arXiv:2302.01312v3 [cs.LG] 3 Oct 2023

用于丰富偶然不确定性与认知不确定性建模的归一化流集成

Lucas Berry, [1] **David Meger** [1]

[1] 麦吉尔大学，智能机器中心，加拿大蒙特利尔
lucas.berry@mail.mcgill.ca

摘要

在这项工作中，我们展示了如何可靠地估计认知不确定性，同时保留捕捉复杂偶然不确定性分布所需的灵活性。为此，我们提出一种归一化流（NF）集成；归一化流在偶然不确定性建模方面处于最先进水平。该集成通过使用多组固定丢弃掩码构建，因此比创建多个独立的 NF 模型成本更低。我们展示了如何利用归一化流的独特结构——基分布——在不依赖样本的情况下估计偶然不确定性，并提供一套全面的基线方法，同时推导出微分熵的无偏估计。我们将这些方法应用于多种常用于基准测试偶然不确定性和认知不确定性估计的实验：一维正弦数据、二维多风网格世界（*Wet Chicken*）、*Pendulum*和跳跃者。在这些实验中，我们搭建了一个主动学习框架，并评估各模型测量偶然不确定性和认知不确定性的能力。结果表明，使用 NF 集成能够更好地捕捉复杂的偶然不确定性，同时保持准确的认知不确定性估计。

1 引言

不确定性的一种常见分解方式是将其分为偶然不确定性和认知不确定性（Hora 1996年；Der Kiureghian 和 Ditlevsen 2009年；H¨ullermeier 和 Waegeman 2021年）。偶然不确定性指实验结果中固有的随机性，而认知不确定性则可描述为无知或知识缺乏。两者之间的重要区别在于，认知不确定性可以通过获取更多数据来降低，而偶然不确定性则无法降低。本文旨在学习高维空间中具有任意分布形式的偶然分布，同时跟踪由非均匀数据采样导致的认知不确定性。

正规化流（NFs）已被证明能够在先验知识很少的情况下，有效捕捉表达能力极强的偶然不确定性（Kingma 和 Dhariwal，2018年；Rezende 和 Mohamed，2015年）。其方法是通过一系列非线性双射映射变换基分布，从而对复杂的异方差噪声和多峰噪声进行建模。机器人系统会呈现这类噪声，因为机器人与高维非线性随机动力学发生交互。动力学建模问题因此更加复杂：许多机器人系统的数据收集成本高得令人难以承受。因此，通常会采用主动学习框架，迭代地收集数据，以尽可能高效地改进模型。为应用这类框架，人们采用集成模型来捕捉深度学习模型的认知不确定性（Gal、Islam 和 Ghahramani，2017年）。

版权所有 © 2023年，人工智能促进协会 (www.aaai.org)。保留所有权利。

本文利用正规化流捕获丰富偶然不确定性的能力，并通过集成将这类模型扩展至认知不确定性估计。随后，我们使用正规化流模型处理回归任务中的认知不确定性。本研究的贡献如下：

- 我们提出两种估计正规化流不确定性的方法，推导出这些模型的无偏估计，并利用基分布减少不确定性估计所需的采样量。
- 我们通过固定丢弃掩码构建集成，以实现内存高效的集成方法，并将其应用于正规化流。
- 我们在一系列先前提出的基准测试（Depeweg 等人，2018年）以及主动学习问题的新设定中，展示了不确定性估计的实用价值。

2 问题陈述

给定数据集 $\mathcal{D} = \{x_i, y_i\}_{i=1}^N$，其中 $x_i \in \mathbb{R}^K$ 和 $y_i \in \mathbb{R}^D$，我们希望近似条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$。因此，我们的模型以 x 为输入，并输出近似条件概率密度函数 $p_{Y|X}(y|x) = f_\theta(y, x)$，其中 θ 是一组待学习的参数。在接下来的实验中，我们不假设真实分布 $p_{Y|X}(y|x)$为同方差，也不对其形状施加限制。

为了捕捉不确定性，我们采用 Houlsby 等人（2011）提出的基于信息的准则来估计不确定性。令 $H(\cdot)$ 表示随机变量 $H(X)$ 的微分熵，$= E\left[-\log(p_X(x))\right], \text{and} W \sim p(w)$ 表示贝叶斯框架或集成中的不同模型。由此可以将认知不确定性定义为 $I(y^*, W)$，即总不确定性 $H(y^*|x^*)$ 与偶然不确定性之间的差值，

$E_{p(w)}\left[H(y^*|x^*,w)\right]$, 不确定性,

$$I(y^*,W) = H(y^*|x^*) - E_{p(w)}\left[H(y^*|x^*,w)\right], \quad (1)$$

其中， $I(\cdot)$ 表示互信息（MI），而 y^*、 x^* 表示训练期间未见过的值。

这些不确定性估计可用于主动学习问题。在主动学习中，我们会迭代地向训练数据集中添加数据点，以便通过每次选取数据点，尽可能提升模型的性能（Settles 2009年；MacKay 1992）。进行主动学习时，我们试图找到能最大化公式（1）的 x^*，并查询该区域中的新数据点。直观而言，我们要寻找总不确定性最高的点 x^*， $H(y^*|x^*)$，但每个模型的不确定性都较低， $H(y^*|x^*, w)$。

3 背景

选择正规化流来捕捉偶然不确定性，因为它们能够表示灵活的分布。选择集成是因为它是深度学习中估计认知不确定性的一种计算效率较高的方法。

3.1 归一化流

正规化流是非参数模型，已被证明能够拟合灵活的多模态分布（Tabak and Vanden-Eijnden 2010；Tabak and Turner 2013）。它们通过变量替换公式，将简单的连续分布（例如高斯分布、贝塔分布等）变换为更复杂的分布。通过这些变换，我们可以对拟合后的分布进行评分和采样，因此正规化流可用于解决多种问题。设 B 为一个 D 维连续随机向量，其密度函数为 $p_B(b)$，并设 $Y = g(B)$，其中 g 可逆，g^{-1} 存在，且 g 和 g^{-1} 均可微。根据变量替换公式，我们可以将Y 的分布写为:

$$p_Y(y) = p_B(g^{-1}(y))\left|\det(J(g^{-1}(y)))\right|, \quad (2)$$

其中， $J(\cdot)$是雅可比矩阵，det 表示行列式。等式（2）右侧乘积中的第一项会改变分布的形状，而$\left|\det(J(g^{-1}(y)))\right|$ 则对其进行归一化，使其积分为 1。

可以通过令 g由 θ参数化，即 $g_\theta(\cdot)$，来学习 NF 模型，然后通过对数似然进行学习。此外，还可以将 NFs 构造为条件模型（Winkler et al. 2019；Ardizzone etal. 2019）。根据 Winkler et al. (2019) 的框架，公式 (2) 变为:

$$p_{Y|X}(y|x) = p_{B|X}(g_\theta^{-1}(y,x))\times \left|\det(J(g_\theta^{-1}(y,x)))\right|, \quad (3)$$

$$\log(p_{Y|X}(y|x)) = \log(p_{B|X}(g_\theta^{-1}(y,x))) + \log(\left|\det(J(g_\theta^{-1}(y,x)))\right|). \quad (4)$$

请注意，现在 $g_\theta^{-1}: Y\times X \mapsto B$ 而正规化流模型通常会将多个双射映射串联起来，使模型更加灵活。拟合正规化流时，通常会在小批次上优化公式 (4) 中的负对数似然。有关正规化流的完整概述，请参阅 Papamakarios 等人（2021年）。

3.2 集成

集成使用多个模型来提升预测性能并衡量不确定性。条件模型可写作:

$$f_\theta(y,x) = \sum_{w=1}^{M} \pi_w f_{\theta_w}(y,x), \quad (5)$$

其中， M 和 π_w 分别是模型组件的数量和组件权重。

集成通常通过两种方式生成：随机化（Breiman 2001年）和提升（Freund and Schapire 1997年）。随机化一直是深度学习模型的首选方法（Lakshminarayanan, Pritzel, and Blundell 2017年）。每个模型都经过随机初始化；随后，在每个模型 w的训练步骤中，从训练集 $\mathcal{D}$ 中有放回地抽取一个样本，并沿梯度方向迈出一步。这样便形成了多样性，因为在每个梯度步骤中，每个集成分量接触到的 $\mathcal{D}$ 都不同。

4 归一化流集成

我们提出了两种构建 NF 集成的方法：Nflows Out 和 Nflows Base。两者都依赖神经样条双射映射， $g_\theta(\cdot)$，因为已有研究表明，这种映射是非常灵活的分布逼近器（Durkan 等，2019年a、b）。训练集成组件时，我们同时采用装袋法和随机初始化。每个集成组件均通过固定丢弃掩码创建（Durasov 等，2021年），从而降低了该方法的内存和计算成本。

4.1 Nflows Out

Nflows Out 在非线性变换 g’ 中构建集成，

$$p_{Y|X,W}(y|x,w) = f_{\theta_w}(y,x) = p_{B|X}(g_{\theta_w}^{-1}(y,x))\times \left|\det(J(g_{\theta_w}^{-1}(y,x)))\right|. \quad (6)$$

每个组件的基分布是静态的，而组件间的差异则体现在双射变换中。网络 g_{θ_w} 输出三次样条的参数，因此每个集成组件都会生成不同的三次样条。**通过结合 NF 对复杂偶然不确定性的预测能力，以及 Dropout 集成对学习参数的不确定性进行捕捉的能力，我们的方法将偶然不确定性的表征和认知不确定性估计提升至最先进水平**。这些新能力使 Nflows Out 能够应用于新的决策任务。

使用 Nflows Out，我们可以近似计算公式（1）。我们采用蒙特卡洛抽样来估计感兴趣的量。因此，总不确定性估计为,

$$H(y^*|x^*) = -E\left[\log(p_{Y|X}(y^*|x^*))\right] \quad (7)$$

$$\approx -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\log(p_{Y|X}(y_n|x^*)), \quad (8)$$

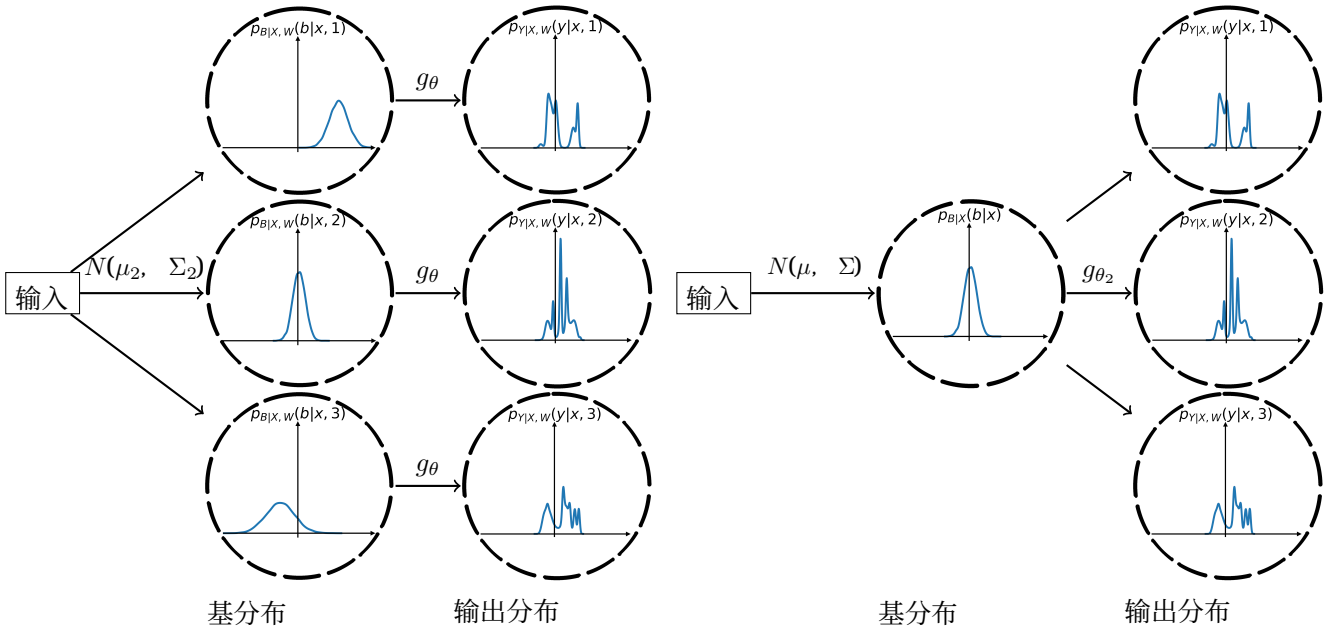

图1：左图展示了 Nflows Base，右图展示了由 3 个分量组成、经过一次双射变换的集成 Nflows Out。

其中， N 是抽取的样本数量。对于给定的 x^*，我们从 $p_{B|X}$ 中抽取 N 个点，然后随机选择一个集成组件 g_w 来变换每个点。公式（1）中的偶然不确定性 $E_{p(w)}[H(y^*|x^*, w)]$, 以类似方式计算,

$$\begin{aligned} & E_{p(w)}\left[H(y^*|x^*,w)\right] \\ &= -\frac{1}{M}\sum_{w=1}^{M} E\left[\log(p_{Y|X,W}(y|x^*,w))\right] \qquad (9) \\ &\approx -\frac{1}{M}\sum_{w=1}^{M}\frac{1}{N_w}\Big(\\ &\quad \sum_{n_w=1}^{N_w}\log(p_{Y|X,W}(y_{n_w}|x^*,w))\Big). \qquad (10) \end{aligned}$$

给定 x^* 和 w，我们从 $p_{B|X}$中采样 N_w 个点，然后根据 g_{θ_w}对这些样本进行变换。蒙特卡洛估计可能会受到维数灾难的影响（Rubinstein 和 Glynn，2009年）。附录 A.8 中包含了相关实验和直观证明，详细说明了蒙特卡洛估计在高维情况下的局限性。

4.2 Nflows Base

为减轻模型对采样的依赖，我们提出了一种针对正规化流的第二种集成技术：Nflows Base。该集成在基分布中构建,

$$\begin{aligned} p_{Y|X,W}(y|x,w) = f_{\theta_w}(y,x) = p_{B|X,W}(g_\theta^{-1}(y,x))\times \\ |\det(J(g_\theta^{-1}(y,x)))|, \qquad (11) \end{aligned}$$

其中，$p_{B|X,\ W}(b|x,\ w)\ =\ N(\mu_w,\ \Sigma_w)$、$\mu_w$和 Σ_w是通过带有固定丢弃掩码的神经网络估计的。在 Nflows Base 中，每个组件的双射映射是静态的，而基分布则会变化。图1展示了左侧的 Nflows Base 和右侧的 Nflows Out。

Nflows Base 在估计不确定性方面具有优势，因为组件的变异性包含在基分布中，因此可以使用解析公式来近似偶然不确定性。公式（10）变为:

$$\approx \frac{1}{M}\sum_{w=1}^{M}\frac{1}{2}\log(\det(2\pi\Sigma_w)). \qquad (12)$$

这些优势体现在内存减少、计算效率提升和估计误差降低方面。设 N_x 表示用于估计不确定性的 x^* 数量。那么，Nflows Out 需要采样 TS 个点，其中 $TS = N_x N_w M$，这些样本也用于估计公式（8）（$N_{out} = N_w M$）。另一方面，对于 Nflows Base，需要 $TS = N_x N_{base}$ 个点来估计不确定性，其中 $N_{base} = \frac{N_{out}}{M}$。这使得所需样本数量减少了 M倍。有关节省时间的分析，请参阅附录 A.8。除了减少所需的采样量外，由于可以直接根据公式（12）计算分量熵，而无需通过采样估计，因此估计误差也更小。对于非参数模型，由于输出分布不具有参数形式，通常不会在不进行采样的情况下估计偶然不确定性。请注意，我们可以使用基分布估计认知不确定性，因为互信息在双射映射下保持不变（Kraskov、St¨ogbauer 和 Grassberger，2004）。证明见附录A.10。

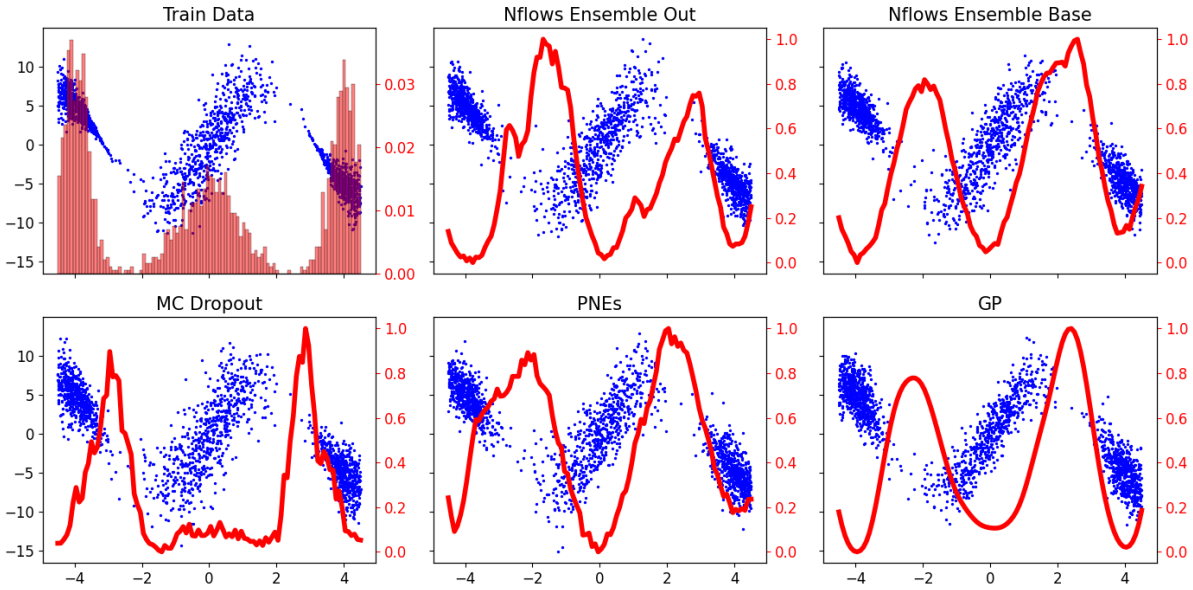

图 2：蓝点和左侧 y 轴表示在 异方差环境中各模型在相应 x 值处的样本。红色曲线和右侧 y 轴表示认知不确定性。请注意，左上图中显示的是概率密度，而非认知不确定性

5 基线模型

我们纳入了若干基线方法，并比较了各方法衡量偶然不确定性和认知不确定性的能力。以下将详细介绍这些基线方法。

5.1 概率网络集成

概率网络集成（PNE）已被证明是衡量神经网络不确定性的有力工具（Chua 等，2018；Kurutach 等，2018）。我们尤其关注它们在监督学习任务中衡量偶然不确定性和认知不确定性的能力。PNE 通过固定的 Dropout 掩码创建，每个组件都对一个高斯分布进行建模，

$$p_{Y|X}(y|x) = \frac{1}{M}\sum_{w=1}^{M} p_{Y|X,W}(y|x,w). \tag{13}$$

随后使用负对数似然训练模型，权重随机初始化，并从训练集中进行自助采样。我们采用与 Nflows Base 相同的方法（公式（8）和（12））估计 PNE 的认知不确定性。

5.2 蒙特卡洛 Dropout

除了集成之外，深度学习领域还存在其他贝叶斯近似方法。蒙特卡洛丢弃是较为普遍且常用的贝叶斯近似方法之一（Gal 和 Ghahramani，2016；Gal、Islam 和 Ghahramani，2017；Kirsch、Van Amersfoort 和 Gal，2019）。蒙特卡洛丢弃在训练期间通过丢弃创建集成，并在测试时使用丢弃来估计不确定性。因此，其输出分布与公式（13）中的 PNE 类似。

然而，我们无法在测试时对每个掩码进行采样，因此需要随机抽取一组掩码。因此，在估计蒙特卡洛丢弃的不确定性时，我们首先抽取一组掩码，然后对每个掩码对应的高斯分布进行采样。之后，我们应用公式（8）和（12）来衡量不确定性。请注意，每个掩码的概率相同，因为丢弃概率设为 0.5。

5.3 高斯过程

高斯过程（GP）是广泛用于量化不确定性的贝叶斯模型（Rasmussen，2003）。高斯过程模型可由其均值函数 $m(\cdot)$和实值过程 $f(x)$的半正定协方差函数/核 $k(\cdot,\ \cdot)$完全定义，

$$\begin{aligned} m(x) &= E\left[f(x)\right], \\ k(x,x') &= E\left[(f(x)-m(x))(f(x')-m(x'))\right]. \end{aligned} \tag{14}$$

选择均值函数和协方差函数，可以让从业者将先验知识输入模型。根据这些选择，预测后验变为：

$$E_f[x^*] = m(x^*) = k_*^T(K+\sigma_w^2 I)^{-1}y \tag{15}$$

$$var_f[x^*] = k_{**} - k_*^T(K+\sigma_w^2 I)k_*, \tag{16}$$

其中，$k_* = k(X,\ x^*)$、$k_{**} = k(x^*,\ x^*)$，K 是核矩阵，其元素为 $K_{ij} = k(x_i,\ x_j)$，而 σ_w^2 是噪声方差超参数。请注意，X 和 y 指的是完整的训练数据集。高斯过程为能够拟合数据点的函数赋予概率分布，并利用该函数分布来表达不确定性，进而量化认知不确定性。

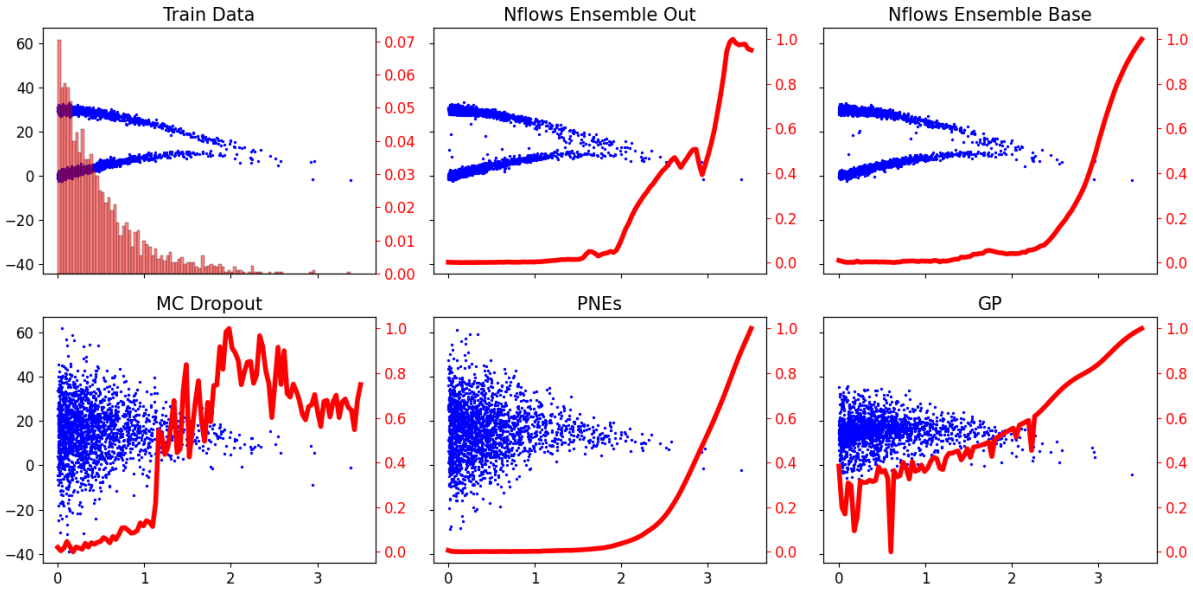

图 3：在双峰 环境中，各模型在对应 x 值处生成的样本以蓝点表示，对应左侧 y 轴。认知不确定性以红色曲线表示，对应右侧 y 轴。请注意，左上图显示的是概率密度，而非认知不确定性

6 实验

我们首先在两个一维环境中评估每种方法，这些环境此前由 Depeweg 等人（2018）提出，用于比较各方法能否捕捉多模态和异方差噪声，同时衡量认知不确定性。此外，我们提供了 5 个主动学习问题，包括一维和多维问题。我们对 OpenAI Gym 和 Nflows 库进行了少量修改后加以使用（Brockman 等人，2016；Durkan 等人，2020）。Depeweg 等人（2016，2018）提出的模型是贝叶斯神经网络，仅支持高斯混合，因此在刻画偶然不确定性方面不如正规化流灵活。此外，该模型没有可用的源代码，因此未将其纳入基线比较，不过我们加入了蒙特卡洛丢弃作为相近的对比方法。关于所有模型超参数的详情，请参阅附录 A.1；代码见 https://github.com/nwaftp23/nflows epistemic。

6.1 数据

为了评估我们的不确定性估计效果，我们在两个一维基准测试上进行评估：异方差 和双峰 （Depeweg 等人（2018））。图 2 左上方窗格展示了异方差数据。红色条形图中显示了两个数据密度较低的谷地，预计这些区域的认知不确定性会较高。图 3 左上方窗格展示了双峰 数据。沿 x 轴向右移动时，数据密度逐渐降低，因此预计认知不确定性会随着 x 增大而增加。有关数据生成的完整细节，请参阅附录 A.2。两个一维环境均用于验证不确定性估计及其可视化的可行性。

除了一维环境外，我们还在三个多维环境中验证了我们的方法。Tra-

是*Wet Chicken* （Trep. 1994），常用于评估模型拟合多模态异方差噪声的能力（Depeweg 等人 2018, 2016）。该环境模拟独木舟驶近瀑布边缘的情形。划桨者会被瀑布边缘吸引，因为那里鱼最多；但随着他们逐渐靠近，跌落边缘并重新开始的概率也会增加。因此，靠近瀑布边缘时，状态转移会呈现双峰分布。其动力学具有自然随机性，并由附录 A.3 中的方程所支配。我们将*WetChicken*纳入评估，以考察在本质上具有随机性的多维环境中的不确定性估计。

此外，我们在*Pendulum* （Brockman 等，2016年）和跳跃者 （Todorov、Erez 和 Tassa，2012）上评估了所有方法。之所以选用这些环境，是因为它们常用于基准测试，并且能提供更高维度的输出空间，以验证我们的方法。这些环境本质上是非随机的，因此我们在动力学中注入噪声，以产生多峰噪声。噪声被施加到每个动作 $a'_t = a_t + a_{max}\epsilon$ 上，其中 epsilon 取自一个多模态分布，而 a_{max} 指动作空间中的最大值。请注意，用于生成噪声分布的参数列于附录 A.4 中，并且 a_t 被记录在回放缓冲区中，而不是 a'_t。

6.2 一维拟合

首先，我们转向一维环境，为认知不确定性估计提供动机和实证依据。在图 2 中可以看到，每个模型都能较为合理地

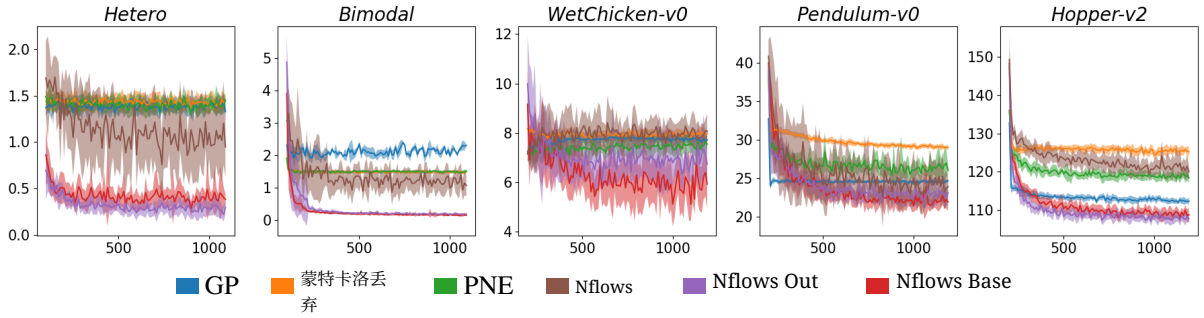

图4：随着数据逐步加入训练集，在 50 个随机抽取的测试集输入上计算的平均 KL散度（$\frac{1}{50}\sum_{i=1}^{50} D_{KL}(P_i \parallel Q_i)$，其中 P_i 是真实条件分布，Q_i 是以 x_i为条件的模型条件分布）。

捕捉 异方差 环境中真实分布先窄后宽的变化。此外，图 2 展示了各模型估计认知不确定性的能力，红色曲线及右侧纵轴所示即为认知不确定性。每个模型都能很好地捕捉数据点较少的两个区域中较高的认知不确定性。高斯过程、PNE 和蒙特卡洛丢弃在异方差环境中表现良好并不令人意外，因为已有研究表明，这些方法都能准确拟合异方差高斯噪声。

尽管基线方法足以捕捉异方差数据，但对于双峰情形则并非如此。图3显示，所有非正规化流模型都无法拟合两个众数。这是意料之中的，因为高斯过程、PNE 和蒙特卡洛丢弃会在每个 x处拟合一个高斯分布。虽然 PNE 和蒙特卡洛丢弃等集成模型理论上可以捕捉多个众数，但并不能保证做到这一点。若要确保捕捉多个众数，则需要深度学习工程。可以通过调整损失函数，或根据各个众数拆分训练数据来实现，但这两种方法都可能需要先验知识。另一方面，正规化流能够通过对数似然直接拟合多个众数。请注意，需要对变换的数量和变换类型进行一定的微调。

除了偶然不确定性估计外，图3还通过右侧 y 轴上的红色曲线，展示了各模型在双峰数据上捕获认知不确定性的能力。**只有 Nflows Out 和 Nflows Base 能够捕获两个众数，同时保持准确的认知不确定性估计**。每个模型都呈现出这样的模式：数据越稀缺，不确定性越高；其中，蒙特卡洛丢弃最难以体现这一模式。在大多数任务中，蒙特卡洛丢弃在估计认知不确定性方面最为困难。这可能是因为，与 PNE 或正规化流方法不同，其集成组件数量通常要多得多（2^n 其中 n是网络中的神经元数量）。因此，在估计公式（1）时，需要对一部分掩码进行采样，从而导致不确定性估计的稳定性较低。

6.3 主动学习

为了评估每个模型利用认知不确定性并捕捉灵活的偶然不确定性的能力，我们提供了一个主动学习实验设置。对于一维和多维实验，每个模型分别从 100 个和 200 个数据点开始。在每个训练轮次，模型采样 1000 个新输入，并保留认知不确定性最高的 10 个输入。随后，通过从测试集中采样 50 个输入，并对这些点处真实分布与模型分布之间的 Kullback–Leibler（KL）散度取平均值，对模型进行评估，

$$\frac{1}{50}\sum_{i=1}^{50} D_{KL}(P_i \parallel Q_i) \tag{17}$$

请注意，报告的 KL散度是通过样本使用 k近邻法估算的（Wang、Kulkarni 和 Verdu，2009年）。选择 KL散度作为评估指标，是因为我们最关注分布拟合。为确保变化性，训练集和测试集通过不同的流程收集；详情请参阅附录A.5。所有实验均使用 10 个随机种子运行，并报告其均值和标准差。

图4展示了随着训练集规模增加，各种方法的性能变化。**对于每种数据设置，NF 集成模型都能达到更低的 KL 值，从而验证它们能够利用认知不确定性估计，更快地学习表达能力更强的偶然不确定性**。在某些情况下，其他模型在数据点数量较少时表现更好。表1列出了这一信息，并以粗体标出不同采集轮次中表现最佳的模型。请注意，除了讨论的基线方法外，我们还纳入了一个不使用集成、以总熵作为采集函数的 NF。

7 相关工作

研究人员利用贝叶斯方法，为使用高斯过程（GP）解决分类问题中的主动学习问题，开发了基于信息的准则（Houlsby 等，2011）。研究人员将这一基于信息的准则用于贝叶斯神经网络的不确定性估计（Gal、Islam 和 Ghahramani，2017；Kendall 和 Gal，2017；Kirsch、Van Amersfoort 和 Gal，2019）。这些研究通过利用 dropout 估计神经网络图像分类中的不确定性，拓展了此前的认知不确定性估计方法。

Env	采集批次	GP	PNEs	蒙特卡洛丢弃	Nflows	Nflows Out	Nflows Base
异方差	10	1.43±0.12	1.39±0.06	1.43±0.1	1.54±0.23	**0.48±0.09**	**0.51±0.17**
	25	1.43±0.11	1.44±0.1	1.43±0.08	1.3±0.45	**0.31±0.09**	**0.43±0.11**
	50	1.41±0.07	1.39±0.07	1.46±0.1	1.39±0.21	**0.27±0.08**	**0.36±0.09**
	100	1.33±0.06	1.45±0.08	1.44±0.07	0.95±0.33	**0.3±0.08**	**0.38±0.06**
双峰	10	2.23±0.18	1.49±0.06	1.49±0.03	1.26±0.81	0.74±0.76	**0.36±0.07**
	25	2.02±0.07	1.46±0.05	1.47±0.04	1.21±0.6	**0.24±0.04**	**0.2±0.03**
	50	1.97±0.07	1.5±0.03	1.49±0.02	1.2±0.45	**0.22±0.03**	**0.18±0.03**
	100	2.3±0.03	1.51±0.05	1.49±0.05	1.07±0.32	**0.18±0.02**	**0.14±0.02**
Wet Chicken	10	7.61±0.21	**7.14±0.24**	7.93±0.27	8.04±1.07	7.83±1.2	7.67±1.36
	25	7.73±0.17	7.49±0.47	8.02±0.3	8.19±1.03	**6.64±0.79**	**6.25±0.98**
	50	7.81±0.12	7.61±0.44	7.95±0.18	8.12±0.78	**6.51±0.56**	**5.86±0.92**
	100	7.71±0.18	7.55±0.46	7.97±0.28	8.06±0.7	**6.73±1.06**	**5.93±1.01**
Pendulum-v0	10	**24.56±0.21**	27.29±0.73	31.04±0.41	26.45±4.61	27.62±1.87	26.07±2.22
	25	**24.52±0.3**	26.43±1.05	30.11±0.29	**24.86±3.66**	**24.13±1.18**	**23.97±2.16**
	50	24.68±0.26	26.47±1.19	29.6±0.26	24.44±3.04	**22.86±1.63**	**22.45±1.29**
	100	24.67±0.17	26.04±0.94	29.0±0.39	23.9±0.93	23.09±1.56	**21.93±1.17**
Hopper-v2	10	114.8±0.97	122.42±1.22	125.66±0.98	126.87±2.83	**112.79±1.18**	114.6±2.14
	25	113.29±0.62	120.3±1.56	125.99±0.84	123.93±1.84	**109.31±2.0**	**110.64±1.59**
	50	112.98±0.71	119.82±1.66	125.65±0.88	122.36±1.36	**108.59±1.04**	**109.44±1.87**
	100	112.27±1.0	118.4±1.21	125.21±1.36	119.97±1.91	**107.74±0.99**	**108.71±1.83**

表1：50个随机抽取的测试输入的真实分布与相应模型分布之间的KL散度。实验采用了十个不同的随机种子，结果以均值加减一个标准差表示。最佳模型以粗体标出。

相比之下，我们的工作在更复杂的输出空间中估计认知不确定性。本文中的实验针对回归问题进行，输出取自维度为 1–11 的连续分布；而以往研究将其方法用于分类问题，其输出是一个一维分类输出。

研究表明，正规化流是认知不确定性的不佳估计器（Kirichenko、Izmailov 和 Wilson，2020年；Zhang、Goldstein 和 Ranganath，2021年）。研究人员认为，正规化流无法通过似然区分分布内样本和分布外样本，这是其方法上的缺陷。有些研究为这一问题找到了变通方法，尤其是集成领域（Choi、Jang 和 Alemi，2018年）。通过利用与贝叶斯方法相似的不确定性量化优势，同时降低计算开销，集成已被证明是机器学习从业者手中的有力工具（Lakshminarayanan、Pritzel 和 Blundell，2017年）。关于正规化流和不确定性的研究主要聚焦于图像生成和无监督学习。我们的方法有所不同，因为我们考虑的是监督学习问题（Winkler 等，2019年）。此外，我们的方法与 Choi、Jang 和 Alemi（2018年）创建的集成不同：我们利用基分布来估计不确定性，使用互信息而非广泛适用信息准则，并以更少的内存创建集成。

除了上述讨论的示例外，也有研究致力于量化回归问题中的认知不确定性（Depeweg 等人（2018）；Postels 等人（2020））。Depeweg 等人（2016）的方法依赖于对神经网络的贝叶斯近似，这些网络对高斯混合进行建模，并展示了它们在三个环境中捕捉不确定性的能力。我们的工作在此基础上，开发了表达能力更强的正规化流模型，用于不确定性估计。Postels 等人（2020）提出了相关理论，说明如何利用代理网络的潜在表示来估计不确定性。他们将代理网络的潜在表示用作条件器。相比之下，我们展示了如何仅用一个正规化流模型实现这一点，以及如何利用基分布提高样本效率。本研究提供了一系列多模态问题，而 Postels 等人（2020）考虑的是一个单模态问题。我们的工作通过全面分析不同的基线方法、比较它们的不确定性量化表现并纳入高维数据，拓展了上述两篇论文的研究。此外，我们还提供了一套完整的主动学习实验方案，并开发了新的正规化流框架，以更高的样本效率和更低的内存开销来测量不确定性。

8 结论

本文介绍了通过固定丢弃掩码构建 NF 集成，并展示了如何高效地利用它们量化不确定性。为此，我们展示了如何利用基分布，以更少的样本高效估计不确定性。此外，Nflows Base 表明，可以在基分布空间中准确测量不确定性。我们通过实验表明，在 5 项回归任务中，我们的模型在捕捉偶然不确定性与认知不确定性的组合方面优于当前最先进的方法。

本文表明，NF 集成是一种能够灵活表达偶然不确定性的模型，同时保留了先前方法在捕捉认知不确定性方面的优势。

致谢

Meger教授获得了加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC）通过NSERC加拿大机器人网络（NCRN）提供的资助。

参考文献

Ardizzone, L.; L¨uth, C.; Kruse, J.; Rother, C.; and K¨othe, U. 2019年. 使用条件可逆神经网络进行引导式图像生成. *arXiv*预印本 *arXiv:1907.02392*. Breiman, L. 2001年. 随机森林. 机器学习, 45(1): 5–32. Brockman, G.; Cheung, V.; Pettersson, L.; Schneider, J.; Schulman, J.; Tang, J.; and Zaremba, W. 2016年. OpenAI Gym.*arXiv*预印本 *arXiv:1606.01540*. Choi, H.; Jang, E.; and Alemi, A. A. 2018年. WAIC，不过为什么？用于鲁棒异常检测的生成式集成. *arXiv*预印本 *arXiv:1810.01392*. Chua, K.; Calandra, R.; McAllister, R.; and Levine, S. 2018年. 少量试验中的深度强化学习：使用概率动力学模型. 载于神经信息处理系统进展，第31卷。Depeweg, S.; Hern´andez-Lobato, J. M.; Doshi-Velez, F.; and Udluft, S. 2016年. 使用贝叶斯神经网络在随机动力系统中进行学习与策略搜索. *arXiv*预印本 *arXiv:1605.07127*. Depeweg, S.; Hernandez-Lobato, J.-M.; Doshi-Velez, F.; and Udluft, S. 2018年. 贝叶斯深度学习中的不确定性分解：实现高效且风险敏感的学习. 载于国际机器学习会议，1184–1193。PMLR. Der Kiureghian, A.; and Ditlevsen, O. 2009年. 偶然不确定性还是认知不确定性？这重要吗？结构安全, 31(2): 105–112. Durasov, N.; Bagautdinov, T.; Baque, P.; and Fua, P. 2021年. 用于不确定性估计的掩码集成. 载于*IEEE/CVF*计算机视觉与模式识别会议论文集，13539–13548。Durkan, C.; Bekasov, A.; Murray, I.; and Papamakarios, G. 2019a. 三次样条流. 载于国际机器学习会议可逆神经网络与归一化流研讨会. Durkan, C.; Bekasov, A.; Murray, I.; and Papamakarios, G. 2019b. 神经样条流. 载于神经信息处理系统进展，第32卷。Durkan, C.; Bekasov, A.; Murray, I.; and Papamakarios, G. 2020年. nflows：PyTorch中的归一化流. https://doi.org/10.5281/zenodo.4296287. 访问日期：2021-09-01。Freund, Y.; and Schapire, R. E. 1997年. 在线学习的决策论推广及其在提升中的应用. 计算机与系统科学期刊, 55(1): 119–139. Gal, Y.；和 Ghahramani, Z. 2016年。Dropout 作为贝叶斯近似：在深度学习中表征模型不确定性。载于国际机器学习会议，1050–1059。PMLR。Gal, Y.；Islam, R.；和 Ghahramani, Z. 2017年。基于图像数据的深度贝叶斯主动学习。载于国际机器学习会议，1183–1192。PMLR。Hora, S. C. 1996年。概率 elicitation 中的偶然不确定性与认知不确定性：以危险废物管理为例。《可靠性工程与系统安全》，54(2-3)：217–223。Houlsby, N.；Husz´ar, F.；Ghahramani, Z.；和 Lengyel, M. 2011年。用于分类与偏好学习的贝叶斯主动学习。*arXiv* 预印本 *arXiv:1112.5745*。H¨ullermeier, E.；和 Waegeman, W. 2021年。机器学习中的偶然不确定性与认知不确定性：概念与方法简介。机器学习，110(3)：457–506。Kendall, A.；和 Gal, Y. 2017年。计算机视觉的贝叶斯深度学习需要哪些不确定性？神经信息处理系统进展，30。Kingma, D. P.；和 Dhariwal, P. 2018年。Glow：具有可逆1×1卷积的生成流。神经信息处理系统进展，31。Kirichenko, P.；Izmailov, P.；和 Wilson, A. G. 2020年。归一化流为何无法检测分布外数据。神经信息处理系统进展，33：20578–20589。Kirsch, A.；Van Amersfoort, J.；和 Gal, Y. 2019年。BatchBALD：用于深度贝叶斯主动学习的高效且多样化批量采集。神经信息处理系统进展，32。Kraskov, A.；St¨ogbauer, H.；和 Grassberger, P. 2004。互信息估计。《物理评论*E*》，69(6)：066138。Kurutach, T.；Clavera, I.；Duan, Y.；Tamar, A.；和 Abbeel, P. 2018年。模型集成信赖域策略优化。*arXiv* 预印本 *arXiv:1802.10592*。Lakshminarayanan, B.；Pritzel, A.；和 Blundell, C. 2017年。使用深度集成进行简单且可扩展的预测不确定性估计。神经信息处理系统进展，30。MacKay, D. J. 1992年。用于主动数据选择的基于信息的目标函数。《神经计算》，4(4)：590–604。Papamakarios, G.；Nalisnick, E. T.；Rezende, D. J.；Mo-hamed, S.；和 Lakshminarayanan, B. 2021年。用于概率建模与推断的归一化流。*J. Mach.Learn. Res.*，22(57)：1–64。Postels, J.；Blum, H.；Str¨umpler, Y.；Cadena, C.；Siegwart, R.；Van Gool, L.；和 Tombari, F. 2020年。神经网络激活中的隐性不确定性。*arXiv* 预印本 *arXiv:2012.03082*。Rasmussen, C. E. 2003年。机器学习中的高斯过程。载于机器学习暑期学校，63–71。Springer。

Rezende, D.；和 Mohamed, S. 2015年。基于归一化流的变分推断。载于第*32*届国际机器学习会议论文集，《机器学习研究论文集》第37卷，1530–1538。法国里尔。Rubinstein, R. Y.；和 Glynn, P. W. 2009年。如何应对蒙特卡罗模拟中似然比的维数灾难。随机模型，25(4)：547–568。Settles, B. 2009年。主动学习文献综述。人工智能与机器学习综合讲座。Tabak, E. G.；和 Turner, C. V. 2013年。一类非参数密度估计算法。《纯粹与应用数学通讯》，66(2)：145–164。Tabak, E. G.；和 Vanden-Eijnden, E. 2010年。通过对数似然的对偶上升进行密度估计。《数学科学通讯》，8(1)：217–233。Todorov, E.；Erez, T.；和 Tassa, Y. 2012年。Mujoco：用于基于模型的控制的物理引擎。载于*2012*年*IEEE/RSJ*国际智能机器人与系统会议，5026–5033。IEEE。Trep., V. 1994年。湿式斗鸡博弈。技术报告，Seimens AG。Wang, Q.；Kulkarni, S. R.；和 Verdu, S. 2009年。基于 k近邻距离的多维密度散度估计。*IEEE*信息论汇刊，55(5)：2392–2405。Winkler, C.；Worrall, D.；Hoogeboom, E.；和 Welling, M. 2019年。使用条件归一化流学习似然。*arXiv* 预印本 *arXiv:1912.00042*。Zhang, L.；Goldstein, M.；和 Ranganath, R. 2021年。理解深度生成模型在分布外检测中的失效。载于国际机器学习会议，12427–12436。PMLR。

A 附录

以下是补充的数学内容和图表。

A.1 模型超参数

PNE 使用了包含三个隐藏层的架构，每层有 50 个单元，并采用 ReLU 激活函数。MC dropout 模型包含五个隐藏层，每层有 400 个隐藏单元，并采用 ReLU 激活函数。所有实验设置均保持这一架构不变。Nflows Out、Nflows Base 和 Nflows 的超参数因实验而异，因此列于表 2 中。请注意，Nflows 的超参数经过特意选择，使其平均参数数量与集成组件相同，因为 dropout 权重为 0.5。高斯过程使用径向基函数核作为协方差函数，并使用常数均值函数。我们在搭载 Intel Gold 6148 Skylake @ 2.4 GHz CPU 和 NVidia V100SXM2（16G 内存）GPU 的设备上，使用 16GB 内存训练了所有模型。这得益于加拿大数字研究联盟的支持。

PNE、Nflows Out 和 Nflows Base 在每种实验设置下均使用五个集成组件运行。为估计给定每个 x 时的不确定性，Nflows Base 采样了 1000 个点，Nflows Out 采样了 5000 个点，PNE 采样了 5000 个点，MC Drop 采样了 2500 个点。蒙特卡洛丢弃采样了 20 个丢弃掩码，并据此估计不确定性。我们发现，增加采样数量会导致计算成本过高，且不会提高不确定性估计的准确性。

模型	Env	Hids	单元	g's
Nflows	异方差	1	10	1
	双峰	1	100	1
	湿鸡	1	100	1
	Pendulum-v0	2	10	2
	Hopper-v2	2	10	2
Nflows Out	异方差	1	20	1
	双峰	1	200	1
	湿鸡	1	200	1
	Pendulum-v0	2	20	2
	Hopper-v2	2	20	2
Nflows Base	异方差	1	20	1
	双峰	1	200	1
	湿鸡	1	200	1
	Pendulum-v0	2	20	2
	Hopper-v2	2	20	2
蒙特卡洛丢弃	异方差	5	400	NA
	双峰	5	400	NA
	湿鸡	5	400	NA
	Pendulum-v0	5	400	NA
	Hopper-v2	5	400	NA
PNEs	异方差	3	50	NA
	双峰	3	50	NA
	湿鸡	3	50	NA
	Pendulum-v0	3	50	NA
	Hopper-v2	3	50	NA

表 2：模型的超参数。

A.2 一维环境

数据异方差 是通过从具有 3 个取值的分类分布中采样 n 个点生成的，其中 $p_i = \frac{1}{3}$，然后根据 n 的取值，从三个不同的高斯分布（$N(-4,\ 25)$、$N(0,\ 910)$、$N(4,\ 25)$）之一中抽取 x。随后生成 y，如下所示：

$$y = 7\sin(x) + 3z\left|\cos\left(\frac{x}{2}\right)\right|. \tag{18}$$

数据双峰 是通过从参数为 $\lambda = 2$ 的指数分布中采样 x 生成的，然后从参数为 $p = 0.5$ 的伯努利分布中抽取 n，具体取值取决于 n:

$$y = \begin{cases} 10\sin(x) + z & n = 0 \\ 10\cos(x) + z + 20 - x & n = 1 \end{cases}. \tag{19}$$

请注意，对于双峰和异方差数据 $z \sim N(0,\ 1)$。

A.3 Wet Chicken

该环境可以看作一群划桨者（智能体）在二维河流中划着一艘独木舟。划桨者的位置，即状态，在时间 t 由 (x_t, y_t) 表示。河流的长度为 l，宽度为 w，两者均设为 5。在河流尽头的 y 方向上有一处瀑布，越过瀑布就会被迫返回原点 (0,0)。河岸边缘可以获得更高的奖励，$r_t = -(l - y_t)$，因此划桨者会尽可能靠近河岸边缘。智能体可以采取动作 $(a_{t,x}, a_{t,y}) \in [-1, 1]^2$，表示各个方向上的划桨力度。除了动作之外，还有湍流 s_t 和漂移 v_t，它们均具有随机性。

其动力学由以下方程组决定，

$$\begin{aligned} v_t &= \frac{3}{w}x_t \\ s_t &= 3.5 - v_t \\ x_{t+1} &= \begin{cases} 0 & x_t + a_{t,x} < 0 \\ 0 & \hat{y}_{t+1} > l \\ w & x_t + a_{t,x} > w \\ x_t + a_{t,x} & o/w \end{cases} \\ y_{t+1} &= \begin{cases} 0 & y_t + a_{t,y} < 0 \\ 0 & \hat{y}_{t+1} > l \\ \hat{y}_{t+1} & o/w \end{cases} \end{aligned}$$

其中 $\hat{}y_{t+1} = y_t + (a_{t,y} - 1) + v_t + s_t\tau_t$ 且 $\tau_t \sim \text{Unif}(-1, 1)$。随着划桨者接近瀑布边缘，状态转移会变得越来越呈双峰分布，因为他们可能会跌落，也可能返回起点。此外，状态转移具有异方差性；随着 x_t 减小，τ_t 的影响会增大。

Env	采集批次	GP	PNEs	蒙特卡洛丢弃_	Nflows	Nflows_输出	Nflows_基础
异方差	10	5.92±0.1	5.89±0.17	5.69±0.17	5.57±0.28	**2.01±0.12**	**2.17±0.1**
	25	5.95±0.06	5.91±0.13	5.66±0.14	4.74±1.57	**1.93±0.05**	**2.22±0.32**
	50	5.96±0.04	5.88±0.06	5.63±0.14	5.3±0.63	**1.92±0.08**	**2.15±0.16**
	100	5.96±0.04	5.91±0.09	5.67±0.13	4.18±1.37	**1.93±0.07**	**2.19±0.18**
双峰	10	9.19±0.24	10.22±0.24	10.3±0.27	7.69±0.87	**6.63±0.1**	**6.61±0.06**
	25	9.3±0.12	10.12±0.19	10.22±0.19	9.12±2.13	**6.62±0.08**	**6.67±0.06**
	50	9.23±0.08	10.11±0.14	10.19±0.16	9.62±2.97	**6.63±0.11**	**6.64±0.06**
	100	9.17±0.07	10.11±0.13	10.15±0.12	9.01±1.47	**6.63±0.04**	**6.72±0.1**
湿鸡	10	1.35±0.06	1.33±0.09	1.38±0.08	1.32±0.18	**0.85±0.07**	**0.89±0.09**
	25	1.38±0.03	1.36±0.07	1.39±0.04	1.37±0.2	**0.88±0.12**	**0.96±0.17**
	50	1.39±0.03	1.38±0.09	1.42±0.04	1.41±0.19	**0.88±0.09**	**0.89±0.08**
	100	1.38±0.02	1.4±0.08	1.45±0.07	1.42±0.21	**0.9±0.05**	**0.94±0.07**
Pendulum-v0	10	0.57±0.0	0.68±0.08	1.0±0.06	0.46±0.38	**0.15±0.1**	**0.17±0.14**
	25	0.57±0.0	0.61±0.02	0.84±0.05	0.28±0.39	**0.08±0.04**	**0.09±0.05**
	50	0.56±0.0	0.6±0.04	0.75±0.02	0.38±0.44	**0.05±0.03**	**0.06±0.03**
	100	0.56±0.0	0.6±0.03	0.71±0.01	0.2±0.14	**0.05±0.02**	**0.06±0.04**
Hopper-v2	10	1.81±0.01	1.87±0.05	1.86±0.05	1.44±0.76	**0.48±0.09**	**0.59±0.1**
	25	1.81±0.0	1.86±0.05	1.91±0.1	1.06±0.21	**0.39±0.06**	**0.42±0.09**
	50	1.81±0.0	1.85±0.03	1.94±0.06	1.05±0.19	**0.33±0.03**	**0.36±0.04**
	100	1.81±0.0	1.83±0.01	1.98±0.08	0.96±0.18	**0.29±0.02**	**0.31±0.03**

表3：给定 x，从模型中抽取一个 $\hat{y}$ 样本，然后计算该样本与真实值之间的均方根误差。此过程针对测试集中的 50 对 (x，y) 进行。实验使用了十个不同的随机种子，结果以均值加减一个标准差表示。

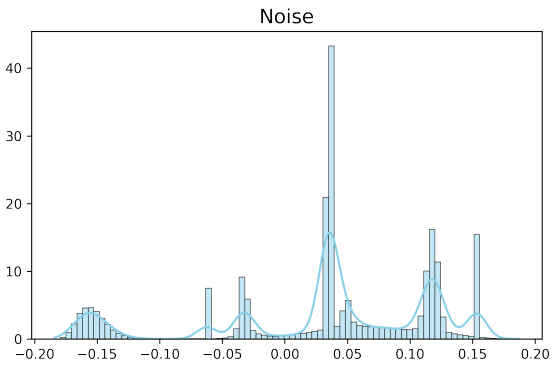

图5：用于向跳跃者和 Pendulum 引入随机性的噪声分布样本。

A.4 Hopper与Pendulum

我们通过高斯混合在两个环境中引入随机性。混合权重从狄利克雷分布中采样，其中 α 被设为全 1 向量；高斯分布的均值从 $N(0,1)$ 中随机抽取，而高斯分布的标准差则从 $N(0,\ 0.5)$ 中随机抽取，然后平方。

$$\pi = [0.062, 0.128, 0.177, 0.001, 0.032, 0.273, 0.062,\ 0.033,\ 0.067,\ 0.022,\ 0.142]$$
$$\mu = [0.508, -2.059, 1.355, -0.675, 0.504, 0.358, -0.332,\ -0.647,\ 2.029,\ -0.294,\ 0.868]$$
$$\sigma = [0.274, 0.276, 0.067, 0.131, 0.028, 0.008, 0.024,\ 0.002,\ 0.008,\ 0.083,\ 0.574]$$

注：π 表示混合权重，μ 表示均值，σ表示标准差。总共有 11 个组件，所得分布经过 $\frac{1}{1+e^{-x}}$ 映射，以保证动作边界。图5展示了从该分布中抽取的一个样本。与其他分布相比，该分布被设计为具有更多众数，以便在我们的实验中提供更多多样性。

A.5 训练集与测试集

对于*WetChicken*、*Pendulum-v0* 和*Hopper-v2* ，我们分别收集了训练集和测试集的回放缓冲区。为确保两个集合具有多样性，测试集通过训练好的软演员-评论家策略收集，而训练集则通过随机策略收集。该软演员-评论家策略在以下代码仓库中训练：https://github.com/pranz24/pytorch-soft-actor-critic。对于异方差 和双峰 ，训练集按上述方式收集，而测试集则通过均匀随机采样收集。

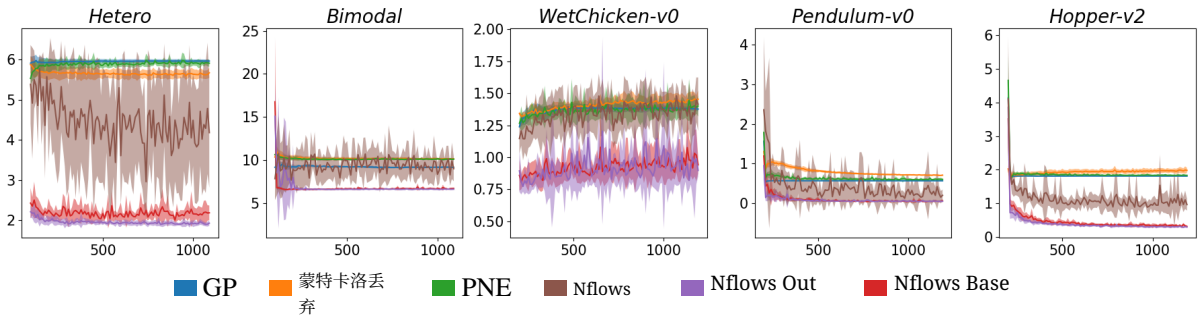

图6：随着数据逐步加入训练集，在随机抽取的50个测试集输入上的均值均方根误差。

Env	采集批次	GP	PNEs	蒙特卡洛丢弃	Nflows	Nflows Out	Nflows Base
异方差	10	-2.08±0.02	**1.01±0.09**	**0.9±0.19**	-0.04±0.16	**0.98±0.2**	**1.04±0.21**
	25	-2.06±0.01	**1.07±0.08**	**0.97±0.14**	0.25±0.4	**1.18±0.18**	**1.11±0.12**
	50	-2.06±0.01	1.13±0.03	1.02±0.12	0.23±0.14	**1.33±0.11**	**1.21±0.11**
	100	-2.06±0.01	**1.23±0.06**	1.1±0.1	0.61±0.36	**1.32±0.09**	**1.25±0.07**
双峰	10	-4.97±0.04	0.62±0.04	0.58±0.05	-1.3e7.0±3.7e7	-1.82±7.76	**1.13±0.18**
	25	-5.0±0.03	0.64±0.03	0.61±0.03	-3.3e3±9.5e3	**1.37±0.04**	**1.38±0.04**
	50	-5.0±0.06	0.67±0.03	0.62±0.03	0.42±0.46	**1.4±0.05**	**1.45±0.04**
	100	-4.96±0.03	0.68±0.02	0.64±0.03	0.56±0.3	**1.46±0.02**	**1.47±0.01**
湿鸡	10	0.17±0.19	**1.22±0.23**	0.44±0.16	0.62±0.84	-7.3±6.98	-0.77±3.12
	25	0.26±0.06	**1.29±0.22**	0.65±0.12	0.5±0.67	-0.11±3.03	**1.77±1.52**
	50	0.28±0.05	1.27±0.29	0.81±0.05	0.63±0.57	**1.9±0.36**	**2.75±0.99**
	100	0.31±0.01	1.19±0.3	0.87±0.2	0.81±0.67	**1.86±1.36**	**2.49±1.15**
Pendulum-v0	10	3.05±0.0	**6.11±0.59**	2.49±0.25	-79.21±106.47	-0.95±13.34	5.74±3.07
	25	3.07±0.0	7.4±0.67	3.46±0.31	-42.66±73.4	**8.92±1.1**	**9.27±1.68**
	50	3.08±0.0	7.5±0.78	4.12±0.18	3.93±7.02	**9.78±2.56**	**10.57±0.92**
	100	3.1±0.0	7.72±0.72	4.58±0.1	7.86±1.54	**9.82±1.82**	**11.27±1.0**
Hopper-v2	10	**30.5±0.36**	17.52±1.14	6.92±0.85	-33.35±28.65	19.94±4.18	14.01±2.32
	25	**32.4±0.08**	21.84±0.76	7.06±0.93	-69.32±139.11	**31.03±1.59**	24.42±1.76
	50	**33.0±0.07**	22.32±1.66	7.66±1.11	-4.39±8.12	**31.87±5.13**	28.1±0.91
	100	**33.69±0.05**	24.12±1.13	8.02±1.29	5.4±4.7	**33.48±1.13**	29.92±1.35

表4：不同采集批次下训练期间留出测试集的对数似然。实验采用了十个不同的随机种子，结果以均值加减一个标准差表示。

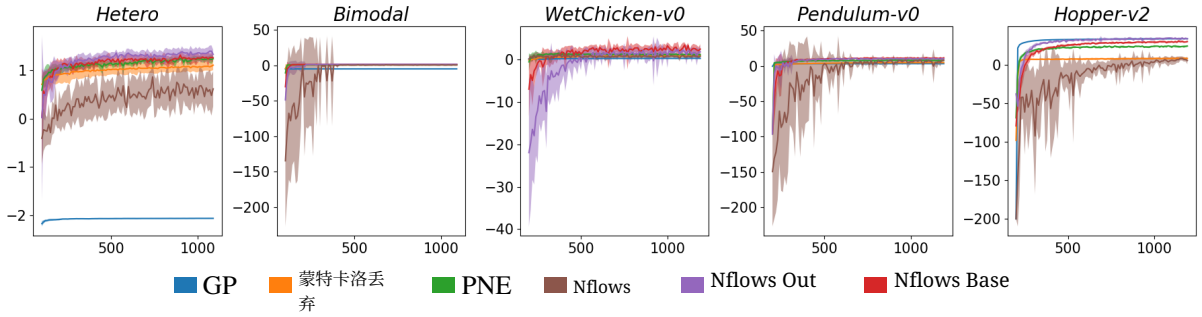

图7：随着数据不断加入训练集，在随机抽取的50个测试集输入上的平均对数似然。

A.6 补充结果

除了文中报告的KL指标外，我们还使用均方根误差和对数似然评估了我们的方法。均方根误差

结果见表4以及图6中的主动学习曲线。在所有情况下，Nflows Out 和 Nflows Base 的表现都优于现有方法。不过，对于每个模型而言，湿鸡 环境似乎都特别难以降低

随着获取的数据增多，其均方根误差（RMSE）仍难以下降。对于 PNE、蒙特卡洛丢弃和高斯过程，KL散度也呈现出类似的情况。我们认为这是因为湿鸡 具有最丰富的随机性，既有异方差性，也有多模态性，因此难以建模。

对数似然结果见表4，主动学习曲线见图7。与之前一样，除了*Hopper-v2* 环境外，Nflows Out 和 Nflows Base 的表现都优于其他基线模型。我们认为，高斯过程在这种情况下表现同样出色，因为噪声是同方差的。尽管噪声并非高斯噪声，高斯近似仍足够有效。

我们认为，纳入均方根误差和对数似然评估是良好的做法，因为它们很常见。不过，我们发现 KL 散度是最合适的评估指标，因为我们最关注分布拟合。为了出于安全考虑更好地捕捉罕见事件，我们希望能够准确捕捉众数。Nflows Out 和 Nflows Base 在这三项指标上的表现都更佳。

A.7 采集准则

除了将我们的模型与基线方法进行比较验证外，我们还评估了不同的采集准则。图8展示了 Nflows Out 在双峰环境下，三项指标对应的不同学习曲线。采用认知不确定性优于其他所有采集准则。请注意，通过采集新的数据点，偶然不确定性似乎并未改善我们的模型。这是因为训练集中偶然不确定性较高，因此采集到的数据仍来自同一区域。

图9展示了 Nflows Base 的相同学习曲线。在这组图中，我们可以看到，在基分布中计算的认知不确定性（基础分布认知不确定性）与在输出分布中计算的认知不确定性（输出分布认知不确定性）表现非常相似。因此，这验证了使用基分布估计不确定性的做法。两幅图都表明，随机累积数据的效果优于随机累积偶然不确定性和总不确定性。

A.8 蒙特卡洛：高维

可以把蒙特卡洛估计想象成：在一个已知面积为 A 的盒子里随机投掷飞镖，再将 A 乘以落在感兴趣函数下方的飞镖所占比例。在高维空间中，可以把它想象成随机向超立方体投掷飞镖，计算落入超球体的飞镖所占的比例。随着维数 d 增加，超球体体积与超立方体体积之比趋近于零。

证明。 我们希望证明 $\lim_{d\to\infty} \frac{V(S)}{V(C)} = 0$，其中$V(S)$ 和 $V(C)$ 分别是超球体和超立方体的体积。令 R 表示超球体的半径和超立方体的边长。注意，我们选择的是能够装入超立方体的最大超球体

我们的超立方体中。因此，

$$\begin{aligned}\lim_{d\to\infty}\frac{V(S)}{V(C)} &= \lim_{d\to\infty}\frac{\frac{R^d\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}}{R^d}\\ &= \lim_{d\to\infty}\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}\\ &= \lim_{d\to\infty}\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\frac{d}{2}\Gamma(\frac{d}{2})} \qquad (20)\\ &= 0 \qquad (21)\end{aligned}$$

利用伽马函数的性质可以得到第（20）行，而利用 lim ( )，其中 是一个常数这一事实可以得到第（ 21 $_{d\to\infty}\Gamma\ d\ >>$ ）行。 □

a^d a

因此，在高维情况下，需要更多样本才能获得准确的估计，因为将飞镖投进超球体会更加困难。图11展示了蒙特卡洛方法在高维情况下的误差。随着维度数量增加，蒙特卡洛估计的熵与真实熵之间的误差也随之增大。此外，我们展示了 Nflows Base 相较于 Nflows Out 的节省时间。这一点可见于表5。

A.9 偶然不确定性与认知不确定性

如果掷一枚公平骰子，其概率质量函数（PMF）是已知的，因此所有不确定性都是已知的。这个例子代表偶然不确定性。对于一枚重量未知的骰子，其 PMF 是未知的，但可以通过样本进行估计。这是认知不确定性的一个例子。图10展示了不同加权骰子实验中的四种不确定性情景。每张图都描绘了由不同颜色表示的三个模型：

Env	节省时间
异方差	44.64±1.18
双峰	44.45±0.84
湿鸡	49.00±5.42
Pendulum-v0	64.77±5.06
Hopper-v2	161.11±6.59

表5：Nflows Base 与 Nflows Out 在 10 个随机种子下运行一次不确定性估计所节省的时间（秒）。报告均值加减一个标准差。

（a）展示了一个低认知不确定性和低偶然不确定性的示例。三个模型的结果一致，且它们的概率质量函数将概率质量集中于一个结果。（b）描绘了一个高认知不确定性和低偶然不确定性的示例。三个模型的结果不一致，且它们的概率质量函数将概率质量集中于一个结果（2、3 或 4）。（c）展示了一个低认知不确定性和高偶然不确定性的示例。三个模型的结果一致，且它们的概率质量函数将概率质量均等地分配给每个结果。

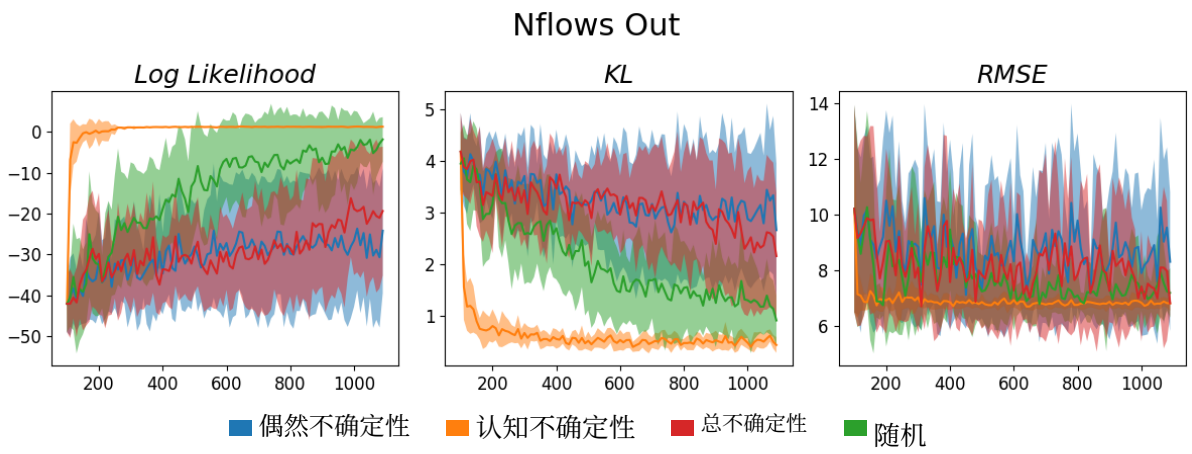

图8：双峰环境中使用 Nflows Out 时，各项指标的主动学习曲线。每种颜色代表不同的采集准则。

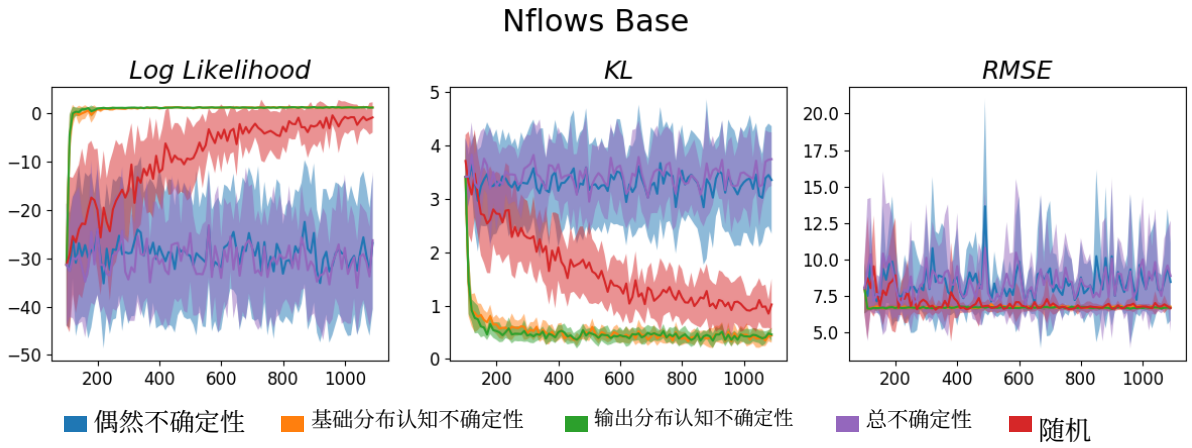

图9：双峰环境中使用 Nflows Base 时各项指标的主动学习曲线。每种颜色代表一种不同的采集准则。

（d）展示了一个高认知不确定性和高偶然不确定性的示例。三个模型的结果不一致，且它们的概率质量函数将概率质量分布于所有可能的结果。

因此，为了高效收集数据，最好优先收集图（b）和（d）所示区域的数据，而不是图（a）和（c）所示区域的数据。尽管图（c）的熵很高，但由于模型之间的预测一致，更多数据不太可能改善模型。

A.10 互信息在微分同胚下不变

定理 A.1。设 $y = g(b)$，其中 g 是一个微分同胚，即它是一个可微双射，且其逆映射也可微。那么 $I(Y, W) = I(B, W)$，其中 W 是表示集成分量的随机变量。

证明。在概率中应用变量替换公式可得：

$$p_Y(y) = p_B(g^{-1}(y))|\det(J_{g^{-1}}(y))|$$
$$p_{Y,W}(y,w) = p_{B,W}(g^{-1}(y), W)|\det(J_{g^{-1}}(y))|$$

应用这些定义，

$$\begin{aligned} I(Y,W) &= \sum_w \int_y p_{Y,W}(y,w) \log \frac{p_{Y,W}(y,w)}{p_Y(y)p_W(w)} dy \\ &= \sum_w \int_b p_{B,W}(b,w) \log \frac{p_{B,W}(b,w)|\det(J_{g^{-1}}(y))|}{p_Y(y)p_W(w)} db \\ &= \sum_w \int_b p_{B,W}(b,w) \log \frac{p_{B,W}(b,w)}{p_B(b)p_W(w)} db \\ &= I(B,W). \end{aligned}$$

□

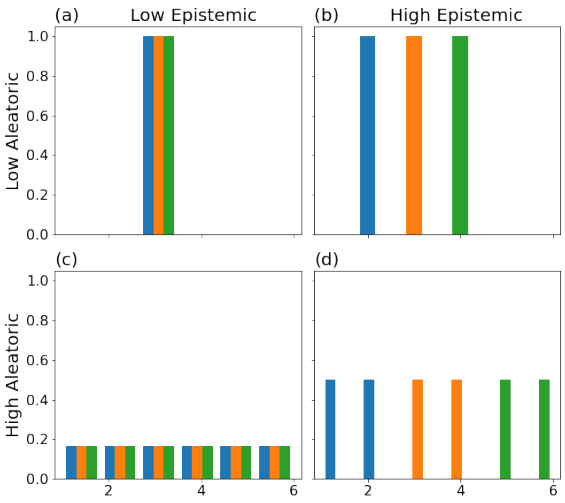

图10：每种颜色代表一种模型在4种不同加权骰子实验中的概率质量函数。

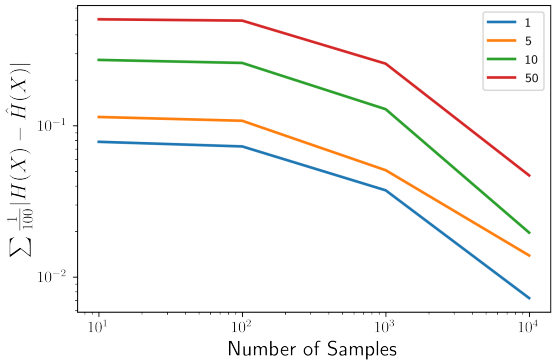

图11：随着维度增加，使用ˆ基于采样的方法 $H(X)$与解析方法$H(X)$估计 Nflows Base 熵时的误差，采用双对数尺度。请注意，结果基于100个随机种子运行并取平均。