arXiv:2602.05246v1 [stat.AP] 5 Feb 2026

面向可扩展跟驰模型校准的主动仿真推断

Menglin Kong、Chengyuan Zhang与Lijun Sun

摘要——**可信的微观交通仿真要求跟驰模型既能刻画平均响应，也能刻画在不同驾驶员与情境中观察到的显著变异性。然而，大多数数据驱动校准仍是确定性的，仅产生单一的最佳拟合参数向量，对不确定性感知预测、风险敏感评估以及群体层面仿真的指导有限。贝叶斯校准通过推断参数上的后验分布来弥补这一不足，但马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）等逐轨迹采样方法对于现代大规模自然驾驶数据集在计算上不可行。本文提出一种面向可扩展跟驰模型校准的主动仿真推断框架。该方法结合了（i）带有两种残差过程备选方案的残差增强跟驰模拟器，以及（ii）摊销条件密度估计器，后者将观测到的领航车–跟随车轨迹在测试时经一次前向传播直接映射为模型参数上的驾驶员特定后验。为降低训练期间的模拟成本，我们引入一种联合主动设计策略，一并选择信息丰富的参数提议与具有代表性的驾驶情境，使模拟聚焦于当前推断模型最不确定之处，同时保持真实性。在HighD数据集上的实验表明，相对于贝叶斯校准基线方法，预测精度更高，模拟轨迹分布与观测轨迹分布更为吻合；收敛性与消融研究支持了所提出设计选择的稳健性。该框架能够实现可扩展、具有不确定性感知的驾驶员群体建模，服务于交通流仿真与风险敏感的交通运输分析。**

索引词—**基于模拟的推断、跟驰、驾驶员行为建模、摊销贝叶斯推断、神经后验估计、模型校准**

I. 引言

人类跟驰行为本质上具有随机性和异质性。即使前车轨迹和道路条件相似，不同驾驶员也可能有不同反应；同一驾驶员也可能随时间变化，这源于感知与反应噪声、注意力波动、个体驾驶风格、未观测情境，以及观测轨迹中的测量误差 [1]–[2]。跟驰模型以紧凑、参数化的形式表示纵向交互，因此是微观交通仿真的核心构件 [3]。它们是高级驾驶辅助系统（ADAS）和自动驾驶车辆安全性评估、混合交通分析以及政策评估的基础。在这些应用中，仿真的可信度不仅取决于能否匹配平均行为，还取决于能否捕捉驾驶员群体中的不确定性和尾部结果。

M. Kong、C. Zhang 和 L. Sun 任职于加拿大魁北克省蒙特利尔麦吉尔大学土木工程系，邮编 H3A 0C3。通讯作者：Chengyuan Zhang（电子邮件：enzozcy@gmail.com）。

校准面临的一项核心挑战是不可辨识性：同一条观测轨迹往往可以由多个合理的参数集解释 [4], [5]。因此，对于下游仿真和决策而言，量化参数不确定性并通过前向仿真传播这种不确定性十分重要，而不是只报告单个最佳拟合估计。然而，大多数实际校准仍依赖确定性优化：先选定拟合优度准则，再通过最小化仿真轨迹与观测轨迹之间的偏差，得到单个参数向量 [5]–[7]。实践中，结果可能对误差度量、时间对齐、加权和拟合时域等建模选择十分敏感 [7], [8], ；而在构建驾驶员群体时，还必须针对数千条轨迹重复进行同样的非凸校准。这些局限促使人们开发可扩展的校准方法，使其能够考虑不确定性并适用于风险敏感评估。

贝叶斯校准通过将模型参数 $\boldsymbol{\theta}$ 视为随机变量，并以观测到的驾驶数据 $\mathbf{x}$ 为条件进行推断，从而得到后验分布 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x})$ [9], [10]。后验分布能够实现不确定性量化、参数相关性分析和可辨识性诊断，而这些通常难以通过点估计获得。然而，这些研究中的标准贝叶斯工作流程通常需要逐轨迹采样（例如马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）），对于包含大量驾驶员和窗口的现代自然驾驶数据集而言，计算成本高得难以承受。这种可扩展性差距促使研究者采用摊销式基于模拟的推断：离线训练一个学习得到的条件密度估计器，随后便可在测试时以几乎零额外成本为新轨迹生成后验样本 [11]–[13]。

为弥合这一差距，我们提出主动基于模拟的校准（ASBC），将摊销后验推断与主动模拟设计相结合，使大规模的不确定性感知跟驰校准成为现实。如图 1 所示，ASBC 在线下训练一个可复用的神经后验估计器，从而避免在测试时针对每个驱动因素进行采样。给定观测到的领航车–跟随车轨迹 $\mathbf{x}$，ASBC 将其编码为紧凑的上下文表示，并使用条件归一化流 [14] 高效生成 $\boldsymbol{\theta}$的后验样本。为减少训练所需的模拟预算，ASBC 通过联合选择参数提议和具有代表性的前车轨迹窗口，主动获取信息丰富的参数–场景对，将模拟集中于当前估计器最不确定、同时仍符合实际的区域。

所提出的框架通过将摊销推断与样本高效的模拟设计相结合，使随机跟驰校准在大规模下切实可行。它能够得到驾驶员特定

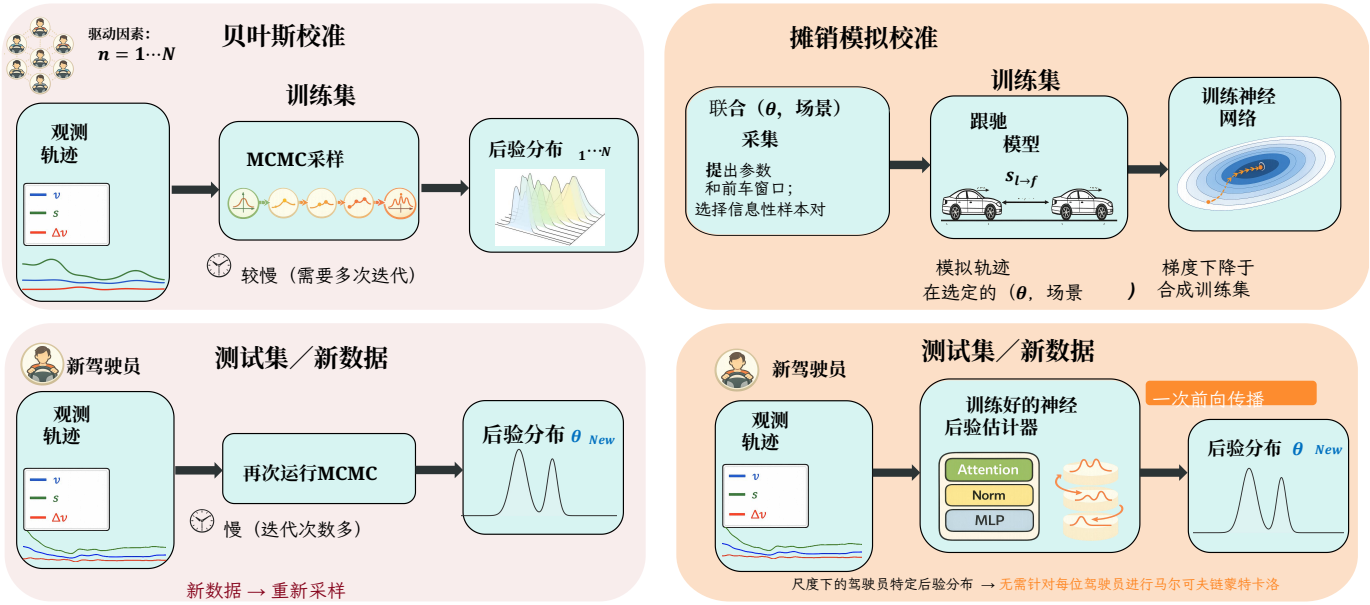

图 1：经典逐轨迹贝叶斯标定与 ASBC 的比较。**左图：**通过对每条轨迹运行马尔可夫链蒙特卡洛，获取每位驾驶员的后验分布；有新数据到达时重新运行。**右图：** 通过主动联合参数-场景采集训练一次，然后通过一次前向传播推断驾驶员特定后验分布。

后验分布，并可将其带入下游仿真、预测和风险导向评估；在这些场景中，系统层面的结论取决于异质性，而非单一的最佳拟合标定。

我们的主要贡献如下：

- **可扩展的不确定性感知标定：**我们提出ASBC，将贝叶斯校准进行摊销，从而在测试时仅通过一次前向传播，即可从观测轨迹推断驾驶员特定的后验分布。
- **联合主动仿真设计：**我们开发了一种联合采集策略，用于选择参数提议和前车场景窗口，从而在固定模拟预算下提高样本效率。
- **实证验证：**我们在HighD数据集上评估ASBC，并提供收敛性、消融、鲁棒性以及不确定性校准分析。

本文其余部分组织如下。第二节回顾相关工作。第三节介绍ASBC，包括残差增强仿真器、摊销后验推断和联合主动采集。第四节描述实验设置与评估方案。第五节给出结果与诊断分析。最后，第六节总结局限性与未来方向。

II. 相关工作

我们的工作处于以下两个领域的交汇点：(i) 跟驰模型校准；(ii) 摊销式基于模拟的推断（SBI）。传统校准主要针对每条轨迹进行确定性拟合，而贝叶斯变体虽能量化不确定性，但通常计算开销过大，无法大规模地逐个驾驶员运行。与此同时，SBI 借助学习得到的条件密度模型，可在测试时快速估计后验分布，但标准方法假设数据生成情境固定，而且仍可能需要大量模拟。综上，现有研究仍缺乏一种可扩展的方法，既能获得驾驶员特定的后验分布，又能主动控制模拟预算 并选择信息丰富的驾驶情境（场景），而非将场景视为固定不变；我们的框架通过结合摊销式贝叶斯校准与参数—场景空间上的主动模拟设计来解决这一问题。

A. 跟驰模型校准

跟驰校准通常被表述为一个优化问题：对于给定的跟驰规律和观测轨迹，通过最小化模拟运动与观测运动之间的偏差来拟合单一参数向量。即使对于智能驾驶员模型（IDM）等广泛使用的模型，结果也可能对所选损失函数、噪声模型和拟合流程较为敏感 [4], [15]。因此，许多研究强调稳健的搜索程序和计算加速方法（例如代理模型或基于梯度的加速方法），以缓解非凸性和模拟器成本 [6], [16]–[18]。然而，这些方法仍然给出点估计，并且必须针对每个驱动因素重复执行，从而在现实噪声和局部最优条件下限制了可扩展性与稳健性 [7]。

贝叶斯校准以驾驶员参数的后验分布取代点估计。早期研究将基于马尔可夫链蒙特卡洛的随机校准应用于跟驰模型 [19]，，而近期研究则纳入层次结构和时间相关残差，以更好地捕捉驾驶员间差异和轨迹噪声 [9], [10]。研究者还通过近似贝叶斯计算（ABC），探索了随机和混合跟驰场景下的无似然贝叶斯校准 [20], [21]。尽管不确定性

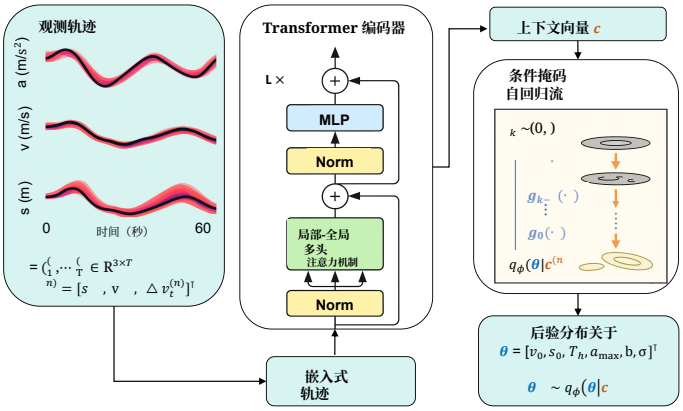

图 2：ASBC 中的摊销测试时推断模块。该模块的训练由仿真驱动，并依赖于采用联合参数-场景采集的主动学习循环（算法 1）。

量化能力有所提升，这些贝叶斯方法和无似然方法通常仍然计算开销很大，因为推断是逐条轨迹进行的，和/或需要对模拟器进行大量评估。以往采用代理模型辅助和主动学习的思路降低了成本 [22], [23], ，但并未完全消除逐条轨迹推断，且通常未将场景选择视为首要设计变量。

B. 摊销推断与后验估计

摊销推断通过离线训练推断模型，使其能够在测试时 [24] 快速对新观测进行后验估计。基于模拟的推断通过从模拟得到的参数—数据对中学习条件密度模型，并利用该模型在没有显式似然的情况下近似后验分布，从而实现这一思路 [12], [25], [26]。SNPE 等方法使用神经密度估计器（包括归一化流）学习灵活的后验分布，并可按序贯方式运行，将模拟集中在参数空间中信息丰富的区域 [11], [13], [27]。

模拟成本是一个关键的实际限制，因此需要采用主动设计策略，自适应地选择模拟，以最大化信息增益或以其他方式提高样本效率 [28]–[30]。然而，大多数主动式基于模拟的推断研究都在固定的实验上下文中选择要模拟的参数。相比之下，跟驰数据本质上依赖于场景：相同的驾驶员参数在不同的前车轨迹和交通状态下可能表现不同。因此，我们的方法将主动模拟选择扩展到参数—场景联合空间，从而能够高效训练针对跟驰校准量身定制的摊销后验估计器。

III. 方法论

本节介绍**ASBC**，这是一种用于跟驰模型随机校准的主动式基于模拟的框架。给定观测轨迹$\mathbf{x}$，我们推断驾驶员特定的参数后验分布$\boldsymbol{\theta}$，并高效地抽取后验样本，从而通过前向仿真传播不确定性以生成随机展开轨迹，以及安全性和性能指标的分布。

该流程由三个组件构成一个闭环：(i) 残差增强型 IDM，在两种残差假设下定义校准模型和前向模拟器（§III-A）；(ii) 神经后验估计器，将 $\mathbf{x}$ 编码为上下文向量，并通过条件归一化流生成 $\boldsymbol{\theta}$ 的后验样本，从而实现摊销推断（§III-B）；(iii) 主动模拟设计模块，通过选择具有信息量的训练查询来减少模拟浪费（§III-C）。这些组件协同作用，使得能够针对大型轨迹数据集进行可扩展的驾驶员特定后验采样。图 2 聚焦于测试时推断模块，而包含联合参数–场景采集的完整训练循环则总结于算法 1。

A. 校准模型：残差增强型 *IDM*

本节介绍作为我们所用校准模型和前向模拟器的残差增强型 IDM。我们保留确定性 IDM 核心，并引入加性残差加速度项，以捕捉观测轨迹与模拟轨迹之间无法解释的差异。这一随机设定用于校准和不确定性传播，并不意味着真实驾驶轨迹恰好由该模型生成。给定初始跟车状态以及观测窗口内的外生前车输入序列，残差增强型 IDM 定义了一个前向模拟器，通过 §III-A4 中的运动学更新，将参数 $\boldsymbol{\theta}$ 映射为轨迹 $\mathbf{x}$。

1）符号说明：在离散时间步 t，跟车状态为$\mathbf{h}_t = [\, s_t,\ v_t,\ \Delta v_t \,]^\top$，其中 s_t 是与前车的间距，v_t 是后车速度，而 $\Delta v_t = v_t - v_{\ell,\,t}$ 是相对于前车速度的相对速度$v_{\ell,\,t}$。我们用 $\boldsymbol{\ell}_t$表示（外生的）前车输入，其中包括 $v_{\ell,\,t}$ 作为驾驶刺激，并将其在观测窗口内汇总为 $\boldsymbol{\ell}_{\text{lead}} = (\boldsymbol{\ell}_1,\ \ldots,\ \boldsymbol{\ell}_T)$。相应的观测到的跟车轨迹为$\mathbf{x} = (\mathbf{h}_1,\ \ldots,\ \mathbf{h}_T)$，其时间与 $\boldsymbol{\ell}_{\text{lead}}$ 对齐。全文中，$\boldsymbol{\ell}_{\text{lead}}$均视为模拟器的已知输入，而$\mathbf{x}$ 则通过从初始状态$\mathbf{h}_1$开始滚动状态更新得到。

我们推断参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的轨迹特定后验分布。在这两个变体中，$\boldsymbol{\theta}$ 都包含标准 IDM 参数和额外的残差参数。

2）确定性 *IDM* 核心：确定性 IDM 加速度 a_t^{IDM}由 [3]定义为

$$a_t^{\text{IDM}} = a_{\max}\left[1 - \left(\frac{v_t}{v_0}\right)^{\delta} - \left(\frac{s^\star(v_t, \Delta v_t)}{s_t}\right)^2\right], \quad (1)$$

$$s^\star(v, \Delta v) = s_0 + vT + \frac{v\Delta v}{2\sqrt{a_{\max} b}}, \quad (2)$$

其中，v_0 为期望速度，s_0 为拥堵距离，T 为期望时间车头时距，$a_{\max}$ 为最大加速度，b为舒适减速度；按照惯例，我们固定 $\delta = 4$ 。

3) 残差模型：独立同分布与时间相关：诸如智能驾驶员模型（IDM）这类确定性跟驰规律能够捕捉平均行为，但无法完整解释自然驾驶轨迹。测量噪声、未观测到的驱动因素以及模型失配会引入额外变异，这些变异也可能

具有时间相关性。忽略这一未解释成分，会使校准对观测窗口变得敏感，并导致下游仿真中的不确定性传播过于自信。

遵循贝叶斯IDM（B-IDM）和记忆增强 IDM（MA-IDM）的建模思路， [9], 我们通过加性残差加速度过程来表示观测加速度与 IDM 预测加速度之间的偏差，

$$a_t = a_t^{\mathrm{IDM}} + r_t, \tag{3}$$

这种方法能以直接且精简的方式，在保留 IDM 核心的同时吸收状态更新中的未建模效应。基于这一残差增强形式，我们开发了一套摊销推断与主动模拟设计流程，用于大规模开展驾驶员特定的后验采样。我们考虑了两种残差假设：独立同分布高斯基线，以及用于敏感性分析的 Mat´ern-$5/2$ 时间相关替代方案。

a) ASBC-Gaussian（独立同分布残差加速度）：我们假设残差加速度独立同分布

$$r_t \equiv \varepsilon_t, \qquad \varepsilon_t \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2), \quad \text{i.i.d. across } t. \tag{4}$$

这一简单基线仿真效率高，并符合 B-IDM [9] 中常用的独立同分布残差假设。

b) ASBC-Mat´ern（*Mat´ern*-$5/2$ 相关残差加速度）：为体现时间相关的偏差，我们还考虑了一种相关残差模型。我们将 $r(t)$ 建模为采用 Mat´ern-$5/2$核的零均值 GP,

$$r(t) \sim \mathcal{GP}(0,\ k_{\mathrm{M52}}(t, t'; \sigma, \ell)), \tag{5}$$

其中

$$k_{\mathrm{M52}}(t,t') = \sigma^2 \left(1 + \frac{\sqrt{5}\,|t-t'|}{\ell} + \frac{5(t-t')^2}{3\ell^2}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5}\,|t-t'|}{\ell}\right), \tag{6}$$

且 ℓ 以秒为单位进行测量。此选项沿用了 MA-IDM [9]利用相关残差捕捉偏差中的序列依赖的做法。

4) 随机运动学：给定前车速度 $v_{\ell,\ t}$ 以及由（3）得到的加速度 a_t ，我们通过以下方式更新跟随车辆的速度和间距：

$$v_{t+1} = v_t + a_t\,\Delta t, \tag{7}$$

$$s_{t+1} = s_t + (v_{\ell,t} - v_t)\,\Delta t - \tfrac{1}{2} a_t\,\Delta t^2. \tag{8}$$

这些更新定义了一个快速前向模拟器。在任一残差假设下，给定 $\boldsymbol{\theta}$、前车输入序列和初始状态，迭代执行（3）–（8）即可生成完整轨迹 $\mathbf{x}$。

*5) IDM*参数和残差超参数的先验：我们在对数空间中设置弱信息先验以确保取值为正，这遵循了 [9] 中的做法。令确定性的 IDM 参数为 $\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{IDM}} = [v_0, s_0, T, a_{\max}, b]^\top$。我们在对数空间中使用对角对数正态先验，其中心设为通常推荐的 IDM 取值 $\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{rec}} = [33.3,\ 2.0,\ 1.6,\ 1.5,\ 1.67]$ [31], 并采用较大的方差以涵盖现实中的驾驶员间异质性；同时，我们还将支持范围限制在物理上合理的范围内，以避免不稳定仿真。实际操作中，通过在仿真过程中拒绝超出可行范围的抽样来实现这种截断。

表I：数据、编码和推断中所用符号说明的汇总。

符号	描述
时长$t \in \mathbb{R}^3$	时间 t 的跟车状态：间距 s_t、速度 v_t，以及相对速度 Δv_t
$\boldsymbol{\ell}_t$	时间 t的外生领导车辆输入，用于定义驾驶情境
$\mathbf{x} = (\mathbf{h}_1, \ldots, \mathbf{h}_T)$	长度为 T 的观测到的跟车轨迹
$\boldsymbol{\ell}_{\mathrm{lead}} = (\boldsymbol{\ell}_1, \ldots, \boldsymbol{\ell}_T)$	与 $\mathbf{x}$ 对齐的前车轨迹，视为已知作为模拟器的输入
$\mathcal{X} = \{\mathbf{x}^{(n)}\}_{n=1}^N$	N 观测到的跟随者轨迹数据集
$\mathcal{L} = \{\boldsymbol{\ell}^{(n)}\}_{n=1}^N$	完整长度的外生前车轨迹数据集与 $\mathcal{X}$ 对齐
L	从 $\boldsymbol{\ell}^{(n)}$ 提取的前车轨迹窗口，用作主动采集中的场景上下文
$\boldsymbol{\theta}^{(n)}$	轨迹 n的驾驶员特定潜在参数；维度取决于残差模型
$f_\psi(\cdot)$	将观测轨迹映射到上下文向量 $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^d$
$\mathbf{c}^{(n)} = f_\psi(\mathbf{x}^{(n)})$	轨迹 n 的上下文嵌入
$q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x})$	在给定 $\boldsymbol{\theta}$ 的条件下的摊销后验估计器观测

为对无法解释的加速度变异性建模，我们引入残差超参数，并将其纳入完整参数向量 $\boldsymbol{\theta}$。对于 ASBC-Gaussian，我们使用

$$\boldsymbol{\theta} = [\,\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{IDM}},\ \sigma\,]^\top,$$

其中， σ 为残差尺度，且服从对数正态先验。对于 ASBC-Mat´ern，我们使用

$$\boldsymbol{\theta} = [\,\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{IDM}},\ \sigma,\ \ell\,]^\top,$$

其中， ℓ 为相关长度尺度（单位：秒）；我们对 σ 和 ℓ 均采用对数正态先验。先验配置和截断范围的具体数值设置见附录 H。

B. 神经后验估计（*NPE*）

给定第 III-A 节中的残差增强校准模型，我们的目标是根据观测到的跟车轨迹，推断参数的轨迹特定后验分布。具体而言，对于每个观测 $\mathbf{x}^{(n)}$，我们旨在使用单一摊销模型 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x})$ 近似后验分布 $p(\boldsymbol{\theta}^{(n)} \mid \mathbf{x}^{(n)})$。训练完成后，该估计器可以通过快速前向传播为新轨迹生成后验样本，从而避免逐轨迹采样或优化。

相关的贝叶斯校准研究考虑了汇总式建模和非汇总式表述 [9]。汇总式建模利用所有跟车对学习单一后验分布，统计效率较高，但可能模糊个体异质性。非汇总式表述则针对每个驱动因素或每个跟车对进行推断，这更符合个体化行为，但在大型数据集上重复执行时成本较高。我们的摊销后验估计器面向非汇总式表述的使用场景，同时通过单一训练完成的推断网络，在整个数据集之间共享统计信息。

我们的估计器分为两个阶段。轨迹编码器 f_ψ将每条观测轨迹映射为定维上下文表示。在此上下文的条件下，条件归一化流对后验分布 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})$进行建模，并支持

在 §III-C 中进行高效采样，以用于推断和采集。表 II 列出了该方法中使用的主要符号。

1）轨迹编码器 f_ψ：为支持对变长观测进行摊销推断，我们将每条跟随车辆轨迹 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{T\times 3}$ 编码为固定维度的上下文向量

$$\mathbf{c} = f_\psi(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^d.$$

我们使用 f_ψ 实现该方法，采用 Transformer 式序列编码器 [32], [33] ，以捕捉观测窗口内的局部时间模式和长程依赖关系。由此得到的上下文向量$\mathbf{c}$ 概括轨迹级响应特征，并作为 §III-B2 中后验流的条件输入。编码器架构的详细信息见附录 A。

2）条件掩码自回归流：我们使用条件掩码自回归流（MAF） [34]对轨迹条件后验分布进行建模。给定上下文向量$\mathbf{c}$，该流为无约束潜变量向量$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^D$定义灵活的条件密度，记为 $q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c})$。采样过程高效：我们抽取一个基础高斯噪声向量，并应用流的逆变换，得到以$\mathbf{c}$为条件的$\mathbf{u}$ 。同一模型还支持通过标准变量替换公式精确计算 $\log q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c})$。

为满足诸如 IDM参数和残差尺度为正等物理约束，我们通过逐元素双射将 $\mathbf{u}$ 映射到物理参数向量 $\boldsymbol{\theta}$

$$\boldsymbol{\theta} = T(\mathbf{u}) = \mathrm{softplus}(\mathbf{u}) + \varepsilon, \qquad \varepsilon > 0.$$

因此，后验样本通过 $\mathbf{u} \sim q_\phi(\cdot \mid \mathbf{c})$，再经过 $\boldsymbol{\theta} = T(\mathbf{u})$ 获得。需要时，物理空间密度由以下公式计算：

$$\log q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c}) = \log q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c}) - \log \left|\det\left(\tfrac{\partial T(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\right)\right|, \qquad \mathbf{u} = T^{-1}(\boldsymbol{\theta})$$

对于 softplus 变换，雅可比项为对角矩阵。流似然的完整表达式和变换细节见附录 B。

通过蒙特卡洛（*MC*）丢弃率估计认知不确定性：我们使用 MC 丢弃率来近似学习得到的后验模型中的认知不确定性。在推断时启用丢弃率后，我们会得到一组后验评估结果，并将其用于 §III-C 中的采集函数，以识别具有信息价值的参数–场景查询。

3）仿真驱动的训练目标：

基于仿真的训练原理：通常，摊销后验估计通过前向模拟器生成的模拟校准对进行训练。给定参数向量$\boldsymbol{\theta}$ 和外生场景上下文 L（定义为从观测到的领航者轨迹 $\boldsymbol{\ell}_{\text{lead}}$中截取的短时间窗口），模拟器会生成一条合成跟随者轨迹，

$$\boldsymbol{\theta} \sim \tilde{p}(\boldsymbol{\theta}), \qquad \mathbf{x}_{\text{sim}} = \mathrm{Sim}(\boldsymbol{\theta}, L),$$

其中，Sim(·) 表示 §III-A 中的残差增强型 IDM 正向模型，$\tilde{p}(\boldsymbol{\theta})$ 是用于仿真的提议分布。每条仿真轨迹都被映射为上下文嵌入 $\mathbf{c} = f_\psi(\mathbf{x}_{\text{sim}})$，并通过最大化条件对数似然来拟合条件密度模型$q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})$

$$\max_{\psi,\phi} \ \mathbb{E}\Big[\log q_\phi\big(\boldsymbol{\theta} \mid f_\psi(\mathbf{x}_{\text{sim}})\big)\Big], \tag{9}$$

其中，期望是对生成 $(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_{\text{sim}})$ 样本对的模拟过程取的。

序贯训练：我们不采用固定的提议分布进行训练，而是采用 SNPE 过程 [11]。在各轮次中，主动采集模块在 §III-C 中生成新的模拟训练对，并将其添加到容量固定的缓冲区中，随后从缓冲区中抽取小批量数据，通过最大化式（10）来更新编码器和流。

最大似然训练：我们通过最大化缓冲区中模拟样本对的条件对数似然来训练编码器和流：

$$\mathcal{L}(\psi, \phi) = \mathbb{E}_{(\boldsymbol{\theta},\mathbf{c})\sim\mathcal{D}_r}\left[\log q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})\right], \tag{10}$$

其中， $\mathcal{D}_r$ 表示由第r 轮的采集和模拟过程（见 §III-C）所产生的经验分布。该目标是 NPE 中的标准目标，可与在所选模型族 [11]中拟合后验近似联系起来。

优化：式（10）的目标函数关于编码器参数 ψ 和流参数ϕ均可微。我们使用随机梯度方法，在从缓冲区中采样的小批量数据上对其进行优化。

C. 使用联合采集的主动学习

本节介绍用于高效训练摊销后验估计器的主动循环。实际目标是将模拟预算投入最能提升针对特定驱动因素的校准效果之处。每轮都会提出候选参数，将其与多样化的前车窗口场景配对，选择信息量丰富的参数–场景对，在 §III-A 中使用残差增强型 IDM 仿真跟车轨迹，并利用 §III-B3 中的模拟驱动目标函数 (10) 更新编码器和后验流。

a) 循环概述：该循环分为四个步骤：提议更新、联合采集、模拟与编码，以及后验优化。与单独选择参数不同，我们会主动选择参数对 $(\boldsymbol{\theta},\ L)$，以便在信息丰富且具有代表性的驾驶情境下查询参数。固定容量的先进先出（FIFO）缓冲区会存储近期的训练数据对，以稳定各轮次间的再训练过程。

b) 参数的软收缩提议分布：在第 $r = 0$ 轮，从先验分布 $p(\boldsymbol{\theta})$ 中抽取参数，以确保广泛覆盖。对于 $r \geq 1$，我们定义一个软收缩混合提议分布

$$\tilde{p}_r(\boldsymbol{\theta}) \ = \ \lambda_r\, p(\boldsymbol{\theta}) \ + \ (1-\lambda_r)\, \tilde{q}_{r-1}(\boldsymbol{\theta}), \qquad \lambda_r \in [0,1], \tag{11}$$

其中， $\tilde{q}_{r-1}(\boldsymbol{\theta})$ 表示根据当前摊销模型对观测轨迹进行评估后构造的后验信息提议分布。[1]

将 λ_r 逐渐退火至更小的值，可在防止过早集中于少数方案的同时，从探索逐步转向利用。

[1]在实践中，通过从 $q_{\phi_{r-1}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}^{(n)})$ 中为部分观测轨迹抽取后验样本，并池化这些样本以形成经验提议分布，从而构造 $\tilde{q}_{r-1}$ 。从概念上讲，这相当于对所选轨迹子集的逐轨迹后验进行混合。

c) 领航车辆窗口库与代表性：我们维护一个前车窗口库，以覆盖多样的驾驶情境。在 $\mathcal{L}_{\text{real}}$ 中，使用固定的窗口长度和步幅，从观测到的前车轨迹 $\mathcal{L}$ 中提取真实的前车窗口。在第r轮，从一个混合分布中采样前车窗口

$$\mathcal{L}_r \;=\; (1-\alpha_r)\,\mathcal{L}_{\text{real}} \;+\; \alpha_r\,\mathcal{L}_{\text{syn}}, \qquad \alpha_r \in [0,1], \tag{12}$$

其中，$\mathcal{L}_{\text{real}}$ 由从观测到的前车轨迹中提取的窗口组成，$\mathcal{L}_{\text{syn}}$ 由经过轻度增强且保留基本运动学合理性的窗口组成。[2] 每个前车窗口 L 都会映射为一个固定的特征向量 $\varphi(L) \in \mathbb{R}^{d_\ell}$，该向量根据窗口内的前车速度和加速度剖面计算得出（例如，拼接均值、标准差、极值和平均绝对一阶差分等简单汇总统计量）。为提高覆盖度，我们定义一个代表性得分

$$\rho(L) \;=\; \frac{1}{\varepsilon + \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} \big\|\varphi(L) - \varphi(L_{(k)})\big\|_2}, \qquad \varepsilon > 0, \tag{13}$$

其中，$L_{(k)}$ 是特征空间中距离 L 最近的 K 个前车窗口。

d) 参数–场景对的联合采集：在第 r 轮，我们抽取参数候选 $\{\boldsymbol{\theta}_j\}_{j=1}^{N} \sim \tilde{p}_r$ 和前车候选 $\{L_k\}_{k=1}^{N_\ell} \sim \mathcal{L}_r$，并构建候选池 $\mathcal{C}_r = \{(\boldsymbol{\theta}_j,\ L_k)\}$。我们使用基于 ASNPE 风格的 [28] 得分 $\alpha_r(\boldsymbol{\theta})$ 来量化参数不确定性，该得分由后验模型的 MC-丢弃率评估计算得出。直观而言，当当前后验模型在丢弃率作用下对 $\boldsymbol{\theta}$ 给出的密度不稳定或变化很大时，$\alpha_r(\boldsymbol{\theta})$ 的值就会较大，这表明存在认知不确定性。随后，我们使用贪心策略选择配对。令$\mathcal{S}$ 表示当前轮次中已选出的参数–场景对集合，初始值为 $\mathcal{S} = \varnothing$，并在逐一添加配对时更新。我们定义一个联合采集得分

$$s_r(\boldsymbol{\theta}, L) = \alpha_r(\boldsymbol{\theta})\,\rho(L) - \gamma\,\mathrm{DivPen}\big(\mathcal{S} \cup \{(\boldsymbol{\theta}, L)\}\big), \qquad \gamma \geq 0, \tag{14}$$

其中，DivPen(·) 是一种多样性惩罚，用于避免选择联合空间中近乎重复的样本对。[3] 对 $s_r(\boldsymbol{\theta},\ L)$ 进行贪心最大化，可得到一组前 B 个样本对，它们兼具高不确定性、代表性和多样性。

e) 仿真、缓冲与后验优化：对于每个选定的样本对（$\boldsymbol{\theta}_b,\ L_b$），我们在第 III-A 节的残差增强型 IDM 下仿真跟随者轨迹$\mathbf{x}_b = \mathrm{Sim}(\boldsymbol{\theta}_b,\ L_b)$，将其编码为上下文向量 $\mathbf{c}_b = f_\psi(\mathbf{x}_b)$，并将（$\boldsymbol{\theta}_b,\ \mathbf{c}_b$）追加到固定容量的先进先出缓冲区 $\mathcal{D}_r$ 中。追加新批次后，我们丢弃最早的样本以保持缓冲区大小固定，因此 $\mathcal{D}_r$ 在近期模拟样本对上形成经验训练分布。随后，我们通过在从 $\mathcal{D}_r$ 中采样的小批量上最大化（10），更新编码器和后验流。

f) 监测与停止：为评估收敛情况并避免不必要的仿真，我们监测在留出的观测轨迹上计算的验证指标，并在轮次间改进趋于微小时应用提前停止。这为稳定训练以及在不同数据集间进行可复现的比较提供了实用的诊断方法。整体流程总结于算法 1。

[2]我们采用低幅度扰动和简单的时间缩放/扭曲，并结合基于物理的筛选；详情见附录 D。

[3]我们使用领航车辆特征上的核离散度项 $\varphi(L)$，以及参数空间中的重缩放距离来实现 DivPen。

算法 1 采用联合参数–场景采集的 ASBC 训练

1：输入：先验 $p(\boldsymbol{\theta})$；观测数据 $(\mathcal{X}, \mathcal{L})$；模拟器 Sim(·)；轮次 R；B；N_{buf}；每轮配对数；缓冲区容量：初始化：先进先出缓冲区；初始化编码器和后验估计器 (f_ψ, q_ϕ) 预热（先验模拟） 3：对于 $b = 1$ 到 B_0，执行 $\boldsymbol{\theta}_b \sim p(\boldsymbol{\theta})$；$L_b$：采样 ( ) 和一个真实领车窗口：模拟 x Sim(,) 并编码 c (x_b) 6：将 $(\boldsymbol{\theta}_b, \mathrm{c}_b)$ 推入 $\mathcal{D}_0$；如果 $|\mathcal{D}_0| > N_{\text{buf}}$，则丢弃最旧的样本 7：结束循环 8：通过式 (10) 使用来自 $\mathcal{D}_0$ 的小批量训练 (f_ψ, q_ϕ) 主动细化 9：对于 $r = 1$ 到 R，执行 10：更新提议分布 $\tilde{p}_r(\boldsymbol{\theta})$（式 (11)） 11：构建领航车辆窗口候选项 $\mathcal{L}_r$ 和分数 $\rho(L)$（式 (12)–(13)） 12：通过最大化式 (14) 选择 B 对配对 $\{(\boldsymbol{\theta}_b, L_b)\}_{b=1}^{B}$ 13：对于 $b = 1$ 到 B，执行 14：模拟 $\mathrm{x}_b \leftarrow \mathrm{Sim}(\boldsymbol{\theta}_b, L_b)$ 并编码 $\mathrm{c}_b \leftarrow f_\psi(\mathrm{x}_b)$ 15：将 $(\boldsymbol{\theta}_b, \mathrm{c}_b)$ 推入 $\mathcal{D}_r$；如果 $|\mathcal{D}_r| > N_{\text{buf}}$，则丢弃最旧的样本 16：结束循环 17：通过式 (10) 使用来自 $\mathcal{D}_r$ 的小批量更新 (f_ψ, q_ϕ) 18：可选择监控验证指标并提前停止 19：结束循环 20：返回：训练后的 (f_ψ, q_ϕ)，支持快速采样 $\boldsymbol{\theta} \sim q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid f_\psi(\mathrm{x}))$

IV. 实验

本节评估 ASBC，并探讨三个问题：(i) 与成熟的校准基线方法相比，ASBC 在模拟保真度和不确定性量化方面表现如何？(ii) 结果对残差模型（独立同分布高斯与时间相关 Mat´ern-5/2）有多敏感？(iii) 主动学习循环能否以稳定且样本高效的方式提升验证性能，并在收益变得微小时停止？

A. 数据集和预处理

1) 数据集：我们在 HighD数据集 [35], 上进行评估，该数据集提供自然场景下的高速公路轨迹，其中以车道保持跟驰交互为主。我们将轨迹从 25 Hz 降采样至 5 Hz（每五帧保留一帧），得到 $\Delta t = 0.2$ s 的仿真时间步长，并降低重复仿真和训练的成本。这一设置遵循智能驾驶员模型类模型贝叶斯校准中的常见做法 [9]。

2) 领导者–跟随者片段：我们仅保留跟随车辆持续跟踪同一前车的时间区间，以此提取领导者–跟随者片段；前车发生变化时，即开始一个新片段。在每个片段内，我们构建跟车状态 $\mathbf{h}_t = [s_t,\, v_t,\, \Delta v_t]^\top$，以及模拟器所需的时间对齐的前车输入。为获得固定大小的上下文

供编码器使用，我们从每辆跟随车辆中提取一个时长为 T_E 的窗口，并将其作为编码器的输入进行后验推断，从而得到驾驶员特定后验。除非另有说明，我们将 $T_E = 15$ 设为基于编码器历史长度扫描（图 7）得到的值，该值在保持训练时间可控的同时实现了接近饱和的性能。最后，我们舍弃短于 $T_{\min} = 40$ 的片段，以确保校准所需的充足时间上下文。

3）训练/验证/测试集划分：我们按 60%/10%/30% 的比例将片段划分为训练集、验证集和测试集，并按跟随车辆 ID 分层。基于 ID 的划分可减少不同数据集划分间的数据泄漏，并评估模型对未见驾驶员的泛化能力。

B. 评估方案与指标

为确保所有表格和图表可直接比较，我们采用标准化方案评估每种模型变体。在所有评估中，前车轨迹均视为已知的外生输入；通过从学习得到的后验中抽取参数样本，并在相应的残差假设下运行残差增强 IDM 仿真器，来传播不确定性。除非另有说明，所有定量结果均在留出测试集上计算；验证集仅用于监控和提前停止。

a）分窗口短时域仿真：对于每个留出的跟驰对，我们在固定时域的滑动窗口上评估预测性能，窗口步长为 S，每对最多使用 m 个窗口以控制计算量。在 HighD 实验中，$\Delta t = 0.2$ 秒（5 Hz），我们使用 $H = 50$ 和 $S = 20$，对应于 10 秒窗口和 4 秒步长。对于每个窗口，我们将模拟器重置为窗口起始时观测到的跟车状态，并使用对齐的前车片段向前仿真 H 步。这种在窗口起始处重置的设计侧重于评估短时域预测保真度和不确定性，避免长时域漂移主导评分。

b) 点准确性指标：对于每个状态变量 $x \in \{s, v, a\}$，我们计算真实值与后验预测均值之间的均方根误差（RMSE）：

$$\widehat{x}_t = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_t^{(i)}, \qquad \mathrm{RMSE}(x) = \sqrt{\frac{1}{H}\sum_{t=1}^{H}(\widehat{x}_t - x_t)^2}. \tag{15}$$

c) 分布质量指标：为评估完整的预测分布，我们采用能量分数（ES），这是一种适用于基于样本的预测的适当评分规则。对于表示为向量 $y \in \mathbb{R}^d$ 的轨迹片段及预测样本$\{y^{(i)}\}_{i=1}^{n}$，

$$\mathrm{ES}(y) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|y^{(i)} - y\|_2 - \frac{1}{2n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\|y^{(i)} - y^{(j)}\|_2. \tag{16}$$

在实际操作中，我们分别计算 s、 v和 a 的 ES，将每个 H 步时间序列视为一个向量（并在适当情况下报告平均 ES）。ES 越低，表示预测分布越尖锐且与真实分布的对齐程度越高。

C. 可复现性和实现细节

我们报告了复现实验所需的关键设置；完整的超参数表和其他诊断信息见附录 I。完整代码库将在论文发表后公开。

a) 训练和主动循环：我们使用最多$R = 10$ 个主动轮次训练 ASBC，并采用跨轮提前停止。第 0 轮进行先验仿真预热，使用 $B_0 = 4000$ 次抽样。每个主动轮选择并仿真 $B = 2000$ $(\boldsymbol{\theta}, L)$ 对，然后使用 Adam（lr$= 10^{-3}$，batch_size$= 128$）在固定容量的先进先出回放缓冲区上对编码器和条件流进行最多 100 个 epoch 的微调。详细的调度安排（包括提议分布和领航车辆库混合）见附录 G。

b) 提前停止与评估配置：为避免在性能趋于饱和后继续消耗模拟预算，我们根据验证性能按轮次实施提前停止。由于真实轨迹不提供真实参数，验证将在一个固定的合成留出集上进行。该留出集由模拟器生成，包含模拟的 $(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_{\mathrm{sim}})$ 样本对；生成时使用固定的随机种子，并采用与训练相同的模拟器和前车窗口构造。除非另有说明，评估时每对数据使用 $n = 500$ 个后验样本。

c) 数据使用：后验估计器使用残差增强模拟器在前车窗口输入条件下生成的模拟样本对 $(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_{\mathrm{sim}})$ 进行训练。真实轨迹仅用于在主动循环中构造基于后验分布的提议分布，以及计算验证和测试指标。

D. 对比方法

我们将 ASBC 的两种变体与经典的贝叶斯 IDM 校准基线方法进行比较。该比较旨在分别考察：(i) 摊销推断的优势，即在多条轨迹间重复使用单个学习得到的后验估计器；以及 (ii) 残差噪声结构（独立同分布误差与时间相关误差）的影响。

1）我们的方法：**ASBC-Gaussian**。残差增强型 IDM，采用加性独立同分布高斯加速度噪声，并通过所提出的摊销推断和主动设计流程进行训练。

ASBC-Mat´ern。采用相同流程，但残差加速度遵循时间相关的 Mat´ern-$5/2$ 过程，以捕捉持续存在的模型失配。

2）基线方法：**B-IDM（汇总式）**。采用独立同分布高斯加速度噪声的贝叶斯IDM。我们使用汇总式建模（所有驾驶员共享一个全局参数向量），以便于进行数据集级评估。

MA-IDM（汇总式）。记忆增强 IDM [9], ，可对时间相关残差进行建模，相较于 B-IDM，能够更真实地再现 HighD 上的情况。我们同样使用汇总式建模，因为非汇总式贝叶斯校准需要针对每条轨迹/每位驾驶员分别运行马尔可夫链蒙特卡洛，在大规模应用中计算开销较高。

对于这两个基线，我们使用其开源实现（ https://github.com/Chengyuan-Zhang/IDM Bayesian Calib ration.git）。通过从汇总后验中采样 $\boldsymbol{\theta}$，并在留出前车输入下运行相应的残差增强型 IDM，生成预测仿真；所用评估方案与 ASBC 相同。由于后验分布在完成校准后便固定，因此我们仅报告这两个基线各自的一个结果

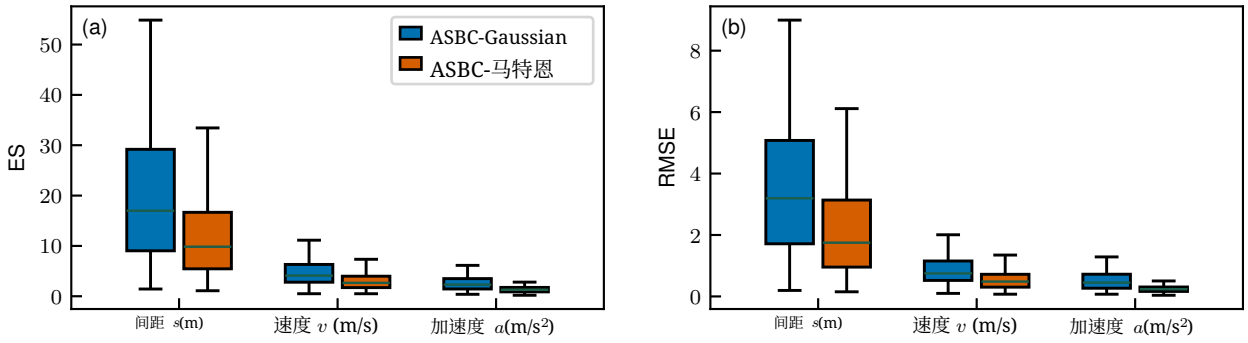

图3：ASBC在HighD上的逐窗口10秒模拟误差分布。(a) 能量分数和(b) 均方根误差，涵盖间距 s (m)、速度v (m/s)和加速度 a (m/s²)。颜色表示ASBC-Gaussian和ASBC-Mat´ern。箱体显示四分位距和中位数。

表II：10秒随机模拟的评估。

方法	均方根误差 ↓			ES ↓		
	s	v	a	s	v	a
ASBC-Gaussian	2.633 ± 0.150	0.627 ± 0.035	0.291 ± 0.018	15.510 ± 1.141	3.571 ± 0.248	1.590 ± 0.093
ASBC-Mat´ern	2.455 ± 0.209	0.628 ± 0.077	0.302 ± 0.031	13.452 ± 0.489	3.367 ± 0.278	1.511 ± 0.179
汇总 MA-IDM	3.381	1.088	0.399	24.591	6.340	2.378
汇总 B-IDM	3.957	1.044	0.439	26.709	7.033	2.744

；重复运行主要反映蒙特卡洛采样噪声，而非不同随机种子和初始化带来的变异。

五、结果与讨论

A. 定量结果

我们首先在 HighD 测试划分上进行窗口化短时域评估，遵循第 IV-B 节中的协议。我们在留出前车输入条件下的 10 秒滚动预测中，同时报告点精度（均方根误差）和分布质量（能量分数，ES）。表II汇总了我们的 ASBC 变体以及汇集式贝叶斯校准基线方法的性能。对于 ASBC，数值以五个随机种子上的均值±标准差报告。总体而言，两种 ASBC 变体在均方根误差和能量分数上均显著优于汇集式基线，表明以上下文为条件的（驱动因素–场景）校准对于大规模实现准确且具备不确定性感知的短时域仿真至关重要。

接下来，我们通过比较 ASBC-Gaussian 与 ASBC-Mat´ern 来分离残差模型的影响。ASBC-Mat´ern 持续提升分布保真度，在全部三个变量（s、 v、 a）上降低能量分数，其中间距s（15.51→13.45）的增益最大。在点精度方面，Mat´ern 模型改善了间距均方根误差（2.63→2.46），同时速度和加速度的均方根误差与之相当。这一模式表明，对时间相关扰动进行建模主要改善了预测分布的匹配程度，即便预测均值仅有适度变化。

总体平均值可能掩盖不同驾驶窗口之间显著的异质性。为明确呈现这种变异性，图 3绘制了两种 ASBC 变体的每个窗口的均方根误差和能量分数分布。以下两点尤为突出。首先，误差分布呈现重尾特征——尤其是在间距 s 方面——这表明有相当一部分窗口确实难以处理（例如突然出现的走走停停过渡）。其次，Mat´ern 残差模型使均方根误差和能量分数均出现系统性的下移，且分布范围更窄。对于间距 s，每个窗口的均方根误差中位数从 3.19 降至 1.75，能量分数中位数从 17 降至 9.84； v 和 a 的能量分数也有类似改善。这些分布层面的结果补充了表II，表明这些改进并非由少数容易处理的窗口驱动。

B. 定性案例研究

为补充窗口级别的汇总结果，我们从 HighD 测试划分中选取一个具有代表性的跟驰对（#426）进行展示。由于 HighD 未提供真实的驾驶员参数，本案例研究并非旨在验证推断参数的正确性，而是有两个目的：(i) 针对观测轨迹进行后验预测检验；(ii) 展示不同的残差假设如何改变驾驶员参数与时间结构化扰动之间对误差的归因。

1) 95% 预测区间下的后验预测展开：图 4(a)–(b) 展示了同一 10 s 评估窗口内的后验预测展开。我们绘制了观测到的跟随者轨迹（间距 s、速度 v_f、加速度 a_f）、后验预测均值，以及根据后验样本计算的 95% 预测区间（PI）。对齐后的前车速度（橙色虚线）被视为已知的外生输入。

两种变体都能跟踪预测均值中的主要短期趋势，但其不确定性随时间的变化方式不同。在 ASBC-Gaussian 下，预测区间边界在各个时点的波动更大（在加速度上尤为明显）。相比之下，ASBC-

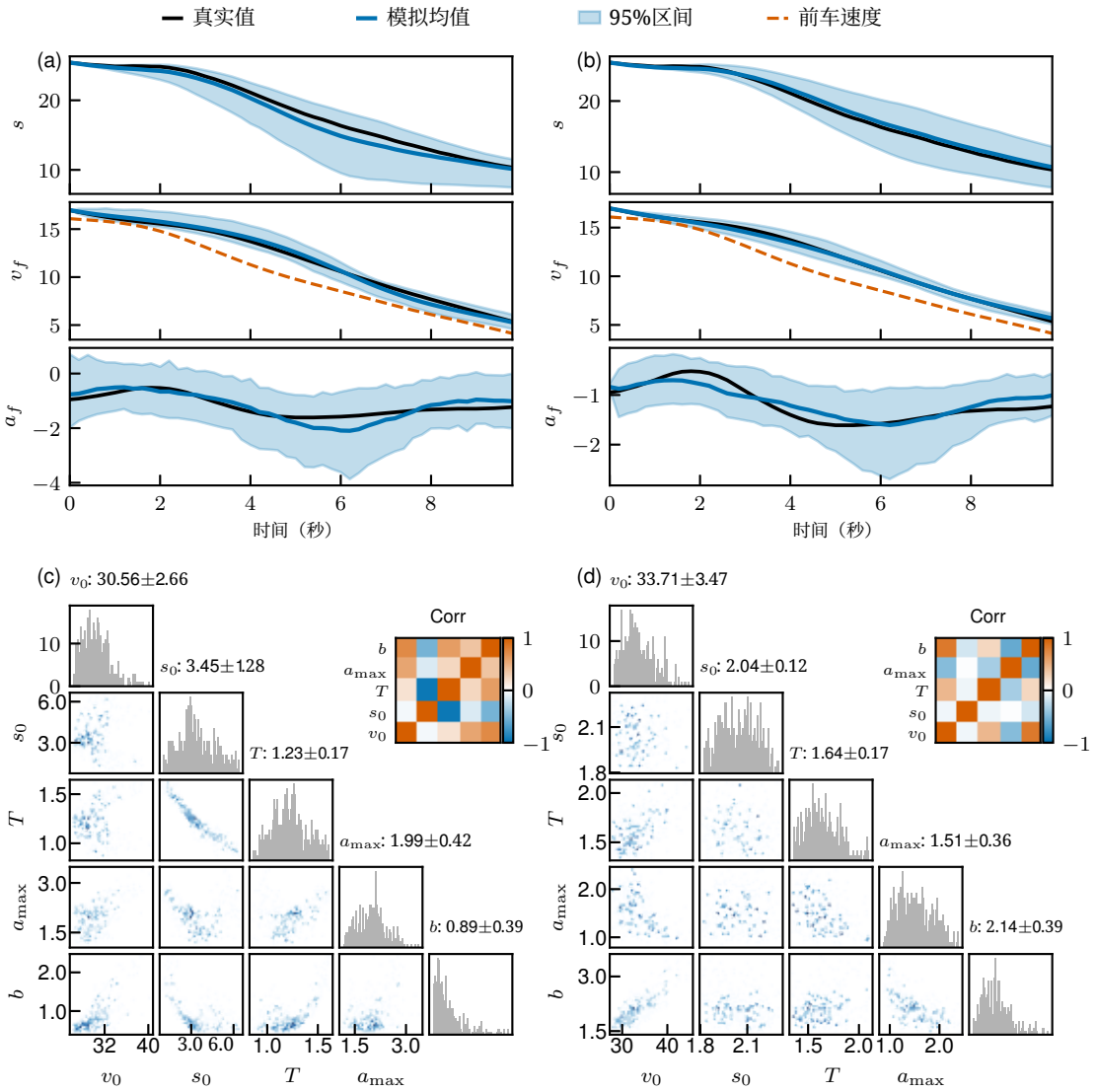

图 4：HighD 配对样本 #426 的案例研究。(a) ASBC-Gaussian 和 (b) ASBC-Mat´ern：后验预测展开及 95%预测区间（虚线：对齐后的前车速度）。(c–d) 同一配对样本的推断后验结构，以成对边际分布和参数相关矩阵呈现。

Mat´ern 产生的不确定性变化更加平滑，并会围绕持续性转变（例如长时间制动）连贯地扩大，这与时间持续性失配而非独立噪声相一致。这种时间相干性在走走停停工况下尤为重要，因为即使均值轨迹看似合理，时间上不一致的不确定性仍可能造成误导。

2）相关残差下的后验结构与归因：图 4(c)–(d) 总结了五个核心智能驾驶员模型参数的推断后验结构。[4] 我们将这些后验分布视为对图 4(a)–(b) 中预测行为的解释性总结，而非对真实驾驶员特征的可验证估计。

关键机制在于归因权衡。由于残差通过加速度更新进入模型，并被积分到未来速度和间距中，因此，短片段内持续的偏差既可以通过调整 $\boldsymbol{\theta}$ 来解释，也可以允许具有时间结构的残差路径 $\{r_t\}$ 吸收系统性失配。这种选择也会影响预测均值。在 ASBC-Mat´ern 模型下，以初始残差前缀为条件可能会使未来残差的条件均值非零，即使 $\boldsymbol{\theta}$ 保持不变，也可能导致预测均值发生偏移。而在独立同分布高斯残差下，未来噪声的条件均值仍为零，因此系统性的均值偏移主要通过 $\boldsymbol{\theta}$ 体现。

对于第 #426 对，Gaussian 变体在较大的拥堵距离和较弱的舒适制动上分配了更多概率质量（图 4c）；而 Mat´ern 变体则集中在更紧凑的 s_0 区域，并趋向于更强的制动和更大的车头时距（图 4d）。相关性矩阵进一步揭示了 IDM 标定中典型的补偿结构，例如车头时距T 与拥堵距离 s_0 之间，以及制动 b 与加速度能力之间的权衡

[4]为便于比较，我们聚焦于核心智能驾驶员模型参数；两个变体也都会推断残差超参数，但此处不予展示。

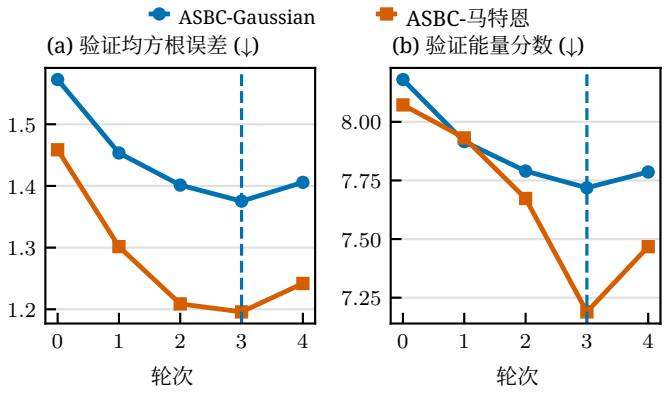

图5：HighD上跨轮次的主动循环收敛情况。虚线标记了使用与训练中相同的验证损失提前停止规则所选定的轮次。

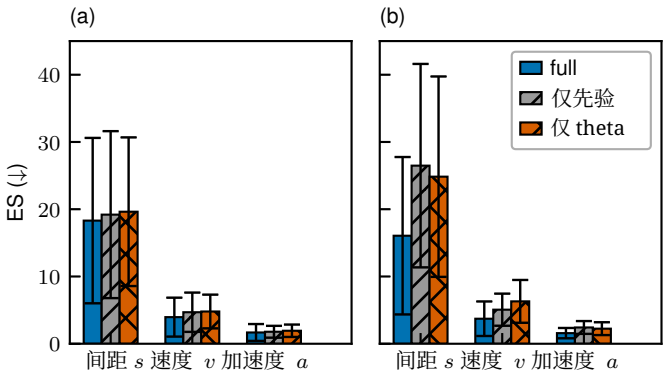

图6：HighD上的消融实验（能量分数）。我们将完整方法与仅先验采样（无软收缩）和 $\boldsymbol{\theta}$ 仅能量分数选择（无联合（$\boldsymbol{\theta}$、 L）采集）进行比较。（a）ASBC-Gaussian；（b）ASBC-Mat´ern。

$a_{\max}$。总体而言，这个例子表明，残差假设不仅会影响预测不确定性的时间结构，还会影响偏差如何在驱动因素参数与时间结构化失配之间分配。

C. 诊断与稳定性

本节报告以下方面的诊断结果：（i）主动学习循环在各采集轮次中的稳定性；（ii）对关键设计选择的敏感性。我们展示采用提前停止所选轮次的收敛曲线、用于隔离采集组件的针对性消融实验，以及编码器历史长度扫描。

1）主动循环收敛曲线：图 5 展示了两个残差模型的评估指标如何随采集轮次变化。主动循环通过后验模型上的验证损失进行监控并提前停止；由于真实轨迹不提供真实参数，因此该损失是在固定的合成留出集上计算的，该留出集由模拟的 $(\boldsymbol{\theta},\mathbf{x})$ 对组成，其中 $\boldsymbol{\theta}$ 在构造时已知。为确认这一停止规则与下游目标一致，我们还绘制了留出的真实领航者–跟随者样本对上的均方根误差和能量分数。除非另有说明，报告的均方根误差和能量分数均对间距 s、速度 v 和加速度 a 取平均。令人欣慰的是，

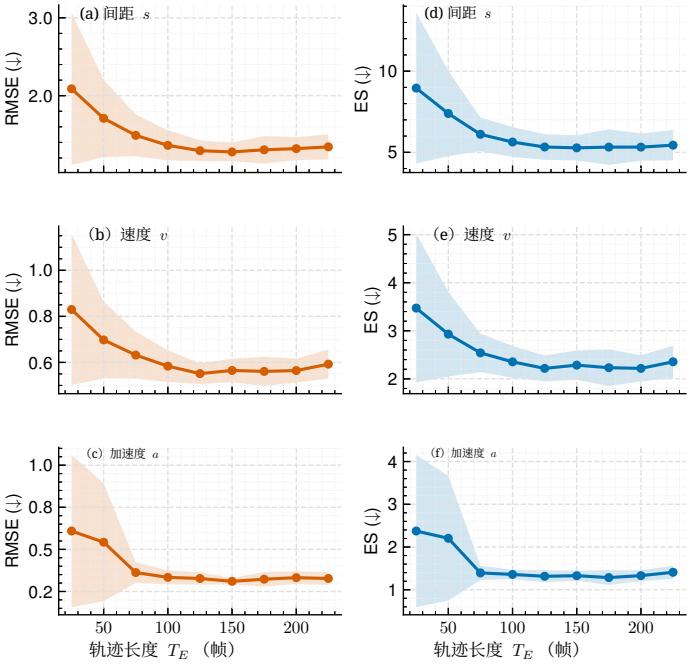

图7：HighD上针对ASBC-Gaussian的编码器历史长度扫描。五个随机种子下的均值 ±标准差。

选定轮次（虚线）出现在均方根误差和能量分数基本趋于平稳的位置。

第二种模式体现在不同残差模型的后期轮次表现差异上。ASBC-Gaussian在选定轮次之后出现明显退化，下一轮的均方根误差和能量分数均有所上升。在采用主动采集的序贯模拟式贝叶斯推断中，这种情况并不意外：随着提议并选定的（$\boldsymbol{\theta}$， L）查询逐渐集中，后续轮次可能使有效训练分布偏离评估域，导致过度专门化或不稳定性。相比之下，ASBC-Mat´ern较早达到最佳表现区间，此后总体保持稳定；这与相关残差能够吸收时间结构化失配、又不会导致智能驾驶员模型参数的后验分布发生漂移的情况一致。总体而言，曲线表明，大部分收益出现在前几轮，而跨轮次早停可作为一种有效的防护机制，避免收益递减和后期轮次性能退化。

2) 消融实验与敏感性分析：

在[illegible]*方面*[illegible]*实验*[illegible]*主动设计中的哪些组件能够提升预测质量，我们将完整方法与两种消融实验进行比较（图6）。仅先验变体关闭软收缩提议分布，仅从先验中抽取参数。 $\boldsymbol{\theta}$仅场景 变体移除联合（$\boldsymbol{\theta}$， L）采集，将选出的参数与随机前车窗口配对，因此舍弃了场景代表性和联合空间多样性控制。两种消融实验都会降低分布准确性，且在相关残差模型下影响显著更大：与各自的消融基线相比，完整方法在 ASBC-Mat´ern 下使不同变量和消融实验的 ES 降低 26.5–41%，而在 ASBC-Gaussian 下则降低 4.6–17.5%；相对变化按 $(\mathrm{ES}_{\mathrm{abl}} - \mathrm{ES}_{\mathrm{full}})/\mathrm{ES}_{\mathrm{abl}} \times 100\%$ 计算。这一规律支持一个关键结论：时间相关残差可以吸收持续存在的

失配，使参数识别对前车场景的选择更加敏感。联合采集通过选取信息丰富的前车上下文来缓解这一问题，有助于将结构化残差效应与驾驶员参数区分开来；在独立同分布高斯噪声下，这一优势不那么关键，因为失配往往更容易相互抵消。

b) 编码器历史长度扫描：我们还对 ASBC-Gaussian 的编码器历史长度 T_E 进行扫描，以量化稳定后验推断所需的过去上下文量（图 7）。随着 T_E 从极短历史增加，性能急剧提升，随后趋于饱和：超过中等T_E后，延长编码器上下文仅带来有限的边际收益。值得注意的是，种子间变异性在较小的 T_E时最大，一旦编码器观察到足以区分驾驶状态的充分历史，该变异性便大幅缩小。因此，我们在所有主要实验中使用默认的 $T_E = 75$ 帧（15秒），并将此次扫描视为一种诊断，表明我们的配置处于稳定区间，而非经过精细调优的边缘情形。

D. 讨论

a) 关键要点：我们的实验为具备不确定性感知的短时域跟驰仿真提出三点启示。**（1）使用窗口级分布和适当的分布评分：**平均值可能掩盖短时域仿真中的重尾行为，而窗口级误差分布以及能量分数等适当的分布评分能更好地反映不确定性下的保真度。**（2）相关残差改善时间相干性：**与独立同分布高斯残差相比，Mat´ern 模型产生的预测区间演变更为平滑，并在持续转变附近相干地扩展。**（3）采集与残差结构相互作用：**在相关残差下，联合（$\boldsymbol{\theta}$，L）采集尤其有益，这与如下直觉一致：持续性失配会使参数识别对场景选择更为敏感。

合成校准研究中的一项常见评估是参数恢复：推断后验分布能否恢复已知的真实参数分布（例如，用于自动驾驶车辆控制器的基于ABC的校准 [21]）。当模拟器被视为数据生成机制，且参数是主要关注对象时，这种评估是合适的。我们的研究设定有所不同。对于自然驾驶数据（例如 HighD），不存在可观测的真实驾驶员参数向量，而且多组不同的参数与残差实现都可能解释相似的短时域行为。因此，我们将推断参数视为预测性摘要，而非可验证的驾驶员特征；并在固定的前车输入下，通过后验预测检验和轨迹级指标评估性能。

b) 实施指南：在实践中，我们建议采用以下工作流程：(i) 使用固定的短时域方案（例如，采用重置初始状态的 10 s 滚动窗口）；(ii) 抽取足够多的后验样本，以确保能量分数和预测区间估计稳定；(iii) 使用固定的合成留出集进行跨轮提前停止，因为真实轨迹缺少真实值 $\boldsymbol{\theta}$；(iv) 维护一个兼顾代表性与多样性的前车窗口库（可选择进行轻度增强，并严格执行物理有效性检查）；(v) 避免使用过短的条件窗口，因为这会增加随机种子敏感性。

c) 尚待解决的问题：我们的研究主要利用残差增强型 IDM 设定中的摊销 。自然的下一步是将其扩展到黑箱微观模拟器（例如 SUMO [36]），在这类模拟器中，无似然学习至关重要，摊销对于扩大规模也更为重要。

在该设定下，有两个尚待解决的问题尤为关键：**(1) 模拟器与现实差距下的目标**。模型设定错误可能主导校准结果，因此尚不清楚哪些差异度量最能反映预期的网络级行为。一个关键问题是，如何设计超越短时域轨迹误差、与任务相契合且稳健的目标（例如，针对行程时间、排队队列或速度场的分布目标），同时仍对行为机制保持敏感。**(2) 大规模场景设计**。场景空间（交通需求、信号灯、几何结构、交通事件）远大于前车窗口刺激，因此有必要将联合采集从 $(\boldsymbol{\theta}, L)$ 扩展到 $(\boldsymbol{\theta}$,场景$)$。一个重要方向是设计场景参数化以及代表性／多样性准则，使其在模拟预算有限的情况下仍能有效发挥作用。

另一个局限是定长条件化。虽然固定窗口有助于稳定训练和评估，但更长的历史数据并不总能为参数识别提供更多信息：较长的自由流片段或快速切换的状态可能会稀释承载参数信息的交互。值得探索的方向包括学习数据自适应的轨迹摘要（例如注意力池化或事件中心编码器 [37], [38]），以及学习依赖于数据的窗口选择 $W(\mathbf{x})$，使模型能够聚焦于关键交互，例如接近和制动事件。

VI. 结论与未来工作

本文提出了一种主动式摊销基于模拟的推断框架，用于根据轨迹数据校准随机跟驰模型。其核心思想是以轨迹条件化的神经后验估计器取代逐条轨迹优化或马尔可夫链蒙特卡洛：模型训练完成后，只需一次前向传播即可生成驾驶员特定的后验分布，从而实现数据集规模的随机校准。为使摊销式基于模拟的推断在模拟预算有限的情况下切实可行，我们提出了一种联合 $(\boldsymbol{\theta}, L)$ 采集策略，同时选择参数和具有代表性的前车轨迹窗口，将模拟资源集中在最能提升后验质量的部分。在 HighD 数据集上，所得后验预测模拟在保真度和分布评分方面优于汇总贝叶斯基线；此外，Mat´ern-$5/2$ 残差变体带来了时间上更连贯的不确定性和更好的分布对齐。

该框架为微观模拟中的不确定性校准提供了一条可扩展的路径。当安全性和可靠性取决于尾部事件而非平均行为时，这一点尤为重要。快速的驾驶员特定后验分布推断还支持进行不确定性感知滚动预测，并针对各种交互情形开展压力测试，从而为交通工程中的稳健场景评估和基于模拟的决策支持提供助力。未来值得探索的方向包括将该框架部署到黑箱微观模拟器中，以及开发数据自适应的轨迹表示。

致谢

本研究由加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC）资助。作者还谨此感谢麦吉尔工程学博士奖（MEDA）、企业网络、物流与运输跨大学研究中心（CIRRELT）以及魁北克自然与技术研究基金（FRQNT）提供奖学金和经费，以支持本研究。

参考文献

[1] C. Zhang、Z. He、C. Wu 和 L. Sun，“上下文不足时：跟驰行为中未解释变异的建模”，*arXiv*预印本 *arXiv:2507.07012*，2025年。[2] L. Li、R. Jiang、Z. He、X. M. Chen 和 X. Zhou，“基于轨迹数据的交通流研究：再探讨”，《交通研究*C*辑：新兴技术》，第114卷，第225–240页，2020年。[3] M. Treiber、A. Hennecke 和 D. Helbing，“实证观测与微观仿真中的拥堵交通状态”，《物理评论*E*》，第62卷，第2期，第1805页，2000年。[4] A. Kesting 和 M. Treiber，“利用轨迹数据校准跟驰模型：方法论研究”，《交通研究记录》，第2088卷，第1期，第148–156页，2008年。[5] V. Punzo、Z. Zheng 和 M. Montanino，“自动驾驶车辆和人工驾驶车辆跟驰动力学的校准：方法论、指南与代码”，《交通研究*C*辑：新兴技术》，第128卷，第103165页，2021年。[6] R. Keane 和 H. O. Gao，“利用伴随方法快速校准跟驰模型以适配轨迹数据”，《交通科学》，第55卷，第3期，第592–615页，2021年。[7] V. P unzo、B. Ciuffo 和 M. Montanino，“基于轨迹数据的跟驰模型校准结果是否可信？”，《交通研究记录》，第2315卷，第1期，第11–24页，2012年。[8] T. Toledo 和 H. N. Koutsopoulos，“交通仿真模型的统计验证”，《交通研究记录》，第1876卷，第1期，第142–150页，2004年。[9] C. Zhang 和 L. Sun，“智能驾驶员模型的贝叶斯校准”，《*IEEE*智能交通系统汇刊》，第25卷，第8期，第9308–9320页，2024年。[10] C. Zhang、W. Wang 和 L. Sun，“通过贝叶斯动态回归校准跟驰模型”，《交通研究*C*辑：新兴技术》，第168卷，第104719页，2024年。[11] G. Papamakarios 和 I. Murray，“基于贝叶斯条件密度估计，对无需 ε 的仿真模型进行快速推断”，《神经信息处理系统进展》，第29卷，2016年。[12] K. Cranmer、J. Brehmer 和 G. Louppe，“基于仿真的推断前沿”，《美国国家科学院院刊》，第117卷，第48期，第30 055–30 062页，2020年。[13] J.-M. Lueckmann、P. J. Goncalves、G. Bassetto、K. ”Ocal、M. Nonnenmacher 和 J. H. Macke，“神经动力学机制模型的灵活统计推断”，《神经信息处理系统进展》，第30卷，2017年。[14] C. Winkler、D. Worrall、E. Hoogeboom 和 M. Welling，“利用条件归一化流学习似然”，*arXiv*预印本 *arXiv:1912.00042*，2019年。[15] T. T. Zhang、P. J. Jin、S. T. McQuade、A. Bayen 和 B. Piccoli，“跟驰模型：多学科综述”，《*IEEE*智能车辆汇刊》，第1–26页，2024年。[16] C. Osorio 和 V. Punzo，“面向大规模随机网络仿真器的微观跟驰模型高效校准”，《交通研究*B*辑：方法论》，第119卷，第156–173页，2019年。[17] R. Keane，“利用轨迹数据快速校准交通微观仿真”，载于美国交通研究委员会（*TRB*）第*98*届年会。美国华盛顿特区：美国交通研究委员会，2019年1月，发表于TRB第98届年会，2019年1月13–17日。TRID记录编号：1572451 [ ] 1572451 。[18]

在线获取： https://trid.trb.org/View/ B. Ciuffo、J. Casas、M. Montanino、J. Perarnau 和 V. Punzo，“用于交通仿真模型敏感性分析的高斯过程元模型：Aimsun中观模型案例研究”，《交通研究记录》，第2390卷，第1期，第87–98页，2013年。[19] M. M. Rahman，“跟驰模型参数估计与校准方法的应用”，硕士论文，克莱姆森大学，2013年。[20] J. Jiang、Y. Zhou、X. Wang 和 S. Ahn，《一种基于近似贝叶斯计算的通用随机混合跟驰模型》，《交通研究C辑：新兴技术》，第 167 卷，第 104799 页，2024 年。[21] J. Jiang、Y. Zhou、G. Jafarsalehi、X. Wang、S. Ahn 和 J. D. Lee，《自动驾驶车辆跟驰控制的随机校准：一种近似贝叶斯计算方法》，《IEEE智能交通系统汇刊》，第 26 卷，第 3 期，第 3115–3127 页，2025 年。[22] D. Sha、K. Ozbay 和 Y. Ding，《应用贝叶斯优化校准交通仿真模型》，《交通研究记录》，第 2674 卷，第 10 期，第 215–228 页，2020 年。[23] S. Oladyshkin、F. Mohammadi、I. Kroeker 和 W. Nowak，《利用信息进行高斯过程模拟器的贝叶斯 3 主动学习》，《熵》，第 22 卷，第 8 期，第 890 页，2020 年。[24] A. Zammit-Mangion、M. Sainsbury-Dale 和 R. Huser，《用于摊销推断的神经方法》，《统计学及其应用年度评论》，第 12 卷，第 1 期，第 311–335 页，2025 年。[25] J. Boelts、M. Deistler、M. Gloeckler、 ´A. Tejero-Cantero、J.-M. Lueckmann、G. Moss、P. Steinbach、T. Moreau、F. Muratore、J. Linhart 等，《sbi reloaded：基于模拟的推断工作流工具包》，arXiv预印本 arXiv:2411.17337，2024 年。[26] M. Deistler、J. Boelts、P. Steinbach、G. Moss、T. Moreau、M. Gloeck- ler、P. L. Rodrigues、J. Linhart、J. K. Lappalainen、B. K. Miller 等，《基于模拟的推断：实用指南》，arXiv预印本 arXiv:2508.12939，2025 年。[27] D. Greenberg、M. Nonnenmacher 和 J. Macke，《似然自由推断的自动后验变换》，载于《国际机器学习会议》。PMLR，2019 年，第 2404–2414 页。[28] S. Griesemer、D. Cao、Z. Cui、C. Osorio 和 Y. Liu，《面向样本高效基于模拟的推断的主动序贯后验估计》，《神经信息处理系统进展》，第 37 卷，第 127 907–127 936 页，2024 年。[29] J. Beck 和 S. Guillas，《利用互信息进行计算机实验的序贯设计（MICE）：海啸模型的模拟》，《SIAM/ASA不确定性量化杂志》，第 4 卷，第 1 期，第 739–766 页，2016 年。[30] L. Schultz 和 V. Sokolov，《交通仿真器的贝叶斯优化》，《计算机科学 Procedia》，第 130 卷，第 973–978 页，2018 年。[31] M. Treiber 和 A. Kesting，《轨迹与浮动车数据》，载于《交通流动力学：数据、模型与仿真》。Springer，2012 年，第 7–12 页。[32] A. Vaswani、N. Shazeer、N. Parmar、J. Uszkoreit、L. Jones、A. N. Gomez、Łukasz Kaiser 和 I. Polosukhin，《注意力机制就是你所需要的一切》，载于《神经信息处理系统进展》（NeurIPS），2017 年。[33] Y. Xiong、Z. Zeng、R. Chakraborty、M. Tan、G. Fung、Y. Li 和 V. Singh，《Nystr¨omformer：一种基于 Nystr¨om 的自注意力近似算法》，载于《AAAI人工智能会议论文集》，第 35 卷，第 16 期，2021 年，第 14 138–14 148 页。[34] G. Papamakarios、T. Pavlakou 和 I. Murray，《用于密度估计的掩码自回归流》，《神经信息处理系统进展》，第 30 卷，2017 年。[35] R. Krajewski、J. Bock、L. Kloeker 和 L. Eckstein，《HighD数据集：用于验证高度自动化驾驶系统的德国高速公路自然驾驶车辆轨迹无人机数据集》，载于《2018 年第 21 届国际智能交通系统会议（ITSC）》。IEEE，2018 年，第 2118–2125 页。[36] D. Krajzewicz、J. Erdmann、M. Behrisch、L. Bieker 等，《SUMO——城市交通仿真的最新发展与应用》，《系统与测量进展国际期刊》，第 5 卷，第 3&4 期，第 128–138 页，2012 年。[37] M. Ilse、J. Tomczak 和 M. Welling，《基于注意力的深度多实例学习》，载于《国际机器学习会议》。PMLR，2018 年，第 2127–2136 页。[38] J. Lee、Y. Lee、J. Kim、A. Kosiorek、S. Choi 和 Y. W. Teh，《集合变换器：基于注意力的置换不变神经网络框架》，载于《国际机器学习会议》。PMLR，2019 年，第 3744–3753 页。

附录概览

本附录包含以下补充材料：

- 附录 A：编码器架构详情（Local–Global Transformer 和上下文嵌入）。
- 附录 B：后验流和参数变换（MAF 密度、正值变换和采样）。
- 附录 C：NPE 目标函数的推导（与期望后验 KL 散度的联系）。
- 附录 D：前车窗口增强和过滤（样本库构建、增强和合理性检查）。
- 附录 E：联合采集中的多样性惩罚（距离和核惩罚）。
- 附录 F：ASNPE 的 MC-dropout 不确定性评分。
- 附录 G：软收缩混合的后验引导提议构造。
- 附录 H：先验设定和可行性约束（智能驾驶员模型及残差超参数）。
- 附录 I：实现超参数和阈值（训练集、leader-bank 和采集设置）。

附录 A 编码器架构详情

我们采用 Local–Global Transformer 编码器，将窗口化自注意力与全局摘要标记相结合。窗口化机制能够捕捉细粒度的局部交互，而专用的 [CLS] 标记则汇总完整序列中的信息。我们按照以下方式引入可学习的相对位置偏置。

输入投影： 给定一条轨迹 $\mathbf{x} = (\mathbf{h}_1, \ldots, \mathbf{h}_T) \in \mathbb{R}^{T\times 3}$，我们使用可学习的投影将每个输入状态映射为一个 d 维表示

$$\mathbf{z}_t^{(0)} = \mathbf{W}_{\text{in}}\mathbf{h}_t, \qquad \mathbf{W}_{\text{in}} \in \mathbb{R}^{d\times 3}.$$

局部–全局注意力层： 我们使用一组 L Local–Global 注意力层来优化表示。在第$\ell = 0, \ldots, L-1$层中，在以 t 为中心的固定大小滑动窗口 $\mathcal{W}(t)$ 内应用局部注意力，

$$\mathbf{z}_t^{(\ell+1)} = \text{MHA}_{\text{local}}\left(\mathbf{z}_t^{(\ell)}, \{\mathbf{z}_\tau^{(\ell)}\}_{\tau\in\mathcal{W}(t)}, \mathbf{B}\right).$$

与此同时，全局注意力作用于 [CLS] 标记，以汇总序列级信息，

$$\mathbf{z}_{[\text{CLS}]}^{(\ell+1)} = \text{MHA}_{\text{global}}\left(\mathbf{z}_{[\text{CLS}]}^{(\ell)}, \{\mathbf{z}_\tau^{(\ell)}\}_{\tau=1}^{T}, \mathbf{B}\right).$$

上下文向量： 经过 L 层后，将 [CLS] 标记的最终隐藏状态作为轨迹嵌入，

$$\mathbf{c} = \mathbf{z}_{[\text{CLS}]}^{(L)} \in \mathbb{R}^d.$$

附录 B
后验流与参数变换的详细信息

A. 条件掩码自回归流（*MAF*）

我们使用条件掩码自回归流（MAF） [34]在无约束空间中对后验分布建模。令$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^D$表示无约束的潜在参数向量，$\mathbf{c}$ 表示上下文嵌入。该流定义了$\mathbf{u}$ 与基变量$\mathbf{z} \in \mathbb{R}^D$之间的可逆映射：

$$\mathbf{z} = f_\phi(\mathbf{u}; \mathbf{c}), \qquad \mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \tag{17}$$

其中， $f_\phi(\cdot;\mathbf{c})$是 K 个可逆的上下文条件变换的复合。具体而言，定义$\mathbf{z}_0 = \mathbf{u}$ ，并令$k = 1,$ ……， K，

$$\mathbf{z}_k = f_{k,\phi}(\mathbf{z}_{k-1}; \mathbf{c}), \qquad \mathbf{z}_K = \mathbf{z}. \tag{18}$$

根据变量替换公式，$\mathbf{u}$ 的条件密度为

$$q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c}) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_K; \mathbf{0}, \mathbf{I}) \prod_{k=1}^{K} \left|\det\left(\frac{\partial \mathbf{z}_k}{\partial \mathbf{z}_{k-1}}\right)\right|, \tag{19}$$

因此

$$\log q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c}) = \log \mathcal{N}(\mathbf{z}_K; \mathbf{0}, \mathbf{I}) + \sum_{k=1}^{K} \log \left|\det\left(\frac{\partial \mathbf{z}_k}{\partial \mathbf{z}_{k-1}}\right)\right|. \tag{20}$$

此表达式用于训练期间的精确对数密度评估，以及 §III-C 中的采集分数。测试时，通过抽取 $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 并应用逆映射 $\mathbf{u} = f_\phi^{-1}(\mathbf{z}; \mathbf{c})$ 进行采样。

B. 正参数变换

为确保物理参数的正值性，我们应用逐元素双射 $T:\mathbb{R}^D \to \mathbb{R}_+^D$ 定义为 y

$$\boldsymbol{\theta} = T(\mathbf{u}) = \mathrm{softplus}(\mathbf{u}) + \varepsilon, \qquad \varepsilon > 0, \tag{21}$$

其中，$\mathrm{softplus}(x) = \log(1+\exp(x))$按分量应用。偏移量 ε 提供了严格的下界 $\theta_i > \varepsilon$，以确保数值稳定性。逆变换同样是逐元素的：

$$u_i = T^{-1}(\theta_i) = \log(\exp(\theta_i - \varepsilon) - 1), \qquad i = 1, \ldots, D. \tag{22}$$

雅可比矩阵 $\partial\boldsymbol{\theta}/\partial\mathbf{u}$ 为对角矩阵，其

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial u_i} = \sigma(u_i), \qquad \sigma(u) = \frac{1}{1+\exp(-u)}, \tag{23}$$

因此

$$\log\left|\det\left(\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \mathbf{u}}\right)\right| = \sum_{i=1}^{D} \log \sigma(u_i). \tag{24}$$

将式 (19) 中的流密度与变换 $T(\cdot)$ 相结合，物理空间后验密度为

$$\log q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c}) = \log q_\phi(\mathbf{u} \mid \mathbf{c}) - \log\left|\det\left(\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \mathbf{u}}\right)\right|, \qquad \mathbf{u} = T^{-1}(\boldsymbol{\theta}). \tag{25}$$

C. 物理空间中的后验采样

给定上下文$\mathbf{c}$，后验样本通过以下方式获得

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^{(s)} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \\ \mathbf{u}^{(s)} &= f_\phi^{-1}(\mathbf{z}^{(s)}; \mathbf{c}), \\ \boldsymbol{\theta}^{(s)} &= T(\mathbf{u}^{(s)}), \qquad s = 1, \ldots, S. \end{aligned} \tag{26}$$

两种残差设定均采用相同的流程；只有 D of $\boldsymbol{\theta}$ 的维数不同（参见 §III-A5）。

Appendix C
Derivation of the NPE objective

本附录简要推导神经后验估计中使用的最大似然目标与真实后验和学习得到的近似之间的 Kullback–Leibler（KL）散度之间的联系。我们在由模拟与编码诱导的联合分布层面给出推导，这正是 §III-B3 所采用的设定。

A. 从条件似然到后验 *KL* 散度

令$\mathbf{x}$ 表示一条模拟的跟随者轨迹，并令$\mathbf{c} = f_\psi(\mathbf{x})$表示其上下文嵌入。考虑任意一个定义在模拟样本对 $(\boldsymbol{\theta},\mathbf{c})$ 上、密度为

$$p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{c}) = p(\mathbf{c})\, p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c}). \tag{27}$$

给定条件密度 m odel $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})$，标准 NPE 目标函数最大化条件对数似然的期望 d

$$\mathcal{L}(\psi, \phi) = \mathbb{E}_{(\boldsymbol{\theta},\mathbf{c})\sim p}\left[\log q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})\right]. \tag{28}$$

利用式 (27) 中的因式分解，我们可以将其改写为

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\psi, \phi) &= \mathbb{E}_{\mathbf{c}\sim p(\mathbf{c})}\left[\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}\sim p(\boldsymbol{\theta}\mid\mathbf{c})} \log q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})\right] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{c}\sim p(\mathbf{c})}\left[\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}\sim p(\boldsymbol{\theta}\mid\mathbf{c})} \log p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})\right] - \mathbb{E}_{\mathbf{c}\sim p(\mathbf{c})}\mathrm{KL}\big(p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c}) \,\|\, q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})\big). \end{aligned} \tag{29}$$

(29) 中的第一项不依赖于 ϕ，因此相对于后验模型而言是一个常数。因此，最大化 $\mathcal{L}$ 等价于最小化真实条件 $p(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})$ 与学习得到的近似 $q_\phi(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c})$ 之间的期望 KL 散度，并对 $\mathbf{c} \sim p(\mathbf{c})$ 取平均。

B. 序贯采集下的解释

在我们的序贯训练流程中，训练样本对 $(\boldsymbol{\theta},\ \mathbf{c})$ 并非仅从固定先验中抽取。相反，在每一轮 r ，我们通过选择参数–场景候选、在残差增强校准模型下模拟轨迹，并将其编码为上下文，来生成样本对数据集。这会在 $(\boldsymbol{\theta},\ \mathbf{c})$ 上诱导出一个经验分布 $\mathcal{D}_r$ ，而我们的训练目标是最大化

$$\mathcal{L}(\psi,\phi)=\mathbb{E}_{(\boldsymbol{\theta},\mathbf{c})\sim\mathcal{D}_r}\left[\log q_\phi(\boldsymbol{\theta}\mid\mathbf{c})\right],$$

如（10）所述。根据（29），这对应于将 $q_\phi(\boldsymbol{\theta}\mid\mathbf{c})$ 拟合到由当前轮次的采集和仿真过程所隐含的条件分布。在实践中，这是合理的，因为主动模块旨在将仿真工作集中于参数–场景对，从而有助于在感兴趣的观测域上学习后验映射。我们使用一个固定容量缓冲来实施这种序贯细化，将新采集的参数–场景对与近期历史数据混合，以稳定训练过程。

附录 D 前车窗口增强与过滤

本附录概述了用于联合采集的前车窗口库的构建方法。目标是在确保仿真输入具有物理 plausibility 且与采样率 Δt 保持一致的同时，提供一组多样化的真实驾驶情境。

A. 前车窗口与样本库构建

对于每条观测到的领航者轨迹 $\boldsymbol{\ell}^{(n)}$，我们提取长度固定为 W 、步长为 S的重叠窗口。每个窗口记为 L ，包含前车速度剖面 $\{v_\ell（t）\}_{t=1}^{W}$；如果无法直接获得加速度，我们就通过有限差分计算，

$$a_\ell(t)=\frac{v_\ell(t)-v_\ell(t-1)}{\Delta t},\qquad t=2,\dots,W,$$

并为方便起见设定 $a_\ell(1)=a_\ell(2)$。由此得到的真实窗口集合定义了 $\mathcal{L}_{\text{real}}$。

为增加上下文多样性，同时避免引入不切实际的运动，我们对 $\mathcal{L}_{\text{real}}$中的窗口应用轻量变换，并进行确定性的合理性检查，以生成增强集合 $\mathcal{L}_{\text{syn}}$ 。各轮的前车采样规律随后

$$\mathcal{L}_r=(1-\alpha_r)\,\mathcal{L}_{\text{real}}+\alpha_r\,\mathcal{L}_{\text{syn}},$$

如式（12）所述。

B. 物理一致增强

我们采用一小组增强方法，在引入轻微变化的同时保留前车运动的整体形态。

a) A1) 带限速度扰动：我们在前车速度上叠加一个低幅度扰动 $\delta v(t)$，得到

$$v'_\ell(t)=v_\ell(t)+\delta v(t),$$

其中， $\delta v(t)$ 是通过过滤白噪声生成的，仅保留低至中频的频率分量。这样既能避免引入不真实的高频抖动，又能产生略有不同的启停模式。

b) A2) 全局缩放：我们对速度及其对应的加速度进行适度的全局缩放，

$$v'_\ell(t)=\kappa\,v_\ell(t),\qquad \kappa\in[1-\beta_{\max},\,1+\beta_{\max}],$$

其中 $\beta_{\max}$ 设为一个较小的值。这样既能保留时间结构，又能调整前车运动的整体强度。

c) A3) 分段仿射时间扭曲：为了引入细微的时间变化，我们可以选择对时间应用分段仿射重参数化。设 $\tau(t)$ 是一个从 $\{1,\dots,W\}$ 到 $\{1,\dots,W\}$ 的单调映射，它通过以一个较小的系数拉伸或压缩若干子区段，再进行线性插值得到。扭曲后的曲线为

$$v'_\ell(t)=v_\ell\big(\tau(t)\big),$$

通过在离散网格上进行线性插值实现。

在所有情况下，我们都使用相同的有限差分规则，根据 $v'_\ell(t)$ 重新计算 $a'_\ell(t)$。

C. 过滤和合理性检查

所有候选增强窗口均经过确定性约束筛选，以确保其符合物理合理性并与采样率一致：

- **非负性：** $v'_\ell(t) \geq 0$ 对所有 t。
- **加速度界限：** $|a'_\ell(t)| \leq a_{\text{物理最大值}}$ 对所有 t。
- **加加速度界限：** $\left|\frac{a'_\ell(t)-a'_\ell(t-1}{\Delta t}\right| \leq j_{\text{最大值}}$ 对所有 $t \geq 2$。
- **运动学一致性：** $|v'_\ell(t) - v'_\ell(t-1) - a'_\ell(t)\Delta t| \leq \varepsilon_{\text{运动学}}$ 对所有 $t \geq 2$。

- **包络约束：** $(v'_\ell(t),\ a'_\ell(t))$ 保持在根据数据集估计的经验百分位范围内，以避免罕见伪影。

只有通过所有检查的窗口才会被纳入 $\mathcal{L}_{\text{syn}}$。

附录 E
联合采集中的多样性惩罚

本附录详细说明联合采集得分 (14) 中使用的多样性惩罚 DivPen(·)。其目的是避免在一轮中选择彼此近乎重复的参数–场景对，从而提高参数空间和领车上下文空间的覆盖度。

A. 领车特征距离

每个领车窗口 L 都会映射为一个固定的特征向量 $\varphi(L) \in \mathbb{R}^{d_\ell}$。在我们的实现中，$\varphi(L)$ 包含窗口内前车速度和加速度的汇总统计量，例如均值、标准差和极值。领车窗口之间的距离使用特征空间中的欧几里得度量计算：

$$d_L(L, L') = \|\varphi(L) - \varphi(L')\|_2.$$

B. 参数空间距离

为了比较单位和尺度不同的参数向量，我们使用对角或完整协方差近似量 $\Sigma_{\boldsymbol{\theta}}$ 对参数空间中的距离进行缩放。令 $\Sigma_{\boldsymbol{\theta}}^{-1/2}$ 为白化变换。缩放后的距离为

$$d_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}') = \|\Sigma_{\boldsymbol{\theta}}^{-1/2}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}')\|_2.$$

实际应用中，$\Sigma_{\boldsymbol{\theta}}$ 可以根据先验尺度或近期样本的经验标准差来设定。

C. 核分散惩罚

给定某个贪心轮次中当前已选定的对集合 S，我们会惩罚那些与现有集合过于接近的新候选项（$\boldsymbol{\theta}$，L）。具体实现如下：

$$\text{DivPen}\big(S \cup \{(\boldsymbol{\theta}, L)\}\big) = \frac{1}{|S|} \sum_{(\boldsymbol{\theta}', L') \in S} \exp\left(-\frac{d_L(L, L')^2}{\tau_L^2} - \frac{d_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}')^2}{\tau_{\boldsymbol{\theta}}^2}\right), \tag{30}$$

其中，τ_L 和 $\tau_{\boldsymbol{\theta}}$ 是温度参数，分别控制相似度在领导者空间和参数空间中的衰减速度。当 $S = \varnothing$ 时，我们设 $\text{DivPen}(\{(\boldsymbol{\theta},\ L)\}) = 0$。

D. 多样性贪心选择

从 $S = \varnothing$ 开始，我们迭代添加使式 (14) 中的联合采集得分 $s_r(\boldsymbol{\theta}, L)$ 最大的候选项对。式 (30) 中的惩罚项鼓励所选集合分布于不同的前车上下文和参数区域，从而在预算固定的情况下提高覆盖度并减少冗余仿真。

Appendix F
MC-dropout uncertainty score for ASNPE

本附录说明联合采集步骤中使用的蒙特卡洛丢弃评分 $\alpha_r(\boldsymbol{\theta})$。令 $\mathbf{c}$ 表示根据观测轨迹计算得到的上下文嵌入，令 $\{\phi_r^{(m)}\}_{m=1}^{M}$ 表示第 r 轮后验网络的 M 个丢弃实现。对于任意候选参数 $\boldsymbol{\theta}$，我们在每个丢弃实现下评估对数密度，

$$\ell_r^{(m)}(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) = \log q_{\phi_r^{(m)}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{c}).$$

我们计算丢弃样本的均值和方差。

$$\mu_r(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \ell_r^{(m)}(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}), \qquad v_r(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) = \text{Var}_m\left[\ell_r^{(m)}(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c})\right].$$

表 III：用于截断 IDM 先验的可行范围（在仿真过程中通过拒绝采样强制执行）。

参数	范围
v_0 (米/秒)	$[20, 40]$
s_0 (米)	$[1, 6]$
T (秒)	$[0.6, 4.5]$
$a_{\max}$ (米/秒²)	$[0.2, 3.5]$
b (米/秒²)	$[0.4, 4.0]$

接着，我们将认知不确定性评分定义为

$$\alpha_r(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) = \mu_r(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) + \log\big(v_r(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{c}) + \varepsilon_\alpha\big), \tag{31}$$

其中，$\varepsilon_\alpha > 0$ 是一个用于保证数值稳定性的小常数。

在实践中，我们对以下内容计算（31）：从一部分观测轨迹中获得的一部分上下文嵌入 $\mathcal{X}^{\text{sub}} \subset \mathcal{X}$并对 th 中的分数进行汇总在子集中。具体而言，对于每个 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}^{\text{sub}}$，我们计算 $\mathbf{c} = f_\psi(\mathbf{x})$ 并取

$$\alpha_r(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{|\mathcal{X}^{\text{sub}}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}^{\text{sub}}} \alpha_r\big(\boldsymbol{\theta}; f_\psi(\mathbf{x})\big).$$

为确保数值稳健性，在排序前会对结果 $\alpha_r(\boldsymbol{\theta})$按候选参数进行标准化。

Appendix G
Posterior-informed proposal construction

本附录介绍如何构造软收缩混合 (11) 中使用的后验信息提议分布 $\tilde{q}_{r-1}(\boldsymbol{\theta})$。在第 $r-1$ 轮，我们选取一组观测轨迹 $\mathcal{X}_{\text{子集}} \subset \mathcal{X}$，可以是固定的验证子集，也可以是使用固定种子随机采样的子集，以确保可复现性。对于每条轨迹 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}_{\text{子集}}$，我们抽取后验样本 $\boldsymbol{\theta}^{(s)} \sim q_{\phi_{r-1}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x})$，并将其汇集起来，形成经验提议分布。从概念上讲，这相当于对$\mathcal{X}_{\text{子集}}$中的逐轨迹后验进行混合，

$$\tilde{q}_{r-1}(\boldsymbol{\theta}) \approx \frac{1}{|\mathcal{X}^{\text{sub}}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}^{\text{sub}}} q_{\phi_{r-1}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}),$$

我们通过维护汇集样本集，并在生成参数候选时从中重采样来实现这一点。

Appendix H
Prior specification and feasibility constraints

*A. IDM*参数先验

我们在对数空间中设置先验，以确保正性。对于 $\boldsymbol{\theta}_{\text{IDM}} = [v_0, s_0, T, a_{\max}, b]^\top$，我们使 e

$$\log \boldsymbol{\theta}_{\text{IDM}} \sim \mathcal{N}\big(\log \boldsymbol{\theta}_{\text{rec}},\ \text{diag}(\sigma_{\log}^2)\big)\,, \tag{32}$$

其中 $\boldsymbol{\theta}_{\text{rec}} = [33.3,\ 2.0,\ 1.6,\ 1.5,\ 1.67]^\top$ [31] 和 $\sigma_{\log} = \mathbf{1}$。为了促进物理上合理且数值稳定的仿真，我们将先验支撑截断至可行范围（表 III），并在仿真时刻通过拒绝采样施加这些约束。

B. 残差超参数先验

对于独立同分布高斯残差模型，我们为残差加速度尺度设置对数正态先验，

$$\log \sigma \sim \mathcal{N}(-1.0,\ 0.3^2). \tag{33}$$

对于 Mat´ern-$5/2$ 残差模型，我们还为相关长度尺度设置对数正态先验 ℓ，其单位为秒，

$$\log \ell \sim \mathcal{N}(\log 3.0,\ 0.5^2), \tag{34}$$

并在相关设定下为残差尺度采用对数正态先验，

$$\log \sigma \sim \mathcal{N}(\log 0.3,\ 0.5^2). \tag{35}$$

§III-B 中的推断模型以观测轨迹 $\mathbf{x}$ 为条件，并在任一残差设定下输出 $\boldsymbol{\theta}$ 的后验样本。

表 IV：我们在 HighD 实验中使用的训练集、主动循环和评估配置。

组件	值
采样间隔	$\Delta t = 0.2$ 秒（5 Hz）
轮次预算	最多 $R = 10$ 轮次
第 0 轮预热	样本_初始= 4000 模拟
每轮候选样本	样本_每_轮次= 5000
每轮选定的样本对	B= 2000
蒙特卡洛丢弃轮次	M= 20
回放缓冲区容量	训练集_缓冲区_大小=样本_初始= 4000 (先进先出)
轮内训练轮数（最大值）	轮数= 100 （每轮内提前停止）
批次大小	批次 _大小= 128
优化器	Adam，学习率 lr= 10^{-3}
跨轮提前停止	最少_轮次= 3，耐心值_轮= 1，最小_增量_轮= 10^{-3}
软收缩调度	lambda_调度_基准 $= [1.0, 0.9, \ldots, 0.1, 0]$
领导者混合调度	alpha_调度_基础 $= [0.00, 0.10, 0.20, 0.30, \ldots]$
评估后验样本	评估_数量_样本= 500
评估窗口协议	$H = 50$ 步（10 秒），步长为 $S = 20$ 步（4 秒），每对最多 $m = 20$ 个窗口
编码器输入长度	编码器_目标_长度= 75 步（15 秒）
验证子集大小	`eval_val_`大小= 200

表 V：编码器超参数。

Item	值
输入维度	3
模型维度	$d = 64$
Transformer层	$L = 2$
注意力头	4
局部窗口大小	局部 _窗口= 4
丢弃率	0.2
前馈网络扩展	$4d$ 使用 GELU
池化	[CLS] 令牌

表 VI：leader-bank 构建和筛选超参数。

Item	值
窗口长度	$W = 75$ 步
窗口步幅	50 步
合成上限	L_合成_截取= 10000
增强参数	时间_缩放_范围= $[0.9, 1.1]$，速度_抖动= 0.20 加速度_截断= 2.5，加加速度_截断= 5.0
物理约束筛选器	$\lvert a_\ell \rvert \le a_{\max}^{\text{phys}} = 10.0$，$\lvert j_\ell \rvert \le j_{\max} = 20.0$
运动学容差	$\varepsilon_{\text{kin}} = 0.5$
包络百分位数	$(v_\ell,\ a_\ell)$ 位于第 (1，99) 百分位数范围内

表 VII：联合采集和多样性惩罚设置。

Item	值
参数候选上限	K 个候选项= 5000_
每个参数的配对数	配对_每个_theta= 10
代表性 KNN	K_rho= 5，$\varepsilon_\rho = 10^{-3}$
多样性惩罚	$\gamma = 0.1$, $\tau_L = 1.0$, $\tau_{\boldsymbol{\theta}} = 1.0$

附录 I
实现超参数和阈值

本附录列出了我们实现中所使用的具体超参数值和筛选阈值。表 IV 总结了训练预算、主动循环配置和评估默认设置。主动循环遵循正文中的算法 1。表 V 总结了采用窗口化局部注意力的轻量级 Transformer 风格编码器的模型配置。表 VI 和表 VII 总结了用于领导者库构建、过滤和联合采集的阈值。