YODO 算法：用于贝叶斯网络敏感性分析的高效计算框架

Rafael Ballester-Ripoll rafael.ballester@ie.edu

Manuele Leonelli manuele.leonelli@ie.edu

西班牙马德里 *IE*大学科学与技术学院

arXiv:2302.00364v1 [stat.ME] 1 Feb 2023

摘要

敏感性分析用于衡量贝叶斯网络的参数对网络定义的关注量的影响，例如某个变量取特定值的概率。人们定义了多种敏感性度量来量化这种影响，最常见的是关注量相对于网络条件概率的偏导数的某种函数。然而，在包含数千个参数的大型网络中计算这些度量，计算成本可能非常高。我们提出一种结合自动微分与精确推断的算法，只需一次遍历即可高效计算敏感性度量。该算法首先对整个网络进行一次边缘化，例如使用变量消除，然后反向传播这一操作，以获得相对于所有输入参数的梯度。我们的方法可用于单向和多向敏感性分析，以及可容许区域的推导。仿真研究通过将算法扩展至包含多达 100’000 个参数的超大规模网络，展示了其效率，并探讨了通用多向分析的可行性。此外，我们还展示了相关程序在两个中型贝叶斯网络上的应用：第一个网络用于对一场人道主义危机的国家风险进行建模，第二个网络用于研究技术使用与 COVID-19疫情期间被迫社会隔离所产生的心理影响之间的关系。我们使用广受欢迎的机器学习库 PyTorch 实现了这些方法，相关程序可免费获取。

关键词：自动微分；贝叶斯网络；COVID-19；PyTorch；敏感性分析。

1. 引言

概率图模型，尤其是贝叶斯网络（贝叶斯网络），是一类广泛用于多个领域复杂运行系统风险评估的模型。这类模型之所以成功，主要在于它们提供了一种高效且直观的框架，可以用简单的图表示一组关注变量的联合概率。如今，使用这类模型评估工程、医疗和生态系统等的可靠性，已越来越普遍。敏感性分析是任何面向现实应用的分析中的关键步骤，可用于评估各种风险因素的重要性，并评价所研究系统的总体安全性（近期案例参见Goerlandt和Islam，2021年；Makaba等人，2021年；Zio等人，2022年）。

正如 Rohmer（2020年）所指出的，贝叶斯网络中的敏感性分析通常是局部的，也就是说，它衡量少量参数变化对关注的输出概率的影响，同时保持其他参数不变。对于单个参数变化，敏感性分析通常称为单向分析；如果变化的参数不止一个，则称为多向分析。尽管近期人们越来越关注为贝叶斯网络提出全局 敏感度方法，以衡量不同因素如何共同影响模型输出的某个函数（例如参见 Ballester-Ripoll和Leonelli，2022a；Li和Mahadevan，2018），本文仍然聚焦于局部敏感度方法。

贝叶斯网络中的局部敏感性分析可分为两个主要步骤。首先，对模型中的某些参数进行变化，并考察这些变化对关注的输出概率的影响。为此，使用一个简单的数学函数（通常称为敏感性函数）将关注的输出概率表示为贝叶斯网络参数的函数（Castillo 等人，1997年；Coup´e 和 van der Gaag，2002年）。此外，还可以计算此类函数的一些特定性质，例如敏感性值 或顶点接近度，以概述关注概率对相关参数变化的敏感程度（van der Gaag 等人，2007年）。其次，在确定参数变化后，通过衡量贝叶斯网络所依据的原始分布与变化后分布之间的距离或散度，总结这些变化的影响；最常用的度量是Chan-Darwiche距离（Chan and Darwiche，2005年）或广为人知的Kullback-Leibler散度。

正如 Kwisthout 和 van der Gaag（2008年）所展示的，推导敏感性函数及其相关性质在计算上都非常耗费资源。在 Ballester-Ripoll 和 Leonelli（2022b）中，我们提出了一种新颖且计算效率极高的方法，用于在单向敏感度分析中一次性计算所有感兴趣的敏感性度量。该方法利用反向传播，并且得益于自动微分，易于计算。现在，我们还展示了如何将该算法用于更通用的多向敏感度分析，以及如何推导可容许区域（van der Gaag 和 Renooij，2001年）。仿真研究表明，该方法能够在几秒钟内处理大规模网络，从而展现出其效率，并说明了多向分析在何种情况下具有计算可行性。来自真实世界数据集的两个实际应用进一步展示了敏感性度量能够提供的洞见，以及所实现程序的效率。

我们已开源一个使用热门机器学习库 PyTorch[1]，实现的 Python 版本，为近期推动敏感性分析的工作作出贡献（Douglas-Smithet al.,2020年）。

1. 可访问 https://github.com/rballester/yodo。

2. 贝叶斯网络与敏感性分析

贝叶斯网络是一种概率图模型，它使用有向无环图对随机向量的概率质量函数进行因子分解（Darwiche，2009b年；Pearl，1988）。更形式化地说，设 $[p] = \{1, \ldots, p\}$ 和 $\boldsymbol{Y} = (Y_i)_{i \in [p]}$ 为感兴趣的随机向量，其样本空间为 $\mathbb{Y} = \times_{i \in [p]} \mathbb{Y}_i$。贝叶斯网络将 $P(\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y})$ 定义为 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{Y}$ 时的概率质量函数，并将其表示为若干更简单的条件概率质量函数之积，如下所示：

$$P(\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{y}) = \prod_{i \in [p]} P(Y_i = y_i \mid \boldsymbol{Y}_{\Pi_i} = \boldsymbol{y}_{\Pi_i}), \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{Y}_{\Pi_i}$ 是与该贝叶斯网络相关的有向无环图中的 Y_i 的父节点。

因此，对于 $\boldsymbol{Y}$ 的概率质量函数，若要定义它就需要定义 $\#\mathbb{Y} - 1$ 个概率，而改用一维条件概率质量函数来表示，则可简化这一过程。这些函数的系数在下文中称为模型的参数 $\boldsymbol{\theta}$。有向无环图的结构既可以由专家指定，也可以通过结构学习算法从数据中学习得到；相应的参数 $\boldsymbol{\theta}$ 既可以由专家指定，也可以通过频率学派或贝叶斯方法学习得到。无论采用何种方法，我们都假设这些参数 $\boldsymbol{\theta}$ 已选定一个值，并将其称为原始值，记为 $\boldsymbol{\theta}^0$。

与贝叶斯网络相关的有向无环图直观地概述了感兴趣变量之间的关系。此外，它还提供了一个框架，可通过所谓的 d-分离准则（例如参见 Pearl，1988）判断变量的特定子集是否满足一般的条件独立性。此外，有向无环图还为概率和证据的高效传播提供了框架，可借助利用底层有向无环图结构的算法实现。

2.1 单向敏感性分析

在实际应用中，全面评估所选参数值 $\boldsymbol{\theta}^0$ 对模型输出的影响至关重要。在贝叶斯网络的背景下，这项研究通常被称为 敏感性分析，并且可以像 Coup´e 等人（2000年）所展示的那样，在模型构建过程中进一步加以利用。设 Y_O 为感兴趣的输出变量，$\boldsymbol{Y}_E$ 为证据变量，即可能被观测到的变量。研究的重点是考察当参数 θ_i 发生变化时，$P(Y_O = y_O \mid \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$ 如何变化。具体而言，将 $P(Y_O = y_O \mid \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$ 视为 θ_i 的函数，称为敏感性函数，记作 $f(\theta_i)$。

2.2 比例协变

请注意，当输入 θ_i 从其原始值 θ_i^0 发生变化时，同一条件概率质量函数中的参数需要协同变化，以满足概率的和为一条件。当变量为二元变量时，这一点会自动实现，因为一个参数必定等于另一个参数减去一。然而，对于取值超过两个的变量，这种协同变化

可以通过多种方式实现（Renooij，2014）。因此，以下假设：每当一个参数从其原始值 θ_i^0 变为新值 θ_i时，同一条件概率质量函数中的每个参数 θ_j 都会从其原始值 θ_j^0开始按比例协同变化（Laskey，1995）：

$$\theta_j(\theta_i) = \frac{1-\theta_i}{1-\theta_i^0}\theta_j^0. \tag{2}$$

比例协变已得到广泛研究，其选择受到众多理论性质的支持（Chan and Darwiche，2005年；Leonelli 等人，2017年；Leonelliand Riccomagno，2022年；Renooij，2014年）。

在比例协变的假设下，Castillo 等人（1997年）和 Coup´e 与 van der Gaag（2002年）证明，敏感性函数是两个线性函数的比值：

$$f(\theta_i) = \frac{c_0 + c_i\theta_i}{d_0 + d_i\theta_i}, \tag{3}$$

其中 c_0，c_i，d_0，$d_i \in \mathbb{R}_{+\circ}$ van der Gaag 等人（2007年）注意到，上述表达式与矩形双曲线的一段相吻合，一般可写为

$$f(\theta_i) = \frac{r}{\theta_i - s} + t, \tag{4}$$

其中

$$s = -\frac{d_0}{d_i},\ \ t = \frac{c_i}{d_i},\ \ r = \frac{c_0}{d_i} + st. \tag{5}$$

2.2.1 Sensitivity values

敏感性值 描述参数原始值发生无穷小变化对关注概率的影响，定义为敏感性函数在参数原始值处的一阶导数的绝对值，即 $|f'(\theta_i^0)|$。只需对敏感性函数求导即可得到：

$$|f'(\theta_i^0)| = \frac{|c_i d_0 - c_0 d_i|}{(d_i\theta_i^0 + d_0)^2}. \tag{6}$$

敏感性值越高，输出概率对参数原始值的微小变化就越敏感。一般来说，敏感性值大于 1 的参数可能需要进一步调查。

请注意，当 $\boldsymbol{Y}_E$ 为空时，也就是说，关注的输出概率是边际概率，敏感性函数关于 θ_i 呈线性。无论原始θ_i^0为何，敏感性值都相同。因此，在这种情况下，梯度的绝对值足以量化参数对关注输出概率的影响。

2.2.2 Vertex proximity

van der Gaag 等人（2007年）进一步指出，敏感性值较小的参数，其关注的条件输出概率仍可能对参数变化非常敏感。当原始参数值接近敏感性函数的顶点时，就会出现这种情况。该顶点定义为敏感性值等于 1 时的点 θ_i^v，即

$$|f^{'}(\theta_i^v)| = 1. \tag{7}$$

顶点可以根据敏感性函数的方程推导得出：

$$\theta_i^v = \begin{cases} s + \sqrt{|r|}, & \text{if } s < 0, \\ s - \sqrt{|r|}, & \text{if } s > 0. \end{cases} \tag{8}$$

请注意，未考虑情形 $s = 0$，因为它对应的是线性敏感度函数，而非双曲线型敏感性函数。

顶点接近度定义为绝对差值 $|\theta_i^0 - \theta_i^v|$。顶点接近度越小，即使敏感性值较小，输出概率也可能对参数变化越敏感。

2.2.3 Other metrics

给定方程（3）的系数 c_0，c_i，d_0，d_i，除敏感性值和顶点接近度之外，敏感性函数的任何性质都可以轻易推导出来。此处我们提出使用另外两个度量指标。第一个度量指标是敏感性函数在原始参数值处二阶导数的绝对值，可通过以下方式轻松计算：

$$|f''(\theta_i^0)| = \frac{2d_i\,|c_i d_0 - c_0 d_i|}{\left(d_i\theta_i^0 + d_0\right)^3}. \tag{9}$$

与敏感性值类似，在 θ_i^0 处二阶导数的值较大，表明这些参数可能会对关注概率产生重大影响。

第二个度量指标是敏感性函数的一阶导数在区间 $[0, 1]$ 上的绝对值最大值。注意到方程（6）的分母是一条抛物线，因此可以轻松求得该值：

$$\max_{\theta_i \in [0,1]} |f'(\theta_i)| = \begin{cases} \infty & \text{if } -d_0/d_i \in [0,1] \\ \max\{|c_i d_0 - c_0 d_i|/d_0^2, |c_i d_0 - c_0 d_i|/(d_i + d_0)^2\} & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{10}$$

同样，较高的值表示参数的变化可能会导致关注的输出概率发生显著变化。

2.3 多向敏感性分析

在许多实际应用中，人们关注同时改变多个参数对关注输出的影响。这称为多向敏感性分析。尽管已有一些研究尝试探讨这类更通用分析的理论性质和计算效率（例如，参见 Bolt 和 Renooij，2014年；Chan and Darwiche，2004年；Kjaerulff 和 van der Gaag，2000年；Leonelli 等，2017年；Leonelli 和 Riccomagno，2022年），但在实践中，这类分析并不像单向分析那么常见。

2.3.1 General formulation

现在假设同时改变参数 n（$\theta_1, \ldots, \theta_n$）。默认情况下，这些参数取自不同的条件概率质量函数，因此彼此独立（van der Gaag 等人，2007年）。在二元情形下，这很自然，因为每个概率质量函数中只能改变一个参数，其他参数与之存在函数关系。条件概率质量函数中的其他参数，包括 $\theta_1, \ldots, \theta_n$，则像单向分析中那样按比例协变（正式讨论见 Leonelli 和 Riccomagno，2022年）。参数 $\boldsymbol{\theta}_n$ 的变化对关注概率 $P(Y_O = y_O \mid \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$ 的影响由 n 阶敏感度函数刻画，其表达式为

$$f(\boldsymbol{\theta}_n) = \frac{\sum_{K \in \mathcal{P}([n])} c_K \prod_{i \in K} \theta_i}{\sum_{K \in \mathcal{P}([n])} d_K \prod_{i \in K} \theta_i}, \tag{11}$$

其中，$\mathcal{P}$表示幂集，$c_K, d_K \in \mathbb{R}$, $K \in \mathcal{P}([n])$ 是根据未改变的参数计算得到的常数。例如，双向敏感性函数可写为:

$$f(\theta_1, \theta_2) = \frac{c_0 + c_1\theta_1 + c_2\theta_2 + c_{12}\theta_1\theta_2}{d_0 + d_1\theta_1 + d_2\theta_2 + d_{12}\theta_1\theta_2} \tag{12}$$

一般而言，n 阶敏感度函数需要计算 2^{n+1} 个常数，因此计算成本较高。此外，需要构建敏感性函数的参数组合数量也会增加：有关讨论请参见第3.2节。

2.3.2 Maximum n-way sensitivity values

对于单向敏感性分析，我们可以明确地讨论敏感性函数的导数；而对于多值函数，正如（Bolt 和 Renooij，2014）所指出的，导数可以沿多个方向计算，因此引入了方向导数这一概念。然而，基本微积分告诉我们，函数 f 在点 $\boldsymbol{\theta}_n$ 处的最大方向导数等于该点 $\boldsymbol{\theta}_n$ 处梯度向量的长度，即 $|\Delta f(\boldsymbol{\theta}_n)|$。这一观察促成了 n 阶敏感度函数的敏感性值定义，即所有可能方向导数中的最大值（Bolt

和 Renooij，2014）。对于一个参数向量 $\boldsymbol{\theta}_n$ ，其原始值为 $\boldsymbol{\theta}_n^0$ ，最大 n 向敏感性值 定义为

$$sv_{\max}^{\boldsymbol{\theta}_n} = |\Delta f(\boldsymbol{\theta}_n^0)|, \tag{13}$$

其中， f 是相应的 n 阶敏感度函数。

根据定义，要得到最大 n 向敏感性值，首先需要推导 n 阶敏感度函数，随后计算其梯度。正如前文所述，这种直接方法的计算成本过高。然而，Bolt 和 Renooij（2014）证明， $sv^{\boldsymbol{\theta}_n\text{最大值}}$ 可以根据一阶敏感度函数的敏感性值轻松计算。设 c_0^i， c_i， d_0^i， d_i 为参数 θ_i 在 $\boldsymbol{\theta}_n$中变化时对应的一阶敏感度函数的系数。那么：

$$sv_{\max}^{\boldsymbol{\theta}_n} = \frac{1}{P(\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)^2} \sqrt{\sum_{i \in [n]} (c_i d_0^i - c_0^i d_i)^2}. \tag{14}$$

因此，如果存在一种高效计算一阶敏感度函数系数的方法，就同样能够高效地推导出最大 n 向敏感性值。

2.4 可容许区域

在许多应用场景中，关注的对象本身并非概率，而是某个变量的最可能值；该值可能以特定证据子集为条件。使用贝叶斯分类器的分类问题便属于这种情况：对于呈现特定证据模式的未标记观测，根据最可能值对其进行分类。专为此任务设计的贝叶斯网络通常称为贝叶斯网络分类器（Bielza 和 Larranaga，2014；Friedman 等，1997年）。

尽管已有研究讨论过此类分类问题的敏感度方法（Bolt 和 van der Gaag，2017年），但敏感性值及相关度量通常并无特别实用的价值。van der Gaag 和 Renooij（2001年）证明，即使参数的敏感性值较小，只要它相对于原始值略有偏离，也可能导致分类规则发生变化，或者同样地，使最可能值发生变化。因此，他们引入了可容许区域这一概念，用于描述在不改变感兴趣变量的最可能值的前提下，参数可以变动的范围。

为方便表述，我们在此考虑一个关注变量 Y_O ，它有两个可能的取值水平y_O 和 y_O'（因此，我们考虑最常见的二元分类问题）。此外，考虑可能的证据 $\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E$和一个扰动参数 θ_i ，并假设 $P(Y_O = y_O | \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E) > P(Y_O = y_O' | \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$，不失一般性。可容许区域$R_i$ 正式定义为 θ_i的取值区间

$$(\max\{\theta_i^0 - r, 0\}, \min\{\theta_i^0 + s, 1\}), \qquad r, s, \in \mathbb{R}, \tag{15}$$

使得 $P(Y_O = y_O|\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E) > P(Y_O = y'_O|\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$。区间 R_i越宽，该参数对最可能值的影响就越小。

van der Gaag 和 Renooij（2001年）以及 van der Gaag 等人（2007年）已经证明，可以通过确定敏感性函数的交点，根据单向敏感度函数计算此类区域。据我们所知，他们并未明确将可容许区域表示为敏感性函数系数的函数。令 c_0、c_i、d_0、d_i为事件 $Y_O = y_O|\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E$的敏感性函数的系数。由此可知，$Y_O = y'_O|\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E$ 的敏感性函数必须等于

$$\frac{(d_0 - c_0) + (d_i - c_i)\theta_i}{d_0 + d_i\theta_i}. \tag{16}$$

令这两个敏感性函数相等，可得

$$R_i = \begin{cases} \left(0, \min\{\frac{d_0 - 2c_0}{2c_i - d_i}, 1\}\right) & \text{if } \theta_i^0 \leq \frac{d_0 - 2c_0}{2c_i - d_i} \\ \left(\max\{0, \frac{d_0 - 2c_0}{2c_i - d_i}\}, 1\right) & \text{otherwise} \end{cases} \tag{17}$$

在 $E = \emptyset$ 的情况下，即没有证据时，可容许区域的表达式可简化为：

$$R_i = \begin{cases} \left(0, \min\{\frac{1 - 2c_0}{2c_i}, 1\}\right) & \text{if } \theta_i^0 \leq \frac{1 - 2c_0}{2c_i} \\ \left(\max\{0, \frac{1 - 2c_0}{2c_i}\}, 1\right) & \text{otherwise} \end{cases} \tag{18}$$

因此，只要有一种高效计算单向敏感度函数的方法，就能同样高效地推导出所有单个参数的可容许区域。

3. YODO 方法

YODO（只推导一次）方法最初由 Ballester-Ripoll 和 Leonelli（2022b）提出，用于计算第 2.2.1–2.2.3 节讨论的单向敏感性度量。我们先对该方法进行回顾，然后讨论其在多向敏感性分析中的应用。

3.1 用于单向敏感性分析的 YODO

3.1.1 First case: Marginal probability as a function of interest

假设 $f(\theta_i) = P(Y_O = y_O) = c_0 + c_i\theta_i$在 θ_i变化时遵循比例协变。令 $\theta_{j_1}, \ldots, \theta_{j_n}$为与 θ_i属于同一条件概率质量函数的其他参数，即它们都受和为一约束 $\theta_i + \theta_{j_1} + \cdots + \theta_{j_n} = 1$的限制。首先，我们将 f改写为

$$f(\theta_i) = g(\theta_i, \theta_{j_1}(\theta_i), \ldots, \theta_{j_n}(\theta_i)) \tag{19}$$

并且我们将展示如何求得 $f'(\theta_i)$，前提是我们能够计算相对于符号 θ_i、θ_{j_1}、...、θ_{j_n} 的梯度 ∇g （关于后者的详细信息，请参见第 3.1.3 节）。

根据广义链式法则，有

$$f'(\theta_i) = \frac{\partial g}{\partial \theta_i} \cdot 1 + \frac{\partial g}{\partial \theta_{j_1}} \cdot \frac{d\theta_{j_1}}{d\theta_i} + \cdots + \frac{\partial g}{\partial \theta_{j_n}} \cdot \frac{d\theta_{j_n}}{d\theta_i}. \tag{20}$$

通过推导方程（2），我们得到对所有 $1 \leq m \leq n$:

$$\frac{d\theta_{j_m}}{d\theta_i} = \frac{-\theta^0_{j_m}}{1-\theta^0_i} \tag{21}$$

因此，

$$f'(\theta_i) = \frac{\partial g}{\partial \theta_i} - \frac{(\partial g/\partial \theta_{j_1}) \cdot \theta^0_{j_1} + \cdots + (\partial g/\partial \theta_{j_n}) \cdot \theta^0_{j_n}}{1-\theta^0_i}. \tag{22}$$

最后，由于 $f(\theta_i) = P(\boldsymbol{Y}_O = \boldsymbol{y}_O) = c_0 + c_i\theta_i$，我们很容易求得参数 c_0， c_i:

$$\begin{cases} c_i = f'(\theta^0_i) \\ c_0 = P(\boldsymbol{Y}_O = \boldsymbol{y}_O) - c_i\theta^0_i. \end{cases} \tag{23}$$

3.1.2 Second case: Conditional probability as a function of interest

当 $f(\theta_i) = P(Y_O = y_O \mid \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E) = P(Y_O = y_O,\ \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)/P(\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$ 时，我们只需将第3.1.1节中的过程重复两次:

1. 我们首先将其应用于 $P(Y_O = y_O,\ \boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$，得到 c_0 和 c_i;
2. 然后将其应用于 $P(\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E)$，得到 d_0 和 d_i。

3.1.3 Computing the gradient ∇g

设 $\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K$ 为取某些证据值的网络变量的子集（这可以是 $K = O$ 或 $K = O \cup E$；因此我们涵盖了上述两种情况）。

首先，我们将贝叶斯网络道德化为马尔可夫随机场（MRF） $\mathcal{M}$。此过程会将所有变量父节点连接在一起，并对每个条件概率表（现称为势函数）去掉和为一约束；更多详情请参见（Darwiche，2009a年）。接下来，我们通过以下方式施加证据 $\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K$ ：定义 $\mathcal{M}^{\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K}$ 为一个新的马尔可夫随机场，它由$\widehat{\ }$将每个势函数$\Phi_{i_1,\ldots,i_M}(x_{i_1},\ldots,x_{i_M})$替换为一个新的势函数$\Phi_{i_1,\ldots,i_M}$而得，定义如下:

$$\widehat{\Phi}_{i_1,\ldots,i_M}(Y_{i_1} = x_{i_1},\ldots,Y_{i_M} = x_{i_M}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \exists m,k \mid i_m = k \wedge x_{i_m} \neq y_{i_m} \\ \Phi_{i_1,\ldots,i_M}(Y_{i_1} = x_{i_1},\ldots,Y_{i_M} = x_{i_M}) & \text{otherwise} \end{cases} \tag{24}$$

	$Y_2=1$	$Y_2=2$	$Y_2=3$
$Y_1=1$	0.8	0.1	0.1
$Y_1=2$	0.3	0.5	0.2
$Y_1=3$	0.1	0.2	0.7

(a) $\Phi_{1,2}(y_1, y_2)$

	$Y_2=1$	$Y_2=2$	$Y_2=3$
$Y_1=1$	0.0	0.0	0.1
$Y_1=2$	0.0	0.0	0.2
$Y_1=3$	0.0	0.0	0.7

(b) $\hat{\Phi}_{1,\ 2}(y_1,\ \ y_2)$

表 1：左：变量 Y_1 和 Y_2 的 MRF 示例势函数 $\mathcal{M}$，每个变量都有三个水平 $\{1,2,3\}$。右：$\mathcal{M}^{Y_2=3}$ 对应的势函数。

换言之，我们复制原始势函数，但将所有不符合变量赋值 $\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K$的条目置零。关于使用二元势函数的示例，请参见表1。

直观而言，修改后的 MRF $\mathcal{M}^{\boldsymbol{Y}_K=\boldsymbol{y}_K}$ 表示与 $\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K$兼容的所有变量赋值的未归一化概率。特别地，如果 $\mathcal{M}_{\boldsymbol{Y}_K}$ 表示网络 $\mathcal{M}$ 在 $\boldsymbol{Y}_K$中的所有变量上的边缘化，则有 ($\mathcal{M}^{\boldsymbol{Y}_K=\boldsymbol{y}_K}$)$_{\boldsymbol{Y}}$ =$P(\boldsymbol{Y}_K = \boldsymbol{y}_K)$。换句话说，计算 g可归结为对我们的 MRF 进行边缘化。在本文中，我们使用变量消除（VE）算法对其进行精确边缘化（参见 Darwiche，2009a年）。该方法相对于所有参数 $\boldsymbol{\theta}$ 都是可微的 $\boldsymbol{\theta}$，因为 VE 仅依赖于变量求和和因子乘法。也可以使用任何其他可微的推断算法（例如 Kjaerulff 和 van der Gaag，2000年所采用的连接树算法）。这一步，即计算函数 g，在神经网络文献中称为前向传播。接下来，我们对前一步操作进行反向传播（这一步称为反向传播），以构建梯度 ∇g。需要特别注意的是，反向传播能够一次性为网络的每个参数 $\theta \in \boldsymbol{\theta}$ 都产生 $\partial g/\partial\theta$，而不仅仅是针对某个单独的 θ_i。最后，我们获得此前详述的参数 $c_0,\ c_i,\ d_0,\ d_i$，并使用它们计算第 2.2.1 至 2.2.3 节中的度量指标，分别对应每个 θ_i。

请注意，与其他替代方法相比，这种方法具有以下优势。例如，符号推导 g 的梯度会十分繁琐，而且取决于目标网络拓扑结构以及关注概率的定义（Darwiche，2003年）。自动微分通过使用链式法则数值计算梯度，避免了这一问题。此外，使用有限差分求取梯度时，每个参数 θ_i都需要对 g进行两次求值。相比之下，自动微分只需进行一次前向和一次反向传递即可求出整个梯度——在我们的实验中，所需时间大致相当于仅执行两次边缘化操作（见下文）。

3.1.4 Additional one-way information

尽管 YODO 专为计算方程（3）的一元敏感性函数的系数而设计，但它还提供了回答其他敏感性问题所需的全部信息：

- 它为 $\boldsymbol{\theta}$ 中的每个参数提供可容许区域，这些区域针对关注事件 $Y_O = y_O|\boldsymbol{Y}_E = \boldsymbol{y}_E$，因为从形式上看，它们仅取决于系数$c_0$、 c_i、 d_0、 d_i，如方程（17）和（18）所示。

- 它可以快速找出不会影响关注输出概率的参数。这组参数通常称为参数敏感度集（Coup´e 和 van der Gaag，2002年）。它由满足以下条件的参数 θ_i 构成： c_i 和/或 d_i 不为零。

- 它可以判断参数变化是否会使敏感性函数单调递增或递减，这一点已由 Bolt 和 Renooij（2017年）论述。同样，只需检查 $c_i d_0 - c_0 d_i$的符号即可直接推导得出：参见方程（6）。

3.2 YODO 的多向敏感性分析

虽然从概念上考虑多个参数同时变化并无困难，但我们将讨论范围限定在双向敏感性分析，即仅改变成对的参数。这是因为：（i）敏感性函数无法在高维空间中可视化；（ii）参数组的数量会呈指数级增长；（iii）最关键的是，相关度量难以解释，这与标准统计模型中的高阶交互作用类似（例如参见 Hayes 等人，2012年）。

此前考虑的敏感性函数的二元版本，需要根据公式 12 计算未知数 c_{12} 和 d_{12} 。这可以通过在之前的计算中计算海森矩阵而非梯度来实现，大多数现代自动微分软件包都支持这一操作。然而，海森矩阵规模庞大（在第 4.1 节所研究的网络中最多可达 10^{10}），仅解释这些指标本身就颇具挑战。

因此，我们主张最大 n 向敏感性值是进行多向敏感性分析最有价值、用途最广的工具。根据公式 (13) 中的定义，可以清楚地看出，运行 YODO 算法后，便可立即针对特定的参数组合 $\boldsymbol{\theta}_n$计算该值。不过，即使只关注 $n = 2$，中等规模贝叶斯网络中可能的$\boldsymbol{\theta}_n$ 仍会变得极其庞大。为解决这一问题，我们指出参数 $\boldsymbol{\theta}$彼此独立地对公式 (14) 作出贡献，并据此引入一种高效获取前 K $sv_{\max}$ 对组合的算法。我们使用优先队列，并采用动态规划的方式：从一个包含 K 个最佳候选项的池 $\mathcal{P}$ 开始，并跟踪所有 $i \in \mathcal{P}$对应的 $\max_j sv^{\theta_i \cdot \theta_j}$最大 值。经过 K 步后，即可保证找到前 K 对组合。该算法依赖于对 n 个元素进行排序以及执行 K 次插入

并对队列执行删除操作，运行时间为 $O(n\log\ n + K^2 \log\ K)$ 次操作。所有细节见算法 1。

算法 1： 查找前 K 大二元敏感度值的算法

sv^{θ_i,θ_j} 最大值 适用于任意 $i, j \in [n]$。

// 汇总每个贝叶斯网络参数 θ_i 对式 14 的贡献
$v \leftarrow$ 空向量
对于 $i \leftarrow 1$ 至 n **执行**
    $v_i \leftarrow (c_i d_0^i - c_0^i d_i)^2$
结束循环
$v \leftarrow$降序排序(v)

// 使用 K 初始候选项填充队列
$q \leftarrow$ 空优先队列
对于 $i \leftarrow 1$ 到 K **执行**
    q.放入($\frac{1}{P(\boldsymbol{Y}_E=\boldsymbol{y}_E)^{\ 2}}\sqrt{v_i + v_{i+1}},\ \ i,\ \ i+1$) // 第一个元素充当队列的键
结束循环

// 更新队列时读取队列的最大值 K 键
$w \leftarrow$ 空向量
对于 $k \leftarrow 1$ 至 K **执行**
    $(v, i, j) \leftarrow q$.get()
    $w_k \leftarrow v$
    如果 $j < n$ **则**
        // 插入下一个候选对
        q.放入($\frac{1}{P(\boldsymbol{Y}_E=\boldsymbol{y}_E)^{\ 2}}\sqrt{v_i + v_{j+1}}, i, j+1$)
    结束 if
结束 for
返回 w

3.3 实现

为了高效执行变量消除，我们注意到，图模型边缘化问题等价于张量网络收缩问题（Robeva 和 Seigal，2018），因此使用库 $opt\ einsum$（Smith 和 Gray，2018），该库针对后者提供了优化的启发式方法。我们使用最先进的机器学习库$PyTorch$（Paszke 等，2019）1.13.1 版作为后端，对张量执行所有运算，然后对其进行反向传播。我们使用 $pgmpy$（Ankan 和 Panda，2015）来读取贝叶斯网络并将其道德化。

4. 结果

我们首先在包含数百个节点和弧、参数数量最多达 10^5 的大型网络上测试该方法，以研究其可扩展性；随后概述我们的方法所揭示的见解

网络	#节点	#弧	#参数	树宽	时间（有限差分）	时间（自动微分）	时间（svmax）
儿童	20	30	344	3	5.901379	0.026062	0.011229
水	32	123	13484	10	246.183577	0.057886	0.242638
警报	37	65	752	4	12.021088	0.039274	0.019980
Hailfinder	56	99	3741	4	58.217657	0.062527	0.092034
Hepar2	70	158	2139	6	100.047695	0.089120	0.052889
win95pts	76	225	1148	8	38.573179	0.092268	0.031935
pathfinder	109	208	97851	6	9254.500155	0.182588	1.848624
munin1	186	354	19226	11	148307.455340	16.085417	1.194862
andes	223	626	2314	17	238.634045	0.311464	0.070569
pigs	441	806	8427	10	1544.150893	0.568345	0.213123

表 2：我们将该方法应用于 10 个贝叶斯网络，并按节点数量排序。所有时间均以秒为单位。基线方法（倒数第三列）的耗时，是根据网络中的参数总数以及数值估算一个敏感性值所需的时间计算得出的。树宽通过$NetworkX$图形库计算得出（Hagberg 等人（2008））。最后一列报告了基于现有 YODO 梯度查找前 $20\ sv$ 个最大值对所需的时间。

将该方法应用于两个贝叶斯网络时的结果。所有实验均在一台配备 16GB RAM 的 4 核 i5-6600 3.3GHz 英特尔工作站上运行。

4.1 模拟研究

首先，我们在 Scutari 等人（2019）所考察的 10 个贝叶斯网络上运行我们的方法。作为基准，我们通过有限差分法对每个敏感性值进行数值估计：轻微扰动每个参数 θ_i，并测量其对 f 的影响。我们将 $P(A = a|B = b)$ 设为关注概率，其中 A，B，a，b 分别是随机选取的两个变量和两个水平。每项计时结果均为三次独立运行的平均值。结果见表 2，表明 YODO 的表现比基准方法快数个数量级，而计算最相关的二阶敏感度值最多只需约 2 秒。

4.2 人道主义危机与灾害的风险评估

接下来，我们将 Ballester-Ripoll 和 Leonelli（2022b）仅关注单向指标的分析加以扩展，以评估与人道主义危机和灾害相关的国家层面风险。数据由 INFORM（INFORM，2022 年）收集，包含 20 个灾害风险驱动因素，涵盖自然、人类、社会经济、制度和基础设施因素，这些因素会影响国家层面的灾害风险；此外还包括一个最终的国家风险指数，用于概括一个国家面临人道主义灾害的可能性及其暴露程度。表 3 概述了所考察的 20 个驱动因素，它们涵盖三个主要风险维度：灾害与暴露（自然/人类）；脆弱性（社会经济/脆弱群体）；应对能力不足（制度/基础设施）。所有

变量	缩写	风险维度	类别
地震	地震	灾害与暴露	自然
海啸	海啸	灾害与暴露	自然
洪水	洪水	灾害与暴露	自然
热带气旋	热带气旋	灾害与暴露	自然
干旱	干旱	灾害与暴露	自然
流行病	流行病	灾害与暴露	自然
预测冲突风险	PCR	灾害与暴露	人类
当前高强度暴力冲突	CHVCI	灾害与暴露	人类
发展与贫困	D AND D	脆弱性	社会经济
经济依赖	经济依赖	脆弱性	社会经济
未受保护的人群	未受保护的人群	脆弱性	脆弱群体
其他脆弱群体	其他脆弱群体	脆弱性	脆弱群体
5岁以下儿童	5岁以下儿童	脆弱性	脆弱群体
粮食安全	粮食安全	脆弱性	脆弱群体
近期冲击	近期冲击	脆弱性	脆弱群体
健康状况	健康状况	脆弱性	脆弱群体
治理	治理	应对能力不足	制度
沟通	沟通	应对能力不足	基础设施
实体基础设施	实体基础设施	应对能力不足	基础设施
医疗卫生系统可及性	医疗卫生可及性	应对能力不足	基础设施

表3：INFORM（2022年）数据集中用于人道主义网络的变量。

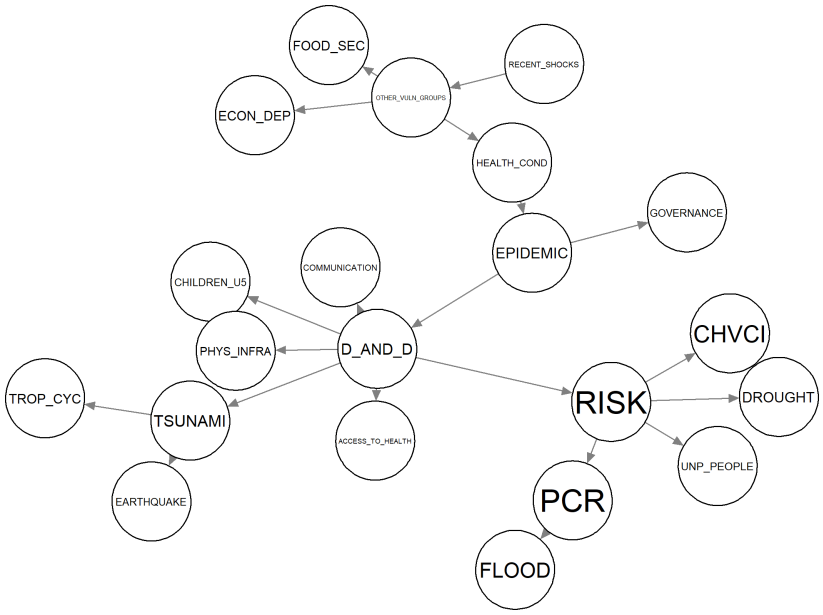


图 1：基于 INFORM（2022年）数据集学习得到的国家层面灾害风险贝叶斯网络.

变量的取值范围均为 0 到 10。采用等宽法后，这些变量被离散为三个类别（低/0、中/1、高/2）。该数据集包含 190 个国家。

参数	值	敏感性值 ↓	近似值-mity	二阶导数	最大值一阶导数
风险 = 高 | D AND D =低	0.0012	0.914	0.056	1.437	0.916
洪水 =高 | PCR = 低	0.107	0.722	0.0534	4.059	1.475
洪水 =中 | PCR = 低	0.469	0.645	0.718	3.238	∞
洪水 =低 | PCR =低	0.425	0.645	0.718	3.238	∞
风险 = 高 | D AND D =高	0.34	0.555	0.731	0.387	0.714
风险 = 高 | D AND D =中	0.0686	0.467	1.002	0.295	0.488
流行病 = 高 | 健康状况 =低 -	0.148	0.295	1.167	0.231	0.332
D AND D- =高 | 流行病 = 中	0.0742	0.238	1.834	0.133	0.249
PCR = 高 | 风险 =中	0.278	0.226	0.6	0.395	0.394
PCR = 高 | 风险 =低	0.0266	0.204	0.694	0.322	0.213
洪水 =高 | PCR = 高	0.509	0.196	0.475	0.46	1.211
洪水 =高 | PCR = 中	0.136	0.167	0.787	0.25	0.206
D AND D- =高 | 流行病 = 高	0.787	0.159	4.159	0.0459	0.202
D AND D- =高 | 流行病 = 低	0.0411	0.153	2.984	0.0625	0.156
风险 = 低 | D AND D =高	0.0208	0.151	2.319	0.0796	0.274
健康状况 =中 | 其他脆弱群体 = 低 - -	0.05	0.151	3.026	0.061	0.154
健康状况 =低 | 其他脆弱群体 = 低 - -	0.949	0.15	3.036	0.0606	0.154
PCR = 低 | 风险 =高	0.00521	0.15	3.023	0.0609	0.236
D AND D- =中 | 流行病 = 高	0.176	0.148	5.393	0.0338	0.18
PCR = 高 | 风险 =高	0.943	0.148	3.092	0.0588	0.224

表4：当关注概率为 P(风险 = 高|洪水 = 高) 时，人道主义危机网络中排名前 20 的参数的四种敏感性指标。

与 Qazi 和 Simsekler（2021年）类似，使用 bnlearn软件包的 hc函数学习贝叶斯网络，结果见图1。对所学有向无环图进行完整解读超出了本文的讨论范围。不过，可以注意到，在给定发展与匮乏指数（D AND D）的情况下，大多数风险因素与整体国家风险相互独立。

作为 YODO 方法的示例，我们在此计算了灾害高风险（RISK = 2）在洪水高风险（FLOOD = 2）条件下的条件概率的所有敏感性度量。使用我们的方法计算全部183个网络参数的所有度量指标仅耗时0.055秒。根据敏感性值，结果列于表4中，展示了影响最大的20个参数。可以注意到，影响最大的参数来自给定发展与匮乏指数（D AND D）时总体风险的条件分布，以及给定预测冲突风险指数（PCR）等于低时洪水指数的条件分布。

作为另一个示例，图2报告了给定地震高风险时总体高风险输出条件概率对应参数的敏感性值。蓝色表示正敏感性值，红色表示负敏感性值。在183个网络参数中，有30个参数的敏感性值为零，这意味着它们不会影响关注概率。可以注意到，影响最大的参数与输出概率呈正相关，并且几乎都与发展与贫困指数相关。

我们进一步通过双向敏感性分析，研究参数变化对同一概率 P(风险 = 高 | 地震 = 高) 的影响。图3列出了最大的15个双向敏感性值。由于这些值是向量范数，因此无论参数与关注概率之间的关系如何，它们始终为正。因此，颜色的含义不应按照图2来解读。同样，

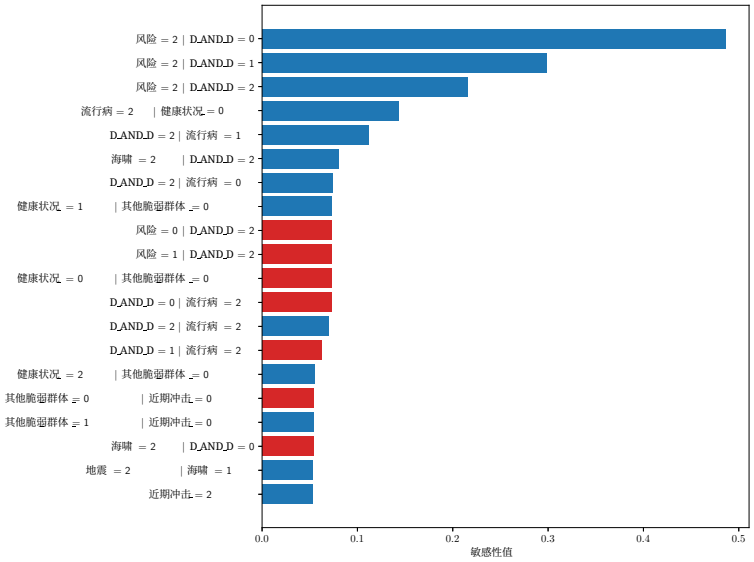


图2：人道主义危机网络中影响力最大的前20个参数，根据 $f'(\theta_i)$的符号进行颜色编码。关注概率为 P(风险 =高 | 地震 = 高)。总计算时间：0.038秒。

与发展与匮乏指数相关的所有参数，对一个国家总体风险较高这一概率的影响最为显著。得益于 YODO 的高效性，这些指数几乎可以瞬时计算出来，总计算时间仅为 0.047 秒。

4.3 COVID-19隔离期间技术的作用

第二个贝叶斯网络探讨了数字通信技术在维系有意义的社会关系和促进社会支持感知方面的作用，这些作用发生在 COVID-19 封锁期间。Gabbiadini 等人（2020）报告称，数据于 2020年3月在意大利通过在线问卷收集，当时距离意大利政府为紧急遏制和管理 COVID-19疫情紧急状态而实施封锁约两周。数据可从 Gabbiadini（2020）下载，其中包含 464 名个体的人口统计信息、他们对数字通信技术的使用情况，以及用于描述其情绪状态的各项心理测量。每个变量均采用等频法或一些特定阈值离散为两、三或四个等级，以优化各等级的含义。详情见表5。

使用禁忌搜索算法进行 1000 次自助抽样重复，并保留出现频率超过 50% 的边，从而为该数据集学习一个贝叶斯网络。此外，从心理测量指向技术和人口统计变量的边被

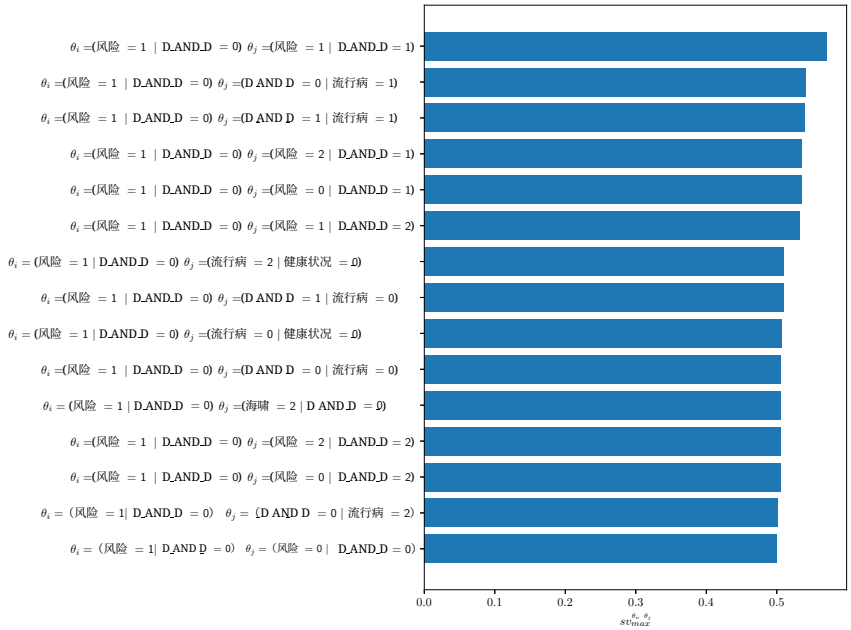


图3：根据 svmax，人道主义危机网络中影响力最大的15对参数。关注概率为 P(风险 = 高 | 地震 =高)。总计算时间：0.033秒。

变量	含义	组	级别
AGE	受访者年龄	人口统计学	< 25/≥ 25 (0/1)
性别	受访者性别	人口统计学	男性/女性(0/1)
地区	居住地区	人口统计学	伦巴第/其他(0/1)
户外	每周外出次数	人口统计学	0/1/≥2(0/1/2)
平方米	住房面积（平方米）	人口统计学	<80/≥80(0/1)
家庭人数	家中人数	人口统计学	1/2/≥ 3(0/1/2)
隔离天数	封锁以来的天数	人口统计学	0-10/11-20/>20(0/1/2)
职业	职业	人口统计学	其他/智能办公/学生/办公室工作(0/1/2/3)
技术趣味 PQ	通信技术的使用隔离前用于娱乐	技术	低／中／高(0/1/2)
技术趣味 Q	通信技术的使用隔离期间娱乐	技术	低／中／高(0/1/2)
技术工作 PQ	通信技术的使用隔离前用于工作	技术	低/高(0/1)
技术工作 Q	通信技术的使用隔离期间用于工作	技术	低／高(0/1)
焦虑	焦虑程度	心理学	低／中／高(0/1/2)
易怒	感知到的愤怒/易怒程度	心理学	低／中／高(0/1/2)
归属感	“我们”一词的使用频率	心理学	低／中／高(0/1/2)
无聊	无聊程度	心理学	低／中／高(0/1/2)
孤独	感知到的孤独感	心理学	低／中／高(0/1/2)
社会	感知到的社会支持	心理学	低／中／高(0/1/2)

表5：Gabbiadini 等人（2020）的 COVID-19 网络所考虑的变量。

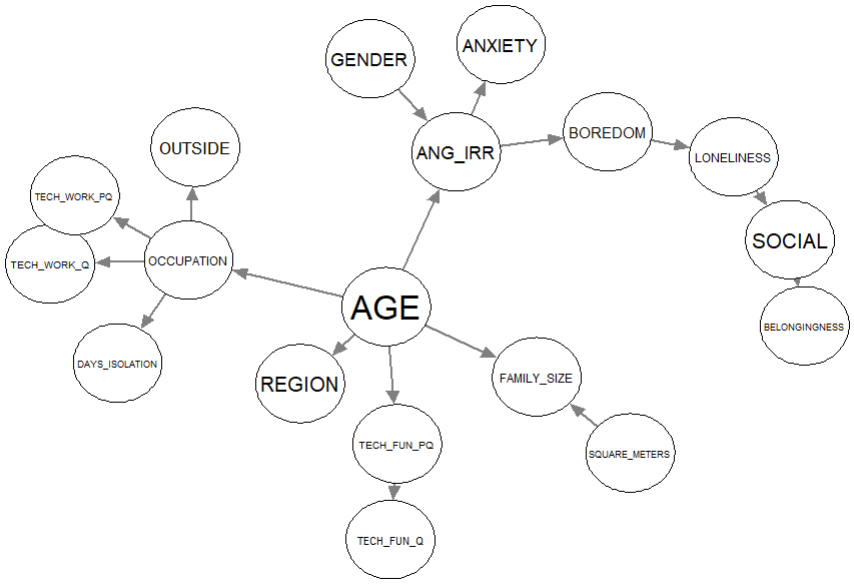


图4：基于 Gabbiadini 等人（2020）的 COVID-19 数据集学习得到的贝叶斯网络。

不允许。同样，也不允许存在从技术变量指向人口统计变量的边。这些选择旨在学习一个网络，使其连接具有更自然的因果解释。图4展示了学习得到的贝叶斯网络。与心理测量相连的两个变量是年龄和性别。具体而言，已知某人的年龄后，其他所有人口统计特征（性别除外）对于预测其心理状态都无关紧要。因此，该网络似乎表明，在封锁期间，年龄是影响个体心理状态的主要因素。

在第二个应用中，我们展示如何使用 YODO 算法计算可容许区域。孤独指数较低的个体，在隔离期间很可能花了大量时间通过远程方式进行工作交流（技术工作 Q）。表 6 按区间从窄到宽的顺序列出了可容许区域的界限及其他测量指标。在六种情况下，可容许区域的宽度不为一，这些情况均来自技术工作 Q 或职业的概率质量函数。这表明，数据有力支持了以下假设：在封锁期间，那些不感到孤独的个体有许多线上工作联系。

作为第二个示例，我们考虑这样一种情况：某人在封锁期间感到非常孤独，探讨其年龄。贝叶斯网络表明，最可能的值是年龄大于 24 岁。表7展示了网络参数的可容许区域，并表明对于这一假设，该网络的稳健性要低得多。可容许区域窄得多，其中两个参数的宽度为 0.04。还可以注意到

参数	值	敏感值	接近度	AR（下限）	AR（上限）
技术工作 Q = 1 ∣ 技术工作 PQ = 1, 职业 = 1	0.96	0.21	$4.54 \cdot 10^{6}$	0.56	1.0
职业 = 0 ∣ 年龄 = 1	0.37	0.28	$9.91 \cdot 10^{6}$	0	0.67
职业 = 1 ∣ 年龄 = 1	0.4	0.28	$9.78 \cdot 10^{6}$	0.1	1.0
技术工作 Q = 1 ∣ 技术工作 PQ = 0, 职业 = 2	0.41	0.27	$2.02 \cdot 10^{7}$	0.093	1.0
技术工作 Q = 0 ∣ 技术工作 PQ = 0, 职业 = 2	0.59	0.16	N/A	0.068	1.0
技术工作 Q = 1 ∣ 技术工作 PQ = 1, 职业 = 2	0.75	0.12	$5.49 \cdot 10^{7}$	0.041	1.0
年龄 = 0	0.45	0.11	4.36	0	1.0
技术趣味 PQ = 1 ∣ 年龄 = 1	0.26	$4.0 \cdot 10^{-9}$	$2.1 \cdot 10^{7}$	0	1.0
技术趣味 PQ = 2 ∣ 年龄 = 0	0.36	$2.39 \cdot 10^{-8}$	N/A	0	1.0
技术趣味 PQ = 2 ∣ 年龄 = 1	0.51	$8.01 \cdot 10^{-9}$	$1.05 \cdot 10^{7}$	0	1.0
技术趣味 Q = 0 ∣ 技术趣味 PQ = 0	0.47	$2.18 \cdot 10^{-8}$	$4.19 \cdot 10^{7}$	0	1.0
技术趣味 Q = 0 ∣ 技术趣味 PQ = 1	0.27	$1.39 \cdot 10^{-8}$	$4.19 \cdot 10^{7}$	0	1.0
技术趣味 Q = 0 ∣ 技术趣味 PQ = 2	0.12	0	N/A	0	1.0
技术趣味 Q = 1 ∣ 技术趣味 PQ = 0	0.34	$7.92 \cdot 10^{-9}$	$2.1 \cdot 10^{7}$	0	1.0
技术趣味 Q = 1 ∣ 技术趣味 PQ = 1	0.41	$1.39 \cdot 10^{-8}$	$4.19 \cdot 10^{7}$	0	1.0

表 6：关注概率 P（技术工作 Q =高 ∣ 孤独 = 低）的 COVID 网络：可容许区域最小的 15 个参数的敏感性指标。总计算时间：0.071 秒。

参数	值	敏感值	接近度	AR（下限）	AR（上限）
隔离天数 = 0 ∣ 职业 = 3	1.0	0.028	11.13	0.96	1.0
户外 = 2 ∣ 职业 = 3	1.0	0.028	11.13	0.96	1.0
易怒 = 2 ∣ 年龄 = 0, 性别 = 0	0.27	0.047	8.4	0	0.29
无聊 = 0 ∣ 易怒 = 1	0.24	0.019	3.4	0	0.3
易怒 = 0 ∣ 年龄 = 1, 性别 = 1	0.3	0.13	2.43	0	0.31
孤独 = 1 ∣ 无聊 = 0	0.33	0.014	7.4	0	0.41
孤独 = 0 ∣ 无聊 = 1	0.32	0.011	4.28	0	0.42
年龄 = 1	0.55	1.01	0.023	0.54	1.0
年龄 = 0	0.45	0.59	1.3	0	0.46
性别 = 1	0.75	0.0048	4.6	0.52	1.0
性别 = 0	0.25	0.0048	4.6	0	0.48
易怒 = 1 ∣ 年龄 = 1, 性别 = 1	0.42	0.018	23.86	0	0.49
易怒 = 2 ∣ 年龄 = 0, 性别 = 1	0.49	0.13	2.42	0	0.5
孤独 = 1 ∣ 无聊 = 1	0.47	0.011	4.28	0	0.57
无聊 = 1 ∣ 易怒 = 1	0.5	0.016	4.12	0	0.58

表7：COVID 网络中关注概率 P（年龄 $=\geq 25$ ∣ 孤独 =高）的敏感性指标：具有最小可容许区域的15个参数。总计算时间：0.11秒。

具有狭窄可容许区域的参数来自许多不同的概率质量函数。因此，网络参数的微小变化会使25岁以下的个体更有可能处于高度孤独状态。

5. 讨论

我们展示了自动微分在贝叶斯网络中的应用，尤其是如何利用它研究贝叶斯网络对参数变化的敏感程度。这些新算法可在 Python 中免费使用，并计划纳入 bnmonitor R 包的下一次发布版本（Leonelli等，2021）。我们通过一项模拟研究展示了它们的高效性。两个重要应用——人道主义危机和研究 COVID-19疫情期间隔离的心理影响——展示了这些算法在实践中的用途。

尽管 YODO 专为计算公式 3 中单向敏感性函数的系数而设计，我们在本文中展示了如何利用它回答各种敏感度查询，例如确定可容许区域和识别参数敏感度集。值得注意的是，YODO 也为多向敏感度分析提供了基础，我们展示了这类分析在实践中的可行性。

未来工作

此处介绍的 YODO 算法专为贝叶斯网络模型设计，但也可以调整后用于其他图模型。研究表明，考察上下文特定独立性通常能提高各种推断任务的效率，因此我们可以预期，这也能加快 YODO 的运行速度。因此，我们计划对其进行调整，使其能够用于包含非对称类型独立性的图模型，例如分阶段树（Carli et al., 2022年；Smith and Anderson, 2008年），其敏感性函数也已得到研究（Leonelli, 2019）。另一个研究方向是调整 YODO，使其适用于和积网络（Poon and Domingos, 2011；S´anchez-Cauce et al., 2021年）。和积网络是联合概率分布因子分解的另一种表示形式，近几年已日益流行。

尽管 YODO 使各种类型的多向敏感性分析成为可能，但它们仍然是一种局部方法，用于考察参数变化对关注概率的综合影响。近期研究表明，在证据敏感度分析中，计算 Sobol 指数这一全局敏感度指数是可行的（Ballester-Ripoll and Leonelli, 2022a）。我们目前正在研究相关算法，以全面评估贝叶斯网络各参数的影响，并据此计算其对应的 Sobol 指数。

参考文献

A. Ankan 和 A. Panda。pgmpy：使用 Python 的概率图模型。载于第*14*届 *Python* 科学会议论文集（*SCIPY 2015*）。Citeseer，2015。R. Ballester-Ripoll 和 M. Leonelli。在概率图模型中计算 Sobol 指数。《可靠性工程与系统安全》，225:108573，2022a。R. Ballester-Ripoll 和 M. Leonelli。只推导一次（YODO）：贝叶斯网络的高效敏感性分析自动微分。载于国际概率图模型会议，第169–180页。PMLR，2022b。C. Bielza 和 P. Larranaga。离散贝叶斯网络分类器：综述。《美国计算机协会计算综述》，47(1):1–43，2014。J. H. Bolt 和 S. Renooij。贝叶斯网络对多个同时参数变化的局部敏感度。载于欧洲概率图模型研讨会，第65–80页。施普林格，2014。

J. H. Bolt 和 S. Renooij。基于结构的贝叶斯网络参数分类。载于欧洲符号与定量推理及不确定性方法会议，第83–92页。施普林格，2017。J. H. Bolt 和 L. C. van der Gaag。用于调优多维贝叶斯网络分类器的平衡敏感性函数。《国际近似推理杂志》，80:361–376，2017。F. Carli、M. Leonelli、E. Riccomagno 和 G. Varando。用于分层阶段树结构学习的 R 包 stagedtrees。《统计软件杂志》，102(6):1–30，2022。E. Castillo、J. M. Guti´errez 和 A. S. Hadi。离散贝叶斯网络中的敏感性分析。《IEEE 系统、人类与控制论汇刊 A辑：系统与人类》，27(4):412–423，1997年。H. Chan 和 A. Darwiche。贝叶斯网络中的敏感性分析：从单个参数到多个参数。载于第*20*届人工智能不确定性会议论文集，第67–75页，2004年。H. Chan 和 A. Darwiche。用于界定概率信念变化的距离度量。《国际近似推理杂志》，38(2):149–174，2005年。V. M. Coup´e 和 L. C. van der Gaag。贝叶斯信念网络敏感性分析的性质。《数学与人工智能年刊》，36(4):323–356，2002年。V. M. Coup´e、L. C. van der Gaag 和 J. D. F. Habbema。敏感性分析：信念网络量化的辅助工具。《知识工程评论》，15(3):215–232，2000年。A. Darwiche。贝叶斯网络推断的微分方法。《美国计算机协会杂志》，50(3):280–305，2003年。A. Darwiche。《贝叶斯网络的建模与推理》。剑桥大学出版社，2009a年。A. Darwiche。《贝叶斯网络的建模与推理》。剑桥大学出版社，2009b年。D. Douglas-Smith、T. Iwanaga、B. F. Croke 和 A. J. Jakeman。不确定性与敏感性分析的若干趋势：软件工具与技术综述。《环境建模与软件》，124:104588，2020年。N. Friedman、D. Geiger 和 M. Goldszmidt。贝叶斯网络分类器。《机器学习》，29(2):131–163，1997 年。

A. Gabbiadini。《2020年意大利新冠疫情期间数字通信技术对负面情绪的缓解作用》。URL doi:10.20366/unimib/unidata/ SN223-1.0。UniData - Bicocca 数据档案馆，米兰。研究编号 SN223。数据文件版本 1.0。A. Gabbiadini、C. Baldissarri、F. Durante、R. R. Valtorta、M. De Rosa 和 M. Gallucci。《分隔却相连：新冠疫情期间数字通信技术对负面情绪的缓解作用》。《心理学前沿》，11:554678，2020。F. Goerlandt 和 S. Islam。《用于估计不列颠哥伦比亚省地震后沿海海上运输延误的贝叶斯网络风险模型》。《可靠性工程与系统安全》，214:107708，2021。A. A. Hagberg、D. A. Schult 和 P. J. Swart。《使用 NetworkX 探索网络结构、动态和功能》。载于《第7届 *Python* 科学会议论文集》，第11–15页，2008年。A. F. Hayes、C. J. Glynn 和 M. E. Huge。《关于解释含交互项的线性模型中的回归系数和假设检验的注意事项》。《传播方法与测量》，6(1):1–11，2012年。INFORM。《风险管理指数》。取自 https://drmkc.jrc.ec.europa.eu/inform-index，2022年。U. Kjaerulff 和 L. van der Gaag。《使敏感性分析在计算上更加高效》。载于《第*17*届人工智能不确定性会议论文集》，第317–325页，2000年。J. Kwisthout 和 L. van der Gaag。《敏感性分析与参数调优的计算复杂度》。载于《第*24*届人工智能不确定性会议论文集》，第349–356页，2008年。K. B. Laskey。《贝叶斯网络中的概率评估敏感性分析》。《*IEEE* 系统、人和控制论汇刊》，25(6):901–909，1995年。M. Leonelli。《超越线性的敏感性分析》。《国际近似推理杂志》，113:106–118，2019。M. Leonelli 和 E. Riccomagno。《单项式模型中敏感性分析的几何刻画》。《国际近似推理杂志》，151:64–84，2022年。M. Leonelli、C. G¨orgen 和 J. Q. Smith。《多线性概率模型中的敏感性分析》。《信息科学》，411:84–97，2017年。M. Leonelli、R. Ramanathan 和 R. L. Wilkerson。《使用 bnmonitor R 包进行贝叶斯网络中的敏感性与稳健性分析》。*arXiv:2107.11785*，2021年。

C. Li 和 S. Mahadevan。《贝叶斯网络的敏感性分析》。*ASCE-ASME*工程系统风险与不确定性期刊*B*辑：机械工程，4(1)，2018。T. Makaba、W. Doorsamy 和 B. S. Paul。《基于贝叶斯网络的道路交通碰撞事故成本影响评估框架》。《智能交通系统研究国际期刊》，19(1):240–253，2021年。A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer、J. Bradbury、G. Chanan、T. Killeen、Z. Lin、N. Gimelshein、L. Antiga、A. Desmaison、A. Kopf、E. Yang、Z. DeVito、M. Raison、A. Tejani、S. Chilamkurthy、B. Steiner、L. Fang、J. Bai 和 S. Chintala。《PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库》。载于 H. Wallach、H. Larochelle、A. Beygelzimer、F. d'Alch´e-Buc、E. Fox 和 R. Garnett（编），《神经信息处理系统进展》，第8024–8035页。Curran Associates, Inc.，2019年。J. Pearl。《概率推理：合理推断网络》。Morgan Kaufmann，1988年。H. Poon 和 P. Domingos。《和积网络：一种新的深度架构》。载于《*2011*年*IEEE*国际计算机视觉会议研讨会（*ICCV*研讨会）》，第689–690页。IEEE，2011年。A. Qazi 和 M. C. E. Simsekler。《使用数据驱动的贝叶斯网络评估人道主义危机和灾害风险暴露》。《国际灾害风险降低期刊》，52:101938，2021年。S. Renooij。《贝叶斯网络敏感性分析的协变：性质、后果与替代方案》。《国际近似推理杂志》，55(4): 1022–1042，2014年。E. Robeva 和 A. Seigal。《图模型与张量网络的对偶性》。《信息与推断：*IMA*期刊》，8(2):273–288，06 2018。J. Rohmer。《离散贝叶斯信念网络条件概率表中的不确定性：全面综述》。《人工智能工程应用》，88: 103384，2020年。R. S´anchez-Cauce、I. Par´ıs 和 F. J. D´ıez。《和积网络：综述》。《*IEEE*模式分析与机器智能汇刊》，2021年。M. Scutari、C. E. Graafland 和 J. M. Guti´errez。《谁能更好地学习贝叶斯网络结构：结构学习算法的准确性与速度》。《国际近似推理杂志》，115:235–253，2019年。

D. G. A. Smith 和 J. Gray。opt einsum——一个用于优化 einsum 类表达式收缩顺序的 Python 包。《开放源代码软件期刊》，3(26):753，2018。J. Q. Smith 和 P. E. Anderson。条件独立性与链事件图。《人工智能》，172(1):42–68，2008。L. van der Gaag 和 S. Renooij。概率网络敏感性数据的分析。载于第*18*届人工智能不确定性会议论文集，第530–537页，2001年。L. C. van der Gaag、S. Renooij 和 V. M. Coup´e。概率网络的敏感性分析。载于《概率图模型进展》，第103–124页。施普林格，2007年。E. Zio、M. Mustafayeva 和 A. Montanaro。用于评估和管理水力压裂中过早筛堵风险的贝叶斯信念网络模型。《可靠性工程与系统安全》，218:108094，2022年。