 [178,179]、高性能计算 [180]、信息安全 [181,182]、测绘遥感 [183]、海洋工程 [184] 和金融工程 [185–200] 等。在这些应用中，CE 被用来分析和度量不同学科数据中的统计关联性或因果性，用以增加对数据中变量间统计关系的理解，或者用于建立和评价模型。CE 不仅为各种应用提供了理论支撑和方法工具，同时也改进了计算的可靠性和效率。

在以上实际应用中，研究者也提出了一些基于 CE 理论的新方法，如 GCM 方法 [71]、半参数互信息估计 [201]、信息瓶颈 (Information Bottleneck) 计算 [23]、独特信息 (Unique Information) 估计 [84]、协同 (Synergy) 估计 [85]、非对称互信息估计 [66]、图结构相似度计算 [65]、聚类算法 [50,55]、非线性主元分析 [165]、决策树构建 [108,109]、图神经网络构建 [31,100]、信息增强生成式对抗补全网络 (IEGAIN) [169]、因果压缩 [89]、因果结构学习 [111,145,146]、LiNGAM-MMI [202]、Copula 参数估计 [49]、藤 Copula 结构选择 [190,192,193]、Survival CE [98]、 CE^2 [181]、Copula Extropy [203]、Cumulative CE [204] 和 B 样条函数逼近 [205] 等。CE 作为一种基础性的理论方法，给出了一种处理相关性和因果性的普适性基本数学概念工具，为更多新方法论的派生提供了可能。

本文第2部分介绍 Copula 熵的理论和估计方法，第3部分介绍 CE 在统计学中的理论应用，用于解决统计学的十个基本问题，第4部分讨论三个相关的问题，第5部分将基于 CE 的 5 种方法与各自的同类方法进行对比评估，第6部分简要叙述 CE 在各个不同学科领域中的实际应用，第7部分对论文进行总结。

2 Copula 熵

2.1 理论

Copula 理论是关于多随机变量之间相互依赖关系表示的理论 [2,3]。此理论定义一类函数，成为 Copula 函数，定义如下：

定义 1 (Copula 函数) 给定 N 维随机向量 $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_N) \in R^N$ 。令 \mathbf{u} 表示 \mathbf{X} 的边缘分布函数 $u_i = F_i(x_i), i = 1, \dots, N$ 。则 \mathbf{X} 对应 N 维 Copula 函数 $C: I^N \rightarrow I, I = [0, 1]$ 需要满足如下性质：

1. C 的下确界为 0 且在单位立方体内的任意子立方体内单调递增；

$$2. C(1, \dots, 1, u_i, 1, \dots, 1) = u_i.$$

直观的理解, Copula 函数就是在单位 N 立方体上的分布函数, 边缘分布为均匀分布, 下确界为 0, 且在任意向上方向上单调增加。从 Copula 函数出发, 对各变量求导, 可以很容易地定义与之相对应的 Copula 密度函数 $c(\mathbf{u})$ 。

Copula 理论的核心结论是 Sklar 定理, 给出了如何利用 Copula 函数表示随机变量依赖关系的结论, 如下:

定理 1 (Sklar 定理) [4] 给定任意 N 维随机变量 \mathbf{X} 的联合分布函数 $F(\mathbf{X})$ 、边缘分布函数 $F_i(X_i)$ 和 Copula 函数 $C(\mathbf{u})$, 则联合分布函数可以表示为输入为边缘分布函数的 Copula 函数的形式, 如下:

$$F(\mathbf{x}) = C(F_1(x_1), \dots, F_N(x_N)). \quad (1)$$

Copula 函数的表示将多变量的联合分布与单个变量的联合分布分离开来, 将依赖关系表示为一个 Copula 函数。因此, 依赖关系与单个变量的属性是没有关系的, Copula 函数中包含了全部的依赖关系信息。对式 (1) 两边求导, 就得到相应的 Sklar 定理的密度函数版本:

$$p(\mathbf{x}) = c(\mathbf{u}) \prod_i p(x_i). \quad (2)$$

其中, $p(\cdot)$ 表示概率密度函数。

利用 Copula 密度函数的表示, 我们就可以定义 Copula 熵, 如下:

定义 2 (Copula 熵) [5] 给定多随机变量 \mathbf{X} , 及其边缘分布 \mathbf{u} 和 Copula 密度函数 $c(\mathbf{u})$, 则 Copula 熵定义为:

$$H_c(\mathbf{x}) = - \int_{\mathbf{u}} c(\mathbf{u}) \log c(\mathbf{u}) d\mathbf{u}. \quad (3)$$

在信息论中, 互信息 (Mutual Information: MI) 和熵是两个定义不同的概念 [6]。在文献 [5] 中, 我们证明了二者本质上是相同的, 也即是, MI 等价于负的 CE, 也可以表示成熵的形式。定理如下:

定理 2 多随机变量的 MI 等价于其负的 CE。

$$I(\mathbf{x}) = -H_c(\mathbf{x}). \quad (4)$$

定理的证明很简单。由定理可以立即得到一条关于联合熵、边缘熵和 CE 之间关系的推论, 如下:

推论 1 多随机变量的联合熵等于边缘熵和 CE 的和。

$$H(\mathbf{x}) = \sum_i H(x_i) + H_c(\mathbf{x}). \quad (5)$$

以上结论通过 CE 的定义, 加深了我们对信息论基本概念及其之间关系的了解, 也因此在 Copula 理论和信息论之间架起了一座桥梁。

2.2 性质

熵性 由 Copula 理论得到的 CE 具有很多有趣的性质。首先从定义来看, CE 是一种特殊的香农熵, 定义在单位体的概率分布函数上, 因此其也具有香农熵具有的连续性、对称性和可加性等特性。

多变量 香农的 MI 定义针对的是二变量情况, 但 CE 概念不限于二变量的情况, 也适用于多变量的情况, 且多变量之间具有对称性, 扩展了 MI 的定义和适用范围。

全阶次 由 Copula 密度函数而定义的 CE 从一个新的角度给出了对 MI 概念更深入的理解。Copula 函数被认为是包含了随机变量之间所有相关性的信息, 那么 CE 作为相关性的随机性的度量, 就等于给出了随机变量之间所有阶次相关性的信息量。

单调变换不变性 由于 Copula 函数具有单调变换不变性, 因此基于 Copula 函数定义的 CE 天然地继承了这一不变性特性。

边缘函数无关 上面提到, Copula 理论将联合分布分解为边缘函数和 Copula 函数两个相对独立的部分, 这也对应到联合熵的分解: 随机变量的联合熵也可以相应地分解为边缘熵和 CE 两个相互无关的部分。而 MI 与 CE 等价, 因此 MI (CE) 只与 Copula 函数有关, 与边缘函数无关、联合函数无关, 这与香农基于边缘函数和联合函数的 MI 定义构成了显著的理论区别。

非正性 需要指出的是, CE 本身是非正的, 当多变量之间是独立的时候, CE 等于 0。它表明了由于多变量之间具有相关性, 使得多变量之间相互包含有其他变量的信息, 因此就使得联合熵的总信息量减少, 表现为联合熵小于各个变量的边缘熵之和。一般地讲, 熵度量了随机变量的不确定性, 是非负的; 而 CE 则是非正的, 因为它度量了由于变量间相关性导致减少的不确定性。

等价关系 相关系数是统计学传统的相关性度量, 它隐含着分布高斯性的假设。可以很容易证明, 在高斯分布的情况下, 相关系数与 CE 具有数学上的等价关系, 即 CE 可以由相关系数矩阵来表示。

2.3 估计方法

MI 作为信息论的基本概念, 具有广泛的应用价值。但学界普遍认为 MI 的估计是十分困难的。我们根据定理 2, 给出了一个简单且优雅的非参数 CE (MI)

估计方法¹ [5]。该方法仅需如下 2 步：

1. 估计经验 Copula 密度函数；
2. 由经验 Copula 密度函数估计 CE。

给定随机变量 \mathbf{X} 的一组独立同分布样本 $\{x_1, \dots, x_T\}$, 可以很容易地通过次序统计量 (rank) 来估计经验 Copula 密度函数, 如下

$$F_i(x_i) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \mathbf{1}(x_t^i < x_i), \quad (6)$$

其中 $\mathbf{1}(\cdot)$ 表示示性函数。

在得到经验 Copula 密度函数后, 第 2 步就是一个熵估计的问题, 有很多方法可以采用。我们采用了 Kraskov 等 [207] 提出的 k 近邻法来估计 CE, 因为它是一个非参数方法, 具有良好的估计性能。

由于在两步中都采用了非参数的方法 (次序统计量和 k 近邻法), 因此, 我们就得到了一个非参数的 CE 估计方法。方法简单, 易于实现, 且计算量要求较低。此方法是一个典型的基于序数 (rank) 统计量的非参数估计方法, 将 CE 非参数估计的本质等价于计算归一化的序数统计量的熵, 内涵深刻。

3 理论应用

3.1 结构学习

从数据分析一组随机变量之间的关联结构, 可以帮助我们了解系统内部的内在结构关联性, 具有重要的应用价值。在统计和机器学习学习中, 表示这种关联结构的主要工具方法是图 (Graph), 图中的顶点表示随机变量, 顶点之间的边表示变量之间的关联, 边的权重表示关联的强度。图又分为有向图和无向图, 前者的边具有方向而后者则无方向, 前者表示变量之间的因果关系而后者表示关联关系。从数据中学习这种关联图结构的问题, 被称为结构学习 (Structure Learning)。

结构学习的算法很多, 其中比较著名的有 Chow-Liu 的图结构学习方法 [208]。该方法通过学习变量的互信息矩阵, 再基于矩阵学习最小生成树 (Minimal-Spanning-Tree: MST) 来得到主要关联结构的骨架。

利用互信息和 CE 的等价性, 我们给出了 Chow-Liu 算法的 CE 版本 [7], 包含两步：

1. 利用 CE 估计方法学习得到随机变量的关联矩阵；

¹本方法已经实现为 R 和 Python 语言的 `copent` 算法包 [206], 并已分别在 CRAN 和 PyPI 上发布共享。

2. 再利用 MST 生成算法从上述矩阵得到关联图结构。

由于我们的 CE 估计方法简单有效, 相较于传统的互信息估计具有明显优势, 因此也使得 Chow-Liu 算法更可靠有效。

我们将算法应用到两个经典的 UCI 机器学习数据集 [209]: 鲍鱼生长数据集和波士顿房价数据集。实验结果显示, 算法能够得到具有可解释性的关联结构, 使我们对数据反映的鲍鱼生长特性和波士顿房价相关因素的内在关系有了更深入的理解。²

3.2 关联发现

经验科学是分析数据的学问。通过分析收集的观察或经验数据, 人们得出对象系统的科学结论。关联的概念是多元统计分析的基本工具之一。它度量了随机变量之间的统计性内在联系, 进而被赋予科学意义。发现关联关系是科学研究的主要内容方法之一。

Pearson 相关系数 [1] 是一种统计学史上重要的相关性度量概念, 教科书里都会讲到, 应用也很广泛。但由于它是统计学早期提出的概念, 因此具有很多局限性。从理论上讲, 它只适用于线性相关关系的情况, 隐含着高斯分布的假设, 使它在绝大多数实际情况中都不适用。它是一个二变量的度量, 没有多变量的版本。

CE 则是一种更高级的相关性度量, 相对于 Pearson 相关系数具有显著的优势。它没有线性和高斯性的假设, 且是一个多变量的相关性度量。实际上, CE 度量的是统计独立性, 比相关性更宽泛的概念, 在统计独立的情况下, 其为 0。CE 还具有单调变换不变性, 且在高斯分布的情况下, 与相关系数等价。简单列一下 CE 作为相关性度量的优点:

- 无模型假设,
- 可处理非线性关系,
- 统计独立性度量,
- 单调变换不变性,
- 在高斯情况下与相关系数等价。

综合了如此多优点, CE 是一个完美的相关性度量, 完全可以替代 Pearson 相关系数, 适用于任何类型的相关性度量。Pearson 相关系数作为一个历史悠久的统计工具, 可以进入历史了。

关于 CE 与 Pearson 相关系数的理论上的对比, 可参见论文 [8]。论文还利用著名的 NHANES 医学体检数据 [210], 从实验上证明了 CE 的显著优越性³。

²实验代码: <https://github.com/majianthu/dse>

³实验代码: <https://github.com/majianthu/nhanes>

3.3 变量选择

变量选择 (Variable Selection), 又称特征选择, 是统计和机器学习的基本问题 [211,212]。当人们试图从一组自变量和目标预测变量之间建立函数关系时, 往往希望只选择真正与目标变量有内在联系的自变量子集作为函数模型的输入, 以提高模型的科学性 (或可解释性), 同时降低模型的复杂度。这样的问题称为变量选择。在统计和机器学习中, 变量选择主要用于多元分类或回归分析中建立的函数模型关系。

传统的变量选择方法很多, 主要的有准则法、模型正则化方法和关联度量方法。主要的准则法有 AIC [213] 和 BIC [214] 等, 通过在似然函数上加上对模型复杂度的惩罚项得到。模型正则化方法主要用于广义线性回归模型, 在学习模型的过程中, 通过在似然函数上加上模型参数 (线性系数) 的 1 范数或 2 范数或二者的组合得到, 经典的方法包括 LASSO [215]、岭回归 (Ridge Regression) [216] 和弹性网络 (Elastic Net) [217] 等。以上两类方法都是基于似然函数加惩罚项的形式完成变量选择, 都是模型有关的。关联度量的方法则是通过自变量和目标变量之间的关联强度来选择变量, 通常是模型无关的。主要的关联关系度量包括传统的 Pearson 相关系数, 但它只能度量线性关系, 仅适用于线性模型。其它几个主要的非线性关联度量也都被应用到变量选择问题上, 包括希尔伯特-施密特独立性准则 (Hilbert-Schmidt Independence Criterion: HSIC) [218,219] 和距离相关 (Distance Correlation: DC) [220,221] 等。

变量选择问题, 推荐 CE 方法, 不建议 LASSO 或者 p-value 等传统统计方法。本方法利用 CE 度量自变量和目标变量之间的关联强度, 根据强度从大到小依次选择变量。在变量选择问题上, CE 已被真实数据实验证明优于以下主流变量选择方法:

- LASSO / Ridge Regression / Elastic Net [215–217],
- AIC / BIC [213,214],
- Adaptive LASSO [222],
- Hilbert-Schmidt Independence Criterion (HSIC) [218,219],
- Distance Correlation [220,221],
- Heller-Heller-Gorfine Tests of Independence [223],
- Hoeffding's D test [224],
- Bergsma-Dassios T^* sign covariance [225],
- Ball correlation [226].

实验⁴采用了著名的 UCI 心脏病数据集 [209]，将 CE 方法与以上方法进行对比。该数据集包含了来自世界 4 地的病人临床生理测量数据和诊断结果，用来研究如何从生理特征预测心脏病诊断结果。其中部分临床特征已被专家认定为是疾病相关特征，这就为验证变量选择方法提供了一个参照标准。实验结果表明，与其他方法相比，CE 方法选择出了最多的疾病相关特征，在预测性和可解释性上优势明显。部分对比结果见图1。

CE 为变量选择问题提供了统一的理论框架。它具有以下优点：

- 模型无关，
- 数学理论坚实，
- 物理上可解释，
- 具有非参数估计算法，不做理论假设，
- 几乎不需要调参。

该方法做变量选择是模型无关的，这是与基于似然函数的方法相比，方法无需考虑模型及其复杂度等因素，具有明显的普适性优势。作为一种关联度量工具，CE 与其他度量工具相比定义更坚实，具有很多理想的独立性度量公理属性，因此也就具有了明显的理论优势。另外，熵是一种物理意义明确的数学概念，CE 可被认为是从自变量到目标变量的函数关系包含的信息量，因此很容易从物理上理解和解释得到的模型。在方法实现上，CE 的估计方法基于序数统计量，是非参数的，不做任何理论假设，充分发挥了其理论优势。同时，其估计方法具有良好的渐近稳定性，且几乎不需要调参，与 LASSO 等结果严重依赖超参数选择的方法形成了鲜明对比。总之，该方法具有理论和计算上的明显优势，将变量选择问题变成了一种科学，而不像 LASSO 等方法是一门艺术。

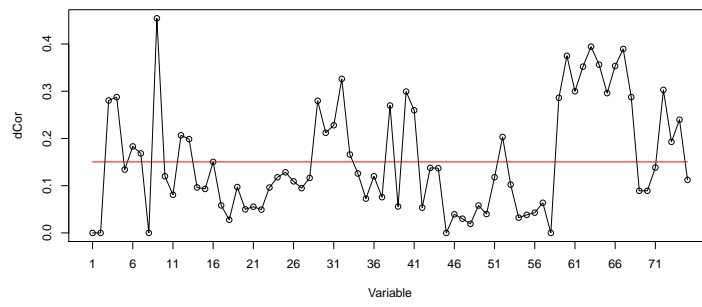
生存分析 (Survival Analysis) 是一类特殊的回归问题，其预测目标是事件发生时间 (time-to-event)，也即是未来某一事件发生所需要的时间。这类问题的特殊性还在于一种删失 (Censoring) 机制，用于当某一事件在观察期未发生时的处理。生存分析在医学、可靠性和社会科学等领域具有广泛的应用。建立生存分析模型也需要进行变量选择，用于筛选与事件发生时间相关的变量。马健 [95] 提出将 CE 的变量选择方法应用于此类问题，通过计算变量与事件发生时间之间的 CE 来选择变量。他将方法应用于两个公开的肺癌数据，与常用的随机生存森林 (Random Survival Forest) 和 Lasso-Cox 两种方法进行了对比，发现该方法能够在保证模型可解释性的同时获得更好的预测性能，验证了方法的优越性⁵。

⁴实验代码：<https://github.com/majianthu/aps2020>

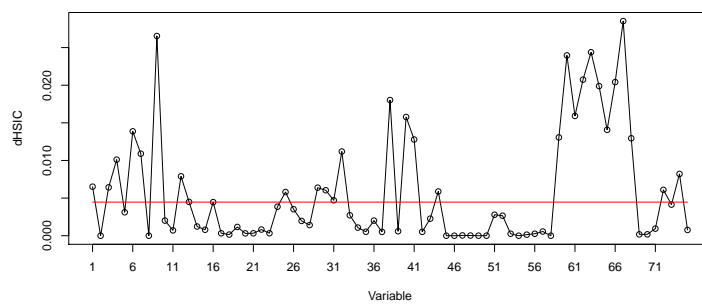
⁵实验代码：<https://github.com/majianthu/survival>



(a) CE



(b) dCor



(c) dHSIC

图 1: 三种统计独立性度量选择的变量.

张轶棠 [205] 将基于 CE 的变量选择方法应用于 B 样条函数逼近问题, 结合 CE 和交叉验证方法, 以改善逐步变量选择方法的性能。B 样条函数逼近实验结果表明, 该方法的逼近误差和准确率优于其他同类方法。

3.4 因果发现

因果关系普遍存在于自然界当中, 发现因果关系是各门科学的主要命题之一。从一组随机变量的时序观测中发现变量之间的因果关系, 被称为因果发现 (Causal Discovery) 问题, 是统计学中时间序列分析的经典问题。时序因果关系发现方法在不同学科领域都有重要应用价值。

如何度量因果关系是因果发现问题解决的基础。控制论学者维纳提出了一种因果关系的哲学概念, 表述为因必须有助于改善果的预测 [227]。在此理念基础上, 格兰杰提出了著名的格兰杰因果关系 (Granger Causality: GC) 检验 [228, 229]。GC 检验是经典的因果发现工具, 但它只适用于高斯的情况。Schreiber [230] 定义了用于发现稳态时序包含的因果关系的传递熵 (Transfer Entropy: TE) 的概念。TE 是 GC 的非线性推广, 等价于信息论的条件互信息 (Conditional Mutual Information: CMI), 本质上是检验条件独立性 (Conditional Independence), 是模型无关的, 因此适用于任何情况的因果关系检验。TE 作为广泛采用的因果关系度量, 较之其他经验式带有模型假设的传统因果关系推断方法更科学合理, 具有更广泛的普适性。

CE 是统计独立性度量, 而 TE 是条件独立性度量。我们证明了二者之间在数学上有着本质上的内在理论联系 [10]。通过并不复杂的数学变换, 可以很容易证明, TE 可以表示为只包含 CE 的数学形式。这一数学表示形式为从 CE 估计 TE 提供了理论基础。

命题 1 TE 可以表示为仅包含 CE 的数学形式。从 X 到 Y 的 TE 的 CE 表示如下:

$$TE_{X \rightarrow Y} = H_c(Y_{t+1}, Y_t) + H_c(X_t, Y_t) - H_c(Y_{t+1}, Y_t, X_t). \quad (7)$$

因为 TE 本质上是条件独立性关系 $Y_{t+1} \perp\!\!\!\perp X_t | Y_t$ 的度量, 因此(7)也其实是给出了一种条件独立性的 CE 表示。

在过去的研究中, 因果关系的估计往往是在一定的假设前提下进行, 无假设前提的因果关系估计被很多研究者认为是不可能的。我们基于以上 TE 的 CE 表示形式, 利用非参数的 CE 估计算法, 提出了一种简单优雅、易于理解和实现的非参数 TE 估计方法 [10]。这样, 不带任何假设条件的因果关系发现就成为了可能。此估计方法包含简单的两步⁶:

1. 利用非参数 CE 估计方法, 估计式(7)中的 3 个 CE 子项;
2. 由 3 个 CE 估计值计算得到 TE。

⁶此方法已在 R 和 Python 语言的 `copent` 包 [206] 中实现。

为了验证提出的非参数 TE 估计方法,我们将该方法应用于大气污染问题中的因果发现,研究了北京地区气象因素和 PM2.5 之间的因果关系⁷。实验采用了 UCI 机器学习数据集仓库中的北京 PM2.5 数据 [231],包含了北京地区 2010 年至 2014 年之间的每小时的连续气象观测数据和 PM2.5 观测数据。我们的分析选择其中一段无缺失值的连续时间数据记录,利用上述方法很容易就可以估计出气象因素对 1 至 24 小时后 PM2.5 浓度的影响程度。利用上述估计方法并不是无条件的,我们默认假设了时序是稳态的,也假设了时间段之间的马尔科夫性,也就是不相邻的时间段之间无关。对 24 小时内滞后因果关系的分析发现,温度、湿度、压力等气象因素对 PM2.5 的形成的因果关系是一个由迅速增加到缓慢增强的过程。

同样在上述实验数据的基础上,我们将提出的 TE 估计方法与另外两种条件独立性度量进行了对比实验,估计从气象因素到 PM2.5 的因果关系 24 小时走势。这两种度量分别是基于核函数的条件独立性度量 (Kernel-based Conditional Independence: KCI) [232] 和条件距离相关 (Conditional Distance Correlation: CDC) [233]。论文通过将用 CE 估计 TE 与其它两种方法进行了对比,结果(见图2)显示 TE 的估计效果更好。

3.5 系统辨识

微分方程是描述动态系统的主要数学工具,在不同学科具有广泛的应用。从数据中学习微分方程是动态系统领域的一个重要问题,也称系统辨识或方程发现,近年来得到了大量的研究。

方程发现问题通常可以被当作一个回归问题来对待,即从数据学习一组从系统状态到状态微分的回归方程。给定一个一般的动态系统微分方程形式,如下:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(\mathbf{x}, t), \quad (8)$$

其中 $x_i, i = 1, \dots, N$ 表示系统状态变量,则方程发现问题就是从数据辨识 f_i 。从数据辨识 f_i 需要确定该方程包含的未知自变量,一旦自变量确定则方程的对应关系就知道了,这是典型的变量选择问题。很多经典回归模型方法被应用到此问题,如高斯过程、基于稀疏性的方法(如 SINDy)、核函数方法和神经网络等。

马健 [14] 提出了一种基于 CE 的微分方程发现方法,将问题理解为变量选择问题,利用基于 CE 的变量选择方法解决了此方程发现问题。该方法包含了两个主要步骤:

1. 利用差分算子近似计算状态变量的微分;
2. 计算状态微分和状态变量之间的 CE, 根据 CE 来选择方程的变量。

⁷实验代码: <https://github.com/majianthu/transfarentropy>



(a) TE



(b) KCI



(c) CDC

图 2: 由三种因果关系度量估计的从压力到 PM2.5 的因果关系强度变化图.

该方法中的差分算子可以由以下非参数方式计算得到：

$$\frac{dx}{dt}\bigg|_{t=t_0} = \frac{x_{t_1} - x_{t_0}}{t_1 - t_0}. \quad (9)$$

而 CE 可以由非参数估计方法得到。因此，所提出的方法是非参数的，不做任何假设，适用于任何动态系统的辨识。

作者将方法应用于经典的 3 维 Lorenz 系统，系统中包含了由一阶和二阶的状态变量组成的 3 个方程，该方法成功地从仿真数据中辨识出了系统方程中状态变量和状态微分变量之间的关系，证明了方法的有效性⁸。

3.6 时延估计

系统辨识 (System Identification) 是现代系统理论中研究系统特性的重要工具方法，主要是研究如何从观测数据来确定描述系统行为的模型及其参数。时延 (Time Lag) 是一种动态系统中普遍存在的特性，指一个变量作用于另一个变量需要的时间。由于物质、能量或信息的传输时间，时延存在于所有物理、社会和生物系统中的因果效应发生的时间先后关系上。因此，时延参数的估计是重要的理论问题，具有广泛的应用价值，比如可以用来分析交通系统中的拥堵传播、太阳活动对地球系统的影响、政策效应的分析等诸多问题。

传统的时延估计的主要方法是基于时序变量的自相关系数，但其具有线性假设，因此作用范围十分有限。另一种主要方法是时延互信息 (Time-delayed MI)，可以去除线性假设的限制，适用于具有非线性特性的时序变量。但这两种方法本质上都是对称关系的度量，而系统时延由于是因果关系的属性，因此是非对称的关系。TE 作为一种非对称的因果关系度量，量化了从因变量到果变量作用关系的信息量，因而更适用于估计因果时延特性。

动态系统的时延可以通过从时序数据估计 TE 统计量来进行估计，但传统的 TE 估计问题被认为十分困难。马健 [13] 提出利用上述基于 CE 的 TE 估计方法来解决时延估计问题，先估计时延窗口内的因变量到果变量的一组 TE 值，再将 TE 的最大值对应的时延作为时延参数的值。由于该 TE 估计器是非参数的，因此不对动态系统做任何假设，具有普适性。

作者仿真了四个具有不同动态特性的时延动态系统以验证方法的有效性，发现该方法可以准确地从系统的仿真数据中估计出相应的时延参数。作者又将方法应用于摩洛哥蒂头万 (Tétouan) 城的电力负荷数据，分析五种天气因素对该城三个区域电力负荷影响的时延特征，发现了不同天气因素对负荷产生影响的时延长度，以及影响的每日变化特征⁹。

⁸实验代码：<https://github.com/majianthu/sysid>

⁹实验代码：<https://github.com/majianthu/timelag>

3.7 域自适应

域自适应 (Domain Adaptation: DA) 是一类常见的问题, 是指训练模型的数据与应用模型的数据的概率分布不同时, 需要让训练的模型适应分布的偏移的情况。DA 问题具有重要的现实意义。比如, 将在一个医院采集的数据上训练好的模型应用到其他医院时, 可能由于数据采集设备的不同导致采集的数据发生分布偏移, 从而导致模型性能下降。同样的情况也会发生在其他领域 (如社会学) 的问题中, 比如由于人群的社会属性的不同, 由一个人群研究得到的模型结论在另一个人群上就会发生模型偏差。

基于 CE 的条件独立性度量作为一种基本的统计学工具, 可以用于解决 DA 问题。马健 [11] 提出了一种从因果角度解决 DA 问题的方法。他假设自变量 X 到预测变量 Y 在不同域 D_i 上的关系是不变的, 将数据分布迁移视为一个由外在条件变量 Z 在 D_i 上作用不同导致的结果, 这样 DA 问题就转化为学习自变量 X 、预测变量 Y 和外在变量 Z 之间统计关系的问题, 需要发现 X, Y 之间不变的依赖关系, 二者的依赖关系以外在变量为条件, 即判断是否

$$X \not\perp\!\!\!\perp Y|Z. \quad (10)$$

这时, 利用基于 CE 的条件独立性测试就能发现域迁移条件 Z 背后的 X 和 Y 之间不变的因果关系, 从而很好地解决了 DA 问题。

作者设计了仿真实验验证了方法的有效性, 并将方法成功应用于社会学的男女收入不平等的社会原因分析问题¹⁰。

3.8 正态性检验

正态分布是一类非常重要的概率分布函数, 在所有概率函数中居于中心地位, 且在实际问题中大量存在。正态性是很多统计模型和方法中的假设条件, 因此在应用中检验分布正态性的方法成为了一个十分必要的工具。正态性检验 (Normality Test) 是一类检验分布正态性假设的假设检验方法, 分为单变量和多变量两类。传统的正态性检验方法很多, 比如基于矩、特征函数、熵或最优传输等概念工具的方法等。

CE 作为衡量变量间全阶次相关关系的度量工具, 也可以用于检验二阶相关特性的正态性检验问题。我们都知道, 根据最大熵原理, 在二阶统计量相同的情况下, 在所有分布中正态分布的熵最大。由于正态分布完全由其一阶和二阶统计量决定, 因此正态分布的 CE 中包含的是二阶相关性对应的信息。可以很容易推导, 在正态分布的条件下, CE 与二阶统计量具有等价关系。具体地, 假设高斯随机向量 \mathbf{X}_n 的协方差为 $V_{\mathbf{x}}$, 则其 CE 与 $V_{\mathbf{x}}$ 之间存在如下关系:

$$H_c(\mathbf{x}_n) = \frac{1}{2} \log |V_{\mathbf{x}}|. \quad (11)$$

¹⁰实验代码: <https://github.com/majianthu/cda>

而在非正态分布中, 相关关系不仅是二阶的, 也有高阶的, 因而 CE 包含的信息除了二阶相关关系对应的信息外, 也有高阶相关关系对应的信息, 且非高斯性越强, CE 中高阶相关的信息越多。同时, 由于熵是全阶次的信息量, 因此 CE 度量了包括二阶相关信息在内的全部阶次相关性信息。

马健 [12] 利用高斯分布的 CE 与二阶统计量之间等价关系提出了一种多变量正态性检验的方法, 通过计算分布与同方差的高斯分布在 CE 统计量的差值来衡量联合分布的正态性, 由此得到的正态性检验的统计量定义为

$$T_{ce} = H_c(\mathbf{x}) - H_c(\mathbf{x}_n), \quad (12)$$

其中, \mathbf{x}_n 是与 \mathbf{x} 具有相同方差的高斯随机向量。易知, 当分布为高斯分布时 $T_{ce} = 0$; 且多元分布的非高斯性越强, T_{ce} 的数值越大。

马健同时给出了此统计量的估计方法¹¹, 包括了十分简单的两部分: 式(12)的第一项可以由 CE 的非参数估计方法得到, 第二项即是式(11)的值, 可先估计协方差矩阵 V_x 再解析计算得到。

作者设计了两组仿真实验, 仿真了两类非高斯性的情况, 并将此检验方法与 5 种经典的同类方法进行了对比, 证明了此检验方法的有效性和对传统 5 种经典方法的优越性¹²。

3.9 双样本检验

双样本检验 (Two-sample test) 是统计学中另一类重要的假设检验方法, 用于测试两组样本是否来自同一个分布函数。很多统计学的理论方法可以转化成双样本检验问题, 如对称性测试就可以转化成检验对称变换的样本是否同分布的问题, 又如变点检测 (Change Point Detection) 其实就是寻找一组双样本检测中样本间差异最大的点。同时, 双样本检验又具有广泛的应用价值, 比如可以检测临床治疗、政策实施等人为干预前后目标变量是否发生了变化等。常见的双样本检验方法很多, 如双样本 T 检验, K-S 检验和基于核函数的检验等。但 these 方法都有各自的不足之处, 比如 T 检验需要正态分布假设, K-S 检验只能作用于单变量情况, 而核函数方法需要超参数的调试等。

马健 [15] 提出了一种基于 CE 的双样本检验方法¹³, 思想是基于样本与检验标注之间的相关性程度来定义检验统计量。给定两组样本 $\mathbf{X}_0 = \{X_{01}, \dots, X_{0m}\} \sim P_0$ 和 $\mathbf{X}_1 = \{X_{11}, \dots, X_{1n}\} \sim P_1$, 该检验的零假设为

$$H_0 : P_0 = P_1, \quad (13)$$

对立假设为

$$H_1 : P_0 \neq P_1. \quad (14)$$

¹¹ 此方法已在 R 和 Python 语言的 `copent` 包 [206] 中实现。

¹² 实验代码: <https://github.com/majianthu/mvnt>

¹³ 此方法已在 R 和 Python 语言的 `copent` 包 [206] 中实现。

定义 $\mathbf{X} = (\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1)$, 以及两个检验标注变量 $Y_0 = (1_1, \dots, 1_{m+n})$ 和 $Y_1 = (1_1, \dots, 1_m, 2_1, \dots, 2_n)$, 则该检验的统计量可通过零假设和对立假设的 CE 差来定义:

$$T_{ce} = H_c(\mathbf{X}, Y_0) - H_c(\mathbf{X}, Y_1). \quad (15)$$

易知, 当 H_0 为真时, T_{ce} 较小; 而当 H_1 为真时, 则较大。作者给出了基于 CE 非参数估计的统计量估计方法。因此, 该检验方法是多变量非参数检验, 且无需调参。作者在 3 组由正态分布和正态 Copula 仿真的数据上验证该方法的有效性, 并将方法与基于 MI、核函数和 dCor 的三种多变量非参数检验方法进行了对比, 发现该方法有效检验了仿真实验中的双样本假设, 与同类方法相比具有同等或更好的检验性能¹⁴。

3.10 变点检测

变点检测 (Change Point Detection) 是统计学中一个典型的时间序列分析任务, 是指在一个时间序列中检测发生的系统状态突变。检测问题可以是离线检测或在线检测, 单点检测或多点检测, 检测对象可以是单变量数据或多变量数据。问题在上个世纪 50 年代就被提出, 经过长时间的研究, 目前已经提出了大量的检测算法。变点检测的应用领域十分广泛, 可以用于检测自然系统、生命系统、社会系统、或工业系统中发生的各种突变。

变点检测问题可以转化为双样本检验问题, 即在时间序列的每个点上, 对该点前后的数据做双样本检验测试, 检验统计量最大的点即可认为是发生了状态改变的变点。Ma [16] 根据这一原理, 利用 3.9 提到的基于 CE 的双样本检验, 提出了一种非参数多变量的单变点检测方法, 继而又结合单变点检验方法和二分分割策略提出了一种多变点检测方法¹⁵, 该方法包括以下步骤:

1. 对待检测时间序列进行单变点检测;
2. 若检测的统计量大于设定的阈值, 则将检测到的变点前后序列分别加入待检测时间序列;
3. 继续进行检测, 直至所有序列检测完毕。

方法中采用阈值来判断某一段序列上是否存在变点, 从而能够自动估计变点的个数。他在一组仿真数据上验证了方法, 并与传统经典方法进行了对比, 证明了该方法的有效性和优越性; 又在典型的变点检测测试数据——尼罗河年径流数据上验证了方法, 结果该方法成功检测到了数据中年径流变化的变点¹⁶。

¹⁴实验代码: <https://github.com/majianthu/tst>

¹⁵此方法已在 Python 语言的 copent 包 [206] 中实现。

¹⁶实验代码: <https://github.com/majianthu/cpd>

4 讨论

4.1 理论应用之间的联系

以上介绍的 CE 的前四个理论应用之间有着内在的联系。从理论上讲，它们都是基于 CE 对统计独立和条件独立的度量的理论框架，学习某种内在的统计关系，这是共同点。区别在于这四个应用研究的关系不同，以及关联结构的表示方式不同。关联发现问题主要关注成对变量之间的静态的统计相关，表示为相关矩阵的形式；结构学习则关注一组变量之间整体的关联结构，表示为图的形式；变量选择的目的是要建立一个多对一的关联结构，最终要表示为函数的形式；时序因果发现是动态系统中的因果关系，它也可以构建表示变量之间因果关系的有向图结构，也可以用来进行变量选择，构建时序预测的函数关系模型。总之，利用 CE 度量统计独立和条件独立关系，可以估计随机变量之间的相关性和因果性关系强度，进而通过相关或因果关系发现表示成基本的矩阵形式，通过结构学习生成直观的无向或有向图的形式，或者通过变量选择构造具有预测能力的静态或动态时序的函数模型的形式。

基于 CE 概念的独立性检验和条件独立性检验是其他理论应用的基础，通过问题之间内在的上下游关系构成了一个方法论体系，为各种问题的求解提供了一个功能丰富的工具箱。独立性检验可以用来解决建立模型过程中的变量选择问题，这样的模型可以是特定类型的函数，如生存分析函数，也可以是动态过程模型，如我们在系统辨识应用中估计的微分方程。条件独立性检验可以直接用来估计 TE，进而进行时序变量之间的因果分析；利用 TE 方法又可以估计动态系统中的时延参数。基于 CE 概念可以用来解决假设检验问题，包括面向多元正态性的单样本检验和普适的双样本检验，而得到的双样本检验又可以解决时序分析中的变点检测问题。

4.2 相关性和因果性

相关性和因果性是统计学中的两个基础性概念，对应于概率论中的统计独立和条件独立。统计独立和条件独立是两个不同的概念，但又有着内在的联系。我们通过 CE 的概念，给出二者之间的内在联系的理论框架，以及在此理论框架基础上的估计方法。

前者可以用 CE 来衡量。CE 是一个完美的衡量统计独立性/相关性的数学概念，具有很多数学家梦寐以求的独立性度量的公理属性。它等价于信息论中的 MI 概念。后者可以用 TE 来衡量。TE 等价于条件 MI。我们证明了 TE 可以用 CE 来表示。也就是说，条件独立可以通过统计独立来表示和计算。因此二者之间具有内在的理论联系。后者可以用 TE 来衡量。TE 等价于条件 MI。因此，二者之间具有内在的理论联系。

相关性不等于因果性，二者是不同的概念，但人们有时却很容易误把二者

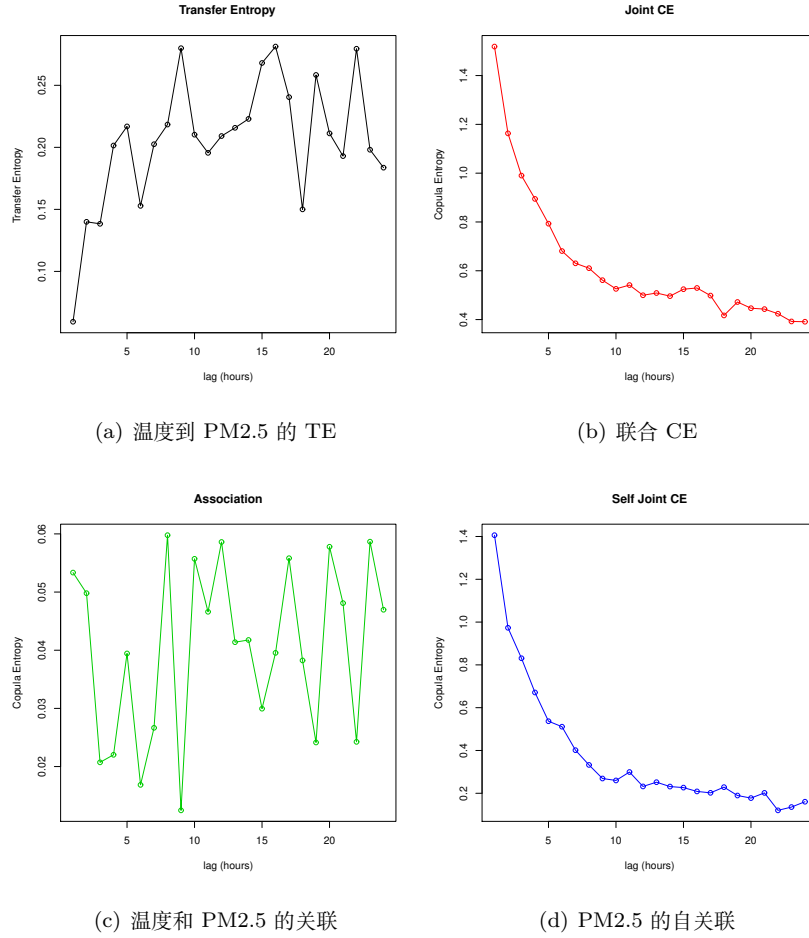


图 3: 对温度到 PM2.5 的 TE 变化的分解.

等同起来。举一个我们做的时序因果发现的研究 [10] 作为例子加以说明。论文给出了一种利用 CE 来估计 TE 的算法，并采用了一个环境气象的数据来验证 TE 估计算法 [10]。数据是北京的 PM2.5 观测数据，以及同时观测到的北京地区气象数据。论文实验分析了气象因素（温度、露点、气压和风速等）对 PM2.5 浓度的因果强度，用从时序观测数据中估计的 TE 来衡量，发现了二者之间的因果关系变化规律。

这里要强调的是论文的讨论部分。我们讨论对比了时序相关性和时序因果性，发现即使是气象因素和 PM2.5 浓度之间相关性微弱的情况下，二者之间仍然有时滞因果关系。论文以温度因素为例（图3），对此做了说明。子图 (a) 和 (c) 分别对应 TE 和 CE，也就是因果性和相关性。我们可以发现，相关性强度几乎为 0，而因果性强度依然很高。

我们认为，这一分析结果是由时序观测的对象系统的动态性造成的，气象

因素对 PM2.5 浓度变化的影响不是即时的,而是由于大气系统的内部运动过程,有一个滞后的效应所致。此时,时序变量之间没有即时的相关关系,但存在时滞的因果关系。

4.3 三种理论框架的对比

我们提出了一个基于 CE 概念,能够将独立性和条件独立性两个基本概念相统一的理论框架。与此类似,核函数的方法 [219,232] 和距离相关的方法 [221,233] 也可以应用到这两个概念的度量问题上,也分别构成了类似的理论框架。但基于 CE 的理论框架更优越,理论上,CE 的定义更严格;计算上,基于 CE 的估计方法也更简单优雅,普遍适用,且计算量相对要小。

我们利用表1对比了三种统计独立度量概念,可以看到 CE 具有多方面的理论优势。比如,CE 天然的是一个多变量的度量,而其他二者需要通过扩展定义来满足多变量的情况;CE 具有单调变换不变性和在高斯条件下与相关系数等价等属性,而 DC 也具有类似的等价关系 [220],HSIC 则未知。在计算成本上,CE 计算复杂度低,而其他二者则具有较高的计算复杂度。

三种度量框架都发展出了一套系统的方法论体系,包含了独立性检验、条件独立性检验、正态性检验、双样本检验和变点检测等方法。在变量选择和因果发现两个理论应用中,我们利用真实数据对比三种框架中的独立性测试和条件独立性测试方法。实验结果表明了 CE 框架的(条件)独立性度量工具均优于其他两个框架中的相应的工具,能够更高效、准确地发现更多的相关或因果关系。三个理论框架都包含有正态性检验和双样本检验等假设检验方法,但基于 CE 的方法理论更严格,也因此仿真数据对比实验上表现出了更优越的检验能力。CE 框架和核函数框架都基于各自的双样本检验方法发展出了多变量非参数变点检测方法,仿真实验表明,前者具有更优越的检测性能。

5 性能评测

5.1 概述

我们提出了 CE 理论,利用其解决了统计学领域的几个基本问题,包括独立性/条件独立性检验、多元正态性检验、双样本检验和变点检测等,进而形成了一个系统的方法论体系。同时,本领域内已经存在大量的针对这些问题的同类方法。为了将基于 CE 的方法与这些同类方法进行对比,我们进行了针对不同问题同类方法的评估实验,实验以仿真为主。我们在 R 语言 `copent` 算法包 [206] 中实现了基于 CE 的 5 个方法,并调研整理了 R 语言和 Python 语言实现的每个问题的 CE 同类算法,利用这些算法实现完成了评估对比实验。本部分将给出这些评估实验的设计和结果,以便读者了解基于 CE 的方法相对于其各自同类方法的性能优势。

表 1: 三种统计独立性度量框架的对比.

框架	CE	DC	HSIC
定义	基于 Copula 函数	相关性的非线性扩展	基于核函数
多变量	是	[234]	[219]
不变性	单调变换不变	线性变换不变	无
Pearson 相关	高斯性假设下等价	高斯性假设下等价	未知
计算复杂度	$O(n^2)$	$O(n^4)$	$O(n^4)$
独立性检验	[5]	[220, 234]	[218, 219]
条件独立性检验	[10]	[233]	[232]
正态性检验	[12]	[235]	[236]
双样本检验	[15]	[237]	[238]
变点检测	[16]	—	[239]

从理论的角度来看, CE 具有着坚实的数学基础和性能良好的非参数估计方法, 从而使其方法体系体现出了科学性和普适性。在所有对比实验上, 基于 CE 的方法都展现了所有方法中最好的评估结果。基于这些仿真实验结果, 作者认为 CE 理论给出了解决这些统计学问题最为科学且有效的方法论体系。

5.2 独立性检验

独立性是概率统计领域的基本性概念, 具有基础性的重要地位。从统计学初期的皮尔逊相关系数开始, 如何度量这种统计学的概念就一直是本学科关注的核心问题之一, 有大量的度量方法根据不同的思想或原则被提出来。这其中, 就包括前述的 CE 等三种理论框架的方法。那么哪一种方法是最理想的度量呢? 理论上, 为了回答此问题, Rényi [240] 曾经提出了著名的独立性度量的公理系统, 包括了 7 条公理。Schweizer 和 Wolff [241] 在提出他们基于 Copula 的度量时, 对 Rényi 的公理系统又做了修正。

如何从实验的角度评估对比这些度量方法是一个重要的问题。马健 [17] 设计了一组仿真实验¹⁷, 对现有的 16 种独立性度量进行了对比 (度量方法及实现见表2), 仿真实验考虑了变量为线性/非线性、高斯性/非高斯性的情况, 也考虑了度量方法为二元/多元、单变量相关/多变量相关等情况, 对多种不同角度进行了组合, 其中二元独立性度量 16 种, 多元独立性度量 6 种。我们设计了 6 组仿真实验生成实验数据, 其中前三组为二元独立性实验, 第四、五组为三元独立性实验, 第六组为四元正态分布仿真实验, 仿真两个二元随机向量之间的独立性, 具体实验设置如下:

1. 二元正态分布, 协方差从 0 以 0.1 步长增加到 0.9;

¹⁷实验代码: <https://github.com/majianthu/eval>

表 2: 评估的独立性度量方法及其软件实现.

算法包	独立性度量	语言
copent	CE [5]	R
stats	Ktau [242]	R
energy	dCor [220]	R
dHSIC	dHSIC [219]	R
HHG	HHG.chisq, HHG.lr [223]	R
independence	Hoeff [224], BDtau [225]	R
Ball	Ball [226]	R
qad	QAD [243]	R
BET	BET [244]	R
MixedIndTests	Mixed [245]	R
subcopem2D	subcopula [246]	R
EDMeasure	MDM [247]	R
FOCI	CODEC [248]	R
NNS	NNS [249]	R

- 二元正态 copula 函数, 两个固定的边缘函数分别为正态分布和指数分布, copula 函数参数从 0 以 0.1 步长增加到 0.9;
- 二元阿基米德 copula 函数 (包括 Clayton, Frank 和 Gumbel 三种), 参数从 1 增加到 10, 边缘函数与上同;
- 三元正态分布, 3 个协方差相等且从 0 以 0.1 步长增加到 0.9;
- 三元 Gumbel copula 函数, 参数从 1 增加到 10, 一个边缘函数为正态分布, 另两个边缘函数为指数分布, 边缘函数参数固定不变;
- 四元正态分布, 用于仿真两组变量间的独立性关系, 4 个变量分为两组, 组内协方差固定不变, 两组间的 4 个协方差相等且从 0 以 0.1 步长增加到 0.8。

六组仿真实验的结果分别见图4、图5、图6、图7和图8。同时, 作者也在两组实际数据 (心脏病数据和葡萄酒数据) 上对上述度量的性能进行了对比, 结果见 [17]。以上实验结果表明, 基于 CE 的独立性度量在所有情况中都表现了最好的性能, 给出了最合理的独立性度量估计值。

5.3 条件独立性检验

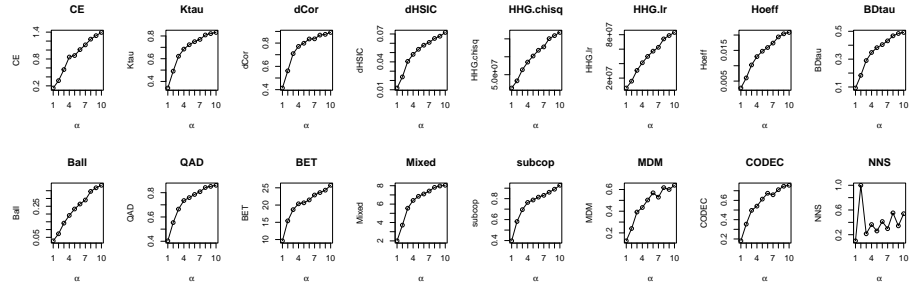
条件独立性是另一个统计学的基础性概念, 与很多其他理论问题密切相连 [250]。我们证明了 TE 可以由 CE 来表示的结论, 并给出了相应的估计算法 [10]。



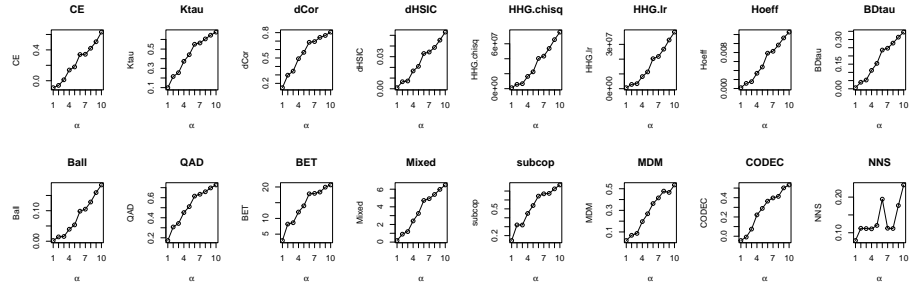
图 4: 二元独立性检验对比实验 (二元正态分布) .



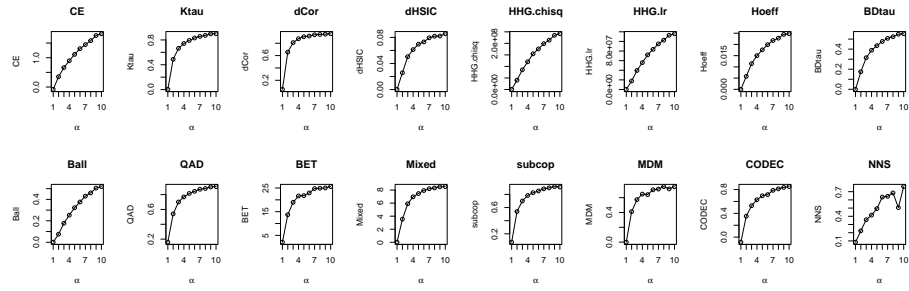
图 5: 二元独立性检验对比实验 (二元正态 Copula 函数) .



(a) Clayton Copula

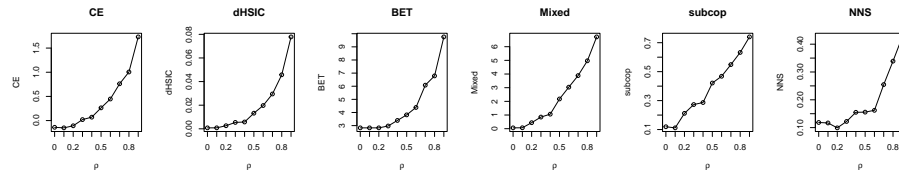


(b) Frank Copula

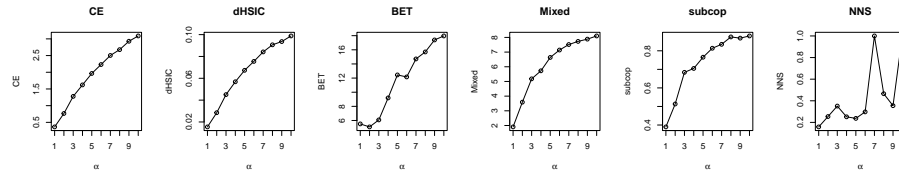


(c) Gumbel Copula

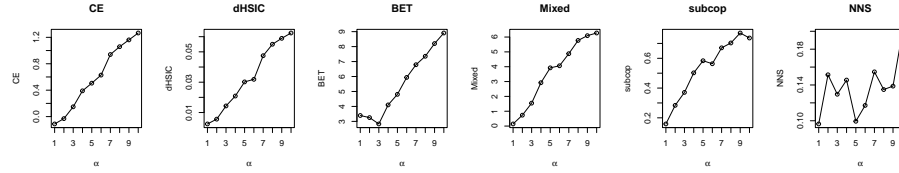
图 6: 二元独立性检验对比实验 (二元阿基米德 Copula 函数) .



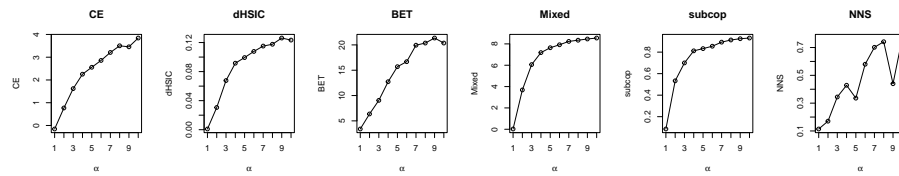
(a) 三元正态分布



(b) 三元 Clayton Copula 函数



(c) 三元 Frank Copula 函数



(d) 三元 Gumbel Copula 函数

图 7: 多元独立性检验对比实验.

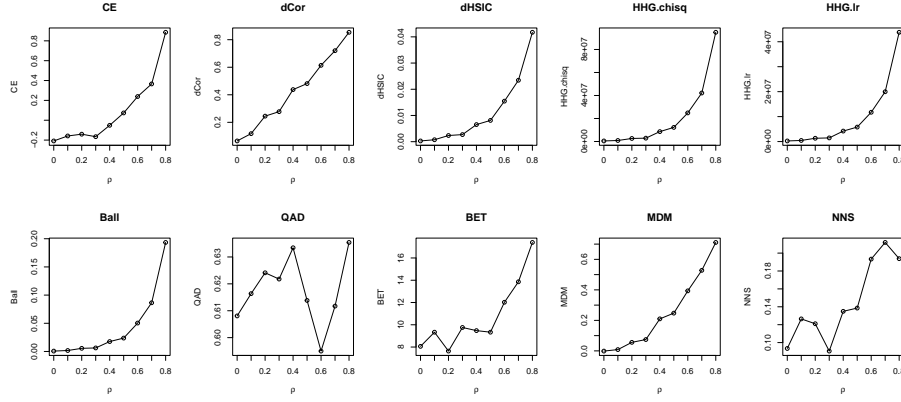


图 8: 多元随机向量独立性检验对比实验 (四元正态分布)。

因为 TE 本质上是条件互信息, 因此我们也同时给出了一个基于信息论的条件独立性度量方法。本领域内也存在一些基于其他理论的同类度量方法 (见表3), 如前述的基于距离相关的方法 [233]、基于核函数的方法 [232, 251]、基于 copula 的方法 [252] 等等。

为了对比这些方法, 我们设计了两组仿真实验并采用了一组实际数据来评估表3中包括 CE 在内的 16 种条件独立性方法的效果¹⁸。仿真实验利用如下分布生成数据, 包括

1. 三元正态分布, 两个协方差固定不变, 条件变量对应的第三个协方差 ρ_{xz} 从 0 以 0.1 步长增加到 0.9, 以模拟条件独立性强度变化;
2. 三元正态 copula 函数, copula 函数中条件变量对应的第三个协方差 ρ_{xz} 从 0 以 0.1 步长增加到 0.9, 以模拟条件独立性强度变化。

这样, 我们就基于三元正态分布和三元正态 copula 函数得到的仿真数据生成强度逐渐变化的一组条件独立性关系。我们将这 16 种条件独立性度量方法用于这两组仿真实验数据估计条件独立性强度。结果表明, CE 方法在仿真数据上能够评估出渐次变化的条件独立性强度 (结果见图9和图10), 给出较同类方法同样或更优的估计结果。

5.4 正态性检验

正态性假设是统计学分析中最常见的理论假设之一, 其假设检验方法一直以来都是本领域的重要研究课题, 大量正态性检验方法被提出来, 如 BHEP 方法、基于偏度和散度的方法、基于距离相关的方法等等 [263]。我们基于 CE 概念提出了一个多元正态性检验的方法, 并给出了统计量的估计算法 [12]。为了与

¹⁸实验代码: <https://github.com/majianthu/eval>

表 3: 评估的条件独立性度量方法及其软件实现.

算法包	条件独立性度量	语言
copent	CE [10]	R
EDMeasure	CMDM [253]	R
FOCI	CODEC [254]	R
RCIT	RCoT [251]	R
cdcsis	CDC [233]	R
GeneralisedCovarianceMeasure	GCM [255]	R
weightedGCM	wGCM [256]	R
KPC	KPC [257]	R
ppcor	pcor	R
parCopCITest	pcop [252]	R
causallearn	KCI [232]	Python
pycit	CMI1 [258]	Python
knncmi	CMI2 [259]	Python
fcit	FCIT [260]	Python
CCIT	CCIT [261]	Python
pcit	PCIT [262]	Python

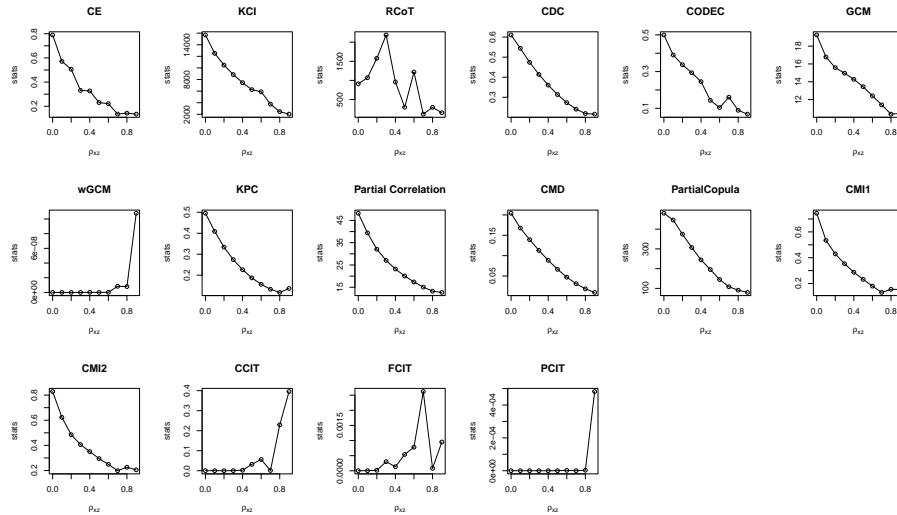


图 9: 在三元正态分布上仿真条件独立性关系的评估实验的结果。

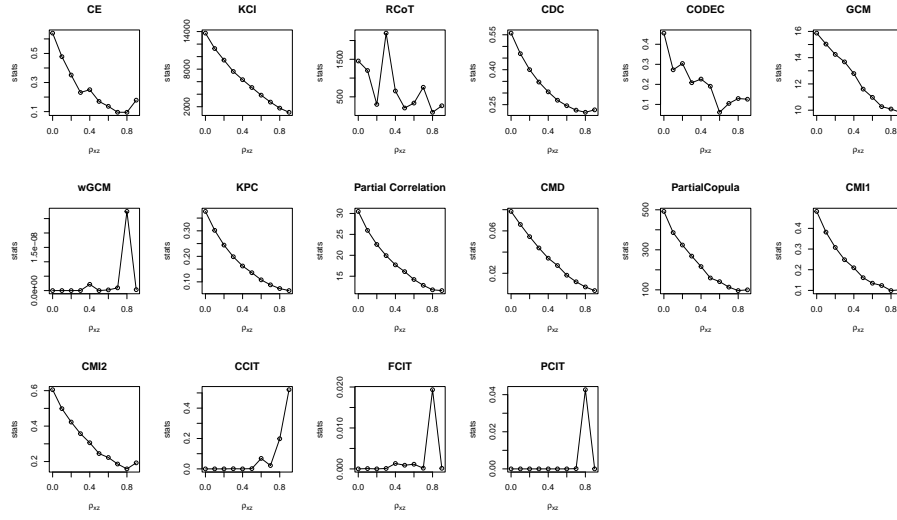


图 10: 在三元正态 copula 函数上仿真条件独立性关系的仿真实验的评估结果。

同类算法进行对比，我们调研得到了基于 R 语言实现的 29 种重要的多元正态性检验方法（见表4），并与基于 CE 的方法进行对比。我们设计了两组仿真实验¹⁹来模拟不同的非正态性分布情况：

1. 第一组实验仿真多元分布由二元正态 copula 函数和两个边缘函数（正态分布和指数分布）生成，其中由指数边缘分布的参数 *rate* 变化来仿真非正态性的增加；
2. 第二组实验仿真多元分布由二元 Gumbel copula 函数和两个正态边缘函数生成，其中由 copula 函数的参数变量 *alpha* 来仿真非正态性的变化。

我们将 CE 和其他 29 种检验方法应用于这两组仿真数据得到检验统计量。实验结果见图11和图12，可以看出基于 CE 的方法的统计量能够反映出数据分布非正态性的变化，且对比方法的效果更准确合理。

5.5 双样本检验

双样本检验是统计学中基础性的假设检验问题之一，很多其他的理论问题，如对称性检验、单样本检验和变点检测等问题都可以转化成此类问题。同时，对比两组分布的差异也是实际应用中经常面对的问题之一。双样本检验可分为单变量问题和多变量问题两种情况，相应地都有很多经典的方法，单变量的有 Wilcoxon 方法、Kruskal-Wallis 方法和 Kolmogorov-Smirnov 方法等 [267]，双样本检验有基于统计量的方法（如距离相关 [237]、核函数 [238]、HHG 统计

¹⁹实验代码：<https://github.com/majianthu/mvnt>

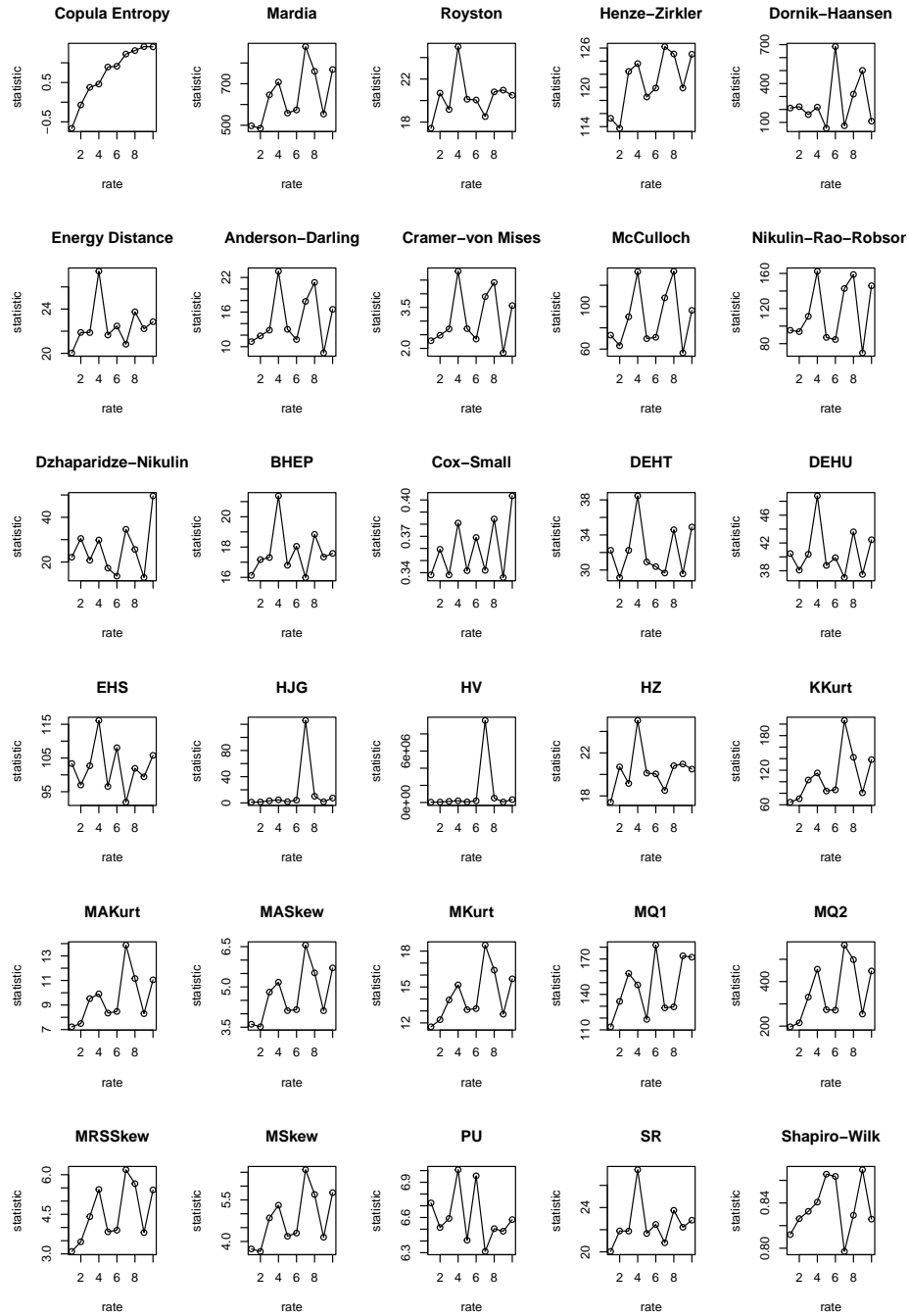


图 11: 基于边缘分布变化的多元正态性检验评估实验结果。



图 12: 基于 copula 函数变化的多元正态性检验评估实验结果。

表 4: 评估的多元正态性检验方法及其 R 语言软件实现.

算法包	检验方法
<code>copent</code>	CE [12]
<code>MVN</code> [264]	Mardia, Royston, Henze-Zirkler Dornik-Haansen, energy distance
<code>mvnTest</code> [265]	Anderson-Darling, Cramer-von Mises McCulloch, Nikulin-Rao-Robson Dzhaparidze-Nikulin
<code>mnt</code> [263]	BHEP, Cox-Small, DEHT, DEHU, EHS, HJG HV, HZ, KKurt, MAKurt, MASkew, MKurt MQ1, MQ2, MRSSkew, MSkew, PU, SR
<code>mvnormtest</code>	Shapiro-Wilk [266]

量 [223]、Ball 统计量 [268] 等) 和基于统计学习的方法 (如随机森林 [269]) 等。我们提出了一种基于 CE 的双样本检验方法, 并给出了统计量的估计算法 [15]。为了与同类方法进行对比, 我们调查整理了 R 语言环境下实现的单变量和多变量同类方法 (见表5和表6), 并设计了对比仿真实验²⁰。

单变量实验 单变量情况的对比仿真实验设计为检验两个不同的单变量正态分布, 有两组:

1. 第一组仿真首先生成一个均值 $\mu_0 = 0$ 的正态分布, 第二个正态分布的均值 μ_1 的值由 0 增加到 9, 两个分布方差均为 1;
2. 第二组仿真也是首先生成一个方差 $\delta_0 = 1$ 的正态分布, 第二个正态分布的方差 δ_1 的值则由 1 增加到 10, 两个分布均值均为 0。

我们利用所有双样本检验方法从仿真数据估计检验统计量。实验结果见图13。结果表明, CE 方法的统计量正确地反映了实验设定情况, 取得了与对比方法相同或更好的结果。

多变量实验 多变量情况的对比仿真实验也是设计为检验对比两个二元分布, 有三组:

1. 第一组仿真两个均值的差值逐渐变大的两个二元正态分布, 第一个均值 $u_0 = \mathbf{0}$, 第二个均值为 $[u_1, u_1]$, u_1 从 0 以 1 为步长增加到 9, 两个分布的协方差矩阵相同;

²⁰实验代码: <https://github.com/majianthu/tst>

表 5: 评估的单变量双样本检验方法及其 R 语言软件实现.

算法包	方法
<code>copent</code>	CE [15]
<code>stat</code>	Wilcoxon1 [267] Kruskal-Wallis [267]
<code>twosamples</code> [270]	CVM, KS, Kuiper WASS, DTS, AD
<code>robustTest</code> [271]	Wilcoxon2, Vartest

2. 第二组仿真首先仿真一个协方差 $\rho_0 = 0$ 的二元正态分布，第二个正态分布的协方差 ρ_1 则由 0 以 0.1 为步长增加到 0.9，两个分布的均值均为 0；
3. 第三组仿真也是首先仿真一个协方差 $\rho_0 = 0$ 的二元正态分布，第二个分布则由二元正态 `copula` 函数和两个边缘函数（正态函数和指数函数）生成，正态 `copula` 函数和边缘正态函数参数不变，指数函数的参数 `rate` 从 1 增加到 10，以仿真不断变大的二元非正态性。

我们利用这些检验方法从仿真数据估计检验统计量。三组实验结果分别见图14、图15和图16，从中可见基于 CE 的方法在多变量的情况下仍然具有良好的检验性能，很好地反映了不同情况下分布差异的变化，具有与对比方法相同或更优的检验能力。

5.6 变点检测

变点检测是时序数据分析领域重要的问题之一，可分为在线和离线、单变量和多变量、参数和非参数等不同类型。它在很多不同领域（如工业过程、神经数据分析、计量经济学等）都有重要应用。此问题很早就被提出，研究者提出了很多解决方法，相关综述见 [285–287]。我们基于 CE 提出了一种非参数多变点检测方法 [16]，可以在无分布假设的情况下应用到任何场合。为了与同类方法进行对比，我们调研整理了基于 R 语言实现的变点检测方法（见表7），并设计了对比仿真实验²¹。

对比仿真实验模拟了 6 种不同类型的情况，分别是

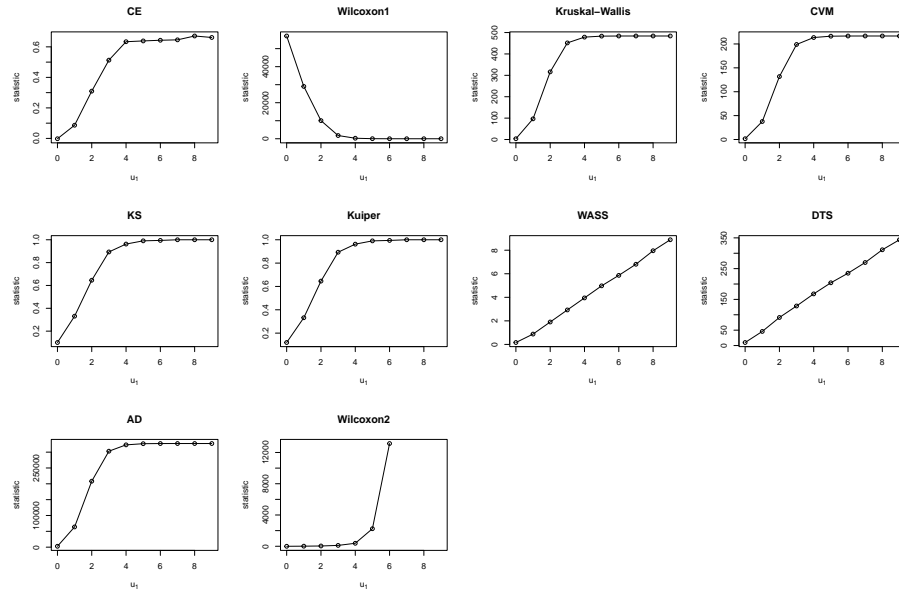
1. 单变量下均值变点、均值-方差变点和方差变点；
2. 多变量下均值变点、均值-方差变点和方差变点。

仿真实验的设计是这样的：首先生成 4 个均值-方差作出相应变化的单/多变量正态分布，再将仿真数据顺次连接以模拟分布变化具有 3 个变点的情况，最后

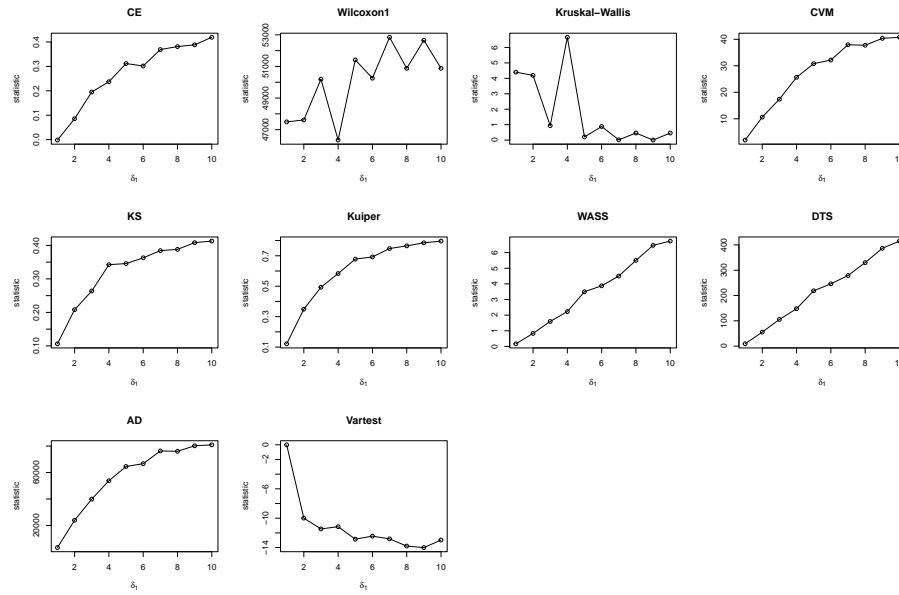
²¹实验代码：<https://github.com/majianthu/cpd>

表 6: 评估的多变量双样本检验方法及其 R 语言软件实现.

算法包	方法
<code>copent</code>	CE [15] MI [272, 273]
<code>kernlab</code> [274]	Kernel [238]
<code>energy</code>	Energy statistics [237]
<code>Ball</code>	Ball divergence [268]
<code>hypoRF</code>	Random Forest [269]
<code>HHG</code> [223]	HHG <code>sum.chisq</code> HHG <code>sum.lr</code> HHG <code>max.chisq</code> HHG <code>max.lr</code>
<code>cramer</code>	Cramer [275]
<code>TwoSampleTest.HD</code> [276]	TST.HD
<code>fasano.franceschini.test</code> [277]	F-F
<code>Peacock.test</code>	Peacock [278]
<code>diproperm</code>	DiProPerm [279]
<code>RandomProjectionTest</code>	RPT [280]
<code>DepthProc</code>	Depth [281]
<code>kSamples</code>	AD [282] QN [283]
<code>lawstat</code>	BM [284]



(a) 均值变化实验



(b) 方差变化实验

图 13: 单变量双样本检验评估实验结果。

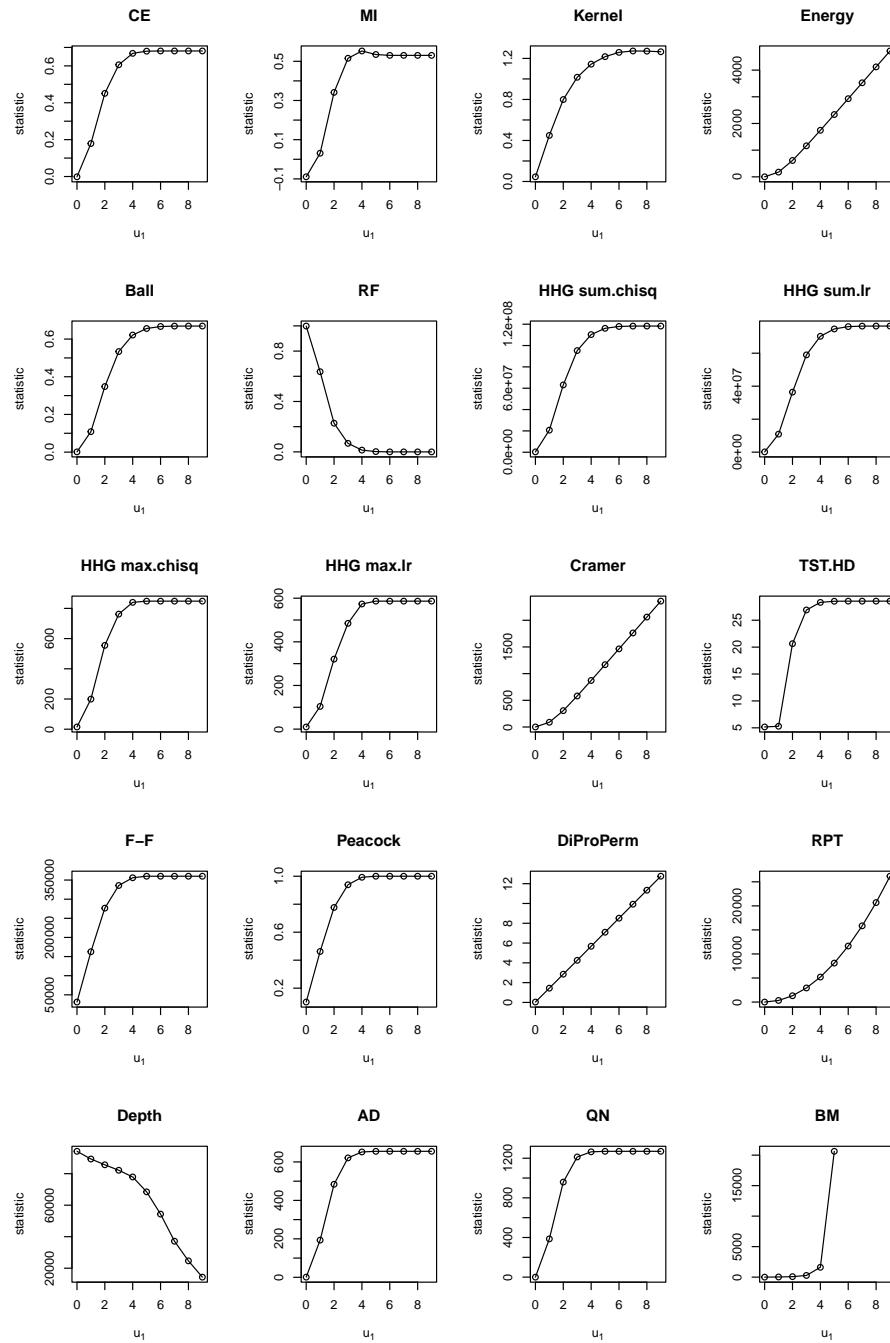


图 14: 多变量双样本检验评估实验 (均值变化) 结果。

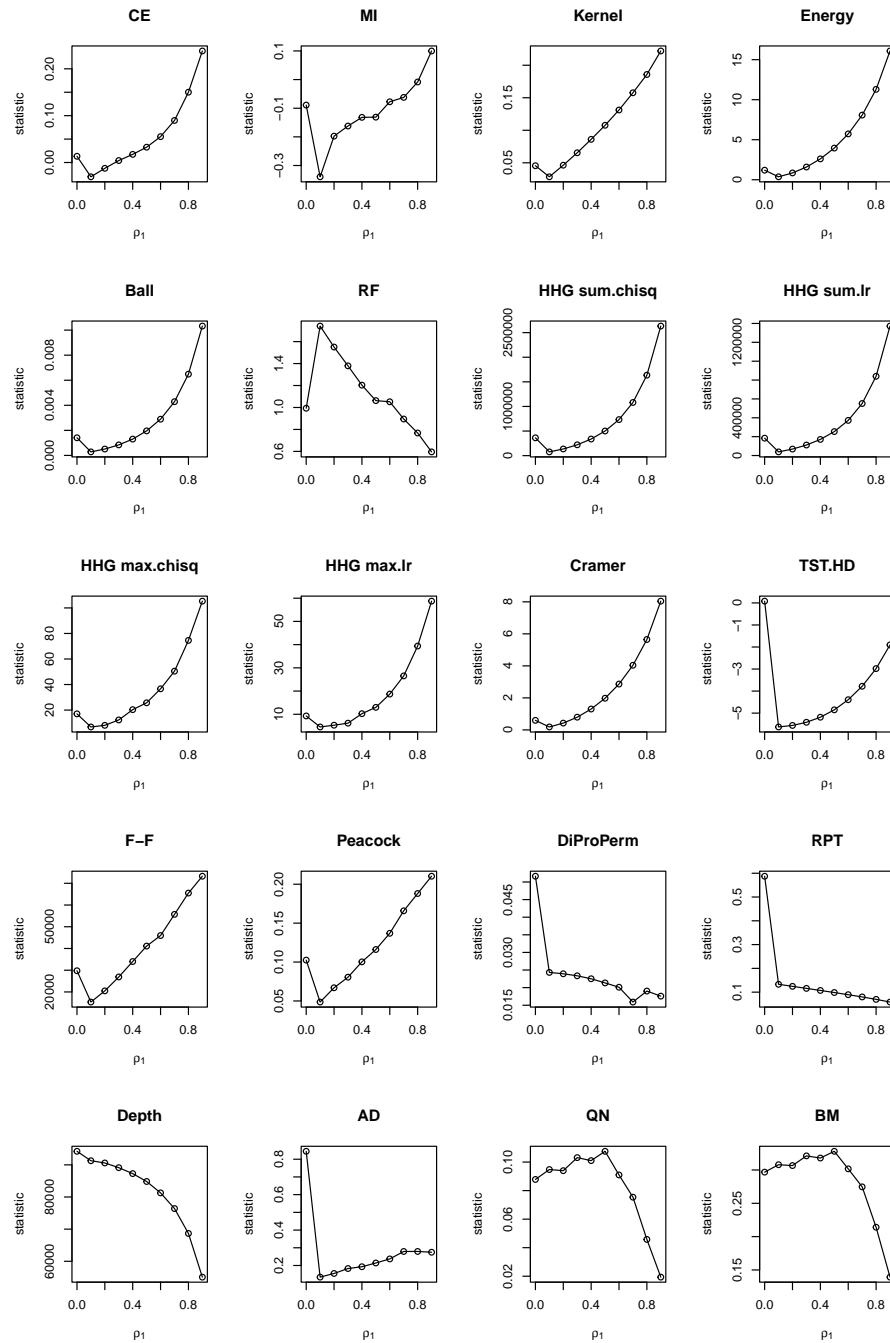


图 15: 多变量双样本检验评估实验 (协方差变化) 结果。

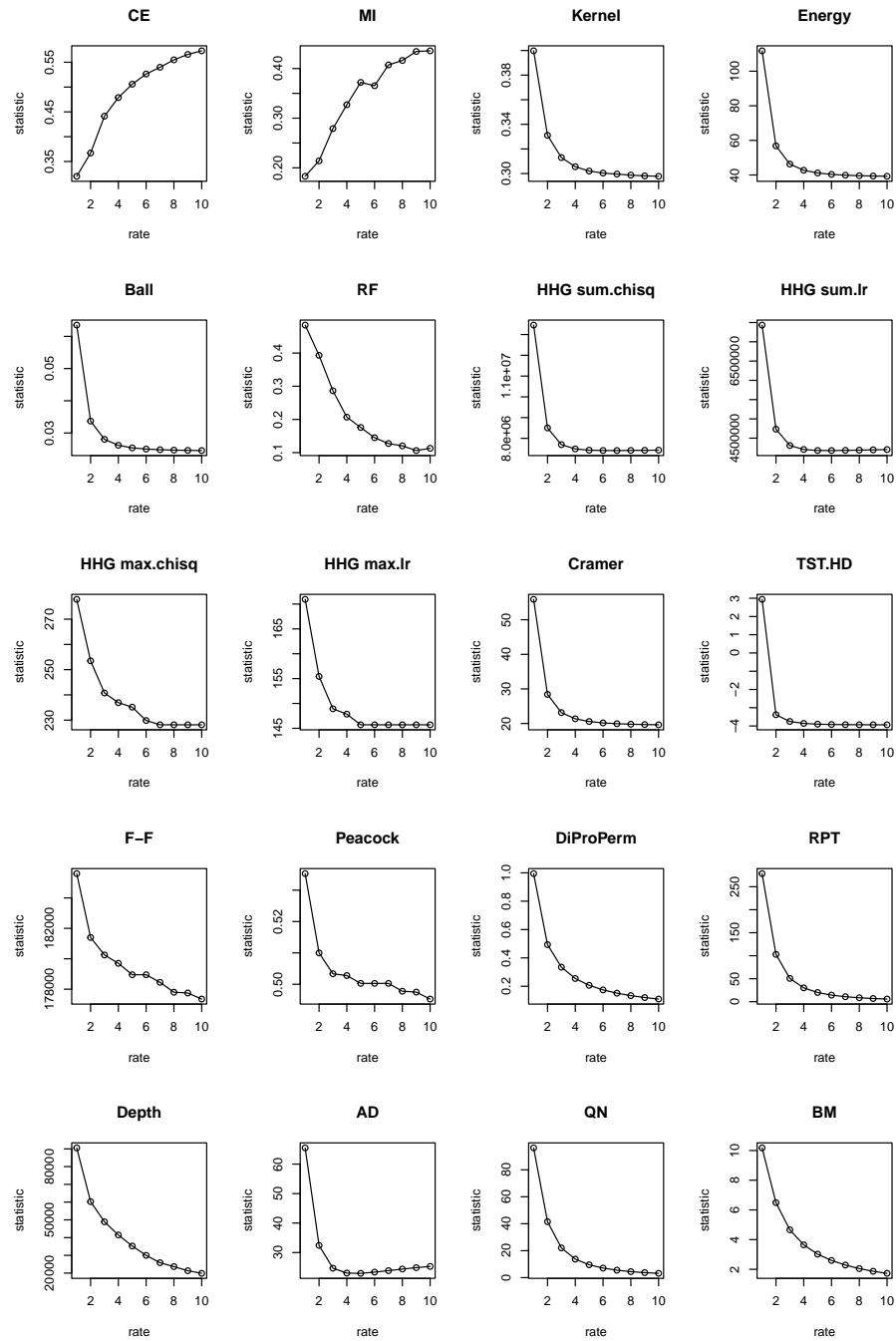


图 16: 多变量双样本检验评估实验 (正态 Copula 函数参数变化) 结果。

我们将表7中的 25 个算法包中适用于仿真变点情况的方法进行检测实验。结果表明，基于 CE 的方法能够检测出 6 种情况下的变点位置，获得了与对比方法相同或更好的结果。特别值得一提的是，基于 CE 的方法适用于所有不同的情况，而且其参数调节量最小，体现了良好的普适性和实用性。而一些对比方法则只适用于某种特定情况（单变量或多变量、均值或方差）的变点，且需要对检测参数进行调优。

6 实际应用

6.1 理论物理学

热力学是一门古老的理论物理学分支，在 19 世纪由克劳修斯、波尔兹曼和吉布斯等人建立，研究物理系统的宏观状态（如温度）与其微观状态之间的理论联系。熵和热力学第二定律是其最为核心理论内容。香农的信息论就是受热力学熵概念启发而建立的。一直以来，热力学和信息论之间的理论联系就是相关领域的重要话题之一。CE 是从信息论领域提出的数学概念，它的物理意义和解释一直未得到研究。马健 [18] 将 CE 理论应用于平衡态相关粒子系统中熵的推导和计算，给出了 CE 的热力学解释，建立了热力学和信息论之间的又一理论联系。

6.2 天体物理学

红移是宇宙星体的最重要信息之一，因其反映了星体距离地球的宇宙距离，可以用于研究星系演化和宇宙学。测光红移是一种从宇宙星体光学观测估计其红移的方法。由于光学观测相比于光谱观测更易于施行，因此测光红移是现代天文学巡天观测的主要手段之一，一般在获得测光红移信息后再对感兴趣的星体进行光谱观测。机器学习方法已经成为构建测光红移预测模型的主要方法之一，但其预测准确度仍有待提高。马健 [19] 提出利用基于 CE 的变量选择方法构建此类估计模型，以提高预测模型的准确度。该方法首先估计光学观测和红移之间的 CE 作为观测变量的重要性度量，再将重要的观测变量作为模型的输入来预测红移。他将方法应用于斯隆巡天类星体观测数据，结果表明，利用 CE 选择后得到的模型的准确度要高于未经过选择的模型，特别是在高红移 ($z > 4$) 的星体上，预测准确度得到了明显提升²²。同时，方法也选择出了具有可解释性的一组光学观测变量，包括光度星等、紫外波段亮度和标准差、和其他四个波段亮度等，为进一步天体物理研究和光学观测仪器设计提供了科学证据。

²²实验代码：<https://github.com/majianthu/quasar>

表 7: 多变点检测方法评估实验中的 R 语言算法软件实现.

算法包	单变量			多变量		
	均值	均值方差	方差	均值	均值方差	方差
copent [16]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
change point [288]	✓	✓	✓			
ecp [289]				✓	✓	✓
rid [290]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
CptNonPar [291]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
npwbs [292]	✓	✓	✓			
MFT [293]	✓					
jcp [294]	✓	✓				
InspectChange point [295]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
hdbinseg [296]				✓	✓	✓
change point.np [297]	✓	✓	✓			
change point.geo [298]				✓	✓	✓
mosum [299]	✓	✓	✓			
SNSeg [300]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
offlineChange [301]				✓	✓	✓
IDetect [302]	✓					
wbs [303]	✓					
breakfast [304]	✓					
mscp [305]	✓					
L2hdchange [306]				✓	✓	✓
fpop [307]	✓	✓	✓			
HD CD [308, 309]	✓	✓	✓	✓	✓	✓
HDDchange point [310]				✓	✓	✓
HDcpDetect [311]				✓	✓	✓
dec p [312]				✓	✓	✓

6.3 空间科学

电离层是指大气层从 50 公里到 1000 公里高度由大量离子和自由电子构成的区域。它的物理特性受太阳辐射活动的影响，同时也影响着通过其的微波传播。电子总量 (Total Electron Content: TEC) 是电离层的主要物理参数，对空间运行的卫星通讯系统和全球定位系统具有重要影响。多普勒频移 (Doppler Frequency Shift: DFS) 是检测电离层的技术之一，可以从通过传输信号的能量谱估计得到，它被研究证明可以反映电离层的短期变化。研究 TEC 和 DFS 之间的复杂关系，可以加深对电离层特性变化了解，对相关空间系统运行意义重大。但这种关系具有非线性复杂性，给研究构成了挑战。TE 作为一种研究非线性因果关系的数学工具，是研究这种关系的理想方法。Akerele 等 [20] 利用一组分析工具研究了赤道地区高频微波信号传输中 TEC 和 DFS 之间的非线性关系，其中利用了基于 CE 的 TE 作为因果关系分析工具。他们利用 2020 到 2021 年间尼日利亚 Abuja 和 Lagos 两地的高频多普勒系统测量数据和 NASA 的 TEC 数据，分析了上述关系。结果发现，TE 分析结果显示 TEC 的变化会导致 DFS 的显著变化，这一因果关系的强度会随着电离层季节变化而变化，而相关性分析并没有揭示这一因果关系。这一结论对高频微波通讯系统的管理具有重要参考价值。

6.4 地球物理学

土地干旱度是土地表面水分和能量动态交互过程的属性，传统的干旱度量大多使用气候条件变量的长期均值来进行计算，难以反映短期的地表水分-能量交互。蒸散是表征短期地表的水汽-能量交互过程的关键变量，包括土地和植物表面的水分散发，传统上根据土壤湿度和能量供应将其分成水分驱动、能量驱动和过渡型三种概念框架。研究表明，蒸散-土壤湿度关系也受其他因素影响，如云层、风速和植被等，考虑这些因素如何影响蒸散为开发新的土地干旱度分类框架提供了可能性。Shan 等 [21] 通过考虑土地-大气的短期耦合效应，提出了一种新的刻画土地干旱度的方法。该方法利用基于 CE 的条件互信息分别计算蒸散与土壤湿度和太阳辐射的因果关系强度，再利用这两种因果关系的差值将土地干旱度分为 6 种类型，分别对应到三种蒸散概念框架。他基于 1990 至 2020 年间夏季中国大陆的气温、露点温度、土壤湿度、潜在热流、敏感热流、蒸散和地表太阳辐射等逐小时记录数据，利用该方法得到了土地干旱度空间分布图，并与联合国环境规划署的干旱度指数进行了对比，发现该方法计算得到的条件互信息分布图与水分和能量的地理分布相符，由此得到的干旱度分布能够更精确地捕捉短期地表过程，因此提供了一种短期土地-大气交互过程的有价值的补充信息。该方法加深了对气候干旱特征的理解，提供了一种对极端热浪和骤发干旱等短期气候变化具有敏感度的表征工具方法。

6.5 理论化学

变构效应 (Allostery) 被认为“生命的第二秘密”，是普遍存在于几乎所有蛋白质的生命现象。它是指变构调节分子与蛋白质结合，诱导结合位点以外的远点发生变化的调节效应。最常见的变构系统模型是变构二状态模型，描述了变构过程的热力学循环。此类模型假设了受体活化是二状态过程，这与 NMR 实验揭示的多模态过程不相符合。深入理解配体诱导的受体活化的分子机制需要构建新的理论来理解配体结合点和激活点之间的热力学耦合关系。Cuendet 等 [22] 提出了一种新的理论，称为变构景观 (Allostery Landscape)，定义了热力学耦合函数来量化生物分子系统中的热力学耦合。他们指出新函数与 copula 密度函数和 CE 有密切联系，CE 定义了变构系统的信息传输属性，即配体结合点和激活点之间的信息传输。他们将新理论应用到丙氨酸二肽的 N 端和 C 端的热力学耦合分析中。

6.6 化学信息学

化学信息学是化学和信息学科的交叉学科，通过表征化学结构为数据，解决诸如分子设计、化学反应模拟和规划等问题。定量构效是该领域的前沿问题，研究分子结构与分子理化性质之间的定量关系，以指导具有指定特性的分子设计，应用广泛。分子理化特性可以理解为分子结构的某种对称变换不变性，而从数据学习得到这种不变性变换是分子设计的关键目标。Wieser 等 [23] 将对称变换学习问题转化为信息瓶颈 (Information Bottleneck) 问题，提出了一种对称变换信息瓶颈 (Symmetry-Transformation Information Bottleneck: STIB) 方法。该方法将分子表征表示为由两个部分组成的隐含表示，其中一个部分对应不变性表示，基于 MI (CE) 的变换不变性，设计了问题模型的学习算法。作者将算法应用于包含 13.4 万有机分子的 QM9 数据库 [313]，使用其中具有固定化学计量 ($C_7O_2H_{10}$) 的 6095 个分子的子集，并将其对应的带隙能量和极性作为目标不变性属性。实验结果表明，STIB 方法给出了能够学习出表征分子属性、带隙能量和极性不变性的对称变换，验证了方法的有效性。

6.7 材料学

耐热型含能材料是指具有高能量和高热稳定性的特殊材料，可以在高温的环境下保持稳定性质，因此是国防、航空航天和地质勘探等重点领域的关键性材料，如宇航和高超音速武器的推进燃料、深井钻探的炸药等。但此类材料数量稀少且实验研究具有极高危险性，因此设计此类材料是材料学家们一直努力攻克挑战性难题。“从头设计”含能材料需要经历“设计-筛选-评估”的流程，其中采用机器学习的方法构建材料结构-性质预测模型对设计的分子性质进行预测是材料分子筛选的关键步骤。传统的含能分子性质预测模型构建过程只采用了与热稳定性线性相关的分子特征，没有考虑与含能材料热分解温度具有非线性

性关系的因素,如晶体结构和堆积方式等。田杰 [24] 提出了一种结合皮尔逊相关系数和 CE 的特征选择方法,从分子拓扑结构和量子化学计算特征中选择与热分解温度具有相关性的特征,并构建预测模型。其中,CE 方法的引入是为了筛选和热分解温度具有非线性关系的特征。他收集了 460 个含能化合物,并生成了包含 286 个特征的数据集,并应用该方法筛选得到了 87 个特征,再将筛选的特征做为随机森林和 SVM 等模型的输入以预测化合物的热分解温度,最终得到了较传统方法更好的预测效果,交叉验证实验的预测误差控制在了 28.5°C 。他们将方法应用于自己设计的分子生成器生成的分子,最终筛选出 16 个具有良好热稳定潜能且爆轰能力很强的含能分子,验证了方法的实用价值。

近 β 钛合金具有低密度、高强度、高韧性、耐腐蚀等特点,是航空航天领域器件制造的关键材料之一。合金组件属性决定于微观结构和结晶材质,而材质与加工过程的形变模式高度相关。研究形变加工对晶体材质的影响是钛合金研究的关键问题之一。计算仿真技术是实物实验以外材料加工研究的新手段,如晶体可塑性等数值方法。Zhang 等 [25] 研究了近 β 钛合金在 β 区形变机制和材质演化之间的关系,利用实验仿真了 β 区形变的 8 种钛合金主要成分在三种滑动形变模式下的演化,利用 CE 计算了每种形变模式与各个成分含量之间的非线性相关性强度。结果发现,三种模式与除 $\{001\}\langle 100\rangle$ 成分外的其他成分高度相关,与已有研究结论相符合; γ 纤维和 $\{110\}\langle 001\rangle$ 材质表现出较低的相关性;同时, $\{112\}$ 和 $\{123\}$ 模式较 $\{110\}$ 模式具有更强的相关性,表明二者在高温形变过程中起决定性作用。

6.8 水文学

洪水是主要自然灾害之一,洪水预报是降低洪水损失和管理洪水资源的重要手段。基于降水数据的降水量-径流量模型可以用来预报一段时间后的洪水。但是,水系统具有复杂性和非线性的特点,导致建立这样的模型时选择正确的模型输入十分困难。陈璐等 [26-28] 提出利用 CE 的方法来选择输入并建立神经网络预报模型。相比于传统的方法,基于 CE 的方法可以建立高维模型且对单个变量的边缘分布不做假设,同时由 CE 来估计降水量和径流量的数量关系的误差更小。陈璐等将方法应用于建立金沙江流域的洪水预报模型,结果显示利用 CE 选择输入的神经网络模型取得了最好的预测效果。Li 等 [29] 基于 CE 和机器学习方法研究了长江上游的月径流预报问题。他们利用 130 个全球环流指数、7 个气象因子和高场和寸滩两个水文站的月径流量数据,采用 CE 等 3 种变量选择方法和 5 种机器学习模型进行组合构建预测模型。结果表明,CE 和 LSTM 组合在高场站获得了最优预测性能,而随机森林和 CE 组合在寸滩站获得了满意性能。Mo 等 [30] 提出了一种长期径流预报模型框架,结合了 CE、LSTM 和 GARCH 三种方法,其中 CE 用于筛选与径流有关的预报因子。与传统方法相比,CE 更适合因子间具有交互关联的复杂情况。他们将方法应用于洪泽湖和骆马湖的径流预报研究,结果表明,与传统方法相比,该框架中的 CE 方法不仅

成功辨别了因子间的交互效应,同时还量化了每个预报期内各个因子的贡献度,从而选出了与预报有关的关键驱动因子,最终该方法框架得到了较对比方法更准确、更稳定且更可靠的预报结果。陈佳雷等 [31] 提出了一种时空图卷积网络的径流预报方法,首先构建流域内站点的拓扑结构图,再利用邻接矩阵表示地理相邻站点之间的时空依赖性,并利用 CE 等工具分析相邻关系、周期性和气象要素与径流量之间的时空相关关系,最后构造相应的带有注意力机制的图卷积网络做为径流预报模型。他们以金沙江流域为对象,验证了方法的有效性。

干旱是另一类重要的水文事件和影响重大的自然灾害之一。频发的干旱严重影响着我国的经济社会安全,特别是黄河流域的干旱威胁尤其严重,迫切需要进行流域干旱驱动和预测的研究。温云亮等 [32] 利用 CE 理论分析了河南省 1951–2014 年逐月气象数据,发现在众多驱动因子中,降水量、气温、水气压和相对湿度对该地区干旱发生的影响最大。Huang 和 Zhang [33] 利用 CE 方法分析了兰州地区 1957–2010 年的气象数据,以构建该地区的干旱预测模型,发现该地区的风速、气温、水气压和相对湿度是与干旱最相关的气象因子。黄春艳 [34] 研究了黄河流域的气象、水文和干旱之间的关系,探讨了干旱的驱动机制,给出了气象干旱和水文干旱的概念,并提出利用 CE 方法探究二者之间的动态非线性响应关系,通过分析黄河流域不同区域水文站的气象和水文干旱指数,得到了水文干旱对气象干旱的滞后效应时间,为应对干旱事件提供了参考。牛犇 [35] 利用 CE 等工具研究了黄河流域 9 个分区干旱传播的时空特征。他基于 1961 至 2020 年间各个分区的气象、土壤湿度和径流数据,利用 CE 计算不同类型非平稳干旱指数之间的非线性相关关系,进而得到干旱响应时间尺度、干旱传播强度和干旱传播率等指标,最终发现了各分区上气象干旱、农业干旱和水文干旱之间传播敏感度和传播强度的强弱特征。Ni 等 [36] 利用 MI 和 CE 之间的等价关系,提出了基于 MI 的藤 Copula 结构选择方法,并应用于黄河流域干旱识别中特征变量建模问题和多水文站流量相关结构建模问题中。Kanthavel 等 [37] 利用 CE 和藤 copula 等理论工具,提出了一种综合干旱指数,整合了标准化降雨指数、干旱监测指数、标准化土壤湿度指数和标准化径流干旱指数等四种指数,可以更好地同时反映相关水文气象变量和不同类型的干旱。CE 理论被用来衡量新指数与原始指数之间的相关性。他们将该指数应用于印度中部的达布蒂 (Tapti) 河流域的单月和四个月尺度的干旱研究中,验证了该指数的有效性,并揭示了该地区干旱的时空分布特点。Mohammadi 等 [38] 利用基于 copula 和 CE 理论的三种相关性度量估计方法,在伊朗三座城市 (扎黑丹、恩泽利和马什哈德) 1950–2017 年的水文观测数据的基础上,分析了三地的干旱变量 (干旱强度、时长和时间间隔) 之间的依赖关系。

河冰是中高纬度地区河流特有的水文现象,具有鲜明的季节性特征。河冰物候学就是研究河冰冻结和融化的季节性变化现象的学问,这种季节性变化具有空间异质性和年度差异。河冰物候现象受多种因素影响,如气候条件、水文条件和人类活动等,其中气候变化是首要驱动因素。在全球气候变化的背景下,

过去一个时期的河冰现象发生了显著变化,理解和量化河冰动态性以及内在的驱动力对于制定河流管理策略至关重要。Xing 等 [39] 研究了黑龙江的河冰物候学时间变化对气候变化的响应,其中利用 CE 工具计算了河冰周期的 5 个关键日期(新冰日、冰封日、冻结日、开化日和冰销日)与气候因子的非线性相关性强度。结果发现,温度、气压和蒸发压是河冰物候最重要的气候驱动因子。特别地,新冰日和冰封日与前一、二个月的蒸发压强相关,冻结日与蒸发压的相关性具有超过 4 个月的滞后期,而这三个日期又与同月的平均最大温度、平均温度和最小极端温度强相关,表明了结冰日期对温度的反应要快于其他气候因素。同时,开化日与 2 个月的月平均温差、最小极端气温和最大极端气温相关,冰销日与 5 个月的月平均温差和月相对湿度相关,具有明显的滞后性特征。作者还基于 CE 研究了 15 年滑动平均的相关性,发现气压和温度等与河冰日期的时间变化规律。这些结论有助于将这些鉴别的因子加入到河流模型中,建立更准确的冰期预测模型,从而使河流管理更好地适应气候变化的影响。

水文气象观测网络是获取水文信息的基础设施。如何设计并优化网络站点是一个综合性的科学和工程问题。一个基本的设计原则是观测站点之间尽量统计独立,这样才能最大程度的获取水文系统的信息。MI 是衡量统计独立性的主要工具,但是其计算是一个难题。Xu 等 [40,41] 提出了一个基于 CE 的多目标优化的水文观测网络设计方法,包括两步:1) 基于 CE 的信息传输将观测站点分组;2) 对每个分组选择最优的站点组合。基于 CE 的计算方法不仅能够处理水文变量的非高斯性,同时在计算性能上也更可靠、更有效率。作者将方法应用于黄河流域伊洛河水文观测网络和上海雨量观测网络的设计。结果显示,CE 的方法计算精度更高,且可以应用于高维的多变量估计情况。同样基于最少重叠信息的原则,Li 等 [42,43] 提出了一个由两个子目标构成的网络优化目标,其中一个子目标基于 CE 而设计,用于衡量冗余信息量。作者将此方法分别应用于汾河径流观测网、北京市区以及太湖盆地的雨量观测网的设计和优化,结果表明了方法可靠且有效。徐鹏程等 [44,45] 提出利用藤 Copula 来构建站点关系网络,再基于估计的藤 Copula 来计算站点间的 CE 值,在此基础上提出了结合 CE 和克里金指标的站点优化目标,利用滑动窗口法选择优化站点。他们基于淮河流域 1992-2018 年的日降水量观测数据,利用该方法对该流域 43 个雨量观测站点网络进行了优化,结果表明该方法得到的网络能够较传统类似方法得到的网络更有效地获取降水相关信息。杨惜岁 [46] 提出一个结合联合熵比、冗余度比和 NSE 效率系数的站网优化准则,并基于 CE 理论提出了新的 MI 计算方法,提高了计算的准确性。他将方法应用于美国查克托哈奇(Choctawhatchee)河流域的 14 个水文站点,进行站点优化研究,最终得到了只包含 5 个站点的网络,提高了站网的监测效率。

分析河流的干流和支流之间的相关性对水利工程设计、洪水预防和风险防控十分重要。三峡大坝作为长江上游河段的大型水利工程,其一个重要功能就是洪水控制,研究该河段的主要河流相关性对工程设计和安全运行具有重要参

考价值。Chen 和 Guo [47] 提出利用 CE 来计算河流相关性的强度,他们将方法应用于包含了 5 条主要干支流的长江上游河段,基于干支流 1951-2007 年间的洪水记录数据计算河流间的相关性。他们发现河流之间总的相关性并不高,这与该地区的气候特征相符;相关关系最强的是岷江和沱江,这是由于二者距离最近,且属于同一降水区域;金沙江和岷江、沱江之间具有一定的相关性,对三峡大坝的洪水控制构成了一定的威胁;金沙江、嘉陵江、岷江和沱江对长江盆地的洪水发生具有显著影响。

不同河流和区域的洪水事件叠加易于形成复合洪水事件,但不同洪水过程之间的空间关系很难利用现有相关性分析方法来准确地描述和评估。Wang 和 Shen [48] 提出了一个整合藤 copula 和相关性评估的方法框架,其中利用了 CE 理论从藤 Copula 来估计 MI、CMI 和 R 统计量等相关性强度。他们将方法用于评估长江上游已鉴别的 102 个复合洪水事件中两种极端径流序列变量(洪峰流量和洪水流量)之间的关系。结果表明,该框架的多维 R 藤 copula 模型能够更好地描绘复杂多样的水文相关关系,特别是藤结构表示了支流洪水汇入干流的顺序和水文站之间的空间位置关系;该框架估计的三种相关性强度比传统的相关性强度更好地反映了复杂时空水文系统的复合洪水事件中的非线性关系。

黄河水沙调控关系到黄河治理的策略制定,科学认知评估黄河的水沙通量变化特征是基础性的科学问题,对研判黄河泥沙情势具有重要意义。特别是近几十年来,受气候变化和人类活动的叠加影响,黄河水沙含量发生了显著变化,需要准确估计径流量和输沙量的分布变化情况。Copula 函数是分析这种分布的基本数学工具,但此类问题往往观测样本较少,难以准确估计 Copula 函数的参数。Qian 等 [49] 提出了一种基于 CE 和全相关 (Total Correlation) 关系的 Copula 参数估计方法,用于解决在样本较少的情况下的 Copula 参数估计问题。他们将方法应用于黄河西柳沟河流域 1960-2016 年间年度径流量和输沙量的数据的分析,该流域在 1999 年前后水沙关系发生了显著变化,但数据较少。分析结果发现,对于 1999 年前后的两个时段,新方法均得到比两种传统方法更准确的 Copula 参数估计,对数据的拟合更好。

流域分区是水文学研究的重要方法,根据水文相似性特征划分流域内相似性区域,可解决无水文观测地区的水文计算等难点问题。径流响应是重要的流域水文特征,根据流域水文站点观测之间的相似性做流域分区是一种基本的研究路径。传统的流域分区方法基于相关性评价,往往难以反映水文系统内在的复杂关系。刘磊等 [50] 提出采用基于 CE 的 R 统计量来衡量节点间的径流相似性,再在此基础上利用社团检测算法对流域进行分区。他们将方法应用于鄱阳湖水系,利用该流域的水文站观测对流域进行了分区,并将方法与传统的 K 均值聚类方法进行了对比。结果表明,该方法能够有效捕捉流域内湖库对径流的调节作用,从而得到较传统方法更合理的流域分区。

多站点径流生成是随机水文学的主要问题之一,生成的流量信息对任何水资源管理都是必不可少的。在径流数据记录有限的情况下,生成多站点径流数

据十分必要,需要设计相应的数据生成模型。Porto 等 [51] 提出了结合广义线性模型 (GLM) 和 Copula 函数的多站点年度径流生成模型,前者表示时序结构,后者为多站点的空间相关性建模。在评价模型性能时,作者采用了包括 CE 在内的多个统计描述性指标,其中 CE 用来衡量非线性的全关联。作者将该模型用于生成巴西的雅瓜里比 (Jaguaribe) -大都市水库系统的多站径流时序数据,结果显示模型表现出了优于当前最好水平的性能,特别是在衡量多站相关性的 CE 指标上,较其他模型更接近于历史观测数据。

南水北调工程是当今世界最大的水利工程,承担着从长江的汉江流域丹江口水库向北方地区城市调水的战略任务。准确的入库径流预报是科学合理的供水调度的前提条件,能够使工程更充分高效地利用自然界的水资源。但传统方法构建的预报模型很难满足调水预报精度的要求,原因在于传统分析方法不能处理水文系统的非线性特性,导致了构建的入库径流预报模型不合理从而预测性能不高。黄朝君等 [52] 构建了丹江口水库的月入库径流预报模型,利用 CE 选择了一组气象水文因子作为模型的输入,得到的模型具有明显优于传统模型的预报性能。模型成功的原因在于采用 CE 选择的预报因子与中长期入库径流密切相关,印证了印度洋偶极子事件和南海副高活动与汉江流域夏季强降水之间的内在联系,符合自然界水文系统的运行规律。

气候变化和人类活动等因素直接影响着水文系统循环,使得径流、降水和蒸发等水文因素发生了不同程度的时空变化。因此,从空间角度研究降水和径流等水文因素之间关系,进而分析这些关系时空变化背后的气候变化和人类活动原因是水文学领域的重要课题,受到了国内外学者的关注,对水资源规划管理等经济社会活动具有科学参考价值。蒋佩东 [53] 利用 CE 等工具分析了长江流域降水、蒸发、潜在蒸散发、径流和植被指数 NDVI 的流域栅格数据,从得到的空间相关性发现了这些因素的空间分布特征,并给出了定性的地理学解释。特别是,根据 CE 估计值判断,他发现实际蒸散发和降水对年径流的影响较高,而年径流与以上各因素的空间相关性具有空间异质性特征。

6.9 气候学

气候变化是气候学研究的课题之一,它不仅体现在水文气候变量幅度上的变化,也体现在变量的季节和周期变化的分布上。这种变化会对降水和气温的强度和频率造成影响,导致极端天气(如洪水、干旱和热浪等)的增加。降水和气温的相关性会加剧联合极端天气的发生和强度。研究气候变化对降水和气温相关结构的影响是一个重要的问题。Hao 和 Singh [54] 利用 CE 度量工具研究了气候变化对这种相关结构的影响。研究采用了美国德克萨斯州达拉斯市沃斯堡 (Fort Worth) 在 1948-2010 年间的每日降水和气温数据,以每 5 年为期计算温度和降水之间的负 CE 值作为相关结构强度,发现该地区的温度和降水之间的相关结构强度(负 CE 值)从 1948-1980 年间的 0.18 下降到了 1948-2005 年间的 0.06,说明了气候变化对该地区水文气候变量之间关系造成了影响。

气候评估是科学应对气候变化的基础性工作，其目标是监测和分析全球和地区气候及其变化，特别关注于变化趋势和极端气候风险等。气候分类是指根据相似气候特征将地区分类，最常见的 Köppen 分类法采用的气候特征是温度模式和季节性降水。Condino [55] 提出了一种基于 Jensen-Shannon 距离的动态分类算法，其中基于 JS 距离的分类准则采用了基于 CE 理论的表示方法并进行估计。他将方法应用于欧洲气候评估问题，根据 1951-2008 年间欧洲气象观测站每日温度和降水数据对欧洲 25 座主要城市的气候进行分类。结果表明，其提出的算法成功区分了分别属于欧洲南部和北部气候带的城市群，当进一步考虑南北气候过渡带时，算法也对欧洲中部城市给出了与实际气候情况相符的合理的分类结果。

6.10 气象学

环境污染是现代社会的主要问题之一。从气象学的角度分析大气污染的成因，明晰其内在机理，有助于更好的理解污染问题，进而预测、干预和管理污染。理解大气系统中的因果关系是问题的关键。基于对气象因素和环境污染物的观测，可以利用统计学中的 TE 方法分析气象因素对环境污染的因果关系。马健 [10] 利用其提出的基于 CE 的 TE 估计方法（见3.4），分析了北京地区的气象和 PM2.5 连续观测数据 [231]，得到了四个气象因素对 PM2.5 浓度的 24 小时时滞内的因果强度变化图（见图17）。变化图显示，四种气象因素对 PM2.5 浓度的因果强度大致经历快速升高和缓慢增加两个阶段。作者还特别讨论和验证了该方法的平稳性假设和马尔科夫性假设在此中尺度数值分析问题上的适用性。论文所得到的因果变化图反映了大气系统运动的内在动态特征，增加了人们对 PM2.5 污染的气象成因的理解。同时，得到的时序因果关系也为整合气象因素，构建更优性能的污染预报模型提供了参考依据。（更多内容见3.4节）

有效的大气污染预测对于污染防控具有基础性作用，也利于保护居民健康。但当前的大气污染（如 PM2.5 浓度）预测在准确性和稳定性上还很难满足要求。开发性能更高的预测模型受到了广泛的关注。在综合考虑了传统方法的不足的基础上，Wang 等 [56] 提出了一种新的大气污染预测预警方法，使用了 CE 和多种机器学习模型的组合方法，CE 方法在其中被用来选择对 PM2.5 浓度波动有影响的因子，以用于构建最终模型。他们将开发的方法应用于上海和广州两地的实际大气污染预测预警系统，结果表明新方法能得到较其他对比方法更好的预测准确性和稳定性。Wu 等 [57] 提出了一种基于 CE 的 PM2.5 预测方法，利用 CE 计算气象因素与大气污染物浓度之间的相关性来选取模型输入特征，在基于 LSTM 和进化算法相结合的方法建立预测模型。该方法在北京地区 2016 年的历史数据上取得了良好的预测性能。Chen [58] 利用 CE 从多种因子中选出影响 PM2.5 的因子，再利用自注意力机制增强的时序卷积网络（TCNA）构建预测 PM2.5 浓度的模型，他将方法应用于北京市 12 个区域 2013 至 2017 年逐小时气象和污染观测数据，得到的预测模型具有高度的可解释性和预测准确度。



图 17: 四种气象因素到 PM2.5 浓度的 24 小时时滞内因果强度变化图.

全球气候变暖导致我国华南地区的台风强度越来越强,强台风给该地区造成了严重的损失。根据台风灾害的观测数据预测灾情程度,是台风灾害的研判和应对的重要参考。但台风灾害影响因子较多,且与灾情之间具有非线性关系,给预测模型构建造成困难。陈燕璇等 [59] 基于 CE 等工具,提出了一种台风灾情预测模型构造方法。他们基于 1985-2014 年间登陆或影响广西的 44 个台风灾害数据,以及同期与致灾、承灾和防灾减灾相关的灾情统计数据,构建了 21 个灾害影响因子,再利用 CE 筛选与灾情指数最相关的因子,发现最大风速、最低气压、暴雨时长和暴雨极值与灾情指数最相关,能够客观地反映实际情况。实验也表明,利用 CE 筛选的因子构建的模型的预测精度要高于同类对比方法构建的模型,可为广西台风灾情预测提供参考。

6.11 环境学

大气污染是现代城市面临的主要环境问题之一,严重影响城市运行和居民生活。对大气污染扩散规律的分析是环境科学的重要问题,对环境监管部门更好地了解污染规律并有效应对具有基础性的指导作用。大量的城市污染气象观测网点生成的数据,有助于分析扩散规律进而对污染扩散作出预测。吴京鹏 [60] 提出了一种节点无特征网络链路预测算法,并将其应用于城市大气污染传播路径建模和预测问题。他将方法应用于兰州市辖区环境监测站网 2017 年的 PM2.5 观测数据,利用基于 CE 的 TE 算法构建了传播网络,再应用提出的网络链路预测算法预测污染传播路径。实验结果表明,该方法可以准确发现污染传播路径,为兰州城市污染治理策略制定提供了理论支撑。

氮氧化物 (NOx) 是火力发电厂排放的主要污染物之一,需要通过实施监测来严格管控其排放浓度。电厂一般采用 SCR 脱硝反应器的中和方法控制 NOx 排放浓度,但控制过程存在大延迟,无法做到精确控制,一般采用软测量模型预测与 SCR 控制器配合来达成控制目标。金秀章等 [61] 提出了一种 VMD-Bayes-Lasso 相结合的软测量算法框架,以预测 NOx 排放浓度。该方法框架首先利用 CE 筛选与 NOx 浓度相关的系统变量,以预测分解后的 NOx 浓度模态变量,再叠加得到最终预测结果,最后设计了基于 Lasso 算法的模型误差预测模型来校正预测结果。他们在宁夏某 660MW 燃煤电厂的数据上验证了该算法框架,得到了较对比方法更好的预测精度,其中,通过 CE 方法分析了系统变量内部以及和目标变量之间的相关度,达到了精简模型和提高预测精度的目的。杨媛 [62] 提出了一种电站锅炉 NOx 排放浓度的预测方法,首先对不同工况的系统延迟进行辨识,然后利用基于 CE 的自适应特征选择方法选择合适的系统变量,最后利用集成学习算法构建预测模型。作者在某电厂 1000MW 超临界锅炉系统上验证了该方法,结果表明,所提出的方法能够较对比方法更准确地预测 NOx 排放浓度。其中,基于 CE 的特征选择方法能够筛选出对 NOx 排放浓度影响显著的系统变量集合;同时,与同类方法相比,该特征选择方法能够给出更好的预测结果。

氨气 (NH_3) 是大气中的重要碱性气体, 在大气氮循环中发挥着重要作用, 也因此与诸多环境问题密切相关。含氨气溶胶颗粒物是空气中 $PM_{2.5}$ 的重要来源; 自然界中氨的含量变化也会导致土壤酸化、水域营养化和生物多样性降低等诸多问题。因此, 研究氨气浓度的时空变化及其影响因素, 具有重要的科学价值和现实意义。大气氨含量主要来自人类的农业、工业和城市交通活动, 长三角地区作为我国的经济发达地区和人口密集区, 氨气相关的环境问题尤其不容忽视。Xue 等 [63] 利用欧洲气象卫星红外大气干涉仪的氨气柱密度数据、NASA 的 NO_2 柱密度数据和欧洲的 ERA5 气象再分析数据, 研究了长三角地区在 2014 至 2020 年间氨气柱密度的长期时空变化以及变化背后的驱动因素。其中, 他们利用 CE 方法分析了导致氨气浓度空间变化的影响因素, 通过计算氨气柱密度与气象因子、pH 值、人口密度和耕地占比等空间变量之间的相关性强度, 发现氨浓度与地表气压、降水量、pH 值和耕地占比等因素密切相关, 表明了长三角地区的氨分布受到自然和人类活动因素的双重影响。

6.12 生态学

在生态学中, 动物运动轨迹研究是一个重要的基本问题, 可以揭示种群活动规律、种群间的竞争关系, 以及种群和环境资源之间的互动等基本生态学过程。信息技术在生态领域的利用生成了大量的动物轨迹数据, 对这些数据的分析需要合理的建模方法。环线数据 (circular-linear data) 是生态学中的一种常见的时序数据类型, 描述了离散化的动物运动过程, 包括运动方向和运动距离两个变量。此二变量之间通常是相关的, 即直线运动时运动方向较小而运动距离较大, 转向运动时运动方向较大而运动距离较小, 同时运动方向变量的分布一般是对称的, 因此通常采用角度对称的环线 copula 函数作为工具对此类数据进行建模, 并利用基于 copula 的相关性度量来衡量二者之间的相关性。Hodel 和 Fleberg [64] 实现了环线 copula 的建模和分析的算法工具包 `Cylcop`, 其中包含了基于 CE 的互信息估计算法作为相关性度量方法, 用于分析动物轨迹数据。

6.13 动物形态学

动物形态学是动物学最古老的分支, 研究动物体的形态和解剖结构以及其在发育和进化过程中的变化规律。作为动物学的基础学科, 形态学的研究是动物分类的基础, 比如鱼类的形态分类。由于鱼类的外形相似, 对其种类进行鉴别往往会出现偏差, 这就需要研究鱼类结构形态之间的相似性度量问题。Escolano 等 [65] 提出了一种图形形似度度量的估计方法, 将图形转换为多维流形嵌入向量, 再利用 CE 估计方法估计向量之间的 MI 作为图形相似度量。他们将方法应用到 `GatorBait` 海洋鱼类图形数据库, 该数据库包含了 30 个类别的 100 个鱼类外形三角网格图形。由于每类对应的是鱼类属而不是种, 因此同一类别

间具有形态差异，给分类造成困难。他们利用新度量方法对数据库中的鱼类图形进行分类，实验表明新的度量方法在数据集上得到了较传统方法更好的分类性能。

鲍是一类重要的海洋贝类，具有较高的营养价值和巨大的经济价值。鲍鱼的形态学研究是通过形态学变量的测量来研究其生长过程和种群分布等问题，对该类海洋资源的管理具有重要意义。Purkayastha 和 Song [66] 提出了一种新的因果关系度量概念，称为非对称 MI (AMI)，用于判断变量之间因果预测性的方向，并基于 CE 理论给出其快速且鲁棒的估计方法。他们将 AMI 方法应用于 UCI 鲍鱼数据集，分析了鲍鱼的长度、直径、身高和体重等形态学参数的测量数据，明晰了鲍鱼生长过程中年龄与这些变量之间的因果关系规律。

6.14 农学

全球变暖导致的环境变化会直接影响粮食产量，从而加重世界粮食安全问题。水稻是最重要的谷物作物之一，占我国谷物产量的四成左右，对我国的粮食安全至关重要。研究气候变化如何影响水稻产量并给出对策是关系到我国粮食安全的重要问题。Zhang 等 [67,68] 利用作物模型和大气环流模式研究了气候变化对我国南方（江南和华南）两季稻生长和产量的影响及对策。研究采用了 DSSAT 作物模型中的模拟水稻生长和产量的 CERES-rice 子模块和 CMIP6 中的四种大气环流模型 (GCMs)，并利用 CE 和随机森林分析各个月份的气象因子和作物产量之间的非线性关系。他们利用每个 GCM 的 27 组数据驱动南方 54 个地点的水稻作物模型以得到最终产量，同时研究了播种日期的影响。研究发现，气象因子的上升趋势会提前水稻成熟期并降低产量；如果再考虑 CO_2 作用，早稻产量则会增加，而晚稻仍会减产；根据 CE 计算结果，两季稻产量和 CO_2 浓度的关系也是气象因子中最强的；提前早稻播种和延后晚稻播种可能会增加一定的产量。该研究的结论为政府和农民应对未来的气候变化指明了路径，为采用相应的适应性对策提供了重要参考。

作为世界三大主要粮食作物之一，水稻在农业生产中具有重要地位。准确预测水稻产量有助于确保粮食安全和指导农业生产，是一个农业领域的重要问题。水稻作物的产量不仅与品种自身特性有关，也受到天气等环境因素的影响，这种影响具有非线性，给准确预测产量构成了挑战。张春磊等 [69] 提出了一种基于深度学习技术的水稻产量预测方法，其中利用 CE 来选择与产量具有非线性关系的环境因素变量，并利用 CNN 和 GRU 技术构建预测模型。他们在浙江省临安区真实数据的基础上验证了该方法，结果显示，CE 能够捕捉水稻产量与环境变量之间的非线性关系，CE 与 CGRU 相结合的方法给出了最好的预测结果。

6.15 认知神经学

认知神经学通过分析大脑活动的各种模态的观测数据,理解大脑作为信息处理器官,对外界刺激的表示、处理和通讯的机理。作为一个非线性的统计度量,MI 被认为是分析大脑信号间关联的理想统计工具。但由于 MI 的估计十分困难,使其难以得到广泛的应用。Ince 等 [71] 根据 MI 和 CE 之间的等价关系,提出了一种 MI 估计方法,称为高斯 Copula 互信息 (Gaussian Copula Mutual Information: GCMI)。GCMI 方法利用了 CE 与边缘函数无关的性质,首先将每个变量的边缘函数转化为高斯函数,从而得到联合高斯分布,再根据所得高斯分布相关矩阵与 MI 的关系来计算 MI。该方法简单方便,且与分布无关。但由于从高斯分布数据计算 MI 是有偏差的,因此此方法还需要进行校正纠偏操作。Ince 等将 GCMI 与其他 MI 估计方法进行了对比,并将其应用于分析人脸检测任务的 EEG 数据 [70] 和听觉语音刺激任务的 MEG 数据 [72]。在人脸检测任务的实验中, GCMI 被用来计算图像内容与认知响应之间的关联强度,并成功选出认识响应敏感区域(图像中的眼睛部分)。在听觉刺激实验中, Ince 等研究了语音中的节奏特征对大脑听觉的节律同步的影响。通过对语音刺激的 EEG 响应数据的分析,作者发现了改变音节和词汇之间的停顿会导致听觉 delta 带同步的降低。在此实验中, GCMI 是数据分析的主要工具。

在 GCMI 算法的基础上, Combrisson 等 [73] 提出了基于信息论的群体层面分析大脑认知网络的方法,将非参数的排列操作与信息度量相结合,用于分析固定效果或随机效果模型,以适应多人间和多次任务间的变化。他们将方法应用于两个已有研究的数据:第一个研究分析人执行认知行为映射任务时的 MEG 数据中的高 Gamma 行为 (High Gamma Activity),发现了任务相关的大脑网络,涉及多个运动区、体感区和视觉皮层区域等;第二个研究分析奖惩学习任务的前脑岛 (anterior Insula) SEEG 数据,发现了奖惩任务的响应时延,以及奖和惩响应的显著差别。汪方毅等 [74] 提出了一种老年人认知水平分类方法,首先采用 GCMI 构建脑认知网络,再利用 GCMI 进行特征选择,最后利用 SVM 从选择的脑网络连接进行认知水平分类。他们将方法应用于 98 名葡萄牙老人的静息态 fMRI 数据,发现提出的方法能够捕捉数据中脑区间的非线性关系,并能够最终得到较同类方法更高的分类准确率。

语音理解是人脑的主要认知功能,研究人脑的神经活动对语音信息的编码和解析是认知神经学的重要问题。语音包络 (speech envelope) 包含了语音信号中的低频时序信息,研究表明其可以解释大部分神经响应的变化过程,语音包络跟踪就是通过脑电图等手段研究语音包络及其神经响应之间关系的问题。由于大脑的非线性特征,常用的线性模型不能很好的表示这种关系。MI 作为非线性关系度量工具,被认为能够捕捉语音包络和神经响应之间的非线性关系。De Clercq 等 [75] 利用根据 CE 理论构建的 GCMI 工具,基于两组故事讲述语音和相应采集的 EEG 数据,对比了线性模型和 MI 分析对大脑非线性成分的刻画能力。实验结果表明 MI 分析检测到了线性模型以外的显著的非线性成分,证明

了 GCMI 是比线性模型更适合于研究神经包络跟踪问题的工具。作者也实验验证了与传统的 MI 估计方法相比, 基于 CE 原理的 GCMI 方法具有鲁棒、无偏和适合多变量分析等诸多优点。

建立神经信号之间的因果关系对理解脑连接至关重要, 因果关系连接反映了在脑认知过程中脑网络内部不同区域之间的信息传输方向, 刻画了大脑认知过程的脑区之间动态关系特征。相比于传统的格兰杰因果检验, 无模型假设的 TE 更适合此类因果分析任务。Redondo 等 [76] 基于 CE 理论提出了一种新的 TE 概念, 称为 STE (Spectral Transfer Entropy), 用于计算频域滤波后的时域信号之间的 TE。与直接在原始信号上计算 TE 相比, 在特定频域上计算的 STE 更具有神经学意义的可解释性。他们将方法应用于注意缺陷多动障碍 (ADHD) 患者 EEG 信号的分析, 利用 STE 构建因果关系脑连接网络, 发现了 ADHD 患者与健康人之间与注意力相关的脑连接网络连接的不同。实验结果表明, 健康人在与注意力和受控记忆存取相关的 θ 和 α 频段表现出明显的因果联系, 而 ADHD 患者的脑网络连接则主要在 δ 振荡上, 可解释为与注意力缺陷有关。

神经元特化 (neuron specification) 是指其具有执行特定功能的属性, 可以通过研究外部环境刺激和神经响应信号之间的关系来鉴别。MI 作为一种非线性关联关系度量, 是研究此问题理想的工具。Pospelov 等 [77] 利用 GCMI 方法计算钙荧光信号和环境变量、动物行为之间的相关性强度, 对小鼠大脑海马的 CA1 区记录的钙信号进行了分析, 揭示了与动物外部环境相关的特化神经元, 如位置神经元, 以及与其行为活动相关的特化神经元, 如在跑、直立和静止时活动的神经元。研究也发现了一些对离散变量进行响应的神经元, 如动物的场地位置 (中央, 靠墙和角落) 和其速度 (休息、慢和快)。他在四组实验中一共检测到 472 个神经元的 781 种特化。

6.16 运动神经学

肌肉协同 (Muscle Synergy) 是运动的基础, 指人完成各种动作时肌肉组合之间时空上的动作协同。人体的运动控制系统是一个具有冗余自由度的系统, 一般认为神经系统通过运动基元的组合协同策略来完成一个动作。运动控制研究的一个重要基本问题是鉴别运动控制中简化的基本肌肉协同策略。通过分解运动过程的肌电 (Electromyographic: EMG) 信号数据理解运动控制潜在的基本协同机理是基础研究手段, 但如何处理信号中的非线性是主要的难题之一, 基于 CE 的 MI 估计是处理此难题的有力工具。Wu 等 [78,79] 将多元变分模态分解与基于 CE 的 MI 相结合, 构建了肌肉耦合网络模型, 基于表面 EMG 数据分析了健康人伸手运动过程中上肢肌肉间的时空协同, 成功刻画了肌肉耦合关系强度。Reilly 和 Delis [80] 提出利用基于 CE 的 GCMI 来度量 EMG 信号之间的时空关联关系, 再利用矩阵分解的降维方法来发现 EMG 信号时空关联中的基本的肌肉协同模式。他们采集了人执行点到点动作运动的 EMG 数据, 将方法应用于数据, 得到了有生理学意义的肌肉协同时空模式。Zhu 等 [81] 提出

了基于 CE 的表示 TE，再利用 R 藤 copula 估计 CE 进而估计 TE。他们将该方法应用于上肢肌肉间耦合网络的研究，基于疲劳/非疲劳状态下上肢肌肉运动的 sEMG 数据构建了肌肉耦合网络，发现疲劳状态下的肌肉群间耦合关系较非疲劳状态逐渐加深。金国美等 [82] 提出利用小波分析和 CE 估计相结合的方法，分析健康人自主运动下的肌肉疲劳状态的 sEMG 信号数据，发现在肘关节屈曲运动中，肌间耦合强度在 Beta 与 gamma 频段最为显著，协同肌肉对耦合强度比拮抗肌肉对耦合强度大；疲劳后的耦合强度相对于疲劳前有所增强。

6.17 计算神经学

计算神经学是利用计算理论和方法来研究和理解神经系统的功能和机理的学科，研究如何描述生物神经元对信号刺激的个体和群体响应等问题。神经可塑性 (neural plasticity) 是指神经网络对外界刺激的适应性结构变化，构建可塑性理论模型是计算神经学关注的主要问题之一。Leugering 和 Pipa [83] 基于 Copula 理论提出了一个神经元群体可塑性的理论框架，构建了一种自适应网络模型，可以在未知模型输入变化的情况下保持模型输出的不变性，CE 在该框架中用于度量神经元群的统计特性，衡量输入输出之间的信息量。神经元之间的信息传输分析是计算神经学的另一个重要问题。分析计算神经元之间的信息传输关系需要涉及多个神经元之间的 MI 的分解。部分信息分解 (Partial Information Decomposition) 就是将 MI 分解为协同 (Synergy)、冗余 (Redundancy) 和独特信息 (Unique Information) 三个部分的理论。基于 CE 理论和方法，Pakman 等 [84] 提出了一种估计独特信息的方法，并应用于分析多个神经元模型的信息处理。Coroian 等 [85] 基于 CE 理论提出了一种估计连续分布的协同的方法，以提高现有协同估计算法工具的计算效率，并应用于大脑神经活动数据，以分析脑功能连接图谱和脑区活动模式变化过程中的协同涌现现象。

6.18 心理学

大脑是一个分布式的网络系统。它不仅控制身体，改变内部生理状态，也影响多个高级过程。同时，内脏信息也时刻受到大脑的监控，也就意味着内脏过程也会反映到皮层活动中。内脏事件相关的大脑活动研究是一个重要的话题。植物神经系统中的过程之间相互关联，而信息论则提供了研究它们之间关系的工具。Ravijts [86] 研究了四种情绪刺激特征（效价、唤醒、支配和喜欢）下心跳诱发脑电位 (HEP) 的时间交互近似估计问题。他采用了用于情绪分析的生理信号 DEAP 数据集，利用基于 CE 的 GCMI 方法估计了 MI、协同和冗余等统计量，用于度量不同情绪刺激下 HEP 上的时间交互。实验发现了支配和喜欢情绪刺激下 HEP 上的时间交互现象，第一次揭示了情绪感知调制的 HEP 的时序特性。

6.19 系统生物学

系统生物学的一个主要任务是通过生化运动学模型，研究调控、信号传导和代谢过程之间的交互。建立这样的模型需要选择合适的模型输入变量，MI 是变量选择的工具之一。但常用的 kNN 的 MI 估计常常是有偏差的，需要进行修正。Charzyńska 和 Gambin [87] 提出了偏差校正方法，并发现当利用 MI 和 CE 之间的关系估计 MI 时，校正效果显著。作者将方法应用于受到广泛研究的 p53 蛋白和 Mdm2 连接酶之间的负反馈环路问题模型上，结果显示此方法能够比传统的本地敏感性分析方法得出更准确地反映系统行为的模型输入输出关系的分析结果。

系统生物学对分子生物学数据分析的主要目的之一是建立复杂生物现象的网络和动态机制，以分析生命组织的功能和行为。MI 在构建基因通路网络的过程中发挥基础性作用。Farhangmehr 等 [88] 首次提出在网络构建中利用 CE 来估计 MI。他们将方法应用于酵母细胞周期数据，将分析得到的动态网络与京都基因组学百科数据库进行了对照。实验结果显示，利用 CE 来估计 MI 提高了计算效率。

6.20 生物信息学

生物信息学 (Bioinformatics) 是通过算法分析基因数据 (包括基因表达谱数据) 来研究生命和疾病机理的新兴学科。基因表达谱是利用 DNA 微阵列技术在基因分子层面观察某一生命组织动态得到的数据，从而能够在基因组水平上反映生命系统的各种现象和机理。Wieczorek 和 Roth [89] 提出了一种研究时间序列数据之间相互作用的分析方法，称为因果压缩 (Causal Compression)。与传统的分析全时间序列之间的因果关系不同，该方法研究了基于定向信息 (Directed Information) 分解的时间序列间相互因果作用的稀疏表达，并据此给出了时序因果分割和因果二分图发现两类问题的解法。基于 CE 与 MI 之间的等价性，作者证明了该方法只与数据分布的 Copula 密度函数有关，并据此设计了求解方法。作者将该方法应用于 NCBI 数据库中的人类 C 型肝炎病毒感染数据 (NCBI/GEO 查询号: GSE7123)，研究了接受了聚乙二醇干扰素和利巴韦林治疗的重组丙型肝炎病毒核心蛋白基因型 1 感染的基因表达谱时序数据，关注了在干扰素信号传导中具有重要交互角色的两个基因：转录子 STAT1 和干扰素诱导抗病毒基因 IFIT3，分别生成了二者在有效救治和无效救治病人内相互作用的不同。研究发现，根据分析结果，干扰素疗法消除了大多数有效救治病人体内两种基因之间的关联，而无效救治病人体内的关联则不受影响。同时，分析表明两种病人救治前后二者之间均存在因果交互作用，但对于有效救治病人，早期的 IFIT3 对后期的 STAT1 的影响更显著，这与已有研究结论相符合。

很多疾病的发生与基因结构变异有关。拷贝数变异 (Copy Number Variations: CNVs) 指长度大于 1kb 的 DNA 片段的变异，在人类基因组中大量存

在。作为重要的基因变异，CNVs 包含了大量 DNA 序列、疾病点和功能单元，能为疾病研究提供线索。研究表明，多种癌症的形成和发展与不同的 CNVs 有关。因此，发现不同基因的 CNVs 与不同癌症之间的关系有助于研究癌症病因和诊断方法。从大量的 CNVs 的基因特征中选择出与癌症相关的特征是生物信息学的一个重要问题。Wu 和 Li [90,91] 提出了一种基因选择方法，称为相关冗余和交互分析（Correlation Redundancy and Interaction Analysis: CRIA）方法，根据 CNVs 选择与癌症有关的基因，以用于癌症分类。CRIA 方法利用了 CE 的多变量相关性特性，设计了基因特征交互强度度量，用于筛选与癌症类型相关性强的基因。他们将该方法应用于 cBioPortal 的癌症基因组数据，利用了其中的 6 种癌症数据，选择出了 200 个与癌症有关的基因。为了验证算法的有效性，他们基于亚利桑那州立大学的数据将方法与其他 8 种基因选择算法进行了对比，结果显示 CRIA 方法选择的基因能够更准确地预测癌症类型。

在生命过程中，复杂的疾病往往由多种基因共同导致，反映到基因组数据中表现为疾病类型数据与多个基因特征同时相关。因此，在建立生物信息学模型时，特征选择过程中必须考虑这种多个基因之间的交互作用，才能得到性能更好的疾病分类模型。钟琦 [92] 提出了一种基于 Copula 和标准化度量的特征选择方法，称为 IFSMRMR，同时考虑特征与疾病标签之间的相关性和特征之间的冗余度，其中 CE 被用于度量特征选择过程中的交互作用强度。他在 8 个公共的基因表达数据集上将该方法与 6 种常见特征选择方法进行了对比，结果表明，该方法通过考虑特征交互作用提升了分类性能，同时也得到了更好的特征聚类效果，性能优于同类对比方法，验证了方法的有效性和优越性。

基于基因测序数据推理构建基因调控网络是生物信息学的主要问题之一，目的是理解基因功能和识别基因表达的动态过程。单细胞测序技术能够同时测量大量单个细胞的全基因组表达情况，时序单细胞测序数据则反映了细胞中基因调控动态过程，因此可以利用 TE 等非线性时序因果分析工具发现基因调控网络。竺政彤 [93] 提出了一种基于 TE 因果关系分析的基因调控网络构建方法，称为 GRN-PAGATE，其中采用了基于 CE 的 TE 估计方法。他分别在 DREAM3 挑战中的 Ecoli 数据和小鼠胚胎早期血液发育的单细胞测序数据上验证了该方法，并与同类方法进行了对比。实验结果表明，该方法在 Ecoli 数据上具有与 GRNTSTE 同等的性能，略高于 DynGENI3 和 SCRIBE 等同类方法；在小鼠胚胎数据上，该方法能够有效发现其他方法未能发现的关键基因调控关系，性能优于同类对比方法。

6.21 临床诊断学

心脏病是最常见的临床疾病之一。医生已经积累了丰富的心脏病临床诊断经验，可以通过各种生理测量结果作出诊断决策。在此经验基础上开发智能临床诊断模型是业界长期追求的目标，开发此类模型的关键在于选择一组生理测量变量来构建预测诊断模型。基于著名的 UCI 心脏病数据集 [209]，马健 [9] 提

出采用 CE 作为变量选择方法,用以选择一组生理变量构建诊断模型。该数据集包含了来自世界四地真实的临床心脏病生理测量和诊断数据,其中 13 个生理测量变量被医学专家认定为是临床相关的。实验结果表明,CE 方法选择出了 13 个临床医生认定变量中的 11 个变量,是对比方法中最多的,从而得到了最好的预测准确率。同时,CE 方法还发现了认定变量以外其他与诊断相关的变量,为临床进一步检验提供了新的参考。(更多内容见 3.3)

糖尿病是另一种常见临床疾病。对糖尿病人的病情管理与临床诊治结果(发病率和致死率)密切相关,因此建立严格的糖尿病患者住院管理流程对其安全十分重要,这就需要对病情管理标准进行分析研究。为了评估住院患者的救治效果,美国业界建立了健康事实(Health Facts)数据集 [314],包含了 130 所美国医院和救治网络的糖尿病患者的数据。基于该数据集 1999 至 2008 年的 10 年间 101,721 名住院患者的数据,Mesiar 和 Sheikh [94] 利用 CE 变量选择方法建立预测模型,用于从其他 49 个变量预测“是否已用药”变量,取得了良好的预测效果,在仅选择使用 20 个变量的情况下就获得了 97.2% 的准确率,增进了对用药相关变量的认识,构建了合理用药评价模型。

癌症预后是指基于癌症病情的临床表现和诊断结果,对病情的未来发展进行评估,以帮助进一步的临床决策。临床评估考虑的预后因子在评估中至关重要,但又常常数量众多,需要进行分析选择。比如,肺癌的预后因子就多达百种。预后模型是在预后因子的基础上建立的病人风险预测模型,是癌症治疗中重要的临床工具。马健 [95] 提出了一种基于 CE 的生存分析变量选择方法,并将其应用于预后因子的选择问题,以建立预测病人生存时间的预后模型。他基于两个公开的肺癌数据验证了该方法,发现其能选择符合临床标准的预后因子,并获得较同类方法更好的预测模型,在保证模型可解释性的同时具有更好的预测性能。

乳腺癌是女性最常见的恶性肿瘤之一,在我国的发病率和死亡率都有逐年上升的趋势,严重威胁着女性的身体健康和家庭幸福。利用统计方法分析临床数据并构建诊断模型来辅助临床诊断决策,可以提高医生工作效率并降低误诊率,从而促进患者健康改善。付金露 [96] 提出采用特征选择的方法构建乳腺癌患者预后模型,采用了 Lasso、CE 和 RFREF 三种特征选择方法,分析了 SEER 数据库中 2010-2014 年的乳腺癌患者临床诊断数据,利用三种方法选择的特征分别构建了逻辑回归、随机森林、XGBoost 和 Stacking 四种模型,用以预测患者 5 年生存状态。结果表明,利用 CE 选择的特征构建的逻辑回归模型给出了最高的预测准确率(96.84%)。

白内障是眼科的常见疾病,是导致患者失明的最主要病因。白内障超声乳化手术(Phacoemulsification)是世界各国治疗白内障的首选手术治疗方式。尽管该手术已十分成熟,但临床仍然可能会导致术后角膜水肿等并发症,从而影响视力恢复并造成患者不适。构建基于风险因素的角膜水肿风险预测模型在临床十分必要。Luo 等 [97] 提出利用 CE 方法构建术后角膜水肿风险预测模型,将

方法应用于临床 178 名患者的数据,从数据的 17 个变量中筛选预测变量,最终将临床预测模型使用的四种变量(糖尿病、最佳矫正视力、晶状体厚度和累积耗散能量)减少为两种(最佳矫正视力和累积耗散能量),且不影响预测精度。结果分析表明,利用 CE 得到的预测模型具有临床应用价值,可以在保证预测性能的情况下减少预测需要收集的临床信息。

主动脉瓣反流(Aortic Regurgitation)是一种常见的心脏瓣膜疾病,主要症状是在心脏舒张期,血液从主动脉回流到左心室。主动脉瓣膜置换手术是主动脉瓣反流的传统治疗方式之一。左心室射血分数(Left Ventricle Ejection Fraction: LVEF)是一项衡量心脏功能的重要指标,研究其在手术前后的改善关系可以为瓣膜置换手术时机选择和效果预测提供参考证据。Sunoj 和 Nair [98] 利用 survival copula 扩展了 CE 概念,提出了一种称为 Survival Copula Entropy (SCE) 的新概念,用于衡量生存函数相关变量之间的依赖关系。他们将 SCE 应用于主动脉瓣置换手术临床数据,发现了手术前后 LVEF 之间的正相关关系。

脑肿瘤是一种高致死率肿瘤,约占全身肿瘤的 5%,近年来在我国发病率呈上升趋势。脑肿瘤病变具有形态多样、位置不定的特点,诊断难度大,基于无侵入式医学影像的分类识别是主要的临床诊断方式。利用深度学习方法,从肿瘤医学影像提取定量特征并构建诊断模型,可以辅助医师的临床诊断,因此得到了大量的研究。如何提取和选择图像的定量特征是构建辅助诊断模型的关键问题。潘红宇 [99] 提出了一种此类特征选择方法,首先利用 CE 等相关性度量初始化特征集合,再利用灰狼优化算法以分类性能为目标优化特征集合。他利用来自重庆医科大学附属第一医院、西南医院和四川省肿瘤医院的 102 例具有 ATRX 突变的低级别脑胶质瘤患者影像数据,提取了五类共 5530 个影像组学特征,结果表明,相较于对比方法,提出的方法在选择使用了最少(13 个)的特征的情况下得到了最优的分类性能,且所选特征与 ATRX 突变特征状态相关,具有作为生物标志物的潜力。

脉搏波是传统中医的主要问诊方式,因其携带了复杂多样的病理信息,在一定程度上反映了心血管系统的生理状态。传统中医的诊脉主要依靠名医的个人经验,研究脉搏波数据的分析算法,对糖尿病和高血压等常见疾病的无创诊断具有重要意义,有助于传统中医的科学化发展。汤宇飞 [100] 提出了一种基于图卷积神经网络的多模态脉搏波诊断算法,通过将脉搏波转换为包含互补的病理信息的三通道图像,再利用 ResNet 提取图像特征,最后利用 CE 等相关度量得到反映脉搏波信号间时间相关性的邻接矩阵构建图卷积神经网络,从而进行疾病分类诊断。他在实际腕部和指尖的脉搏波数据的基础上,对高血压和糖尿病患者的健康状态进行分类,结果表明算法可以得到 99% 以上的预测准确率。

6.22 老年医学

阿尔兹海默病(Alzheimer's disease, 也称痴呆症)是老年人面对的主要神经退行性疾病之一,临床表现为认知能力的过度衰退等。早期筛查和诊断可以帮助

痴呆症患者和家庭及早干预并管理病情发展,可以有效提高病人生活质量,降低家庭和社会成本和负担。简易精神状态量表(Mini-Mental State Examination: MMSE)是临床广泛采用的认知能力筛查工具之一。马健[101]通过利用CE分析了手指扣击运动(finger tapping)的特征和MMSE之间的关联强度,发现一组与MMSE相关联的特征,包括扣击频率(或扣击次数或扣击平均时间间隔)等。在此关联关系的基础上,他们构建了从手指扣击特征到MMSE的预测模型,取得了良好的预测效果。此预测模型有望用于痴呆症等疾病的认知能力筛查工作中。

帕金森病(Parkinson's disease: PD)是另一种常见的神经退行性疾病,临床表现为动作迟缓和运动功能障碍等症状。重复经颅磁刺激(repitive transcranial magnetic stimulation: rTMS)是利用脉冲磁场作用于中枢神经系统,以改善生理功能的临床治疗技术,广泛应用于神经、精神类疾病的治疗,并在近年应用于PD康复治疗的研究中,以期缓解患者症状并改善运动功能。李润泽等[102]研究了rTMS对PD患者运动症状辅助治疗的神经调控机制,利用基于CE的GCMI等方法分析了rTMS治疗前后的EEG数据,构建了脑功能网络连接矩阵并得到3种网络特征参数。实验结果表明rTMS主要改变PD患者的beta和gamma振荡,其中运动皮层的相应变化可能与运动功能改善有关。

跌倒是老年人面对的重大健康风险之一,需要科学管理和及早干预。跌倒预测是管理跌倒风险的重要手段之一。起立行走试验(Timed Up and Go: TUG)是一种主要的跌倒风险评估工具。马健[103]提出了一种结合视频分析和机器学习技术的跌倒风险预测方法。该方法首先从老年人进行TUG测试的视频中分析出人体3D姿态信息,再由一段时间的姿态信息序列计算出一组步态特征,通过利用CE分析步态特征和跌倒风险指数之间的关联关系,选择出一组与风险关联的步态特征(包括步幅、步态速度和步态速度的方差等),最后用此特征作为输入构建跌倒风险的预测模型。该方法在真实数据上的实验显示了良好的预测效果。此分析结果也表明了步态特征反映的行动能力与跌倒风险之间的内在联系,使得模型具有临床意义的可解释性。

在以上两个研究的基础上,马健[104]还利用CE对手指扣击运动特征数据和步态特征数据进行了联合分析,发现了某些手指运动特征与跌倒风险之间具有一定的关联性。这一发现为首次发现,揭示了衰老过程中认知能力和行动能力之间的关联,提供了科学实验证据,加深了对衰老的生理特征的认识和理解。

6.23 精神病学

抑郁症是一种常见的情绪相关的心理精神障碍,全世界约有3.5亿名患者为此病所困扰,对其进行研究对人类健康具有重要意义。脑电图(EEG)是一种非侵入式的大脑活动电信号测量手段,广泛应用于大脑疾病的研究中。脑功能网络是在EEG信号基础上构建的反映大脑活动的功能性指标,可采用MI、相干性等多种方法构建此类网络。张婷婷等[105,106]提出基于相干性虚部(Imaginary

part of Coherency) 构建的脑网络连通性指标来研究抑郁症患者识别问题。他们利用 CE、Relief 过滤等特征选择方法对脑电网络连通特征进行选取, 发现利用 CE 和 Relief 过滤联合得到的相干性在线反馈指标特征集合能够有效区分抑郁症患者和健康人群。

6.24 药学

药物-靶点相互作用 (DTIs) 预测是指对药物小分子与蛋白质靶标之间的结合进行计算预测, 是药物发现流程中的最重要环节之一, 可以提高传统实验候选药物筛选的效率。利用机器学习方法从药物和蛋白特征集合预测 DTIs 已经得到了广泛的研究, 取得了大量的成果。其中, 如何选择合适的特征集合以建立 DTIs 预测模型是该领域的关键问题, 选择结果对最终的模型预测性能至关重要。高浩田等 [107] 提出了一种交互式多特征融合的 DTIs 预测算法, 其中利用 CE 等工具设计了一种多特征融合算法, 称为 RCI, 可以在不损失预测精度的前提下, 选择具有高交互性和低冗余度的最优特征集合。他们利用四类基准数据集 (Enzyme、IC、GPCR 和 NR) 将该方法与同类 DTIs 基线算法进行了对比。实验结果表明, RCI 方法性能优于同类特征选择方法, 在所选特征集合最精简的情况下模型预测精度结果最优; 同时, 基于 RCI 的预测算法的预测性能指标要好于同类 DTIs 基线算法, 从而验证了算法的优越性。

6.25 公共卫生学

流行病是公共卫生学的重要话题, 流行病患者的及时诊断对控制流行病的传播至关重要。感染了流行病毒的病人往往伴有发热等症状, 很难与正常的发热病人进行区分。目前正在流行的新型冠状病毒患者就具有这样的发热症状, 基于临床数据开发能够区分病毒感染者和正常流感病人的技术成为一个紧迫的问题。然而, 相关的症状有 10 几种, 如何选择合适的变量集合成为研究成功的关键。Mesiar 和 Sheikhi [94] 基于 CE 变量选择方法, 利用真实的临床数据, 分析了新冠患者诊断相关的 19 种症状变量, 发现年龄、疲劳和恶心呕吐是最重要的诊断变量, 可以使诊断达到 85% 的诊断准确率, 如果将诊断变量增加到 15 个, 准确率可以提高到 91.4%。

高血压是全球首要致死病因, 对人群健康构成严重威胁。全基因组关联研究表明多个基因与高血压密切相关。已有多个研究报道 I 型细胞膜钙离子转运酶基因 (ATP2B1) 与收缩压和舒张压相关联。该基因有 21 个 CpG 位点。研究该基因及其 CpG 位点与高血压的关系是一个新的重要问题。Purkayastha 和 Song [66] 提出了一种新的非对称可预测性概念, 称为非对称 MI (AMI), 并利用 CE 理论给出了其估计方法。他们将该方法应用于 ELEMENT 数据集, 分析 525 个年龄在 10-18 岁之间的儿童的数据, 发现 ATP2B1 与舒张压相关联, 证实了已有的发现; 同时发现该基因的 CpG 位点 CG17564205 与舒张压相关联,

且根据 AMI 判断,舒张压对该位点具有预测性,这一新发现表明血压可以改变位点。

6.26 经济学

经济政策的评估需要定量分析,定量分析方法可以科学、客观地评估政策效果。Shan 和 Liu [108,109] 提出了一种可以定量分析政策组合效果的决策树构建方法,CE 被用来度量非线性相关关系并构建决策树,方法的思想是利用基于 CE 定义的信息增益来构建用以区别不同政策对象群体的政策决策树,由树的叶子节点来表示不同政策组合对应的群体划分。他们将该方法应用于发展经济学领域,评估我国的减贫政策效果,研究分析了 2018 年由政府开展的贫困家庭状况普查的问卷调查数据中四川省的数据。分析发现,就业政策、新收入来源和是否有抵押贷款是影响家庭收入的主要政策因素,并揭示了这些政策组合对应的不同目标贫困群体收入结构的不同特征。该方法在无历史数据的情况下,评估验证了减贫政策的有效性,并发现了更加有效的政策组合方案。Zhang 等 [110] 将同样的方法应用于上述调查数据中河南省的数据,得出了基本相同的结论。

经济学的核心目的是发现因果关系。传统的经济学依靠推理建模以及基于此的实验设计。因果发现是从数据中发现因果关系的方法,将其与经济学理论模型相结合是设计经济学实验的新路径。Bossemeyer [111] 基于 CE 和 MI 的关系提出了一种条件独立性测试算法,并将其应用于因果结构发现的 PC 算法中。作者利用新 PC 算法研究了经济学中的议价理论,研究讨价还价行为中互惠关系的作用,以及响应时间在这个过程中中的作用。作者将算法应用于 eBay 的 Best Offer 平台数据,发现交易双方让价行为之间存在关联,印证了互惠理论;同时,发现了对手还价响应时间对下一次要价存在因果效应。

产业链是指产业部门之间基于经济关系形成的链条式关联关系形态。产业链基于资源要素分配和专业化分工等多种因素构成上下游关系,来进行价值互换,上游企业向下游企业提供产品和服务,同时接受下游企业的反馈信息,从而构成关联互动关系。产业链各环节之间的相关性分析,对产业布局管理和投资组合设计具有重要参考意义。韦颖璐 [112] 基于 CE 概念,提出了 pair-copula 熵的概念,用于度量多变量内部的成对相关关系。她将该概念应用于国内畜禽养殖产业链各环节之间的相关性研究,基于该领域内 9 家上中下游主要上市企业的股票价格数据,运用 pair-copula 熵度量了产业链内上中下游之间的相关性,发现该产业链上游相关性较强,下游相关性较弱;无条件相关性强,条件相关性弱;上中之间相关性强等现象。

投资者情绪对财经市场有着广泛而多面的影响,投资者情绪分析是经济学研究的重要问题之一。由于社交媒体和市场关系整合,投资者情绪会在人群和国家间传播,进而形成传播网络,使得局部情绪波动得以迅速扩散,造成系统性影响。Han 和 Zhou [113] 提出了一个基于小波分析、传递熵和网络分析组合的方法,研究公司间投资者情绪传播的模式,其中采用了基于 CE 的传递熵估计

方法。他们采用 2015-2021 年间的中国 137 家新能源汽车上市公司的百度搜索索引数据来代表投资者情绪，将其用小波分析分解为多尺度信息，再用传递熵构建情绪传播网络，最后用网络分析的方法分析短期和长期传播特征。他们发现，投资者情绪表现为短期局部活跃，并具有连续且逐渐增长的进化模式。

通胀预期直接影响市场主体的经济行为，是通胀的成因之一。研究通胀与预期的关系是一个重要的课题，特别对中央银行决策者具有重要价值。Ardakani [114] 提出利用 CE 分析预期对通胀的信息量，证明了负费舍尔信息 (Fisher Information) 是 CE 的下界，可以作为通胀和预期关系的最小度量值。他利用 CE 等工具分析了美国 1982 至 2022 年逐月通胀指数 (CPI 和 PPI) 和通胀预期指数 (密歇根大学调查指数、克利夫兰联邦储备银行 2 年、10 年和 30 年预期指数) 数据，发现 30 年预期与通胀之间 CE 最小，说明其提供了更多可以预测通胀的信息。此研究为中央银行管控预期以达到通胀目标提供了一个有力工具，能够帮助理解不同预期对通胀的预测能力，从而更有力地调控通胀。

6.27 管理学

准确预测农产品期货价格有助于为政府相关部门的科学决策提供参考，因而对保障国家粮食安全具有重要意义。然而价格预测受多种复杂因素的影响，如国际形势、市场情绪博弈等。因此，识别价格的影响因素对构建准确的价格预测模型至关重要。An 等 [115] 提出了一个基于历史数据和文本数据的融合多种方法的混合预测框架，其中经验模态分解 (Empirical Mode Decomposition: EMD) 用于预处理历史数据，动态主题模型 (Dynamic Topic Model: DTM) 和情感分析用于提取微博文本信息，再利用 CE 等方法对提取的因子进行筛选，用于构建预测模型。作者在两个实际数据上验证了该方法框架：国家统计局的猪肉价格数据和大连商品交易所的大豆期货价格数据，并收集了相应时间内的微博文本数据。在实验中，作者将 CE 方法与同类的 dCor 和 HSIC 方法进行了对比，结果表明，在两个数据上，基于 CE 的预测模型都给出了最好的预测性能。

库存管理是企业运营管理过程中的关键环节，也是管理学的重要问题之一。报童问题是典型的单周期库存管理模型，一直是本领域研究的焦点。近年来，利用数据驱动模型和方法的报童问题研究展现出比传统方法的优越性，进而成为了热门话题。Tian 和 Zhang [116] 提出了一种端到端的算法框架，利用深度学习模型从在线商品评论等特征数据中预测订单数量，其中采用了包括 CE 在内的方法来选择模型的输入特征。他们将方法应用于汽车库存管理问题，基于 2016 至 2022 年间的大众朗逸汽车的历史销售量、某网站的评论、某搜索引擎指数、和宏观经济指数等数据构建了模型。结果显示，本方法能够大幅减少超额成本和短缺成本之和，与同类方法相比减少了 31.8% 的成本。

中国企业海外并购面临着时代的机遇和挑战。探究影响中国企业海外并购的国内外各种因素，分析并购的短期和中长期绩效，具有重大的理论和现实意义。王琳君 [117] 提出利用 Copula VECM 模型，分析与海外并购数量强关联的

经济变量对并购的影响，特别考虑了被其他研究者忽视的宏观经济变量的动态影响。由于此类经济变量较多，容易使构建的 VAR 模型复杂度增加，导致估计模型的不准确性。因此，他提出利用 CE 对经济变量进行选择后再建立模型。他在 Wind 数据库中选取了海外并购数量和其他 7 个与并购数量可能关联的宏观经济变量的季度数据，通过 CE 关联度分析后，得出结论认为宏观经济杠杆率、GDP、货币供给增长率和汇率四个宏观经济因素是影响我国海外企业并购活动不可忽视的重要因素。他进一步分析论述了所选变量对并购数量影响的内在经济逻辑，增强了模型的合理性。

6.28 社会学

性别不平等是社会学研究的问题之一。由性别视角，我们可以发现很多不平等现象，如两性在收入上、教育上、职业上的不平等等。分析和鉴别导致不平等现象的社会学因素是学者们关心的问题，利用定量方法分析相关社会学数据是研究的手段之一。然而各种社会因素之间的因果链条十分复杂，需要采用科学的数据分析工具加以应对。马健 [11] 提出了一种多域因果关系鉴别方法，将性别因素作为社会外在变量，将不平等问题转化为数据分析中的域迁移问题，利用基于 CE 的条件独立性测试发现社会变量之间的因果关系。他将方法应用于美国国家成人收入社会调查数据，分析了性别、教育和收入之间的因果关系链条，发现了性别导致教育不平等，进而造成收入不平等的科学证据。

6.29 教育学

高中教育各学科之间具有内在的联系，教学大纲中强调了数学对物理、化学和生物等学科的基础性地位，数学知识、数学思维和思想方法深刻地渗透影响着其他学科的教学。因此，数学成绩被认为与其他学科成绩具有相关性。利用实证的方法研究数学与其他学科的关系，分析数学成绩与其他成绩之间的相关性是一个重要的基本问题，对于教学改革和学习方式的选择具有普遍参考意义。柳琼 [118] 基于某市 2013 级理科学生高一、高二期末考试成绩和高三两次模拟考试成绩，研究了数学成绩与其他学科成绩之间的相关性。作者比较了经典线性相关系数、秩相关系数和 MI 三种相关性度量方法，从 CE 和 MI 理论关系的角度分析论证了 MI 度量的优越性，并实验证明了 MI 度量能够更好地刻画揭示数学对其他不同学科（语文、英语、物理、化学和生物等）的影响力机制。

6.30 计算语言学

城市服务热线是政府公共管理系统的重要组成部分，促进了政府和市民的沟通，改善了政府的公共服务。但传统的人工派单方式无法满足日益增长的热线诉求，如何高效快速的处理大量的市民热线诉求是城市服务热线提高服务质量面临的重要课题。大量的热线文本数据积累为快速筛选和处理热线诉求提供

了可能,可以利用自然语言处理方法处理热线文本数据,进而构建智能派单系统。陈作海等 [119] 提出了一种基于知识图谱技术的城市热线派单方法,基于城市热线数据构建热线知识图谱,再对待派单诉求根据构建的知识图谱检索结果进行派单,大大改善了热线服务的工作效率。在此智能派单系统中,CE 作为特征选择方法被用来对城市热线数据进行预处理,以构建和更新知识图谱。结果表明,CE 表现优于其他同类方法。作者将该方法应用在济南市民服务热线的系统上,通过不断更新知识图谱,最终获得了 90% 以上的派单准确率。

6.31 新闻传播学

公共卫生事件发生过程如何影响公众情绪是一个重要的问题,具有理论和现实意义,对政府的信息发布和舆情管控具有参考价值。特别是新媒体环境中,公众情绪的传播和演化过程受多种因素影响,因而更趋复杂。新冠疫情的发生给研究这类问题提供了条件。Zhang 等 [120] 研究了上海新冠疫情发生期间,疫情过程对公众情绪的影响特点和机理。他们以微博平台上“上海疫情”主题的数据为基础,研究了公众情绪的影响因素、时间演化以及疫情与公众情绪之间的因果关系。研究利用了基于 CE 的传递熵方法分析了疫情和公众情绪之间的因果关系,实证地发现了疫情过程对公众负面情绪的因果效应大于正面情绪,且正面情绪对负面情绪具有抑制效应。

6.32 法学

社区是基本的社会生活单元,社区治安管理与每个人的生活息息相关。社区属性与社区犯罪之间具有内在联系,分析社区经济、社会和人口等属性与各类犯罪之间的关系,可以加深对犯罪行为发生的理解,对执法部门合理安排部署资源力量具有重要参考意义。Wieser [121] 基于 CE 与 MI 的等价关系,提出了一种新的信息瓶颈 (Information Bottleneck) 估计方法。由于利用了 CE 的变换不变性,该方法较传统同类方法具有更好的估计性能。他将该方法应用于美国社区与犯罪数据集,分析 125 种经济社会因素与 18 种犯罪属性 (包括 8 种犯罪行为,人均犯罪率和人均 (非) 暴力犯罪率) 之间的关系,学习得到了可以表示这种关系的潜变量模型,为构建犯罪预测模型提供了参考。

6.33 政治学

政治安全事关国家安危。政治学研究关心政权领导力因素与政权危机之间的关系,并根据这些信息配置资源,开展情报收集、稳定或颠覆政权等行动。基于雪城大学莫伊尼汉全球事务研究所的国际政治领导力数据集,Card [122] 研究了 37 个领导力因素与政治安全之间的非线性关系,采用 CE (MI) 作为非线性分析工具,重点关注了两个领导力变量 (政权建立原因和政权结束原因) 与其

他因素的关系。分析结果佐证了社会学家的已有理论，分析也印证了已知的关系，发现了未知的关系和现象。

6.34 军事学

目标意图及时准确识别是战场态势感知的一项重要内容，是指挥决策的基础和前提。空中飞行目标意图识别会面临多种不确定性的挑战，如行为特性与物理特性的不确定性、飞行规则的不确定性和行动能力的不确定性等，使得及时准确的意图识别十分困难。张可等 [123] 提出了一种基于动态贝叶斯网络的目标意图识别方法，用于从复杂态势中目标的时序数据中完成意图识别，方法利用基于 CE 的 MI 估计算法从目标属性和目标意图数据来生成贝叶斯网络结构，再利用自适应遗传算法迭代优化网络结构，利用最终优化得到的网络来进行未知目标的意图识别。他们将该方法应用于空中目标的处理过程，利用空中目标的位置信息、飞行信息，以及雷达和通讯系统信息来识别其 6 种不同意图（巡逻、预警/指挥、电子侦察、电子干扰、攻击和打击等）。该方法可不限于空中飞行目标，可以很方便地推广到其他类型目标上。

6.35 情报学

颠覆性技术是具有原始创新性的技术，会对现有主流技术和产业产生变革性作用，推动经济社会发生突变式进步。开展颠覆式技术的前瞻识别及预判研究是科技情报分析领域的重要问题，对科技政策制订、科技产业布局和科技创新生态培育具有指导意义。基于知识网络分析的科学、技术和产业互动模式研究是解决识别研判问题的路径之一。许海云等 [124] 提出了一个颠覆性技术研究流程框架，以渐进式技术为参照获取科技、专利和产业文献资料的文本数据，利用自然语言处理技术分别构建三者的知识网络，再利用知识网络的三种整体网络属性和网络社区相似度属性将知识网络互动模式划分为预设的五种模式，包括科学-技术-产业联动模式。其中，CE 被用来度量三种知识网络的整体网络属性之间的关联度，以表征互动模式。他们以再生医学（干细胞）领域作为颠覆性技术对象，以白血病治疗领域为渐进性技术参照开展实证研究，获取了截至 2020 年底的权威数据库相关文本数据，利用该流程框架研究了两个对比领域科学-技术-产业互动模式的共性和差异，加深了对颠覆性技术创新生态要素的知识流动和扩散规律的认识。

6.36 能源工程

天气是能源系统的重要影响因素，直接影响能源的生产和消费两端。特别是当可再生能源整合到能源系统中后，风速和光照等天气因素决定了风能和光伏能源的生产能力，而温度变化则会影响居民的能源消耗需求。但自然系统具有较大的随机性，给新能源系统的稳定高效运行带来了挑战。因此，新型能源

网络管理系统需要建立合理的模型,以便将新能源集成到网络中。信息论为管理天气系统的随机性提供了工具。Fu 等 [125] 研究了基于信息论在集成能源系统中建立天气模型的方法。作者采用了 Copula 函数建立天气变量的联合分布模型,并采用 CE 计算的 MI 作为模型准确性的评价指标,以指导建模过程。同时,MI 还被用来衡量各种能源产出之间的关联强度。作者将得到的集成能源系统模型用于模拟中国北方某地区的能源系统运行情况,并与实际数据进行了对比。结果显示,系统模型的模拟与实际情况基本符合,说明构建的天气模型能够满足能源管理系统运行需求。

光伏发电技术受天气等环境因素影响,具有较大的不确定性,给电网的安全稳定运行构成影响。根据气象条件等因素对光伏电站有功功率进行预报,有助于电网调度人员更好地制定调度策略,应对光伏发电的不确定性给电网的冲击威胁。朱正林和张冕 [126] 提出了一种结合优化算法、模态分解、CE 和深度学习模型的方法,用于提高发电功率的预测精度。他们在澳大利亚 Yulara 地区光伏电站数据上将方法与多种同类方法进行了对比,表明该方法得到的模型能够更好地适应天气变化的影响,取得最好的预测效果。

光伏组件是太阳能发电站的核心设备,其运行状态直接关系着电站的运行效率和稳定性,如发电量、洁净度和故障状态等。因此,预测光伏组件状态是光伏电站管理的核心问题之一。传统的状态预测方法大多只基于单个组件信息,忽略了组件之间的联结关系,导致预测准确度不高。王士涛和邹晨鑫 [127] 提出了一种光伏组件状态方法,在考虑单个组件状态的影响因素的同时,还考虑组件之间的联结关系,用以构建状态图神经网络预测模型。其中,他们利用 CE 估计不同影响因素之间以及状态和影响因素之间的相关性,用于构建预测模型中变量之间的拓扑关系。他们基于一套光伏组件的样本数据验证了方法的有效性。

风能作为一种主要的清洁能源,具有间歇性和不确定性的特点,导致风电机组的功率预测和控制十分复杂。基于风电机组的监测数据,分析机组内各变量之间的相关性特征,有助于机组的健康状态监测和风电功率预测,从而更好地利用风能资源。崔双双和孙单勋 [128] 提出利用 CE 来分析风电机组状态变量之间的相关性,再基于 CE 相关性进行聚类以得到机组工况的划分。他们将方法应用于广东某海上风电场数据采集与监控(SCADA)系统的数据,发现 CE 方法较传统方法能更好地描述数据中的相关性,并利用 K-means 方法得到了能精确地反映风电机组运行特性和状态的工况划分,具有重要的现实意义。

电力负荷预测是根据历史数据来预报未来一段时间的用电量,对智能电网调度和规划电力输送具有重要意义。电力负荷受多种因素影响,具有周期性和季节性等特点,特别是受天气因素的影响明显。因此,构建准确的电力负荷预测模型需要考虑天气等多种因素,并对天气对负荷的影响特点进行分析。Ma [13] 提出利用基于 CE 的 TE 方法来分析动态系统的时延特性,并将方法应用于摩洛哥蒂头万(Tétouan)城的电力消费数据,从时延的角度分析了五种天气因素对该城三个电力供应网络的负荷的影响,发现了影响的每日时延变化特征。Yan

等 [129] 提出了一种结合聚类算法、预测算法和集成学习方法的综合能源负荷短期预测方法, 首先根据负荷数据特性对数据进行聚类, 再对每类数据利用基于 CE 的 TE 算法分析选择对负荷有影响的外部因素 (包括天气和时间两类), 最后利用集成学习算法对负荷进行预测。他们将方法应用于 2018 年美国亚利桑那居民建筑综合能源负荷数据, 以预测电力、燃气、制冷和供热四种负荷。实验结果表明, 利用基于 CE 的 TE 算法选择的外部因素可以在预测模型上得到最好的预测性能, 效果明显好于其他相关性变量选择对比方法, 原因是 TE 可以准确度量外部因素和负荷之间的时序非线性关系。阚超 [130] 提出了一种基于深度学习的综合能源多元负荷短期预测方法, 首先利用 VMD 对多元负荷进行分解, 再利用 CE 计算分解得到的 IMF 分量与负荷影响因素之间的连接强度, 作为图卷积网络的邻接矩阵权重, 再将如此得到的时序耦合特征输入到 LSTM 模型, 将由此得到的模型输出与另一个 Transformer 模型的输出进行点乘运算作为最终预测结果。他在美国亚利桑那州立大学坦佩小区的数据上验证了方法的有效性, 发现 CE 能够很好地计算出气象和时间等因素与冷、热、电负荷各分量之间的耦合强度关系, 增加了模型的可解释性。胡程林 [131] 提出了一种基于多任务学习的多节点符合预测方法。他首先分析了节点负荷间的相关性和因果性关系, 特别是节点负荷与总负荷之间的关系。其中, 他利用基于 CE 的 TE 方法分析探索了节点负荷与总负荷之间的非线性因果关系。他基于新西兰配电系统九个地区变电站负荷数据集进行了 24 小时因果分析, 发现节点负荷对总负荷的因果关系是一个波动的因果关系过程, 说明总负荷中含有节点负荷的变化信息。

可再生的风光能源越来越成为电力能源的重要组成部分, 如何保证风光电力接入的经济效益和安全可靠是可再生能源利用的主要关切。合理的规划对于解决此关切十分关键, 可保证建设投资回报和系统合理运行, 防止风光能源被弃用的发生。储能系统可以平抑风光能源的不稳定波动性, 是风光系统规划的组成部分。董海燕等 [132] 提出了一种考虑源荷时序相似性的风光储协同规划配置方法, 其中利用 CE 衡量风光能源与负荷之间的相似性, 以提高系统风光能源的利用效率。他们将方法应用于某工业园区的风光火储联合发电系统的规划配置, 结果表明, 该方法能有效降低储能系统的装机容量, 提高新能源的消纳能力, 经济效益和减排效益明显。

频率是电力系统最重要的物理量指标之一, 频率稳定性是保障电力供应稳定性的一个基本要求。可再生能源由于具有不可预测性, 其大量接入电网给电网频率稳定性带来了挑战。为了稳定和控制新能源带来的频率波动, 需要准确快速地预测系统的频率稳定性, 以帮助系统操作员提前制定控制策略。传统的频率稳定性预测是模型驱动的, 由于求解耗时从而无法做到在线预测。基于机器学习的模型方法, 通过简化模型以提高计算效率, 可以满足在线预测的需求。Liu 等 [133, 134] 提出了一种结合深度学习和 CE 的频率稳定性预测方法, CE 被用来选择模型输入变量, 减少冗余信息以提高计算效率。作者将方法应用于两个系统: 一个是新英格兰 39 节点系统, 集成了美国西部电力调度委员会的动

态风场模型；另一个是基于南加州西部的电网系统建立的 ACTIVSg500 系统。实验表明该方法建立的模型相较同类模型取得了最好成绩，达到了实用的要求。CE 方法不仅简化了模型、大幅降低了计算时间，且分析发现了与频率稳定性相关的电网变量，使得模型具有了可解释性。

电力系统宽频振荡由电力电子设备的动态交互作用引发，在电网中的传播会造成连锁反应，严重危害电网安全运行。宽频振荡激发机理复杂，具有显著的时变、非线性和广域传播等特征，难以有效地进行建模分析。冯双等 [135,136] 利用 CE 的模型无关特性，提出了一种宽频振荡影响因素和传播路径分析方法。该方法以系统运行的状态参数为随机变量，通过计算其与各个频率区间的振荡阻尼之间的 CE 来选取影响振荡的关键因素；同时，利用系统发生振荡时的数据，计算系统变量之间的 copula 传递熵网络，用于分析振荡的传播过程和振源定位。该分析方法是数据驱动的方法，可以在系统模型未知的情况下得到相应的分析结果。作者仿真了直驱风机并网系统和含风电场的四机两区系统，对控制器内部各环节和复杂系统各母线之间的振荡因果关系进行分析。仿真结果表明，该方法能够从设备级和网络级两个层面准确确定宽频振荡的传播路径和振源位置，为研究振荡传播机理提供了支撑，为进一步采取振荡抑制措施提供了参考。孙文涛等 [137,138] 也提出了一个利用 CE 识别交直流混联系统宽频振荡风险识别方法，通过分析计算振荡影响因素变量与各个子频率区间内振荡模态的阻尼变量之间的 CE 来进行风险识别。他们利用该方法分析了某省份电网系统在小扰动下的振荡风险，采用 LCC 模型发现了整流器控制参数和直流传输功率等关键影响因素，为后续设计抑制振荡的针对性调整方案提供了准确且可靠的依据。

新能源的接入给电网带来了动态性和不确定性，增加了电压协同控制的复杂性，给电网运营带来了新的挑战。电压控制要求多个变压器的分布协同控制，但通信网络存在时延、抖动和丢包等信息传输问题，给这种分布式协同控制带来了不利影响，导致性能下降甚至构成系统不稳定风险。因此，研究通信不确定性下的电压系统控制是一个重要问题。由于网络信道特性和拥堵的原因，时延、抖动和丢包等问题之间存在非线性的相关性，这种相关性在以往的研究中没有被充分考虑，导致可能的次优控制甚至系统不稳定。Yang 等 [139] 提出了一个多变量相关通信不确定性事件条件下事件触发的滑模控制策略，用于电网的电压协同控制。作者提出利用 CE 来度量时延、抖动和丢包三种事件之间的不确定相关性，进而得到联合熵用于衡量总的通信事件不确定性，再将这样得到的总不确定性用于滑模控制的状态观测器设计，进而得到滑模控制器的控制律。他们在江苏电网的一个 7 总线配电系统和一个 IEEE 69 总线配电系统上进行了仿真和实物实验，将提出的滑模控制策略与 3 种同类方法进行了对比，结果表明，所提出的算法展现出了良好的控制性能和鲁棒性，各种指标均优于对比方法，使其更适合复杂通信环境下电网的协同电压控制。

线损率是电力能源企业的一项重要经济技术指标，衡量其经济效益水平的高低。因此，线损管理和异常线损稽查是电力部门的一项重要工作。线损分析是

利用科学的计算手段分析线损在电网中的分布规律, 能为管理提供高效、准确的决策支持。Hu 等 [140] 提出了一种基于 TE 的线损分析方法, 通过 CE 估计计算每个用户对区域总线损的 TE 值来判断其对总线损的贡献。他们基于每日电力供应和线损数据的计算分析, 将用户根据线损贡献度排序, 以应用于实际线损管理工作中, 从而减少总线损率。

配电网拓扑辨识是电网系统分析的重要问题, 为潮流计算、电网状态估计、无功优化调节和网络重构等配电网管理功能提供基础。随着分布式能源大规模接入配电网, 其波动性和不确定性导致系统拓扑重构更加多变, 给拓扑辨识带来了新的难题。秦超和潘毓笙 [141] 提出了一种新的配电网拓扑辨识方法, 基于时空相关性将辨识问题转化为多个开关节点状态识别的子问题。该方法首先利用 CE 和马尔科夫链分别提取节点电压序列之间的空间和时间非线性相关性特征, 在此基础上得到能够识别单个开关状态变化序列的模型, 最后结合多个此类开关状态识别结果完成一定时间内的网络拓扑结构辨识。他们模拟了接入风机和光伏的拓扑结构动态变化的配电网, 为其仿真生成了为期 120 天的配电网家庭负荷, 在此网络节点量测数据的基础上检验所提出的方法, 结果表明 CE 能够有效分析节点电压之间的相关性, 导致该方法能够在短时间内有效辨识网络拓扑结构。

电价预测问题在电力市场参与者决策中至关重要, 可以帮助其开发交易策略并合理分配资源。但新能源的广泛使用使电力供应具有不确定性, 从而使电价预测变得更加复杂, 造成预测模型构建较为困难。Xiong 和 Qing [142] 提出了一种基于时序数据的混合电价预测框架, 将基于 CE 的特征选择方法与信号分解、贝叶斯优化和 LSTM 模型相结合, 以构建预测模型。他们将方法应用于 2017 年美国宾夕法尼亚州-新泽西州-马里兰州互联网络 (PJM) 电力市场数据上, 证明了该方法的有效性和实用性。

锂电池是使用最广泛的绿色清洁能源。但锂电池的电池容量会随着使用次数而退化, 因此电池健康状态监测是电池管理系统中的主要问题之一。传统的健康状态监测模型大多在单一负载状况假设下得到, 无法适用于真实场景下的多种状况, 导致在原始数据上得到的模型无法适应新的情况。针对此问题, Hu 和 Wu [143] 提出了一种基于迁移学习思想的电池容量估计方法, 结合了因果分析、注意力机制和 LSTM 等工具, 其中基于 CE 的 TE 被用于选择与容量退化相关的健康状态指标, 以保证构建模型在不同状况下的可迁移性。作者将方法应用于 NASA 的 3 种负载状况下的锂电池退化数据, 结果表明, 基于因果分析构建的模型比基于两种传统方法的模型的跨工况预测准确度分别提高了 8.6% 和 12.4%, 增强了模型的鲁棒性。

能源效率是工业 4.0 的主要目标之一, 生产系统的数字化给提高工业设备的能源效率提供了巨大的机会。能效异常是改善能源效率的突破口, 发现异常并给出其原因是改善能效的有效途径。然而工业系统大都具有复杂的结构和运行机理, 难以通过传统建模方法分析能效异常的根本原因。马健 [144] 提出利用

TE 对能效异常进行根因分析, 针对工业系统的非平稳性, 给出了一个称为 TE 流的能效异常原因诊断方法, 其中采用了基于 CE 的 TE 估计方法。由于 TE 是模型无关的, 该方法也就可以在无设备机理的条件下对各种设备进行能效异常根因分析。他将该方法应用于一个空气压缩机系统, 成功地对系统运行的因果关系进行了描述, 从而找到了导致系统能效异常状态的空压机子系统。

6.37 食品工程

葡萄酒作为一种奢侈农产品, 越来越走进广大普通消费者。葡萄酒质量的品鉴对其生产和销售都至关重要, 葡萄酒酿造业大量投入在质量评价环节, 以改善酿造工艺并促进消费。传统的质量品鉴主要依靠理化测试和专家感受, 但专家的味觉感受主观性较强, 其内在机理难以理解。因此, 有必要研究酒的成分和专家评价之间的内在联系, 以增进对葡萄酒质量的理解, 提高质量评价的客观性。Lasserre 等 [145,146] 利用基于 CE 的 (条件) 独立性度量估计, 提出了一种因果关系网络学习算法, 称为 CMIIC, 并将其应用于著名的葡萄牙绿酒的质量评价数据上, 分析发现了分别与红葡萄酒和白葡萄酒的质量相关的理化成分。

6.38 土木建筑

建筑能源消耗占全部能源消耗的四成左右, 建筑节能技术是重要的绿色能源技术, 对实现联合国的碳中和目标意义重大。供暖、通风和空调 (HVAC) 系统贡献了商业楼宇四成以上的能耗, 是建筑节能的主要研究对象之一。HVAC 系统的运行具有时延的特性, 来自于媒介传导的滞后和热惯性。理解并运用这种特性, 有利于设计适当的控制策略, 从而达到节能的目的。Li 等 [147] 将基于 CE 的 TE 理念方法引入到 HVAC 领域, 开发了一种基于信息论框架的无模型时延鉴别方法, 用于 HVAC 系统的时序预测。他们改进了 kNN 的多变量 TE 估计器, 结合优化方法设计了时延鉴别算法。他们将算法应用于大连某四层教学楼的供热监控系统, 分析室内温度与天气参数 (如室外温度、相对湿度、太阳辐射、风速等) 和供热参数 (如热水供应和回流温度等) 的数据, 鉴别时延特性, 进而利用后两组参数预测下一段时间的室温。结果表明, TE 方法能够鉴别参数之间的时延关系特性, 进而提高室温预测性能。

工程变形监测是工程测量领域的重要问题之一, 需要保证监测精度和可靠性, 对大型工程的施工运营安全具有重要意义。常见的变形监测分析方法一般只针对单个监测点的建模和预测, 但变形体内部监测点间不是孤立的, 而是具有内在的相关性, 因而可以利用这种相关性提高单点监测的预测精度。曹久慧等 [148] 提出了一种基于自注意力机制的变形监测方法, 采用 CE 度量监测点与周围点之间的相关性, 再利用这些相关点组成的数据集训练自注意力机制的模型来进行长时间的变形预测。他们将方法应用于某隧道施工段 2020 年 12 月至 2021 年 10 月间围堰上监测点位的位移数据, 以预测 7 天的变形, 获得了较好

的效果,对实际工程围堰预警等长期变形预测问题具有良好的应用价值。

6.39 交通运输

大件货物运输是指通过多种运输方式对具有不可拆解属性的大型物件的专业运输作业活动,在国民经济中占有重要地位,对国计民生重点行业的基础设施建设起着重要的支撑和保障作用,也关系着国防军事和国家安全。大件货物运输大都需要铁路、航运等多式联运的方式才能完成,需要制定各个局部运输环节模块联动的整体方案。随着交通系统的数字化,大量的相关方案数据得到积累,基于数据的大件货物运输方案制定成为了一个重要的问题,其研究有助于提高方案制定的科学性和适用性。黄达 [149] 利用 CE 等多种数学工具提出了一种基于模块链构建的大件货物多式联运方案制定方法。该方法先将运输方案分解为多个局部环节模块,再利用 CE 等相关性度量工具筛选一组模块属性用于计算方案之间的相似度,最后在已有运输案例库中检索与目标运输任务相似度高的案例作为初步运输方案。由于大件运输方案的多样性,一些案例模块属性会具有非高斯性,使得传统的相关系数工具不再适用于计算属性间相关性,而 CE 由于具有普适性则依然适用。作者在 600 多个实际案例的数据上验证了该方法,并构建了方案制定原型系统。

航空和高速铁路是我国最主要的两种旅客运输方式。相较于航空,高铁票价的市场化水平处于落后的水平,欠缺灵活性和动态性。因此,研究影响票价的因素以期改进高铁票价的定价机制是学界十分关心的问题。许罗豪等 [150] 基于京沪航空和高铁票价的数据,利用 CE 和决策树等工具研究了出行需求、旅客选择、出行效率和出行路线四类因素对航空和高铁票价的影响。他们发现购票提前期对两种票价的影响程度不同,但旅行时间对二者的影响程度较为相似。这些研究结论对高铁定价具有一定的参考价值。

城市轨道交通已经成为我国各大城市的主要交通出行方式之一,提升城市轨道交通系统的管理水平和运营效率是交通系统面临的重要问题之一。城市交通客流分析与预测可以为正常客流引导、异常客流疏导和轨道列车调度提供依据。基于出行记录数据分析轨道交通和公交、出租车等其他交通方式客流之间的互动关系,有助于提升轨道交通客流预测效果。王升 [151] 提出利用相关分析和因果分析等方法对客流时序数据进行分析,以增进对不同交通方式客流之间关系的理解。其中,基于 CE 的 TE 方法被用于客流间因果关系分析。他将方法应用于苏州市轨道交通系统四个站点 2018 年 8 月 6 日至 12 日期间的轨道交通、公交和出租车客流时序数据,因果分析结果表明,三元坊和东环路站的出租车客流到轨道交通进站客流的影响有 1 小时的滞后效应,而东方之门站的这种滞后效应则有 5 小时。这一分析结果对轨道交通站点的客流预测具有重要指导意义。

铁路客流量预测是铁路客运服务管理的基础,准确的预测可以改善铁路运力的统一调度、协调路网资源和提高经济效益。但客流受自然和社会因素共同

影响,准确预测具有一定的难度。作为一个典型的时间序列预测问题,一般采用时序模型来完成预测,这其中一个问题就是如何处理客流和其外部影响因素之间的非线性关系。Chang 和 Song [152] 提出了一种改进的 Prophet 客流预测模型,其中利用 CE 来分析天气因素和节假日因素与客流之间的非线性关系。他们利用 2015 年 1 月至 2016 年 3 月期间的真实铁路客流数据进行了实验研究,利用 CE 相关性分析发现天气因素对客流的影响可以忽略不计。他们又基于 CE 工具构造选择了新的节假日时序特征,用于提高预测性能。实验结果表明,利用如此改进的 Prophet 模型可以提高客流预测的准确性。

6.40 制造工程

产品质量是制造业的生命。注射成型 (injection molding) 是近年快速发展的工业制造技术,在航天、建筑、通讯等领域有着广泛应用。注射成型过程包括了多步复杂的物理和化学反应过程,很容易受到外部因素的影响,保证塑料产品质量的稳定性是一个难题。基于制造过程历史数据,建立产品质量预测模型是提高产品质量的手段之一。但建立模型需要首先选择有关的过程参数作为模型输入,以获得较好的预测性能。Sun 等 [153] 提出基于 CE 方法选择过程参数变量用于构建质量预测模型,并将方法应用于真实的富士康公司的注射成型生产过程数据,大幅改善了质量预测的性能。Cai 和 Rong [154] 提出了一种鉴别影响质量的关键因子的方法,首先利用 CE 建立因子间相关矩阵,再用网络反卷积方法消除因子之间的间接影响,从而鉴别出影响质量的关键因子。他们将方法应用于 UCI 机器学习库的三个数据集,结果表明该方法能够较同类方法更高效地鉴别关键因子并取得最高的预测准确率。他们又将方法应用于一个薄膜晶体管液晶显示器生产的实际数据,结果显示,该方法从 1540 个因子中选出 154 个因子,并得到了最好的质量预测精度。

复杂机械产品的整机制造包括设计、制造和装配三个环节。作为产品生产的最后一个环节,装配过程在零部件的制造过程基础上组装高精度产品,装配质量控制在零部件制造质量的基础上保障整机产品质量。复杂机械产品零部件数量种类繁多、相互关联,装配环节错综复杂,上游环节的装配质量误差会对下游环节质量构成影响。王小巧 [155] 在装配质量控制中考虑了上下游工序和质量控制点之间的相关性,利用 Copula 对控制点间相关关系建模,并用 CE 度量这种相关性,进而提出了一种装配质量控制点控制阀优化方法。她将方法应用于江淮汽车某型汽油发动机关键零部件缸盖的装配工序过程,验证了方法的有效性。

现代工业系统变得越来越高度复杂和自动化,使得工业过程监测变得愈加困难。如何监测系统异常并发现异常原因是一个具有广泛应用的重要问题。利用因果分析得到工业系统内部复杂的因果关系图,有助于准确发现异常的传播路径,进而及时进行干预。Dong 等 [156] 提出了一个结合动态 PCA、TE 和 LSTM 的故障分析框架,其中基于 CE 的 TE 被用分析系统内的因果关系。作

者将该方法应用于辽宁鞍钢的热轧带钢工艺过程数据的分析,成功地对过程中的两个故障及其原因进行了分析。作者还将基于 TE 的因果图分析方法与同类格兰杰因果分析方法进行了对比,表明 TE 方法能够更准确地对故障进行根因分析。刘鹏阳等 [157,158] 提出了一种动态过程分布式监控的 CE-DR-SVDD 方法,首先利用基于 CE 的 Louvain 算法对系统变量分组,再利用动态递归支持向量数据描述算法构建局部监控模块,最后利用贝叶斯推理融合局部监控结果来得到全局监控结果。他将方法应用到田纳西伊斯曼过程的实验数据上,并与同类方法进行了对比,结果发现该方法在仿真的 21 个故障中的 19 个上获得了最好的检测结果。

烧结过程 (Sintering Process: SP) 在钢铁工业中至关重要,同时也会消耗大量的能源。动态预测 SP 的碳消耗有助于节约能源和减少碳排放。传统的 SP 建模基于一定的假设,无法适应 SP 的系统动态特性,基于数据的机器学习模型可以克服传统模型的不足。Hu 等 [159] 提出了一种动态建模方法框架,可以自动识别过程工况状态,从而进行碳消耗预测。该方法框架结合了 AKFCM 聚类算法、基于 CE 的模型选择和宽度学习模型方法。作者在一家钢铁企业的实际数据上验证了方法的有效性,证明了 CE 可以快速地捕捉不同工况下 SP 中复杂的相关关系模式,从而使该方法能够比传统方法更准确地预测烧结碳消耗。

6.41 可靠性工程

退化过程 (degradation processes) 在各种工程系统中普遍存在,导致系统可靠性的降低甚至失效,如金属材料的疲劳和腐蚀、半导体器件的参数漂移等。退化过程建模是评估系统和产品有效性和寿命的主要技术手段之一。由于现代系统的复杂性,影响退化过程的因素较多,因素变量本身具有非线性特征,且变量之间又相互关联,从而对退化过程建模构成了可靠性工程的一个基本难题。如果建模时忽略了因素之间的相关性,就会导致模型错误和可靠性估计误差。传统的衡量因素之间的相关性主要采用线性相关系数,难以处理复杂的相关关系。Sun 等 [160] 提出采用 copula 对过程因素之间关系建模,并用 CE 来度量退化过程因素之间的关联。他给出了一种参数化 CE 估计方法,并成功应用于微波电子组件的退化过程分析中。结果表明,该方法能够分析不同阶段的退化过程。

砂轮是数控磨床的关键核心部件,用于对工件表面进行磨削加工作业,其物理磨损程度直接影响加工质量和效率。因此,砂轮的维修和保养十分重要,如何对其进行预测性维护是一个关键的问题。程毅 [161] 提出了一种基于 CE 和最大相关最小冗余的特征选择方法,用于构建砂轮剩余寿命预测模型。他基于威孚高科 CPM2.2 凸轮轴生产线上 5 个磨床上 55 个参数的 SCADA 数据,对比了多种相关性特征选择方法,发现基于 CE 的方法能够有效地计算出传统相关性方法不能发现的非线性特征关系,得到的 15 个参数与砂轮剩余寿命密切相关,符合磨床运行机理。

6.42 石油工程

煤层气是蕴藏在煤层中的一种天然气,通常通过向煤层钻井来开采,在我国已经有 30 多年的开发历史。煤层气产量受开采过程中的多种地质和工艺因素影响,鉴别出与其密切相关的关键因素对作出煤层压裂开采决策至关重要。但煤层压裂有效性和影响因素之间关系具有非线性特征,且因素之间相互影响,给关键因素分析和产量预测构成了挑战。Luo 和 Xi [162] 提出了一种将基于 CE 的特征选择方法、混合优化算法和神经网络方法相结合的方法,用于构建煤层气井产量预测模型。他们在鄂尔多斯盆地某地块的气井数据上验证了该方法,利用基于 CE 的方法从 36 个备选因素中得到了 4 个关键因素,包括与气层相关的含气量和气饱和度,以及与压裂工艺相关的前置液量和含沙液量,由此得到的预测模型能够在实验数据上预测最高 83% 的产量。作者在同一地块的一口典型钻井上应用该方法选择地层中的高产气量区域,使得该井的日产量从每天 322 立方米大幅提高到 950 立方米。

6.43 冶金工程

高纯金属材料是具有很高纯度的特殊材料,具有高电导率和稳定性、良好的光学性能等物理特性,是制造各种精密科学仪器和高科技产品的必备材料。制备高纯金属需要精密的工艺来保证高纯度,但传统工艺方法普遍存在制备纯度低的问题。真空蒸馏法则可以绿色高效地提纯金属,但其工艺参数需要手动调节,依赖于人的经验。田庆华等 [163] 提出了一种真空蒸馏制备高纯金属的优化方法,利用 CE 等机器学习技术筛选出能够保证高纯度和低杂质的工艺参数集合,建立以纯度和杂质含量为目标变量的预测模型,再基于此模型利用参数寻优方法得到最佳工艺参数,用于高纯金属制备。他利用该方法进行了真空蒸馏制备高纯金属硒和碲的工艺参数优化实验,基于 CE 等特征选择方法发现蒸馏温度、保温时间、冷凝温度和真空度对制备纯度具有重要性,保温时间、蒸馏温度、升温速度和冷凝温度对杂质含量具有重要性。经过不断的迭代循环实验,该方法所得工艺参数能够获得良好的制备效果,可以根据不同产品需求对工艺参数进行自动控制优化。

6.44 化学工程

故障诊断对化学过程的安全、高效运行至关重要,数据驱动的故障诊断方法是实际生产运行中的主要方法之一。为了构建诊断模型,构建合理的正常和故障状态的过程表示是问题的关键环节。Yin 等 [164] 提出了一种基于 CE 的灰度相关空间的故障诊断方法,通过变量之间的 CE 相关性矩阵来刻画过程的正常和故障状态,再将矩阵作为卷积神经网络的输入来构建故障分类模型。他们将方法应用于田纳西伊斯曼 (Tennessee Eastman) 过程的故障诊断数据,结果表明该方法取得了 95% 以上的诊断准确率,验证了方法的有效性。主元分析法 (PCA)

是一种常用的多变量过程检测方法，原理是基于最大方差准则从一组过程变量构建过程检测统计量，但其仅适用于线性的情况。Wei 和 Wang [165,166] 提出了一种基于 CE 的非线性 PCA 方法 (CEPCA)，从具有非线性特征的 CE 矩阵得到过程检测统计量。他们将方法应用于田纳西伊斯曼过程数据，并与 PCA 方法进行了对比，结果表明，CEPCA 方法获得了更好的故障检测率结果。Pan 等 [167] 提出了一个基于关联故障因果图构建的故障传播和根因分析方法，称为 KPCA-DTMTE，其中基于 CE 的 TE 被用于分析因果关系。他们将该方法应用于田纳西伊斯曼过程，证明了方法能够追踪故障传播路径并获知故障发生原因。

理解化工过程变量之间的因果关系对于过程控制十分重要，有助于更好的过程监测和故障诊断。利用因果发现方法构建化工过程因果关系图，可以对故障进行根因分析，是故障诊断的重要方法之一。Bi 等 [168] 提出了一种基于深度学习进行因果发现的 CGTST 方法，并与基于 CE 的 TE 等多种方法进行了对比。实验结果表明，在一个 5 变量的连续搅拌槽式反应器数据上，TE 方法获得的反应图结果非常接近于真实情况；在田纳西伊斯曼过程数据上，TE 方法也取得了接近于真实情况的估计结果，体现出了较强的实用性。

软测量技术是化工过程建模的重要方法之一，指通过易测量的过程变量来估计推断难以直接测量的过程变量。然而，受实际生产过程中设备故障、环境干扰和信号传输等多种因素的影响，过程变量数据往往包含大量的缺失值，因此需要进行缺失值补全。生成对抗补全网络 (Generative Adversarial Imputation Nets: GAIN) 是一种以生成对抗网络算法框架为基础的数据补全方法，但当缺失值数量较大时，算法的性能难以满足实际需求。武昊 [169] 提出了一种改进设计的 GAIN 算法框架，称为信息增强 GAIN (IEGAIN)，其中 CE 被用于计算权重矩阵以作为新算法中生成器的输入。他分别在 UCI 的 Spam 和 Letter 数据集、公开的火电厂数据集和脱丁烷塔过程数据集和实际的聚丙烯生产过程数据集上，将 IEGAIN 与 GAIN 等其它经典算法进行了对比，结果表明 IEGAIN 能够以最低的误差补全数据缺失值。

6.45 航空航天

航空飞行器系统日趋复杂，飞行器设计首先需要加深对其总体设计参数的认识。对各种设计参数间的耦合关系的理论分析，有助于分析设计方案可行性或优化总体设计方案。Krishnankutty 等 [170] 基于 CE 与 MI 的等价关系，提出了两种基于 Copula 的 MI 估计方法，并将方法应用于美国 22 种喷气战斗机的技术参数数据的分析，估计了飞行航程和可承受负载之间的耦合关系，验证了分析方法的有效性。

卫星是航天时代的主要航天器类型，在信息时代有着广泛的民事和军事用途。作为一种在极端环境运行的复杂系统，卫星的在轨健康状态监测十分重要。卫星遥测数据是各种传感器参数的编码，包含了卫星内部运行系统物理参数的

交互关系信息。卫星的异常模式会由于这种交互而在内部传播，因此分析这种内部交互导致的故障传播链条有助于及时发现卫星异常状态，保障卫星正常运行。分析遥测参数之间的因果关系是一种解决问题的路径。Liu 等 [171] 提出直接将基于 CE 的 TE 应用于分析真实的卫星遥测数据，得到了遥测参数之间的故障传导图，结果要优于传统的 TE 方法。Zeng 等 [172] 提出了一种改进的 TE 度量，称为 NMCTE，用于分析遥测参数之间的因果关系网络，该度量利用了基于 CE 的 TE 表示和估计方法。他们又提出了基于所得因果网络的异常检测的 CN-FA-LSTM 方法。他们将 NMCTE 方法应用于真实的卫星遥测数据，得到了具有良好的可解释性的因果网络。他们又将 CN-FA-LSTM 方法在 NASA 公开的 SMAP 和 MSL 数据集上与其它 6 种方法进行了对比，验证了方法的优越性。

涡扇发动机是喷气式飞机最常用的发动机，具有高效、可靠和节能的特点，是现代航空业的关键设备之一。涡扇发动机结构复杂，且长期在极端环境下运行，导致其容易出现磨损和老化，因而监测其健康状态，进而开展故障预测和维修保养，对于保障航空安全、提高涡扇发动机的可靠性和使用寿命至关重要。因而，如何评估发动机的健康状态是一个基础性的关键问题。贾如侠 [173] 提出了一种涡扇发动机的健康指标，采用证据推理方法融合发动机传感器监测数据度量发动机健康状态，其中 CE 被用于推理过程中计算发动机传感器变量的可靠度。他将方法应用于 NASA 格林中心提供的引擎性能退化模拟数据集，并与两种传统方法进行了对比，结果表明新方法对发动机健康状态的评估效果更好，这得益于方法融合了基于 CE 度量的传感器变量间非线性相关性信息。他进一步利用得到的一维复合健康指标建立了发动机故障预测模型和剩余寿命预测模型，都获得了较对比方法更精确的预测效果。

航班延误是影响国际民航业正常有效运行的主要问题之一，不仅给旅客造成出行不便，也给航空业带来巨大经济损失。航空系统是一个有机的整体，运行中存在航班资源的上下游共享，带来了系统耦合，导致上游航班的到港延误会向下游传播，因此航班延误管控首先需要对这种延误因果关系进行分析。吴格等 [174] 提出利用一种基于 CE 的 TE 估计器来分析机场的航班延误时间序列之间的因果关系强度的方法，使民航信息系统具有了分析两个航班之间是否具有延误因果关系的能力，从而能够深入理解和利用航空系统节点间航班延误的内在关系。

6.46 兵器工程

武器装备效能评估是指对某一武器的技术指标和作战性能进行全面、系统、科学的分析和评价。由于武器装备系统及其运用的复杂性，评估需要考虑多方面因素，因此就需要一套综合的指标体系来完成评估。效能指标体系往往包含大量不同类型的指标，从而造成指标之间具有相关性，导致指标体系维数大，需要对其进行约简，以利于后续的评估流程。传统的约简方法一般采用相关系数

等数学工具,但其线性假设在实际问题通常得不到满足。陈爱真等 [175] 提出了一种指标体系约简方法,利用 CE 度量指标之间相关性,通过比较每个指标与其它指标之间的平均 CE 来约简指标。他利用评估对象的仿真数据实施验证了该方法,证明了该方法具有可处理指标间非线性相关性关系的优点,较传统方法更为科学和准确。

6.47 车辆工程

现代汽车的电子设备系统由车载网络连接集成,提高了乘坐的舒适性、安全性和多功能特性。但随着智能车辆技术的发展,车内设备也成为了黑客攻击的对象,对车辆安全构成了威胁。CAN 总线是一种智能车辆内连接控制各个车辆电子组件的数据通信协议,已在汽车领域成为事实上的主流标准,但由于缺乏加密、认证等机制,其在网络攻击面前非常脆弱。因此,研究 CAN 总线的入侵检测技术成为了提高其安全性的主要技术手段之一。Gao 等 [176] 提出了一种轻量级神经网络设计方法,用于检测 CAN 总线入侵事件,其首先分析异常 CAN 数据帧的属性集合,再利用 CE 选择出众多属性中与入侵攻击有关的少数属性,再利用这些属性构建一种 CanNet 神经网络检测器以检测入侵。他们利用现代汽车索纳塔 YF 的 CAN 总线数据验证了 CanNet 方法,结果表明该方法与同类方法相比具有高检测率、高实时性和低内存占用的优点。

6.48 电子工程

半导体芯片的集成度的不断提高,对微电子封装的要求也越来越高。微电子封装起着隔绝外部环境、散发内部热量的功能,对集成电路的稳定运行具有至关重要的保护作用。这就要求封装材料具有良好稳定性、高强度,同时还要满足其他物理性质。刘勃 [177] 以 Cu 基材料为主体,建立 CuNi 二元合金体系,利用第一性原理与机器学习相结合的方法,基于团簇相关函数特征,预测分别与材料强度和稳定性相关的构型能和杨氏模量。作者利用 CE 分析了预测模型的合理性,通过计算特征之间的相关性,以及特征与构型能和杨氏模量之间的相关性,发现模型特征与杨氏模量之间的相关性更高,同时构型能与杨氏模量之间的相关度较低,增进了模型的可解释性,有助于设计更合理的材料性质预测模型。

6.49 通信工程

通信安全是移动通讯的主要关切之一,一般通过通信层的加密技术加以解决。在资源受限的新兴网络(如 IoT、WSN 等)中,密钥分发是一个挑战。无线信道的互易性为通信双方提供了共享密钥的机制,双方可通过测量无线信道获取密钥。密钥容量概念为无线信道密钥提取提供了理论上限。然而,现实中密钥容量往往受到诸多实际物理条件(如终端移动、信道噪声等)的限制,需要对

其进行定量分析。Wang 等 [178] 研究了均匀散射环境下物理因素对密钥容量的影响, 将其转化为随机变量的 MI 计算问题, 并基于仿真物理环境验证其理论推导的正确性, 仿真实验采用了基于 CE 的 MI 估计算法估计密钥容量。仿真结果表明, 理论推导得到了验证, 能够指导实际应用。

第 6 代 (6G) 通信网络技术的研发需要面对的主要挑战之一就是要达到更高的数据传输率, 以满足更极致的体验、3D 视觉、工业智能等场景需求。传统的通信理论没有考虑传输信息中的语义信息, 而 6G 技术可以利用基于 AI 的语义通信来达到更高的网络传输性能。傅宇舟等 [179] 提出了一种面向 6G 网络的基于语义通信的端到端服务框架, 将语义通信与 AI 的语义分析能力相融合, 利用基于 Transformer 的编解码器来压缩语义信息。其中, 语义编码器的损失函数由基于欧式距离的语义损失函数和基于 CE 的信息量损失函数组成。他们利用图像数据验证了该服务框架, 使用 ImageNet-1K 数据集训练框架, 再使用 VOC2012 数据集进行仿真验证。结果表明, 与传统通信方案相比, 该服务框架在目标检测和图像语义重建上均取得了最优性能, 且取得了与全语义特征传输方案相近的性能, 有望成为 6G 网络的技术内容。

6.50 高性能计算

提高能源效率是高性能计算研究的一个重要目标。通过配置程序的最优能效设置, 如处理器频率等, 可以降低程序执行时的能耗。但决定最优配置是一个费时的过程, 程序一旦修改就需要重新配置。利用机器学习方法通过性能事件来自动决定最优配置是一个新的研究方向, 但需要确定哪些事件是能效相关的以决定最优配置。Gocht-Zech [180] 提出利用特征选择的方法来选择能效相关事件, 他选择了 6 种特征选择方法, 并基于 CE 理论给出了相应的估计方法。实际数据实验表明该基于 copula 的方法能够鉴别出能效相关的性能事件, 从而提高程序执行时的能效, 在增加 7% 运行时的成本下节省了 24% 的能源消耗。

6.51 信息安全

对抗性攻击和防御是信息安全领域的热点问题, 是指攻击者利用对系统和算法的特性的了解发动的攻击以及相应的防御手段。深度神经网络是机器学习领域的一类重要算法, 应用领域十分广泛, 研究其攻击和防御算法对该类人工智能系统的安全具有重要意义。Liu 等 [181] 提出了一个基于 CE 的 MI 估计算法, 称为 CE^2 , 并利用此算法提出了一个神经网络对抗训练算法。该算法充分利用了基于 CE 的 MI 估计对对抗攻击的可靠性, 设计网络训练算法以引导神经网络预测模型最小化对抗样本的攻击。作者首先通过仿真实验证明了 CE^2 相对于传统 MI 估计算法的性能优势, 然后在 CIFAR-10 和 CIFAR-100 数据集上验证了基于 CE^2 的神经网络防御算法在典型深度神经网络对抗性攻击的防御中相对于其他同类经典防御算法的优越性。

物联网 (IoT) 作为一种万物互联的信息技术, 已经广泛地应用到如工业生产、医疗保健、智能家居等社会生活的各个领域, 成为一类重要的信息基础设施。IoT 安全是保障设施正常运行的前提, 因此, IoT 入侵检测作为一个重要的安全问题被广泛研究。然而, 由于数据量所限, 现有的入侵检测方法无法很好地跨域应用。王倩等 [182] 提出了一种新的跨域 IoT 入侵检测方法, 利用增量聚类算法从入侵数据集生成图结构, 再利用图神经网络提出域特征, 然后利用基于 CE 定义的距离将特征进行跨域对齐, 最后利用条件域对抗神经网络进行入侵检测。他们在 4 个公开的 IoT 入侵检测数据集上验证了方法的有效性。其中, 基于 CE 的数据跨域对齐方法能够有效地减小提取特征的域间差异, 从而提高检测分类性能。

6.52 测绘遥感

高光谱遥感是应用广泛的前沿测绘技术, 通过遥感光谱成像, 能够获取不同地物的诊断性光谱信息。由于高光谱图像波段数多, 数据大且存在大量冗余信息, 需要利用特征提取技术对有效波段进行选择, 以表征成像对象体。因此, 高光谱图像波段选择是该领域的重要问题之一, 主要思想是选择一个波段子集, 使得成像评价准则函数达到最大。其中, 基于信息论的准则是波段选择的主要方法之一。Zeng 和 Durrani [183] 提出利用基于 CE 的 MI 选择波段的方法, 并将其应用于美国印第安纳西北的 Indian Pine 处采集的真实高光谱数据, 结果表明 CE 提供了一种鲁棒的 MI 波段选择方法。

6.53 海洋工程

人类对海洋空间的探索是海洋工程建设、海洋资源开发和管理以及海洋军事行动等活动的基础, 海洋底质信息探测是诸多活动的前提, 因而是海洋测绘学研究的重要问题之一。多波束声呐系统是海洋测绘领域的主要调查设备之一, 可以用来通过声学探测获取海底的底质信息并对其进行分类。赵廷 [184] 提出了一整套多波束声呐海底底质分类技术, 在多波束反向散射图像的基础上提取一组空间、频率和尺度特征, 再利用 CE 等相关性工具去除其中的冗余特征, 最后利用筛选后的特征构建底质分类模型。他在比利时 Oostende Harbor 数据集上对提出的特征选择和模型构建方法进行了实验验证, 结果表明, 利用 CE 等工具可以发现特征之间的非线性相关关系, 在此基础上去除冗余特征后, 模型的分类性能得到了显著提升。

6.54 金融工程

量化金融是通过对金融数据的数量关系分析指导金融决策的新兴金融学科。基于金融交易系统产生的大量金融市场交易数据, 利用数学工具分析金融产品之间的数量关系, 可以明晰市场规律和动态, 进而管理金融资产。其中, 分析市

场金融变量之间的相关性是金融工程的重要问题,可以帮助交易员洞察它们之间的动态关系,进而调整投资组合和管理风险。由于金融市场变量具有非线性、非高斯性等特征,使得 MI 成为了理想的相关性度量,而 MI 估计算法则成了量化金融工具箱的重要工具之一。基于 CE 的 MI 估计算法就被量化金融算法库 MLFinLab [185] 和 ArbitrageLab [186] 实现,并得到业界广泛应用。

基于中国股票市场(沪市 A 股指数、深市 A 股指数和沪深 300 指数)真实数据,Wang [187] 研究了利用股票资产之间的相关性关系网络,优化投资组合的方法。方法采用了包括 CE 在内的线性和非线性相关性度量,基于相关性强度构建股票资产间的关系网络,进而构建投资组合。研究中估计了不同 Copula 参数函数族的 CE (MI)。廖轶楠 [188] 研究了投资标的筛选的问题,他基于净资产收益率、净利润三年复合增长率和市盈率三项指标从 A 股 4000 多家上市公司中初步筛选了 10 家 A 股上市公司,再利用 CE 等工具对标的股票的价格数据进行了统计分析,以判断投资组合的抗风险能力。

股票市场的投资者总是希望投资发展良好的上市公司,因此甄别一只股票的好坏对投资者十分重要。ST 股票制度是在我国 A 股市场实施的股票风险警示机制,有助于投资者选择投资组合并规避风险。股票分类是股票分析领域的一类重要问题,对金融市场投资者具有参考价值。朱仲儿 [189] 提出了一种基于机器学习方法的 ST 股票分类方法,采用 Boruta 算法和 CE 方法进行特征选择,再利用 6 种回归模型进行预测,利用 Optuna 框架对模型的超参数寻优。他选取了 tushare 数据库中上交所和深交所的 2076 只股票(含 351 只 ST 股票)自 2016 年以来的数据,含有 139 个股票特征变量,最终利用 Boruta 和 CE 方法筛选了 7 个可解释的变量。模型预测结果表明该方法在筛选特征和 XGBoost 模型组合上获得了最好的预测精度。

分析金融数据需要对其建模数学模型,但金融变量以及其联合分布具有非高斯性,给数据建模带来了挑战。Calsaverini 和 Vicente [190,191] 给出了一种巧妙的 Copula 函数模型选择方法。该方法利用 CE (MI) 的边缘分布无关特性,将 Copula 鉴别问题的目标与边缘函数分开,再利用 CE 的定义,将问题转化为以 MI 为上界的模型选择问题。作者还定义了超量信息 (Informaion Excess) 的概念。作者将建模方法应用于 1990 至 2008 年间标普 500 指数的 150 只股票的每日对数收益率数据,利用超量信息,验证了该方法作用于 T-Copula 函数族时的有效性。

R 藤 Copula 是一种灵活的构建多元 copula 分布的工具,确定藤的结构是建立此类模型的关键步骤。Alanazi [192] 基于 CE 和 MI、CMI 之间的关系,提出了一种 R 藤 copula 的构建方法,基于 MI 建立最小生成树,再计算前一子树每对边上的 CMI,根据 CMI 建立新的子树并决定藤 copula 的层级结构。他将该 R 藤 copula 构建方法应用于股票间相关结构的建模问题,基于德国 DAX 指数 15 种主要股票数据(2005 年 1 月至 2009 年 8 月)构建了资产间关系结构的 R 藤 copula 模型,与传统方法相比,该方法建立的 copula 相关结构模型能

够更好地拟合数据。王念鸽 [193] 基于 CE 与 MI、CMI 之间的关系提出了一个类似的藤 copula 结构选择算法。作者利用该算法分析了中证五大行业指数之间的相关结构,利用 2019 年 3 月 1 日至 2022 年 3 月 1 日之间的数据,构建了基于 Kendall 相关系数的藤 copula 结构和基于 MI 的藤 copula 结构,结果表明,从拟合优度指标看,后者的结果优于前者的结果;从可解释性角度看,后者的结果刻画的五大行业资产之间的依赖关系更合理。

金融危机的发生使金融系统的系统性风险问题受到各国监管部门的关注。我国股票市场放开管制加深了经济金融的一体化程度,造成了各个行业之间的耦合,从而加大了系统性风险的程度,因此需要对跨行业的风险溢出效应加以研究,以期进行防范和化解。熵作为量化不确定性的数学工具,十分适合度量金融风险组合。熊靖宇 [194] 采用 CE 等工具对 2005 年 1 月 5 日至 2020 年 7 月 3 日我国股票市场 11 个行业的日对数收益率数据进行了分析,研究行业个体风险和跨行业风险溢出特征的动态演变过程,特别针对 2008 年金融危机、2013 年钱荒和 2015 年股灾三个时期的风险特征进行研究。研究发现,行业联合 CE 动态变化滞后于累加独立熵发生,说明了行业间联动导致了系统性风险增强;2008 年金融危机的市场内部传染性更强,破坏程度更大;近期 11 个行业内部关联水平较强。

金融脆弱性是由金融部门自身高负债经营带来的内在不稳定性。金融脆弱性度量工具可以使国家及时地对危机进行响应和干预,因此得到了大量的研究。日益成熟的网络分析理论为从金融网络的角度度量金融脆弱性提供了方法工具,但传统的网络构建方法只是基于线性关系度量工具,如皮尔逊相关系数等,不能够反映金融系统中的非线性关系特性。Chen 等 [195] 提出了一种利用 CE 改进的网络曲率 (Network Curvature) 金融脆弱性度量方法,该方法先利用 CE 构建金融网络,再计算网络的四种离散 Ricci 曲率作为市场脆弱性度量。他们将该度量方法应用于 2006 年 4 月至 2022 年 4 月间沪深 300 指数的股票数据,分析金融危机前后的市场脆弱性。结果表明,该度量方法比基于皮尔逊相关的方法更清晰地描述了金融危机后市场的脆弱性,且具有传统风险度量同样的风险度量能力。

信用风险是金融银行业面对的主要基本风险之一,保障金融安全需要有效地管理信用风险。信用评分卡模型是一种对客户进行信用风险评价的模型方法,是管控金融风险的决策工具。该类模型根据客户的信用历史数据为其划分信用等级,来决定其金融权限。传统的建立信用评分卡模型方法依靠专家经验,效率低且生成的模型不够完善。孔祥永等 [196] 提出一种基于 CE 的自动化信用风险模型构建方法,能够显著提高建模效率,可以同时保证模型具有高预测性能和可解释性。作者将该方法在真实信用卡数据上与专家建模进行了对比,实验结果表明方法大大缩短了建模时间,且能够得到媲美专家模型的预测性能和可解释的客户信用特征。

P2P (Peer-to-Peer) 借贷是一种通过互联网进行集资和放贷的金融模式,该

类金融模式的信用风险主要是由借贷人未能履行还款义务造成的，对集资债权人的资金安全构成了巨大风险。因此，如何准确地评估借贷方的信用风险是一个重要问题，通过借贷数据构建个人信用风险模型是一个主要的解决方法。彭翊庭 [197] 提出利用 CE 度量风险变量和个人数据高维特征之间的非线性相关性，用以选择个人信用风险预测模型的输入特征。他利用美国 P2P 借贷平台 Lending Club 的贷款数据展开实证研究，对比了 CE 和皮尔逊相关系数两种常用特征选择方法，发现 CE 选择的非线性特征在 XGBoost 模型上获得了更好的预测结果。

准确地预测金融产品价格可以帮助投资者管理风险并进行投资决策，因而建立相关预测模型是研究者关心的重要问题之一。由于金融产品之间存在内在的市场逻辑，它们的价格也会产生相应的因果联动效应。因此，可以利用这种价格间的因果关系建立比传统方法更准确的价格预测模型。Zhang 等 [198] 提出了一种基于价格间因果关系的迁移学习框架，利用基于 CE 的 TE 方法计算不同金融产品价格之间的因果关系，以选择因变量价格用于预测果变量价格，再在选择的基础上，提出了用于训练深度学习模型的学习算法以得到预测模型。他们将算法分别应用于国际主要的财经指数、能源期货价格和农产品期货价格 2010 年至 2021 年的每日价格数据上，结果发现，利用基于 CE 的 TE 方法发现了同类价格间的因果关系，在此基础上，利用该迁移学习框架得到的模型在三类价格数据上均给出了较同类对比算法更好的预测结果。

流行病疫情对人群健康构成严重威胁，促使社会和个体采取应对措施。这些疫情应对进而会产生巨大的经济社会影响，特别是对金融市场的影响。研究疫情对金融市场的影响是一个重要课题，对市场利益主体具有现实意义。Gurgul 和 Syrek [199] 利用 CE 方法研究了波兰股票市场指数在 2019 新冠疫情期间的的相关性特征，特别研究了 2020 年 3 月 13 日波兰疫情发生当天 WIG 指数和其 14 个板块指数之间的相关性，发现宣布疫情后这种相关性明显增强。作者还利用同样的方法研究了四个国家（法、德、英、美）的股市，利用 CE 计算了各国股市板块收盘价和股市指数之间的相关性，发现了疫情后这种相关性也明显增强 [200]。这一发现与 2008 年金融危机得到的经验是一致的。他们还发现 CE 方法得到的结论与经验相符，而传统皮尔逊相关得到的结论则不符合过去的经验，如后者低估了德国股市疫情后的相关性。作者认为这是因为 CE 可以度量金融市场变量之间的非线性相关关系而不做任何假设，从而验证了 CE 的优越性。

7 总结

统计独立性是统计学和机器学习领域的基础性概念，如何表示和度量统计独立性是该领域的基本问题。Copula 理论提供了统计相关性表示的理论工具，通过将随机变量的边缘函数与表示统计关联性的 Copula 函数相分离，得到了表示任何关联性的数学形式。而 CE 理论则给出了度量统计独立性的概念工具，

度量了 Copula 函数表示中所有的信息量，也就是相关性的强度。CE 是一种具有诸多公理性属性的理想的统计度量工具。

本文综述了 CE 的理论和应用，介绍了 CE 基本概念定义、与 MI 等价性的定理和推论，以及 CE 的性质。介绍了 CE 的非参数估计方法。本文介绍了 CE 研究的最新进展，包括其在统计学十个基本问题（结构学习、关联发现、变量选择、因果发现、系统辨识、时延估计、域自适应、正态性检验、双样本检验和变点检测等）上的理论应用，讨论了理论应用之间的内在联系，探讨了这些应用对应的深层次的相关性和因果性概念之间的联系，并将基于 CE 的（条件）独立性度量框架与基于核函数和距离的相关性度量框架进行了对比，指出了本理论框架在多个方面的理论优越性。通过仿真和实际数据实验评估验证了基于 CE 的 5 种方法相对于各自同类方法的实际优越性。

本文综述了 CE 在理论物理学、天体物理学、空间科学、地球物理学、理论化学、化学信息学、材料学、水文学、气候学、气象学、环境学、生态学、动物形态学、农学、认知神经学、运动神经学、计算神经学、心理学、系统生物学、生物信息学、临床诊断学、老年医学、精神病学、药理学、公共卫生学、经济学、管理学、社会学、教育学、计算语言学、新闻传播学、法学、政治学、军事学、情报学，以及能源工程、食品工程、土木工程、交通运输、制造工程、可靠性工程、石油工程、冶金工程、化学工程、航空航天、兵器工程、车辆工程、电子工程、通信工程、高性能计算、信息安全、测绘遥感、海洋工程和金融工程等学科领域的实际应用。基于 CE 带来的理论和计算上的优势，在这些应用中 CE 被用来分析和度量各种类型数据中的统计关联性或因果性，通过选择变量来建立模型，以及作为评价指标评价模型，均取得了良好的应用效果。CE 作为一种基础性工具，不仅为这些应用提供了基本的理论和方法，也为应用中各种新方法论的派生提供了可能。

A 软件实现

本文所述的 CE 估计算法、TE 估计算法、正态性检验和双样本检验的统计量估计算法和变点检测算法已在 R 和 Python 语言的 `copent` 算法包中实现 [206]，分别在 CRAN 和 PyPI 上共享：

- CRAN <https://cran.r-project.org/package=copent>;
- PyPI <https://pypi.org/project/copent/>。

相关源码见作者的 GitHub: <https://github.com/majianthu/>。

另，基于 CE 理论的 CE/MI/TE 估计等算法的第三方软件实现包括：

- R 语言的 `cylcop` 包 [64,315];

- Python 语言的 MLFinLab 包 [185]、ArbitrageLab 包 [186]、gcmi 包 [71, 316]、pytorch-mighty 包 [317]、HOI 包 [318]、Frites 包 [319]、Tensorpac 包 [320]、driada 包 [321] 和 Polars-ds 包 [322];
- Julia 语言的 CopEnt.jl 包 [323] 和 CausalityTools.jl 包 [324]; 以及
- Matlab 语言的 gcmi 包 [71, 316] 和 FieldTrip 包 [325]。

参考文献

- [1] Karl Pearson. Mathematical contributions to the theory of evolution.—on a form of spurious correlation which may arise when indices are used in the measurement of organs. *Proceedings of The Royal Society of London*, 60(1):489–498, 1896.
- [2] Roger B Nelsen. *An introduction to copulas*. Springer Science & Business Media, 2007.
- [3] Harry Joe. *Dependence modeling with copulas*. CRC press, 2014.
- [4] Abe Sklar. Fonctions de repartition a n dimensions et leurs marges. *Publ. Inst. Statist. Univ. Paris*, 8:229–231, 1959.
- [5] Jian Ma and Zengqi Sun. Mutual information is copula entropy. *Tsinghua Science & Technology*, 16(1):51–54, 2011. See also arXiv preprint arXiv:0808.0845, 2008.
- [6] Thomas M Cover. *Elements of information theory*. John Wiley & Sons, 1999.
- [7] Jian Ma and Zengqi Sun. Dependence structure estimation via copula. *arXiv preprint arXiv:0804.4451*, 2008.
- [8] Jian Ma. Discovering association with copula entropy. *arXiv preprint arXiv:1907.12268*, 2019.
- [9] Jian Ma. Variable selection with copula entropy. *Chinese Journal of Applied Probability and Statistics*, 37(4):405–420, 2021. See also arXiv preprint arXiv:1910.12389, 2019.
- [10] Jian Ma. Estimating transfer entropy via copula entropy. *arXiv preprint arXiv:1910.04375*, 2019.
- [11] Jian Ma. Causal domain adaptation with copula entropy based conditional independence test. *arXiv preprint arXiv:2202.13482*, 2022.

- [12] Jian Ma. Multivariate normality test with copula entropy. *arXiv preprint arXiv:arXiv:2206.05956*, 2022.
- [13] Jian Ma. Identifying Time Lag in Dynamical Systems with Copula Entropy based Transfer Entropy. *arXiv preprint arXiv:2301.06037*, 2023.
- [14] Jian Ma. System identification with copula entropy. *arXiv preprint arXiv:2304.12922*, 2023.
- [15] Jian Ma. Two-sample test with copula entropy. *arXiv preprint arXiv:2307.07247*, 2023.
- [16] Jian Ma. Change point detection with copula entropy based two-sample test. *arXiv preprint arXiv:2403.07892*, 2024.
- [17] Jian Ma. Evaluating independence and conditional independence measures. *arXiv preprint arXiv:2205.07253*, 2022.
- [18] Jian Ma. On thermodynamic interpretation of copula entropy. *arXiv preprint arXiv:2111.14042*, 2021.
- [19] Jian Ma. Photometric redshifts with copula entropy. *arXiv preprint arXiv:2310.16633*, 2023.
- [20] Aderonke Akerele, Babatunde Rabi, Samuel Ogunjo, Daniel Okoh, Anton Kascheyev, Bruno Nava, Olawale Bolaji, Ibiyinka Fuwape, Elijah Oyeyemi, Busola Olugbon, Jacob Akinpelu, and Olumide Ajani. Complexity and nonlinear dependence of ionospheric electron content and Doppler frequency shifts in propagating HF radio signals within equatorial regions. *Atmosphere*, 15(6):654, 2024.
- [21] Yufeng Shan, Jiangfeng Wei, and Beilei Zan. Improving estimates of land-atmosphere coupling through a novel framework of land aridity classification. *Geophysical Research Letters*, 51(2):e2023GL106598, 2024.
- [22] Michel A. Cuendet, Harel Weinstein, and Michael V. LeVine. The allostery landscape: Quantifying thermodynamic couplings in biomolecular systems. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 12(12):5758–5767, December 2016.
- [23] Mario Wieser, Sonali Parbhoo, Aleksander Wieczorek, and Volker Roth. Inverse learning of symmetries. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 33, pages 18004–18015, 2020.

- [24] 田杰. 基于机器学习的耐热型含能材料设计方法研究. 硕士学位论文, 西南科技大学, 2023.
- [25] Song Zhang, Y.C. Lin, Dao-Guang He, Yu-Qiang Jiang, Hui-Jie Zhang, Ning-Fu Zeng, Gui-Cheng Wu, and Majid Naseri. Correlation between plastic deformation mechanism and texture evolution of a near β -Ti alloy deformed in β region. *Intermetallics*, 170:108333, 2024.
- [26] Lu Chen, Vijay P. Singh, and Shenglian Guo. Measure of correlation between river flows using the copula-entropy method. *Journal of Hydrologic Engineering*, 18(12):1591–1606, 2013.
- [27] Lu Chen, Vijay P. Singh, Shenglian Guo, Jianzhong Zhou, and Lei Ye. Copula entropy coupled with artificial neural network for rainfall–runoff simulation. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 28(7):1755–1767, 2014.
- [28] Lu Chen and Vijay P. Singh. Flood forecasting and error simulation using copula entropy method. In Priyanka Sharma and Deepesh Machiwal, editors, *Advances in Streamflow Forecasting*, pages 331–368. Elsevier, 2021.
- [29] Xiao Li, Liping Zhang, Sidong Zeng, Zhenyu Tang, Lina Liu, Qin Zhang, Zhengyang Tang, and Xiaojun Hua. Predicting monthly runoff of the upper Yangtze river based on multiple machine learning models. *Sustainability*, 14(18):11149, 2022.
- [30] Ran Mo, Bin Xu, Ping-An Zhong, Yuanheng Dong, Han Wang, Hao Yue, Jian Zhu, Huili Wang, Guoqing Wang, and Jianyun Zhang. Long-term probabilistic streamflow forecast model with “inputs–structure–parameters” hierarchical optimization framework. *Journal of Hydrology*, page 129736, 2023.
- [31] 陈佳雷, 彭甜, 葛宜达, 王熠炜, 张楚, 孙娜, 王政, 李茜, 钱诗婕, and 李燕妮. 一种基于多要素注意力时空图卷积网络的径流预报方法, 2023. CN117151285A.
- [32] 温云亮, 李艳玲, 黄春艳, and 张泽中. 基于 Copula 熵理论的干旱驱动因子选择. 华北水利水电大学学报 (自然科学版), 40(4):51–56, 2019.
- [33] C.Y. Huang and Y.P. Zhang. Prediction based on copula entropy and general regression neural network. *Applied Ecology and Environmental Research*, 17(6):14415–14424, 2019.

- [34] 黄春艳. 黄河流域的干旱驱动及评估预测研究. 博士学位论文, 西安理工大学, 2021.
- [35] 牛犇. 黄河流域气象-农业-水文干旱的时空传递特征. 硕士学位论文, 西北农林科技大学, 2023.
- [36] Lingling Ni, Dong Wang, Jianfeng Wu, Yuankun Wang, Yuwei Tao, Jianyun Zhang, Jiufu Liu, and Fei Xie. Vine copula selection using mutual information for hydrological dependence modeling. *Environmental Research*, 186:109604, 2020.
- [37] P. Kanthavel, C.K. Saxena, and R.K. Singh. Integrated Drought Index based on Vine Copula Modelling. *International Journal of Climatology*, 2022.
- [38] M. Mohammadi, M. Emadi, and M. Amini. Bivariate dependency analysis using Jeffrey and Hellinger divergence measures based on copula density estimation by improved probit transformation. *Journal of Statistical Sciences*, 15(1):233–254, 2021.
- [39] Ruofei Xing, Zefeng Chen, Jie Hao, Wenbin Liu, Qin Ju, Dawei Zhang, Shiqin Xu, and Huimin Wang. Temporal variation in river ice phenology of the Heilongjiang river in response to climate change. *Journal of Hydrology: Regional Studies*, 54:101868, 2024.
- [40] Pengcheng Xu, Dong Wang, Vijay P. Singh, Yuankun Wang, Jichun Wu, Lachun Wang, Xinqing Zou, Yuanfang Chen, Xi Chen, Jiufu Liu, Ying Zou, and Ruimin He. A two-phase copula entropy-based multiobjective optimization approach to hydrometeorological gauge network design. *Journal of Hydrology*, 555:228–241, 2017.
- [41] 王栋, 徐鹏程, 王远坤, and 吴吉春. 一种基于 Copula 熵的水文站网优化模型的优化方法, 2019. CN106897530B.
- [42] Heshu Li, Dong Wang, Vijay P. Singh, Yuankun Wang, Jianfeng Wu, Jichun Wu, Ruimin He, Ying Zou, Jiufu Liu, and Jianyun Zhang. Developing a dual entropy-transinformation criterion for hydrometric network optimization based on information theory and copulas. *Environmental Research*, 180:108813, 2020.
- [43] Heshu Li, Dong Wang, Vijay P. Singh, Yuankun Wang, Jianfeng Wu, and Jichun Wu. Developing an entropy and copula-based approach for precipitation monitoring network expansion. *Journal of Hydrology*, 598:126366, 2021.

- [44] 徐鹏程, 仇建春, 李帆, 刘赛艳, and 蒋新跃. 基于高维 Copula 熵和克里金的站网优化方法, 2022. CN114595556A.
- [45] 徐鹏程, 李帆, 张昌盛, and 仇建春. 基于 C-Vine Copula 熵多目标优化模型的水文气象站网优化研究. 中国农村水利水电, 2:16–21, 2022.
- [46] 杨惜岁. 多目标准则下流域水文站网的优化与评价. 硕士学位论文, 武汉理工大学, 2019.
- [47] Lu Chen and Shenglian Guo. *Copulas and its application in hydrology and water resources*. Springer, 2019.
- [48] Xu Wang and Yong-Ming Shen. A framework of dependence modeling and evaluation system for compound flood events. *Water Resources Research*, 59(8):e2023WR034718, 2023.
- [49] Longxia Qian, Yong Zhao, Jianhong Yang, Hanlin Li, Hongrui Wang, and ChengZu Bai. A new estimation method for copula parameters for multivariate hydrological frequency analysis with small sample sizes. *Water Resources Management*, 36(4):1141–1157, March 2022.
- [50] 刘磊, 高超, 王志刚, 王晓艳, 章四龙, and 陈娜. 基于非线性相关性和复杂网络的径流相似性分区. 水科学进展, 33(3):442–451, 2022.
- [51] Victor Costa Porto, Francisco de Assis de Souza Filho, Taís Maria Nunes Carvalho, Ticiana Marinho de Carvalho Studart, and Maria Manuela Portela. A GLM copula approach for multisite annual streamflow generation. *Journal of Hydrology*, 598:126226, 2021.
- [52] 黄朝君, 贾建伟, 秦赫, and 王栋. 基于 Copula 熵-随机森林的中长期径流预报研究. 人民长江, 52(11):81–85, 2021.
- [53] 蒋佩东. 基于 Bayesian 模型的长江流域年径流对变化环境响应的空间效应. 硕士学位论文, 武汉大学, 2023.
- [54] Zengchao Hao and Vijay P. Singh. Integrating entropy and copula theories for hydrologic modeling and analysis. *Entropy*, 17(4):2253–2280, 2015.
- [55] Francesca Condino. *La divergenza di Jensen-Shannon nell'algoritmo di clustering dinamico per dati descritti da distribuzioni multivariate*. PhD thesis, Università degli Studi di Napoli Federico II, 2009.
- [56] Jujie Wang, Wenjie Xu, Yue Zhang, and Jian Dong. A novel air quality prediction and early warning system based on combined model of optimal feature extraction and intelligent optimization. *Chaos, Solitons & Fractals*, 158:112098, 2022.

- [57] Xiaoxuan Wu, Chen Zhang, Jun Zhu, and Xin Zhang. Research on PM2.5 concentration prediction based on the CE-AGA-LSTM model. *Applied Sciences*, 12(14):7009, 2022.
- [58] Jieyin Chen. Short-term prediction of PM2.5 concentration based on self-attention mechanism improved temporal convolution network. In *2023 International Seminar on Computer Science and Engineering Technology (SCSET)*, pages 528–534, 2023.
- [59] 陈燕璇, 刘合香, and 倪增华. 基于 Copula 熵因子选取的 PSO-ELM 台风灾情预测模型. *气象研究与应用*, 40(2):7–11, 2019.
- [60] 吴京鹏. 基于图嵌入表示的节点无特征网络链路预测研究. 硕士学位论文, 西北师范大学, 2022.
- [61] 金秀章, 乔鹏, and 史德金. 基于 VMD-Bayes-Lasso 算法带误差补偿的火电厂 NO_x 浓度软测量. *华北电力大学学报 (自然科学版)*, 2023.
- [62] 杨媛. 电站锅炉 NO_x 排放浓度两阶段智能优化研究. 硕士学位论文, 东北电力大学, 2024.
- [63] Jingkai Xue, Chengzhi Xing, Qihua Li, Shanshan Wang, Qihou Hu, Yizhi Zhu, Ting Liu, Chengxin Zhang, and Cheng Liu. Long-term spatiotemporal variations of ammonia in the Yangtze River Delta region of China and its driving factors. *Journal of Environmental Sciences*, 150:202–217, 2025.
- [64] Florian H. Hodel and John R. Fieberg. `cylcop`: An R package for circular-linear copulae with angular symmetry. *bioRxiv*, page 2021.07.14.452253, 2021.
- [65] Francisco Escolano, Edwin R. Hancock, Miguel A. Lozano, and Manuel Curado. The mutual information between graphs. *Pattern Recognition Letters*, 87:12–19, 2017.
- [66] Soumik Purkayastha and Peter X.K. Song. Asymmetric predictability in causal discovery: an information theoretic approach. *arXiv preprint arXiv:2210.14455*, 2022.
- [67] Ziya Zhang, Yi Li, Chen Xinguo, Yanzi Wang, Ben Niu, De Li Liu, Jianqiang He, Bakhtiyor Pulatov, Ishtiaq Hassan, and Qingtao Meng. Impact of climate change and planting date shifts on growth and yields of double cropping rice in southeastern China in future. *Agricultural Systems*, 205:103581, 2023.

- [68] 张子雅. 气候变化对中国水稻物候和产量的影响及播期优化. 硕士学位论文, 西北农林科技大学, 2023.
- [69] 张春磊, 李颜娥, 丁煜, and 罗煦钦. 基于深度学习技术的水稻环境因素产量预测. *电子技术应用*, 50(4):81–86, 2024.
- [70] Robin A. A. Ince, Katarzyna Jaworska, Joachim Gross, Stefano Panzeri, Nicola J. van Rijsbergen, Guillaume A. Rousselet, and Philippe G. Schyns. The deceptively simple N170 reflects network information processing mechanisms involving visual feature coding and transfer across hemispheres. *Cerebral Cortex*, 26(11):4123–4135, 2016.
- [71] Robin A.A. Ince, Bruno L. Giordano, Christoph Kayser, Guillaume A. Rousselet, Joachim Gross, and Philippe G. Schyns. A statistical framework for neuroimaging data analysis based on mutual information estimated via a gaussian copula. *Human Brain Mapping*, 38(3):1541–1573, 2017.
- [72] Stephanie J. Kayser, Robin A.A. Ince, Joachim Gross, and Christoph Kayser. Irregular speech rate dissociates auditory cortical entrainment, evoked responses, and frontal alpha. *The Journal of Neuroscience*, 35(44):14691–14701, 2015.
- [73] Etienne Combrisson, Michele Allegra, Ruggero Basanisi, Robin A.A. Ince, Bruno Giordano, Julien Bastin, and Andrea Brovelli. Group-level inference of information-based measures for the analyses of cognitive brain networks from neurophysiological data. *NeuroImage*, page 119347, 2022.
- [74] 汪方毅, 唐杰庆, 刘倩, 余成新, 李博, and 丁帆. 基于静息态 fMRI 区分健康老年人认知水平的 MVPA 方法研究. *磁共振成像*, 14(6):18–25, 2023.
- [75] Pieter De Clercq, Jonas Vanthornhout, Maaike Vandermosten, and Tom Francart. Beyond linear neural envelope tracking: a mutual information approach. *Journal of Neural Engineering*, 20(2):026007, 2023.
- [76] Paolo Victor Redondo, Raphaël Huser, and Hernando Ombao. Measuring information transfer between nodes in a brain network through spectral transfer entropy. *arXiv preprint arXiv:2303.06384*, 2023.
- [77] NA Pospelov, VP Sotskov, VV Plusnin, OS Rogozhnikova, KA Toropova, OI Ivashkina, and KV Anokhin. Searching for cognitive specializations of neurons using mutual information framework. *Genes & Cells*, 18(4):878–881, 2023.

- [78] 吴亚婷, 余青山, 高云园, 谭同才, and 范影乐. 多尺度肌间耦合网络分析. *生物医学工程学杂志*, 38(4):742–752, 2021.
- [79] Yating Wu, Qingshan She, Hongan Wang, Yuliang Ma, Mingxu Sun, and Tao Shen. R-Vine copula mutual information for intermuscular coupling analysis. In *Proceedings of the 11th International Conference on Computer Engineering and Networks*, pages 526–534, 2022.
- [80] David Ó’ Reilly and Ioannis Delis. A network information theoretic framework to characterise muscle synergies in space and time. *Journal of Neural Engineering*, 19(1):016031, feb 2022.
- [81] Shaojun Zhu, Jinhui Zhao, Yating Wu, and Qingshan She. Intermuscular coupling network analysis of upper limbs based on R-vine copula transfer entropy. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 19(9):9437–9456, 2022.
- [82] 金国美, 余青山, 马玉良, 张建海, and 孙明旭. 基于小波包-copula 互信息的肌间耦合特性. *传感技术学报*, 35(10):1348–1353, 2022.
- [83] Johannes Leugering and Gordon Pipa. A unifying framework of synaptic and intrinsic plasticity in neural populations. *Neural Computation*, 30(4):945–986, 2018.
- [84] Ari Pakman, Amin Nejatbakhsh, Dar Gilboa, Abdullah Makkeh, Luca Mazzucato, Michael Wibral, and Elad Schneidman. Estimating the unique information of continuous variables in recurrent networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021.
- [85] Vlad-Bogdan Coroian, Pedro Mediano, and Tolga Birdal. Scaling up synergy estimators. Technical report, Imperial College London, 2024.
- [86] Liesa Ravijts. Revealing temporal interactions around the heartbeat-evoked potential modulated by emotional perception. Master’s thesis, Ghent Univeristy, 2019.
- [87] Agata Charzyńska and Anna Gambin. Improvement of the k-NN entropy estimator with applications in systems biology. *Entropy*, 18(1):13, 2015.
- [88] Farzaneh Farhangmehr, Daniel M. Tartakovsky, Parastou Sadatmousavi, Mano R. Maurya, and Shankar Subramaniam. An information-theoretic algorithm to data-driven genetic pathway interaction network reconstruction of dynamic systems. In *2013 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine*, pages 214–217, 2013.

- [89] Aleksander Wieczorek and Volker Roth. Causal compression. *arXiv preprint arXiv:1611.00261*, 2016.
- [90] Qiang Wu and Dongxi Li. CRIA: An interactive gene selection algorithm for cancers prediction based on copy number variations. *Frontiers in Plant Science*, 13:839044, 2022.
- [91] 吴强. 基于 Copula 熵的交互式基因选择算法及其在癌症预测中的应用. 硕士学位论文, 太原理工大学, 2022.
- [92] 钟琦. 基于信息度量的基因表达数据特征选择方法研究. 硕士学位论文, 曲阜师范大学, 2024.
- [93] 竺政彤. 基于单细胞测序数据构建基因调控网络的方法研究. 硕士学位论文, 内蒙古农业大学, 2023.
- [94] Radko Mesiar and Ayyub Sheikhi. Nonlinear random forest classification, a copula-based approach. *Applied Sciences*, 11(15):15, 2021.
- [95] Jian Ma. Copula entropy based variable selection for survival analysis. *arXiv preprint arXiv:2209.01561*, 2022.
- [96] 付金露. 基于特征选择的乳腺癌患者预后模型研究. 硕士学位论文, 江西财经大学, 2023.
- [97] Yu Luo, Guangcan Xu, Hongyu Li, Tianju Ma, Zi Ye, and Zhaohui Li. Research on establishing corneal edema after phacoemulsification prediction model based on variable selection with copula entropy. *Journal of Clinical Medicine*, 12(4):1290, 2023.
- [98] S.M. Sunoj and N. Unnikrishnan Nair. Survival copula entropy and dependence in bivariate distributions. *REVSTAT-Statistical Journal*, 2023.
- [99] 潘红宇. 基于影像组学与深度学习的脑肿瘤图像分类研究. 硕士学位论文, 西南大学, 2023.
- [100] 汤宇飞. 基于脉搏波的糖尿病和高血压诊断算法研究. 硕士学位论文, 中国矿业大学, 2023.
- [101] Jian Ma. Predicting MMSE score from finger-tapping measurement. In *Proceedings of 2021 Chinese Intelligent Automation Conference*, pages 294–304, 2022. See also bioRxiv 817338 (2019).
- [102] 李润泽, 姚尧, 冯珂珂, 杨硕, 李佳丽, 程轶峰, 尹绍雅, and 徐桂芝. 重复经颅磁刺激改善帕金森病运动症状的脑功能网络分析. *生物化学与生物物理进展*, 50(1):126–134, 2023.

- [103] Jian Ma. Predicting TUG score from gait characteristics based on video analysis and machine learning. In *Proceedings of 2023 Chinese Intelligent Automation Conference*, pages 1–12, 2023. See also bioXiv 963686 (2020).
- [104] Jian Ma. Associations between finger tapping, gait and fall risk with application to fall risk assessment. *arXiv preprint arXiv:2006.16648*, 2020.
- [105] 张婷婷, 王楠, 周天彤, 王苏弘, and 邹凌. 基于 Couple 熵的抑郁症相干性反馈指标提取. *电子测量技术*, 45(9):160–167, 2022.
- [106] 张婷婷. 基于脑电的抑郁症识别及虚拟现实康复训练研究. 硕士学位论文, 常州大学, 2022.
- [107] 高浩田, 李东喜, 陈泽华, and 赵芊. 基于交互式多特征融合算法的药物靶标预测. *太原理工大学学报*, 55(4):751–758, 2024.
- [108] Qingsong Shan and Qianning Liu. Binary trees for dependence structure. *IEEE Access*, 8:150989–150998, 2020.
- [109] 罗良清, 平卫英, 单青松, and 王佳. 中国贫困治理经验总结: 扶贫政策能够实现有效增收吗? . *管理世界*, 38(2):70–83, 2022.
- [110] Haonan Zhang, Jiapeng Dai, and Yousaf Ali Khan. Poverty improvement policies and household income: Evidence from China. *Heliyon*, page E21442, 2023.
- [111] Leonie Bossemeyer. Machine learning for causal discovery with applications in economics. Master’s thesis, Ludwig-Maximilians-Universität München, 2021.
- [112] 韦颖璐. 基于 pair-copula 熵的相关性度量. 硕士学位论文, 苏州大学, 2021.
- [113] Muye Han and Jinsheng Zhou. Multi-scale characteristics of investor sentiment transmission based on wavelet, transfer entropy and network analysis. *Entropy*, 24(12):1786, 2022.
- [114] Omid M. Ardakani. Information content of inflation expectations: A copula-based model. *Studies in Nonlinear Dynamics & Econometrics*, 2024.
- [115] Wuyue An, Lin Wang, and Dongfeng Zhang. Comprehensive commodity price forecasting framework using text mining methods. *Journal of Forecasting*, 42(7):1865–1888, 2023.

- [116] Yu-Xin Tian and Chuan Zhang. An end-to-end deep learning model for solving data-driven newsvendor problem with accessibility to textual review data. *International Journal of Production Economics*, page 109016, 2023.
- [117] 王琳君. 中国企业海外并购的影响因素和绩效评价研究. 博士学位论文, 中国科学院大学, 2022.
- [118] 柳琼. 基于 Copula 和 MI 理论的相关性度量及其应用研究. 硕士学位论文, 三峡大学, 2018.
- [119] 陈作海, 钱恒, and 高永超. 一种基于知识图谱的城市热线派单方法及系统, 2023. CN115860436A.
- [120] Bowen Zhang, Jinping Lin, Man Luo, Changxian Zeng, Jiajia Feng, Meiqi Zhou, and Fuying Deng. Changes in public sentiment under the background of major emergencies – taking the Shanghai epidemic as an example. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(19):12594, 2022.
- [121] Mario Wieser. *Learning Invariant Representations for Deep Latent Variable Models*. PhD thesis, University of Basel, 2020.
- [122] Stuart William Card. Towards an information theoretic framework for evolutionary learning. Master’s thesis, Syracuse University, 2011.
- [123] 张可, 刘施彤, 郑植, 贾宇明, and 黄乐天. 一种基于动态贝叶斯网络的目标意图识别方法, 2022. CN114997306A.
- [124] 许海云, 王超, 陈亮, 徐硕, 杨冠灿, and 朱礼军. 颠覆性技术的科学-技术-产业互动模式识别与分析. *情报学报*, 42(7):816–831, 2023.
- [125] Xueqian Fu, Hongbin Sun, Qinglai Guo, Zhaoguang Pan, Wen Xiong, and Li Wang. Uncertainty analysis of an integrated energy system based on information theory. *Energy*, 122(122):649–662, 2017.
- [126] 朱正林 and 张冕. 基于 AO 优化 VMD-CE-BiGRU 的光伏发电功率预测. *国外电子测量技术*, 41(10):56–61, 2022.
- [127] 王士涛 and 邹晨鑫. 一种光伏组件状态的预测方法及系统、计算机程序产品, 2024. CN118134033A.
- [128] 崔双双 and 孙单勋. 分工况下风电机组各变量相关性研究. *综合智慧能源*, 44(12):49–55, 2022.

- [129] Qin Yan, Zhiying Lu, Hong Liu, Xingtang He, Xihai Zhang, and Jianlin Guo. Short-term prediction of integrated energy load aggregation using a bi-directional simple recurrent unit network with feature-temporal attention mechanism ensemble learning model. *Applied Energy*, 355:122159, 2024.
- [130] 阚超. 基于深度学习的综合能源系统多元负荷短期预测研究. 硕士学位论文, 贵州大学, 2023.
- [131] 胡程林. 基于深度多任务学习的多节点电力负荷预测研究. 硕士学位论文, 湘潭大学, 2022.
- [132] 董海艳, 赵炳文, 王运韬, 田宇, 傅彦博, 孟德群, and 张铁. 一种含源荷时序相似度约束的源储协同规划配置方法, 2022. CN110766314A.
- [133] Peili Liu, Song Han, Na Rong, and Junqiu Fan. Frequency Stability Prediction of Power Systems Using Vision Transformer and Copula Entropy. *Entropy*, 24(8):1165, 2022.
- [134] 刘沛力. 基于机器学习的低惯性电力系统频率稳定性预测方法研究. 硕士学位论文, 贵州大学, 2023.
- [135] 冯双, 杨浩, 雷家兴, 汤奕, 周吉, 钱俊良, and 郝珊珊. 一种电力系统宽频振荡影响因素和传播路径分析方法, 2022. CN114977222A.
- [136] 冯双, 杨浩, 崔昊, 汤奕, and 雷家兴. 基于 copula 传递熵的设备级和网络级宽频振荡传播路径分析及振荡源定位方法. *电工技术学报*, 2023.
- [137] Wentao Sun, Quanquan Wang, Sixuan Xu, Yi Ge, Feifei Zhao, Zhuyi Peng, and Wanchun Qi. A stability analysis and quantitative evaluation method for hybrid transmission systems. In *2023 4th International Conference on Advanced Electrical and Energy Systems (AEES)*, pages 412–417, 2023.
- [138] 王旭, 王之伟, 陈泉, 张文嘉, 孙文涛, 邹盛, 王荃荃, 宗炫君, 韩杏宁, 沈高峰, 张敏, 孙海森, and 王静怡. 一种交直流混联系统宽频振荡风险的识别方法及装置, 2024. CN117674116A.
- [139] Ting Yang, Yachuang Liu, Hao Li, Yanhou Chen, and Haibo Pen. Cooperative voltage control in distribution networks considering multiple uncertainties in communication. *Sustainable Energy, Grids and Networks*, page 101459, 2024.
- [140] Wei Hu, Qiuting Guo, Wei Wang, Weiheng Wang, and Shuhong Song. Research on user loss contribution calculation of high-loss distribution

- area based on transfer entropy. In *2022 China International Conference on Electricity Distribution (CICED)*, pages 499–502, 2022.
- [141] 秦超 and 潘毓笙. 一种基于时空特征的配电网拓扑辨识方法, 2023. CN117154679A.
- [142] Xiaoping Xiong and Guohua Qing. A hybrid day-ahead electricity price forecasting framework based on time series. *Energy*, page 126099, 2022.
- [143] Jiabei He and Lifeng Wu. Cross-conditions capacity estimation of lithium-ion battery with constrained adversarial domain adaptation. *Energy*, 277:127559, 2023.
- [144] Jian Ma. Root cause analysis on energy efficiency with transfer entropy flow. *arXiv preprint arXiv:2401.05664*, 2024.
- [145] Marvin Lasserre, Régis Lebrun, and Pierre-Henri Wuillemin. Learning Continuous High-Dimensional Models using Mutual Information and Copula Bayesian Networks. In *Thirty-Fifth AAAI Conference on Artificial Intelligence, AAAI 2021*, pages 12139–12146. AAAI Press, 2021.
- [146] Marvin Lasserre. *Apprentissages dans les réseaux bayésiens à base de copules non-paramétriques*. PhD thesis, Sorbonne Université, 2022.
- [147] Zhiwei Li, Peng Wang, Jili Zhang, and Hua Guan. A model-free method for identifying time-delay characteristics of HVAC system based on multivariate transfer entropy. *Building and Environment*, 217:109072, 2022.
- [148] 曹久慧, 卞桂荣, 陈剑, 李宝枝, 顾晓彬, 徐士月, 夏显文, and 张旭辉. 一种基于自注意力机制的变形监测方法, 2023. CN116378120A.
- [149] 黄达. 基于模块链构建的大件货物多式联运方案研究. 博士学位论文, 北京交通大学, 2021.
- [150] 许罗豪, 刘金鑫, 张慧波, and 纪超. 基于熵与回归树的票价影响因素研究. *综合运输*, 45(6):125–130, 2023.
- [151] 王升. 基于多源数据的城市轨道交通系统客流分析与预测. 硕士学位论文, 东南大学, 2022.
- [152] Jiahao Chang and Xiaoyu Song. A railway passenger flow prediction model based on improved Prophet. In *Proceedings of the 2023 4th International Conference on Machine Learning and Computer Application*, page 798–804, 2024.

- [153] Yan-Ning Sun, Yu Chen, Wu-Yin Wang, Hong-Wei Xu, and Wei Qin. Modelling and prediction of injection molding process using copula entropy and multi-output SVR. In *IEEE 17th International Conference on Automation Science and Engineering*, 2021.
- [154] Hongxia Cai and Zhiqiang Rong. Key quality feature identification and quality prediction in complex manufacturing processes. In *2023 15th International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics (IHMSC)*, pages 229–232, 2023.
- [155] 王小巧. 复杂机械产品装配过程质量自适应控制方法及支持系统研究. 博士学位论文, 合肥工业大学, 2015.
- [156] Jie Dong, Keren Cao, and Kaixiang Peng. Hierarchical causal graph-based fault root cause diagnosis and propagation path identification for complex industrial process monitoring. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 72:1–11, 2023.
- [157] 刘鹏阳. 数据驱动的全流程分布式过程监控. 硕士学位论文, 北方工业大学, 2023.
- [158] 王晶, 刘鹏阳, 卢山, 周萌, and 陈晓露. 基于 CE-Louvain 分解和动态递归 SVDD 的分布式过程监测. *控制理论与应用*, 2024.
- [159] Jie Hu, Min Wu, Weihua Cao, and Witold Pedrycz. Dynamic modeling framework based on automatic identification of operating conditions for sintering carbon consumption prediction. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, pages 1–9, 2023.
- [160] Fuqiang Sun, Wendi Zhang, Ning Wang, and Wei Zhang. A copula entropy approach to dependence measurement for multiple degradation processes. *Entropy*, 21(8):724, 2019.
- [161] 程毅. 基于深度学习的砂轮剩余使用寿命预测. 硕士学位论文, 江南大学, 2023.
- [162] Zhifeng Luo and Haojiang Xi. Hybrid model based on copula mutual information and SSA-BP: Analysis of key factors and prediction of stable gas production. *Arabian Journal for Science and Engineering*, June 2024.
- [163] 田庆华, 崔璇, 许志鹏, and 郭学益. 一种真空蒸馏制备高纯金属的优化方法及优化系统, 2024. CN117577229A.

- [164] Min Yin, Jince Li, and Hongguang Li. A CNN approach based on correlation metrics to chemical process fault classifications with limited labeled data. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 101(7):3982–3997, 2022.
- [165] Yingpeng Wei and Li Wang. Copula entropy-based PCA method and application in process monitoring. In *2022 4th International Conference on Intelligent Information Processing (IIP)*, pages 61–64, 2022.
- [166] 魏英鹏. 基于 copula 函数的过程监测方法研究. 硕士学位论文, 上海应用技术大学, 2023.
- [167] Shuangshuang Pan, Li Zhu, and Xirong Xu. Root cause and fault propagation analysis based on causal graph in chemical processes. In *2023 CAA Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS)*, pages 1–6, 2023.
- [168] Xiaotian Bi, Deyang Wu, Daoxiong Xie, Huawei Ye, and Jinsong Zhao. Large-scale chemical process causal discovery from big data with Transformer-based deep learning. *Process Safety and Environmental Protection*, 173:163–177, 2023.
- [169] 武昊. 基于深度学习的化工过程软测量建模方法研究. 博士学位论文, 北京化工大学, 2023.
- [170] Baby Alpettiyil Krishnankutty, Rajesh Ganapathy, and Paduthol Godan Sankaran. Non-parametric estimation of copula based mutual information. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 49(6):1513–1527, 2020.
- [171] Hao Liu, Dechang Pi, Shuyuan Qiu, Xixuan Wang, and Chang Guo. Data-driven identification model for associated fault propagation path. *Measurement*, 188:110628, 2022.
- [172] Zefan Zeng, Guang Jin, Chi Xu, Siya Chen, Zhelong Zeng, and Lu Zhang. Satellite telemetry data anomaly detection using causal network and feature-attention-based LSTM. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 71:1–21, 2022.
- [173] 贾如侠. 涡扇发动机故障预测及剩余寿命分析方法研究. 硕士学位论文, 哈尔滨师范大学, 2023.
- [174] 吴格, 陈旭, 傅之凤, 李忠虎, and 杨程屹. 一种因果关系分析方法及装置, 2020. CN110766314A.

- [175] 陈爱真, 罗汝斌, 董帅, 方娟, 刘朝阳, 白云飞, 董柏顺, 曹达, 王时雨, 李艳, 李梦阳, 侯婷婷, 王珣珉, and 周桃. 一种效能评估指标体系的约简方法和系统, 2024. CN117634946A.
- [176] Sheng Gao, Linchuan Zhang, Lei He, Xiaoyang Deng, Huilin Yin, and Hao Zhang. Attack detection for intelligent vehicles via CAN- bus: A lightweight image network approach. *IEEE Transactions on Vehicular Technology*, pages 1–13, 2023.
- [177] 刘勃. 基于机器学习的封装材料加速预测. 硕士学位论文, 哈尔滨理工大学, 2022.
- [178] Xu Wang, Liang Jin, Kaizhi Huang, Mingliang Li, and Yi Ming. Physical layer secret key capacity using correlated wireless channel samples. In *2016 IEEE Global Communications Conference (GLOBECOM)*, pages 1–6, 2016.
- [179] 傅宇舟, 程文驰, 陈小军, and 李赞. 面向 6G 网络的基于语义通信的端到端服务框架. *移动通信*, 47(6):35–40, 2023.
- [180] Andreas Gocht-Zech. *Ein Framework zur Optimierung der Energieeffizienz von HPC-Anwendungen auf der Basis von Machine-Learning-Methoden*. PhD thesis, Technische Universität Dresden, 2022.
- [181] Lin Liu, Cong Hu, and Xiao-Jun Wu. CE^2 : A copula entropic mutual information estimator for enhancing adversarial robustness. In *Pattern Recognition and Computer Vision*, pages 163–174. Springer, 2024.
- [182] 王倩, 王学航, 刘韩, and 孟伟伦. 一种物联网入侵检测方法, 2024. CN118473739A.
- [183] Xuexing Zeng and T S Durrani. Band selection for hyperspectral images using copulas-based mutual information. In *2009 IEEE/SP 15th Workshop on Statistical Signal Processing*, pages 341–344, 2009.
- [184] 赵廷. 多波束声呐海底底质智能分类关键技术研究. 博士学位论文, 哈尔滨工程大学, 2022.
- [185] Hudson and Thames. Machine learning financial laboratory (MLFinLab). GitHub, 2021. URL: <https://github.com/hudson-and-thames/mlfinlab>.
- [186] Hudson and Thames. The ArbitrageLab package in Python. GitHub, 2024. URL: <https://github.com/hudson-and-thames/arbitragelab>.

- [187] Qiutong Wang. Social networks, asset allocation and portfolio diversification. Master's thesis, University of Waterloo, 2015.
- [188] 廖铁楠. 基于 Copula 熵选股及集成神经网络预测的投资组合管理研究. 硕士学位论文, 南京信息工程大学, 2023.
- [189] 朱仲儿. 多种机器学习方法的股票分类预测. 硕士学位论文, 上海师范大学, 2022.
- [190] Rafael Calsaverini and Renato Vicente. An information-theoretic approach to statistical dependence: Copula information. *EPL (Europhysics Letters)*, 88(6):68003, 2009.
- [191] Rafael S. Calsaverini. *Tópicos em Mecânica Estatística de Sistemas Complexos*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2013.
- [192] Fadiah Amer Alanazi. Truncating Regular Vine Copula Based on Mutual Information: An Efficient Parsimonious Model for High-Dimensional Data. *Mathematical Problems in Engineering*, 2021:4347957, October 2021.
- [193] 王念鸽. 基于互信息的 Vine Copula 模型的高频数据投资组合风险测度研究. 硕士学位论文, 浙江财经大学, 2023.
- [194] 熊靖宇. 基于 Copula 熵的行业风险溢出效应分析. 硕士学位论文, 东北财经大学, 2020.
- [195] Mengyuan Chen, Jilan Liu, Ning Zhang, and Yichao Zheng. Vulnerability analysis method based on network and copula entropy. *Entropy*, 26(3), 2024.
- [196] 孔祥永, 王浩, 袁伟, and 蔡明. 一种自动化特征工程信用风险评价系统及方法, 2021. CN114049198A.
- [197] 彭翊庭. 个人信用风险评估模型比较——基于 Copula 熵的特征选择. 硕士学位论文, 清华大学, 2022.
- [198] Dabin Zhang, Ruibin Lin, Tingting Wei, Liwen Ling, and Junjie Huang. A novel deep transfer learning framework with adversarial domain adaptation: application to financial time-series forecasting. *Neural Computing and Applications*, 2023.
- [199] Henryk Gurgul and Robert Syrek. Mutual information between Polish subindexes –the use of copula entropy around the time of the COVID-19 pandemic. *Statistics in Transition new series*, 25(1):23–41, 2024.

- [200] Henryk Gurgul and Robert Syrek. Mutual information between the main foreign subindices: The application of copula entropy around WHO's declaration date at the time of the COVID-19 pandemic. *International Entrepreneurship Review*, 10(2):7–24, 2024.
- [201] M. Mohammadi, M. Hashempour, and M. Emadi. Semiparametric estimation of mutual information for elliptical copulas. In *The 7th Seminar on Copula Theory and its Applications*, page 44, 2023.
- [202] Joe Suzuki and Tian-Le Yang. Generalization of LiNGAM that allows confounding. *arXiv preprint arXiv:2401.16661*, 2024.
- [203] Shital Saha and Suchandan Kayal. Copula-based extropy measures, properties and dependence in bivariate distributions. *arXiv preprint arXiv:2311.08061*, 2023.
- [204] Mohd. Arshad, Swaroop Georgy Zachariah, and Ashok Kumar Pathak. Multivariate information measures: A copula-based approach. *arXiv preprint arXiv:2408.02028*, 2024.
- [205] 张轶棠. 基于 copula entropy 的变数选取方法与节点选取方法. 硕士学位论文, 国立政治大学, 2024.
- [206] Jian Ma. **copent**: Estimating copula entropy and transfer entropy in R. *arXiv preprint arXiv:2005.14025*, 2021.
- [207] Alexander Kraskov, Harald Stögbauer, and Peter Grassberger. Estimating mutual information. *Physical Review E*, 69(6):66138, 2004.
- [208] C.K. Chow and C.N. Liu. Approximating discrete probability distributions with dependence trees. *IEEE Transactions on Information Theory*, 14(3):462–467, 1968.
- [209] Arthur Asuncion and David Newman. UCI machine learning repository, 2007.
- [210] National Center for Health Statistics (NCHS). National Health and Nutrition Examination Survey, 2013-2014.
- [211] Edward I. George. The variable selection problem. *Journal of the American Statistical Association*, 95(452):1304–1308, 2000.
- [212] Isabelle Guyon and André Elisseeff. An introduction to variable and feature selection. *Journal of Machine Learning Research*, 3:1157–1182, 2003.

- [213] Hirotugu Akaike. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19(6):716–723, 1974.
- [214] Gideon Schwarz. Estimating the dimension of a model. *Annals of Statistics*, 6(2):461–464, 1978.
- [215] Robert Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the LASSO. *Journal of the Royal Statistical Society Series B-Methodological*, 58(1):267–288, 1996.
- [216] Arthur E. Hoerl and Robert W. Kennard. Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems. *Technometrics*, 42(1):80–86, 2000.
- [217] Hui Zou and Trevor Hastie. Regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of The Royal Statistical Society Series B-statistical Methodology*, 67(2):301–320, 2005.
- [218] Arthur Gretton, Kenji Fukumizu, Choon H. Teo, Le Song, Bernhard Schölkopf, and Alex J. Smola. A kernel statistical test of independence. In *Advances in Neural Information Processing Systems 20*, volume 20, pages 585–592, 2007.
- [219] Niklas Pfister, Peter Bühlmann, Bernhard Schölkopf, and Jonas Peters. Kernel-based tests for joint independence. *Journal of The Royal Statistical Society Series B-statistical Methodology*, 80(1):5–31, 2018.
- [220] Gábor J. Székely, Maria L. Rizzo, and Nail K. Bakirov. Measuring and testing dependence by correlation of distances. *Annals of Statistics*, 35(6):2769–2794, 2007.
- [221] Gábor J. Székely and Maria L. Rizzo. Brownian distance covariance. *The Annals of Applied Statistics*, 3(4):1236–1265, 2009.
- [222] Hui Zou. The adaptive LASSO and its oracle properties. *Journal of the American Statistical Association*, 101(476):1418–1429, 2006.
- [223] Ruth Heller, Yair Heller, Shachar Kaufman, Barak Brill, and Malka Gorfine. Consistent distribution-free K-sample and independence tests for univariate random variables. *Journal of Machine Learning Research*, 17(1):978–1031, 2016.
- [224] Wassily Hoeffding. A non-parametric test of independence. *Annals of Mathematical Statistics*, 19(4):546–557, 1948.

- [225] Wicher Bergsma and Angelos Dassios. A consistent test of independence based on a sign covariance related to Kendall's tau. *Bernoulli*, 20(2):1006–1028, 2014.
- [226] Wenliang Pan, Xueqin Wang, Heping Zhang, Hongtu Zhu, and Jin Zhu. Ball covariance: A generic measure of dependence in banach space. *Journal of the American Statistical Association*, 115(529):307–317, 2020.
- [227] Norbert Wiener. The theory of prediction. modern mathematics for engineers. *New York*, 165, 1956.
- [228] Clive WJ Granger. Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods. *Econometrica: Journal of the Econometric Society*, pages 424–438, 1969.
- [229] Clive WJ Granger. Testing for causality: a personal viewpoint. *Journal of Economic Dynamics and control*, 2:329–352, 1980.
- [230] Thomas Schreiber. Measuring information transfer. *Physical Review Letters*, 85(2):461–464, 2000.
- [231] Xuan Liang, Tao Zou, Bin Guo, Shuo Li, Haozhe Zhang, Shuyi Zhang, Hui Huang, and Song Xi Chen. Assessing Beijing's PM2.5 pollution: severity, weather impact, APEC and winter heating. *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 471(2182):20150257, 2015.
- [232] Kun Zhang, Jonas Peters, Dominik Janzing, and Bernhard Schölkopf. Kernel-based conditional independence test and application in causal discovery. In *UAI'11 Proceedings of the Twenty-Seventh Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, pages 804–813, 2011.
- [233] Xueqin Wang, Wenliang Pan, Wenhao Hu, Yuan Tian, and Heping Zhang. Conditional distance correlation. *Journal of the American Statistical Association*, 110(512):1726–1734, 2015.
- [234] Björn Böttcher, Martin Keller-Ressel, and René L. Schilling. Distance multivariate: New dependence measures for random vectors. *The Annals of Statistics*, 47(5):2757 – 2789, 2019.
- [235] Gábor J. Székely and Maria L. Rizzo. A new test for multivariate normality. *Journal of Multivariate Analysis*, 93(1):58–80, 2005.

- [236] Jérémie Kellner and Alain Celisse. A one-sample test for normality with kernel methods. *Bernoulli*, 25(3):1816 – 1837, 2019.
- [237] Gábor J. Székely and Maria L. Rizzo. Testing for equal distributions in high dimension. *InterStat*, (5), 2004.
- [238] Arthur Gretton, Karsten M. Borgwardt, Malte J. Rasch, Bernhard Schölkopf, and Alexander Smola. A kernel two-sample test. *Journal of Machine Learning Research*, 13(25):723–773, 2012.
- [239] Zaïd Harchaoui, Eric Moulines, and Francis Bach. Kernel change-point analysis. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 21, 2008.
- [240] Alfréd Rényi. On measures of dependence. *Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungarica*, 10:441–451, 1959.
- [241] B. Schweizer and E. F. Wolff. On Nonparametric Measures of Dependence for Random Variables. *The Annals of Statistics*, 9(4):879 – 885, 1981.
- [242] M. G. Kendall. A new measure of rank correlation. *Biometrika*, 30(1/2):81–93, 1938.
- [243] Wolfgang Trutschnig. On a strong metric on the space of copulas and its induced dependence measure. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 384(2):690–705, 2011.
- [244] Kai Zhang. BET on independence. *Journal of the American Statistical Association*, 114(528):1620–1637, 2019.
- [245] C Genest, J G Nešlehová, B Rémillard, and O A Murphy. Testing for independence in arbitrary distributions. *Biometrika*, 106(1):47–68, 01 2019.
- [246] Arturo Erdely. A subcopula based dependence measure. *Kybernetika*, 53(2):231–243, 2017.
- [247] Xiaofeng Shao and Jingsi Zhang. Martingale difference correlation and its use in high-dimensional variable screening. *Journal of the American Statistical Association*, 109(507):1302–1318, 2014.
- [248] Sourav Chatterjee. A new coefficient of correlation. *Journal of the American Statistical Association*, 116(536):2009–2022, 2021.
- [249] Fred Viole and David N. Nawrocki. Deriving nonlinear correlation coefficients from partial moments. *SSRN*, 2012.

- [250] A. P. Dawid. Conditional independence in statistical theory. *Journal of the Royal Statistical Society Series B-Methodological*, 41(1):1–15, 1979.
- [251] Eric V. Strobl, Kun Zhang, and Shyam Visweswaran. Approximate kernel-based conditional independence tests for fast non-parametric causal discovery. *Journal of Causal Inference*, 7(1):20180017, 2019.
- [252] Lasse Petersen and Niels Richard Hansen. Testing conditional independence via quantile regression based partial copulas. *Journal of Machine Learning Research*, 22(70):1–47, 2021.
- [253] Trevor Park, Xiaofeng Shao, and Shun Yao. Partial martingale difference correlation. *Electronic Journal of Statistics*, 9(1):1492 – 1517, 2015.
- [254] Mona Azadkia and Sourav Chatterjee. A simple measure of conditional dependence. *The Annals of Statistics*, 49(6):3070 – 3102, 2021.
- [255] Rajen D. Shah and Jonas Peters. The hardness of conditional independence testing and the generalised covariance measure. *The Annals of Statistics*, 48(3):1514 – 1538, 2020.
- [256] Cyrill Scheidegger, Julia Hörrmann, and Peter Bühlmann. The weighted generalised covariance measure. *arXiv preprint arXiv:2111.04361*, 2021.
- [257] Zhen Huang, Nabarun Deb, and Bodhisattva Sen. Kernel partial correlation coefficient – a measure of conditional dependence. *arXiv preprint arXiv:2012.14804*, 2020.
- [258] Jakob Runge. Conditional independence testing based on a nearest-neighbor estimator of conditional mutual information. In *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pages 938–947, 2017.
- [259] Octavio César Mesner and Cosma Rohilla Shalizi. Conditional mutual information estimation for mixed, discrete and continuous data. *IEEE Transaction on Information Theory*, 67(1):464–484, jan 2021.
- [260] Krzysztof Chalupka, Pietro Perona, and Frederick Eberhardt. Fast conditional independence test for vector variables with large sample sizes. *arXiv preprint arXiv:1804.02747*, 2018.
- [261] Rajat Sen, Ananda Theertha Suresh, Karthikeyan Shanmugam, Alexandros G Dimakis, and Sanjay Shakkottai. Model-powered conditional independence test. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 30, 2017.

- [262] Samuel Burkart and Franz J Király. Predictive independence testing, predictive conditional independence testing, and predictive graphical modelling. *arXiv preprint arXiv:1711.05869*, 2017.
- [263] Bruno Ebner and Norbert Henze. Tests for multivariate normality—a critical review with emphasis on weighted L^2 -statistics. *TEST*, 29(4):845–892, December 2020.
- [264] Selcuk Korkmaz, Dincer Goksuluk, and Gokmen Zararsiz. MVN: An R Package for Assessing Multivariate Normality. *The R Journal*, 6(2):151–162, 2014.
- [265] Natalya Pya, Vassily Voinov, Rashid Makarov, and Yevgeniy Voinov. **mvnTest**: Goodness of Fit Tests for Multivariate Normality. CRAN, 2016. R package version 1.1-0, URL: <https://cran.r-project.org/package=mvnTest>.
- [266] J Patrick Royston. An extension of Shapiro and Wilk’s W test for normality to large samples. *Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)*, 31(2):115–124, 1982.
- [267] Myles Hollander and Douglas A. Wolfe. *Nonparametric Statistical Methods*. New York: John Wiley & Sons, 1973.
- [268] Wenliang Pan, Yuan Tian, Xueqin Wang, and Heping Zhang. Ball Divergence: Nonparametric two sample test. *The Annals of Statistics*, 46(3):1109 – 1137, 2018.
- [269] Simon Hediger, Loris Michel, and Jeffrey Näf. On the use of random forest for two-sample testing. *Computational Statistics & Data Analysis*, 170:107435, 2022.
- [270] Connor Dowd. A new ECDF two-sample test statistic. *arXiv preprint arXiv:2007.01360*, 2020.
- [271] Sinda Ammous, Olivier Bouaziz, Anatole Dedecker, Jérôme Dedecker, Jonathan El Methni, Mohamed Mellouk, and Florence Muri. The **robustTest** package: two-sample tests revisited. *arXiv preprint arXiv:2211.08784*, 2024.
- [272] Robert Drake and Apratim Guha. A mutual information-based k-sample test for discrete distributions. *Journal of Applied Statistics*, 41(9):2011–2027, 2014.

- [273] Apratim Guha and Tom Chothia. A two sample test based on mutual information. *Calcutta Statistical Association Bulletin*, 66(1-2):39–54, 2014.
- [274] Alexandros Karatzoglou, Alexandros Smola, Kurt Hornik, and Achim Zeileis. `kernlab` - an S4 package for kernel methods in R. *Journal of Statistical Software*, 11(9):1–20, 2004.
- [275] L. Baringhaus and C. Franz. On a new multivariate two-sample test. *Journal of Multivariate Analysis*, 88(1):190–206, 2004.
- [276] Marta Cousido-Rocha and Jacobo de Uña-Álvarez. `TwoSampleTest.HD`: An R package for the two-sample problem with high-dimensional data. *The R Journal*, 15:79–92, 2023.
- [277] Connor Puritz, Elan Ness-Cohn, and Rosemary Braun. `fasano.franceschini.test`: An implementation of a multivariate KS test in R. *The R Journal*, 15:159–171, 2023.
- [278] J. A. Peacock. Two-dimensional goodness-of-fit testing in astronomy. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 202(3):615–627, 03 1983.
- [279] Susan Wei, Chihoon Lee, Lindsay Wichers, and J. S. Marron. Direction-projection-permutation for high-dimensional hypothesis tests. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 25(2):549–569, 2016.
- [280] Miles Lopes, Laurent Jacob, and Martin J Wainwright. A more powerful two-sample test in high dimensions using random projection. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 24, 2011.
- [281] Regina Y. Liu and Kesar Singh. A quality index based on data depth and multivariate rank tests. *Journal of the American Statistical Association*, 88(421):252–260, 1993.
- [282] A. N. Pettitt. A two-sample Anderson-Darling rank statistic. *Biometrika*, 63(1):161–168, 04 1976.
- [283] William H. Kruskal. A nonparametric test for the several sample problem. *The Annals of Mathematical Statistics*, 23(4):525–540, 1952.
- [284] Karin Neubert and Edgar Brunner. A studentized permutation test for the non-parametric Behrens–Fisher problem. *Computational Statistics & Data Analysis*, 51(10):5192–5204, 2007.

- [285] Samaneh Aminikhanghahi and Diane J. Cook. A survey of methods for time series change point detection. *Knowledge and Information Systems*, 51(2):339–367, May 2017.
- [286] Jaxk Reeves, Jien Chen, Xiaolan L. Wang, Robert Lund, and Qi Qi Lu. A review and comparison of changepoint detection techniques for climate data. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 46(6):900 – 915, 2007.
- [287] Charles Truong, Laurent Oudre, and Nicolas Vayatis. Selective review of offline change point detection methods. *Signal Processing*, 167:107299, 2020.
- [288] Rebecca Killick and Idris A. Eckley. **changepoint**: An R package for changepoint analysis. *Journal of Statistical Software*, 58(3):1–19, 2014.
- [289] Nicholas A. James and David S. Matteson. **ecp**: An R package for non-parametric multiple change point analysis of multivariate data. *Journal of Statistical Software*, 62(7):1–25, 2015.
- [290] Xinyuan Fan and Weichi Wu. Random interval distillation for detecting multiple changes in general dependent data. *arXiv preprint arXiv:2403.00600*, 2024.
- [291] Euan T. McGonigle and Haeran Cho. Nonparametric data segmentation in multivariate time series via joint characteristic functions. *arXiv preprint arXiv:arXiv:2305.07581*, 2023.
- [292] Gordon J. Ross. Nonparametric detection of multiple location-scale change points via wild binary segmentation. *arXiv preprint arXiv:2107.01742*, 2021.
- [293] Michael Messer, Stefan Albert, and Gaby Schneider. The multiple filter test for change point detection in time series. *Metrika*, 81(6):589–607, August 2018.
- [294] Michael Messer. Bivariate change point detection: Joint detection of changes in expectation and variance. *Scandinavian Journal of Statistics*, 49(2):886–916, 2022.
- [295] Tengyao Wang and Richard J. Samworth. High Dimensional Change Point Estimation via Sparse Projection. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 80(1):57–83, 08 2017.

- [296] Haeran Cho and Piotr Fryzlewicz. Multiple-change-point detection for high dimensional time series via sparsified binary segmentation. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Statistical Methodology)*, 77(2):475–507, 2015.
- [297] R. Killick, P. Fearnhead, and I. A. Eckley. Optimal detection of change-points with a linear computational cost. *Journal of the American Statistical Association*, 107(500):1590–1598, 2012.
- [298] Thomas Grundy, Rebecca Killick, and Gueorgui Mihaylov. High-dimensional changepoint detection via a geometrically inspired mapping. *Statistics and Computing*, 30(4):1155–1166, July 2020.
- [299] Alexander Meier, Claudia Kirch, and Haeran Cho. **mosum**: A package for moving sums in change-point analysis. *Journal of Statistical Software*, 97(8):1–42, 2021.
- [300] Shubo Sun, Zifeng Zhao, Feiyu Jiang, and Xiaofeng Shao. **SNSeg**: An R package for time series segmentation via self-normalization. *arXiv preprint arXiv:2404.07451*, 2024.
- [301] Jie Ding, Yu Xiang, Lu Shen, and Vahid Tarokh. Multiple change point analysis: Fast implementation and strong consistency. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 65(17):4495–4510, 2017.
- [302] Andreas Anastasiou and Piotr Fryzlewicz. Detecting multiple generalized change-points by isolating single ones. *Metrika*, 85(2):141–174, February 2022.
- [303] Piotr Fryzlewicz. Wild binary segmentation for multiple change-point detection. *The Annals of Statistics*, 42(6):2243 – 2281, 2014.
- [304] Andreas Anastasiou, Yining Chen, Haeran Cho, and Piotr Fryzlewicz. **breakfast**: Methods for fast multiple change-point/break-point detection and estimation. CRAN, 2024. URL: <https://CRAN.R-project.org/package=breakfast>.
- [305] Tijana Levajković and Michael Messer. Multiscale change point detection via gradual bandwidth adjustment in moving sum processes. *Electronic Journal of Statistics*, 17(1):70 – 101, 2023.
- [306] Jiaqi Li, Likai Chen, Weining Wang, and Wei Biao Wu. Inference for change points in high-dimensional time series via a Two-Way MOSUM. *The Annals of Statistics*, 52(2):602 – 627, 2024.

- [307] Vincent Runge, Toby Dylan Hocking, Gaetano Romano, Fatemeh Afghah, Paul Fearnhead, and Guillem Rigaill. `gfpop`: An R package for univariate graph-constrained change-point detection. *Journal of Statistical Software*, 106(6):1–39, 2023.
- [308] Per August Jarval Moen, Ingrid Kristine Glad, and Martin Tveten. Efficient sparsity adaptive changepoint estimation. *arXiv preprint arXiv:2306.04702*, 2023.
- [309] Emmanuel Pilliat, Alexandra Carpentier, and Nicolas Verzelen. Optimal multiple change-point detection for high-dimensional data. *Electronic Journal of Statistics*, 17(1):1240 – 1315, 2023.
- [310] Reza Drikvandi and Reza Modarres. A distribution-free method for change point detection in non-sparse high dimensional data. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, pages 1–30, 2024.
- [311] Jun Li, Minya Xu, Ping-Shou Zhong, and Lingjun Li. Change point detection in the mean of high-dimensional time series data under dependence. *arXiv preprint arXiv:1903.07006*, 2019.
- [312] Sean Ryan and Rebecca Killick. Detecting changes in covariance via random matrix theory. *Technometrics*, 65(4):480–491, 2023.
- [313] Raghunathan Ramakrishnan, Pavlo O. Dral, Matthias Rupp, and O. Anatole von Lilienfeld. Quantum chemistry structures and properties of 134 kilo molecules. *Scientific Data*, 1(1):140022–140022, 2014.
- [314] Beata Strack, Jonathan P. DeShazo, Chris Gennings, Juan L. Olmo, Sebastian Ventura, Krzysztof J. Cios, and John N. Clore. Impact of HbA1c measurement on hospital readmission rates: Analysis of 70,000 clinical database patient records. *BioMed Research International*, 2014:781670, 2014.
- [315] Florian Hodel. `cylcop`: Circular-linear copulas with angular symmetry for movement data. CRAN, 2022. R package version 0.2.0, URL: <https://cran.r-project.org/package=cylcop>.
- [316] Robin A.A. Ince, Jan-Mathijs Schoffelen, Lukas Snoek, and Danylo Ulianych. `gcmi` : Gaussian-Copula Mutual Information. GitHub, 2020. URL: <https://github.com/robinince/gcmi>.
- [317] Danylo Ulianych. The `pytorch-mighty` package in Python. GitHub, 2023. URL: <https://github.com/dizcza/pytorch-mighty>.

- [318] BraiNets. The H0I package in Python. Github, 2024. URL: <https://brainets.github.io/hoi/>.
- [319] Etienne Combrisson, Ruggero Basanisi, Vinicius Lima Cordeiro, Robin A.a Ince, and Andrea Brovelli. **Frites**: A Python package for functional connectivity analysis and group-level statistics of neurophysiological data. *Journal of Open Source Software*, 7(79):3842, 2022.
- [320] Etienne Combrisson, Timothy Nest, Andrea Brovelli, Robin A. A. Ince, Juan L. P. Soto, Aymeric Guillot, and Karim Jerbi. **Tensorpac**: An open-source Python toolbox for tensor-based phase-amplitude coupling measurement in electrophysiological brain signals. *PLoS computational biology*, 16(10):e1008302, October 2020.
- [321] Institute for Advanced Brain Studies. **driada**: Dimensionality reduction for integrated activity data. Github, 2024. URL: <https://github.com/iabs-neuro/driada>.
- [322] Tianren Qin. **Polars-ds**: Polars extension for general data science use. GitHub, 2024. URL: https://github.com/abstractqqq/polars_ds_extension.
- [323] Kai Xu. The CopEnt.jl package in Julia. Github, 2021. URL: <https://github.com/xukai92/CopEnt.jl>.
- [324] Kristian Agasøster Haaga. The CausalityTools.jl package in Julia. Github, 2023. URL: <https://github.com/JuliaDynamics/CausalityTools.jl>.
- [325] Robert Oostenveld, Pascal Fries, Eric Maris, and Jan-Mathijs Schoffelen. **FieldTrip**: Open source software for advanced analysis of MEG, EEG, and invasive electrophysiological data. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2011(1):156869, 2011.