arXiv:2602.06900v1 [cs.LG] 6 Feb 2026

为贝叶斯最优实验设计中的基于模拟的推断注入强劲动力

Samuel Klein [1] **Willie Neiswanger** [2] **Daniel Ratner** [1] **Michael Kagan** [1] **Sean Gasiorowski** [1]

摘要

贝叶斯最优实验设计（BOED）旨在最大化实验的期望信息增益（EIG）。这需要进行似然估计，而在许多情况下，这一任务难以处理。基于模拟的推断（SBI）为此类问题提供了强大的工具。然而，现有明确关联SBI与BOED的研究仅限于一种对比式期望信息增益界。我们表明，EIG有多种表述方式，可直接利用现代SBI密度估计器，涵盖神经后验分布估计、似然估计和比率估计。基于这一视角，我们利用神经似然估计定义了一种新颖的EIG估计器。此外，我们指出，优化是基于梯度的EIG最大化中的关键瓶颈，并表明一种简单的多起点并行梯度上升方法能够显著提升可靠性和性能。通过这些创新，我们基于SBI的BOED方法在标准BOED基准测试中，性能可媲美或超越现有最先进方法，最高提升22%。

1. 引言

现代科学实验往往复杂、维度高且成本昂贵。为实现实验目标，诸如对关注空间进行网格或栅格扫描等朴素的数据采集方法通常难以实施，因此需要更先进的方法来优化数据采集。本文关注的情形是：科学目标在于增加对潜在系统参数的了解。对此，贝叶斯最优实验设计（Rainforth等人，2024年）已成为最先进的方法。在贝叶斯最优实验设计中，目标通常是设计一系列实验，以最大化关于感兴趣参数的期望信息增益（EIG）。

[1]SLAC 国家加速器实验室 [2]南加州大学。联系作者：Samuel Klein <samk- lein@slac.stanford.edu>。

预印本。*2026*年*2*月*9*日。

贝叶斯最优实验设计的核心对象是似然。尽管并非所有科学研究都会在数据采集中采用贝叶斯最优实验设计，但似然通常会用于科学分析。本研究尤其关注无法获得显式似然的情形；在这种情况下，需通过模拟器生成的样本间接获取似然。这在粒子物理学（Aad等人，2025）、天体物理学（Alsing等人，2019年）和神经科学（Deistler等人，2022）等领域十分常见，各领域也都投入了大量精力来开发潜在过程的模拟器。新兴的基于模拟的推断领域（Cranmer等人，2020）已在不依赖显式似然的科学分析中展现出显著成效。

对于显式和隐式似然，贝叶斯最优实验设计方法提供了寻找使期望信息增益最大化的设计的策略。目前已有两种主要方法，被认为是在高维空间中优化期望信息增益的有力候选方案（Rainforth 等人，2024年）。基于策略的方法学习一种摊销设计策略，而逐轨迹方法则在每次测量后执行期望信息增益优化。在基于策略的方法中，网络经过训练后，可以适应从先验分布中抽取的参数的任意取值。在部署时，策略无需进一步优化即可采样设计，从而实现快速数据采集。相比之下，逐轨迹方法会在每次测量后运行期望信息增益优化程序，为每个已执行的测量序列推导出特定的解。令人意外的是，先前研究发现，与基于策略的策略相比，逐轨迹优化的表现较差（Ivanova 等人，2021；Zaballa和Hui，2025），尽管前者会根据当前观测集合定制设计选择。

这种性能不佳在模拟成本高昂且策略训练难以实现的场景中尤为突出，而这恰恰是模拟式贝叶斯推断方法常用的场景（Cranmer等人，2020）。此外，尽管基于模拟的推断已在多个科学领域产生了有用的后验分布，但很少有研究直接将这些方法与贝叶斯最优实验设计联系起来；现有尝试所达到的期望信息增益显著低于基于策略的方法（Zaballa和Hui，2025）。接下来，我们将概述为推动这一方向所做的贡献。

全面的基于模拟推断的贝叶斯最优实验设计框架。我们提出了

神经后验估计、似然估计和比率估计这三种应用最广泛的模拟式贝叶斯推断方法与期望信息增益变分界之间的明确联系。具体而言，我们利用这些模拟式贝叶斯推断方法，直接计算期望信息增益界相关表述中所需概率密度的变分近似。这使从业者能够灵活选择最适合其具体情境的方法。基于这一联系，我们定义了一种**期望信息增益的新估计量**，并分析其性能和理论性质。

改进期望信息增益优化。我们发现，逐轨迹的基于梯度的期望信息增益优化表现不佳，主要是因为算法收敛到了局部最优。我们提出了多并行重启梯度上升（MPR-GA），这是一种简单的算法，能够显著提升优化表现，使基于模拟的推断方法达到或超越最先进的基于策略的方法。性能提升十分显著，并非渐进式改进，这表明性能上界比以往认为的更高。为了实现 MPR-GA 技术，我们识别并分析了对设计进行摊销所带来的挑战。

我们强调，除了本文的详细贡献之外，基于模拟的推断与贝叶斯最优实验设计这两个领域之间还存在重要的实践和概念联系。许多科学领域已采用基于模拟的推断进行后验推断，推动了专用神经网络架构和软件工具的大量开发（Boelts 等人，2025）。概率密度建模是基于模拟的推断的主要关注点，相关研究投入了大量精力，以提升灵活性、质量和归纳偏置（Dax 等人，2021）。贝叶斯最优实验设计历来采用相对简单的变分模型，因此可以从利用这些基础设施中获益良多。此外，通过明确建立基于模拟的推断后验分布与贝叶斯最优实验设计之间的联系，包括说明如何顺序更新基于模拟的推断后验分布，我们预计许多现有科学工作流都可以转化为数据采集框架。

2. 背景 / 相关工作

尽管已有研究探讨了隐式模型的贝叶斯最优实验设计（Kleinegesse 与 Gutmann，2020；Ivanova 等人，2021；Kleinegesse 与 Gutmann，2019；Zaballa和Hui，2025），这些方法并未充分利用现代基于模拟的推断方法，也未与之建立联系。唯一明确联系到基于模拟的推断的方法（Zaballa和Hui，2025）仅限于单一的对比式期望信息增益界。因此，贝叶斯最优实验设计中仍有大量基于模拟的推断方法尚未得到利用。

2.1. 基于模拟的推断

在许多科学领域，模拟能够准确描述生成数据的过程，模拟器则涵盖了关于某个感兴趣系统的所有已知信息。模拟器提供了一种采样观测y的方法：给定感兴趣的参数 θ 和实验设计 ξ，通过似然函数 $p(y|\theta,\xi)$进行采样。这些似然往往难以处理，因此人们开发了基于模拟的推断方法，以在这类情形下执行推断（Cranmer等，2020）。模拟式贝叶斯推断方法提供了估计后验分布 $p(\theta|D)$的方法，其中 D 表示先前观测到的数据；估计过程使用来自模拟器的样本。许多模拟式贝叶斯推断方法致力于通过自适应模拟方案提升样本效率（Papamakarios & Murray, 2016；Lueckmann 等，2017；Greenberg 等，2019；Wiqvist 等，2021；Griesemer 等，2024；Papamakarios 等，2019）。鉴于科学研究中运行模拟的计算成本高昂，且参数空间维度很高，这些方案往往必不可少。

本研究旨在为现有模拟式贝叶斯推断基础设施铺路，使其能够直接用于贝叶斯最优实验设计的数据采集。许多科学工作流已在用于后验推断的模拟式贝叶斯推断基础设施上投入资源。这些基础设施包括专用模拟器、训练流程和验证框架（Hermans 等人，2022；Lueckmann 等人，2021）。这些模拟式贝叶斯推断系统通常提供摊销后验分布，可实现无需重新训练的即时推断。在本研究中，我们假设所有模拟器均可微。这使得基于梯度优化期望信息增益更加直接，因为梯度可以通过模拟器反向传播。由于人们对自动微分的理解不断加深（Baydin 等人，2018），可微模拟器在科学领域日益普及（Kochkov 等人，2024；Gasiorowski 等人，2024；Heinrich 与 Kagan，2023；Simpson 与 Heinrich，2023）。不可微模拟器的情形留待未来研究，我们将在附录A中作进一步讨论。

2.2. 贝叶斯最优实验设计

贝叶斯最优实验设计（Rainforth 等人，2024年）是一种用于选择实验设计的框架，ξ 旨在最大化关于 θ的期望信息增益。候选设计 ξ 的期望信息增益量化了观测数据后参数 θ 熵的预期减少量 y，并有两种等价的表达形式：

$$\mathrm{EIG}(\xi) = \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log \frac{p(\theta|y,\xi)}{p(\theta|D)}\right] \tag{1}$$

$$= \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log \frac{p(y|\theta,\xi)}{p(y|\xi)}\right]. \tag{2}$$

即使似然 $p(y|\theta,\xi)$ 具有可处理性，后验分布 $p(\theta|y,\xi)$ 和边际似然 $p(y|\xi)$ 通常仍难以处理。直接采用蒙特卡罗方法需要进行嵌套采样，因此估计量的效率低得难以接受（Rainforth 等人，2018），在高维情形下尤其如此。另一种方法是使用变分界。针对

期望信息增益（EIG）已经提出了多种变分界，包括可联合优化变分参数和设计的下界（Foster 等人，2020）。本研究关注逐轨迹策略：每次测量后更新后验分布，并基于当前后验分布优化期望信息增益。我们尤其考虑测量过程成本高昂的情形，此时可以投入大量计算资源来选择信息量最大的设计。这包括测量间隔从几分钟到几小时不等的场景，例如天文学或材料／束线实验。

3. 方法

本节将介绍如何通过对期望信息增益进行基于梯度的优化，将模拟式贝叶斯推断方法整合到贝叶斯最优实验设计中。具体而言，我们提出一种新的期望信息增益估计器，并概述如何使用我们的方法构建和优化三种现有的期望信息增益界。下文假设计算期望信息增益所用的设计 ξ 是从设计分布 $p(\xi)$ 中抽取的。我们使用模拟式贝叶斯推断方法构建优化期望信息增益所需的变分近似；这些方法旨在隐式似然的背景下估计这些概率密度。重要的是，不同的模拟式贝叶斯推断方法自然对应于不同的期望信息增益下界形式。

3.1. 神经似然估计

作为展示我们方法框架效用的首个示例，我们考虑神经似然估计（NLE）。在 NLE 形式中，似然函数 $p(y|\theta,\xi)$ 由条件密度估计器 $q_\phi(y|\theta,\xi)$ 近似，其参数为 ϕ（Papamakarios 等，2019）。该密度估计器使用从联合分布 $p(\theta,y,\xi) = p(y|\theta,\xi)p(\theta|D)p(\xi)$ 中抽取的样本，通过最大似然进行训练。随后可使用贝叶斯定理从后验分布中获取样本。构建该密度估计器有多种方法，包括使用归一化流（Tabak 和 Turner，2013；Rezende 和 Mohamed，2015）；归一化流在模拟型贝叶斯推断文献中颇受欢迎。

估计量 1：使用神经似然估计的新型直接期望信息增益估计量。与神经似然估计最自然契合的期望信息增益公式采用似然 $p(y|\theta,\xi)$ 和边际似然 $p(y|\xi)$，如公式（2）所示。我们注意到，这两个概率密度共享相同的观测空间，因此使用相同的神经网络架构对它们分别建模，得到

$$\mathrm{EIG}(\xi) \approx \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log \frac{q_\phi(y|\theta,\xi)}{q_\phi(y|\xi)}\right], \qquad (3)$$

其中，独立的归一化流分别对每个密度进行参数化。虽然这一采集函数在概念上简单明了，但据我们所知，它此前尚未应用于贝叶斯最优实验设计。该估计量需要训练两个模型。我们使用估计量 $q_\phi(y|\xi)$，采用与我们训练 $q_\phi(y|\theta,\xi)$相同的参数—观测—设计—数据对训练集。附录 B中提供了对我们方法的分析。

估计量 2：使用神经似然估计的对比估计量。 一种不那么直接的神经似然估计方法是为期望信息增益构造对比估计量（Zaballa和Hui，2025）。该估计量只需要一个用于边际似然的估计量；研究表明，与基于策略的方法相比，它在期望信息增益估计上的表现较差。我们的结果表明，这种较差的表现源于优化问题，可以通过我们的改进加以解决（附录 C）。不过，对比下界的缺点是，需要从先验分布中抽取大量样本，才能获得方差较低的期望信息增益估计。在高维参数空间中，若采用基于复杂归一化流的似然估计器，计算成本尤其高昂。这与公式（3）中的估计量形成对比，后者不需要额外对先验分布样本取期望。因此，我们采用公式（3）作为期望信息增益的标准神经似然估计公式。

3.2. 神经后验估计

与神经似然估计（NLE）估计似然不同，神经后验估计（NPE）使用神经网络直接近似后验分布 $p(\theta|\xi,\ y)$（Papamakarios &Murray，2019年）。具体做法是训练一个条件密度估计器 $q_\phi(\theta|\xi,\ y)$，其参数为 ϕ，使真实后验分布与估计后验之间的 Kullback–Leibler散度最小化。与神经似然估计类似，通常使用归一化流来估计后验分布。

估计量 3：使用 NPE 的 Barber–Agakov界。根据式（1）中期望信息增益的定义，我们用变分后验分布$p(\theta|\xi,\ y)$ 替代真实后验分布 $q_\phi(\theta|\xi,\ y)$，从而得到期望信息增益的下界：

$$\mathrm{EIG}(\xi) \geq \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log q_\phi(\theta|y,\xi)\right]. \qquad (4)$$

NPE 与期望信息增益之间的这种联系称为 Barber–Agakov界（Barber & Agakov，2004），此前已有研究在贝叶斯最优实验设计的背景下对其进行了探讨（Foster 等人，2019年）。迄今为止，归一化流等灵活的变分估计器尚未在贝叶斯最优实验设计领域得到充分探索；本文将填补这一空白。

3.3. 神经比率估计

估计量 4：使用神经比率估计的 InfoNCE界。 执行基于模拟的推断的另一种方式，是使用分类器直接估计似然与证据之比（Thomas等人，2022）。研究表明，这一版本的基于模拟的推断与对比学习方法一致，通常称为神经比率估计（NRE）（Durkan等人，2020b）。将这种方法嵌入贝叶斯最优实验设计，自然促使人们在期望信息增益上使用对比界。对比界已被用于逐轨迹期望信息增益优

算法 1 用于基于模拟推断的贝叶斯最优实验设计的 MPR-GA。期望信息增益估计-tor $\widehat{\text{期望信息增益}}_\phi(\xi)$可使用任何基于模拟的推断本文所述的方法来定义。

要求： 当前后验分布 $p(\theta|D_t)$，设计分布 $p(\xi)$，模拟器 $p(y|\theta,\xi)$
要求： 超参数：M 次重启，K 梯度步，学习率 α，批次大小 S
样本缓冲区 $\Theta \sim p\ (\theta|D_t)$
初始化设计：$\{\xi_j^{(0)}\}_{j=1}^M$ 其中 $\xi_j^{(0)} \sim p\ (\xi)$
对于 $k = 1, \ldots, K$ **do**
  对于 $j = 1, \ldots, M$ **（并行）执行**
    采样 $\{\theta_i\}_{i=\ 1}^S \sim \Theta$
    采样 $\{y_i\}_{i=\ 1}^S$ 其中 $y_i \sim p(y|\theta_i, \xi_j^{(k-1)})$
    使用 SGD 更新 ϕ {适应当前设计}
    $g_j \leftarrow \nabla_\xi \widehat{\text{期望信息增益}}_\phi(\xi_j^{(k-1)})$ 在 $\{(\theta_i, y_i, \xi_j^{(k-1)})\}_{i=1}^S$
    $\xi_j^{(k)} \leftarrow \text{投影}_\Xi\left(\xi_j^{(k-1)} + \alpha \cdot g_j\right)$
  结束循环
结束循环 **返回** $\xi^* \leftarrow \arg\max_j \widehat{\text{期望信息增益}}_\phi(\xi_j^{(K)})$

化（Kleinegesse 与 Gutmann，2019年；Belghazi 等人，2018；Kleinegesse 与 Gutmann，2020）以及基于策略的方法（Ivanova 等人，2021）。特别是，InfoNCE界（van den Oord，2019年）在基于策略的设置中展现出优异性能（Ivanova 等人，2021）；我们首次将其应用于逐轨迹优化。

一般而言，我们将基于模拟推断的密度估计器形式与期望信息增益界形式之间的自然对应关系视为一种优势，并且我们的常规方法是将每种期望信息增益估计器与其对应的基于模拟的推断技术配合使用。不过，也可以混合不同组件。我们发现，将 NPE 后验分布与 InfoNCE 界（与神经比率估计相关的 EIG公式）结合使用，在模型质量和速度方面都可能更有优势。我们将这种混合方法称为 NPE-NRE，而两个组件采用相同技术的方法则用单一名称表示，例如 NRE。其主要优势在于计算效率：神经比率估计需要通过计算成本高昂的马尔可夫链蒙特卡洛进行后验采样，而神经后验估计则可直接从归一化流中生成样本。同样，也可以将神经后验估计样本与式（3）中的神经似然估计器配合使用，从而避免神经似然估计所需的马尔可夫链蒙特卡洛。不过，由于神经似然估计的期望信息增益估计需要评估两个密度模型，其计算成本仍高于 NPE-NRE。

3.4. 多并行重启梯度上升

先前研究一致发现，基于策略的方法优于逐轨迹的期望信息增益基于梯度的优化，无论采用何种变分界（Ivanova 等人，2021；Zaballa和Hui，2025；Dahlke和Pacheco，2025）。对此的一种解释是，基于梯度的优化所使用的变分模型不够灵活，无法捕捉真实后验分布。然而，正如先前研究所示（Ivanova 等人，2021），当使用能够准确估计高维后验分布的基于模拟的推断方法时，我们仍然发现，基于策略的方法优于简单的基于梯度的优化。我们证明，要使逐轨迹的基于模拟推断的贝叶斯最优实验设计能够与基于策略的方法竞争，就必须改进期望信息增益优化，并提出一种实现这一改进的方法，即多并行重启梯度上升（MPR-GA）。

MPR-GA 程序由一种鲁棒的期望信息增益优化策略和在线模型更新规则组成，概述见算法 1。由于期望信息增益通常是设计 ξ的非凸函数，因此需要进行鲁棒优化。为此，我们提出初始化多个候选设计 $\{\xi_j \sim p(\xi)\}_{j=1}^M$，并对每个设计并行执行梯度上升。经过固定数量的梯度步后，选择期望信息增益最高的设计，作为下一次实验的最优设计。这种方法能够探索设计空间，并有助于避免局部最优。

为了在 MPR-GA 优化过程中确保相关设计附近的 EIG 估计质量，模型参数 ϕ 会在设计参数 ξ的每次随机梯度上升迭代中，利用批量模拟数据通过随机梯度下降（SGD）进行在线更新。对 ξ 和 ϕ 的优化分步进行，这与同时更新二者的联合优化程序不同（Foster 等人，2020）。通过分开进行这些更新，我们利用了 SGD 在机器学习模型中的成熟稳定性和收敛性。该方法还有助于公平比较不同的采集优化策略。在为探测器设计问题构建局部生成式代理模型时，这种分步策略已被证明十分有效（Shirobokov 等人，2020）。

MPR-GA 算法利用了若干关键特性，因此在实践中具有较高的计算效率。首先，期望信息增益可自然地按设计分解，这意味着每个候选设计 ξ_j 的梯度都可以独立计算。其次，用于 EIG 估计的变分模型在整个设计空间上进行摊销，从而能够高效计算任意设计点处的所有梯度。第三，现代硬件可以同时并行评估多个设计，通常不会增加实际运行时间，也无需分配单个设计优化之外的额外计算资源。最后，许多科学模拟器天然适合并行处理，因此可以同时为所有 M 候选设计生成合成数据。综合而言，

这些特性使 MPR-GA 能够以很高的并行化效率探索设计空间的 M 不同区域：信息增益会随着 M 迅速增加，随后趋于平稳；而在这一过程的大部分阶段，由于并行执行，实际运行时间几乎保持不变。尽管 MPR-GA 方法可能会增加执行 EIG 优化所需的模拟次数，但它能显著提升选定设计的质量。在真实实验成本高昂的情形下，预计性能提升足以证明额外计算成本是值得的。

MPR-GA 的一个关键挑战在于，设计分布 $p(\xi)$会在优化过程中不断变化。随着候选设计通过梯度上升移动，它们可能聚集在某些区域，或未能探索模型训练数据有限的高期望信息增益区域。由于模拟是在当前设计位置生成的，因此模型在任何区域的准确性都取决于该区域内 $p(\xi)$的密度。如果很少有设计进入高期望信息增益区域，就可能出现问题，因为模型可能无法正确识别这些有价值的区域。

为了解决这一问题，我们引入多样性惩罚，鼓励设计在整个空间中分散开来，具体如下

$$\mathcal{L}_{\text{div}}(\boldsymbol{\xi}) = w(t) \sum_{i<j} \max(0, d_{\min} - \|\boldsymbol{\xi}_i - \boldsymbol{\xi}_j\|_2)^2, \quad (5)$$

其中， $d_{\min}$ 设定最小间隔阈值， $\|\cdot\|_2$表示欧几里得距离，而 $w(t)$会在经过固定步数 t后逐渐退火至零。通过防止设计坍缩到单一位置，这一惩罚能够维持更均匀的覆盖，并有助于确保模型在已探索区域内持续保持良好性能。初始分布 $p(\xi)$也应合理覆盖设计空间，我们将探讨这一选择对 MPR-GA 性能的影响。尽管存在这些挑战，我们发现该方法在实践中表现得极为稳健。对于我们考察的所有基准测试，简单的多样性惩罚结合合理的初始化，无需仔细调参，就能在整个优化过程中维持足够的模型质量。

3.5. 序贯模拟式推断

要计算设计 ξ 的期望信息增益，需要从分布 $p(\theta|D)$ 中采样。在进行任何测量之前，这就是先验分布；但每次测量之后，它都会被当前后验分布取代。无需显式知道该密度，只需从中采样即可。所有后验估计都将通过针对序贯数据采集场景进行调整的模拟式贝叶斯推断方法得出。尽管模拟式贝叶斯推断方法已在不同科学领域得到广泛探索，但将其用于序贯数据采集——即每次测量后更新后验分布——仍有若干方面尚未得到研究。

我们确定了在序贯场景下更新后验分布的两种方法。第一种方法是将当 $p(\theta|D)$前后验分布作为下一轮推断的先验分布，并定义一个仅以最新观测和设计对为条件的条件密度估计器。第二种方法是训练一个新的条件密度估计器，该估计器以所有先前的观测和设计，以及从先验分布 $p(\theta)$ 或其他提议分布 $\pi(\theta)$中采样得到的样本为条件。采用哪种方法取决于所使用的模拟式贝叶斯推断方法。以往的研究联合进行了设计优化和后验更新（Kleinegesse 与 Gutmann，2020），但我们指出，这严格属于第一种方法，无法灵活选择两者之一。联合方法可能因仅使用当前后验分布中的样本进行训练而产生有偏设计。为避免这一问题，我们将设计优化与后验更新分开进行。

对于神经似然估计和神经比率估计方法，我们会像第二种方案那样，训练以所有已测量设计点为条件的变分模型。这样，我们便可以使用简便的马尔可夫链蒙特卡洛（MCMC），结合梅特罗波利斯-黑斯廷斯算法（Hastings，1970）从后验分布中生成样本。原则上，这两种方法都可以基于来自任意提议分布 π（θ）的样本进行训练，其中也包括当前后验分布，但我们发现这样可能会引入偏差。作为替代，我们采用当前后验分布与先验分布样本的等权混合。对于神经后验估计，我们采用第一种方案，将当前后验估计作为下一轮推断的先验。这类似于现有的自适应模拟方案（Lueckmann 等人，2017；Greenberg 等人，2019年），这些方案会逐步优化参数的提议分布。在每一轮中，我们训练一个条件密度估计器q_ϕ（$\theta|\xi$， y），仅根据最新的观测和设计对来近似后验分布。这种方法每轮只需训练一个密度估计器，从而降低计算成本。在此情形下，还可以使用自适应模拟方案进一步提高模拟效率。

4. 结果

本节中的所有结果都将模拟器视为隐式模型，其似然函数难以计算，只能通过样本获取。我们采用序贯先验对比估计（sPCE）界作为主要指标（Foster 等人，2021年），该界为一系列测量所获得的总信息量提供下界。这一界是贝叶斯最优实验设计文献中的标准指标。接下来，我们将首先展示 MPR-GA 程序的影响，然后与最先进的基线方法进行比较。我们主要将所提出的方法与深度自适应设计（DAD）（Foster 等人，2021年）以及强化学习贝叶斯最优实验设计（RL-BOED）（Blau 等人，2022）进行比较。这两种方法都是最先进的基于策略的方法，且表现始终优于逐轨迹技术。

除非另有说明，所有 MPR-GA 程序均运行 $K = 12000$ 步，使用 $S = 3$ 个样本。InfoNCE界始终使用 1024 个对比样本进行估计。所有流均由有理二次样条层构建（Durkan等人，2019年）。有关所有模型的详细信息，请参见附录 D。计算成本的完整明细见附录 E。所有代码均可在以下网址获取：github.com/sambklein/sbi-boed。

4.1. 改进采集优化

我们首先评估 MPR-GA 在单轮数据采集中的表现，此时会根据当前后验分布选择一个设计。由于计算成本较低，我们可以多次评估这一情形，从而准确估计 sPCE 界。我们考虑在二维空间中定位两个源的问题（需要学习的参数总数为四个），并使用带噪传感器测量（Foster 等人，2021）。每个数据采集步骤都包括将传感器放置在设计位置ξ 并记录来自两个源的总强度，其中包含噪声。每个源的强度会随其到传感器距离的平方而衰减。选择这一设置，是因为它会产生具有结构的后验分布，设计空间连续且需要进行基于梯度的优化，并且会出现多个局部极小值，从而对优化方法构成挑战。为探索具有有趣后验结构的设置，我们在两个不同位置同时进行观测；其中一个点选在原点，另一个点则通过随机选择两个源中的一个，再从以该源为中心、半径为 0.5 的球体内均匀采样来确定。

进行两次观测后，使用神经后验估计（NPE）定义后验分布，并使用每种期望信息增益公式选择设计。之所以使用 NPE 定义后验分布，是因为它能够借助归一化流高效地从后验分布中采样，从而使整个流程的计算成本较低。由于所有期望信息增益公式使用相同的后验样本，这一选择不会偏向任何特定方法。图1展示了一个后验分布及其对应的优化过程。该图凸显了在梯度上升过程中进行多次重启的必要性，因为许多候选设计会陷入较差的局部最优，而且在 ξ的许多区域中，期望信息增益曲面较为平坦。

我们探究了MPR-GA策略中所使用的设计数量以及用于初始化设计点的策略所产生的影响。我们默认的初始化策略是从给定分布 $p(\xi)$中随机采样设计。以往关于源定位的工作通过分别从先验分布中为单个源抽取样本来生成随机设计；这被视为默认的随机设计初始化方式。然而，另一种策略是利用当前后验分布来采样设计。我们清楚地看到多次重启能显著提升所考虑的所有EIG公式的性能，如图2所示。我们还看到，初始化策略具有显著影响：用来自当前后验分布的样本对优化进行初始化，可以用更少的重启次数使性能达到饱和。重要的是，每种方法所需的计算时间随重启次数的增加而缓慢增长，从而能够以极小的额外计算成本获得显著的性能提升。

使用带有公式（5）所示多样性惩罚的 MPR-GA 程序，可提升所有受评估的基于模拟的推断方法的性能（附录C）。以下结果中的所有优化均采用多样性惩罚。使用对比下界计算期望信息增益的神经似然估计方法，在采用 MPR-GA 和 1024 个对比样本时，性能与其他方法相近；但由于所需的先验样本数量很大，其速度约比采用公式（3）的方法慢6 倍，因此我们决定不将其纳入基准测试。有关多样性惩罚和对比式神经似然估计的更多详情，请参见附录C 。所有方法均在单块 NVIDIA RTX 2080 Ti GPU 上进行了基准测试。

4.2. n维空间中的源定位

为了与最先进的基于策略的方法进行比较，我们转向完整问题：在二维、三维和五维空间中定位两个源的位置。这意味着参数维度分别为 4、6 和 10。我们考虑进行十轮数据采集。按照上述识别出的后验估计与期望信息增益公式之间的对应关系，首先对每种模拟式贝叶斯推断方法进行基准测试，如表 1 所示。在基准测试中，我们发现所有模拟式贝叶斯推断方法的表现相近，但神经后验估计作为后验估计器的速度显著更快，而神经比率估计的期望信息增益表述用于采集时的计算速度显著更快。由于这种组合在计算上效率最高，我们在后续实验中重点采用 NPE-NRE 方法。不过，我们强调，NPE-NRE 的这一优势仅适用于我们的基准测试场景；在实际应用中，各方法的表现将很大程度上取决于具体的模拟设计和基础设施。

迄今为止，源定位基准上已发表的最佳结果是使用 DAD*（Ivanova 等人，2021）取得的。DAD* 是一种基于策略的方法，通过采样使期望信息增益最大化的设计。采用 256 次重启运行 MPR-GA 程序时，我们发现，正如表 1所示，三种基于模拟推断的贝叶斯最优实验设计方法在二维源定位任务中均显著优于 DAD，而在其他考察的维数下表现相近。我们还发现，在所有考察的维度下，MPR-GA 的表现均显著优于仅使用单次设计初始化的基于梯度的优化方法（Kleinegesse 与 Gut- mann，2019年；Belghazi 等人，2018；Kleinegesse 与 Gutmann，2020）。具体而言，尽管

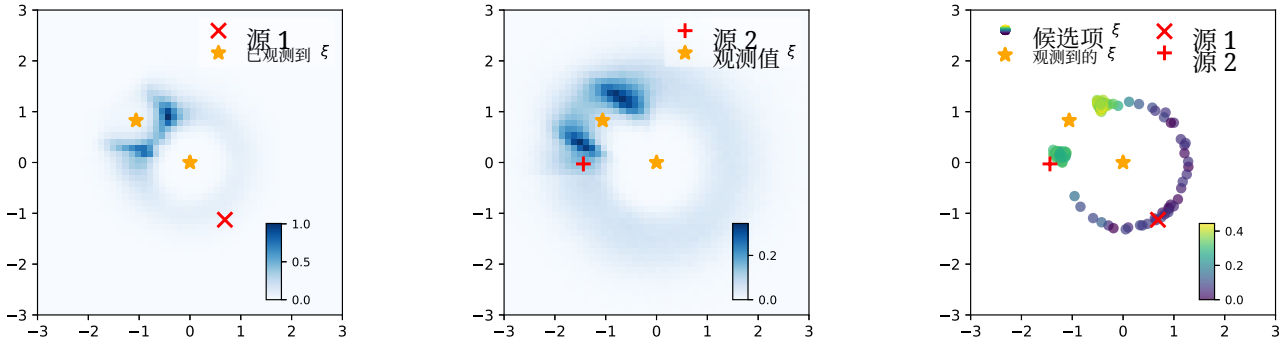


图*1.* 在两个设计点进行观测后，第一个（左）和第二个（中）源的后验样本。观测到的设计 ξ、源位置，以及使用神经比率估计方法（右）运行 MPR-GA 采集优化、重启 256 次并迭代 12000 步后得到的候选设计分布。

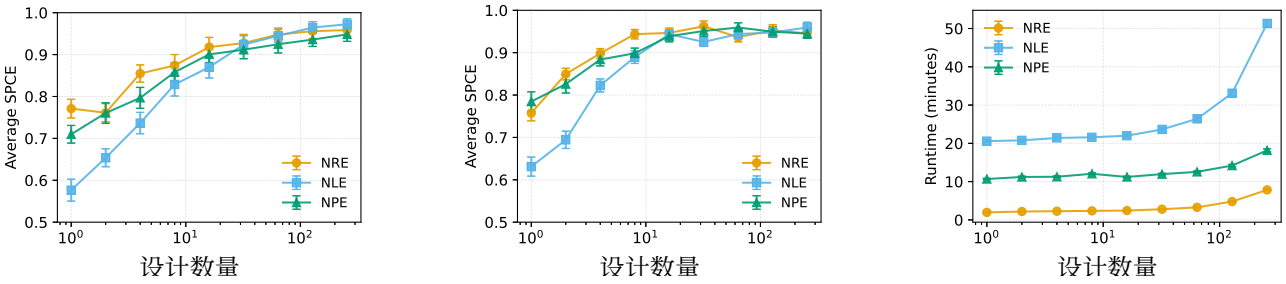


图*2.* 针对不同模拟式贝叶斯推断方法，对 MPR-GA 所用重启次数进行消融实验。使用多次重启显著提升了所有受考察模拟式贝叶斯推断方法的性能。误差条表示 50 个随机种子下的标准误。考察了不同的初始化策略：随机设计（左）和从当前后验分布中采样（中）。同时展示了各方法的时序（右）。

$M = 1$ 神经比率估计和 MINEBED* 表现相近，$M = 256$ 神经比率估计则取得了显著提升，这得益于优化方法的改进。我们强调，我们的改进使性能较以往的逐轨迹方法有了显著飞跃。逐轨迹方法在二维情况下表现出色，但在更高维度下优势逐渐减弱；这表明后验估计质量会随着维度升高而下降，从而妨碍逐轨迹优化，同时也意味着可能需要更多 MPR-GA 候选设计。

4.3. 药代动力学模型

我们考虑的下一个基准是药代动力学模型（Ivanova 等人，2021；Ryan 等人，2014）。该药代动力学模型涉及选择测量药物浓度的时间点，以便最佳地推断药代动力学参数。这是一个一维设计问题，由于策略式方法部署速度快，因此应能在此类问题上表现出色。设计分布 $p(\xi)$ 设定为在整个设计空间上均匀分布。

我们发现，逐轨迹优化在前三次测量中找到了高度一致的设计。NPE-NRE方法在不同的实验运行中，通常会选择大致相同的三个时间点。将这些时间点用作静态设计

基线方法在表2所示的三项指标上均优于 DAD 和 RL-BOED 方法，即使这两种方法的策略都经过重新训练，只执行三次测量也是如此。值得注意的是，这种静态基线无需部署时间，性能更好，执行速度也快于训练好的策略。

这一结果对基于策略的方法的核心优势——快速部署——提出了质疑，并表明即使在策略本应表现出色的情境下，也可能需要改进策略训练方法。我们注意到，随着测量次数增加，SBI逐轨迹方法的优势会减弱；测量五次后，DAD 的表现与 NPE-NRE 相近。对于五次测量的静态基线，我们发现重复使用三次测量静态基线所用三个时间点中的两个效果很好，这再次表明，对于这个问题，可能存在性能强劲的静态基线。

4.4. 常数替代弹性

在最后一个基准测试中，我们考虑常数替代弹性（CES）生产函数模型（Foster 等人，2020）。在此设定中，设计空间为六维，感兴趣参数为五维。每条轨迹进行十次测量，我们

表 *1*。 采用不同采集方法和维度进行源定位时的平均 sPCE 下界。误差以标准误表示。DAD* 和 MINEBED* 的比较数值取自 iDAD 论文（Ivanova 等人，2021），其中该模型表现最佳。除 NPE-NRE 外，所有模拟式贝叶斯推断—贝叶斯最优实验设计方法均取 10 次运行的平均值；NPE-NRE 取 100 次运行的平均值，其他所有方法均使用 4096 次运行。

方法	2D	3D	5D
随机	4.79 ± 0.04	3.47 ± 0.01	1.89 ± 0.01
基于策略的			
DAD*	7.97 ± 0.03	6.30 ± 0.03	3.34 ± 0.04
RL-BOED	6.86 ± 0.05	4.95 ± 0.05	–
每条轨迹 M = *1* 重启			
MINEBED*	5.52 ± 0.03	4.22 ± 0.03	2.46 ± 0.03
NRE	5.67 ± 0.59	4.39 ± 0.85	2.58 ± 0.79
每条轨迹 M = *256* 次重启			
NRE	7.41 ± 0.64	6.44 ± 0.92	3.07 ± 0.87
NLE	$\mathbf{9.62 \pm 0.82}$	5.37 ± 0.76	3.01 ± 0.86
NPE	9.12 ± 0.99	5.08 ± 0.97	$\mathbf{3.62 \pm 0.60}$
NPE-NRE	9.27 ± 0.31	$\mathbf{6.44 \pm 0.28}$	3.13 ± 0.20

表2. </style}药代动力学模型在经过 T 次测量后的平均 sPCE 下界。误差表示实验运行中的标准误。NPE-NRE 基线方法进行了 100 次运行，其他所有方法（包括静态基线）均进行了 4096 次运行。

方法	$T = 3$	$T = 5$
随机	2.14 ± 0.02	2.75 ± 0.03
DAD	2.12 ± 0.02	$\mathbf{3.23 \pm 0.02}$
RL-BOED	2.37 ± 0.03	2.98 ± 0.03
NPE-NRE	2.50 ± 0.14	3.20 ± 0.13
NPE-NRE（静态）	$\mathbf{2.56 \pm 0.02}$	3.13 ± 0.02

发现，MPR-GA 程序需要进行 36000 次梯度更新才能收敛。我们发现，NPE-NRE 的表现显著优于现有方法，其期望信息增益达到 15.97 ± 0.34，而 13.97 ± 0.06 是 RL-BOED 的结果，10.77 ± 0.08 是 DAD 的结果。值得注意的是，NPE-NRE 仅用 6 次测量便达到 RL-BOED 的峰值表现，而非 10 次，这既体现了其最终表现更优，也表明其获取信息的速度更快。结果如图 3所示。有趣的是，逐轨迹方法在早期测量中表现较差，但在后期超越了基于策略的方法，这表明随着时间推移，后验估计质量的提升有助于更有效地进行设计选择。设计分布 $p(\xi)$ 设为在整个设计空间上的均匀分布。

5. 结论

我们证明，现代模拟式贝叶斯推断方法结合改进的优化，能够使逐轨迹贝叶斯最优实验设计

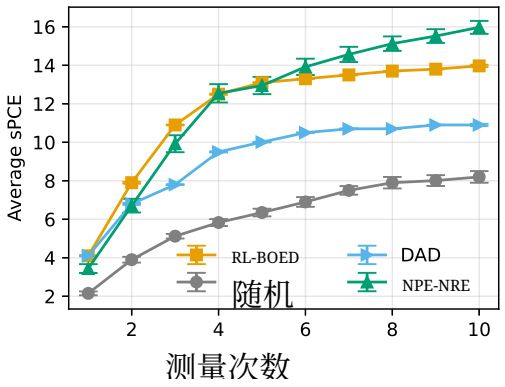


图 *3.* CES 实验经过 10 次测量后的平均 sPCE 下界。误差表示不同运行结果均值的标准误。NPE-NRE 进行了 100 次运行，所有其他方法均进行了 4096 次运行。

达到或超越最先进的基于策略的方法，并显著优于以往所有逐轨迹方法。我们的框架将三种主要的模拟式贝叶斯推断方法（神经后验估计、神经似然估计、神经比率估计）与变分期望信息增益下界相连接，使从业者能够直接利用现有的模拟式贝叶斯推断基础设施进行实验设计。一个关键见解是，逐轨迹方法过去表现不佳，源于优化失败。我们的 MPR-GA 程序结合并行重启与在线模型适应，在二维源定位任务上较此前最先进的方法提升了至多 22%，在 CES 基准上较表现最佳的基于策略的方法提升了 14%。值得注意的是，通过逐轨迹优化得到的静态设计，其表现可以优于训练好的策略，同时无需任何部署时间，这对策略摊销必不可少这一假设提出了挑战。

在高维设置下，我们相较于基于策略的方法的优势有所减弱，这很可能是因为后验估计质量限制了采集效果。这凸显了开发专门针对序贯贝叶斯最优实验设计的模拟式贝叶斯推断方法的必要性——这一方向在模拟式贝叶斯推断领域尚未得到充分探索。这也表明，有必要改进基于策略的贝叶斯最优实验设计方法，尤其是在关键数据采集场景中。未来的工作还应研究混合方法，例如将基于策略的初始化与逐轨迹细化相结合、改进序贯采集过程中的后验验证，以及降低运行 MPR-GA 算法的模拟负担的技术。

致谢

我们谨此感谢 Zhe Zhang 为本手稿提供了宝贵的反馈意见。S.K. 和 S.G. 得到了美国能源部在 SLAC 国家加速器实验室实施的实验室定向研究与开发计划的支持，

该实验室依据合同 DE-AC02-76SF00515 运营。M.K. 获得美国能源部（DOE）拨款编号 DE-AC02-76SF00515 的支持。W.N. 获得美国国家科学基金会（NSF）奖项编号 2427856 的支持。

影响声明

本文旨在推动《机器学习》领域的发展。我们的工作可能会对社会产生诸多影响，但我们认为没有哪项影响需要在此特别强调。

参考文献

Aad, G. 等. ATLAS 中用于参数估计的神经网络模拟推断实现。《物理学进展报告》, 88(6):067801, 2025年. doi: 10.1088/ 1361-6633/add370.

Alsing, J., Charnock, T., Feeney, S., 和 Wandelt, B. 利用神经密度估计器和主动学习进行快速无似然宇宙学研究。《皇家天文学会月报》, 2019年7月. doi: 10.1093/ mnras/stz1960.

Ansel, J., Yang, E., He, H., Gimelshein, N., Jain, A., Voznesensky, M., Bao, B., Bell, P., Berard, D., Burovski, E., Chauhan, G., Chourdia, A., Constable, W., Desmaison, A., DeVito, Z., Ellison, E., Feng, W., Gong, J., Gschwind, M., Hirsh, B., Huang, S., Kalambarkar, K., Kirsch, L., Lazos, M., Lezcano, M., Liang, Y., Liang, J., Lu, Y., Luk, C., Maher, B., Pan, Y., Puhrsch, C., Reso, M., Saroufim, M.-A., Siraichi, M. Y., Suk, H., Zhang, S., Suo, M., Tillet, P., Zhao, X., Wang, E., Zhou, K., Zou, R., Wang, X., Mathews, A., Wen, W., Chanan, G., Wu, P., and Chin- tala, S. *PyTorch 2*: 通过动态 *Python* 字节码转换和图编译加速《机器学习》. 2024年。

Arts, R., Zalmstra, B., Vollprecht, W., de Jager, T., Morcotilo, N. 和 Hofer, J. pixi. 网址 https://github.com/prefix-dev/pixi/releases/tag/v0.63.2。

Barber, D. 和 Agakov, F. 信息最大化算法：一种信息最大化的变分方法。神经信息处理系统进展，16(320):201, 2004。

Baydin, A. G., Pearlmutter, B. A., Radul, A. A. 和 Siskind, J. M. 机器学习中的自动微分：综述。《机器学习研究期刊》，18(153):1–43，2018。网址 http://jmlr.org/papers/v18/17-468.html。

Belghazi, M. I., Baratin, A., Rajeshwar, S., Ozair, S., Bengio, Y., Courville, A. 和 Hjelm, D. 互信息神经估计。发表于《第*35*届国际机器学习大会，第80卷，第531–540页。PMLR, 2018年7月10–15日。网址：https://proceedings.mlr.press/v80/belghazi18a.html。

Blau, T., Bonilla, E. V., Chades, I. 和 Dezfouli, A. 利用深度强化学习优化序贯实验设计。发表于第*39*届国际机器学习大会论文集，第162卷，第2107–2128页。PMLR，2022年7月17–23日。网址：https://proceedings.mlr.press/v162/blau22a.html。

Boelts, J., Deistler, M., Gloeckler, M., AlvaroTejero-Cantero, Lueckmann, J.-M., Moss, G., Steinbach,P.,Moreau, T., Muratore, F., Linhart, J., Durkan, C.,Vet-ter, J., Miller, B.K., Herold, M., Ziaeemehr, A., Pals,M., Gruner, T., Bischoff, S., Krouglova, N., Gao,R.,Lappalainen, J. K., Mucs´anyi, B., Pei, F., Schulz, A.,Ste-fanidi, Z., Rodrigues, P.,Schr¨oder, C., Zaid, F. A., Beck,J., Kapoor, J., Greenberg, D. S., Gonc,alves, P. J. 和 Macke, J. sbi reloaded：用于基于模拟的推断工作流的工具包。《开放源代码软件期刊》，10(108):7754，2025年。doi: 10.21105/joss.07754。Cranmer, K., Brehmer, J. 和 Louppe, G. 基于模拟的推断前沿。《美国国家科学院院刊》，117(48):30055–30062，2020。doi: 10.1073/pnas.1912789117。网址：https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.1912789117。

Dahlke, C. 和 Pacheco, J. 基于流的变分互信息：快速而灵活的近似。发表于国际学习表征会议，第2025卷，第68771–68793页，2025年。网址：https://openreview.net/forum?id=spDUv05cEq。

Dax, M., Green, S. R., Gair, J., Macke, J. H., Buonanno, A. 和 Sch¨olkopf, B. 利用神经后验估计开展实时引力波科学研究。《物理评论快报》，127:241103，2021年12月。doi: 10.1103/PhysRevLett.127. 241103。Deistler, M., Goncalves, P. J. 和 Macke, J. H. 面向可扩展、便捷的基于模拟的推断的截断提议分布。神经信息处理系统进展，35:23135–23149，2022年。

Durkan, C., Bekasov, A., Murray, I. 和 Papamakarios, G. 神经样条流。发表于神经信息处理系统进展，第32卷。Curran Associates, Inc.，2019年。网址：https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2019/file/7ac71d433f282034e088473244df8c02-Paper.pdf。

Durkan, C., Bekasov, A., Murray, I., and Papamakarios, G. nflows：PyTorch 中的归一化流，2020年11月a。

Durkan, C., Murray, I., and Papamakarios, G. 关于无似然推断的对比学习。载于 第 *37* 届国际机器学习会议论文集，第 119 卷，第 2771–2781 页。PMLR，2020 年 7 月 13–18 日b。网址：
h
ttps://proceedings.mlr.press/v119/durkan20a.html。

Feickert, M., Arts, R. 和 Kirkham, J. 面向科学家的可复现机器学习工作流：使用 pixi。第 232–244 页，2025。

Foster, A., Jankowiak, M., Bingham, E., Horsfall, P., Teh, Y. W., Rainforth, T. 和 Goodman, N. 变分贝叶斯最优实验设计。载于神经信息处理系统进展，第 32 卷。Curran Associates, Inc.，2019年。网址：
https://proceedings.neurips.cc/paper_
f
iles/paper/2019/file/d55cbf210f175f4a37916eafe6c04f0d-Paper
pdf. Foster, A., Jankowiak, M., O'Meara, M., Teh, Y. W., and Rainforth, T. 用统一的随机梯度方法设计贝叶斯最优实验。载于 第二十三届人工智能与统计国际会议论文集，第108卷，第 2959–2969页。PMLR，2020年8月26–28日。网址：
h
ttps://proceedings.mlr.press/v108/foster20a.html。
Foster, A., Ivanova, D. R., Malik, I., and Rainforth, T. 深度自适应设计：摊销序贯贝叶斯实验设计。载于 第*38*届国际机器学习会议论文集，第139卷，第3384–3395页。PMLR，2021年7月18–24日。网址：
h
ttps://proceedings.mlr.press/v139/foster21a.html。
Gasiorowski, S., Chen, Y., Nashed, Y., Granger, P., Mironov, C., Vang Tsang, K., Ratner, D., and Terao, K. 液氩时间投影室的可微分模拟。载于 机器学习：科学与技术，5(2): 025012，2024年4月。doi: 10.1088/2632-2153/ad2cf0。Greenberg, D., Nonnenmacher, M., and Macke, J. 用于无似然推断的自动后验变换。载于第*36*届国际机器学习会议论文集，第97卷，第2404–2414页。PMLR，2019年6月09–15日。网址
h
t
t
ps://proceedings.mlr.press/v97/greenberg19a.html。
Griesemer, S., Cao, D., Cui, Z., Osorio, C., and Liu, Y. 面向样本高效的基于模拟的推断的主动序贯后验估计。载于 神经信息处理系统第三十八届年会论文集，2024年。网址：
https://openreview.net/forum?id=fkuseU0nJs。

Harris, C. R., Millman, K., Walt, S., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., Kern, R., Picus, M., Hoyer, S., Kerkwijk, M., Brett, M., Haldane, A., del R'io, J. F., Wiebe, M., Pe- terson, P., G'erard-Marchant, P., Sheppard, K., Reddy, T., Weckesser, W., Abbasi, H., Gohlke, C., and Oliphant, T. 使用NumPy进行数组编程。《自然》，585:357–362，2020。

Hastings, W. K. 使用马尔可夫链及其应用的蒙特卡罗采样方法。*Biometrika*，57（1）：97–109，1970。ISSN 00063444, 14643510。网址：
http://www.jstor.org/stable/2334940。

Heinrich, L. 和 Kagan, M. 使用 MadJAX 计算可微矩阵元。《物理学杂志：会议系列》，2438(1):012137，2023 年 2 月。doi: 10.1088/1742-6596/ 2438/1/012137。

Hermans, J.、Delaunoy, A.、Rozet, F.、Wehenkel, A.、Begy, V. 和 Louppe, G. 仿真推断领域的危机？当心，你的后验近似可能并不忠实。*TMLR*，2022。网址：
https://openreview.net/forum?id=LHAbHkt6Aq。

Hunter, J. D. Matplotlib：一种二维图形环境。《科学与工程计算》，9(3):90–95，2007。doi: 10.1109/MCSE.2007.55。

Ivanova, D. R., Foster, A., Kleinegesse, S., Gutmann, M. 和 Rainforth, T. 隐式深度自适应设计：无需似然的基于策略的实验设计。神经信息处理系统进展，34:25785– 25798，2021。

Kleinegesse, S. 和 Gutmann, M. 面向隐式模型的高效贝叶斯实验设计。载于 第二十二届人工智能与统计国际会议论文集，第 89 卷，第 476–485 页。PMLR，2019 年 4 月 16–18 日。网址：
h
t
tps://proceedings.mlr.press/v89/kleinegesse19a.html。

Kleinegesse, S. 和 Gutmann, M. 通过互信息神经估计实现面向隐式模型的贝叶斯实验设计。载于 第 *37* 届国际机器学习会议论文集，第 119 卷，第 5316– 5326 页。PMLR，2020 年 7 月。网址：https://icml.cc/。

Kochkov, D., Yuval, J., Langmore, I., Norgaard, P., Smith, J., Mooers, G., Kl¨ower, M., Lottes, J., Rasp, S., D¨uben, P., Hatfield, S., Battaglia, P., Sanchez-Gonzalez, A., Willson, M., Brenner, M. P. 和 Hoyer, S. 用于天气和气候的神经通用环流模型。《自然》，632(8027)：1060–1066，2024年。doi: 10.1038/s41586-024-07744-y。

Loshchilov, I. 和 Hutter, F. 解耦权重衰减正则化，2019年。网址https://arxiv.org/abs/1711.05101。

¨Lueckmann, J.-M.、Goncalves, P. J.、Bassetto, G.、Ocal, K.、Nonnenmacher, M. 和 Macke, J. 神经动力学机制模型的灵活统计推断。载于 神经信息处理系统进展，第30卷。Curran Associates, Inc.，2017年。网址https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2017/file/addfa9b7e234254d26e9c7f2af1005cb-Paper.pdf。Lueckmann, J.-M.、Boelts, J.、Greenberg, D.、Goncalves, P. 和 Macke, J. 基于模拟的推断基准测试。载于第*24*届国际人工智能与统计学会议论文集，第130卷，第343–351页。PMLR，2021年4月13–15日。网址 https://proceedings.mlr.press/v130/lueckmann21a.html。Mohamed, S.、Rosca, M.、Figurnov, M. 和 Mnih, A. 机器学习中的蒙特卡罗梯度估计。机器学习研究期刊，21(132)：1–62，2020。网址 http://jmlr.org/papers/v21/19-346.html。M¨older, F.、Jablonski, K. P.、Letcher, B. 等。使用 Snakemake 进行可持续数据分析。*F1000Research*，10:33，2025。doi：10.12688/f1000research.29032.3。第3版；同行评审：2项获批准。Papamakarios, G. 和 Murray, I. 基于模拟模型的快速 ϵ无似然推断：贝叶斯条件密度估计。载于神经信息处理系统进展，第29卷。Curran Associates, Inc.，2016年。网址 https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2016/file/6aca97005c68f1206823815f66102863-Paper.pdf。Papamakarios, G.、Sterratt, D. 和 Murray, I. 序列神经似然：使用自回归流进行快速无似然推断。载于第二十二届国际人工智能与统计学会议论文集，第89卷，第837–848页。PMLR，2019年4月16–18日。网址 https://proceedings.mlr.press/v89/papamakarios19a.html。Rainforth, T.、Cornish, R.、Yang, H.、Warrington, A. 和 Wood, F. 关于嵌套蒙特卡洛估计量。载于 第*35*届国际机器学习大会论文集，第80卷，第4267–4276页。PMLR，2018年7月10–15日。网址 https://proceedings.mlr.press/v80/rainforth18a.html。Rainforth, T.、Foster, A.、Ivanova, D. R. 和 Smith, F. B. 现代贝叶斯实验设计。统计科学，39(1)：100–114，2024年2月。doi：10.1214/23-STS915。Rezende, D. 和 Mohamed, S. 使用归一化流进行变分推断。载于 第*32*届国际机器学习会议论文集，第37卷，第1530–1538页。PMLR，2015年7月7–9日。网址 https://proceedings.mlr.press/v37/rezende15.html。Ryan, E. G., Drovandi, C. C., Thompson, M. H. 和 Pettitt, A. N. 面向需要大量采样时间的非线性模型的贝叶斯实验设计。《计算统计与数据分析》，70：45–60，2014年。Shirobokov, S., Belavin, V., Kagan, M., Ustyuzhanin, A. 和 Baydin, A. G. 使用局部生成式代理模型进行黑箱优化。载于神经信息处理系统进展，第33卷，第14650–14662页。Curran Associates, Inc.，2020。网址 https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2020/file/a878dbebc902328b41dbf02aa87abb58-Paper.pdf。Simpson, N. 和 Heinrich, L. neos：面向高能物理的端到端优化汇总统计量。《物理学杂志：会议系列》，2438(1)：012105，2023年2月。doi：10.1088/1742-6596/2438/1/012105。Tabak, E. G. 和 Turner, C. V. 一类非参数密度估计算法。《纯粹与应用数学通讯》，66(2)：145–164，2013年。Thomas, O., Dutta, R., Corander, J., Kaski, S. 和 Gutmann, M. 通过比率估计进行无似然推断。《贝叶斯分析》，17(1)：1–31，2022年。van den Oord, A.、Li, Y. 和 Vinyals, O. 使用对比预测编码进行表征学习，2019年。网址 https://arxiv.org/abs/1807.03748。Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S. J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A. R. J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C. J., Polat, ˙I., Feng, Y., Moore, E. W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E. A., Harris, C. R., Archibald, A. M., Ribeiro, A. H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P. 和 SciPy 1.0 贡献者。SciPy 1.0：Python 科学计算的基础算法。《自然·方法》，17：261–272，2020。doi：10.1038/s41592-019-0686-2。Williams, R. J. 用于联结主义强化学习的简单统计梯度跟随算法。《机器学习》，8(3)：229–256，1992年。doi：10.1007/ BF00992696。

Wiqvist, S., Frellsen, J. 和 Picchini, U. 序贯神经后验分布与似然近似，2021年。网址 https://arxiv.org/abs/2102.06522。

Yadan, O. Hydra——用于优雅配置复杂应用程序的框架。GitHub，2019年。网址 https://github.com/facebookresearch/hydra。

Zaballa, V. D. 和 Hui, E. E. 通过互信息优化似然：连接基于模拟的推断与贝叶斯最优实验设计，2025。网址https://arxiv.org/abs/2502.08004。

A. 可微模拟器与梯度估计

我们的方法依赖于针对设计 ξ对期望信息增益进行基于梯度的优化。计算这些梯度需要对一个期望值进行反向传播，即

$$\nabla_\xi \mathrm{EIG}(\xi) = \nabla_\xi \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log \frac{p(y|\theta,\xi)}{p(y|\xi)}\right]. \tag{6}$$

该梯度可以通过分布梯度（Williams，1992）或路径导数梯度进行估计。

分布　　梯度估计量将期望视为积分，并通过密度进行求导　　：

$$\nabla_\xi \mathbb{E}_{p(y|\theta,\xi)}[f(y)] = \mathbb{E}_{p(y|\theta,\xi)}\left[f(y)\nabla_\xi \log p(y|\theta,\xi)\right]. \tag{7}$$

这些估计量适用于任意模拟器，但方差较高，通常需要采用控制变量等方差缩减技术（Mohamed 等人，2020）。对于隐式模拟器（例如本文所研究的模拟器），$p(y|\theta,\ \xi)$ 是难以处理的，因此若无额外近似，无法计算 $\nabla_\xi \log\ p(y|\theta,\ \xi)$。

路径导数梯度估计器则通过样本进行求导。当模拟器可以表示为 $y = g(\theta,\ \xi,\ \epsilon)$，其中 $\epsilon \sim p(\epsilon)$ 是独立于 ξ 的随机源时，我们可以写成

$$\nabla_\xi \mathbb{E}_{p(y|\theta,\xi)}[f(y)] = \mathbb{E}_{p(\epsilon)}\left[\nabla_\xi f(g(\theta,\xi,\epsilon))\right]. \tag{8}$$

该梯度通过自动微分沿着模拟器的计算图直接传递。路径导数估计量的方差通常远低于分布梯度估计量，而且无需明确知道 $p(y|\theta,\ \xi)$。

我们的工作假设模拟器是可微的，从而能够进行路径导数梯度估计。随着可微模拟器在科学计算中日益普及，这一关于模拟器兼容路径导数梯度的假设正变得越来越切合实际。近期的例子包括粒子物理模拟（Gasiorowski 等人，2024年；Heinrich 与 Kagan，2023）以及分析（Simpson 与 Heinrich，2023）。

对于不可微模拟器，我们仍可通过用分布梯度估计器或无梯度优化方法替代路径导数梯度来应用我们的框架。不过，这需要对 MPR-GA 算法进行重大修改，而且可能会降低计算效率。为不可微模拟器开发高效的贝叶斯最优实验设计方法，仍是未来研究的一个重要方向。

B. 使用 NLE 的直接 EIG 估计器

考虑使用变分分布分别近似边际似然和条件似然。令$q_0(y|\xi)$为边际似然 $p(y|\xi)$的一个近似，并令 $r_\phi(y|\theta,\xi)$为条件似然 $p(y|\theta,\xi)$的一个近似。

真实的期望信息增益定义为

$$\mathrm{EIG}(\xi) = \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log p(y|\theta,\xi) - \log p(y|\xi)\right]. \tag{9}$$

使用变分近似的一种自然的代入估计量为

$$\mathcal{L}(\xi) = \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log r_\phi(y|\theta,\xi) - \log q_0(y|\xi)\right]. \tag{10}$$

为理解该估计量与真实期望信息增益之间的关系，我们将两者之差分解为：

$$\begin{aligned}\mathrm{EIG}(\xi) &= \mathbb{E}_{p(\theta|D)p(y|\theta,\xi)}\left[\log p(y|\theta,\xi) - \log p(y|\xi)\right] &(11)\\ &= \mathcal{L}(\xi) + \mathbb{E}_{p(\theta|D)}\left[\mathrm{KL}\big(p(y|\theta,\xi)\ \|\ r_\phi(y|\theta,\xi)\big)\right] - \mathrm{KL}\big(p(y|\xi)\,\|\,q_0(y|\xi)\big). &(12)\end{aligned}$$

由于两个 KL 项均非负，式（12）表明，$\mathcal{L}(\xi)$既不能保证是真实期望信息增益的上界，也不能保证是其下界。相反，它与真实值的差等于两个非负项之差。第一项 $\mathbb{E}_{p(\theta|D)}\left[\mathrm{KL}\big(p(y|\theta,\xi)\ \|\ r_\phi(y|\theta,\xi)\big)\right]$衡量变分条件 r_ϕ 对真实条件似然的逼近程度，并对 θ取平均。第二项 $\mathrm{KL}\big(p(y|\xi)\ \|\ q_0(y|\xi)\big)$ 衡量变分边缘q_0 对真实边际似然的逼近程度。

$\mathcal{L}(\xi)$的偏差取决于这两个近似误差的相对大小。当边缘近似误差占主导时，估计量会高估真实的期望信息增益。相反，当条件近似误差占主导时，估计量会低估真实的期望信息增益。当两种误差都很小或大小大致相当时，估计量能够提供良好的近似。

实践中，如果 r_ϕ 和 q_0 都是灵活的参数化族，例如归一化流，并且经过充分训练，具有足够的容量，那么两个 KL 项都可以变得很小，从而得到 $\mathcal{L}(\xi) \approx$ 期望信息增益(ξ)。然而，与 Barber–Agakov 界等变分下界不同，这个估计量无法对偏差方向提供正式保证。

C. 采集优化

多样性惩罚通过对成对距离应用平方铰链损失，鼓励选定设计 $\{\boldsymbol{\xi}_1, \ldots, \boldsymbol{\xi}_n\}$ 之间保持间隔：

$$\mathcal{L}_{\text{div}}(\boldsymbol{\xi}) = w(t) \sum_{i<j} \max(0, d_{\min} - \|\boldsymbol{\xi}_i - \boldsymbol{\xi}_j\|_2)^2, \tag{13}$$

其中， $d_{\min}$ 设定最小间隔阈值， $\|\cdot\|_2$ 表示欧几里得距离， $w(t)$会在固定步数后逐渐退火至零。对于所有设置，在计算距离之前，都会根据各自的边界将设计归一化到 $[0,1]^d$ 方框中，以确保惩罚项具有尺度不变性，且不受设计空间坐标系影响。对于所有实验，我们设定$d_{\min} = 0.01$

惩罚权重按以下方式逐步退火

$$w(t) = \begin{cases} \lambda & \text{if } t < T_{\text{anneal}} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \tag{14}$$

这一调度策略可避免在早期迭代（探索阶段）进行过于激进的正则化，同时允许采集目标在后期（利用阶段）占据主导地位。对于所有实验，我们使用 $\lambda = 1000$。平方铰链形式仅在距离违反约束时才产生平滑梯度；当设计之间的间隔足够大时，则不会产生任何多样性惩罚。采用 RMSProp 算法进行梯度更新，源定位的学习率为 0.001，药代动力学模型为 0.01，CES 模型为 0.1。学习率逐渐增大，是为了适应设计空间尺度的增大。根据每个设计的梯度范数，将所有设计的梯度裁剪至 1。优化过程中，所有方法均先进行 1000 个梯度步的预热，且所有方法的 T_{anneal} 也设为 1000。采集优化结束时，针对每个设计分别使用 1000 个蒙特卡洛样本计算期望信息增益，并利用该估计值选出最终设计。

为表征多样性惩罚的影响，我们在第4.1节的单设计采集设置中测试了各种设计。表 3 展示了多样性惩罚对不同模拟式贝叶斯推断方法采集性能的影响。

表 3。 采集方法 sPCE 估计值的不确定性 有无多样性惩罚的比较。在采集优化中，所有方法均使用了 256 次重启。其对所有方法而言约为 0。001。

方法	无多样性	多样性	时序（分钟）
NRE	0.872	0.881	3.07
对比神经似然估计	0.886	0.881	157.3
NLE	0.870	0.885	27.5
NPE	0.868	0.885	12.7

D. 模型

D.1. 后验模型训练

采集步骤中使用的所有后验分布和变分模型均采用 AdamW优化器（Loshchilov 与 Hutter，2019年）训练 100 个训练轮次，学习率为 10^{-4}，权重衰减为 0.01。训练用于源定位和药代动力学模型的后验分布时，使用 100,000 个模拟样本训练后验估计器，批次大小为 1024。训练用于 CES问题的后验分布时，使用 100 万个样本，批次大小为 8192。

D.2. 神经似然估计

用于神经似然估计（NLE）的归一化流，在所有应用中功能上均等价，即在后验估计中用于估计 $p(y|\xi,\ \theta)$，以及在采集优化中用于估计$p(y|\xi,\ \theta)$ 和 $p(y|\xi)$。这些流由两个有理二次样条层（Durkan等人，2019）参数化，每层包含 10 个箱，节点位置由两个残差块参数化，每个残差块包含 128 个隐藏节点，具体实现见 nflows 库（Durkan等人，2020a）。所有 NLE 流的基分布均为正态分布。所有输入观测均缩放至范围 $[-3.5, 3.5]$，有理二次函数也限定在相同的定义域内。所有流均具有固定的线性尾部。

用于估计 $p(y|\theta,\xi)$ 和 $p(y|\xi)$ 的变分近似通常需要同时学习描述 y 均值的条件函数，以及均值周围的条件分布。为了让模型能够直接捕捉这种结构，我们在归一化流中加入条件仿射变换。这样，模型便能学习 y 中任意的缩放和平移，并将其表示为设计 ξ 和参数 θ 的函数。

D.3. 神经后验估计

用于神经后验估计（NPE）的归一化流，在后验估计中计算 $p(\theta|y)$ 和采集优化中计算 $p(\theta|y,\xi)$的功能等效。上下文嵌入器的输入层会根据应用场景而变化。所有流均由两个有理二次样条层参数化（Durkan等人，2019年），每层包含10 个箱，其节点位置由两个含有128 个隐藏节点的残差块参数化，这些实现均来自 nflows 库（Durkan等人，2020a）。

除 CES 基准外，所有问题均选择标准正态分布作为基础分布。对于 CES 问题，基础分布选择为在 $[-3.5, 3.5]$ 上具有支集的均匀分布。这一选择反映了 CES 参数弹性 $\rho \in (0,1)$ 和单纯形约束权重 α 的自然有界支集。所有输入参数 θ 均归一化到范围 $[-3.5, 3.5]$，有理二次函数也在同一域上取有界值，并采用固定的线性尾部。为与 NLE 方法保持一致，我们加入了一个条件仿射变换层，使流模型能够根据观测值学习对 θ 进行任意缩放和平移。对于源定位基准，我们使用超球坐标而非笛卡尔坐标表示后验分布。在对欧几里得空间中的位置分布进行建模时，这种变换减少了冗余并提高了样本效率。

D.4. 神经比率估计

神经比率估计（NRE）方法通过 InfoNCE 界（$I(\theta;\ y|\xi)$直接估计互信息（van den Oord 等，2019年）。我们不学习显式的密度模型，而是训练一个判别网络 $T(\theta,\ y,\ \xi)$，为参数—观测—设计三元组分配评分。该判别网络由一个具有两个隐藏层的多层感知机构成，每层包含 256 个单元，并使用 ReLU 激活函数。输入三元组通过拼接 $(\theta,\ y,\ \xi)$形成，并在输入多层感知机之前经过层归一化。通过最大化所有设计上的互信息 InfoNCE 下界来训练判别网络。为提高大批次大小下的计算效率，我们实现了分块计算变体，将 $N \times N$ 成对评分矩阵分块处理，在保持梯度精确不变的同时降低峰值内存使用量。在训练用于后验估计的分类器时，采用相同的网络结构。训练后验估计时，学习率固定为 0。001，批次大小设为 1024，模型训练 500 个训练轮次。NRE 方法的训练速度快得多，因此相比基于流的模型，可以高效地训练更多训练轮次。

E. 时间信息

我们比较了所有基准测试中逐轨迹 SBI-BOED 方法与基于策略的方法的计算成本。对于逐轨迹方法，我们测量训练后验模型、在采集优化期间从后验分布中采样，以及执行采集优化本身所需的时间。对于基于策略的方法，我们报告部署前所需的一次性总训练时间。

表 4 详细列出了源定位基准的时序细分，并报告了正文中表 1 所列所有基于模拟推断的贝叶斯最优实验设计方法的结果。值得注意的是，无论使用 $M = 1$ 还是 $M = 256$次重启，由于并行执行，采集优化的实际运行时间都基本保持不变；而多次重启带来的探索能力提升，则能显著改善设计。

表 4. 各方法训练后验分布所需的时间（分钟）、从后验分布中采样所需的时间（秒），以及运行源定位问题的采集优化所需的时间。

方法	后验分布训练（分钟）	采样（秒）	采集函数优化（分钟）
每条轨迹的 $M = 1$ 重启			
NRE	27	300	9
每条轨迹重启 $M = 256$ 次			
NRE	27	300	9
NLE	25	3600	35
NPE	10	1	16
NPE-NRE	10	1	9

在所有基准测试中，对于单条轨迹的实验，逐轨迹方法与基于策略的方法的总计算成本相当。对于源定位（10 步），NPE-NRE 总共需要 $\sim$200 分钟，而 DAD 需要预先训练 $\sim$180 分钟（平均每次设计 $\sim$18 分钟）。对于药代动力学模型（5 步），NPE-NRE 和 DAD 均需要 $\sim$45 分钟（DAD 平均每次设计 $\sim$9 分钟）。对于 CES（10 步），NPE-NRE 总共需要 $\sim$530 分钟，而 RL-BOED 需要 $\sim$840 分钟（平均每次设计 $\sim$84 分钟）。

基于策略的方法能够将训练成本分摊到多条轨迹上，因此在需要进行大量实验运行时更具优势；而逐轨迹方法在成本高昂、仅执行少量轨迹的科学实验中也很有竞争力，因为其能够根据观测进行调整，这使得逐步计算成本物有所值。

F. 基准问题

本节详细介绍了我们实验中使用的基准问题，包括前向模型、先验分布和实验设置。

F.1. 源定位基准

前向模型 源定位问题（Foster 等人，2021）对以下位置的探测器测得的强度进行建模：$y \in \mathbb{R}$ 探测器位置 $\xi \in \mathbb{R}^d$ 这些强度来自 n 位于位置 $\theta =$ 的未知点源（$\theta_1, \ldots, \theta_n$）其中 $\theta_i \in \mathbb{R}^d$。测量模型为：

$$y = G(\xi, \theta) + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) \tag{15}$$

其中，确定性前向映射 G将信号衰减建模为距离平方反比：

$$G(\xi, \theta) = \log\left(\gamma + \sum_{i=1}^{n} \frac{\alpha}{\alpha + \|\xi - \theta_i\|_2^2}\right) \tag{16}$$

此处 $\gamma = 0.1$为基线　　信号强度，$\alpha = 10^{-4}$ 控制衰减率，$\sigma = 0.5$ 为观测噪声尺度　　.

先验分布 为打破多源问题中固有的置换对称性，我们采用一种有序先验，根据源到原点的距离对源进行约束。令 $\theta^* = (\theta_1^*, \ldots, \theta_n^*)$ 表示按径向距离排序的源

$$\|\theta_1^*\|_2 \leq \|\theta_2^*\|_2 \leq \cdots \leq \|\theta_n^*\|_2 \tag{17}$$

有序先验由可交换基分布构造而成

$$p(\theta) = n! \cdot \prod_{i=1}^{n} \mathcal{N}(\theta_i^* \mid 0, I_d) \cdot \mathbb{I}[\text{ordered}], \tag{18}$$

其中，$\mathbb{I}[\text{ordered}]$ 是一个指示函数：若源满足径向排序约束，则取值为 1；否则取值为 0。因子 $n!$ 用于补偿从 $n!$ 种排列中选取一种所导致的支持集缩减。这种构造在保持可交换基先验的同时，通过排序约束确保可辨识性。

实验设置 设计 ξ 在域 $[-6,6]^2$ 上进行优化，以最大化期望信息增益。第一次测量始终在原点进行；这一位置是通过使用先验分布运行一次 NRE 采集优化选定的。

F.2. 药代动力学基准

前向模型 药代动力学问题（Ivanova 等人，2021；Ryan 等人，2014）对口服给药后各时间点 $y \in \mathbb{R}_+$（小时）$\xi \in [0,24]$ 的药物浓度测量进行建模。该模型遵循一个具有参数 $\theta =$（k_a、k_e、V）的一室吸收-消除过程，分别表示吸收速率、消除速率和分布容积。测量模型为：

$$y = G(\xi,\theta) + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2(\xi,\theta)) \tag{19}$$

其中，确定性前向映射 G 描述了血浆浓度随时间的变化：

$$G(\xi,\theta) = \frac{D}{V} \cdot \frac{k_a}{k_a - k_e} \cdot \left(e^{-k_e \xi} - e^{-k_a \xi}\right) \tag{20}$$

其中，$D = 400\text{mg}$ 为给药剂量。观测噪声具有异方差性：

$$\sigma^2(\xi,\theta) = (\epsilon_{\text{rel}} \cdot G(\xi,\theta))^2 + \nu^2 \tag{21}$$

其中，相对误差为 $\epsilon_{\text{rel}} = 0.1$，绝对误差为 $\nu = \sqrt{0.1}$。这同时体现了比例测量误差（随浓度变化）和恒定的背景噪声。

先验分布 Para ˜米以对数空间建模，以确保正性。令 $\theta =$(log k_a、log k_e、log V)。先验分布 i s:

$$p(\tilde{\theta}) = \mathcal{N}\left(\tilde{\theta} \mid \mu, \Sigma\right) \tag{22}$$

其中均值和协方差为：

$$\mu = \begin{pmatrix} \log(1.0) \\ \log(0.1) \\ \log(20.0) \end{pmatrix}, \quad \Sigma = 0.05 \cdot I_3 \tag{23}$$

这些超参数反映了典型的生理值：吸收速度快于消除速度（$k_a > k_e$），分布容积适中。

实验设置 遵循 iDAD 基准（Ivanova 等人，2021），我们在以下测量时间进行实验：$\xi \in [0,24]$ 小时。初始测量始终在 $\xi_1 = 17.56$ 小时进行，该时间是通过使用先验分布运行一次 NRE 采集优化选定的。

静态基线 我们发现，静态基线在 17.56、0.3223 和 5.397 小时进行测量。对于五次测量的静态基线，会重复前两次测量。这三个设计参数是通过对 100 次 NPE-NRE 数据采集程序运行中按时间排序的前三次测量取平均值得出的。

F.3. 常替代弹性（CES）基准

前向模型 常替代弹性（CES）（Foster 等，2020）问题对商品束之间的成对偏好评分进行建模 $y \in [\epsilon, 1-\epsilon]$。给定两个组合 $\xi = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}) \in \mathbb{R}_+^6$（每个组合包含 3 种商品），该模型根据效用差预测偏好评分。参数为 $\theta =$（ρ，α_1，α_2，log u），其中 $\rho \in$（0，1）控制替代弹性，(α_1，α_2) 为商品权重，$\alpha_3 = 1 - \alpha_1 - \alpha_2$ 施加单纯形约束，而 $u =$ exp(log u) 用于缩放效用。测量模型为

$$y = \sigma(\eta), \quad \eta \sim \mathcal{N}(\mu_\eta, \sigma_\eta^2), \tag{24}$$

其中 $\sigma(\cdot)$ Sigmoid 函数映射到 $[0,1]$,，均值由效用差决定

$$\mu_\eta = u \cdot (U(\xi^{(1)}) - U(\xi^{(2)})). \tag{25}$$

组合 $x = (x_1,\ x_2,\ x_3)$ 的 CES效用函数为

$$U(x) = \left(\sum_{i=1}^{3} \alpha_i x_i^{\rho} \right)^{1/\rho}. \tag{26}$$

观测噪声是异方差的，并取决于组合差异度：

$$\sigma_\eta = u \cdot \sigma_0 \cdot (1 + \|\xi^{(1)} - \xi^{(2)}\|_2) \tag{27}$$

其中 $\sigma_0 = 0.005$ 为基础噪声尺度。响应被截断至 $[\epsilon, 1-\epsilon]$，并使用 $\epsilon = 2^{-22}$，以避免Sigmoid边界处的数值问题。

先验分布 先验分布按参数类型分解：

$$\rho \sim \text{Beta}(1,1) = \text{Uniform}(0,1) \tag{28}$$

$$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \sim \text{Dirichlet}(1,1,1) \tag{29}$$

$$\log u \sim \mathcal{N}(1, 9) \tag{30}$$

狄利克雷先验确保权重之和为1，而对 u 的对数正态先验确保效用缩放为正。 ρ 上的均匀先验涵盖从完全替代品（$\rho \to 1$）到列昂惕夫偏好（$\rho \to 0$）的全部范围。

实验设置 设计 $\xi \in [0, 100]^6$ 由两个组合构成，每个组合包含三种商品。初始测量在组合对处进行

$$\xi_0 = (24.9, 52.0, 81.8, 53.5, 62.5, 35.5), \tag{31}$$

该方案通过使用先验分布运行一次 NRE 采集优化来选定。

G. 实现与软件

我们的方法使用 Python 和 PyTorch 深度学习框架（Ansel 等，2024年）以及基于模拟的推断（SBI）库（Boelts 等，2025）实现。神经网络架构使用 nflows 实现，用于归一化流模型（Durkan 等，2020a）。数值计算使用 NumPy（Harris 等，2020）和 SciPy（Virtanen 等，2020）完成，可视化则使用 Matplotlib（Hunter，2007）处理。实验配置使用 Hydra（Yadan，2019）管理，工作流编排使用 Snakemake（M¨older 等，2025）完成。计算环境使用 Pixi（Feickert 等，2025；Arts 等人）管理。