基于物理引导深度学习的组织黏弹性行为实时仿真

Mohammad Karami[a,b,*], Herv´e Lombaert[b], David Rivest-H´enault[a]

[a] *National Research Council of Canada, 75 de Mortagne Blvd, Boucherville, Québec, Canada*
[b] *ETS Montreal, Department of Computer and Software Engineering, Canada*

arXiv:2301.04614v1 [cs.LG] 11 Jan 2023

摘要

有限元方法（FEM）常用于模拟具有弹性或黏弹性行为的软组织。然而，在虚拟现实外科培训等实时应用中，有限元方法的使用受到计算成本的限制。在这类应用场景中，通常使用便携式模拟器，而计算硬件会严重限制仿真场景的规模或细节程度。为解决这一限制，研究者提出了数据驱动方法，通过学习有限元法生成的数据集中的映射规则来模拟机械变形。以往的数据驱动方法忽略了底层工程问题的物理定律，因此仅适用于简单超弹性材料的仿真案例，并且实际上忽略了时间变化。然而，大多数外科培训场景需要更复杂的超弹性模型，以处理组织的黏弹性特性。这类材料在受到外力作用时会同时表现出黏性和弹性行为，因此需要引入与时间相关的状态变量。本文提出一种深度学习方法，用于预测具有黏弹性特性的软组织位移场。本研究的主要贡献是采用物理引导损失函数来优化深度学习模型参数。所提出的深度学习模型基于卷积（CNN）和循环层（长短期记忆网络），用于预测时空变化。该模型在损失函数中加入质量守恒定律，以避免产生物理不一致结果。深度学习模型使用一组有限元数据集进行训练，这些数据集由一款商业化的先进数值神经外科手术模拟器生成。在深度学习模型中使用物理引导损失函数，提升了模型对未见仿真案例中变形的预测泛化能力。此外，与传统卷积神经网络模型相比，所提出的方法准确度更高；根据外力大小的不同，在未见组织上的提升幅度为 8% 至 30%。我们希望本研究有助于弥合深度学习在虚拟现实模拟器中的应用差距，从而提升其计算性能（相较于有限元模拟），并最终增强其效用。

关键词：物理引导深度学习、实时仿真、黏弹性材料、有限元方法

1. 引言

神经外科培训通常在手术室中进行，由经验丰富的神经外科医生直接监督，但他们可用于培训的时间和练习机会都非常有限。因此，临床外手术模拟通常被纳入培训课程，以提供更多发展机会。文献证据表明，通过模拟训练获得的特定技能能够迁移到手术室中 [35]。传统上，外科手术模拟使用活体动物、训练台或尸体标本模型 [34]。近年来，虚拟现实模拟器已成为满足教学要求的一种颇具前景的替代方法 [1, 2, 3, 4, 35]。利用模拟进行外科培训能够开辟新的培训可能性，从而产生可衡量且显著的临床影响。在一项随机对照试验中， [33] 证明，在学习模拟脑肿瘤切除术时，使用配备基于指标的人工智能（AI）辅导的模拟器，比接受人工指导者的远程辅导或不接受辅导更有效。在这种情况下，具备双手触觉反馈的逼真模拟系统提供了人工智能代理所需的监测数据，因此使这一应用成为可能。此外，外科手术模拟所提供的高精度数据流，使人们能够利用机器学习算法自动对受训者的专业水平进行分类[32]。持续的专业水平监测系统还可实时评估外科双手操作表现，这

*通讯作者：Mohammad Karami
Email addresses: mohammad.karami@mirametrix.com(Mohammad Karami), herve.lombaert@etsmtl.ca (Herv´e Lombaert), david.rivest-henault@nrc-cnrc.gc.ca (David Rivest-H´enault)

可用于在外科住院医师培训期间提供预测性评估，从而及早发现错误 [30] 并提高培训效率。因此，虚拟现实模拟器使受训者能够在各种教学场景中进行练习，同时也有助于制定新的训练指标并开发新的应用（例如远程培训）。

1.1. 虚拟现实模拟器概述

为了通过触觉反馈设备提供逼真的触觉感受，虚拟现实模拟器需要实时仿真组织变形 [5]。组织的行为在神经外科手术中至关重要，而由于其具有复杂的非线性黏弹性特征，对其进行仿真颇具挑战。有限元方法（FEM）是此类仿真中常用的数值技术。然而，有限元方法在实时仿真中的应用目前受到硬件要求的限制。虽然多种手术已成功完成仿真，例如颅脑显微神经外科手术 [1], ，但其他需要更大视野或涉及更坚硬的非刚性材料的手术，实现起来则更具挑战性。具有挑战性的场景包括骨科中的股骨髓内钉固定术 [29] 或经鼻神经外科手术。如果仿真场景受计算能力限制，设计人员就需要退而采用临时的启发式方法，这可能会降低真实感。

在技术层面，有限元法面临的主要挑战之一，是多个计算线程同时更新描述物理状态的矩阵元素。由于内存访问布局 [6]的限制，要高效地并行实现这一操作并不容易。为克服这一局限，已有研究提出了以下方法。

第一类解决方案基于模型降阶 [7, 8, 9]。构建自由度相对较少的模型时，常用的方法是本征正交分解（POD）。POD 提取主要的位移模式（即模态），以简化形式表示组织位移。随后，通过这些模态的线性组合来近似最终的位移场。将 POD 用于组织行为的实时仿真已得到广泛研究 [10, 11, 12] ，且在线性问题中取得了令人满意的结果。然而，这种方法无法模拟高度非线性问题 [13, 14, 15],，例如神经外科手术模拟。为克服这一局限，人们将模态表示为一系列可分离非线性函数之和，这种方法称为广义本征正交分解（PGD） [15]。然而，由于在 PGD 中将边界条件作为一个新维度来实现，该技术的泛化能力较弱，需要进行修改并与核主成分分析相结合 [16]。

加速有限元模拟的第二种替代方案是利用机器学习方法 [17]。机器学习模型基于有限元模拟数据，学习一个将输入（如外力）映射到输出（如节点位移）的函数，而无需预先了解问题本身。研究者提出，如果机器学习模型在有限元数据集上完成训练，之后便可用于实时预测有限元模拟的结果。机器学习在组织行为实时仿真中的这类应用，已用于模拟多种器官，包括乳房 [18]和肝脏 [19, 20]。然而，正如 [21]所讨论的，这些研究所采用的机器学习技术，尤其是支持向量机（SVM）和随机森林，将其应用限制在小幅节点位移的范围内。

近年来，作为一类机器学习方法的卷积神经网络（CNN）已被用于加速有限元模拟[21, 24, 31]。研究表明，CNN 擅长提取复杂模式，而且能够在现代 GPU 上实现良好的并行化。Mendizabal 等人 [21] 基于 U-Net 架构 [22], ，使用 CNN 实时预测弹性肝脏的节点位移。他们还将 CNN模型与本征正交分解（POD）方法 [23] 进行了比较，结果表明，在推理时间相当的情况下，CNN 的准确度高于 POD。Pfeifer 等人 [24] 也使用全卷积神经网络预测了三种不同肝脏模型的节点位移，并在 20 毫秒的推理时间内取得了合理的准确度。Han 等人 [31] 将 CNN 模型与经典求解器结合，用于求解电外科中的多物理场问题。

尽管机器学习已广泛应用于计算机视觉和自然语言处理，但将其用于物理学问题时往往成效有限 [25, 26]。这在一定程度上是因为机器学习算法中缺少物理定律。例如，Jia 等人 [27]指出了预测湖泊温度剖面时存在的这一问题。湖泊温度的计算与材料位移的计算（即本文研究的问题）颇为相似，因为这两个变量都可以根据动量／能量守恒的物理原理求得。Jia 等人[27] 表明，如果损失函数中没有纳入问题所遵循的物理定律，深度学习技术预测的温度剖面就不符合能量方程。因此，先前提出用于加速有限元模拟的深度学习技术（CNN） [21, 24] 仅限于模拟简单超弹性材料的情形，在这些情形中，时间变化实际上被忽略了。近年来，将物理定律与深度学习相结合的物理引导深度学习受到了广泛关注。Willard 等人 [28] 对这一主题进行了全面综述。

1.2. 贡献

采用机器学习（数据驱动）系统的虚拟现实模拟器，其效果与仅使用数值方法的有限元模拟系统相比存在显著差异。前者的主要优势在于能够用于实时应用，同时提供与有限元法相近的结果。因此，本文研究了这一问题。据作者所知，本研究首次提出了一种深度学习方法，用于预测具有黏弹性特性的软组织的位移场。

总体而言，我们的贡献在于将质量守恒定律作为一种新的领域专用损失函数集成到所提出的深度学习模型中，从而能够避免生成不符合物理规律的结果。这与现有的其他机器学习技术形成对比：这些技术只关注样本数据，在模拟组织黏弹性行为这类高度非线性问题时表现不佳。为展示所提方法的实际应用（这也是另一项贡献），我们使用了来自 NeuroTouch 虚拟现实神经外科手术模拟器的真实数据。NeuroTouch 是一款商业产品。由于组织具有超弹性行为，这些数据独特且颇具挑战性。我们还证明，与基于有限元技术的虚拟现实模拟器结果相比，所提方法的计算速度更快。希望本研究也有助于弥合深度学习在有限元模拟中的应用差距。

1.3. 论文结构

本文结构如下。第 2 节介绍商用神经外科模拟器的相关信息，尤其关注 NeuroTech 中所实现的有限元技术。第 3 节介绍所提出的模型，并在第 4 节和第 5 节报告和讨论该模型的结果。最后，第 6 节总结全文。

2. 背景信息

商业神经外科模拟器基于源自连续介质力学基本原理的组织变形模型。在这类实时应用中，常见策略是采用计算成本低于更具解析性的替代方案的简化数值有限元模型。本研究的动机之一是通过数据驱动方法模拟基于有限元法的模拟器输出（并希望实现更高的计算速度），因此这里给出了主要的驱动方程。所选用的有限元参考软件将在第 4 节介绍，它采用显式时间积分方案，并使用准线性黏弹性本构模型[1]将组织建模为黏弹性固体。松弛函数如下：

$$G(t) = g_0 + \sum_{k=1}^{2} g_k e^{-t/\tau_k} \tag{1}$$

其中， τ_k 是松弛时间， g_k 是松弛模量。组织行为的弹性部分采用广义 Neo-Hookean 本构模型的超弹性固体进行建模，其应变能密度函数定义如下：

$$W = C_1(I_1 - 3 - 2\ln(j)) + \frac{K}{2}(j-1)^2, \tag{2}$$

其中， C_1 是通过实验确定的材料常数， I_1 是左柯西-格林变形张量的第一不变量， K 是体积模量， j 是左柯西-格林变形张量第三不变量的平方根，用于衡量体积变形。体积模量定义如下：

$$K = \frac{2\mu(1+\nu)}{3(1-2\nu)}, \tag{3}$$

其中 μ 为剪切模量， ν 为泊松比。

3. 方法

本节提出基于深度神经网络架构的数据驱动方法，以加速有限元模拟软件。深度学习模型使用由商业级模拟器生成的一组有限元数据集进行训练。模型的输入是施加在每个节点上的外力，是一个形状为 $N_x \times N_y \times N_z \times 3$ 的张量，其中 N 是 x、y和 z 三个方向上的节点数（例如，本研究中用于实时仿真的脑肿瘤网格大小为 $N_x = 17$、$N_y = 17$和 $N_z = 8$）。模型输出是预测的节点位移场，其形状与输入张量相同。

[1]在材料力学中，本构模型是对本构定律的表述，而本构定律是描述材料行为的控制方程。

3.1. 用于组织位移模拟的现有神经网络模型

U-Net 是一种基于卷积层的神经网络架构， [22] 此前已成功用于简单超弹性材料的仿真 [21]。然而，该模型只能提取节点位移场的空间特征，而忽略了黏弹性材料的时变形变，这可能会降低时间平滑度和精度。在本研究中，我们提出通过定义一种包含 LSTM 层的模型来缓解这些问题。此外，我们还考虑了与问题力学特性相关的专门项。

3.2. 提出的方法

3.2.1. 网络架构

我们提出的深度神经网络模型采用图1所示的架构，将卷积神经网络（CNN）与长短期记忆网络（LSTM）相结合。LSTM 是循环神经网络（RNN）模型之一，与 CNN 模型不同，它会考虑时间序列。LSTM 包含输入门、输出门和遗忘门。这些门的结合使 LSTM 成为适用于时变问题的模型。然而，采用通用 CNN-LSTM 模型难以对具有复杂超弹性模型的黏弹性材料进行建模，因为其非线性极强。本文将采用均方误差（MSE）损失函数的 CNN-LSTM 模型称为“通用 CNN-LSTM”模型。该模型基于 CNN 模型，其瓶颈层由一个包含 512 个节点的 LSTM 层构成。得益于 LSTM 的特征提取能力，我们得以减少模型中的卷积操作数量。编码/解码路径仅包含一次卷积操作，使用 32 个滤波器。网络架构的设计参数见表1，其中列出了包括卷积层、激活函数层、池化层、LSTM 层和上采样层在内的所有层的设置及可训练参数数量。模型优化器为 Adam，学习率为 0.00001。

3.2.2. 力学位移专用损失函数

为改进对黏弹性材料的建模，我们通过一项辅助任务对深度学习模型进行正则化，以确保节点位移图受到本构定律的约束。回归问题中常用的损失函数是模型对每个节点、每个时间步的预测值 $U_{n,\ t}$ 与有限元模拟输出 $U_{n,\ t}$ 之间的均方误差（MSE）。

为更好地约束学习过程，可以考虑基于质量守恒定律的项，以扩展损失函数。

当模型满足质量守恒定律时，每个时间步的肿瘤体积 V_t 应始终保持恒定，并等于未变形材料的初始体积 V_{origin}。因此，违反 $\Delta V = V_t - V_{origin} = 0$ 的预测节点位移场将受到惩罚。一种常见的惩罚方法是使用修正线性单元（ReLU）作为激活函数，但本研究发现，该函数存在梯度消失问题。因此，为避免 ReLU 固有的梯度消失问题，我们采用 V_t 与 V_{origin} 之间的平方差（即 L2 损失函数）进行惩罚。最后，将组合损失函数定义如下，并称为物理引导损失函数：

$$Loss = L_{MSE} + \lambda L_{Physics} = \frac{1}{N}\sum_{t,n=1}^{T,N}(\hat{U}_{n,t} - U_{n,t})^2 + \lambda(V_t - V_{origin})^2, \tag{4}$$

其中，λ 是一个用于调节 L_{MSE} 和 $L_{Physics}$ 之间平衡的超参数，其值为 0.1。研究发现，将 λ 降至 0.01 会使 $L_{Physics}$ 的影响变小，而将 λ 提高至 1 则会使学习过程恶化。需要指出的是，当前的有限元模拟采用了具有可压缩性的粗网格，因此在某些情况下会产生物理误差。为规避这一问题，物理引导项 $L_{Physics}$ 仅应用于体积变化超过阈值的情况，该阈值为材料体积的 7%。本文其余部分将采用物理引导自定义损失函数的 CNN-LSTM 模型称为我们的模型。

值得一提的是，我们还尝试将另一种物理定律应用于物理损失函数的实现中， $L_{Physics}$。根据胡克定律，每个节点的位移方向应与该节点所受外力的方向一致。换言之，每个节点的外力向量与位移向量之间的余弦角 $\cos\theta$ 应始终为零。因此，我们在 $L_{Physics}$中添加了一个新项，$ReLU(1-\cos\ \theta)$。然而，研究发现，这个新项对学习过程没有显著影响，因此在所提出的物理引导损失函数中将其忽略。

深度学习模型训练完成后，即可用于组织行为的实时仿真。

表1：所提出的 CNN-LSTM架构。请注意，合并层由两个前置卷积层的输出沿通道维度拼接而成。

Type	#滤波器	卷积核大小	步幅	上采样大小	# 参数
卷积	32	(3, 3, 3)	(1, 1, 1)	-	2624
激活函数 (ReLU)	-	-	-	-	-
池化	-	(3, 3, 3)	(3, 3, 3)	-	-
双向长短期记忆网络(512)	-	-	-	-	11538432
激活函数（双曲正切函数）	-	-	-	-	-
上采样	-	-	-	(4, 4, 3)	-
卷积	32	(3, 3, 3)	(1, 1, 1)	-	27680
激活函数 (ReLU)	-	-	-	-	-
合并*	-	-	-	-	-
卷积	3	(1, 1, 1)	(1, 1, 1)	-	195

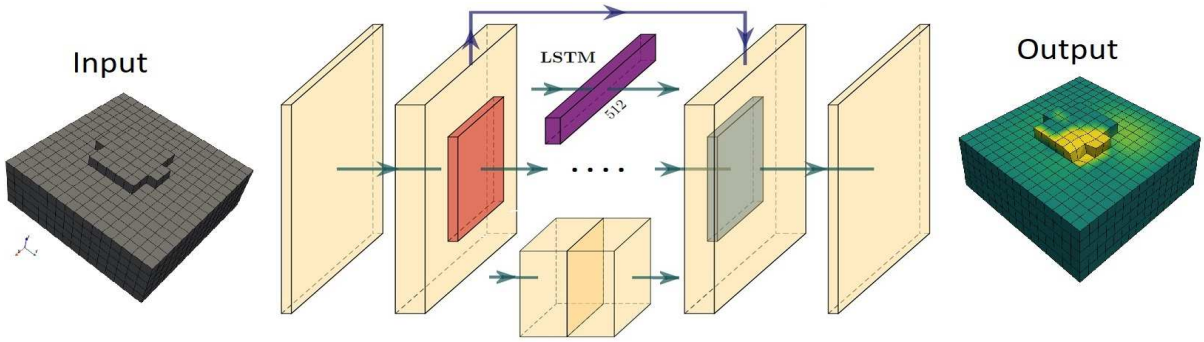


图1：CNN U-Net 和 CNN-LSTM 深度学习架构。参考 CNN U-Net 网络（见第 4.1.2 节）不包含紫色的 LSTM 方框。所提出的 CNN-LSTM 通用架构与 CNN 网络相似，不同之处在于瓶颈层（中心层）由一个 LSTM 层组成。本文的主要贡献是使用物理引导损失函数来优化模型参数。

4. 结果

我们使用了配备触觉反馈[2] [1, 2], 的虚拟现实神经外科手术模拟器（图 2），以展示所提出的方法在快速进行黏弹性组织位移模拟方面的适用性。尽管该模拟器能够进行实时仿真，但其内嵌的仿真软件受计算能力限制，因此无法在便携性更高的硬件上运行，也无法使用更大的力学网格。该手术模拟器曾用于生成脑肿瘤的有限元仿真数据集。肿瘤网格的整体尺寸为 $N_x = 17$、$N_y = 17$ 和 $N_z = 8$，由 1782 个节点和 1314 个六面体单元组成，输入张量的尺寸为 (17, 17, 8, 3)。该网格受到两种接触力的不同作用状态影响。材料的底面和周边表面采用零位移边界条件，顶面则不受约束。模拟器实现了方程（1–3）。在（1）中，τ_1 和 τ_2 分别为 330s 和 11s，而 g_1 和 g_2 分别为 0.12 和 0.8。在式（2）和（3）中，C_1、ν 和 μ 分别为 0.0002 Mpa、0.0004 Mpa 和 0.42。

[2] $NeuroTouch$，来自加拿大国家研究委员会，可通过 $NeuroVR$ 商标从 CAE HealthCare 商业购得。

4.1. 与其他方法的比较

本文将所提出的技术与两种不同的方法进行了比较，用于根据外力预测组织变形：线性回归（作为基线模型）以及此前介绍的一种卷积神经网络（CNN）模型。这些模型均使用 TensorFlow 实现，源代码见：https://github.com/Mkarami3/UNet_FEM。

4.1.1. 基线模型

基线模型是线性回归模型。线性回归模型将节点位移场预测为输入力的线性组合。我们并不期望该模型能取得理想结果，但将其纳入研究是为了提供一个概念上的下限。对于复杂的非线性问题，通常需要采用深度学习等非线性方法。



图 2：加拿大国家研究委员会的虚拟现实神经外科手术模拟器 NeuroTouch。

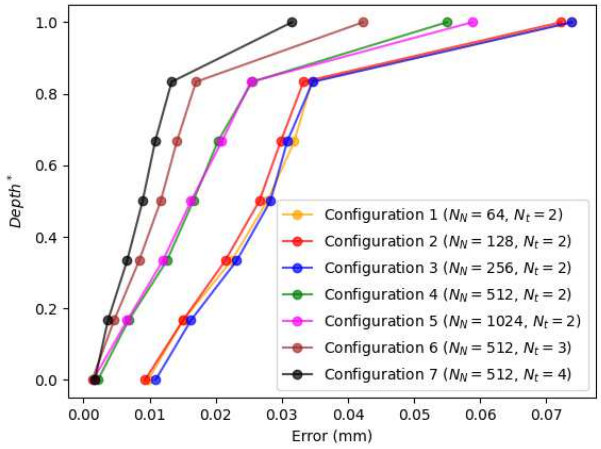


图 3：CNN-LSTM模型（本文提出）不同配置下，平均绝对误差随归一化深度的变化，见表 2。

4.1.2. CNN U-Net 模型

所选的参考卷积神经网络基于 U-Net 架构，如图 1 所示。编码路径由两次包含 64 个滤波器的卷积操作组成，随后进行最大池化操作，将输入尺寸缩小一半。瓶颈层由两个包含 128 个滤波器的卷积操作堆叠而成。解码过程通过上采样完成，随后进行六次卷积操作，滤波器数量依次为 64、64、128、64 和 3。U-Net [22] 已成功用于简单超弹性材料的模拟 [21]。然而，该模型只能提取节点位移场的空间特征，而忽略了黏弹性材料的时变形变。相比之下，我们通过在所提出的模型中引入 LSTM 层，并采用物理引导损失函数，解决了所提出的 CNN-LSTM 模型中的这些问题。

4.2. 超参数优化实验

在本节中，我们针对所提出模型的不同配置进行了多次实验，以找到能够提升模型性能的超参数组合。这些超参数是 LSTM 层中的神经元数量（N_N）和时间步数量（N_t）。数据集大小为 1512，其中 1210 个样本划分为训练集，300 个样本划分为验证集。所有实验均在一台配备 Intel Core i7（3.40 GHz）和 Nvidia Geforce RTX 2080（显存为 11 GB）的个人计算机上完成。

表 2 展示了 LSTM 层的配置集合，图 3 展示了这些配置在预测节点位移场时的相应性能。结果表明，当时间步（N_t）保持不变时，将神经元数量（N_N）从 64 增加到 512，会使所有真实位移水平下的位移误差降低。在图 3 中，对比黄色曲线（配置 1 ）与绿色曲线（配置 4 ）即可观察到这一现象。然而，将 N_N 值进一步增加到 1024 并不会降低位移误差，因为图 3 中配置 4（绿色曲线）和配置 5（粉色曲线）的误差彼此重合。

简而言之，该图表明，采用 512 个神经元（N_N）和两个时间步（N_t）的所提出模型，在准确度和实时应用方面表现最佳。请注意，虽然模型准确度会随着时间步数量的增加而提高，但本文选择了 $N_t = 2$ ，以满足实时处理应用的要求。

4.3. 所提出模型的准确度评估

为评估所提出模型的性能，图 4 展示了 Bland-Altman 图。该分析通过对各时间序列中的预测节点位移场取平均值来完成，随后将所得结果绘制为散点图：纵轴表示预测节点位移与参考有限元仿真数据集之间的差值，横轴表示参考有限元仿真数据集的均值。与相关系数和回归方法相比，这种技术在考察不同模型性能差异方面具有优势。

表 2：模型中 LSTM 层的不同配置。

	#神经元 (N_N)	#时间步 (N_t)	#可训练参数
配置 1	64	2	1,219,235
配置 2	128	2	2,501,155
配置 3	256	2	5,261,603
配置 4	512	2	11,568,931
配置 5	1024	2	27,329,315
配置 6	512	3	11,568,931
配置 7	512	4	11,568,931

Bland-Altman 图（图 4）显示，作为基线的线性回归模型完全无法预测节点位移场。对此并不意外，因为线性回归基于这样一个假设：节点位移场是输入力的线性组合；但由于材料具有黏弹性，这一假设在此并不成立。CNN 深度学习模型似乎能够对组织变形进行建模，但当材料承受高应变时，我们的模型比 CNN模型具有更高的准确度。请参见变形均值高于 0.6 mm 时两个模型之间的差异。此外，由于这些差异呈偏斜分布且并非正态分布，因此并不落在 96% 置信区间范围内。

图5展示了所提出的深度学习模型在估计器官内部变形方面的性能。图中显示了材料归一化深度 $depth^*$ 处的误差变化，单位为毫米。深度以材料的高度进行归一化，位移误差通过对时间序列以及深度相近的节点处的 ˆ($U_{n,\ t} - U_{n,\ t}$) 求平均来计算。结果表明，CNN模型相较于回归模型（作为基线）平均提升了 45%。将长短期记忆网络层纳入所提出的模型后，相较于CNN模型，性能还可进一步平均提升 31%。

4.3.1. 物理引导项的贡献

通过将所提出的物理引导项加入损失函数的具体贡献，与采用 L2 损失函数优化的 CNN-LSTM 网络，以及 CNN U-Net 和线性基线进行比较，评估了该项的作用。结果见图5。尽管通用CNN-LSTM模型与我们提出的模型在节点位移预测误差方面相近，但这两种模型的主要差异在于深度学习的泛化能力。通过考虑质量守恒定律，所提出的模型能够很好地泛化到未见仿真案例。图6展示了一个这样的未见有限元法仿真案例及其预测位移场。这一特性也通过监测体积守恒的违反程度、{v1}({v2})以及测试数据集中100个序列的外力大小得到了验证，见图7。可以看出，与所提出的模型相比，通用CNN-LSTM在序列83中的违反程度最大，此时外力大小与其均值的偏差也最大。换言之，当测试案例的输入数据（外力）偏离训练数据集中的数据越多时，通用CNN-LSTM模型的泛化误差就越大。然而，物理损失函数为我们提出的模型提供了有利于提升泛化能力的特性。对于未见仿真案例（即图7中的序列78至85），这一改进幅度为8%至30%，具体取决于外力大小。

需要指出的是，对于满足质量守恒定律的理想模型，$\Delta V(mm^3)$ 应始终保持不变并等于零。然而，当前的有限元模拟仅包含少量单元，因此形成了带有一定收敛误差的粗网格，而且材料并非完全不可压缩。因此，在参考有限元案例中可以观察到轻微的体积保持偏差；对于物理不一致性高于阈值（即 $\Delta V > 12.1\,mm^3$）的情况，我们的模型才会施加惩罚。

4.4. 计算性能

本节将考察所提出的深度学习方法的计算行为，并分析其能否用于加速实时有限元模拟。我们将所提出的模型部署在 CPU 上，并将其推理时间与 NeuroTouch 有限元模拟软件的延迟时间进行比较。在本研究期间，由于 TensorRT 7.2.3 不支持所需的 LSTM组件，因此无法将 CNN-LSTM 部署在 Nvidia GPU 上。为估算所提出模型在 GPU 上的推理时间，我们将 CNN模型部署在 GPU 上。

表3展示了CNN和所提出模型的推理时间，并与以下对象的延迟时间进行比较：

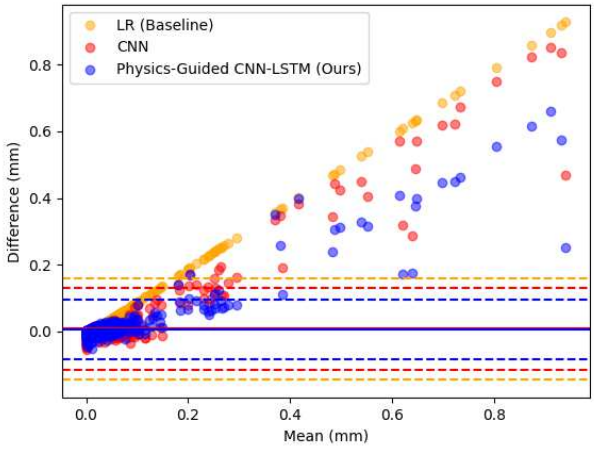


图 4：参考有限元数据集中的线性回归（基线）、CNN 和物理引导的 CNN-LSTM（本文提出）模型所预测变形的差值与均值关系图。实线表示差值的均值，虚线表示限值的 96% 置信区间。

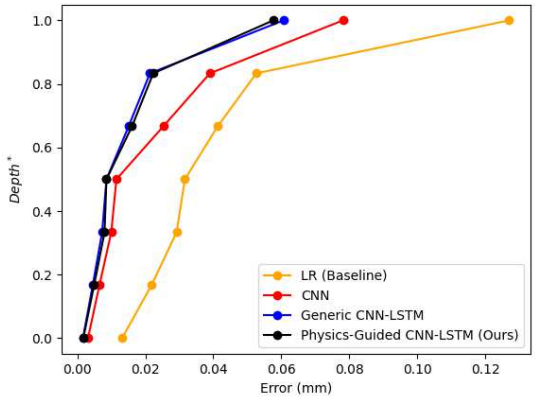


图5：基线、CNN、通用 CNN-LSTM 和物理引导的 CNN-LSTM（本文提出）模型的平均绝对误差随归一化深度的变化。

表3：深度学习模型与 NeuroTouch有限元软件的推理时间对比。请注意，有限元法的计算时间固定为 0.010，但无法保证求解器一定收敛。

模型	CPU 延迟（秒）	GPU 延迟（秒）
CNN	0.022	0.0019
所提出的模型	0.032	不支持
NeuroTouch-有限元法	非实时	0.01*

NeuroTouch。可以看出，部署在GPU上时，CNN深度学习模型的速度几乎是NeuroTouch的11倍。此外，研究发现，通过对CNN模型卷积层中的低幅值权重进行剪枝，在不损失准确度的情况下，CPU上的推理时间可缩短至原来的1/1.3。以牺牲模型准确度为代价，通过量化操作还可以进一步提升CPU上的加速效果。图8展示了量化对CNN模型准确度的影响。float16量化对模型准确度的影响并不显著，但采用int8量化后，模型性能会下降。将CNN模型部署在GPU上表明，我们可以缩短所提出模型的推理时间，使其在GPU上的运行速度快于NeuroTouch。

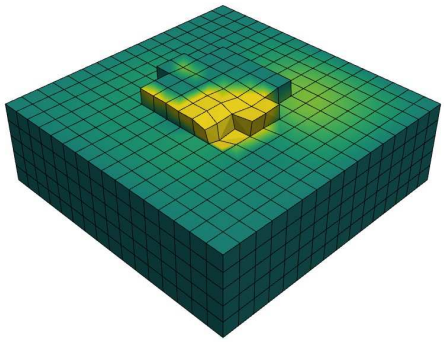
目前，所提出的 CNN-LSTM架构尚无法部署在 GPU 上。不过，一旦具备这一功能，根据 CPU 耗时进行的外推表明，其运行速度可能比显式求解器快 3 倍。尽管当前实现比 NeuroTouch有限元软件慢，但将其部署在 CPU 上仍可能有益。NeuroTouch 中实现的有限元引擎使用显式求解器，延迟固定为 0.010s，这是一个设计参数。该引擎通过执行固定数量的积分步数来实现固定延迟，而积分步数取决于网格大小。因此，对于某些配置，尤其是在较大网格上发生大变形时，显式求解器可能无法充分收敛到理想解。因此，设计者需要提供足够小的网格，使其能够以可接受的精度求解，从而满足大多数情况下的仿真需求。不过，在部署深度学习模型时不存在这一问题，因此本文认为，我们的模型架构在部署方面的优势足以弥补其延迟时间较长这一缺点。

5. 讨论

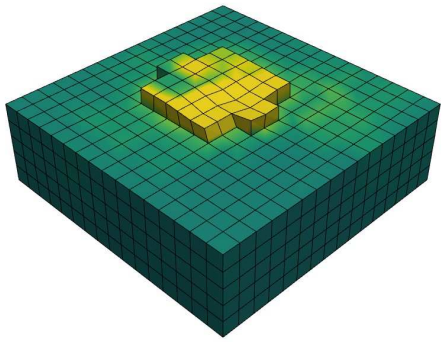
我们的实验表明，物理引导深度学习是加速有限元模拟的一种可行方案。然而，这种方法仍存在一些局限性，这些局限性可能会成为未来研究的重要挑战。

第一项局限是，式 4 中的物理引导损失函数 $L_{Physics}$ 仅适用于体积守恒 $\Delta V = 0$ 违反程度不大的有限元法案例。如果参考有限元模拟案例存在较大的收敛误差（由粗网格导致），或表现出较高的可压缩性值，那么 ΔV 将显著偏离零，从而使当前方法$L_{Physics}$ 无效。

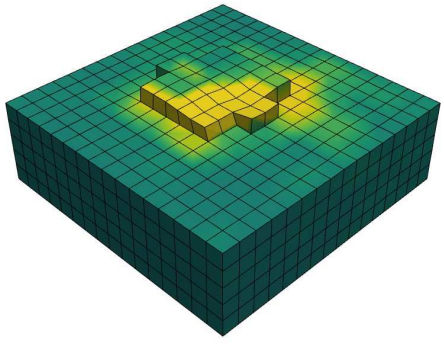
第二个局限是，长短期记忆网络模型捕捉时间依赖关系的能力，仅适用于应力松弛时间较短的黏弹性材料。黏弹性材料在发生变形时同时具有黏性和弹性。在这里，应力松弛取决于因子 τ，其值越高，



(a)

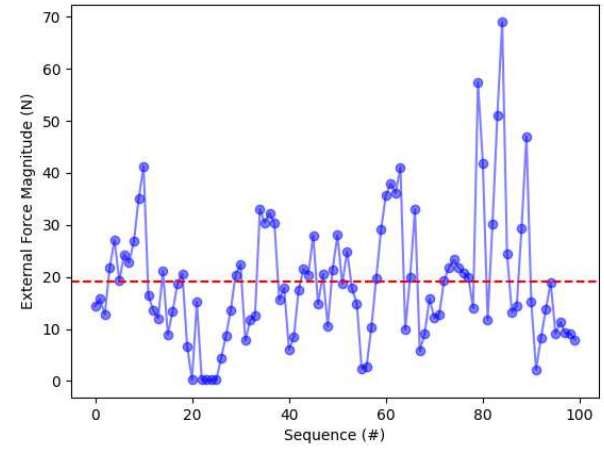


(b)

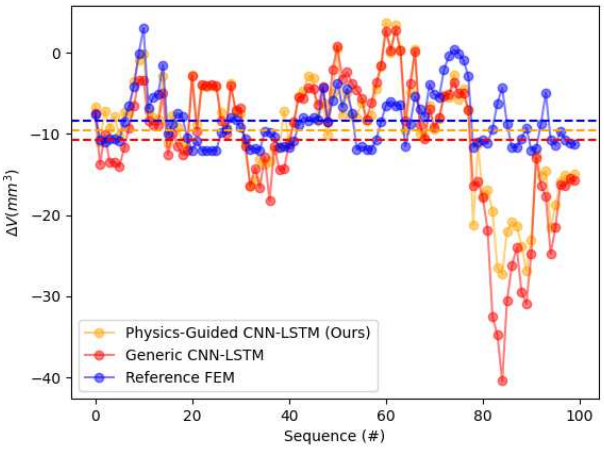


(c)

图6：（a）参考有限元法模拟的节点位移场，（b）通用CNN-LSTM模型的预测结果，以及（c）物理引导CNN-LSTM模型（本文方法）的预测结果。与这些图相关的补充视频可在本文在线版本中查看。



(a)



(b)

图7：参考有限元法、通用CNN-LSTM模型和物理引导CNN-LSTM（本文方法）模型的100个测试案例序列中，（a）外力大小和（b）体积保持违反程度$\Delta V(mm^3)$的变化。

应力松弛所需的时间就越长。这需要使用输入时间步更多、神经元数量更大的 LSTM 层，因此不适用于实时处理应用。

另一个局限是，目前的深度学习网络无法对包含拓扑变化的有限元仿真案例进行建模。对可变形物体进行虚拟切割或烧灼，需要重新网格化，并移动切割层中的节点。然而，目前的网络需要使用节点顺序固定的类网格张量来执行卷积运算。

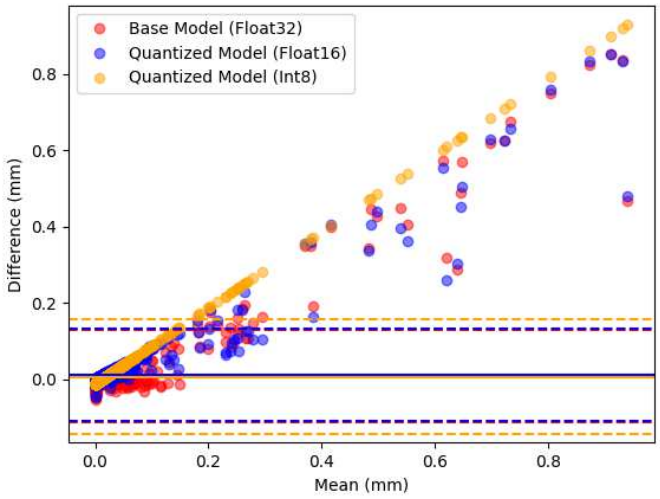


图8：量化对CNN模型准确度的影响。量化可以加快模型推理，但代价是准确度降低。

6. 结论

本文提出了一种深度学习方法，用于预测具有黏弹性特性的软组织的位移场。本研究的主要贡献是采用物理引导损失函数来优化深度学习模型参数。为处理采用复杂超弹性模型的材料的黏弹性特性，所提出的深度学习模型融入了本构定律（以新的损失函数形式实现），即物理引导深度学习，并加入了一个长短期记忆网络层。这两个特性使深度学习模型能够预测节点位移场在空间和时间上的变化。研究发现，与 CNN模型相比，所提出的方法精度更高；与采用均方误差损失函数的通用模型相比，其泛化能力也更强。在计算成本方面，研究表明，所提出的方法目前能够在 CPU 上实时运行（0.032 秒/周期，31 Hz），但运行速率相对较低。不过，待所需软件组件可用后，潜在的 GPU 实现预计可带来约 10 倍的加速，使该实现比作为参考的显式求解器快 3 倍。同时，在 CPU 上部署 CNN-LSTM 还有其他优势：参考 NeuroTouch有限元引擎使用显式求解器，可能会出现深度学习模型不会遇到的收敛问题。

致谢

本研究部分得到了加拿大国家研究委员会（NRC）和加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC）的支持，并使用了 Compute Canada 和 Calcul Québec 提供的计算资源。

参考文献

[1] Delorme, S., Laroche, D., DiRaddo, R., Del Maestro, R. F., 2012. NeuroTouch：一种用于颅内显微神经外科培训的基于物理的虚拟模拟器，《手术神经外科》71，32–42。[2] Brunozzi, D., McGuire, L.S., Alaraj, A., 2018. NeuroVR模拟器在神经外科培训中的应用。《综合医疗模拟：神经外科》，施普林格，Cham。https://doi.org/10.1007/978-3-319-75583-0 16。[3] Vikal, S., U-Thainual, P., Carrino, J.A., Iordachita, I., Fischer, G.S., Fichtinger, G., 2010. Perk Station——经皮手术培训与性能测量平台。《计算机化医学影像与图形》34，19–32。[4] Law, M.Y., Zhou, Z., 2003. PACS教育与培训的新方向。《计算机化医学影像与图形》27，147–156。[5] Zhu, B., Gu, L., 2012. 一种用于实时手术模拟的混合可变形模型。《计算机化医学影像与图形》36，356–365。[6] Ljungkvist, K., 2015. 面向现代处理器的有限元方法技术，执照论文。[7] Niroomandi, S., Alfaro, I., Cueto, E., Chinesta, F., 2008. 通过模型降阶技术实时模拟非线性组织的变形。《生物医学中的计算方法与程序》91，223–231。[8] Niroomandi, S., Alfaro, I., Gonzalez, D., Cueto, E., Chinesta, F., 2012. 通过降阶建模和扩展有限元技术实时模拟手术。《生物医学工程数值方法国际期刊》28，574–588。[9] Taylor, Z. A., Crozier, S., Ourselin, S., 2011. 一种用于手术模拟的降阶显式动力有限元算法。《IEEE医学影像汇刊》30，1713–1721。[10] Yvonnet, J., He, Q.-C., 2007. 用于有限应变下超弹性介质非线性均质化的降阶模型多尺度方法（R3M）。《计算物理学杂志》223，341–368。[11] Hernandez, J. A., Oliver, J., Huespe, A.E., Caicedo, M.A., Cante, J.C., 2014. 计算多尺度均质化中的高性能模型降阶技术。《计算方法与应用力学和工程》276，149–189。[12] Kerfriden, P., Rodenas, J.-J., Bordas, S.P.-A., 2014. 通过本构关系误差验证计算均质化中的基于投影的降阶建模。《生物医学工程数值方法国际期刊》97，395–422。[13] Bhattacharjee, S., Matous, K., 2016. 一种基于非线性流形的降阶模型，用于异质超弹性材料的多尺度分析。《计算物理学杂志》313，635–653。[14] Chatterjee, A., 2000. 本征正交分解简介。《当代科学》78，808–817。[15] Niroomandi, S., Gonzalez, D., Alfaro, I., Bordeu, F., Leygue, A., Cueto, E., Chinesta, F., 2013. 生物软组织的实时仿真：一种PGD方法。《生物医学工程数值方法国际期刊》29，586–600。[16] Gonzalez, D., Aguado, J. V., Cueto, E., Abisset-Chavanne, E., Chinesta, F., 2016. PGD框架中的基于kPCA的参数解。《工程计算方法档案》25，69–86。

[17] Phellan, R., Hachem, B., Clin, J., Mac-Thiong, J.-M., Duong, L., 2021. 基于有限元方法和机器学习的实时生物力学：综述与展望。《医学物理学》48，7–18。[18] Martinez-Martinez, F., Ruperez-Moreno, M.J., Martinez-Sober, M., Solves-Llorens, J.A., Lorente, D., Serrano-Lopez, A.J., Martinez-Sanchis, S., Monserrat, C., Martin-Guerrero, J.D., 2017. 一种基于有限元的机器学习方法，用于实时模拟乳腺组织受压时的力学行为。《生物学与医学计算机》90，116–124。[19] Pellicer-Valero, O.J., Ruperez, M.J., Martinez-Sanchis, S., Mart´ın-Guerrero, J.D., 2020. 使用基于有限元方法仿真训练的机器学习模型实时进行肝脏生物力学建模。《专家系统及其应用》143，113083。[20] Lorente, D., Martinez-Martinez, F., Ruperez, M.J., Lago, M.A., Martinez-Sober, M. Escandell-Montero, P., Martinez-Martinez, J.M., Martinez-Sanchis, S., Serrano-Lopez, A.J., Monserrat, C., Martin-Guerrero, J.D., 2017. 一个利用机器学习实时模拟呼吸过程中人类肝脏生物力学行为的框架。《专家系统及其应用》71，342–357。[21] Mendizabal, A., Marquez-Neila, P., Cotin, S., 2020. 使用深度学习实时模拟超弹性材料。《医学图像分析》59，101569。[22] Ronneberger, O., Fischer, P., Brox, T., 2015. U-Net：用于生物医学图像分割的卷积网络。《医学图像计算与计算机辅助手术》，施普林格，LNCS，9351，234–241。[23] Goury, O., Duriez, C., 2018. 利用模型降阶实现软体机器人的快速、通用且可靠的控制与仿真。《IEEE机器人学汇刊》34，1565–1576。[24] Pfeiffer, M., Riediger, C., Weitz, J., Speidel, S., 2019. 利用卷积神经网络学习器官的软组织行为，以用于手术导航。《国际计算机辅助放射学与外科学杂志》14，1147–1155。[25] Karpatne, A., Atluri, G., Faghmous, J.H., Steinbach, M., Banerjee, A., Ganguly, A., Shekhar, S., Samatova, N., Kumar, V., 2017. 理论引导的数据科学：一种利用数据进行科学发现的新范式。《IEEE知识与数据工程汇刊》29，2318–2331。[26] Rai, R., Chandan, K.S., 2020. 由数据驱动还是由物理学推导？聚焦信息物理系统（CPS）的混合物理引导机器学习技术综述。《IEEE Access》8，71050–71073, doi: 10.1109/AC- CESS.2020.2987324。[27] Jia, X., Willard, J., Karpatne, A., Read, J.S., Zwart, J.A., Steinbach, M., Kumar, V., 2001. 用于科学发现的物理引导机器学习：湖泊温度剖面模拟应用。arXiv 2001.11086。[28] Willard, J. D., Jia, X., Xu, S., Steinbach, M., Kumar, V., 2003. 将基于物理的建模与机器学习相结合：综述。《计算物理学》，arXiv 2003.04919v3。[29] Gino De Luca, Nusrat Choudhury, Catherine Pagiatakis, Denis Laroche, 2019. 一种用于骨科培训的多术式虚拟现实模拟器。HCII 2019，LNCS 11575，256–271。[30]Recai Yilmaz, Alexander Winkler-Schwartz, Nykan Mirchi, Aiden Reich, Sommer Christie, Dan Huy Tran, Nicole Ledwos, Ali M. Fazlollahi, Carlo Santaguida, Abdulrahman J. Sabbagh, Khalid Bajunaid, Rolando Del Maestro, 2022年. 在虚拟现实模拟中使用深度神经网络持续监测手术双手操作技能。《npj数字医学》（54）。[31] Zhongqing Han, Rahul, Suvranu De, 2019. 一种基于深度学习的混合方法，用于求解电外科中的多物理场问题。《计算方法与应用力学和工程》357（2019）112603。[32]Alexander Winkler-Schwartz, Recai Yilmaz, Nykan Mirchi, Vincent Bissonnette, Nicole Ledwos, Samaneh Siyar, Hamed Azarnoush、Bekir Karlik、Rolando Del Maestro，2019年。利用机器学习识别虚拟现实模拟中与外科专业技能相关的手术及操作因素。《JAMA Network Open》。2019年；2(8):e198363。doi: 10 1001 2019 8363 。/jamanetworkopen。.

[33] Ali M. Fazlollahi、Mohamad Bakhaidar、Ahmad Alsayegh、Recai Yilmaz、Alexander Winkler-Schwartz、Nykan Mirchi、Ian Langleben、Nicole Ledwos、Abdulrahman J. Sabbagh、Khalid Bajunaid、Jason M. Harley、Rolando F. Del Maestro，2022年。人工智能辅导与专家指导对医学生学习模拟手术技能的影响——一项随机临床试验。《JAMA Network Open》。

[34] 2022 5 2 2149008 10 1001 2021 49008 ; ( ): 2013 e 。doi: 。/jamanetworkopen。. Jennifer Davies、Manaf Khatib、Fernando Bello，。开放式手术模拟——综述。《外科教育杂志》，70 (5)，第 618–627 页。[35] Ido Badash、Karen Burtt、Carlos A. Solorzano、Joseph N. Carey，2016年。手术模拟领域的创新：对过去、当前和未来技术的综述。《ATM 转化医学年鉴》，4 (23)。