一种用于在数据稀疏条件下推断生物力学本构定律族的生成式建模框架

Minglang Yin[ab†]、Zongren Zou[c†]、Enrui Zhang[c]、Cristina Cavinato[d]、Jay D. Humphrey[d*]、George Em Karniadakis[abc**]

[a]*Center for Biomedical Engineering, Brown University, Providence, RI*
[b]*School of Engineering, Brown University, Providence, RI*
[c]*Division of Applied Mathematics, Brown University, Providence, RI*
[d]*Department of Biomedical Engineering, Yale University, New Haven, CT*

arXiv:2305.03184v1 [cs.LG] 4 May 2023

摘要

量化人体脉管系统的生物力学性质，有助于加深我们对心血管疾病的理解。采用本构建模中的标准非线性回归，需要大量高质量数据，并且要求将本构模型的明确形式作为先验知识。相比之下，我们提出了一种新方法，将生成式深度学习与贝叶斯推断相结合，以便在数据稀疏的情况下高效推断本构关系族。受函数先验概念的启发，我们开发了一种生成对抗网络（GAN），其中生成器为神经算子，判别器为全连接神经网络。生成器以测量数据为条件，将噪声向量作为输入，并输出预测的本构关系；随后，判别器会对其进行审查。我们证明，该框架能够利用从模型生成的合成数据或针对存在遗传缺陷的小鼠开展的离体实验所采集的数据，准确估计小鼠主动脉本构关系的均值和标准差。此外，该框架无需显式获知本构模型的函数形式，即可学习本构模型先验，为从数据中学习隐含本构行为提供了一种新的模型无关方法。

关键词： 本构关系、不确定性量化、函数先验、生成对抗网络、深度算子网络、贝叶斯推断

*通讯作者：jay.humphrey@yale.edu
**通讯作者：george karniadakis@brown.edu
†这些作者贡献相同。

1. 引言

主动脉力学性质的量化对于理解心血管健康与疾病的诸多方面至关重要。这些性质源于主动脉壁中多种不同结构蛋白、糖蛋白及其他成分之间的相互作用与关联 [1]。这些成分发生功能障碍可能导致微观和宏观尺度上的结构变化，并表现为生物力学性质的改变，例如马凡综合征 [2], 、埃勒斯-当洛斯综合征 [3], 或许多其他疾病。因此，要加深对血管疾病的理解，就必须开发适当的本构关系。

主动脉力学行为的建模已取得长足进展 [4–11]。近期，人们提出了多种考虑纤维波曲和取向的指数模型，用于描述健康主动脉的本构行为，其中包括两种广泛采用的模型，即 Holzapfel-Gasser-Ogden（HGO 或双纤维族）模型 [10]和四纤维族（4FF）模型 [11]。这些模型包含一个用于非晶态组分（例如弹性层板和聚集的糖胺聚糖）的各向同性项（新胡克应变能密度），以及若干用于表征不同主要方向上的纤维状细胞外基质的各向异性项（多个指数项） [12–14]。双纤维族和四纤维族模型都能很好地描述实验数据，在某些情况下，后者的效果更佳 [14]。

在估计主动脉的生物力学性质时，仍面临若干挑战。首先，来自体内或离体实验的数据通常噪声较大且稀疏，这可能会降低参数识别的准确性，并常导致优化收敛于局部极小值而非全局极小值。为缓解这一问题，可以在优化中估计更好的初始值，并采用更多数据和正则化项。近期，基于贝叶斯推断的研究提供了另一种解决方案 [15–20]。具体而言，Rego 等人 [21]通过开发贝叶斯框架，解决了这一问题，该框架用于量化升主动脉的局部材料性质。另一个更严峻的挑战在于，需要为本构模型指定恰当的函数形式。从历史上看，提出新的本构模型通常是一项极具挑战性的任务，因为这既耗时，又需要深厚的物理学洞见。与此相关的是，大多数已开发的本构模型都是现象学模型，即采用一些项来近似观测到的行为，并忽略或简化微观细节和动态过程；HGO 和 4FF 模型忽略了不同方向纤维之间的相互作用。如今，这一挑战日益突出，原因有二：1）更多元材料和生物材料不断被创造和发现；2）这些材料可能受到许多被忽略因素的影响，例如微观结构或基因型，从而导致预测不准确。总而言之，这两项挑战共同构成了开发准确本构关系的障碍。

近年来，数据驱动的本构建模受到越来越多的关注，因为这类方法只需对函数形式有有限的了解，同时能够保留重要的数学性质。本文将这类方法称为“模型无关”，以区别于已知显式函数形式的“模型特定”方法；值得注意的是，机器学习极大地推动了这一领域的发展 [22–30]。具体而言，Masi 等人 [31] 提出了一种基于热力学的神经网络，用于学习材料本构

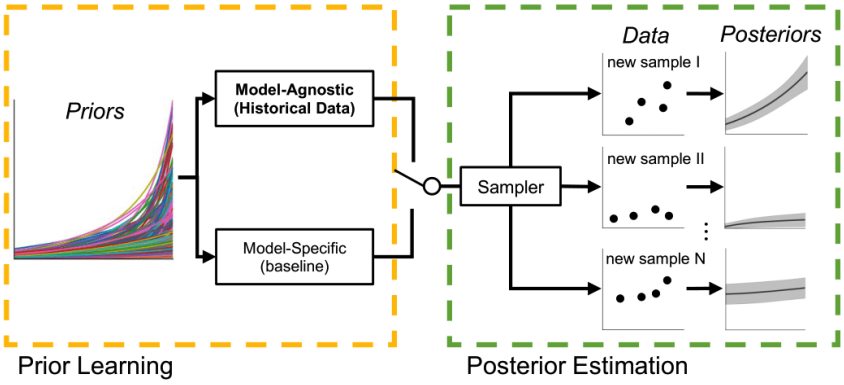

图1：**针对材料家系，使用模型无关方法与特定模型方法推断本构关系的示意图**。本构模型家系的先验知识可以通过特定模型方法以其显式函数形式表示，也可以用于指导采用历史数据训练的模型无关深度学习模型。两种模型都可以与采样器结合，根据从不同样本收集的新数据，估计材料家系的后验分布。N 个样本可以采集自一个或多个遗传家系。

定律。该网络以热力学两条基本原理以及应力—应变关系为依据，以提高模型的泛化能力。Linka 及其同事 [32] 提出了一种神经网络，将带有特征向量的右柯西—格林张量作为输入，并预测应变能密度。 $As'as$ 等人 [33] 提出的网络保留了力学的基本原理和约束，例如客观性、一致性或稳定性。随后，Linka 等人 [34, 35] 进一步开发了一类新的神经网络，用于学习本构定律，并强制满足热力学一致性、多凸性及其他物理约束。

受微观结构和遗传因素对生物力学性质的重要影响驱动，开发能够纳入这些特征的数据驱动本构模型也日益受到关注 [36, 37]。Holzapfel 及其同事 [38] 设计了一种神经网络，基于组织学分析和二次谐波成像图像预测 HGO 模型的参数。随后，Linka 等人 [37]从双光子成像中提取不同血管层的结构特征，并将这些特征输入物理信息神经网络。该网络根据结构特征准确预测动脉的力学性质，并为定量考察组织微观结构与其宏观性质之间的关系开辟了途径。然而，前述大多数研究都基于破坏性测量或采用逐例处理的方法来学习本构关系，而材料性质发生变化时则需要重新训练模型。为了解决这一局限，Zhang 等人 [39]提出了一种通用框架，无需预先假定函数形式，即可推断不同基因型小鼠主动脉的应力-应变关系先验。具体而言，该网络在潜在空间中采样，并挑选与新样本测量数据最匹配的应力曲线，无需重新训练。

为应对上述挑战，本研究开发了一种生成框架，用于在数据稀疏条件下推断软组织本构关系族；其整体示意图如图所示。

图1。与以往特定模型方法（已知函数形式）不同，我们的模型无关方法无需知道函数形式，直接从历史数据中学习本构关系。受函数先验这一概念启发，先验知识由生成对抗网络（GAN）隐式捕获。训练完成后，我们将训练好的生成器与贝叶斯推断相结合，无需重新训练模型，即可基于来自单个或多个遗传家系的多个样本的稀疏测量，高效估计后验分布（图1）。采用马尔可夫链蒙特卡罗、哈密顿蒙特卡罗或其他相关方法等采样方法来估计后验分布。作为贝叶斯推断的输出，会生成一个以新数据为条件的噪声分布，并将其传递给生成对抗网络，以估计应力的均值和标准差。

本文结构如下：第2节简要介绍用于血管生物力学建模的4FF 模型、模型无关方法，以及针对特定模型方法的贝叶斯推断框架。第3节报告一维和二维基准测试的推断准确性，随后基于离体实验数据进行后验推断。最后，在第4节进行简短讨论并总结。

2. 方法论

本节将简要介绍第2.1节中的4FF 模型、第2.2节中用于先验学习的生成对抗网络（GAN）、第2.3节中的贝叶斯推断及后验估计方法，以及第2.4节中的模型特定推断。

2.1. 血管力学的四纤维模型

我们采用 4FF 模型作为一个示例性唯象本构模型，用于描述主动脉的力学特性并生成训练数据 [11, 12, 14]。由于函数形式不会作为生成网络的输入，因此采用这一本构模型仅仅是为了展示我们的生成框架的学习能力，并说明其推广至其他本构模型的潜力。4FF 模型将主动脉描述为一种超弹性、非线性且各向异性的材料，后者与沿四个不同方向的纤维增强特性相一致。应变能密度表示为：

$$W = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) + \sum_{i=1}^{4} \frac{k_1^i}{4k_2^i}(\exp{(k_2^i(I_{4i} - 1)^2)} - 1), \tag{1}$$

其中， μ 为剪切模量，$k^i_{1、}{}_2$、$i = 1$、.....4 为沿轴向（$i = 1$）、周向（$i = 2$）以及两个对称对角方向（$i =$ 3、4）取向的四个纤维组的纤维模量和指数系数。上述参数通常基于实验数据 [12, 44]，使用非线性回归方法进行标定。 I_1 为第一主不变量， I_{4i} 表示与第 $i-$ 个纤维组对应的伪主不变量：

$$I_1 = tr\mathbf{C},$$
$$I_{4i} = \mathbf{C} : \mathbf{M}_i \otimes \mathbf{M}_i, \quad i = 1, .., 4$$

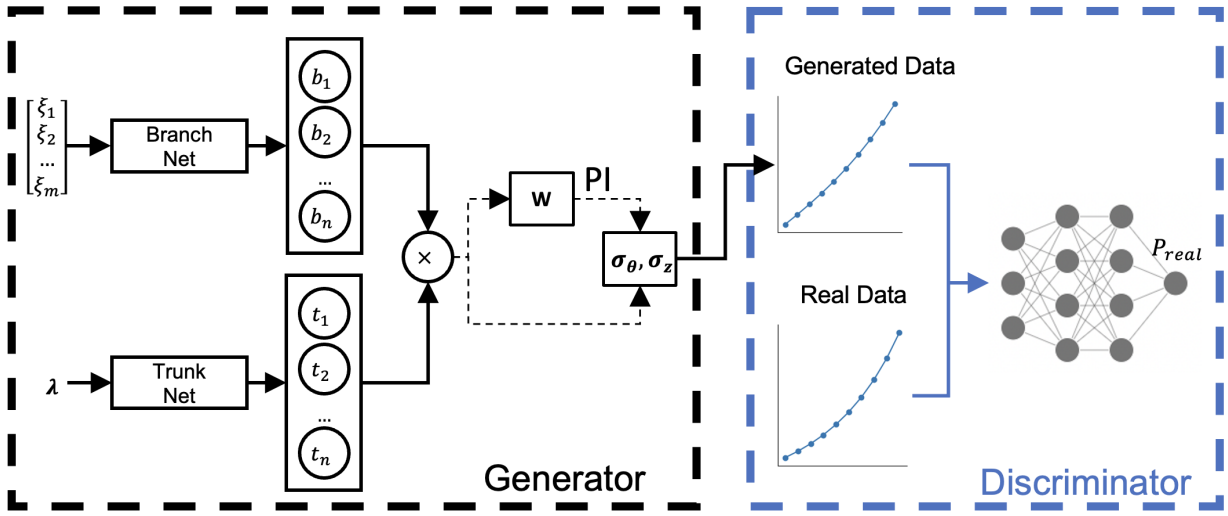

图 2：**用于学习血管本构定律先验知识的生成对抗网络（GAN）**。生成器是一个 DeepONet，其分支网络和主干网络的输入分别为噪声向量 $\boldsymbol{\xi}$ 和伸长比 $\boldsymbol{\lambda}$。生成器直接预测相应的应力（σ_θ 和 σ_z），或者通过对中间输出（应变能密度 W）求偏导数（物理信息驱动的方式）来预测相应的应力。生成的应力场和真实数据将被传输至判别器，以估计二者之间的差异。

其中，$\mathbf{C}$ 为右柯西-格林张量。$\mathbf{M}_i$ 表示第 i 个局部平行纤维族的取向（$i=1$，轴向；$i=2$，周向；$i=3$、4，对称对角方向，角度为 α，其中 α 为对角纤维族相对于轴向的角度）。假设材料不可压缩（$J=1$）且纤维之间不存在相互作用，则可通过对能量密度求偏导数来计算柯西应力（$\boldsymbol{\sigma}$）：

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\boldsymbol{I} + 2\boldsymbol{F}\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{C}}\boldsymbol{F}^T = -p\boldsymbol{I} + \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^T \tag{2}$$

2.2. 用于学习先验的模型无关方法

在本节中，我们简要介绍如何通过训练模型无关方法，从历史数据中学习本构关系的先验知识。生成对抗网络（GAN）凭借其强大的图像先验学习能力，在图像生成方面展现出了良好的性能。因此，我们采用生成对抗网络来学习本构关系的先验知识。该模型由一个作为生成器的物理信息深度算子网络（PI-DeepONet）和一个作为判别器的全连接神经网络（FNN）组成。

生成对抗网络的架构如图2所示。生成器的结构沿用了 DeepONet，它是一种灵活而强大的神经网络，可用于学习函数之间的映射 [45–49]。如图2左侧所示，该网络由分支网络和主干网络组成。分支网络将由高斯随机变量构成的向量 $\boldsymbol{\xi}$ 作为输入，并输出一个潜向量 $\boldsymbol{b} = [b_1, b_2, ..., b_n]$；主干网络则将伸长比向量 $\boldsymbol{\lambda}$ 作为输入，并输出与 $\boldsymbol{b}$维度相同的向量 $\boldsymbol{t} = [t_1, t_2, ..., t_n]$。在 DeepONet 的原始框架中，网络输出取这两个向量 $\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{t}$的内积，即 $\Sigma_{i=1}^{n} b_i(\boldsymbol{\xi}) t_i(\boldsymbol{\lambda})$，以近似感兴趣的函数。在本研究中，$\boldsymbol{\xi}$ 是

生成建模的随机性来源，而 $\boldsymbol{\xi}$ 的每个实例都对应一个特定函数，该函数以 $\boldsymbol{\lambda}$ 为输入，并输出感兴趣的量。

需要指出的是，用于先验学习中训练生成对抗网络的数据（如图1左图所示），记为$\tilde{}$ T，与用于下游后验估计的数据（如图1$\tilde{}$右图所示），记为 D，并不相同。 T 是一个包含模型族先验信息的数据集，$\tilde{}$其中的每个数据/实例 T 都描述一个特定模型，即一个将伸长比 $\boldsymbol{\lambda}$ 与应力$\boldsymbol{\sigma}$关联起来的函数。相比之下， D 是一个包含特定模型信息的数据集，其中的每个数据/实例 D都描述一个测量值，即在特定伸长比 $\boldsymbol{\lambda}$下测得的应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 值。换言之，$\sim T$ 包含许多模型/函数，而 D 包含同一模型/函数的许多测量值。

生成器输出动脉壁的应变能（图2左图），例如第3.2节中的生成器。请注意，能量密度在伸长比较大时有指数增长的趋势，因此，我们采用指数形式，在逐点相乘后预测 W 作为模型输出： $\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\xi})$ =exp ($\Sigma_{i=1}^{n} b_i(\boldsymbol{\xi}) t_i(\boldsymbol{\lambda})$) -1。柯西应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 根据公式2计算。由于我们假设主动脉为薄壁，忽略径向应力，因此得到：

$$\sigma_r = -p + \frac{\partial W}{\partial \lambda_r}\lambda_r = 0, \tag{3}$$

其中 $\lambda_r = 1/(\lambda_\theta \lambda_z)$。 $\frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{\lambda}}$ 通过机器学习软件包 [50]中的自动微分计算得出。这种修改有两个优点：首先，我们通过经验观察到，这种修改增强了网络对指数族的表达能力；其次，线性组合 y 的结果受控于 $O(10^0)$。

这种技术通常称为“物理信息”学习，是一个新兴领域，在该领域中，网络使用控制方程或其他先验物理知识 [28, 51–62]进行训练和正则化。如图2所示，生成器也可以直接预测应力，这一点已在第3.1节和第3.3节中展示。直接预测应力有助于执行此类操作，例如应力在不同方向上的增长速率各不相同。对于判别器 $\mathcal{D}$ （图2右图），我们选择前馈神经网络作为网络结构，其规模将在第3节中介绍。生成器 $\mathcal{G}$ 旨在尽可能准确地逼近数据分布，记为 P_T；判别器 $\mathcal{D}$ 则经过训练，以区分真实数据与由 $\mathcal{G}$生成的数据之间的距离。这两个部分以对抗式方式进行训练，直至网络达到均衡 [43]。定量而言，生成器旨在最小化：

$$L_{\mathcal{G}} = -\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}\sim P_{\boldsymbol{\xi}}}[\mathcal{D}(\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi}))], \tag{4}$$

wh其中， P_ξ 表示 ξ的密度函数，判别器经过训练以最小化：

$$L_{\mathcal{D}} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}\sim P_{\boldsymbol{\xi}}}[\mathcal{D}(\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\xi}))] - \mathbb{E}_{T\sim P_T}[\mathcal{D}(T)] + \beta_{reg}\mathbb{E}_{\hat{T}\sim P_{\hat{T}}}(||\nabla_{\hat{T}}\mathcal{D}(\hat{T})||_2 - 1)^2, \tag{5}$$

其中， $P_{\hat{T}}$ 表示通过在 T与 $\mathcal{G}$之间的插值线上进行均匀采样所诱导的密度函数（$\boldsymbol{\lambda}$，$\boldsymbol{\xi}$）。 T表示目标族中模型的一种有限表示。我们注意到，$\mathrm{E}_{T\sim P_T}[\mathcal{D}(T)]$

在实践中近似为 $\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathcal{D}(T_i)$,其中 T_i，$i=1$，.....，N是 $\tilde{T}$的数据，N是生成对抗网络的训练数据数量。另请注意，式（5）中的前两项 $\mathrm{E}_{\boldsymbol{\xi}\sim P_{\boldsymbol{\xi}}}[\mathcal{D}(\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\xi}))]-\mathrm{E}_{T\sim P_T}[\mathcal{D}(T)]$,可解释为学习到的分布与真实分布之间的 Wasserstein-1 距离的负值 [41]，这增强了 $\mathcal{D}$ 将生成数据 $\mathcal{G}(\boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\xi})$与真实数据 D区分开的能力；最后一项则作为梯度惩罚项，用于规范训练动态。在本研究中，梯度惩罚系数 β_{reg} 取为 0.1。更多详情见 [40]。

2.3. 贝叶斯推断

如上一节所述，训练生成对抗网络（GAN）会得到一个生成器，将具有易处理分布的潜在多元随机变量 $\boldsymbol{\xi}$ 映射为 $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\lambda};\boldsymbol{\xi})$。GAN 训练完成后，目标是估计在数据 $D:=\{(\boldsymbol{\lambda}_i,\ \boldsymbol{\sigma}_i)\}_{i=1}^{N}$ 条件下 $\boldsymbol{\xi}$ 的后验分布，即 $P(\boldsymbol{\xi}|D)$，其中 N 表示测量值的数量。贝叶斯定理指出：

$$P(\boldsymbol{\xi}|D)=\frac{P(D|\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi})}{P(D)}\simeq P(D|\boldsymbol{\xi})P(\boldsymbol{\xi}) \tag{6}$$

其中，$\simeq$ 表示等式在相差一个常数的意义下成立，因为 $P(D)$ 不易处理。$P(D|\boldsymbol{\xi})$ 是似然（即在 $\boldsymbol{\xi}$ 条件下 D 的概率），定义如下：

$$P(D|\boldsymbol{\xi})=\prod_{i=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon^2}}\exp(-\frac{(\boldsymbol{\sigma}_{\mathcal{G}}(\boldsymbol{\lambda}_i;\boldsymbol{\xi})-\boldsymbol{\sigma}_i)^2}{2\epsilon^2}), \tag{7}$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}_{\mathcal{G}}(\boldsymbol{\lambda};\boldsymbol{\xi})$ 是在 $\boldsymbol{\lambda}$ 处、给定 $\boldsymbol{\xi}$ 时生成器的预测值，ϵ 是数据的标准差，而 $\boldsymbol{\sigma}_i$，$i=1$、.....、N 是测量值。如果有多个方向的应力数据（例如环向应力和轴向应力），则新的似然就是这些变量的联合分布，并假设数据彼此独立。$\boldsymbol{\xi}$ 的先验分布 $P(\boldsymbol{\xi})$ 在 GAN 训练和后续推断中均选为多元高斯分布：

$$P(\boldsymbol{\xi})=(\frac{1}{\sqrt{2\pi}})^{d_{\boldsymbol{\xi}}}\exp-\frac{||\boldsymbol{\xi}||^2}{2}, \tag{8}$$

其中，$d_{\boldsymbol{\xi}}$ 表示 $\boldsymbol{\xi}$的维数。

后验估计可以通过多种方式进行 [63, 64], ，包括变分推断、拉普拉斯近似等。在本研究中，我们选择马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法，从公式（6）中的未归一化分布中采样。具体而言，我们采用哈密顿蒙特卡罗（HMC） [65] 及其变体 [66] 作为采样方法，以获得满足 $P(\boldsymbol{\xi}|D)$的 $\boldsymbol{\xi}$ 样本，并将这些样本输入生成器来估计 $\boldsymbol{\sigma}$，即 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathcal{G}}(\boldsymbol{\lambda};\boldsymbol{\xi})$。我们将本节所述方法称为基于 *GAN* 的方法，因为用于贝叶斯推断的随机模型是 GAN。

2.4. 特定模型的贝叶斯推断

我们可以通过将模型参数视为随机变量，并建立与公式（7）中相同的似然分布，对 4FF 模型进行贝叶斯推断。我们将模型参数记为

$\Theta = \{\mu, k^i_{1,2}, i = 1, ..., 4\}$，将模型记为 $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\lambda}; \Theta)$。类似地，给定 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$、D 的数据后，问题就变成估计后验分布 $P(\Theta|D) \simeq P(D|\Theta)P(\Theta)$。我们采用相同的采样方法，即 HMC 及其变体，进行后验估计。我们将这种方法称为 基于 *4FF* 的方法。需要指出的是，与基于 4FF 模型的标准非线性回归方法相比，后者通常会对模型参数进行确定性推断，而我们的方法将模型参数视为随机变量，因此侧重于其预测分布。

我们进一步指出，与基于 GAN 的方法不同，基于 4FF 的方法需要选择模型参数 Θ 的先验分布；这一选择对贝叶斯推断至关重要，但对于科学机器学习中的许多问题而言仍然是一项挑战 [63]。相比之下，基于 GAN 的方法将 $\boldsymbol{\xi}$, $P(\boldsymbol{\xi})$ 的先验分布作为训练生成对抗网络时的超参数，因此 $P(\boldsymbol{\xi})$ 是固定的，从而简化了后续的贝叶斯推断。

基于 4FF 的方法中模型参数的先验分布如表 1 所示，并将在第3节中讨论；这些分布是相互独立的均匀分布，这使得无法直接使用 HMC 及其变体，因为均匀分布的密度函数不连续。通过改变变量并令变换后的随机变量具有光滑的密度函数，可以轻松解决这一问题。详情请参阅附录 A。

3. 结果

本节通过若干示例展示我们框架的性能，其中应力测量数据采样自合成实验和离体实验。我们将生成对抗网络的训练轮数设为 100,000，并使用 ADAM [67] 作为优化器。所有网络均在配备 NVIDIA GeForce RTX 2060 图形处理器的设备上训练。

3.1. 案例 *I*：一维模型，一个教学示例

我们首先在一个教学性的一维示例中，研究应用基于 GAN 的方法来学习 4FF 模型的可行性。为生成 GAN 的训练数据，我们首先固定轴向伸长比 $\lambda_z = 1.44$，并从相互独立的均匀分布中抽取 4FF 模型的参数，其取值范围根据表 1 计算。上下界由“基准值”分别乘以“变化范围”的上下界得到。“基准值”取自 [12]，且变化范围相对较宽。我们的目标是模拟一项经验观察 [13, 68], ：在一个心动周期内，小鼠腹主动脉的长度保持不变，这意味着体内轴向伸长比几乎为常数。

在表 2 中，我们列出了 GAN 的更多详细信息。案例 I 中的所有网络均选用具有三个隐藏层的全连接神经网络（FNN）。每个隐藏层包含 64 个神经元。我们采用 DeepONet [45] 作为生成器，其分支网络以随机变量 $\boldsymbol{\xi} \in \mathrm{R}^{50}$为输入。主干网络以环向伸长比（$\lambda_\theta$）作为输入。生成器预测环向应力（$\sigma_\theta$），其表达式为 $u_{\mathcal{G}} = \exp(\mathbf{bt}) - 1$，其中 $\mathbf{b}$ 和$\mathbf{t}$ 分别表示分支网络和主干网络的输出。

参数	Unit	基准值	变化范围
μ	kPa	8.633	[0.1, 5.0]
k_1^1	kPa	9.34	[0.1, 5.0]
k_2^1	-	0.137	[0.01, 2.0]
k_1^2	kPa	4.447	[0.1, 5.0]
k_2^2	-	0.046	[0.01, 2.0]
$k_1^{3,4}$	kPa	0.015	[0.1, 5.0]
$k_2^{3,4}$	-	1.193	[0.01, 2.0]
α	°	28	[0.1, 2.0]

表 1：**4FF 参数及其变化范围**。 所有训练数据均通过在各参数范围内独立、均匀采样生成，这些范围的上下限由“基准值”分别乘以“变化范围”的上限和下限计算得出。“基准值”取自参考文献 [12]。参数单位列于第二列。

Name	Type	结构	输入	输出
分支网络（生成器）	FNN	[50, 64, 64, 64, 50]	$\boldsymbol{\xi}$	t
主干网络（生成器）	FNN	[1, 64, 64, 64, 50]	λ_θ	b
判别器	FNN	[15, 64, 64, 64, 1]	σ_θ	y_{dis}

表 2：**案例 I 中生成对抗网络的结构和规模**。例如， [50, 64, 64, 64, 50]表示一个三层网络，其输入维度和输出维度均为 50。每个隐藏层包含 64 个神经元。FNN：全连接神经网络。

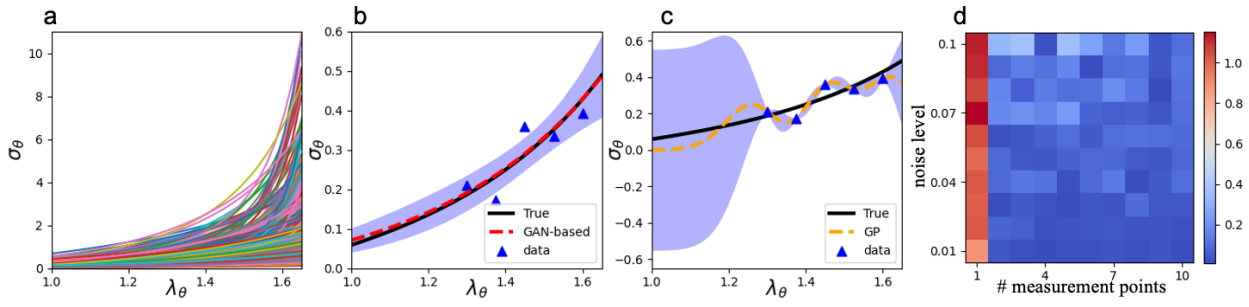

图 3：**一维本构模型中 FP（先验信息模型）与 GP（高斯过程，无先验信息模型）的比较**。a)： σ_θ的随机样本。均值和标准差分别根据 b) 函数先验和 c) 高斯过程计算得出。d) 不同噪声尺度和数据点数量下的一维预测误差。颜色表示式 (10) 中定义的误差幅值。应力单位：0.1 兆帕。

Name	Type	结构	输入	输出
分支网络（生成器）	FNN	[100, 64, 64, 64, 50]	$\boldsymbol{\xi}$	t
主干网络（生成器）	FNN	[2, 64, 64, 64, 50]	$[\lambda_\theta, \lambda_z]$	b
判别器（σ_θ 和 σ_z）	FNN	[1250, 250, 250, 250, 1]	$[\sigma_\theta, \sigma_z]$	y_{dis}

表 3：**案例 II 中 GAN 的结构和规模，其中 $\boldsymbol{\lambda} = \lambda_\theta,\ \lambda_z$ 适用于二维问题**。前馈神经网络：全连接神经网络。

图 3(a) 展示了训练批次中包含本构关系先验知识的样本，其中 σ_θ 的范围从 $O(10^{-1})$ 到 $O(10^{1})$。训练轮数设为 100,000，采用 ADAM 优化器。训练完成后，目标是根据稀疏且含噪测量值推断环向应力的后验分布。我们首先从 $\lambda_\theta \in [1.3, 1.6]$中抽取五个 $\sigma_{\theta,\ 4FF}$作为测量数据，这些数据由 4FF 模型计算得出，模型参数值设为表 1 中的均值。为了测试模型在含噪测量值条件下的性能，我们在 $\sigma_{\theta,\ 4FF}$ 中加入噪声 e，其服从均值和方差分别为 0 和 1 的高斯分布；噪声尺度 ϵ 设为 0.1。因此，测量值 σ_θ 计算如下：

$$\sigma_\theta := \sigma_{\theta,4FF} + \epsilon e, e \sim \mathcal{N}(0,1), \tag{9}$$

图 3(b) 展示了我们框架的后验推断（红色虚线），与真实数据（黑色实线）吻合良好。相对误差 ϵ_{fp} 约为 0.02，其定义如下：

$$\epsilon = \frac{||\bar{\sigma}_{pred} - \bar{\sigma}_{true}||}{||\bar{\sigma}_{true}||}. \tag{10}$$

均值和标准差是根据从 No-U-Turn 采样的噪声向量，由生成器生成的 1,000 个预测结果取平均得到的。阴影区域表示两个标准差。作为对比，图 3(c) 展示了高斯过程（GP）回归得到的均值和标准差。GP 未纳入关于 4FF 模型的任何先验知识，因此预测误差较大（$err = 0.22$）。请注意，仅有五个测量点时，由于系统欠定（变量数量多于可用数据数量），标准非线性回归无法完成拟合。接下来，我们考察噪声和测量数量对模型性能的影响。从图 3(d) 可以清楚看出，更多的测量点和更低的噪声水平（ϵ）能够带来更准确的预测，而测量点较少且噪声较大则会降低准确性。

3.2. 案例 *II*：二维合成数据

在本节中，我们使用二维合成数据，考察基于 GAN 的方法在推断动脉本构关系方面的性能。所有训练数据和测试数据均根据表 1 中的参数设置进行采样和生成。我们采用了表 3 所示的更大网络结构。在训练阶段，我们将 σ_θ 和 σ_z 作为训练数据输入 GAN；这些数据是在一系列伸长比范围内采样得到的

二维网格 $(\lambda_\theta,\ \lambda_z) \in [1.0, 1.65] \times [1.0, 1.65]$。分支网络输入 ξ 是一个由 50 个随机变量组成的向量，这些随机变量在训练阶段从多元高斯分布中采样得到。生成器预测给定拉伸状态下的能量 W，并在下一步根据公式（2）计算双轴应力$\sigma_{\theta,\ z}$。应力在 25×25 的网格上进行估计。随后，我们将预测得到的 σ_θ 和 σ_z 拼接起来，作为判别器的输入，以计算学习到的分布与真实分布之间的 Wasserstein距离。我们系统地考察了同一训练模型在随机采样点（第3.2.1节）、等拉伸点（第3.2.2节）、部分数据（第3.2.3节）和分布外数据（第3.2.4节）上推断二维应力曲面的能力。我们还研究了 GAN 训练数据数量的影响，以及测量值位置对后验推断的影响；分别见附录B和附录 C。

3.2.1. 使用随机采样点进行推断

我们考察在给定包含完整应力信息（σ_θ和 σ_z）的随机采样点时模型的性能。首先，我们在高拉伸条件下（$\lambda_\theta,\ \lambda_z$）$\in [1.4, 1.6] \times [1.4, 1.6]$，对 σ_θ和 σ_z进行七次带噪测量；这些带噪测量由参数取表 1 中基准值的 4FF 模型生成。接下来，我们采用 No-U-Turn算法，在给定应力测量值的条件下对 $\boldsymbol{\xi}$ 进行 1,000 次采样。然后，将采样得到的 $\boldsymbol{\xi}$ 输入生成器，生成 1,000 个不同的$\sigma_{\theta,\ z}$，以估计均值和标准差。

图 4 顶行展示了基于 GAN 的方法所得推断结果与真实数据（蓝色曲面）的对比。代表$\sigma_{\theta,\ z}$和 W均值估计的红色曲面与真实数据吻合良好，且真实数据处于标准差界定的范围内。(a) 和 (b) 中第一列和第二列的黑点为测量数据。我们将噪声水平 ϵ 设为 0.1。基于 4FF 的推断结果（第二行）作为基线模型，因为在给定相同测量值的情况下，它代表了基于已知函数形式所能达到的最佳结果。我们观察到，基于 GAN 的方法与基于 4FF 的方法在性能上具有定量一致性。为进一步比较这两种方法，我们在底行绘制了 $\lambda_z = 1.51$ 处的推断结果与真实解的对比：基于 GAN 和基于 4FF 的方法所估计的均值吻合良好，且在不同伸长比下的不确定性区域相似。然而，基于 GAN 的方法对能量（W）的估计不确定性大于基于 4FF 的方法，这可能是因为已知的函数形式有助于对网络进行正则化，从而降低不确定性，如蓝色阴影区域所示。此外，基于 GAN 的方法对 σ_θ 的部分估计在接近 $\lambda_{\theta,\ z} = 1$的区域不符合物理规律。请注意，后验推断仅基于七次带噪测量，而在此情形下，标准非线性回归是欠定的，因为存在八个未知参数。总体而言，图 4 的结果表明，在推断二维本构曲面方面，基于 GAN 的方法与特定模型方法（基于 4FF 的方法）性能相当。此外，即使训练时没有向网络提供有关能量分布的先验知识，所提出的框架仍能预测能量密度。

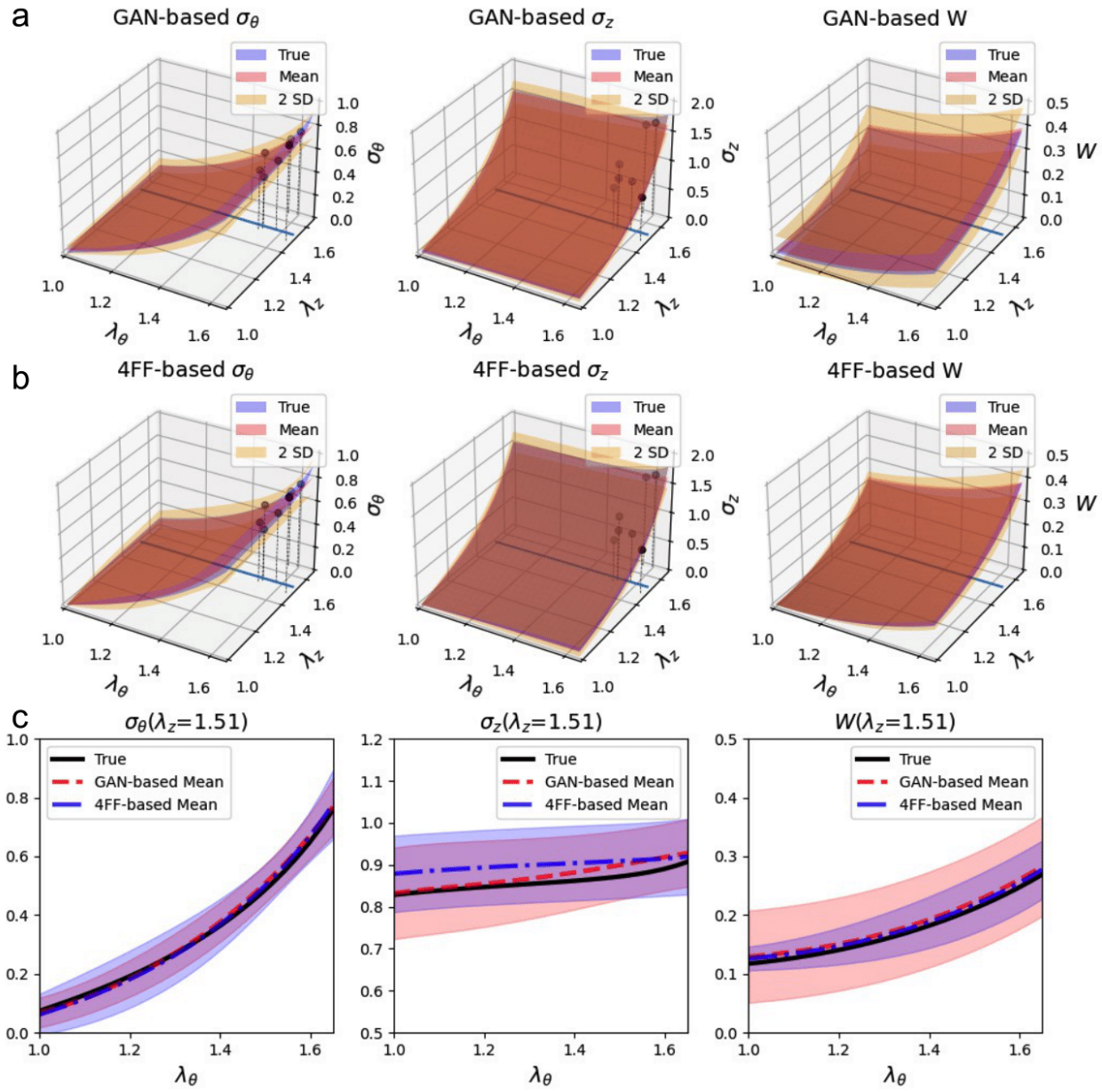

图4：**基于7个测量点，通过 (a) FP 和 (b) BI 对本构关系进行后验估计**。第1至3列分别绘制了 σ_θ、 σ_z 和 W 的均值（红色）、2倍标准差（橙色）及真实数据（蓝色）。将 $\lambda_z = 1.51$ 时的推断结果与真实结果及不确定性界限进行对比。包含 σ_θ 和 σ_z 的测量点由 4FF 模型生成。应力单位：0.1 兆帕。

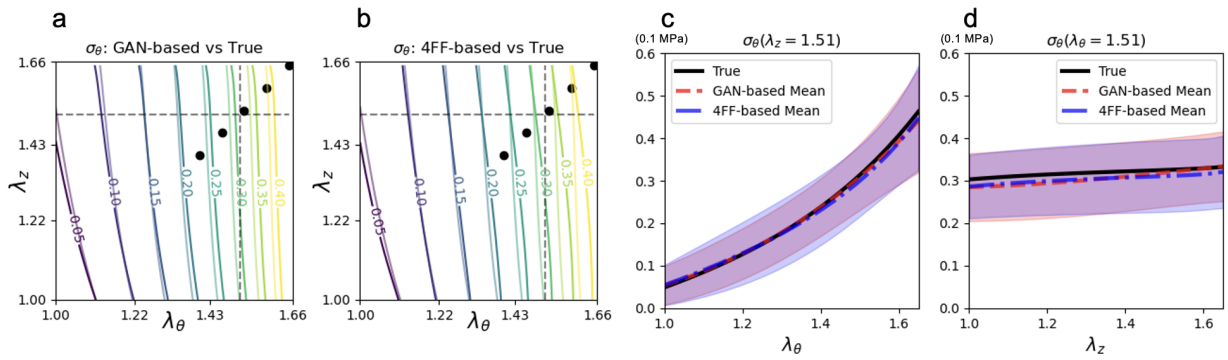

图 5：**基于等拉伸点的模型推断**。真实 σ_θ 与基于生成对抗网络和基于 4FF 的方法所得的推断结果进行对比。标准差以阴影区域表示。应力单位：0.1 兆帕。

3.2.2. 使用等拉伸点进行推断

接下来，我们基于等拉伸点测量值（$\lambda_z = \lambda_\theta$）考察模型的性能。在标准的非线性参数拟合中，鉴于应变能 W 的某些特定函数形式，这些点有时会被排除。我们在图 5 中总结了采用基于 GAN 的方法并结合等拉伸点进行的应力推断结果。我们使用第3.2节中的相同 GAN 模型。左侧两个面板（a 和 b）分别展示了由两个推断模型得到的 σ_θ 等值线，其中真实数据的等值线（虚线）以较浅的颜色呈现在背景中。黑色圆点表示在五个等拉伸点处采集的数据。同样，这些数据是根据表 1 中的 4FF 模型范围生成的。两个模型的预测结果均与真实数据吻合良好，仅在高拉伸区域存在细微差异。右侧两个面板分别绘制了 $\lambda_z = 1.51$ 和 $\lambda_\theta = 1.51$ 处的应力曲线，以比较基于 GAN 的方法（红色虚线）和基于 4FF 的方法（蓝色虚线）的均值与真实数据（黑色实线）。这两种方法在均值和标准差方面均表现出相近的预测精度。

3.2.3. 基于部分数据的推断

要推断出信息丰富的应力/能量场，测量值必须包含各独立方向上的完整信息，例如本例中的环向和轴向。缺少某些信息会导致模型在相关方向上的推断缺乏信息。本节研究基于部分信息的模型推断，即环向应力测量值（σ_θ），但没有测量 σ_z。图 6 展示了基于生成对抗网络和基于 4FF 的方法在 σ_θ 时的模型推断结果（前两行），并在最后一行比较了 $\lambda_z = 1.51$ 处的推断结果。两种模型对 σ_θ 的估计都准确且信息丰富，第一列中准确的均值曲面（红色曲面）和相对较小的不确定性带（橙色曲面）说明了这一点。然而，两种方法在预测 σ_z和能量密度时都会产生较大的不确定性带。这一结果表明，准确推断应力场和能量密度场依赖于环向和轴向两个方向上的应力信息。否则，无论采用哪种推断模型，不确定性都会大到难以接受，导致推断毫无用处。

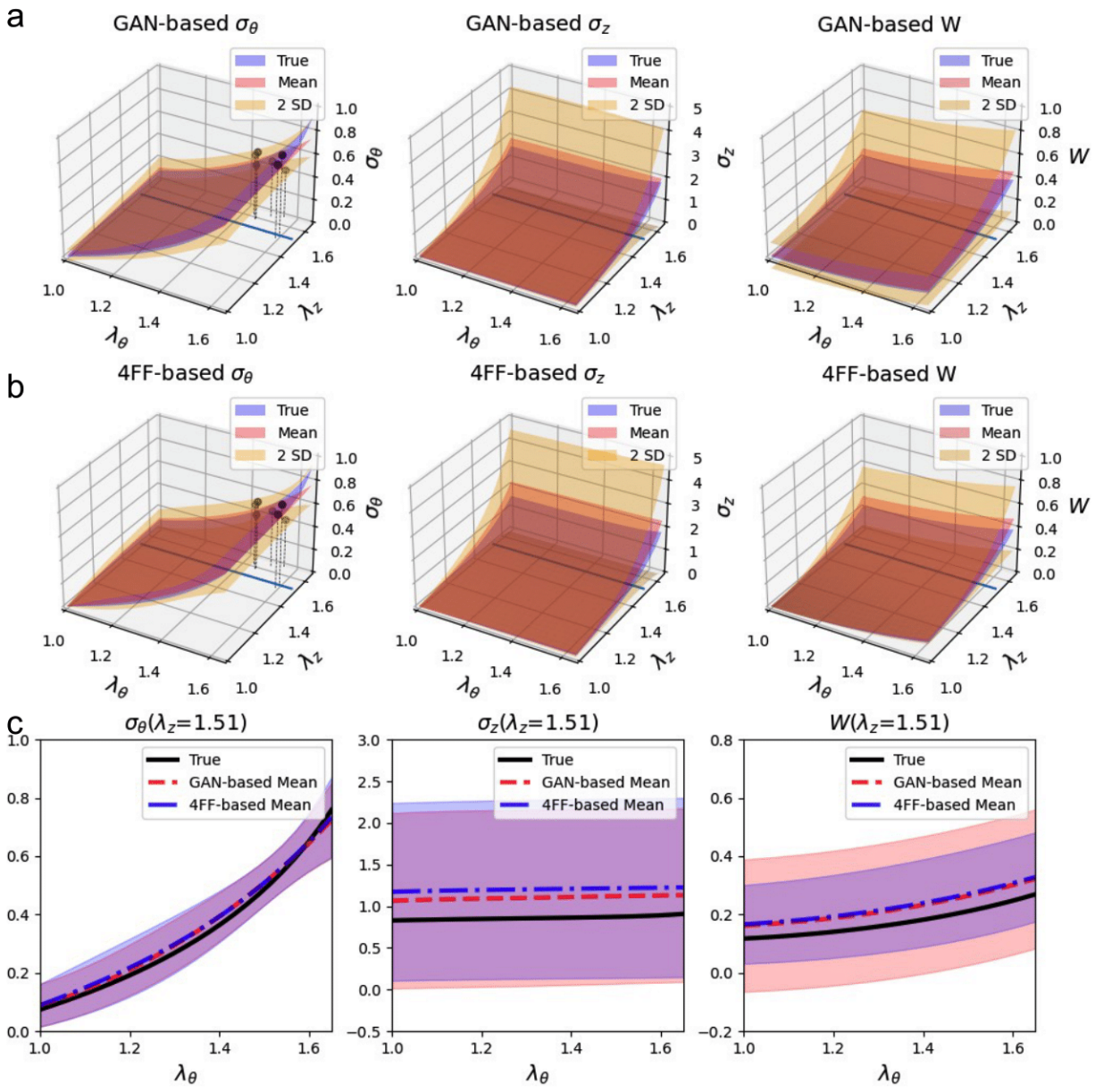

图 6：**基于部分信息测量值的无信息推断**。测量点仅包含有关 σ_θ 的信息，不包含 σ_z。测量数据在表 1 所示范围内采样。应力单位：0.1 兆帕。

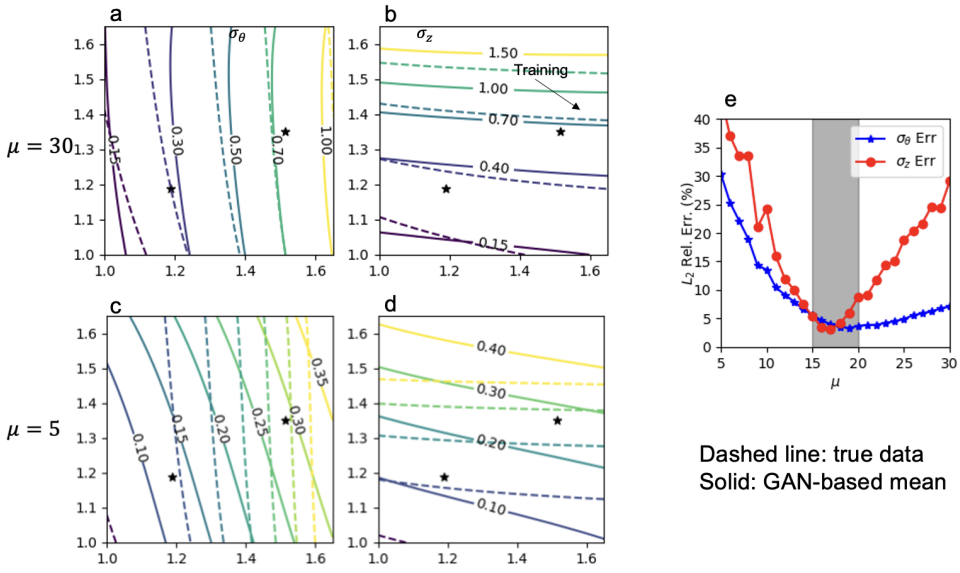

图 7：**分布外（OOD）测试结果**。基于 GAN 的方法在均匀分布于 $[15.0, 20.0]$ 的 μ 上进行训练（阴影区域），并在 $\mu \in \{5, 6, ..., 29, 30\}$ 上进行测试。a) 和 b) 中分别绘制了 $\mu = 30$ 处的 σ_θ 和 σ_z。c) 计算了 σ_θ 和 σ_z 的精确均值与根据后验分布样本估计的预测均值之间的相对误差。应力单位：0.1 兆帕。

3.2.4. 分布外测试推断

在本节中，我们研究模型推断分布外（OOD）数据的性能，即训练数据与测量数据之间存在分布偏移。换言之，OOD 数据表示其参数取自训练数据范围之外的分布，这通常会导致模型性能下降。不过，使用 OOD 数据进行测试的主要目的是检验我们的方法是否仍能提供相对准确的推断，因为现实世界数据和模拟数据来自不同分布的情况十分常见。首先，我们选择与表 1 所定义的先验分布相同的先验分布，并将剪切模量 μ 的范围设为 $[15.0, 20.0]$。生成对抗网络使用从更新后的参数范围内随机采样的数据进行训练。下游任务的定义与前面的示例相同：我们从 4FF 模型收集测量数据 σ_θ 和σ_z，其中 μ 从更宽的范围内采样：$\mu \in \{5, 6, ..., 29, 30\}$。其余参数则保持在训练范围内。图 7(a-d) 比较了 $\mu = 30$ 和 5 处的真实等值线与模型预测（σ_θ 和σ_z）。测量数据以 $*$ 标记。显然，预测的等值线偏离了真实数据。在 (e) 中，我们绘制了精确均值与预测均值之间的 L_2 相对误差随 μ 变化的曲线。在训练区域（阴影区域） $\mu \in [15.0, 20.0]$ 内，误差相对较小；但随着采样数据偏离训练区域，误差逐渐增大。

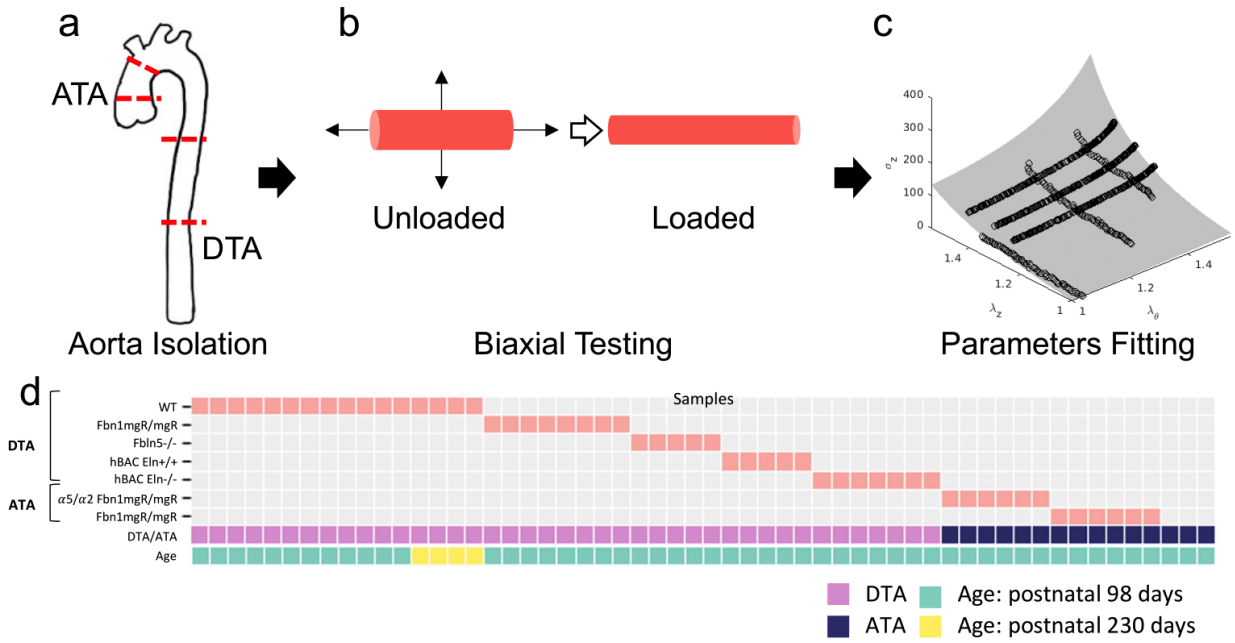

图8：**离体双轴加载的数据采集**。(a) 分离来自不同小鼠的升主动脉/降主动脉（ATA/DTA），并在 (b) 双轴加载条件下进行测试，同时测量轴向力和压力。(c) 收集测得的应力/应变，并用于非线性参数拟合。

3.3. 案例 *III*：具有离体数据的二维本构定律

在前面的章节中，我们展示了框架基于合成数据推断本构定律的能力。在此，我们进一步将模型应用于从具有不同基因型的小鼠离体生物力学实验中采集的真实数据。为丰富数据集，我们纳入了已发表研究 [39, 69–73] 中五种小鼠模型的降胸主动脉（DTA）数据，以及另外两个新采集的升胸主动脉（ATA）数据组。

1. (DTA) 野生型（WT）C57BL/6J 对照小鼠 [73]；2. (DTA) $Fbn1^{mgR/mgR}$ 小鼠：正常原纤维蛋白-1的表达量为正常水平的 15-25% [72]；3. (DTA) $Fbln5^{-/-}$ 小鼠：完全缺失弹性蛋白相关糖蛋白 fibulin-5 [74, 75]；4. (DTA) hBAC $Eln^{-/-}$ 小鼠：通过引入人弹性蛋白（细菌人工染色体，hBAC-mNull）挽救了弹性蛋白的生成，使其表达量达到正常水平的 ∼30% [73]；5. (DTA) hBAC $Eln^{+/+}$ 小鼠：弹性蛋白的表达量为正常水平的 115% [73]；6. (ATA) $\alpha5/\alpha2$;Fbn1 mgR/mgR：使用同源重组技术，在 C57BL/6J 品系中生成整合素 $\alpha5/\alpha2$ 嵌合全身敲入小鼠，并与 mgR 杂合小鼠交配，得到双纯合突变体；7. (ATA) $Fbn1^{mgR/mgR}$ 小鼠：正常原纤维蛋白-1的表达量为正常水平的 15-25% [72]；

应力/伸长比数据按照标准双轴加载试验的流程收集 [12], ，如图 8 所示。分离出 DTA 或 ATA 的一个节段（图 8(a)），进行插管，并置于双轴加载装置中。随后，装置在对 DTA/ATA 节段加压和拉伸，使其达到体内状态的同时，收集机械载荷（图 8(b)）。血管分离和双轴加载的实验细节详见 [12, 76]。完成数据采集后，我们基于所有收集的数据进行非线性回归，以确定 4FF 参数的最佳拟合值（图 8(c)）。具有拟合参数的 4FF 模型能够总体上较好地近似个体特异性生物力学，但在某些伸长比下存在差异。图 8(d) 以热图展示了数据集的详细信息和多样性，例如大小、基因型、节段位置以及年龄。

需要注意的是，血管生物力学的先验知识由历史数据承载，而为生成模型提供充足的数据对于确保推断精度至关重要。然而，实验过程成本高昂且耗时，因此无法开展高通量实验，也进一步限制了直接从数据中学习的能力。作为概念验证，我们采用由 4FF 模型生成的数据，其变化范围相对较宽，用于训练生成模型，并在体内范围内采样数十组离体数据（λ_θ， λ_z; σ_θ， σ_z），以进行后验估计。

图 9 展示了不同基因型的等值线和 σ_θ, σ_z 场，分别来自非线性回归（第 1 和第 3 列）和基于 GAN 的方法（第 2 和第 4 列）。(a-h) 中的每一行展示了不同基因型小鼠模型的 σ_θ 和 σ_z，其中高应力以深红色表示。每个子图中的星号表示用于推断的数据。总体而言，基于 GAN 的方法结果表明，该方法能够基于稀疏测量（数十个测量点）高效捕捉应力场的整体趋势，而非线性回归则基于数量级更多的测量值进行。正如前文所述，历史数据由 4FF 模型在广泛的变化范围内生成，其中可能包含在高伸长比下不切实际的高应力。为便于网络训练，我们对应用于应力场的“截断函数”进行处理，将大于 0.5 兆帕的应力截断为 0.5 兆帕。此外，值得注意的是，一些基于 GAN 的结果在某些区域不满足某些性质（例如单调性），如图 9(c) $\sigma_\theta = 0.1$ 或 0。3。

为定量比较非线性回归、基于 GAN 的方法和基于 4FF 的方法的准确性，我们根据离体数据中各伸长比处的模型预测计算相对误差的均值，并将其绘制于图10中。不同方法的应力误差以不同颜色表示： σ_θ非线性回归、基于 GAN 的方法和基于 4FF 的方法所产生的误差分别用由深到浅的蓝色方框表示； σ_z 误差用红色表示。不同方法在所有基因型中的平均误差均在 10% 左右波动，表明各种方法的性能相近。具体而言，在 $Fbn1^{mgR/mgR}$ 中，基于 GAN 的方法甚至优于非线性回归，这可能是因为后者对较大应力赋予了更高权重。总体而言，我们观察到新方法与标准非线性回归的性能相当。

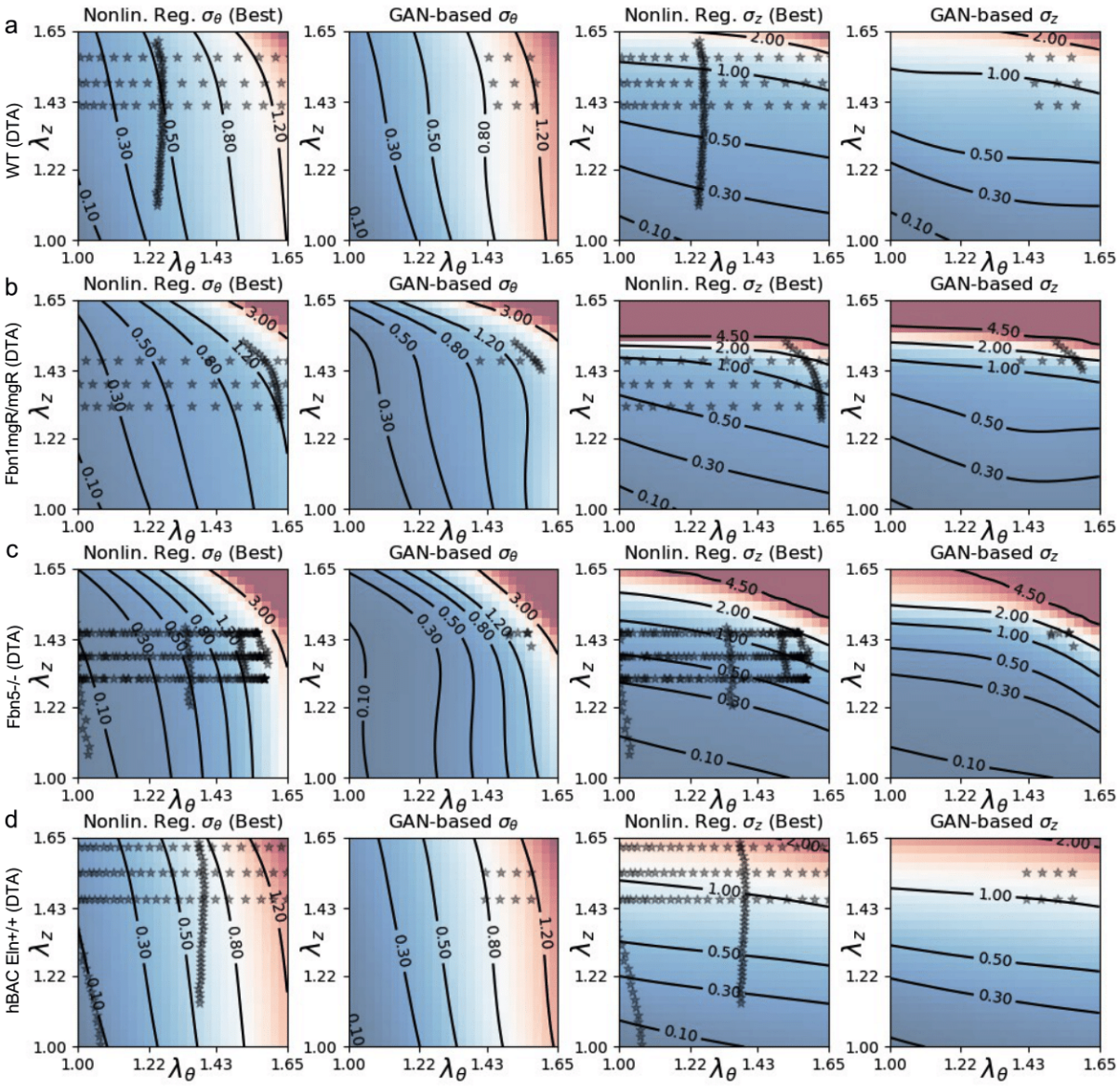

图 9：**(*) 对从四种不同基因型中分离出的 DTA 进行应力推断：(a) 野生型，(b) Fbn1mgR/mgR，(c) Fbn5-/-，以及 (d) hBAC Eln+/+**。非线性回归（Nonlin. Reg.）的等值线根据离体实验收集的全部数据计算得出，而基于 GAN 的方法仅根据聚集于高伸长比区域的稀疏数据，估计受试对象特异性本构关系的均值。应力单位：0.1 兆帕。

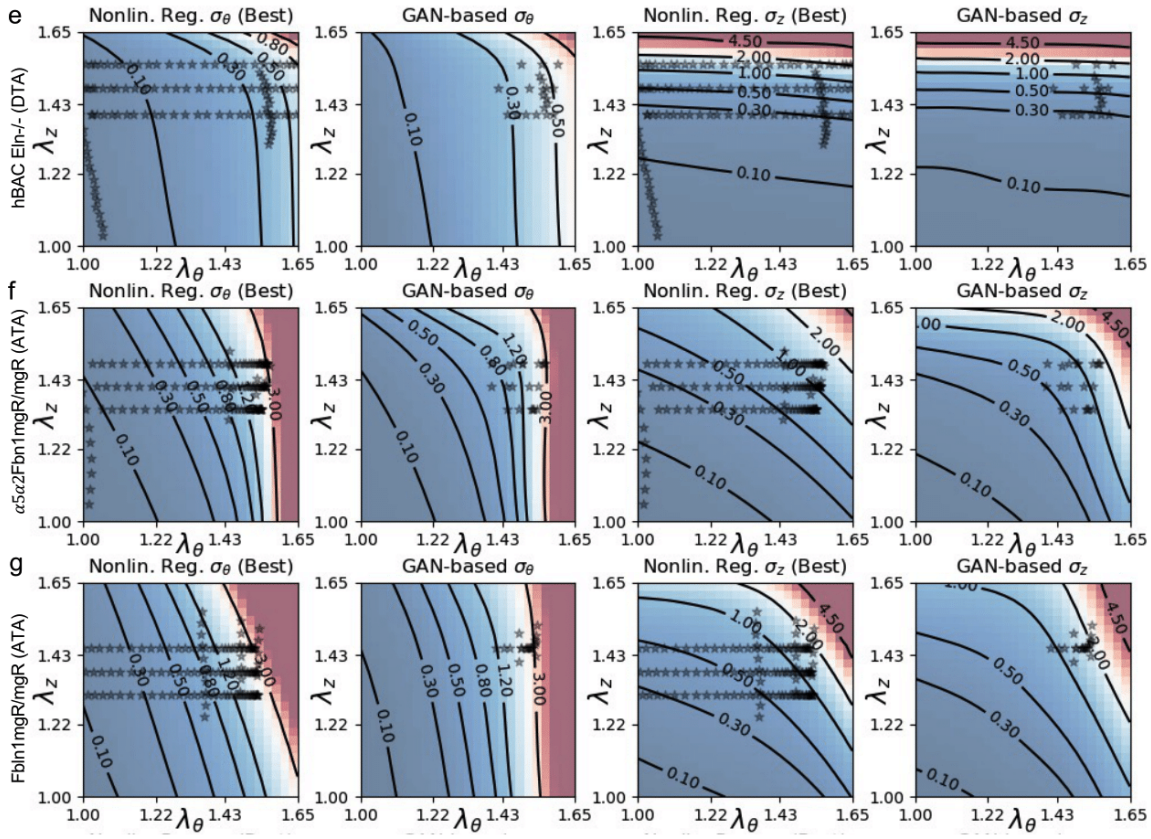

图 9：**(**) 三个 ATA组和一个 DTA组的应力推断：(e) hBAC Eln-/-（DTA）、(f) $\alpha5/\alpha2$xmgR，以及 (g) Fbln1 mgR。应力单位：0.1 兆帕。**应力单位：0.1 兆帕。

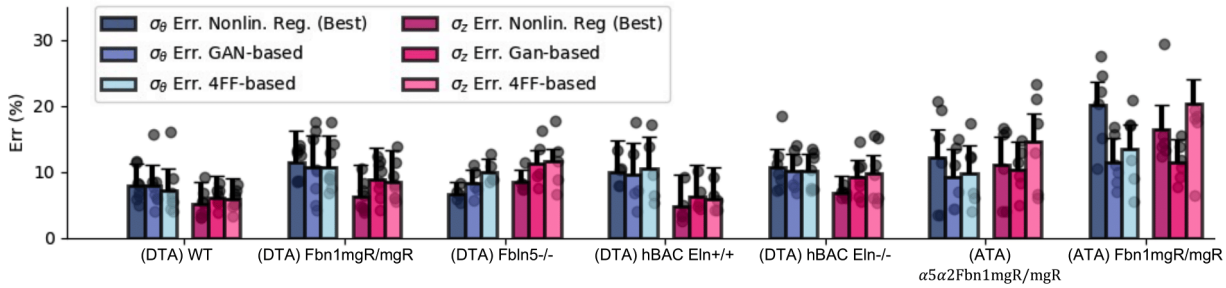

图 10：**基于离体实验采集的数据，非线性回归、基于生成对抗网络的方法和基于 4FF 的方法的相对误差。**

4. 讨论

本文提出了一种生成建模框架，用于在数据稀疏的情况下推断生物力学本构关系族。受函数先验概念的启发 [40], ，我们使用基于已发表数据所采用参数的 4FF 模型合成数据，对小鼠主动脉进行模型训练 [12]。将本构模型的先验知识输入基于生成对抗网络的网络，以生成拉伸/应力曲线，并在后续的贝叶斯推断步骤中估计似然函数。随后，对以稀疏测量为条件的噪声向量进行采样，并将其传递给生成器，以推断函数空间中的应力后验分布。我们通过三个示例展示了该框架的性能。前两个示例使用合成数据作为测量值。最后一个示例展示了该模型基于从多种小鼠模型收集的真实测量值推断本构关系的潜力。

我们发现，将先验知识融入神经网络能够提高该框架的准确性和效率：与高斯过程（GP）相比，我们的框架降低了预测误差和标准差。高斯过程代表不采用函数先验的模型推断，其结果容易受到噪声影响，并且在采样范围之外缺乏信息。与线性回归或非线性回归不同，该框架不受某些数值限制的约束，例如数据点数量必须多于未知参数数量。这一特点使其在利用稀疏测量进行推断，以及处理参数较多的复杂模型时，优于传统的非线性回归算法。此外，均值和标准差比不进行不确定性量化的传统算法提供更多信息，因为它们分别表示预测的期望值和置信度。

采用模型无关深度学习的优势，部分在于无需明确了解函数形式即可学习系统。尽管对于具有显式函数形式的系统，标准的特定模型方法无需使用网络来估计似然，因此可能更加高效 [21], ，但仍值得注意的是，当显式函数形式未知时，我们的框架在保持相近准确度的同时展现了自身优势。此外，模型专用方法通常要求函数形式准确，而许多本构函数都是基于某些假设和简化建立的，例如，4FF 模型忽略了不同取向之间的纤维相互作用。然而，我们的框架通过直接从数据中学习先验，绕过了这一局限。在训练数据充足的情况下，我们的框架有望优于模型专用方法。

然而，我们的生成建模框架并非没有局限性。首先，与直接估计条件概率的判别模型相比，采用这种生成框架需要更多数据。尽管增加训练样本量有助于降低误差（见附录B），但通常不切实际的是，收集足够多的数据来训练此类生成模型。另一项局限源于数据采集，这也进一步增加了直接利用数据进行训练的难度：网络的损失是在整个域上计算的，而标准的双轴离体测量仅覆盖域的一部分（见 $*$

图 9）。为缓解第一项局限，可以尝试在生成模型训练中结合合成数据与实验数据：合成数据可用于提供响应曲面整体形状的信息，而实验数据则可在特定伸长比处用作正则化。此外，在训练中编码物理约束是生成建模中一个很有前景的方向。客观性、一致性、稳定性或多凸性等性质 [33, 34], 可用作进一步的正则化，以减少对训练数据量的需求并提高准确性。至于第二项局限，双轴离体测量的非结构化且分布有偏的特点，也可以通过在训练过程中纳入上述性质来解决。机器学习领域中处理非结构化数据的一些技术 [77, 78], ，例如 PointNet，也可能有所帮助。尽管如此，本研究的目的并非证明特定模型方法或模型无关方法孰优，因为二者各自在某些情境下都可能适用。当函数形式已知时，特定模型方法是自然之选。我们的贡献在于开发一种新的模型无关本构建模方法，该方法在函数形式未知且训练数据充足时可能适用。

5. 致谢

MY 和 ZZ 感谢华中科技大学的 Xuhui Meng 教授所进行的富有见地的讨论。我们感谢美国国立卫生研究院提供的 U01 HL142518 号资助。

附录 A. 均匀先验分布与哈密顿蒙特卡洛

哈密顿蒙特卡罗（HMC）是一种基于哈密顿动力学的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法。事实证明，它是贝叶斯推断中获取后验分布（可能未归一化）样本的强大工具，并广泛用于在存在噪声测量值的情况下获取贝叶斯神经网络的后验样本 [64]。作为一项限制，HMC 要求目标分布的密度函数可微。然而，当选择均匀分布作为先验时，后验分布 $P(\theta|D) \propto P(D|\theta)P(\theta)$ 不再连续且可微，这使得直接实现 HMC 方法变得困难。在这项工作中，我们通过将正态分布映射为均匀分布来规避这一限制

$$X \sim \mathcal{N}(0, 1^2) \longrightarrow a + (b-a)F_X(X) \sim U(a, b), \tag{A.1}$$

其中， X 是服从均值为 0、标准差为 1 的高斯分布的随机变量，$a < b$ 为实数， F_X 是标准正态随机变量的累积分布函数，即 $F_X(x) := \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{s^2}{2}) ds$。因此，对于每个具有均匀先验分布的模型参数，$\theta \sim U(a, b)$，都存在一个潜变量 $X_\theta \sim \mathcal{N}(0, 1^2)$，使得 θ 和 $a + (b-a)F_X(X_\theta)$ 在分布上相等

因此，哈密顿蒙特卡洛（HMC）改为在潜变量上进行，其联合先验分布具有可微的概率密度函数。

附录B. 历史数据规模的影响

回顾一下，我们使用由 4FF 模型生成的 σ_θ 和 σ_z, $\tilde{T} = \{T_i\}_{i=1}^{N}$ 历史数据训练了生成对抗网络（GAN），其中每个 T_i 都是目标族中一个模型的有限表示，而 N 是数据量。因此，生成对抗网络在学习 4FF 模型方面的准确性，对于下游任务中进行准确且可靠的预测至关重要。本节进行了一项简单实验，展示用于训练生成对抗网络的历史数据量及其对下游推断的影响。

此处使用三个数据集（$N = 500$、 $N = 1{,}000$ 和 $N = 2{,}000$）训练生成对抗网络。在下游任务中，我们基于相同的测量值 D 测试模型准确性。噪声为均值为零、标准差为 0.1 的加性高斯噪声。4FF 模型的分布取自表 1。结果如图 B.11 所示，由此可见，准确性和鲁棒性会随着训练数据量的增加而提高。 L_2 预测均值的相对误差如下：环向应力在 500、1000 和 2000年 条数据下分别为 35.69%、18.28% 和 17.45%；轴向应力则分别为 10.71%、10.07% 和 7.71%。此外，我们还注意到，在 500 条数据的情况下，环向应力违反了单调性（见图 B.11 第一行第二列中的 $\lambda_\theta \in [1.00, 1.22]$区域和 $\sigma_\theta = 0.1$ 等值线），这表明由于训练数据不足，网络未能充分捕捉先验知识。

附录 C. 采样区域的影响

在本节中，我们研究测量位置对下游推断准确性的影响。使用同一个训练好的网络，我们在不同区域采样相同数量的测量值进行推断。如图 C.12 所示，采样位置分为三种不同的分布方式：集中在高拉伸比区域 $\lambda_z \times \lambda_\theta \in [1.4, 1.6]^2$、集中在低拉伸比区域 $\lambda_z \times \lambda_\theta \in [1.0, 1.2]^2$，以及分布在整个感兴趣区域内 $\lambda_z \times \lambda_\theta \in [1, 1.65]^2$。在这三种情况下，使用覆盖整个区域的数据进行推断最为准确，而数据集中在 $[1.0, 1.2]^2$ 的情况结果最差。高拉伸比区域的集中采样效果略逊于分散采样。

参考文献

[1] S. K. Karnik, B. S. Brooke, A. Bayes-Genis, L. Sorensen, J. D. Wythe, R. S. Schwartz, M. T. Keating, and D. Y.Li, “弹性蛋白信号传导在血管形态发生和疾病中的关键作用”, *Development*, 2003.

[2] J. Humphrey, 《糖胺聚糖在胸主动脉夹层中的潜在力学作用及其与转化生长因子-β失调的关联》, 《血管研究杂志》, 第50卷第1期, 第1–10页, 2013年。

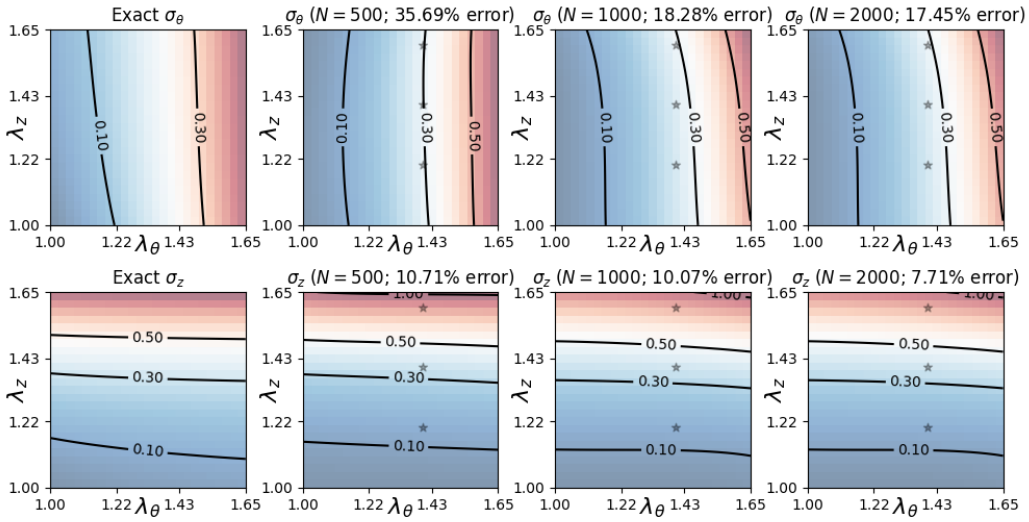

图 B.11：**使用基于不同数量数据训练的生成对抗网络，从稀疏测量（模拟数据）进行下游推断的结果**。数据数量指用于训练基于生成对抗网络的先验的案例数。推断精度随训练数据数量增加而提高。各图顶部显示了推断的 L_2 相对误差。使用基于 $N = 500$ 数据训练的生成对抗网络先验推断环向应力时，也会出现违反本构定律的情况。应力单位：0.1 兆帕。

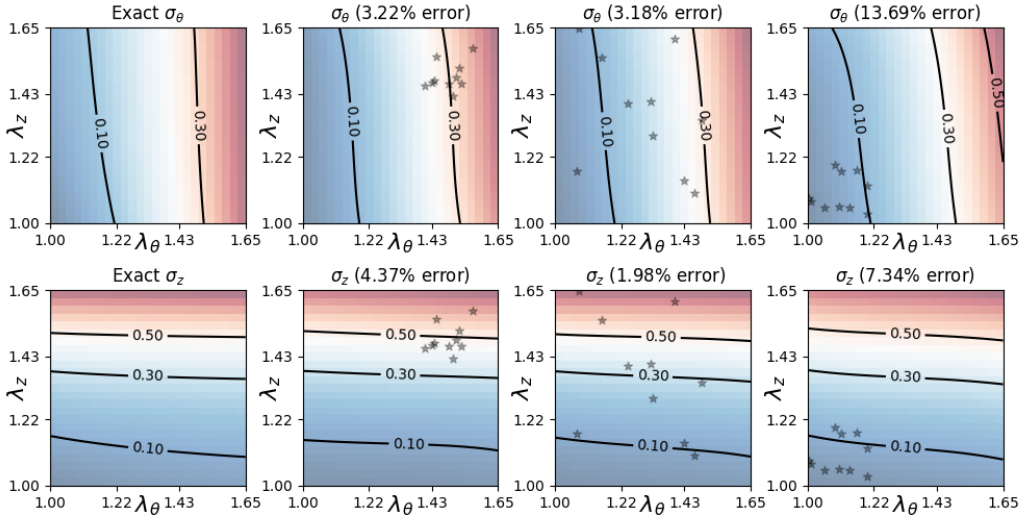

图 C.12：**根据在不同区域采样的测量进行下游推断的结果**。三个案例的测量数量均设为 20。假设测量值无噪声，其位置分别在 $[1.4, 1.6]^2$、 $[1.0, 1.65]^2$ （整个感兴趣区域）和 $[1.0, 1.2]^2$中随机采样。各图顶部显示了推断的 L_2 相对误差。在这三种方法中，扩散采样技术得出的推断结果最准确。应力单位：0.1 兆帕

[3] P. H. Byers、J. Belmont、J. Black、J. De Backer、M. Frank、X. Jeunemaitre、D. Johnson、M. Pepin、L. Robert、L. Sanders、等，“血管型埃勒斯-当洛斯综合征的诊断、自然病程与管理”，《美国医学遗传学杂志*C*辑：医学遗传学研讨会》，第175卷，第1期，第40–47页，2017年。[4] J. D. Humphrey，“动脉壁力学：综述与研究方向”，《重要评论》*TM*《生物医学工程》，第23卷，第1-2期，1995年。[5] Y. C. Fung，《生物力学：活体组织的力学性质》。施普林格科学与商业媒体，2013年。[6] B. R. Simon、A. S. KOBAYASHI、D. E. STRANDNESS 和 C. A. WIEDERHIELM，“动脉本构关系的重新评估：有限变形方法”，《循环研究》，第30卷，第4期，第491–500页，1972年。[7] R. N. Vaishnav、J. T. Young、J. S. Janicki 和 D. J. Patel，“犬主动脉的非线性各向异性弹性性质”，《生物物理学杂志》，第12卷，第8期，第1008–1027页，1972年。[8] Y. Fung，“简单拉伸下软组织的弹性”，《美国生理学杂志：经典内容》，第213卷，第6期，第1532–1544页，1967年。[9] Y. Fung、K. Fronek 和 P. Patitucci，“动脉的伪弹性及其数学表达式的选择”，《美国生理学杂志：心脏与循环生理学》，第237卷，第5期，第H620–H631页，1979年。[10] G. A. Holzapfel、T. C. Gasser 和 R. W. Ogden，“一种用于动脉壁力学的新本构框架及材料模型的比较研究”，《弹性学杂志》，第61卷，第1期，第1–48页，2000年。[11] S. Baek、R. L. Gleason、K. Rajagopal 和 J. Humphrey，“大变形上的小变形理论：在动脉流固相互作用计算中的潜在用途”，《应用力学与工程中的计算方法》，第196卷，第31-32期，第3070–3078页，2007年。[12] J. Ferruzzi、M. Bersi 和 J. Humphrey，“健康与疾病状态下中央动脉的生物力学表型分析：小鼠模型的优势与方法”，《生物医学工程年鉴》，第41卷，第7期，第1311–1330页，2013年。[13] I. Masson、P. Boutouyrie、S. Laurent、J. D. Humphrey 和 M. Zidi，“基于人体临床数据的动脉壁力学行为与应力表征”，《生物力学杂志》，第41卷，第12期，第2618–2627页，2008年。

[14] M. Jadidi、S. Sherifova、G. Sommer、A. Kamenskiy 和 G. A. Holzapfel，《利用不同年龄人类股浅动脉标本中胶原纤维方向与分散度的结构信息进行本构建模》，《生物材料学报》，第 121 卷，第 461–474 页，2021 年。[15] G. Ninos、V. Bartzis、N. Merlemis 和 I. E. Sarris，《人体血流动力学流动中的不确定性量化实现》，《生物医学计算方法与程序》，第 203 卷，文章编号 106021，2021 年。[16] V. G. Eck、W. P. Donders、J. Sturdy、J. Feinberg、T. Delhaas、L. R. Hellevik 和 W. Huberts，《心血管应用中不确定性量化与敏感性分析指南》，《生物医学工程数值方法国际期刊》，第 32 卷，第 8 期，文章编号 e02755，2016 年。[17] J. Biehler、M. W. Gee 和 W. A. Wall，《基于贝叶斯多保真度方案解决复杂大规模生物力学问题的高效不确定性量化》，《生物力学与机械生物学建模》，第 14 卷，第 3 期，第 489–513 页，2015 年。[18] B. Staber 和 J. Guilleminot，《各向异性应变能函数的随机场模型及其在血管力学不确定性量化中的应用》，《应用力学与工程中的计算方法》，第 333 卷，第 94–113 页，2018 年。[19] P. T. Brewick 和 K. Teferra，《脑组织本构模型标定的不确定性量化》，《生物医学材料力学行为杂志》，第 85 卷，第 237–255 页，2018 年。[20] M. Flaschel、S. Kumar 和 L. De Lorenzis，《可解释超弹性本构定律的无监督发现》，《应用力学与工程中的计算方法》，第 381 卷，文章编号 113852，2021 年。[21] B. V. Rego、D. Weiss、M. R. Bersi 和 J. D. Humphrey，《受试者特异性局部血管力学特性估计中的不确定性量化》，《生物医学工程数值方法国际期刊》，第 37 卷，第 12 期，文章编号 e3535，2021 年。[22] V. Tac、F. S. Costabal 和 A. B. Tepole，《基于多凸神经常微分方程的数据驱动组织力学》，《应用力学与工程中的计算方法》，第 398 卷，文章编号 115248，2022 年。[23] J. N. Fuhg 和 N. Bouklas，《通过概率机器学习与空间填充采样研究物理信息驱动的数据驱动各向同性和各向异性本构模型》，《应用力学与工程中的计算方法》，第 394 卷，文章编号 114915，2022 年。[24] P. Thakolkaran、A. Joshi、Y. Zheng、M. Flaschel、L. De Lorenzis 和 S. Kumar，《NN-Euclid：无需应力数据的深度学习超弹性》，*arXiv* 预印本 *arXiv:2205.06664*，2022 年。

[25] M. Mozaffar, R. Bostanabad, W. Chen, K. Ehmann, J. Cao, and M. Bessa, “深度学习预测路径相关塑性”, 《美国国家科学院院刊》, 第116卷, 第52期, 第26414–26420页, 2019年。[26] T. Qu, S. Di, Y. Feng, M. Wang, and T. Zhao, “通过微观力学引导的深度学习实现颗粒材料的数据驱动本构建模”, 《国际塑性学杂志》, 第144卷, 文章编号103046, 2021年。[27] D. Z. Huang, K. Xu, C. Farhat, and E. Darve, “利用深度神经网络从间接观测中学习本构关系”, 《计算物理学杂志》, 第416卷, 文章编号109491, 2020年。[28] M. Liu, L. Liang, and W. Sun, “一种适用于软生物组织的通用物理信息神经网络本构模型”, 《应用力学与工程中的计算方法》, 第372卷, 文章编号113402, 2020年。[29] M. Liu, L. Liang, and W. Sun, “主动脉壁体内力学性质的估计：一种多分辨率直接搜索方法”, 《生物医学材料力学行为杂志》, 第77卷, 第649–659页, 2018年。[30] M. Liu, L. Liang, and W. Sun, “使用机器学习方法估计主动脉壁的体内本构参数”, 《应用力学与工程中的计算方法》, 第347卷, 第201–217页, 2019年。[31] F. Masi, I. Stefanou, P. Vannucci, and V. Maffi-Berthier, “基于热力学的人工神经网络用于本构建模”, 《固体力学与物理学杂志》, 第147卷, 文章编号104277, 2021年。[32] K. Linka, M. Hillg¨artner, K. P. Abdolazizi, R. C. Aydin, M. Itskov, and C. J. Cyron, “本构人工神经网络：通过深度学习实现预测性数据驱动本构建模的一种快速通用方法”, 《计算物理学杂志》, 第429卷, 文章编号110010, 2021年。[33] F. As’ad, P. Avery, and C. Farhat, “数据驱动本构建模中的力学引导人工神经网络方法”, 《工程数值方法国际杂志》, 第123卷, 第12期, 第2738–2759页, 2022年。[34] K. Linka and E. Kuhl, “面向自动化模型发现的新型本构人工神经网络家族”, 《应用力学与工程中的计算方法》, 第403卷, 文章编号115731, 2023年。[35] K. Linka, S. R. S. Pierre, and E. Kuhl, “利用本构人工神经网络实现人脑自动化模型发现”, 《生物材料学报》, 2023年。

[36] T. Guo、O. Roko˘s 和 K. Veroy，“通过非侵入式降阶基方法，从微观结构模拟中学习本构模型”，《应用力学与工程中的计算方法》，第 384 卷，第 113924 页，2021 年。[37] K. Linka、C. Cavinato、J. D. Humphrey 和 C. J. Cyron，“通过双向深度学习，根据关键微观结构特征预测并理解动脉弹性”，《生物材料学报》，2022 年。[38] G. A. Holzapfel、K. Linka、S. Sherifova 和 C. J. Cyron，“通过深度学习对动脉进行预测性本构建模”，《英国皇家学会界面杂志》，第 18 卷，第 182 期，第 20210411 页，2021 年。[39] E. Zhang、B. Spronck、J. D. Humphrey 和 G. E. Karniadakis，“G2ϕnet：利用深度学习关联组织的基因型与生物力学表型”，《*PLOS*计算生物学》，第 18 卷，第 10 期，第 e1010660 页，2022 年。[40] X. Meng、L. Yang、Z. Mao、J. del ´Aguila Ferrandis 和 G. E. Karniadakis，“从数据与物理中学习函数先验与后验分布”，《计算物理学杂志》，第 457 卷，第 111073 页，2022 年。[41] L. Yang、D. Zhang 和 G. E. Karniadakis，“用于随机微分方程的物理信息生成对抗网络”，《*SIAM*科学计算杂志》，第 42 卷，第 1 期，第 A292–A317 页，2020 年。[42] Y. Yang 和 P. Perdikaris，“物理信息神经网络中的对抗性不确定性量化”，《计算物理学杂志》，第 394 卷，第 136–152 页，2019 年。[43] I. Goodfellow、J. Pouget-Abadie、M. Mirza、B. Xu、D. Warde-Farley、S. Ozair、A. Courville 和 Y. Ben- gio，“生成对抗网络”，《神经信息处理系统进展》，第 27 卷，2014 年。[44] H. P. Gavin，“用于非线性最小二乘曲线拟合问题的 Levenberg-Marquardt 算法”，土木与环境工程系，杜克大学，第 19 卷，2019 年。[45] L. Lu、P. Jin、G. Pang、Z. Zhang 和 G. E. Karniadakis，“基于算子通用逼近定理，通过 DeepONet 学习非线性算子”，《自然·机器智能》，第 3 卷，第 3 期，第 218–229 页，2021 年。[46] M. Yin、E. Zhang、Y. Yu 和 G. E. Karniadakis，“将有限元与深度神经算子相结合，实现力学问题的快速多尺度建模”，《应用力学与工程中的计算方法》，第 115027 页，2022 年。[47] M. Yin、E. Ban、B. V. Rego、E. Zhang、C. Cavinato、J. D. Humphrey 和 G. Em Karniadakis，“使用 DeepONet 模拟导致主动脉夹层的渐进性壁内损伤：一种算子回归神经网络”，《英国皇家学会界面杂志》，第 19 卷，第 187 期，第 20210670 页，2022 年。

[48] C. Lin、Z. Li、L. Lu、S. Cai、M. Maxey 和 G. E. Karniadakis，“用于预测多尺度气泡生长动力学的算子学习”，《化学物理学杂志》，第 154 卷，第 10 期，第 104118 页，2021 年。[49] E. Zhang、A. Kahana、E. Turkel、R. Ranade、J. Pathak 和 G. E. Karniadakis，“基于深度算子网络和松弛方法的偏微分方程混合迭代数值可迁移求解器（hints）”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2208.13273*，2022 年。[50] M. Abadi、P. Barham、J. Chen、Z. Chen、A. Davis、J. Dean、M. Devin、S. Ghemawat、G. Irving、M. Isard、等，“{TensorFlow}：用于 {大规模} 机器学习的系统”，载于第 *12* 届 *USENIX* 操作系统设计与实现研讨会（*OSDI 16*），第 265–283 页，2016 年。[51] G. E. Karniadakis、I. G. Kevrekidis、L. Lu、P. Perdikaris、S. Wang 和 L. Yang，“物理信息机器学习”，《自然评论：物理学》，第 3 卷，第 6 期，第 422–440 页，2021 年。[52] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G. E. Karniadakis，“物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架”，《计算物理学杂志》，第 378 卷，第 686–707 页，2019 年。[53] S. Cai、Z. Mao、Z. Wang、M. Yin 和 G. E. Karniadakis，“流体力学中的物理信息神经网络（PINN）：综述”，《力学学报》，第 1–12 页，2022 年。[54] E. Zhang、M. Dao、G. E. Karniadakis 和 S. Suresh，“使用物理信息神经网络分析材料中的内部结构和缺陷”，《科学进展》，第 8 卷，第 7 期，第 eabk0644 页，2022 年。[55] X. Jin 、 S. Cai 、 H. Li 和 G. E. Karniadakis，“NSFnets（Navier–Stokes 流网络）：用于不可压缩 Navier–Stokes 方程的物理信息神经网络”，《计算物理学杂志》，第 426 卷，第 109951 页，2021 年。[56] B. Reyes、A. A. Howard、P. Perdikaris 和 A. M. Tartakovsky，“学习非牛顿流体的未知物理规律”，《物理评论：流体》，第 6 卷，第 7 期，第 073301 页，2021 年。[57] E. Zhang、M. Yin 和 G. E. Karniadakis，“用于弹性成像中非均质材料识别的物理信息神经网络”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2009.04525*，2020 年。[58] M. Yin、X. Zheng、J. D. Humphrey 和 G. E. Karniadakis，“利用物理信息神经网络无创推断血栓材料属性”，《应用力学与工程中的计算方法》，第 375 卷，第 113603 页，2021 年。[59]Z. Zou 和 G. E. Karniadakis，“L-HYDRA：多头物理信息神经网络”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2301.02152*，2023 年。[60] P. Chen、T. Meng、Z. Zou、J. Darbon 和 G. E. Karniadakis，“利用多时间 Hamilton–Jacobi 偏微分方程解决某些科学机器学习问题”，*arXiv* 预印本 *arXiv:2303.12928*，2023 年。

[61] S. Goswami、M. Yin、Y. Yu 和 G. E. Karniadakis，《一种用于预测准脆性材料裂纹路径的物理信息变分 DeepONet》，《应用力学与工程中的计算方法》，第391卷，114587页，2022年。[62] S. Wang、H. Wang 和 P. Perdikaris，《利用物理信息 DeepONet 学习参数化偏微分方程的解算子》，《科学进展》，第7卷，第40期，eabi8605页，2021年。[63] A. F. Psaros、X. Meng、Z. Zou、L. Guo 和 G. E. Karniadakis，《科学机器学习中的不确定性量化：方法、指标与比较》，《计算物理学杂志》，111902页，2023年。[64] Z. Zou、X. Meng、A. F. Psaros 和 G. E. Karniadakis，《NeuralUQ：用于神经微分方程与算子不确定性量化的综合库》，*arXiv* 预印本 *arXiv:2208.11866*，2022年。[65] R. M. Neal等，《使用哈密顿动力学进行 MCMC》，《马尔可夫链蒙特卡罗手册》，第2卷，第11期，第2页，2011年。[66] M. D. Hoffman、A. Gelman等，《No-U-Turn 采样器：自适应设定哈密顿蒙特卡罗的路径长度》，《机器学习研究杂志》，第15卷，第1期，第1593–1623页，2014年。[67]D. P. Kingma 和 J. Ba，《Adam：一种随机优化方法》，*arXiv* 预印本 *arXiv:1412.6980*，2014年。[68] J. Ferruzzi、P. Di Achille、G. Tellides 和 J. D. Humphrey，《结合体内和体外生物力学数据揭示血管周围锚定在中央动脉功能中的关键作用》，《*PLOS ONE*》，第13卷，第9期，e0201379页，2018年。[69] L. Pereira、S. Y. Lee、B. Gayraud、K. Andrikopoulos、S. D. Shapiro、T. Bunton、N. J. Biery、H. C. Dietz、L. Y. Sakai 和 F. Ramirez，《在原纤维蛋白-1表达不足的小鼠中揭示的动脉瘤致病序列》，《美国国家科学院院刊》，第96卷，第7期，第3819–3823页，1999年。[70] H. Yanagisawa、E. C. Davis、B. C. Starcher、T. Ouchi、M. Yanagisawa、J. A. Richardson 和 E. N. Olson，《纤维连接蛋白-5是一种弹性蛋白结合蛋白，对体内弹性纤维发育至关重要》，《自然》，第415卷，第6868期，第168–171页，2002年。[71] B. Spronck、M. Latorre、M. Wang、S. Mehta、A. W. Caulk、P. Ren、A. B. Ramachandra、S.-I. Murtada、A. Rojas、C.-S. He等，《过度外膜应力驱动小鼠高血压性主动脉重塑中的炎症介导纤维化》，《英国皇家学会界面杂志》，第18卷，第180期，20210336页，2021年。

[72] A. Korneva、L. Zilberberg、D. Rifkin、J. Humphrey 和 C. Bellini，“ltbp-3缺失可减轻马凡综合征的动脉瘤表型，但无法消除脊柱对主动脉的影响”，《生物力学与力学生物学建模》，第18卷第1期，页码261–273，2019年。[73] Y. Jiao、G. Li、A. Korneva、A. W. Caulk、L. Qin、M. R. Bersi、Q. Li、W. Li、R. P. Mecham、J. D. Humphrey，等，“周向生长不足是部分弹性蛋白缺乏所致主动脉阻塞的主要决定因素”，《动脉硬化、血栓形成与血管生物学》，第37卷第5期，页码930–941，2017年。[74] J. Ferruzzi、M. Bersi、S. Uman、H. Yanagisawa 和 J. Humphrey，“纤维连接蛋白-5缺乏导致中央动脉功能障碍的特征是弹性能储存减少，而非材料刚度增加，且与性别无关”，《生物力学工程杂志》，第137卷第3期，页码031007，2015年。[75] B. Spronck、J. Ferruzzi、C. Bellini、A. W. Caulk、S.-I. Murtada 和 J. D. Humphrey，“在衰老基础上叠加高血压时，小鼠主动脉重塑程度较轻且与性别无关”，《高血压杂志》，第38卷第7期，页码1312，2020年。[76] C. Cavinato、S.-I. Murtada、A. Rojas 和 J. D. Humphrey，“多光子显微镜揭示主动脉成熟与衰老过程中的结构-功能关系演变”，《衰老与发育机制》，第196卷，页码111471，2021年。[77] C. R. Qi、H. Su、K. Mo 和 L. J. Guibas，“PointNet：用于三维分类与分割的点集深度学习”，载于*IEEE*计算机视觉与模式识别会议论文集，页码652–660，2017年。[78] S. T. Radev、U. K. Mertens、A. Voss、L. Ardizzone 和 U. K¨othe，“BayesFlow：利用可逆神经网络学习复杂随机模型”，*IEEE*神经网络与学习系统汇刊，第33卷第4期，页码1452–1466，2020年。