arXiv:2303.07310v1 [cs.LG] 13 Mar 2023

使用图神经网络学习心血管模拟的降阶模型

Luca Pegolotti斯坦福大学
lpego@stanford.edu

Martin R. Pfaller斯坦福大学

Natalia L. Rubio
斯坦福大学

Ke Ding英特尔公司

Rita Brugarolas Brufau英特尔公司

Eric Darve斯坦福大学

Alison L.Marsden斯坦福大学

摘要

基于物理的降阶模型因其高效性而成为心血管建模中的常用选择，但在处理包含大量交界处或病理状况的解剖结构时，其准确率可能会下降。我们开发了一维降阶模型，利用基于三维血流动力学模拟数据训练的图神经网络来模拟血流动力学。给定系统的初始条件后，该网络会迭代预测血管中心线节点处的压力和流量。数值结果表明，我们的方法在包含多种解剖结构和边界条件的生理几何形状中具有准确性和良好的泛化能力。研究结果表明，在训练数据充足的情况下，我们的方法对压力和流量的误差分别低于 2% 和 3%。因此，与基于物理的一维模型相比，我们的方法性能更优，同时保持了较高的推理效率。

1 引言

在过去二十年中，计算流体力学（CFD）已成为研究心血管系统的重要工具 [1–3]。例如，CFD 模拟已用于无创评估冠状动脉瘤的严重程度 [4, 5], 、提出先天性心脏病的新型外科手术方法 [6], 以及优化医疗器械 [7, 8]。完整的三维血流模型通常采用有限元法求解，可实现患者特异性建模，并提取壁面剪切应力和速度场等详细量。

然而，由于计算成本高等原因，这些模拟在临床实践中的应用仍然有限。为解决这一问题，人们开发了降阶模型（ROM），但效率的提升通常以准确率下降为代价。本文旨在采用基于图神经网络（GNN）的数据驱动方法，开发并验证一种新型降阶模型。

心血管模拟降阶模型的典型构建方法是基于物理原理的。这类建模依赖简化假设，以降低血管几何结构的复杂度，从而减少描述感兴趣量所需的变量数量。这类基于物理原理的降阶模型包括常用的零维和一维模型。

在零维建模中（通常称为集总参数网络模型），心血管系统类似于一个电路：动脉树各部分的压降和血流量分别对应电势差和电流。这些感兴趣的量不依赖任何空间变量。关于此类模型在心血管模拟中的应用示例，从简单的Windkessel模型 [13] 到完整的循环网络，请参阅 [9–12] 。

预印本。初步工作。

一维模型通过对纳维-斯托克斯方程在血管横截面上进行积分，将方程简化为仅含一个空间变量的形式 [14]。具体而言，动脉树被近似为由若干段组成，每段代表血管的中心线；压力、流量和血管壁位移均被视为仅随轴向分量变化的函数。与集总参数网络模型相比，一维模型能够描述更多物理现象，因为它可以考虑流动与弹性血管壁相互作用所引起的波传播现象。一维模型已在众多研究中证明其价值；例如，请参阅 [15–28]。

零维和一维形式通常只需完整三维模拟的一小部分计算成本，就能获得相当准确的结果。然而，这些降阶模型有时表现不佳，因为：（i）它们无法正确考虑血管分叉处的压力损失；（ii）它们依赖特定的数学模型（大多基于经验数据或启发式方法），尤其是在描述病理情况（例如狭窄或动脉瘤）时。最近的一项研究从免费开放的心血管模型数据库——血管模型库（VMR）中选取了 72 个心血管模型，将零维和一维形式与三维参考模拟进行了比较[1] [29]。作者观察到，压力的平均相对误差分别为 2.1% 和 1.8%（零维和一维模型），流量的平均相对误差分别为 3.9% 和 3.4%（零维和一维模型）。

数据驱动降阶模型有望克服上述问题。典型的数据驱动降阶方法包括基于投影的方法，例如降阶基方法或正交本征分解技术 [30, 31]。尽管这些方法可以通过插值策略适配特定几何形状 [32–35],，但它们通常无法表示患者特异性解剖模型所具有的完整几何变异范围。通过在构成目标血管几何形态的简单子域中采用基于投影的方法，可以部分克服这些问题 [36, 37]。

生成用于物理模拟的数据驱动模型的另一种方法是深度学习。尽管在心血管建模领域，深度学习已被用于加速模拟流程的其他环节，例如基于图像的分割 [38, 39]和模型生成[40–42], , 但它尚未广泛用于对物理过程建模。此类应用中最受欢迎的架构包括物理信息神经网络（PINN） [43, 44], , 这类神经网络经过训练，能够仿效已知的物理定律。PINN 已被用于例如海洋和气候建模 [45, 46], 、原子模拟领域 [47], 、近似心脏激动标测 [48] 以及血流动力学建模 [49] 和 [50]。关于流体动力学与机器学习相关工作的综述，请参阅 [51]。与基于投影的方法一样，这些算法通常难以灵活适应计算域几何形状的变化；对于患者特异性应用中的心血管模拟而言，这是一个至关重要的缺点。

近来，图神经网络被提出作为经典的全连接神经网络和卷积神经网络的替代方案，以解决这些难题。例如，图神经网络被用于 [52] ，学习基于粒子的模拟中支配粒子相互作用的规律；也被用于 [53] ，作为一种名为 MeshGraphNets 的基于网格模拟的求解器。最近，图神经网络还被用于估计一个三维动脉合成数据集中的稳态血流 [54]。
本文借鉴 MeshGraphNets 的方法，为心血管模拟构建一维代理降阶模型。我们使用图神经网络学习支配整体量的规律，例如中心线节点处的平均压力和流量，而非像原论文那样用它来近似求解三维血流方程。由于该方法能够在心血管模型的中心线上求解压力和流量，我们将其视为一种数据驱动的一维模型。网络会迭代处理系统状态，其中包括特定时间步的压力和流量，以及其他相关特征（例如横截面积和决定边界条件的参数），并计算下一时刻压力和流量的近似值。

我们对原始 MeshGraphNet实现进行了调整，使其适用于血流模拟。具体而言，我们加入图边，以便将边界条件信息高效地传递到图内部节点；并将特殊参数作为节点特征，以处理心血管建模中常见的温德凯塞尔型或阻力型边界条件。在

[1] http://www.vascularmodel.com

数值结果中，我们展示了图神经网络在一组多样的几何形状上的表现。我们评估了其对多种几何形状的泛化能力，并将其性能与基于物理的一维模型进行比较。

总之，本文的主要贡献有三点：

1. 我们采用了改进版的 MeshGraphNet，通过向图中添加特殊边和患者特异性特征，使其能够处理复杂的边界条件。我们在第 5.2 节进行的消融研究表明，与 MeshGraphNet 相比，这些改进带来了显著提升。2. 我们评估了图神经网络对不同几何形状的泛化能力；据我们所知，此前的研究尚未对此进行探讨。我们再次强调，几何变异性在患者特异性建模中发挥着至关重要的作用（参见第 5.1 节和第 5.2 节）。3. 我们证明，对于具有多个交汇处或病理状况的几何形状，我们的降阶模型优于物理驱动的一维模型（参见第 5.2 节）。

我们的图神经网络实现可在以下地址免费获取：https://github.com/StanfordCBCL/gROM .

2 符号说明

考虑一组 G 患者特异性心血管几何形状 Ω_1、.....、Ω_G。给定一个几何形状Ω_g，我们沿血管中心线生成一个由一组节点构成的有向图：n_1^g、.....、$n_{N^g}^g$；参见图 1（左）。我们将 e_{ij}^g 记为连接节点 i 与节点 j的有向边。我们将 T_{cc}^g 记为患者一个心动周期的时长，并考虑离散时间序列

$$t^{0,g}, t^{1,g}, \ldots, t^{M,g},$$

使得 $t^{0,\,g} = 0, t^{M,\,g} = T_{\text{cc}}^g$，以及 $\Delta t^g = t^{1,\,g} - t^{0,\,g} = \ldots = t^{M,\,g} - t^{M-1,\,g}$。

在本文中，为简化学习处理，我们对所有患者取相同的常数 Δt^g。不过，我们认为只需对架构做少量修改（例如，将 Δt^g 纳入节点特征集合），便可推广至可变时间步长。

我们将时间 $t^{k,\,g}$ 的所有节点和边特征集合称为系统状态 $\Theta^{k,\,g}(\boldsymbol{\mu})$，其中 $\boldsymbol{\mu}$ 是系统参数向量——在本文中，这些参数与其边界条件有关。对于给定的系统参数 $\tilde{\boldsymbol{\mu}}$，我们将状态序列 $\Theta^{k,\,g}(\tilde{\boldsymbol{\mu}})$ 称为一条轨迹。关于本文所考虑特征的说明，请参阅第3.1节。为简洁起见，以下各节中我们将默认所有量都必须针对特定患者，并尽可能省略上标 g。

3 用于心血管模拟的 MeshGraphNets

我们的图神经网络充当数据驱动的一维降阶模型；关于经典基于物理的一维模型的描述，请参阅附录 A。在图1 （右上）所示的滚动阶段，网络将 Θ^k 作为输入，并计算出一次更新，使我们能够将系统状态从 Θ^k 推进到 Θ^{k+1}。我们迭代地应用图神经网络。在每个时间步 t^k，当 $k > 0$ 时，我们向其提供先前估计的系统状态。在 t^0时，我们向网络输入指定的初始条件。图神经网络的作用将在第3.4节中描述。

3.1 图特征

我们根据对问题的了解来选择节点和边特征。例如，众所周知，在泊肃叶条件下，流量 Q 与近似圆柱形血管两端的压降 ΔP 呈线性关系。具体而言，

$$\Delta P = RQ = \frac{8\mu L}{\pi r^4} Q.$$

比例常数 R 称为阻力，取决于血液的黏度 μ、血管的长度 L及其半径 r。在本研究中，我们假设所有患者的血液黏度和密度分别为 $\mu = 0.04\,\text{gcm}^{-1}\,\text{s}^{-1}$ 和 $\rho = 1.06\,\text{gr cm}^{-3}$，并且不将黏度和密度纳入图特征。基于这些流体动力学概念，我们将横截面积纳入节点特征。

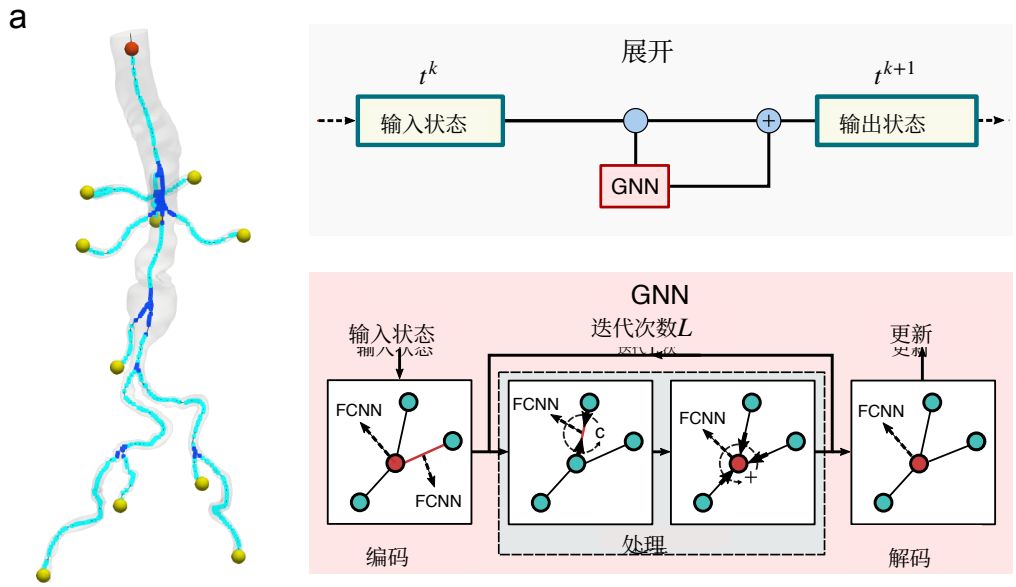

图1： MeshGraphNet 示意图。左侧：主动脉-股动脉模型的图，其中节点包括分支（浅蓝色）、交汇处（深蓝色）、入口（红色）和出口（黄色）。右上：该方法的展开阶段。我们将输入状态 Θ^k 提供给图神经网络，由其计算状态变量的更新预测。将该更新与当前状态结合，计算出 Θ^{k+1}。右下：图神经网络中的步骤。使用全连接神经网络（FCNN）对节点和边特征进行编码，经过聚合操作处理 L 次，再解码到输出空间。

节点特征。我们将每个中心线节点 n_i 处的截面平均压力 $p_i^k \in \mathbb{R}^+$ 和流量 $q_i^k \in \mathbb{R}$作为时刻 t^k系统状态 Θ^k 的描述量。这些量是在由垂直于中心线的平面与血管的三维模型相交所得到的截面上计算的。同样，血管腔的面积 $A_i \in \mathbb{R}$ 是经过节点 i 的截面面积，基于上述原因，我们将其视为节点特征。我们引入一个独热向量 $\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathbb{R}^4$ 来编码不同的节点类型。这些类型包括分支节点、交汇节点、模型入口（每个几何形状一个）和模型出口，如图1（左）所示。之所以需要区分分支节点和交汇节点，是因为交汇处截面的面积沿中心线呈不连续变化（这是因为相邻切片有时会穿过不同数量的分支）。因此，对这些截面上的量取平均时，分支和交汇处会呈现不同的血流动力学。我们使用与 [29]相同的自动化算法进行交汇处检测。其他节点特征还包括在节点 n_i处计算的中心线切向量，我们将其记作 $\boldsymbol{\phi}_i \in \mathbb{R}^3$；心动周期的周期 $T_{\text{cc}} \in \mathbb{R}^+$；整个心动周期内的最小和最大压力（$p_{\text{min}} \in \mathbb{R}^+$ 和 $p_{\text{max}} \in \mathbb{R}^+$）；与边界条件相关的三个参数（$R_{i,p} \in \mathbb{R}^+$、$C_i \in \mathbb{R}^+$和 $R_{i,d} \in \mathbb{R}^+$；详见第3.2节）；以及与模型初始化相关的布尔加载变量 $l^k \in \{0,1\}$（见第3.3节）。需要指出的是，尽管在本研究中，p_{min} 和 p_{max} 是根据模拟数据设定的，但对于具体患者而言，这些值通常是已知的——例如，在主动脉模型中，它们被确定为舒张压和收缩压——并且常用于基于物理的心血管模拟中，以调整第3.2节讨论的边界条件。总之，我们为每个节点 n_i 关联特征向量

$$\mathbf{v}_i^k = [p_i^k, q_i^k, A_i, \boldsymbol{\alpha}_i^{\text{T}}, \boldsymbol{\phi}_i^{\text{T}}, T_{\text{cc}}, p_{\text{min}}, p_{\text{max}}, R_{i,p}, C_i, R_{i,d}, l^k]^{\text{T}} \in \mathbb{R}^{17}. \tag{1}$$

节点特征及其定义总结于表1。

边特征。我们将$\mathbf{d}^{ij} = \mathbf{x}^j - \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^3$ 定义为节点 n_j与 n_i的位置之差，以及 z_{ij} 这两个节点之间最短路径的长度。除物理边外，本文还引入了连接边界节点与内部节点的边（见第3.2节）。因此，我们引入独热向量 $\boldsymbol{\beta}_{ij} \in \mathbb{R}^4$ 来编码边类型。我们定义如下

节点特征	定义
p_i^k	时间 t^k的压力
q_i^k	时间 q^k的流量
A_i	横截面积
$\boldsymbol{\alpha}_i$	节点类型
$\boldsymbol{\phi}_i$	中心线切向量
T_{cc}	心动周期时长
p_{min}	最低压力（整个心动周期内）
p_{max}	最大压力（整个心动周期内）
$R_{i,p}$	R_p RCR 边界条件中的参数（见图2）
C_i	C RCR 边界条件中的参数（见图2）
$R_{i,d}$	R_d RCR 边界条件中的参数（见图2）
l^k	时间 t^k处的布尔负载变量

表1： 节点特征及其定义。

边特征	定义
$\mathbf{d}_{ij}^{\text{T}}/\|\mathbf{d}_{ij}$	节点 i 与 j之间的归一化向量距离
z_{ij}	节点 i 与 j之间的最短路径长度
$\boldsymbol{\beta}_{ij}$	边类型

表 2： 边特征及其定义。

边类型：连接分支节点与分支节点的边、连接交汇节点与交汇节点的边，以及连接模型入口或出口与内部节点的边。为简单起见，连接分支节点与交汇节点的边被赋予与分支内部边相同的类型。我们注意到，分支和交汇处内部的边用于定义解剖模型的中心线；计算最短路径 z_{ij} 时，我们仅考虑这些边。此外，我们强调，尽管引入边界边会改变图的拓扑，但通过不同的边类型仍保留了有关原始拓扑的信息。与 e_{ij} 相关联的边特征为

$$\mathbf{w}_{ij} = [\mathbf{d}_{ij}^{\text{T}}/\|\mathbf{d}_{ij}\|_2, z_{ij}, \boldsymbol{\beta}_{ij}^{\text{T}}]^{\text{T}} \in \mathbb{R}^8. \tag{2}$$

边特征及其定义汇总于表2。

请注意，除酉向量 $\mathbf{t}_i$ 和 $\mathbf{d}_{ij}^{\text{T}}/\|\mathbf{d}_{ij}\|_2$外，所有特征均根据数据集计算得出的统计数据进行归一化，使其服从标准高斯分布 $\mathcal{N}(0,1)$。

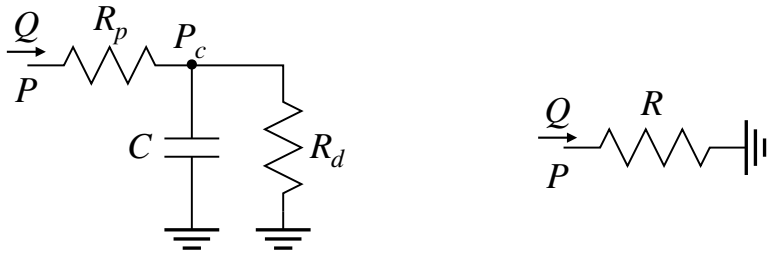

图2： 三元温德凯塞尔（RCR）和电阻边界条件的电路示意图（分别位于左侧和右侧）。在基于物理的模型中，这些边界条件通过常微分方程建模，例如式（3）。在此，我们通过将 R_p、C、R_d或 R纳入图特征，训练图神经网络来表征这些边界条件。

3.2 扩展 MeshGraphNet 以支持心血管边界条件

脉管系统中的血流动力学由入口和出口处的边界条件决定。在心血管模拟中，我们将下游脉管系统表示为三元件温德凯塞尔型（RCR）或阻力型边界条件，如图 2所示。

在 RCR 边界条件中，电容器 $P_c(t,\ Q)$ 中的压力由以下关系确定

$$\frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{C}\left(Q(t) - \frac{P_c}{R_d}\right). \tag{3}$$

然后，出口处的压力（P见图 2）可表示为 $P(t,\ Q) = P_c(t,\ Q) - R_pQ(t)$。
在电阻边界条件中，出口处压力与流量之间的关系很简单，即 $P(t) = RQ(t)$。值得注意的是，这是 RCR 边界条件的一个特例，此时 C和 R_d 趋于零。

为简化起见，在 RCR 和电阻边界条件中，我们均假设远端压力为零。

为了将这些边界条件类型整合到 MeshGraphNet框架中，我们将 R_p、C 和 R_d 的值作为出口节点的节点特征。对于图中的所有其他节点，这些特征均设为零。使用仅包含阻力的边界条件时，我们还会设置 $C = 0$ 和 $R_d = 0$。在训练期间以及展开阶段的每次迭代中，我们只指定入口处下一时间步的流量值。
鉴于本文所研究中心线的特点，大多数中心线节点仅与两个相邻节点相连，这妨碍了边界节点与内部节点之间的信息传递。因此，我们添加人工边，将每个内部节点与边界上距其最近的节点相连。具体而言，每个内部节点 n_i 都与边界节点 n_j 相连，使得 n_i 与 n_j之间的最短路径长度（即 z_{ij}）最小化。连接入口和出口与内部节点的边属于不同的边类型（参见第 *3.1* 节中的 边特征），并且与本文考虑的其他所有类型的边一样，均为双向边。

3.3 初始条件

正如我们将在第 4 节中看到的，我们在一个心动周期内使用时变模拟数据训练图神经网络。然而，通常很难从临床数据中轻易估计心动周期开始时系统的初始条件。因此，生成数据集中的轨迹时，我们从一个常数解开始，其中所有图节点的 $p^0 = p_{\min}$ 和 $q^0 = 0$ 均为初始值，然后在 $T_l = 0.1$ 秒内，对该初始状态与心动周期开始时的实际初始条件进行线性插值。接着，我们加入一个节点特征，记为 l^k，在 $t = -0.1$ 秒至 $t = 0$ 秒期间取单位值，在 $t > 0$ 时取零，以区分加载阶段与心动周期的实际模拟。

3.4 图神经网络的前向步骤

本节中，我们用 $\mathbf{f}_*$ 表示一个具有 n_h 个隐藏层的全连接神经网络（全连接神经网络）[55]。隐藏层中的神经元数量保持恒定，等于 n_s。除输出层外，每一层均采用 LeakyReLU 激活函数；除非另有说明，我们还会对输出层应用层归一化。当全连接神经网络接收多个参数时，应将这些参数连接成一个张量。
MeshGraphNet 基于图 1 (右下角)所示的三个主要阶段：

1. 编码：我们使用全连接神经网络将节点和边特征转换为潜在特征。具体而言，给定节点特征 $\mathbf{v}_i^k$，我们将其潜在表示计算为 $\mathbf{v}_i^{k\,(0)} = , \mathbf{f}_{\text{en}}(\mathbf{v}_i^k) \in \mathbb{R}^{n_l}$，其中$\mathbf{f}_{\text{en}}$ 是一个将节点特征空间映射到 $\mathbb{R}^{n_l}$ 的全连接神经网络。类似地，对于所有边 $\mathbf{w}_{ij}^{(0)} = \mathbf{f}_{\text{ee}}(\mathbf{w}^{ij}) \in \mathbb{R}^{n_l}$，我们计算 e_{ij}。尽管边和节点的潜在空间 n_l 大小不必相同，但为便于优化我们的架构（将在第 3.6 节讨论），我们令二者相同。

2. 处理：处理阶段执行 L 次，并进一步分为两个阶段。在第一阶段，我们将边特征计算为

$$\mathbf{w}_{ij}^{(l)} = \mathbf{f}_{\text{pe}}^{(l)}(\mathbf{w}_{ij}^{(l-1)}, \mathbf{v}_i^{k,(l-1)}, \mathbf{v}_j^{k,(l-1)}) \in \mathbb{R}^{n_l},$$

其中 $l \geq 1$ 表示迭代次数。然后，我们使用聚合函数计算新的节点特征：

$$\mathbf{v}_j^{k,(l)} = \mathbf{f}_{\text{pn}}^{(l)}(\mathbf{v}_j^{k,(l-1)}, \sum_{i:\exists e_{ij}} \mathbf{w}_{ij}^{(l)}, \mathbf{w}_{\text{in},j}, \mathbf{w}_{\text{out},j}) \in \mathbb{R}^{n_l}.$$

此阶段考虑的所有网络都具有残差连接。

3. 解码：在最后一个阶段，使用全连接神经网络将节点特征从潜在空间转换到所需的输出空间。所需的输出是一个向量，其中包含压力和流量的更新量 $[\delta p_i^k, \delta q_i^k] = \mathbf{f}_{\text{dn}}(\mathbf{v}_i^{k\,(L)}) \in \mathbb{R}^2$。遵循 [53], 我们不在 $\mathbf{f}_{\text{dn}}$ 的输出层上使用层归一化。

在图神经网络前向传播结束时，我们将压力和流量的节点值 p_i^k和q_i^k更新为 $p_i^{k+1} = p_i^k + \delta p_i^k$和 $q_i^{k+1} = q_i^k + \delta q_i^k$。
我们引入 $\delta \mathbf{v}_i^k = [\delta p_i^k, \delta q_i^k, 0, \ldots, 0] \in \mathbb{R}^{17}$ 以及函数 Ψ_m，该函数表示连续应用图神经网络 m 次的结果（滚动阶段）。具体而言，

$$\Psi_1(\Theta^k) = \bigcup_{i=1}^{N} \{\mathbf{v}_i^k + \delta \mathbf{v}_i^k\} \cup \bigcup_{i,j:\exists e_{ij}} \{\mathbf{w}_{ij}\},$$

and

$$\Psi_m(\Theta^k) = (\underbrace{\Psi_1 \circ \cdots \circ \Psi_1}_{m})(\Theta^k).$$

我们将图神经网络应用 m 次后，节点 i 处 p 和 q 的近似值分别记为 $\Psi_m(\Theta^k)|_{p,\,i}$ 和 $\Psi_m(\Theta^k)|_{q,\,i}$。

3.5 训练

现在，我们介绍训练图神经网络时要最小化的损失函数 $\mathcal{L}$。定义训练集 $\{\Omega_g\}_{g\in\mathcal{T}}$，其中 $\mathcal{T}$ 是 $[1, \ldots, G]$ 的子集。我们在连续时间步 s 的较小跨步上训练网络，使其近似节点压力和流量的精确值 $\hat{p}^{k,\,i}{}^{g}$ 和 $\hat{q}^{k,\,i}{}^{g}$。此处，我们考虑 $s = 5$。已有研究证明，考虑多个时间步有助于提升效果 [56]。具体而言，我们定义跨步均方误差

$$\text{sMSE}^{k,g,s} = \frac{1}{N^g} \sum_{l=1}^{s} \sum_{i=1}^{N^g} a_l b_i \left[(\hat{p}_i^{k+l,g} - \Psi_l(\Theta^{k,g})|_{p,i})^2 + (\hat{q}_i^{k+l,g} - \Psi_l(\Theta^{k,g})|_{q,i})^2 \right],$$

其中，当 $l = 1$ 时， $a_l = 1$；否则为 $a_l = 0.5$；对于边界节点， $b_i = 100$；否则为 $b_i = 1$。于是，损失函数为

$$\mathcal{L} = \text{MSE} = \sum_{g\in\mathcal{T}} \frac{1}{|\mathcal{T}|(M^g - s)} \sum_{k=0}^{M^g - s} \text{sMSE}^{k,g,s}. \tag{4}$$

我们的目标是让图神经网络在多个时间步的展开过程中保持稳健。为此，训练期间必须加入随机噪声，以模拟网络在滚动阶段产生的误差所造成的影响，详见 [52, 53]。训练期间，我们对状态中的压力和流量 $\Theta^{k\text{进行扰动},\,g}$ 使其分别变为 $\tilde{p}_i^g = \hat{p}_i^g + \varepsilon_p$ 和 $\tilde{q}_i^g = \hat{q}_i^g + \varepsilon_q$，其中 $\varepsilon_p \sim N(0, \sigma^2)$，$\varepsilon_q \sim N(0, \sigma^2)$，而 σ 是控制噪声标准差的超参数。我们使用随机梯度下降和 Adam优化器优化损失函数（4）。关于图神经网络和训练超参数的详细信息，请参见第3.6节。

我们将每条完整轨迹视为一个数据点。由于以这种方式获得的数据集规模有限（与例如将每组可能的 s 个连续时间步都视为

独立数据点不同），我们采用 k折交叉验证 [57], ，即使用相同的一组超参数，在不同的训练集-测试集划分上训练 k 网络，并报告其平均性能。划分训练集和测试集时，确保 $1-1/k$ 和 $1/k$ 的轨迹分别分配到训练集和测试集，并确保每条轨迹恰好出现在测试集中一次。以第5.1节所用的数据集为例，该数据集由 160 条轨迹组成。在 10 折交叉验证中，10 个网络中的每个网络都使用 144 条轨迹进行训练，并使用 16 条进行测试；我们报告训练集和测试集上的平均性能。

3.6 超参数优化

超参数优化对于使用机器学习方法实现最先进的性能至关重要。在本研究中，我们采用了优化平台 SigOpt。[2] 我们将训练后在测试集上得到的压力和流量的平均滚动误差作为目标函数。具体而言，给定患者 g 的解剖结构，压力和流量的误差计算如下：

$$\mathrm{e}_p^g = \frac{\sum_{i\in\mathcal{B}^g}\sum_{k=1}^{M^g}(\hat{p}_i^{k,g} - \Psi_k(\Theta^{0,g})|_{p,i})^2}{\sum_{i\in\mathcal{B}^g}\sum_{k=1}^{M^g}(\hat{p}_i^{k,g})^2}, \tag{5}$$

$$\mathrm{e}_q^g = \frac{\sum_{i\in\mathcal{B}^g}\sum_{k=1}^{M^g}(\hat{q}_i^{k,g} - \Psi_k(\Theta^{0,g})|_{q,i})^2}{\sum_{i\in\mathcal{B}^g}\sum_{k=1}^{M^g}(\hat{q}_i^{k,g})^2}, \tag{6}$$

其中，$\hat{p}^{k,g}_i$ 和 $\hat{q}^{k,g}_i$ 分别是在时刻 t^k 、患者 g 的节点 n_i 处的精确压力值和流量值。请注意，计算这些误差时，我们仅考虑位于分支中的节点索引，即 $\mathcal{B}^g$。

通过优化，我们得到以下超参数设置：

1. 网络架构。 图神经网络中的每个全连接网络包含 $n_h = 2$ 个隐藏层，每个隐藏层有 $n_s = 64$ 个神经元。图神经网络前向步骤中的最佳处理迭代次数为 $L = 5$，潜在空间的大小设为 $n_l = 16$ 。2. 训练超参数。 我们将初始学习率设为 10^{-3}。学习率通过余弦退火函数逐渐降低，最终值为 10^{-6}。我们使用由 100 个图组成的批次。训练期间，我们注入正态分布噪声 $N(0,\ \sigma^2)$，其中 $\sigma = 5\cdot 10^{-2}$.除非另有说明，否则我们对图神经网络进行 100 个训练轮次。

4 数据集

我们考虑了从 VMR 中选取的八个健康和患病患者特异性模型，如图 3 所示。模型 1–5 是健康的主动脉模型，模型 6 是具有动脉瘤的主动脉-股动脉模型，模型 7 是健康的肺动脉模型，模型 8 是受主动脉缩窄影响的主动脉。我们选择这些模型的原因是，正如 [29], 等先前研究所示，它们具有一些特征——例如，许多交界处（模型 7）或狭窄（模型 8）——这些特征通常会给传统的基于物理的模型带来挑战。

数据生成流程包括三个主要步骤：使用 SimVascular 进行三维模拟 [58, 59], 转换为一维表示，以及图生成。

三维模拟。除几何信息外，VMR 还包含模拟数据以及经过调节以匹配临床测量数据的边界条件信息。这些模型在入口处采用一个心动周期内预设的流量曲线，并在出口处采用 RCR（模型 1-6 和模型 8）或电阻边界条件（模型 7）。我们针对每种几何形状，在原始边界条件上施加随机扰动，分别进行了 32 次（模型 1-5）和 50 次（模型 6-8）三维模拟。具体而言，我们将入口流量以及控制出口边界条件的各个参数分别乘以在 $[0.8, 1.2]$范围内均匀分布的独立因子。按照第 2 节中引入的记号，VMR 中的每个模型都关联一个控制其边界条件的特定参数集 $\boldsymbol{\mu} = [\mu^{\text{in}}, \mu_1^{\text{out}}, \ldots, \mu_{N_{\text{out}}}^{\text{out}}]$，并针对每个模型的多个扰动参数集进行了模拟。

[2] https://sigopt.com

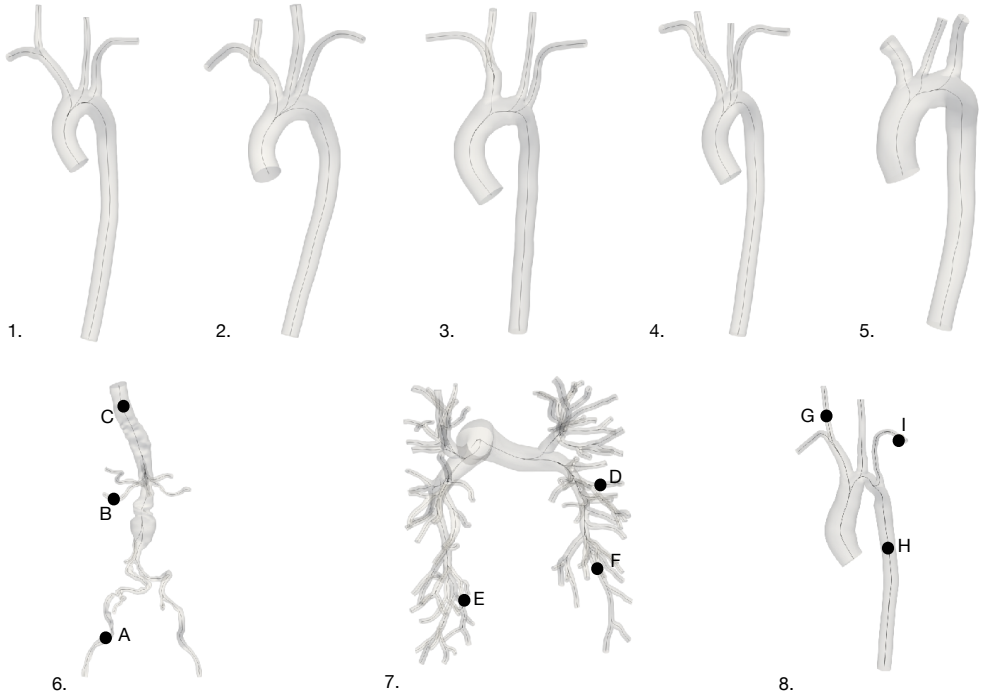

图3： 血管模型库中的心血管模型。模型1–5：健康主动脉模型。模型6：患有动脉瘤的主动脉-股动脉模型。模型7：健康肺动脉模型。模型8：患有主动脉缩窄的主动脉模型。底部几何形状中标记的位置用于第 5.2节所展示的结果。

	1	2	3	4	5	6	7	8
运行时间 [小时]	3.8	2.7	1.7	2.9	3.7	19.4	5.8	5.9
模拟次数	32	32	32	32	32	50	50	50

表3： 所考虑的各个心血管模型的三维模拟平均运行时间（小时）及模拟总次数。

形式为 $\tilde{\boldsymbol{\mu}} = [c^{\text{in}}\mu^{\text{in}}, c_1^{\text{out}}\mu_1^{\text{out}}, \ldots, c_{N_{\text{out}}}^{\text{out}}\mu_{N_{\text{out}}}^{\text{out}}]$，其中 c^{in}，c_1^{out}，……，$c_{N_{\text{out}}}^{\text{out}} \sim U(0.8,\ 1.8)$。我们在圣迭戈超级计算中心（SDSC）Expanse 集群的 128 个双路 AMD(R) EPYC 7742 核心上，对非定常纳维–斯托克斯方程进行了两个心动周期的三维有限元模拟。

在表 3 中，我们报告了所考虑的八种模型各自的平均模拟运行时间。

模拟结果的后处理。 我们将三维结果限制在模型中心线上。具体而言，我们在血管几何形态的每个中心线节点处，考虑其正交横截面，并对横截面上的压力和速度法向分量进行积分，从而计算出平均压力和流量。我们还为每个中心线节点关联了对应横截面的面积。为便于说明，图 4 （中）展示了我们对压力场和速度场进行积分的部分横截面。

图生成。 我们的图神经网络实现基于 PyTorch 和深度图学习库（DGL）[3]。在流程的最后一步中，我们生成了节点、边和相对特征，其格式与 DGL 兼容。如第 3.2 节所述并如图 4 （右图）所示，我们在此阶段添加了连接边界节点与内部节点的边。随后，我们使用三次样条对每个图节点处的时变压力场和流率场进行重采样，重采样间隔为固定的 Δt。我们还进行了

[3]https://www.dgl.ai

ID	p [毫米汞柱]	q [厘米^2/秒]	A [厘米^2]	h [毫米]	节点	边
1	84 [46,148]	35 [-43,449]	1.23 [0.2,3.3]	2.06 [1.1,4.2]	288	1138
2	72 [42,209]	15 [-20,376]	0.55 [0.1,1.4]	1.36 [0.8,3.0]	292	1154
3	74 [33,120]	17 [-10,235]	0.78 [0.1,2.6]	2.08 [1.2,4.6]	240	946
4	86 [52,125]	20 [-9,243]	1.23 [0.2,3.8]	2.42 [1.4,5.6]	257	1014
5	91 [13,143]	43 [-61,594]	2.60 [0.3,5.5]	2.88 [1.6,5.2]	144	564
6	91 [63,159]	10 [-3,227]	0.95 [0.1,6.9]	2.91 [1.7,6.6]	479	1892
7	6 [1,26]	2 [-1,172]	0.19 [0.1,2.6]	3.97 [2.3, 10.7]	848	3200
8	86 [19,161]	20 [-22,310]	1.07 [0.1, 5.3]	1.68 [0.9, 4.2]	326	1290

表4： 压力 p、流量 q、横截面积 A、节点距离 h、节点数和边数，分别对应第 5.1 节（第1–5行）和第 5.2 节（第6–8行）结果中所用图的相关数据。以下数值 p、q、A 和 h 均为分支节点的平均值。方括号中报告的是最小值和最大值。

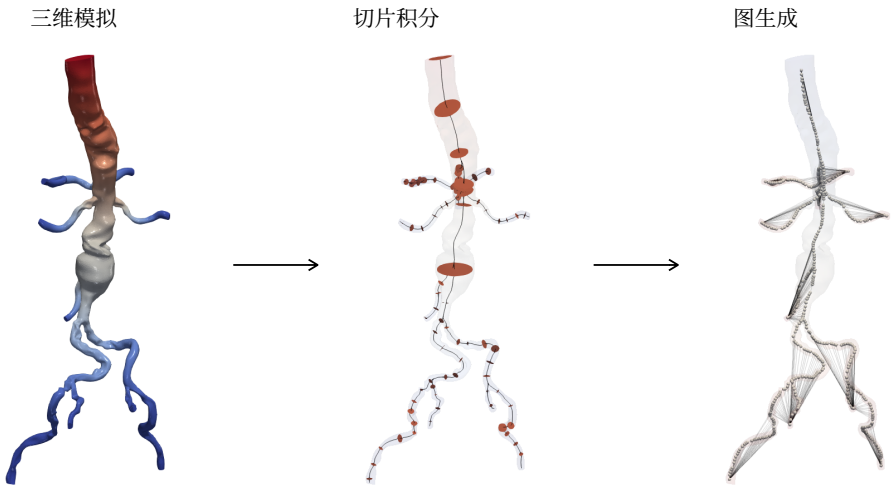

图4： 生成 MeshGraphNet 输入数据的流程。我们首先使用 SimVascular 运行三维模拟，然后通过对切片上的压力和速度进行积分，将结果限制在中心线上，最后从中心线节点和连通关系出发，生成图以及相应的节点和边特征。右侧的图展示了第 3.2 节中讨论的边界边。

数据增强：将每条轨迹的起始位置设为不同偏移量，从而将图的数量增加到原来的 4 倍。表 4 展示了本文所研究图的统计数据。每一行根据相应心血管模型的标识符编索引（参见图 3 ）。

流程的这三个步骤总结见图4。

5 结果

本节展示了在第4节所述数据集上获得的结果。我们在 16 个 36 核双路 Intel(R) Ice Lake Xeon(R) 节点上以分布式方式训练网络。推断时，我们使用 Apple M1 Max 处理器。

5.1 数据集大小相关的收敛研究与敏感性分析

我们首先评估了图神经网络的性能随数据集大小变化的情况。我们使用了图 3 中所示的五个健康模型（模型 1–5），并提取每个几何形状最后一个心动周期的解（每个几何形状 32 个）来训练 MeshGraphNet。考虑数据增强后，数据集中共有 640 个已求解流场。通过采用 90-10% 的划分，我们进行了 10 折交叉验证

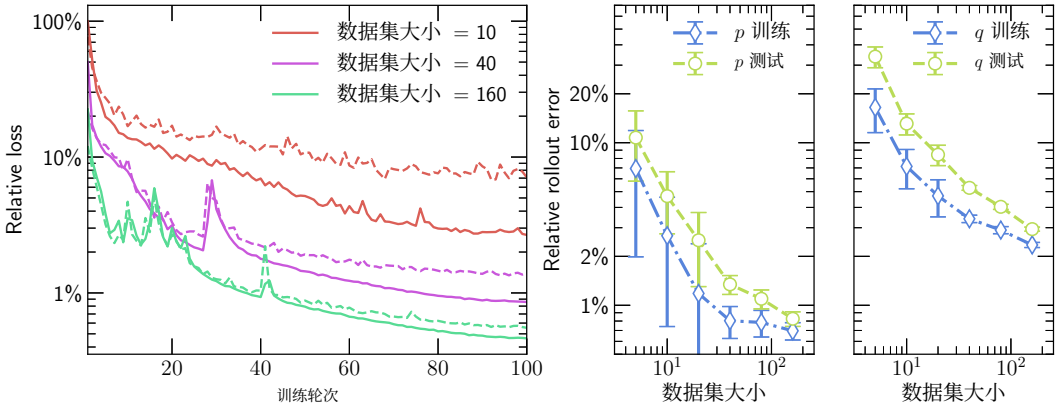

图 5： 在包含数量可变的唯一轨迹（即不考虑增强数据）的数据集上训练时，MeshGraphNet 的性能。左：损失函数在 100 个训练轮次中的衰减情况（实线：训练损失，虚线：测试损失）。显示的损失相对于使用 10 条轨迹训练的网络所达到的最大值。右：压力 p 和流量 q相对滚动误差的收敛情况。竖直误差线表示基于 10 次独立训练运行计算的 95% 置信区间。

bet将训练集和测试集分开，并避免数据泄漏——也就是说，每次模拟的增强数据 n belo映射到与原始模拟相同的（训练或测试）集合。

图5 展示了网络分别使用 10、20、40、80 和 160 条轨迹进行训练时的性能。左图报告了训练轮次中训练损失和测试损失值的下降情况。随着数据集大小增加，训练损失与测试验证损失之间的差距缩小，最终损失值也随之降低。右图根据数据集大小，数值展示了压力误差和流量误差的预期收敛情况（计算方法见公式（5）和公式（6））。结果还表明，随着用于训练图神经网络的轨迹增多，训练与测试的展开误差之间的泛化差距会缩小，且波动性降低。图 5 （右）通过 95% 置信区间展示了性能的波动性，该区间根据 10 折交叉验证中训练的 10 个网络计算得出。

我们通过以下方式分析了 MeshGraphNet 对各项节点和边特征的敏感性。我们从数据集中随机选取一条轨迹，并根据压力和流量的展开误差，评估在整个数据集上训练的 10 个图神经网络各自的基线性能。随后，我们使用相同的图神经网络进行多次展开，并在每个时间步中，对每个节点和边的每次展开仅针对一项特征施加随机高斯噪声 $N(0, 0.05)$（对于切向量和节点类型等多维节点特征，我们将标准差除以向量的维数）。需要指出的是，节点和边特征均经过标准化，因此所有特征都使用相同的噪声分布。我们将某一特征的敏感性因子定义为扰动配置下所得误差与基线误差之比。因此，敏感性接近 1 表示模型对噪声具有鲁棒性。敏感性值较高的特征比敏感性值较低的特征对结果准确性更为重要。我们的研究结果汇总于图 6。

压力和流量全局近似的准确率并未明显受到前一时间步的影响。事实上，正如第 3.5 节所述，我们专门训练图神经网络，使其能够抵抗压力和流量中的噪声。网络对横截面积的变化（这与我们对流体动力学的理解一致）以及患者特定数据（例如边界条件参数和压力参考值（$p_{\min}$ 和$p_{\max}$））最为敏感。出乎意料的是，心动周期 T_{cc} 也发挥了重要作用；我们认为，这是因为此处考虑的不同 T_{cc} 数量较少（五个，即每种几何形状对应一个），而增加数据集中该参数的变化范围也会减弱其影响。切向量或节点距离等几何特征对结果准确率没有显著影响。部分原因可能是这些特征并非彼此独立——例如，可以根据节点位置估算切向量值，反之亦然。最后，我们观察到，

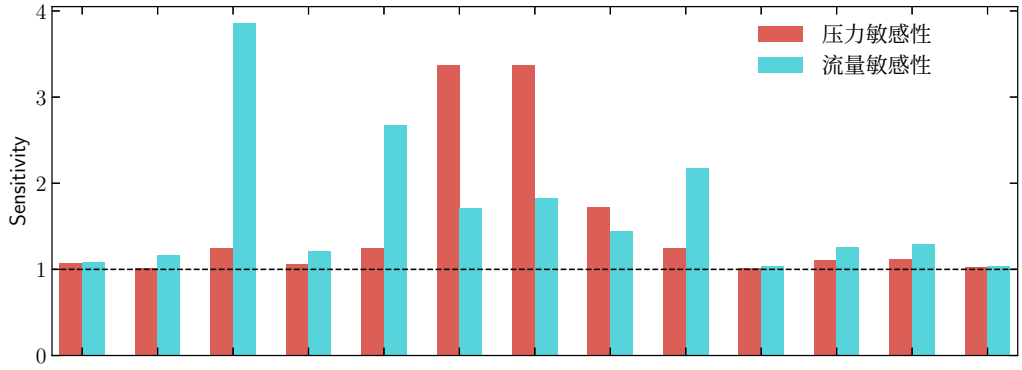

图6： MeshGraphNet对节点和边特征的敏感性分析。敏感性以扰动误差与基线误差的比值衡量；在展开过程中，我们通过向横轴所示特征添加随机高斯噪声来获得扰动配置。结果取自十个独立训练的图神经网络的平均值。节点和边特征包括：时间 t^k （p_i^k）的节点压力、时间 t^k （q_i^k）的节点流量、横截面积 A_i、中心线切向量 $\boldsymbol{\phi}_i$、节点类型、心动周期 T_{cc}、最低压力 p_{min}、最大压力 p_{max}、RCR参数、加载变量 l^k、相对节点位置 $\mathbf{d}_{ij}/\|\mathbf{d}_{ij}\|$、节点 n_j 和 n_i之间的最短路径长度，以及边类型。

我们引入加载变量 l^k，用于区分加载阶段和心动周期模拟；它对滚动预测精度并未产生重要影响。

5.2 与基于物理的一维模型的比较

为了评估我们的方法相对于基于物理的降阶模型的性能，我们考察了模型6、7和8（见图3）。这些模型具有一维模型通常难以处理的特征。对于每种几何形状，我们使用与VMR中心血管模型相关的边界条件的50组随机配置，模拟了两个心动周期。

我们还使用与三维模拟相同的边界条件进行了 一维模拟。我们按照 [29] 中采用的方法，设置动脉壁的材料属性，使管腔面积的变化接近于零。有关我们实现一维模型的更多细节，请参阅附录 A。我们使用三维模型在一维节点处计算得到的压力和流量近似值初始化降阶模型，并运行两个心动周期。根据我们的经验，这种设置与三维数据的吻合度更高（相比之下，使用压力和流量的常数值初始化降阶模型，或让模拟运行更多心动周期，效果较差）。

与第5.1节类似，我们在训练时采用了 4 倍数据增强，因此，每个解剖模型都对应一个包含 200 条轨迹的训练数据集。我们考虑了两种训练方法。第一种方法使用一个全局数据集，其中包含基于全部三个心血管模型计算得到的轨迹。我们将以这种方式训练的网络称为 GNN-A。第二种方法是在由同一解剖模型的轨迹组成的数据集上分别训练三个不同的图神经网络。换言之，我们在与模型 6 相关的所有轨迹上训练一个图神经网络，在与模型 7 相关的所有轨迹上训练一个图神经网络，并在与模型 8 相关的所有轨迹上训练一个图神经网络。由于这些网络是在单一几何形状上训练的，我们将其称为 GNN-Bg，其中 $g = 6$，$g = 7$ 或 $g = 8$ 表示患者标识符。表4汇总了本节所考虑模型的统计数据，这也说明了选择针对特定几何形状训练网络的原因。事实上，不同血管区域的关键物理量（如压力、流量和横截面积）具有不同的取值范围。由于图神经网络处理的是使用数据集内所有图计算得到的统计量进行归一化的数据，我们旨在研究，使用适用于各个心血管区域的数值对数据进行归一化，是否能提高准确率。

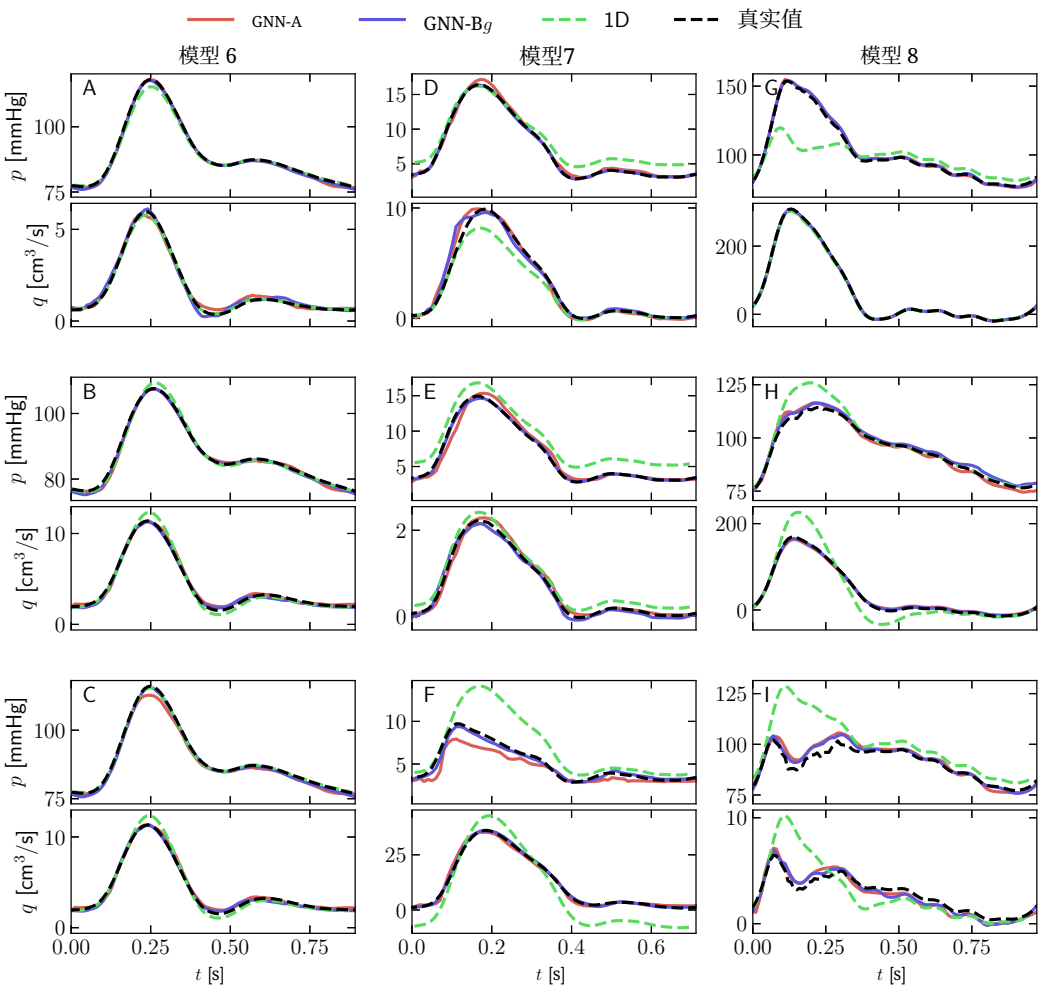

图7： 图神经网络和一维模型在图 3所示位置处对压力和流量的近似结果。左、中、右列分别对应模型6、7和8。所有结果均采用 $t = 10^{-2}$ s 得到。在图例中，GNN-A 表示同时使用全部三种几何形状训练的网络，GNN-Bg 表示使用单个患者的仿真轨迹训练的图神经网络（$g = 6$、 $g = 7$ 或 $g = 8$），而 1D 表示物理驱动的一维模型（见附录 A）。真实值以黑色虚线表示。

在准确率方面是否具有优势。我们对 GNN-A 和 GNN-Bg进行五折交叉验证。由于数据集大小不同，GNN-A 网络训练 100 轮，GNN-Bg 网络训练 500 轮。

图7展示了 GNN-A、GNN-B6（左列）、GNN-B7（中列）和 GNN-B8（右列）在测试集所含轨迹上的表现。我们在模型分支中随机抽取的 20 个图节点处评估压力误差，并展示 GNN-A 压力误差最小（顶行）、中位数（中行）和最大（底行）位置处的压力和流量变化。图神经网络在所有考察位置的表现都非常准确。图 7 还展示了一维模型采用 $\Delta t = 10^{-2}$ s 运行时的表现（时间步与 GNN-A 和 GNN-Bg相同）。数据驱动模型和物理驱动模型在主动脉-股动脉模型（左列）上均表现良好，但在肺动脉模型和主动脉缩窄模型（中列和右列）上，图神经网络的表现优于一维降阶模型。

图 8 比较了 GNN-A 和一维模型在整个数据集上的准确率；由于 GNN-A 和 GNN-Bg 的表现相近，为简洁起见，我们在此重点讨论更通用的 GNN-A。在所有情况下 $\Delta t = 10^{-2}$ s。我们绘制了 GNN 和一维模型对压力（上排）和流量

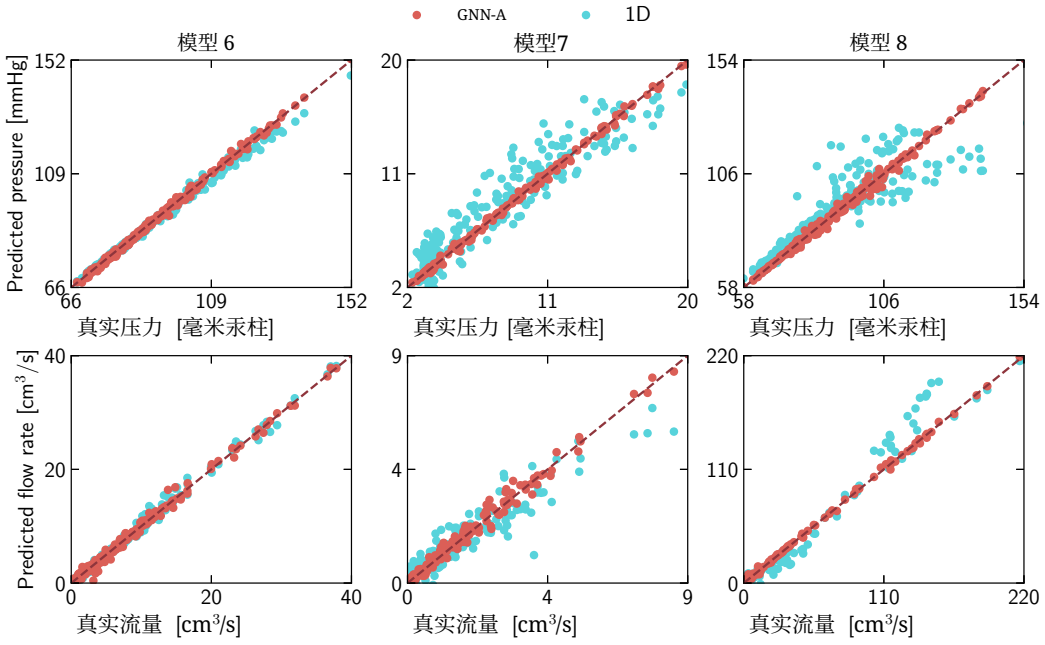

图8： GNN-A 和一维模型的压力和流量近似值，$\Delta t = 10^{-2}$（纵轴）与真实值（横轴）对比。左、中、右列分别对应模型 6、7 和 8。点是在数据集所有轨迹的时空范围内随机采样得到的。

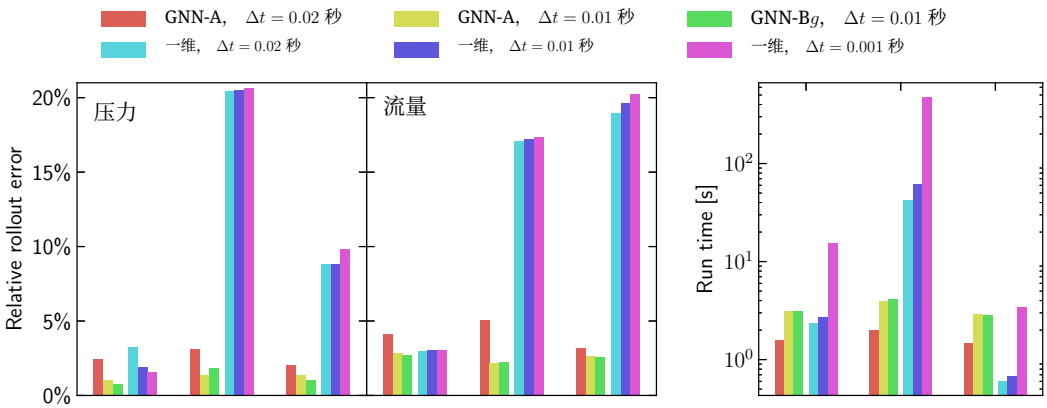

图 9： 不同配置的图神经网络和一维模型的压力与流量平均误差（左图），以及平均运行时间（秒）（右图）。

（下排）的近似值，并将其与数据集中所有模型在空间和时间上随机抽取的位置处的真实值进行比较。位于平分线上的点表示 ROM 近似与真实值吻合良好。再次，这些结果表明，图神经网络的准确率远高于基于物理的一维模型。

在图 9中，我们报告了图神经网络和一维模型在全部 150 条轨迹上的平均性能。由于采用了五折交叉验证，且每条轨迹恰好在测试集中出现一次，因此图神经网络的结果是对数据集中的所有轨迹取平均所得。我们观察到，GNN-A 和 GNN-Bg 的准确率相当，这表明单个图神经网络可以

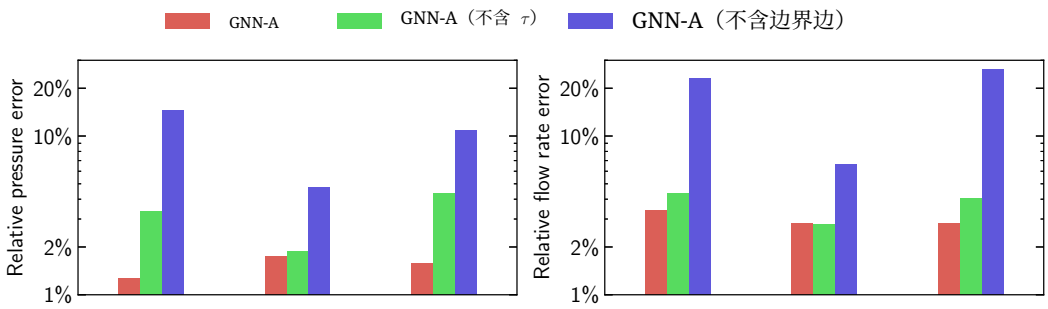

图10： 消融研究。与基线 GNN-A（红色柱）相比，当我们从图中去除公式（7）中定义的特征（绿色柱），或不添加边界边（蓝色柱）时，压力（左）和流量（右）的性能会下降。

泛化到多种几何形状。我们还注意到，训练 GNN-A 时使用 $\Delta t = 2 \cdot 10^{-2}$ s 而非 $\Delta t = 10^{-1}$ s 会导致准确率降低。不过，我们强调，不同的时间步长可能需要采用不同的超参数集，尤其是我们用于提高网络在展开过程中鲁棒性的噪声标准差。在我们的研究中，第 3.6 节讨论的超参数优化是在考虑 $\Delta t = 10^{-2}$ s 的情况下进行的。

图神经网络在各个解剖模型中产生的压力和流量相对误差，远低于一维降阶模型产生的相对误差。此外，我们未观察到 Δt 对一维模型整体精度有显著影响。这表明，模型7和模型8表现不佳是由这些方法本身的局限性所致。

在模型 6 中，使用相同的时间步长 Δt 时，图神经网络的运行时间效率与一维模型相近；而在模型 8 中，效率较低。对于更复杂的肺动脉模型（模型7），图神经网络的效率比一维模型高出多个数量级：例如，当 $\Delta t = 0.01$ s 时，一维模型需要 60.6 秒才能完成一个心动周期，而 GNN-A 和 GNN-Bg 则约需 4.0 秒。

我们观察到，使用较大的 Δt 训练 GNN-A 时，运行时间相应缩短：模型6、7和8的运行时间分别从 3.1、4.0 和 2.9（GNN-A 和 GNN-Bg的运行时间大致相同）降至 1.6、2.0 和 1.5。一维模型的运行时间并非线性缩放，因为在较大的 Δt下，求解非线性系统并使解收敛需要更多次牛顿迭代。

最后，我们通过完全移除不同的图神经网络组件，开展了消融研究，以评估它们的影响。我们的目标是确定本文提出的 MeshGraph- Net 主要改进是否提升了原始算法的准确率。这些改进包括：(i) 式（1）和式（2）中列出的所有图特征，但不包括 p_i^k、 q_i^k、 $\boldsymbol{\alpha}_i$、$\mathbf{d}_{ij}^T/\|\mathbf{d}_{ij}^T\|$ 和 z_{ij}；(ii) 第 3.2 节讨论的边界边。为清晰起见，我们定义集合

$$\tau = \{A_i, \boldsymbol{\phi}_i, T_{\text{cc}}, p_{\min}, p_{\max}, R_{i,p}, C_i, R_{i,d}, l^k, \boldsymbol{\beta}_{ij}, \text{ for all } i, j, k\}, \tag{7}$$

其中包含了我们提议纳入 MeshGraphNet 的所有节点和边的图特征，涵盖所有节点、边和时间步。我们通过排除 τ 训练了一个 GNN-A，并使用第3.6节所述的相同超参数，通过排除边界边训练了另一个 GNN-A；随后进行了 5 折交叉验证，并将它们的性能与基线 GNN-A 进行了比较。图10 展示了对所有网络取平均后的结果，并按模型 6、7 和 8 分组。排除边界边时，性能下降幅度最大。这表明，在我们的应用中，MeshGraphNet 若不包含这些边以便信息在图中更快流动，就无法直接使用。排除本文引入的所有图特征也导致性能明显下降，尤其是在患病模型（模型 6 和 8）中。这些结果表明，我们对 MeshGraphNet 所做的改进显著提升了降阶模型的性能。

6 结论

我们提出了一种降阶模型，用于模拟患者特异性脉管系统的一维近似中的血流动力学。我们的架构是 MeshGraphNet 的改进版本，专为心血管模拟而设计。我们展示了该网络对各种不同几何形状和拓扑结构的泛化能力。我们还展示了随着用于训练的轨迹数量增加，训练和测试数据集上的展开误差逐渐收敛。我们进行了敏感性分析，以确定哪些节点和边特征对于正确近似压力和流量更为重要。在我们的实验中，影响最大的特征是节点横截面积，以及患者特异性参数（例如控制边界条件的参数）。在第5.2节中，我们直接将其与物理驱动的一维模型进行了比较，结果显示图神经网络性能更优，尤其是在处理复杂几何形状时，例如具有多个交汇处的几何形状（模型 7）或存在狭窄的几何形状（模型 8）。具体而言，我们的网络始终将压力和流量误差分别控制在 2% 和 3% 以下。我们还考虑了训练算法的不同方法：针对不同心血管区域分别训练专用网络，而非训练一个能够处理不同几何形状的通用网络。结果表明，采用后一种策略可以获得较低的误差；这说明只要有充足的训练数据，我们的算法就能在心血管树的所有区域充分模拟三维模拟。受敏感性研究的启发，我们进行了消融研究，以确定完全排除各项改进时，哪些改进对网络准确率的影响更为关键。结果表明，引入边界边对于确保结果有意义至关重要；此外，使用患者特异性图特征也能提升性能，优于原始 MeshGraphNet 架构。

未来工作将着重于进一步量化并提升图神经网络在训练期间对未见几何形状的泛化能力。我们将探索能够让图神经网络在使用更小训练数据集的情况下，稳健地实现本研究所展示的准确度和效率的方法。这可以通过修改图神经网络的结构（例如，纳入质量守恒等物理概念），或调整训练数据集的组成来实现，例如加入更多患者特异性几何形状，并减少每种几何形状对应的轨迹数量。
另一个值得探索的研究方向（受到第 5.1 节敏感性分析的启发）是考察引入新特征或移除部分现有特征是否能够提升该方法的性能。移除与边界条件相关的参数，同时保留通常用于确定这些参数的患者特异性数据，将是相较于现有方法的一项显著优势。实际上，边界条件调节是当前基于物理的模拟中的关键步骤，通常通过在贝叶斯优化框架中调整代理模型（例如，零维或一维降阶模型）的边界条件参数来完成，而此类框架通常需要进行大量模型评估才能收敛。这些优化过程基于目标函数，用于衡量代理模型对收缩压和舒张压等关键生理量的复现程度。将这些生理指标纳入神经网络后，我们就能够跳过边界条件调节阶段，缩短从医学图像采集到模拟结果评估之间的流程。附录 C 中的结果让我们确信，进一步调优模型并改进训练数据集，将使我们能够在不向网络提供边界条件参数的情况下获得准确的近似结果。

致谢

本研究得到美国国立卫生研究院（NIH）资助，项目编号为 R01LM013120、R01EB029362 和 K99HL161313。另有斯坦福研究生奖学金和美国国家科学基金会研究生研究奖学金计划（NSF GRFP）提供资助。本论文还得到斯坦福母婴健康研究所的支持。作者谨此感谢圣迭戈超级计算中心（SDSC）和英特尔提供计算资源，用于运行三维模拟以及训练本文介绍的图神经网络。作者还感谢 Tailin Wu 博士就图神经网络的实现和校准提供富有见地的讨论与支持。

参考文献

[1] Gang Bao、Yuri Bazilevs、Jae-Hyun Chung、Paolo Decuzzi、Horacio D. Espinosa、Mauro Ferrari、Huajian Gao、Shaolie S. Hossain、Thomas J. R. Hughes、Roger D. Kamm 等。《英国皇家学会界面期刊》，“USNCTAM 关于医学力学的观点”，11(97):20140301，2014年。1[2] C. Alberto Figueroa、Charles A. Taylor 和 Alison L. Marsden。血流，第1–31页。美国癌症协会，2017年。ISBN 9781119176817。doi：10.1002/9781119176817.ecm2068。网址：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9781119176817.ecm2068。[3] Erica L Schwarz、Luca Pegolotti、Martin R Pfaller 和 Alison L Marsden。“超越计算流体力学：心血管健康与疾病预测模拟的新兴方法”。《生物物理学评论》，4(1):011301，2023年。1[4] Karthik Menon、Jongmin Seo、Andrew M Kahn、Jane C Burns 和 Alison L Marsden。“川崎病患者心肌缺血风险：来自冠状动脉血流动力学患者特异性模拟的启示”。medRxiv，第2022–09页，2022年。1[5] Noelia Grande Gutierrez、Mathew Mathew、Brian W McCrindle、Justin S Tran、Andrew M Kahn、Jane C Burns 和 Alison L Marsden。“动脉瘤中的血流动力学变量与川崎病儿童的血栓风险相关”。《国际心脏病学杂志》，281：15–21，2019年。1[6] Alison L. Marsden、Adam J. Bernstein、V. Mohan Reddy、Shawn C. Shadden、Ryan L. Spilker、Frandics P. Chan、Charles A. Taylor 和 Jeffrey A. Feinstein。“利用计算流体力学评估新型Y形心外Fontan导流板”。《胸心血管外科杂志》，137(2):394–403，2009年。1[7] Timothy J Gundert、Alison L Marsden、Weiguang Yang 和 John F LaDisa Jr。“利用计算流体力学优化心血管支架设计”。《生物力学工程杂志》，134(1)，2012年02月。1[8] Sethuraman Sankaran、Mahdi Esmaily Moghadam、Andrew M. Kahn、Elaine E. Tseng、Julius M. Guccione 和 Alison L. Marsden。“冠状动脉旁路移植术血流的患者特异性多尺度建模”。《生物医学工程年鉴》，40(10):2228–2242，2012年。1[9] Francesco Migliavacca、Rossella Balossino、Giancarlo Pennati、Gabriele Dubini、Tain-Yen Hsia、Marc R de Leval 和 Edward L Bove。“生物流体动力学中的多尺度建模：在儿童心脏重建手术中的应用”。《生物力学杂志》，39(6):1010–1020，2006年。1[10] Ethan Kung、Alessia Baretta、Catriona Baker、Gregory Arbia、Giovanni Biglino、Chiara Corsini、Silvia Schievano、Irene E Vignon-Clementel、Gabriele Dubini、Giancarlo Pennati 等。“第二阶段单心室姑息治疗虚拟半Fontan手术的预测建模：两个患者特异性病例”。《生物力学杂志》，46(2):423–429，2013年。[11] Hyun J Kim、IE Vignon-Clementel、CA Figueroa、KE Jansen 和 CA Taylor。“开发冠状动脉血流三维有限元模拟的计算方法”。《有限元分析与设计》，46(6):514–525，2010年。[12] Hyun Jin Kim、IE Vignon-Clementel、JS Coogan、CA Figueroa、KE Jansen 和 CA Taylor。“人类冠状动脉血流与压力的患者特异性建模”。《生物医学工程年鉴》，38(10):3195–3209，2010年。1[13] Nico Westerhof、Jan-Willem Lankhaar 和 Berend E Westerhof。“动脉风箱模型”。《医学与生物工程及计算》，47(2):131–141，2009年。1[14] Thomas JR Hughes 和 J Lubliner。“关于大血管血流的一维理论”。《数学生物科学》，18(1-2):161–170，1973年。2[15] Noelia Grande Gutiérrez、Talid Sinno 和 Scott L. Diamond。“患者特异性冠状动脉血流动力学的一维–三维混合模型”。《心血管工程与技术》，13(2):331–342，2022年。doi：10.1007/s13239-021-00580-5。2[16] Philippe Reymond、Paolo Crosetto、Simone Deparis、Alfio Quarteroni 和 Nikos Stergiopulos。“主动脉血流的生理模拟：比较三维流固耦合、三维刚性血管壁和一维模型预测的血流动力学指标”。《医学工程与物理》，35(6):784–791，2013年。

[17] Nan Xiao、Jordi Alastruey 和 C Alberto Figueroa。顺应性动脉模型中一维与三维血流动力学的系统比较。《生物医学工程数值方法国际期刊》，30(2):204–231，2014年。[18] Mohammad Hasan、BP Patel 和 S Pradyumna。将多层主动脉建模为黏弹性材料时用于血流分析的高效有限元公式。《工程数值方法国际期刊》，122(16):4313–4332，2021年。[19] Etienne Boileau、Sanjay Pant、Carl Roobottom、Igor Sazonov、Jingjing Deng、Xianghua Xie 和 Perumal Nithiarasu。用于计算血流储备分数（FFR）的降阶模型准确率评估。《生物医学工程数值方法国际期刊》，34(1):e2908，2018年。[20] Pablo J. Blanco、Carlos A. Bulant、Lucas O. Müller、G. D. Maso Talou、C. Guedes Bezerra、Pedro A. Lemos 和 Raúl A. Feijóo。用于估算血流储备分数的一维和三维模型比较。《科学报告》，8(1):1–12，2018年。[21] Lucas O Müller、Fredrik E Fossan、Anders T Bråten、Arve Jørgensen、Rune Wiseth 和 Leif R Hellevik。基线冠状动脉血流及其分布对血流储备分数预测的影响。《生物医学工程数值方法国际期刊》，37(11):e3246，2021年。[22] SM Moore、KT Moorhead、JG Chase、T David 和 J Fink。脑血管血流的一维和三维模型。《生物力学工程杂志》，127(3):440–449，2005年。[23] Leopold Grinberg、Elizabeth Cheever、Tomer Anor、Joseph R Madsen 和 GE Karniadakis。颅内动脉网络中的血液循环建模：三维/一维模拟比较研究。《Annals of Biomedical Engineering》，39(1):297–309，2011年。[24] Philippe Reymond、Fabrice Merenda、Fabienne Perren、Daniel Rufenacht 和 Nikos Stergiopulos。体循环动脉树一维模型的验证。《American Journal of Physiology-Heart and Circulatory Physiology》，297(1):H208–H222，2009年。[25] Philippe Reymond、Fabienne Perren、François Lazeyras 和 Nikos Stergiopulos。体循环动脉树中患者特异性平均压降：一维和三维模型比较。生物力学杂志，45(15):2499–2505，2012年。[26] Etienne Boileau、Perumal Nithiarasu、Pablo J Blanco、Lucas O Müller、Fredrik Eikeland Fossan、Leif Rune Hellevik、Wouter P Donders、Wouter Huberts、Marie Willemet 和 Jordi Alastruey。一维动脉血流建模数值格式的基准研究。《生物医学工程数值方法国际期刊》，31(10):e02732，2015年。[27] Giulia Bertaglia、Adrián Navas-Montilla、Alessandro Valiani、Manuel Ignacio Monge García、Javier Murillo 和 Valerio Caleffi。采用一维增强型流固耦合系统对动脉进行计算血流动力学建模：黏弹性参数估计及与体内数据的比较。《生物力学杂志》，100:109595，2020年。[28] Pablo J Blanco、Lucas O Müller、Sansuke M Watanabe 和 Raúl A Feijóo。血流模拟中动脉网络的解剖学定义：详细模型与简化模型的比较。《生物力学与机械生物学建模》，19(5):1663–1678，2020年。2[29] Martin R. Pfaller、Jonathan Pham、Aekaansh Verma、Luca Pegolotti、Nathan M. Wilson、David W. Parker、Weiguang Yang 和 Alison L. Marsden。自动生成患者特异性血流的零维和一维降阶模型。《生物医学工程数值方法国际期刊》，第 e3639 页，2022年。doi：https://doi.org/10.1002/cnm.3639。2、4、8、12、21[30] Jan S. Hesthaven、Gianluigi Rozza 和 Benjamin Stamm。参数化偏微分方程的认证降阶基方法。施普林格，2016年。2[31] Alfio Quarteroni、Andrea Manzoni 和 Federico Negri。偏微分方程的降阶基方法：导论，第92卷。施普林格，2015年。2[32] Maxime Barrault、Yvon Maday、Ngoc C. Nguyen 和 Anthony T. Patera。一种“经验插值”方法：应用于偏微分方程的高效降阶基离散化。《巴黎科学院数学报告》，339(9):667–672，2004年。2

[33] Federico Negri、Andrea Manzoni 和 David Amsallem。通过矩阵离散经验插值实现参数化系统的高效模型降阶。计算物理学杂志，303:431–454，2015年。[34] Niccolò Dal Santo 和 Andrea Manzoni。可变形状区域上参数化非定常纳维-斯托克斯方程的超降阶模型。计算数学进展，45(5):2463–2501，2019年。[35] Andrea Manzoni 和 Federico Negri。可变形状区域上定义的偏微分方程的高效降阶。载于 P. Benner、M. Ohlberger、A. Patera、G. Rozza 和 K. Urban 编，《参数化系统的模型降阶》，第17卷，第183–199页。施普林格，查姆，2017年。2[36] Laura Iapichino、Alfio Quarteroni 和 Gianluigi Rozza。网络与复杂参数化几何中椭圆问题的降阶基方法和区域分解。《计算机与应用数学》，71(1):408–430，2016年。2[37] Luca Pegolotti、Martin R. Pfaller、Alison L. Marsden 和 Simone Deparis。基于血管模块化几何近似的流动模型降阶。《计算机方法在应用力学与工程中的应用》，380:113762，2021年。2[38] Gabriel Maher、Nathan Wilson 和 Alison L. Marsden。利用卷积神经网络加速心血管模型构建。《医学与生物工程及计算》，57(10):2319–2335，2019年。2[39] Gabriel Maher、David Parker、Nathan Wilson 和 Alison Marsden。用于心血管基于图像建模中管腔横截面自动分割的神经网络血管管腔回归。《心血管工程与技术》，11(6):621–635，2020年。2[40] Fanwei Kong 和 Shawn C Shadden。通过学习自由形变，为基于图像的计算模拟生成全心脏网格。载于《医学图像计算与计算机辅助介入——MICCAI 2021：第24届国际会议，法国斯特拉斯堡，2021年9月27日至10月1日，会议录》第IV部分第24卷，第550–559页。施普林格，2021年。2[41] Fanwei Kong 和 Shawn C Shadden。基于图像的心脏血流模拟中模型生成自动化。《生物力学工程杂志》，142(11)，2020年。[42] Fanwei Kong、Nathan Wilson 和 Shawn Shadden。用于直接重建全心脏网格的深度学习方法。《医学图像分析》，74:102222，2021年。2[43] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George Em Karniadakis。物理信息深度学习（第一部分）：非线性偏微分方程的数据驱动解。arXiv预印本 arXiv:1711.10561，2017年。2[44] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George Em Karniadakis。物理信息深度学习（第二部分）：非线性偏微分方程的数据驱动发现。arXiv预印本 arXiv:1711.10566，2017年。2[45] Björn Lütjens、Catherine H Crawford、Mark Veillette 和 Dava Newman。PCE-PINNs：用于海洋建模中不确定性传播的物理信息神经网络。arXiv预印本 arXiv:2105.02939，2021年。2[46] K Kashinath、M Mustafa、A Albert、JL Wu、C Jiang、S Esmaeilzadeh、K Azizzadenesheli、R Wang、A Chattopadhyay、A Singh 等。物理信息机器学习：天气与气候建模案例研究。《皇家学会哲学汇刊A辑》，379(2194):20200093，2021年。2[47] GP Pun、R Batra、R Ramprasad 和 Y Mishin。用于材料原子尺度建模的物理信息人工神经网络。《自然·通讯》，10(1):1–10，2019年。2[48] Francisco Sahli Costabal、Yibo Yang、Paris Perdikaris、Daniel E Hurtado 和 Ellen Kuhl。用于心脏激动标测的物理信息神经网络。《物理学前沿》，8:42，2020年。2[49] Georgios Kissas、Yibo Yang、Eileen Hwuang、Walter R Witschey、John A Detre 和 Paris Perdikaris。心血管流动建模中的机器学习：利用物理信息神经网络从无创四维流动磁共振成像数据预测动脉血压。《计算机方法在应用力学与工程中的应用》，358:112623，2020年。2

[50] Amirhossein Arzani、Jian-Xun Wang 和 Roshan M D'Souza。利用物理信息神经网络从稀疏数据中揭示近壁血流。Physics of Fluids，33(7):071905，2021年。2[51] Steven L Brunton、Bernd R Noack 和 Petros Koumoutsakos。流体力学中的机器学习。Annual Review of Fluid Mechanics，52:477–508，2020年。2[52] Alvaro Sanchez-Gonzalez、Jonathan Godwin、Tobias Pfaff、Rex Ying、Jure Leskovec 和 Peter Battaglia。利用图网络学习模拟复杂物理。在国际机器学习会议论文集，页码 8459–8468。PMLR，2020年。2，7[53] Tobias Pfaff、Meire Fortunato、Alvaro Sanchez-Gonzalez 和 Peter W Battaglia。利用图网络学习基于网格的模拟。arXiv 预印本 arXiv:2010.03409，2020年。2，7[54] Julian Suk、Christoph Brune 和 Jelmer M Wolterink。Se (3) 对称性使图神经网络能够利用小型数据集学习动脉血流速度估计。arXiv 预印本 arXiv:2302.08780，2023年。2[55] Ian Goodfellow、Yoshua Bengio 和 Aaron Courville。深度学习。MIT 出版社，2016年。6[56] Tailin Wu、Qinchen Wang、Yinan Zhang、Rex Ying、Kaidi Cao、Rok Sosic、Ridwan Jalali、Hassan Hamam、Marko Maucec 和 Jure Leskovec。利用混合图网络模拟器学习大规模地下模拟。在第 28 届 ACM SIGKDD 知识发现与数据挖掘大会论文集，页码 4184–4194，2022年。7[57] Trevor Hastie、Robert Tibshirani、Jerome H Friedman 和 Jerome H Friedman。统计学习基础：数据挖掘、推断与预测，第 2 卷。施普林格，2009年。8[58] Adam Updegrove、Nathan M. Wilson、Jameson Merkow、Hongzhi Lan、Alison L. Marsden 和 Shawn C. Shadden。Simvascular：用于心血管模拟的开源流程。Annals of biomedical engineering，45(3):525–541，2017年。8[59] Hongzhi Lan、Adam Updegrove、Nathan M Wilson、Gabriel D Maher、Shawn C Shadden 和 Alison L Marsden。为开源 SimVascular 心血管建模软件包重新设计的软件界面和工作流程。《生物力学工程杂志》，140(2)，2018年。8[60] Mette S Olufsen。用于较大体循环动脉血流的结构化树流出边界条件。American journal of physiology-Heart and circulatory physiology，276(1):H257–H268，1999年。20

关于一维模型的详细说明

一维模型用于近似描述顺应性血管中心线上的压力、流量和壁面位移。给定三维空间中由轴向变量z参数化的一条曲线，我们定义 $p = p(z,\ t)$、 $q = q(z,\ t)$ 和 $A = A(z,\ t)$，分别表示 z 处血液的压力和流量，以及血管腔的面积。假设为泊肃叶流，血液动力学方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{4}{3}\frac{q^2}{A}\right) &= -8\pi\nu\frac{q}{A} + \nu\frac{\partial^2 q}{\partial z^2} - \frac{A}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z}, \end{aligned} \tag{8}$$

其中 ν 是血液的运动黏度，通常设为 $\nu = 3.77 \cdot 10^{-2}\,\mathrm{scm}^{-2}$。为了准确预测血管对血流的响应，需要用本构模型补充方程（8）。Olufsen 模型

$$p(z,t) = p_0(z) + \frac{4}{3}\left(k_1 e^{k_2 r_0(z)} + k_3\right)\left(1 - \sqrt{\frac{A_0(z)}{A(z,t)}}\right)$$

是基于简化形式的线弹性本构定律的常见示例 [60]。这里， $p_0(z)$、 $r_0(z)$、 $A_0(z)$ 分别是压力、半径和管腔面积的参考值，而 k_1、 k_2和 k_3 是经验常数。由于我们用作基准的三维模拟是在刚性壁假设下获得的，在第5.2 节所述测试中，我们将 $k_1 = 0$ 和k_3 设为任意大的值，以便在一维模型中获得相同类型的壁面响应

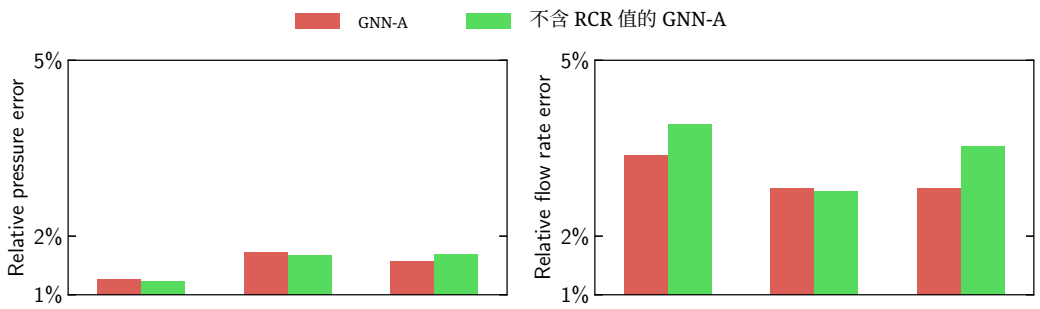

图 11： 红色柱：在模型 6、模型7 和模型 8 上训练的基线 GNN-A。绿色柱：修改后的 GNN-A，其边界节点的节点特征集合中不包含 RCR 值。

模型中也采用了这种方法。在 [29], 中，一维模型与三维模拟在 72 种不同的心血管几何形状上进行了比较。
虽然方程（8）描述了分支中的行为，但我们还需要添加条件来模拟交界处的动态特性。典型条件包括流量守恒——即流入流量之和必须等于流出流量之和——以及交界处入口与出口之间的压降为零。

我们的结果使用一款开源 C++ 代码获得，该代码可公开获取：
https://github.com/SimVascular/svOneDSolver。

B 心血管模型参考标识符

本研究中使用的心血管模型在 VMR 中对应以下标识符： $1 = 0090_0001$, $2 = 0091_0001$, $3 = 0093_0001$, $4 = 0094_0001$, $5 = 0095_0001$,$6 = 0140_2001$, $7 = 0080_0001$, $8 = 0104_0001$。

C 从图特征中移除边界条件参数

与第 5.2 节所述的消融研究类似，我们旨在探究从图中移除某项特征并评估其对图神经网络性能的影响。具体而言，我们关注边界条件的 RCR 值。之所以这样选择，是因为在标准仿真流程中，需要从生理测量值出发，通过优化过程估算 RCR参数，而该过程需要进行大量模型评估。数据驱动方法具有灵活性，可以在推断过程中轻松纳入生理特征（例如，在本研究中，我们将 p_{min} 和 p_{max} 作为图节点特征，这些特征通常用于估算边界值参数），因此我们预计未来有可能在模拟流程中省去边界条件调优步骤。为验证这一假设，我们训练了一个 GNN-A，并从节点图特征中移除了 RCR 值。我们在图 5.2 节所述的同三个模型上获得的性能如图 11所示。与图 10所示结果类似，这些结果是五折交叉验证期间取得的平均值。尽管在某些情况下（尤其是在流量近似方面），将 RCR 值加入图中提高了准确率，但与基线 GNN-A 相比，差异微乎其微，这支持了我们的初步假设。未来工作将进一步验证这一假设，并分析图特征之间的依赖关系，以便在保持准确率的同时减少特征数量。