arXiv:2601.10115v1 [physics.flu-dyn] 15 Jan 2026

屈服应力流体复杂流动的贝叶斯模型选择

Aricia Rinkens[1], Clemens V. Verhoosel[1], Alexandra Alicke[1], Patrick D.Anderson[1],和 Nick O. Jaensson[1]

[1]埃因霍温理工大学机械工程系，荷兰 ds

2026年1月16日

摘要

在复杂流动情景中对屈服应力流体进行建模面临诸多挑战，尤其是因为传统的流变学表征方法所得到的材料参数，往往无法充分代表复杂几何形状和流动条件下观测到的复杂本构行为。在本研究中，我们提出了一个贝叶斯不确定性量化框架，用于校准和选择屈服应力流体的本构模型，并明确考虑建模准确性和实验观测中的不确定性。该框架通过明确并量化源自流变测量的偏差，来应对复杂流动建模的挑战。我们将贝叶斯框架应用于 Carbopol 980 的流变测量和挤压流实验，并对多种本构模型进行比较。分析结果表明，贝叶斯模型选择能够给出稳健的概率预测，并通过评估各模型的可信度，对模型适用性作出客观判断；尤其是在推断过程中纳入模型偏差时更是如此。该框架会自然地惩罚不必要的复杂性，符合奥卡姆剃刀原则；同时表明，最优模型的选择取决于所纳入的物理机制、先验信息的设定以及校准数据的可用性。在流变学情境中，Herschel-Bulkley 模型和双黏度幂律模型表现良好，且不确定性主要由观测噪声主导。然而，将这些流变学结果用作流变学信息引导的挤压流分析的先验信息时，会发现其与实验数据存在显著不匹配。这是因为根据流变测量推断出的屈服应力并不适用于复杂的挤压流情形。相比之下，基于更宽泛先验分布的专家信息引导的挤压流分析能够给出准确预测。这些发现凸显了将流变测量结果外推至复杂流动的局限性，并强调了贝叶斯方法在量化模型偏差以及在不确定性条件下指导模型选择方面的价值。

关键词 秒： 不确定性量化；模型选择；贝叶斯推断；软物质；流变学-学；马尔 可夫链蒙特卡洛

1 引言

软物质是一类材料，通常被描述为具有复杂内部微观结构的液体，例如乳液、悬浮液和聚合物溶液 [1, 2]。其微观结构使变形与应力之间形成复杂的关系，这种关系称为其本构行为 [3]。软物质在食品加工、制药和能源等众多行业中发挥着重要作用。在这些领域，准确的流体建模对于过程优化、控制和规模化等方面至关重要。本文聚焦于屈服应力流体——即在应力超过某一阈值之前表现得像固体，超过该阈值后则像液体一样流动的材料。这类流体属于软物质的一个子类，在许多工业应用中发挥作用（例如牙膏、水泥和番茄酱）。

复杂流体流动研究中有两个重要的建模目标：一是表征材料本身，我们称之为描述性建模；二是运用模型对所研究的系统作出有用预测，我们称之为预测建模。优秀的描述性模型能够捕捉与材料行为相关的所有关键物理现象。要使模型同时具备良好的预测能力，关键在于能够针对具体应用场景对模型参数进行唯一且准确的表征。众所周知，屈服应力流体的材料表征颇具挑战性；在复杂应用中，预测建模的成效对所遇到的具体流动条件十分敏感 [4, 5]。在 VPF研讨会的讨论中，这一挑战得到了强调，而这些讨论也构成了本期特刊的基础。

提高屈服应力流体预测建模能力的传统方法，是改进实验步骤和数学物理模型，并针对所关注的具体流动场景对其进行定制。对于需要极高确定性的情况，这种方法是合理的。然而，在工程系统中，鉴于其他所有固有不确定性，这种确定性方法未必总是合理的。通过改进实验和模型来实际消除不确定性，通常既不切实际，也不可行。从工程角度来看，只要不确定性能够得到可靠量化，并且保持在明确定义的范围内，就不一定会构成阻碍。通过将不确定性纳入建模过程，不确定性量化（*UQ*）建模范式为确定性方法提供了一种替代方案。

在不确定性量化（UQ）中，模型预测与实验观测之间的差异，即误差，可能来自两个来源：模型偏差，即认知误差；以及观测噪声，即偶然误差 [6]。原则上，经典力学将所有误差都视为模型偏差。然而，在实践中，底层模型往往难以处理，并且对实现建模目标并非必不可少。因此，UQ通过概率建模，在这些误差之间寻求一种实用的平衡。这一概率建模过程的一个关键方面，是确定模型和观测中的哪些要素需要进行详细的基于物理的描述，哪些要素可以作为随机变量处理。在实践中，平衡这些误差来源需要选择适当的模型，并以随机方式表示建模和观测不确定性。UQ与模型选择为实现这种平衡提供了自然的方法。

通常采用两种主要范式来处理随机性：频率学派方法和贝叶斯方法。二者的关键区别在于对不确定性的处理方式。在频率学派框架中，模型被视为确定性的，而数据被视为随机的；该框架旨在确定在给定固定模型的情况下哪些数据最有可能出现。相比之下，贝叶斯方法将模型参数视为随机变量，并回答在给定观测数据的情况下哪些模型最有可能，从而为模型选择和不确定性量化提供了自然的框架。因此，本文采用贝叶斯方法进行不确定性量化。

贝叶斯不确定性量化基于贝叶斯定理，其本质上通过利用观测数据更新概率模型参数，为模型校准提供了一个框架。从模型选择的角度来看，贝叶斯不确定性量化是对奥卡姆剃刀的一种概率诠释[1] [7]。从不确定性量化的角度来看，模型越复杂并不意味着模型越好，因为引入额外的参数不确定性需要付出代价，尤其是在缺乏足够校准数据的情况下。因此，一个在受控实验室条件下表现良好的模型，可能并不适用于参数校准机会有限的工业环境。

复杂流动情景中的屈服应力流体体现了概率模型选择的重要性。文献报道了表征和建模屈服应力材料的困难，卡波姆就是一个典型例子 [8–12]。即使使用相同的方案制备同一种材料，测得的屈服应力值和其他流变性质也常常会因制备过程、物理状态和实验环境的细微差异而出现显著变化。当考虑现实应用中涉及的复杂流动时，这些差异会变得更加明显，而这些流动通常与流变表征所依据的简单剪切流条件相关性较差，

[1]奥卡姆剃刀是一项原则：在同样能够解释数据的多个竞争模型中，应优先选择最简单的模型。

尤其是涉及复杂流动时，这些流动通常与流变表征所依据的简单剪切流条件相关性较差。这凸显了理解屈服应力流体在简单剪切之外的行为的重要性，包括挤压流应用 [13]以及源自原流变学等新兴技术的场景 [14–16]。在此类情况下，选择并校准模型至关重要 [17]。

屈服应力流体的研究一直着眼于改进测量方法和模型，以实现理论与观测结果近乎完美的吻合。传统本构模型，例如宾汉[18, 19] 和Herschel–Bulkley模型 [20]，长期以来一直被广泛使用，并假设材料会从类固态行为骤然转变为类流体行为。Herschel–Bulkley模型通过纳入剪切变稀效应，对宾汉模型进行了扩展；然而，这两种模型都依赖固定的屈服应力阈值，且未考虑触变性、时效和黏弹性等现象 [21–25]。为克服这些局限，人们开发了更复杂的本构模型。例如，Saramito[26] 提出了一种热力学一致的弹黏塑性模型，将黏弹性行为与黏塑性行为相结合，从而能够更准确地模拟卡波姆等复杂材料。Pagani等人 [27] 对固定屈服应力这一概念提出质疑，提出了一种由应力激活的松弛时间模型，将屈服视为渐进式转变，而非离散阈值。Kamani和 Rogers [28]进一步强调，屈服响应具有多样性，例如脆性与延性之别，而这种差异取决于微观结构动力学；他们指出，有必要针对软物质系统的具体行为构建相应的流变模型。

关于屈服应力流体的研究，主要可归为一种传统的确定性方法，旨在提升预测建模能力。尽管这种方法在受控（实验室）和工程环境中均取得了成功，但在复杂的流动情景下，要获得准确预测仍然颇具挑战，因为系统的复杂性和可用数据的局限性使模型校准变得困难。虽然不确定性量化建模范式更适用于此类不确定条件，但它在非牛顿流体力学和流变学领域仍鲜有探索。Freund 和 Ewoldt 的开创性工作系统地将不确定性量化引入流变建模，涵盖了贝叶斯推断和模型选择[29], 。后续研究表明，将本构模型参数的贝叶斯校准与不确定性传播相结合，能够对流变流动给出稳健可靠的预测，例如，参见文献 [30–32]。贝叶斯推断也已扩展到更复杂的流变模型（例如，参见文献 [33–36]）以及日益复杂的流动情景（例如，参见文献 [37, 38]）。近期关于流变学中模型选择的研究也开始考虑数据驱动方法 [39, 40]。

本文提出并研究了一种不确定性量化框架，用于在复杂流动情景中校准和选择屈服应力流体模型。该框架明确考虑了建模过程和实验观测中固有的不确定性。我们研究了模型复杂度与数据可用性如何在模型选择过程中相互作用，并证明贝叶斯模型选择会自然地惩罚不必要的复杂性参见奥卡姆剃刀原理。我们表明，因此，最优模型选择可能因情境而异：在数据丰富且受控的流变测量实验中，与在数据稀疏且噪声较大的复杂流动情景中，最优选择可能不同。

鉴于控制不确定性的各个方面至关重要，我们采用实验与建模相结合的方法。这种集成方法使我们能够系统地量化模型偏差和实验误差。为了构建针对复杂屈服应力流体流动情景的不确定性量化框架，我们采取两步法。第一步，我们考察流变测量，此时我们拥有明确定义且受控的实验环境。这些测量得益于先进的仪器设备，能够精确量化不确定性。此外，相关模型通常为解析模型，具有稳健性和较高的计算效率，从而显著降低不确定性量化中常见的挑战。第二步，我们将分析扩展至挤压流，这是较不受控的复杂流动实验的典型案例，可用于表征屈服应力流体 [41]。我们采用定制的实验装置和半解析模型，使采样仍然具有可行性。对于贝叶斯推断，我们考虑两种不同的方法。第一种方法称为流变信息引导的推断，其中流变测量被纳入

先验信息，模拟这样一种情形：复杂流动实验受到实验数据的引导。第二种方法称为专家信息推断，其中我们将这些测量排除在先验分布之外，代表缺乏此类支持数据的场景。这种方法使我们能够评估先验知识如何影响模型选择和性能。

本文结构安排如下。我们将在第2节介绍贝叶斯推断和模型选择。第3节将介绍我们应用贝叶斯模型选择的本构模型。第4节将讨论流变学背景下贝叶斯模型选择的结果，并区分两种情况：一种假设模型偏差可以忽略，另一种则将模型偏差视为待推断参数。第5节将介绍挤压流本构模型选择的结果，并同时考察流变信息方法和专家信息方法。最后，我们将在第6节总结研究发现，并提出未来工作的建议。

2 贝叶斯模型选择

2.1 概率建模

科学与工程领域的一项核心目标，是对物理现象作出可靠预测。随着系统日益复杂，不确定性的来源也随之增多。这些不确定性来自多个方面：实验测量的局限（实验测量用于模型验证和校准）、对系统行为认识不足，以及模型本身固有的简化。此外，在许多工程应用中，模型是通过简化的实验进行校准的，而这些实验可能无法充分反映真实系统的行为。不确定性量化（UQ）提供了一个在明确考虑这些不确定性的同时进行预测的框架。

在不确定性量化（UQ）中，我们将不确定量建模为随机变量，并用概率分布来描述。当我们对感兴趣的量进行预测时，预测结果本身也是一个概率分布，反映了模型参数引入的不确定性。为了形式化不确定性量化的概念，我们将感兴趣量的真实值定义为 $\boldsymbol{g}$ [6]。真实值的观测由集合 $\boldsymbol{y} = \{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, ..., \boldsymbol{y}_n\}$ 描述，其中 n 表示测量次数。真实值与实验之间的观测（偶然）误差定义为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{noise},i} = \boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{g}_i, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{g}_i$ 是与观测 $\boldsymbol{y}_i$对应的 $\boldsymbol{g}$ 的实现值。由于实际中真实值未知，我们通常通过噪声模型对观测误差进行概率建模。

除观测误差外，我们还有模型误差（或模型偏差）$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{bias},\ i}(\boldsymbol{\theta})$，它量化了模型与真实值之间的误差，定义为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{bias},i}(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{g}_i - \boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{\theta}), \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{\theta})$ 表示一次模型评估。结合观测误差和模型偏差，我们可以消去未知的真实值，得到

$$\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{noise},i} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{bias},i}(\boldsymbol{\theta}). \tag{3}$$

该方程将模型预测与观测数据之间的不匹配形式化为来自两个方面：测量噪声和模型不足。

不确定性量化（UQ）的一项关键任务，是为这些误差项构建恰当的概率模型，因为它们会直接影响预测的可靠性。通常，这两种误差会合并为一个有效噪声模型，以涵盖观测不确定性和模型不确定性。然而，在本研究中，我们将这两项误差分开，并使用贝叶斯推断研究这两种不确定性的来源。

2.2 贝叶斯模型选择

在贝叶斯模型选择中，我们考虑一组 m 模型类别 $\boldsymbol{M} = [M_1, M_2, ...M_m]$。每个模型类别 M_j 都是 p_j 模型参数 $\boldsymbol{\theta}_j = [\theta_1, \theta_2, ..., \theta_{p_j}] \in \boldsymbol{\Theta}_j$的函数，其中 $\boldsymbol{\Theta}_j$ 是对应于该模型类别的参数域 M_j[2]。

贝叶斯定理表示模型类 M_j 的参数 $\boldsymbol{\theta}_j$ 在给定观测数据 $\boldsymbol{y}$ 时的概率密度，该概率密度称为后验分布：

$$\begin{aligned} \pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j) &= \frac{\pi(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{\theta}_j, M_j)\, \pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}{\pi(\boldsymbol{y} \mid M_j)} \\ &= \frac{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\, \pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}{z_j}, \end{aligned} \tag{4}$$

其中，$\pi(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{\theta}_j, M_j) \equiv \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)$ 为似然，$\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)$ 为先验分布，而 $\pi(\boldsymbol{y} \mid M_j) \equiv z_j$为证据 [6, 42]。

在模型选择中，证据 z_j 被解释为给定模型类 M_j 时观测到数据 $\boldsymbol{y}$ 的概率，这对应于边际似然

$$z_j = \int_{\boldsymbol{\Theta}_j} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\, \pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)\, d\boldsymbol{\theta}_j. \tag{5}$$

通过贝叶斯模型可信度

$$\rho_j \equiv \pi(M_j \mid \boldsymbol{y}) = \frac{\pi(\boldsymbol{y} \mid M_j)\, \pi(M_j)}{\pi(\boldsymbol{y})} = \frac{z_j\, \pi(M_j)}{\pi(\boldsymbol{y})}, \tag{6}$$

模型证据使我们能够评估哪个模型类最能解释数据。在方程 (6) 中，$\pi(M_j)$ 是模型类 M_j 的先验概率，例如可基于专家意见确定，而

$$\pi(\boldsymbol{y}) = \sum_{j=1}^{m} z_j\, \pi(M_j) \tag{7}$$

是归一化常数，可确保 $\sum_{j=1}^{m} \rho_j = 1$。因此，可信度构成了模型类别集合 $\boldsymbol{M}$ 上的离散概率分布。某一模型类别的可信度越高，就越可能比其他模型类别更好地解释数据。

2.3 基于马尔可夫链蒙特卡罗抽样的模型选择

为了评估后验分布 (4)，我们采用马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法，该方法是涉及大量参数 [43, 44] 的问题的标准方法。对于每个模型类别，MCMC 会生成一个长度为 N 的序列 $\boldsymbol{\mathcal{C}}_j = \{\boldsymbol{\theta}_{j,n}\}_{n=1}^{N}$，其中每个 $\boldsymbol{\theta}_{j,n}$都包含迭代 n 时的 p_j 参数值，从而有效地探索后验分布。

我们使用仿射不变拉伸移动（AISM）采样器，该采样器适用于无法通过解析方式获得对数后验分布梯度的情形 [45]。该采样器通过行走者集成运行，降低收敛到局部极大值的风险，并提升对复杂后验分布的探索能力。关于重要实现方面的说明，请参见备注1；有关 AISM算法的进一步讨论（包括预热期去除和收敛性评估等方面），请参见 Rinkens 等人 [46] 。

为评估可信度（6），必须针对每一类模型计算边际似然（5）。对于参数数量较多的问题，由于需要对整个参数域进行积分，直接计算边际似然会变得难以处理。为

[2]我们将 *model class* 正式定义为一种数学形式，将 *model* 定义为一类模型及其参数。不过，为了提高可读性，本文其余部分将交替使用这两个术语。

避免这种情况，我们使用从后验分布中抽取的样本来估计模型证据，即，$\boldsymbol{\theta}_{j,\,n} \in \mathcal{C}_j$，采用调和均值估计量 [47]

$$\begin{aligned} z_j^{-1} &= \mathrm{E}_{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}\left[\frac{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\,\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}\right] \\ &= \mathrm{E}_{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}\left[\frac{1}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}\right] \\ &\approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_{j,n} \mid \boldsymbol{y}, M_j)}. \end{aligned} \tag{8}$$

该估计量颇具吸引力，因为它只需要后验样本和似然评估。然而，它的方差很高，因为它对似然值极低的样本赋予了很大的权重，而这类样本通常位于后验分布的尾部。这些低似然样本主导了调和均值，导致估计结果不可靠，甚至发散 [48]。

为稳定该估计量，可以定义一个任意的概率密度 $\varphi(\boldsymbol{\theta})$，以减轻极小似然值的影响。于是，模型证据的重要性采样估计量为

$$\begin{aligned} z_j^{-1} &= \mathrm{E}_{\varphi(\boldsymbol{\theta}_j)}\left[\frac{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\,\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}\right] \\ &= \mathrm{E}_{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}\left[\frac{\varphi(\boldsymbol{\theta}_j)}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}\right] \\ &\approx \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{\varphi(\boldsymbol{\theta}_{j,n})}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_{j,n} \mid \boldsymbol{y}, M_j)\pi(\boldsymbol{\theta}_{j,n} \mid M_j)} \equiv \hat{z}_j^{-1}, \end{aligned} \tag{9}$$

其中，$\pi(\boldsymbol{\theta}_{j,\,n} \mid M_j)$ 是样本 [49] 的先验概率密度。

T为在估计量 (9) 中排除低似然区域，我们考虑均匀密度 ity

$$\varphi(\boldsymbol{\theta}_{j,n}) = \frac{I_s(\boldsymbol{\theta}_{j,n})}{V_{s,j}}, \tag{10}$$

其中，$I_s(\boldsymbol{\theta}_{j,\,n})$ 是由下式定义的均值中心椭球的指示函数

$$I_s(\boldsymbol{\theta}_{j,n}) = \begin{cases} 1, & (\boldsymbol{\theta}_{j,n} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_j^{-1}(\boldsymbol{\theta}_{j,n} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_j) < R_s^2 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}, \tag{11}$$

¯其后验均值为 $\boldsymbol{\theta}_j$，后验协方差为 $\boldsymbol{\Sigma}_j$。该椭球的体积 $V_{s,\,j}$ 为

$$V_{s,j} = \frac{\pi^{p_j/2}}{\Gamma(p_j/2+1)} R_s^{p_j} |\Sigma_j|^{1/2}, \tag{12}$$

其中，p_j 是参数空间的维数，$\Gamma(\cdot)$是伽马函数。基于密度 φ 这一特定选择的估计量称为截断调和均值估计量 [50]。我们注意到，还存在其他更灵活的稳定化策略 [51], ，但对于当前工作的目的而言，截断估计量已足够。

为使截断调和平均估计量 (9) 准确，必须适当选择方程 (11) 中的截断半径 R_s。截断半径的最优选择可使估计量的方差最小，从而确保分布 (10) 既不会过宽（否则仍会纳入似然较低的样本），也不会过窄（否则会排除后验分布中包含信息的区域）。为近似求得这一最优值，我们估计截断调和平均估计量 (9) 的倒数的方差，计算如下：

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}\left[\hat{z}_j^{-1}\right] &\approx \frac{1}{N^{\mathrm{eff}}}\mathrm{Var}_{\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)}\left[\frac{\varphi(\boldsymbol{\theta}_j)}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_j \mid \boldsymbol{y}, M_j)\pi(\boldsymbol{\theta}_j \mid M_j)}\right] \\ &\approx \frac{1}{N^{\mathrm{eff}}} \cdot \frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\varphi(\boldsymbol{\theta}_{j,n})}{\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}_{j,n} \mid \boldsymbol{y}, M_j)\pi(\boldsymbol{\theta}_{j,n} \mid M_j)} - \hat{z}_j^{-1}\right)^2, \end{aligned} \tag{13}$$

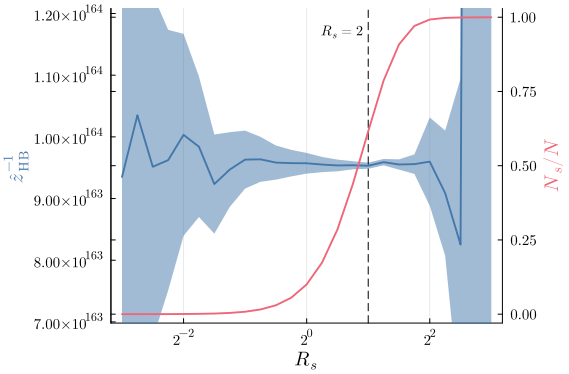


图 1：证据估计量随截断半径变化的示例 R_s。不确定性带表示估计量的 95%置信区间。截断中包含的样本比例用 N_s/N 表示。

其中， N^{eff} 是后验样本 [52], 的有效样本量，并据此确定使该方差最小的半径。我们在附录A中研究这一方差估计量的准确性。

图 1 展示了如何选择截断半径的示例。我们绘制了证据估计量 (9) 随截断半径 R_s 的变化，并根据方程 (13) 给出不确定性带。右侧纵轴显示椭球内的后验样本数 (N_s) 占样本总数 (N) 的比例。可以看出，证据估计量的方差在 $R_s \approx 2$ 附近达到最小值。尽管 R_s 的最优值通常取决于具体问题，但对于所有考虑的情况，我们发现 $R_s = 2$ 接近最优值。由于 R_s 值保持恒定，截断中包含的后验样本比例实际上也保持恒定，从而便于公平比较不同模型。

我们使用估计量 (9) 及其方差 (13) 来估计可信度 (6)，如下所示

$$\hat{\rho}_j = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \frac{\hat{z}_{j,n}\pi(M_j)}{\sum_{k=1}^{m}\hat{z}_{k,n}\pi(M_k)}, \tag{14}$$

其中

$$\hat{z}^{-1}_{j,n} \sim \log\mathcal{N}\left(\hat{z}^{-1}_{j}, \sqrt{\mathrm{Var}\left[\hat{z}^{-1}_{j}\right]}\right). \tag{15}$$

根据采样得到的可信度（14），我们还推导出可信度的不确定性界限。虽然这些界限基于估计量（13），但它们反映了可信度中由采样器导致的不确定性（见附录A）。

备注1 (采样器实现方面)。 关于本文所考虑的采样过程的实现，有两个重要方面需要注意：

- 为避免浮点下溢和上溢，所有采样过程均对概率和似然的对数进行运算。

- 要对（部分）参数施加约束，仅选择合适的先验分布（例如均匀分布、对数正态分布或指数分布）是不够的，因为 *MCMC* 采样器的提议步骤仍可能违反约束。为稳健地施加约束，我们在实现中将受约束参数映射到实轴上。例如，对于对数正态分布，这意味着变换后的参数服从正态分布。

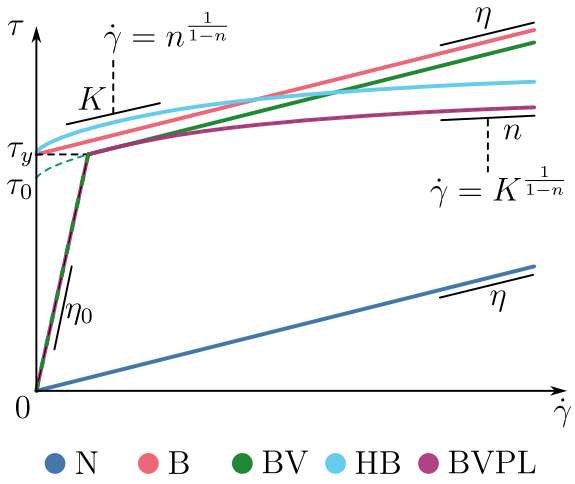


图2：所考虑流变模型概览：(N) 牛顿型；(B) 宾汉；(BV) 双黏度；(HB) Herschel-Bulkley；以及 (BVPL) 双黏度幂律。请注意，参数在不同模型中的含义可能有所不同，例如，双黏度幂律中的 η 不应解释为有效牛顿黏度。

3 广义牛顿模型：屈服应力流体

在流体力学中，应力张量分解为静水压力张量 $p\boldsymbol{I}$ 和额外应力张量 $\boldsymbol{\tau}$，即

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - p\boldsymbol{I}. \tag{16}$$

额外应力张量刻画了材料变形与作用于材料上的应力之间的关系，这种关系称为本构行为。对于广义牛顿流体，应力响应完全由瞬时变形速率决定，而与其历史无关，因此本构关系的形式为

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{D}), \tag{17}$$

其中，变形率张量定义为 $\boldsymbol{D} = \frac{1}{2}(\nabla \boldsymbol{v} + (\nabla \boldsymbol{v})^T)$，即速度场的对称梯度 $\boldsymbol{v}$。

对于本文所考虑的简单剪切流和薄间隙极限下的润滑流，我们将本构关系限制为标量形式，即，$\tau = \tau(\dot{\gamma})$，其中 τ和 $\dot{\gamma}$分别为额外应力张量和变形率张量的剪切分量。为简洁起见，在介绍本构模型时，我们考虑 $\dot{\gamma} \geq 0$。

我们考虑一组用于描述屈服应力流体的模型类别——即，这类材料在低于某一应力阈值时表现为固体，而高于该阈值时则像液体一样流动；每种模型以不同方式表示材料从固态特征向流体态特征的转变。发生这种转变时的临界应力称为剪切屈服应力 τ_y。为简洁起见，下文将τ_y 简称为屈服应力，默认指剪切屈服应力。我们比较五种复杂度依次不减的参数化本构模型类别：牛顿模型（N）；宾汉模型（B）；双黏度模型（BV）；Herschel-Bulkley模型（HB）；以及双黏度幂律模型（BVPL）。这些模型类别的复杂度以参数数量衡量，如图2所示。本节余下部分将详细介绍这些模型类别。

3.1 牛顿模型

牛顿模型假设剪切应力与剪切速率之间呈线性关系，如下所示

$$\tau = \eta\dot{\gamma}, \tag{18}$$

其中，恒定黏度 η 是唯一的参数，即， $\boldsymbol{\theta}_N = [\eta]$和 $p_N = 1$。由于牛顿模型未将屈服应力纳入参数，因此不能指望它准确地表征屈服应力流体的本构行为。不过，我们将其纳入模型类别层级，作为基准模型，以展示我们的框架如何处理模型偏差。

3.2 宾汉模型

在宾汉模型中， [19], 假设流体在屈服前区域表现为无限刚性的固体。一旦应力超过屈服应力，流体便进入流动区域，并以恒定黏度 η发生形变，其行为类似于牛顿型流体。宾汉模型定义如下

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= 0 \qquad\quad \tau < \tau_y \\ \tau &= \tau_y + \eta\dot{\gamma} \quad \tau \geq \tau_y. \end{aligned} \tag{19}$$

宾汉模型包含两个参数，即， $\boldsymbol{\theta}_B = [\eta, \tau_y]$ 和 $p_B = 2$。当屈服应力设为零时，宾汉模型便简化为牛顿模型。

3.3 双黏度模型

双黏度模型 [53]通过在屈服前区域考虑一个非常高的恒定黏度 η_0，对宾汉模型进行了推广。一旦应力超过屈服阈值，流体便转入流动区域，其行为类似于黏度低得多的牛顿型流体 η。屈服前后的黏度之间这种显著差异，使该模型能够在保持计算可处理性的同时近似描述屈服应力行为（注 2）。

本构关系表示为

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= \frac{\tau}{\eta_0} \qquad\quad \tau < \tau_y \\ \tau &= \tau_0 + \eta\dot{\gamma} \quad \tau \geq \tau_y \end{aligned}, \tag{20}$$

其中 $\tau_0 = (1-\varepsilon)\tau_y$， $\varepsilon = \eta/\eta_0$ 确保屈服阈值处应力连续。这个三参数模型，即 即，$\boldsymbol{\theta}_{BV} = [\eta_0, \eta, \tau_y]$ 和 $p_{BV} = 3$，当$\eta_0 \to \infty$时退化为宾汉模型，如图2所示。

3.4 Herschel-Bulkley模型

Herschel–Bulkley模型 [20]描述了一种流体，在屈服应力超过阈值之前，其行为如同刚度无限大的固体。一旦超过该阈值，流体进入流动区域后，便会表现出剪切变稀或剪切增稠行为，这由幂律关系决定。Herschel–Bulkley模型定义为

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= 0 \qquad\quad \tau < \tau_y \\ \tau &= \tau_y + K\dot{\gamma}^n \quad \tau \geq \tau_y, \end{aligned} \tag{21}$$

其中 K 为稠度指数， n 为无量纲流动指数。当 $0 < n < 1$ 时，流体发生剪切变稀；当 $n > 1$时，流体发生剪切增稠。当 $n = 1$ 时，可恢复宾汉模型（其中 η 重新定义为 K）。与双黏度模型类似，Herschel-Bulkley模型也有三个参数，即 即， $\boldsymbol{\theta}_{HB} = [K, n, \tau_y]$和 $p_{HB} = 3$。不过，与双黏度模型相比，它以不同的方式推广了宾汉模型。

3.5 双黏度幂律模型

最后，我们考虑一种结合了双黏度模型和 Herschel-Bulkley 模型特性的模型。在屈服前区域，类固体行为由

非常高的恒定黏度 η_0 表征，与双黏度模型类似。屈服后，该模型表现出类似 Herschel-Bulkley 模型的幂律行为，因此能够捕捉剪切变稀和剪切增稠响应。该双黏度幂律模型的本构关系如下：

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= \frac{\tau}{\eta_0} \qquad\quad \tau < \tau_y \\ \tau &= \tau_0 + K\dot{\gamma}^n \quad \tau \geq \tau_y \end{aligned}, \tag{22}$$

其中 $\tau_0 = (1-\varepsilon)\tau_y$ 和 $\varepsilon = K\tau_y^{n-1}/\eta_0^n$ 确保屈服阈值处的应力连续性。这个四参数模型（即，$\boldsymbol{\theta}_{BVPL} = [\eta_0, K, n, \tau_y]$ 和 $p_{BVPL} = 4$）在 $\eta_0 \to \infty$ 时退化为 Hershel-Bulkley 模型，如图2所示；在 $n = 1$ 时则退化为双黏度模型。

备注 2（双黏度模型中的表观黏度）。在双黏度模型 *[53]*，中，流体屈服后的表观黏度为 $\tau_0/\dot{\gamma} + \eta$，这在本质上模拟了剪切变稀行为。请注意，我们将零剪切速率下的屈服应力记为 τ_0。在 ***Beverly and Tanner*** *[53]*，中，双黏度模型被视为一种数值正则化技术（备注 *3*），因此使用 τ_y，在这种情况下，它与 τ_0 十分相似。由于我们不一定假设屈服前黏度非常高，因此将参数 τ_y 赋予发生屈服时的应力水平。

注释 3（正则化解释）。

双黏度模型（包括具有剪切变稀特性的模型和不具有剪切变稀特性的模型）中的屈服前黏度推广了宾汉模型和***Herschel-Bulkley***模型，使其具备计算可处理性 *[54]*。因此，这些模型可以被视为上述模型的正则化版本。将其视为正则化模型时，应在保持计算可处理性的同时，将屈服前黏度设定得尽可能高。然而，我们认为屈服前的黏性行为是这些模型的物理特征，因此基于实验观测对屈服前黏度进行标定。出于这一原因，我们不将双黏度模型称为正则化宾汉模型或正则化***Herschel-Bulkley***模型。

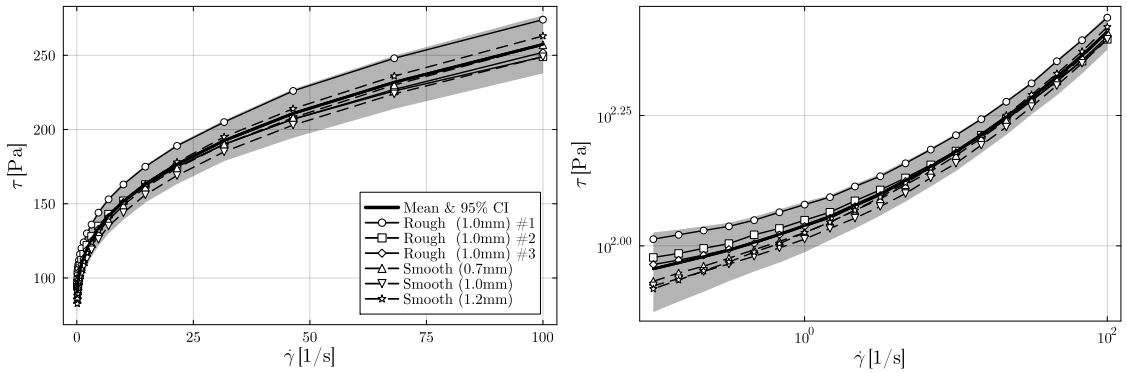
注释 4（模型层级）。 所考虑的模型构成了一个层级，这是因为更复杂的模型可以在数学上约化为较简单的模型；需要特别指出的是，双黏度模型和***Herschel-Bulkley***模型是宾汉模型的两种不同推广（两者均包含三个参数）。不过需要注意的是，不同模型类别中参数的物理解释可能发生变化，从物理角度来看，这会使该层级关系产生歧义。例如，在比较双黏度模型与牛顿模型时，无法明确两种黏度中的哪一种应被解释为牛顿黏度。这种解释上的歧义在贝叶斯分析中十分重要，因为它可能影响先验分布的选择。

4 Co流变测量中的本构模型选择

在本节中，我们将贝叶斯模型选择应用于流变学情境。首先，我们概述第4.1节中的实验步骤，并说明所用材料。接着，在第4.2节中，我们介绍贝叶斯框架的主要组成部分，即先验分布、模型偏差和实验噪声；后两者构成似然函数。在第4.3节中，我们展示两种不同情形下的结果：一种假设模型偏差可以忽略不计，另一种则对模型偏差进行推断。

4.1 实验数据采集

我们表征的屈服应力材料是浓度为 0.5 wt% 的 Carbopol 980。该材料按照参考文献 [10] 中所述的步骤制备。简而言之，将 150 mL 超纯水（MilliQ，电阻率为 18.2 MΩ cm）置于塑料容器中，在配有螺旋桨叶片的机械搅拌器上以 750 rpm 的高速搅拌。随后将 Carbopol粉末（750 mg）缓慢加入搅拌中的液体。使分散体持续搅拌 15 分钟，然后



（a）线性尺度　　（b）对数尺度

图3：两个批次的 Carbopol 980 流变学数据，其中批次 1 使用 50 mm 粗糙板获得，批次 2 使用 50 mm 光滑板在不同间隙高度下测得。我们将这两个批次合并为一个数据集，并将其 95% 置信区间可视化。

静置 30 分钟。随后，在使用锚式叶片以 200 rpm 搅拌的同时，向分散体中加入 1.44 mL、浓度为 18 % w/w 的氢氧化钠溶液，以中和 pH值，此时黏度立即开始增大。然后使混合物连续搅拌 48 小时。该方案可确保 Carbopol分散体稳定，并保证不同批次之间的可重复性。按照此步骤制备了两个独立批次。

为表征该材料，我们在旋转流变仪（MCR501，Anton Paar）上进行稳态速率扫描实验，从高到低的剪切速率进行测量，以获得范围为$\dot{\gamma} = [10^{-1}, 10^{2}]$ s^{-1}的流动曲线。我们确保材料有足够的时间在给定剪切速率下达到稳态应力。对于完整的剪切速率扫描，我们测量范围为 $\dot{\gamma} = 100\,\mathrm{s}^{-1}$ 至 $\dot{\gamma} = 0.1\mathrm{s}^{-1}$，测量持续时间从最高剪切速率下的 1 秒线性增加至最低剪切速率下的 80 秒。由于蒸发效应在约 20 分钟后变得显著，因此未对更低的剪切速率进行测量。每个剪切速率下测得的剪切应力均收集于观测向量 $\boldsymbol{y}_i$ 中，其中 i 是对应于该实验的索引。

为评估是否存在文献中所述的显著（表观）滑移效应 [55]，我们采用不同的流变仪几何结构进行了实验。第一批实验中，我们使用直径为 50 mm、带粗糙交叉纹理的平板，在 1 mm 的间隙高度下进行了三次测量。第二批实验中，我们使用直径为 50 mm 的光滑板，间隙高度分别为 0.7 mm（一次实验）、1 mm（四次实验）和 1.2 mm（一次实验）。

所有批次的测量数据如图3所示。基于两批不同测量所得合并数据的均值和标准差计算出的 95%置信区间，即即，

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{y}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{y}_i, \tag{23a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{y}} = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n} \left(\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{y}}\right)^2}, \tag{23b}$$

这说明实验具有可重复性，无论是在不同批次之间，还是在各项测量之间。通过考察不同板几何形状所揭示的滑移效应，在所考察的剪切速率范围内均处于不确定性界限之内。因此，我们将滑移引起的变异视为随机测量模型的一部分，即通过似然函数对其进行建模。

表1：五种流变模型的流变学先验分布和后验分布。

参数	先验分布	无模型偏差的后验			有模型偏差的后验		
		Mean	标准差	变异系数	*Mean*	标准差	变异系数
牛顿型							
η [帕·秒]	$\mathcal{U}(1,\ 100)$	4.23	2.65×10^{-2}	0.6%	3.59	2.23×10^{-1}	6.2%
σ_{bias} [帕斯卡]	$\mathcal{E}(50)$				7.41×10^{1}	4.99	6.7%
宾汉							
η [帕·秒]	$\mathcal{U}(1,\ 100)$	1.84	3.05×10^{-2}	1.7%	1.51	6.60×10^{-2}	4.4%
τ_y [帕斯卡]	$\mathcal{U}(1,\ 200)$	1.14×10^{2}	7.04×10^{-1}	0.6%	1.28×10^{2}	2.51	2.0%
σ_{bias} [帕斯卡]	$\mathcal{E}(50)$				1.37×10^{1}	1.15	8.4%
双黏度							
$\log_{10}\eta_0$ [帕·秒]	$\mathcal{U}(2,\ 4)$	2.85	1.35×10^{-2}	0.5%	3.44	3.05×10^{-1}	8.9%
η_1 [帕·秒]	$\mathcal{U}(1,\ 100)$	1.78	3.08×10^{-2}	1.7%	1.51	6.57×10^{-2}	4.3%
τ_y [帕斯卡]	$\mathcal{U}(1,\ 200)$	1.17×10^{2}	7.43×10^{-1}	0.6%	1.28×10^{2}	2.50	2.0%
σ_{bias} [帕斯卡]	$\mathcal{E}(50)$				1.36×10^{1}	1.16	8.5%
Herschel-Bulkley							
K [帕·秒^n]	$\mathcal{U}(1,\ 100)$	3.04×10^{1}	2.67	8.8%	3.06×10^{1}	3.37	11.0%
τ_y [帕斯卡]	$\mathcal{U}(1,\ 200)$	7.86×10^{1}	2.83	3.6%	7.84×10^{1}	3.86	4.9%
n [-]	$\mathcal{U}(0.1, 1.0)$	3.84×10^{-1}	1.80×10^{-2}	4.7%	3.84×10^{-1}	2.18×10^{-2}	5.7%
σ_{bias} [帕斯卡]	$\mathcal{E}(50)$				3.40	7.28×10^{-1}	21.4%
双黏度幂律							
$\log_{10}\eta_0$ [帕·秒]	$\mathcal{U}(2,\ 4)$	3.47	3.10×10^{-1}	8.9%	3.47	3.09×10^{-1}	8.9%
K [帕·秒^n]	$\mathcal{U}(1,\ 100)$	3.04×10^{1}	2.70	8.9%	3.06×10^{1}	3.40	11.1%
τ_y [帕斯卡]	$\mathcal{U}(1,\ 200)$	8.68×10^{1}	2.94	3.4%	8.67×10^{1}	3.47	4.0%
n [-]	$\mathcal{U}(0.1, 1.0)$	3.84×10^{-1}	1.81×10^{-2}	4.7%	3.84×10^{-1}	2.19×10^{-2}	5.7%
σ_{bias} [帕斯卡]	$\mathcal{E}(50)$				3.39	7.22×10^{-1}	21.3%

4.2 概率建模

要利用稳态速率扫描测试收集的实验数据集，对上述本构模型应用贝叶斯推断，必须定义模型参数的先验信息和似然函数。

4.2.1 先验信息

对于模型流变参数的先验信息，即 $\{\boldsymbol{\theta}_m\}_{m=1}^{M}$，我们力求施加具有物理依据的正性约束，但除此之外不对其作任何预设。因此，我们用具有宽泛取值范围的均匀分布表示每个物理参数（表1）。当某个参数出现在不同模型中且具有相同的物理含义时，使用相同的先验分布。

在分析中，我们认为所有模型的先验概率均相等。也就是说，我们为模型先验指定一个均匀离散分布。

4.2.2 似然函数：实验噪声与模型偏差

模型预测与实验观测之间的差异，$\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{\theta})$，可加性地分解为实验噪声 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{noise},\ i}$ 和模型偏差 $\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{bias},\ i}(\boldsymbol{\theta})$，其中 $i = 1,\ \ldots\ldots,\ n,\ n$ 为实验次数。也就是说，对于每次实验，这一差异都可以解释为真实值受到实验噪声和建模偏差扰动后的表示。在贝叶斯框架中，这两项均采用概率模型进行描述。

我们假设所进行的实验 $\{\boldsymbol{y}_i\}_{i=1}^{n}$ 相互独立且服从相同的正态分布，即，$\boldsymbol{y}_i \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{y}},\ \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{y}})$。对角协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{y}} = \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{y}})$ 对应于实验的标准差 (23b)，并反映了我们的假设：不同剪切速率下的测量点彼此不相关。于是，对于所考虑的每项实验，其实验噪声可假定为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\text{noise},i} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{y}}\right), \tag{24}$$

其中包含　设实验已进行了足够多次
秒以使其
均值 (23b) 可代表真实值。

对于模型偏差，预期剪切速率之间存在相关性是合理的。因此，我们通过高斯过程来表示区域 $[0, \dot{\gamma}_{\max}]$ 上的模型偏差

$$\varepsilon_{\mathrm{bias},i}(\dot{\gamma}) \sim \mathcal{GP}(0, \sigma_{\mathrm{bias}}^2 \rho_{\mathrm{bias}}(\dot{\gamma}, \dot{\gamma}')), \tag{25}$$

其中， σ_{bias} 表示通过场的逐点标准差表征的偏差强度。不同剪切速率下模型误差之间的相关性通过自相关核建模

$$\rho_{\mathrm{bias}}(\dot{\gamma}, \dot{\gamma}') = \exp\left(-\frac{|\dot{\gamma} - \dot{\gamma}'|}{l_{\mathrm{bias}}}\right), \tag{26}$$

其中， l_{bias} 为相关长度。在测量点处进行评估时，高斯过程 (25) 可表示为多元正态分布

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{bias},i} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \sigma_{\mathrm{bias}}^2 \boldsymbol{\Lambda}(l_{\mathrm{bias}})\right), \tag{27}$$

其中， $\boldsymbol{\Lambda}(l_{\mathrm{bias}})$ 是相关矩阵 参见方程 (26)。

为体现模型偏差所存在的不确定性，我们将偏差强度 σ_{bias}作为待推断的超参数。该超参数的指数先验分布列于表1。原则上，相关长度也可以视为超参数，但我们发现这样会使分析过于复杂。因此，在下文中，我们假设偏差相关长度固定为 $1\ \mathrm{s}^{-1}$。

由于实验噪声 (24) 和模型偏差 (27) 均服从高斯分布，组合误差也服从高斯分布，即，

$$\boldsymbol{y}_i - \boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{\theta}) \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{y}} + \sigma_{\mathrm{bias}}^2 \boldsymbol{\Lambda}(l_{\mathrm{bias}})\right). \tag{28}$$

似然函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{y},\ M)$ 可定义为所有实验中组合误差的概率密度之积 [6] ，即

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{y}, M) \propto \prod_{i=1}^{n} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{d} - \boldsymbol{y}_i)^{\mathrm{T}} [\boldsymbol{\Sigma}]^{-1} (\boldsymbol{d} - \boldsymbol{y}_i)\right), \tag{29}$$

其中， $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{y}} + \sigma_{\mathrm{bias}}^2 \boldsymbol{\Lambda}(l_{\mathrm{bias}})$ 是组合误差的协方差矩阵。

4.3 结果

为展示在贝叶斯框架中纳入模型偏差的影响，我们研究了纳入和未纳入偏差时的模型选择。通过设置 $\sigma_{\mathrm{bias}} = 0$，在分析中省略模型偏差。所有结果均基于马尔可夫链蒙特卡罗模拟，每个参数使用两个行走者，每个行走者运行 10 000 步。对于所有链，Gelman-Rubin诊断均收敛至远低于 1.1 的容差。

4.3.1 省略模型偏差

图4展示了所有流变模型中 $\tau(\dot{\gamma})$的后验预测分布。这些预测后验来自模拟实验，即在其中加入了噪声。表1报告了（校准后的）后验参数分布的各阶矩。与先验分布相比，所有参数的标准差都显著减小，这表明先验分布如预期一样不具信息性。图4中的不确定性带表示预测后验的95%可信区间。实验数据的95%置信区间也列出以供比较。牛顿模型与数据的偏差最大，因为它既无法捕捉实验观测到的屈服应力，也无法描述剪切变稀。双黏度模型和宾汉模型能够捕捉屈服行为，但无法描述剪切变稀效应。Herschel–Bulkley模型和双黏度幂律模型均与实验数据吻合良好，因为两者都纳入了关键的物理现象。

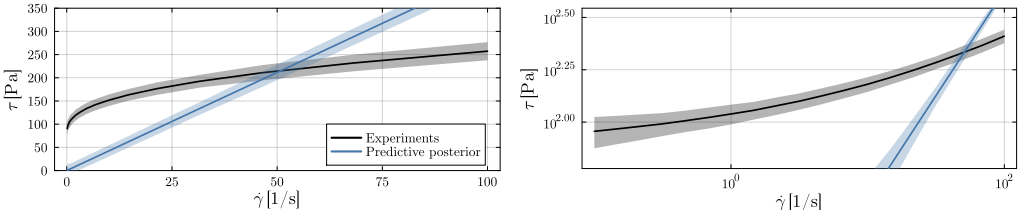
对于牛顿模型，可以观察到，在正剪切速率下，不确定性带允许出现负剪切应力。这种不符合物理规律的行为是由实验噪声和模型偏差的概率描述具有可加性和高斯性质所导致的。如果在建模目的下认为这类非物理特性会造成问题，则应开发更先进的概率模型。

从图4中还可以观察到，对于所有模型，预测后验分布的标准差都与实验噪声的标准差十分相似；即，预测后验的带宽与实验数据的带宽相近。这是宽先验和忽略模型偏差的直接结果。宽先验使后验不确定性由似然函数决定；由于此时似然中仅包含实验噪声，因此预测后验受该实验噪声支配。因此，预测后验不确定性基本上独立于所选模型是否合适。这会导致误导性结果：对于偏差较大的模型——此处为牛顿模型、宾汉模型和双黏度模型——其带宽并不能反映与数据之间的差异。与数据不匹配的程度相比，该带宽显示出相对较高的确定性。对于偏差较小的模型——此处为 Herschel-Bulkley模型和双黏度幂律模型——预测后验的带宽与实验数据高度吻合，表明这些模型的偏差确实可以忽略不计。

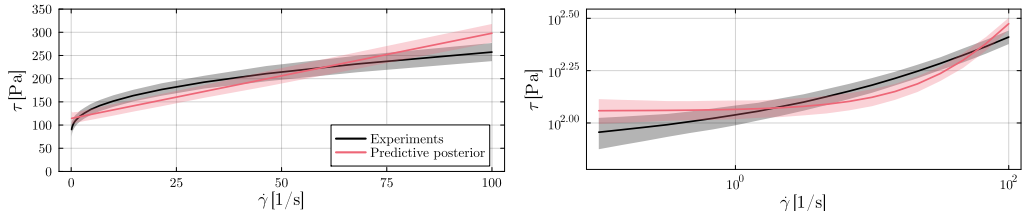
尽管预测后验分布能够从定性角度区分不适用模型与适用模型，但它们无法揭示由不必要的模型复杂性所导致的可信度差异。为评估模型选择的这一方面，图5展示了使用我们的贝叶斯模型选择框架计算得到的可信度。不确定性带对应于第2.3节所述估计量的95%置信区间。正如对预测后验的分析所预期的那样，牛顿模型、宾汉模型和双黏度模型的可信度可以忽略不计，这是因为这些模型无法模拟屈服应力和/或剪切变稀行为。与预测后验分布不同，可信度显示，Herschel-Bulkley模型比双黏度幂律模型更可信。这是因为Herschel-Bulkley模型的复杂性低于双黏度幂律模型，同时具备同等的解释观测结果的能力。根据奥卡姆剃刀原则，因此应优先选择更简单的模型。

双黏度幂律模型引入的额外复杂性源自屈服前黏度，η_0。我们对 $\log_{10}\eta_0$ 采用了下限为 2、上限为 4 的均匀先验，即屈服前黏度介于 100 Pa s 和 10 000 Pa s 之间。这涵盖了实验数据中可观测到的最高屈服前黏度，即剪切速率为 0.1 s^{-1} 时，对应约 90 Pa 应力的黏度。当屈服前黏度大于 900 Pa s 时，所有剪切应力观测值都落在屈服后区域。此时，似然对该参数的敏感度较低，但由于屈服后曲线会受到屈服前黏度的影响，仍存在一定的残余敏感度。对于所考虑的先验分布，概率质量有相当一部分落在 900 Pa s 以下的区域；在该区域内，双黏度幂律模型的似然显著低于 Herschel-Bulkley 模型。因此，总体而言，Herschel-Bulkley 模型更为可信。

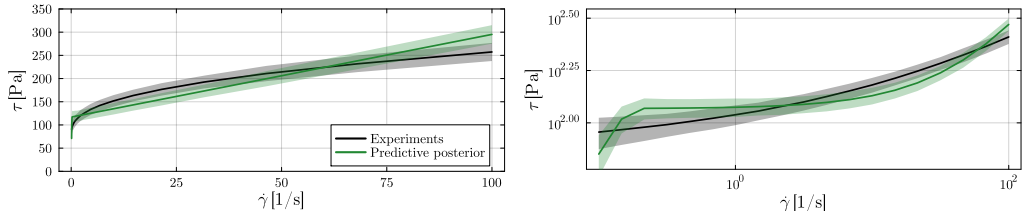
图6进一步详细研究了屈服前黏度的先验选择所产生的影响。我们将 $\log_{10}\eta_0$ 的均匀先验上下界之差固定为 2，同时改变其均值。图5中报告的可信度对应的均值为 $\mathrm{E}[\log_{10}\eta_0] = 3$，即 $\log_{10}\eta_0 \sim \mathcal{U}(2, 4)$。均值降低时，双黏度幂律模型的可信度会大幅下降。这是因为屈服前黏度的先验分布随之产生偏差，也就是说，它为与数据不一致的数值赋予了较高的概率。在这种情况下，Herschel-Bulkley模型显然更受青睐，因为它不受这种错误信息的影响。与均值为3的参考情形相比，当 $\log_{10}\eta_0$ 的均值增加时，双黏度幂律模型的可信度会逐渐提高，这是由于先验偏差减小所致。当均值增至5附近时，也就是说，当屈服前黏度介于10 000 Pa·秒和1 000 000 Pa·秒之间时，由于双黏度幂律模型对……不敏感，两种模型的可信度实际上相同



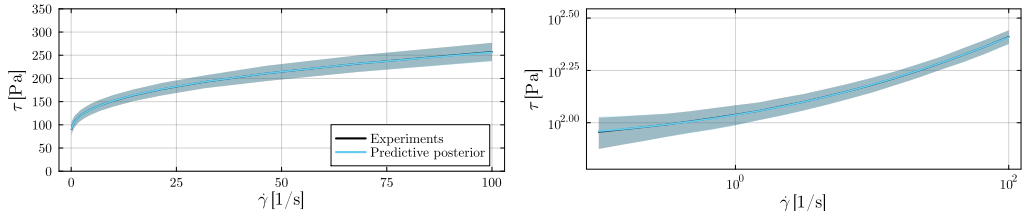
(a) 牛顿型



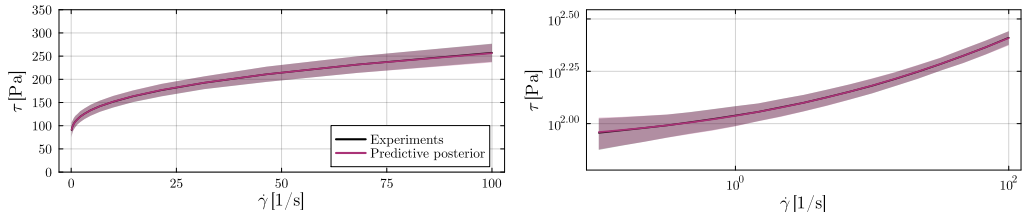
(b) 宾汉



(c) 双黏度



(d) Herschel-Bulkley



(e) 双黏度幂律

图4：省略模型偏差时各模型的预测后验分布。左列以线性尺度显示所有模型，右列则以对数尺度显示相同的结果。

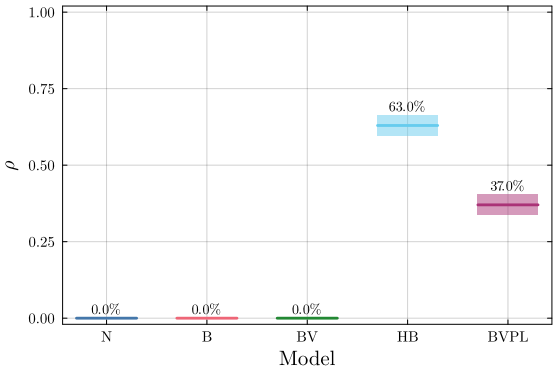


图5：对牛顿型（N）、宾汉（B）、双黏度（BV）、Herschel-Bulkley（HB）和双黏度幂律（BVPL）模型忽略模型偏差时的模型可信度。对于前三种模型，其可信度在机器精度范围内为零。

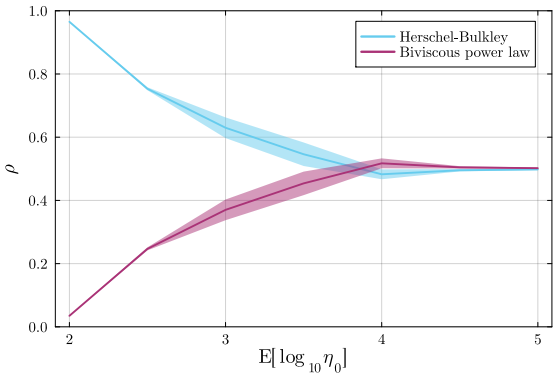


图6：Herschel-Bulkley模型和双黏度幂律模型的可信度对屈服前黏度先验分布 η_0的依赖关系。先验分布定义为$\log_{10}\eta_0 \sim \mathcal{U}(\ell, \ell+2)$，其均值为$\mathrm{E}[\log_{10}\eta_0] = \ell + 1$。

所有考察数据点的屈服前黏度。

从图6还可以观察到，当 $\log_{10}\eta_0$ 的均值约为 4 时，即对于先验分布 $\log_{10}\eta_0 \sim \mathcal{U}(3, 5)$，双黏度幂律模型略微优于 Herschel-Bulkley 模型。对此的解释是，在这种情况下，先验分布的下界接近可观测到的最高屈服前黏度 900 帕·秒。在此范围内，双黏度幂律模型对数据的拟合略优于宾汉模型，同时不会因屈服前黏度较低、与数据不符而受到惩罚。需要强调的一点是，模型的可信度不仅取决于它能够描述的现象，还会通过参数校准受到先验分布选择的影响。

4.3.2 推断的模型偏差

图7展示了推断模型偏差时各流变模型的后验预测分布。与未纳入模型偏差时的结果（图4）相比，牛顿型、宾汉和双黏度模型的预测带显著变宽，而 Herschel–Bulkley模型和双黏度幂律模型的预测带则没有明显变化。这是推断模型偏差的直接结果：如表1和图8所示，与后两种模型相比，前三种模型的模型偏差相对较大。从图8可以看出，所有模型的模型偏差指数先验分布提供的信息都相对有限。

与不考虑模型偏差的分析相比，对于存在显著偏差的模型，预测后验能够更可靠地量化不确定性。例如，对比未推断模型偏差和推断模型偏差时的牛顿模型结果（分别见图4a和图7a），可以发现，推断模型偏差后的预测涵盖了实验观测。相比之下，忽略模型偏差时，不确定性带无法解释实验观测。对于偏差较小的模型，例如图4e和图7e所示的双黏度幂律模型，这种根本差异并不显著。

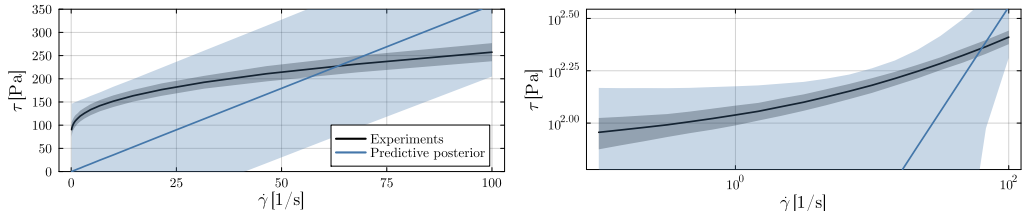
图9展示了计算得到的模型可信度，印证了预测后验分布（图7）中的定性观察结果。牛顿型、宾汉和双黏度模型的可信度仍然可以忽略不计，因为这些模型无法模拟屈服应力和/或剪切变稀行为；图8中相对较大的模型偏差也反映了这一点。对于偏差较小的模型，即 Herschel-Bulkley模型和双黏度幂律模型，结果与忽略模型误差时的情况只有轻微差异。这是预期之中的，因为这些模型推断出的模型偏差非常小（图8）。不过，与忽略模型偏差时相比，可信度估计量的方差有所降低，这表明对噪声进行推断能使可信度计算更加可靠。

5 挤压流中的本构模型选择

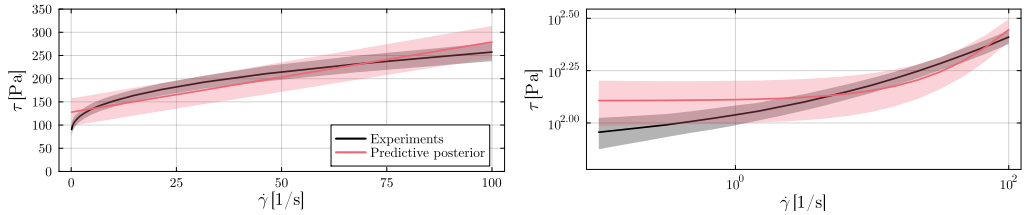
本节中，我们针对一种更复杂的流体流动——即挤压流，探讨贝叶斯模型选择。第5.1节介绍实验装置，并讨论数据采集流程。第5.2节介绍第3节所述适用流变定律对应的挤压流模型。随后，我们在第5.3节详细说明概率设定，但暂不涉及流变学先验的具体设定。第5.4节中，我们探讨两种不同的模型选择方法。第一种方法称为流变信息引导的推断，我们根据第4节所讨论的推断，为流变参数定义先验信息。第二种方法称为专家信息推断，我们不采用流变测量，而是依赖由专家意见提供信息的宽泛先验分布。

5.1 实验数据采集

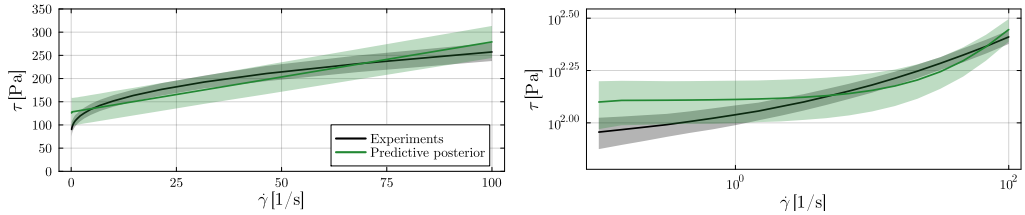
我们采用 Rinkens 等人 [37] 所述的挤压流实验装置；见图10a。该系统由两块平行板组成，用于压缩置于两板之间的流体。摄像机位于



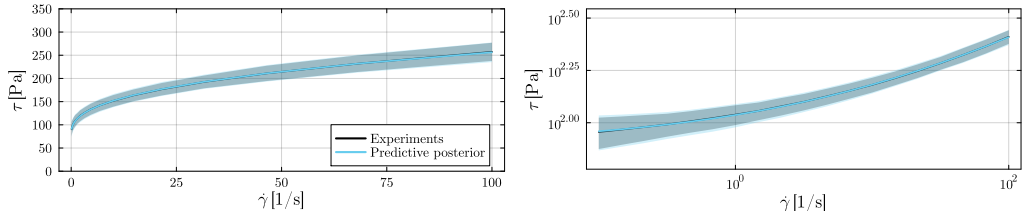
(a) 牛顿型



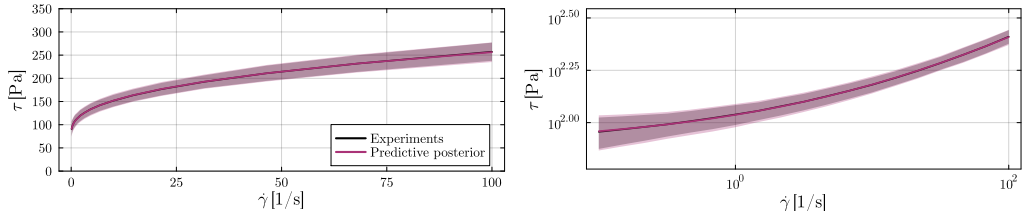
(b) 宾汉



(c) 双黏度

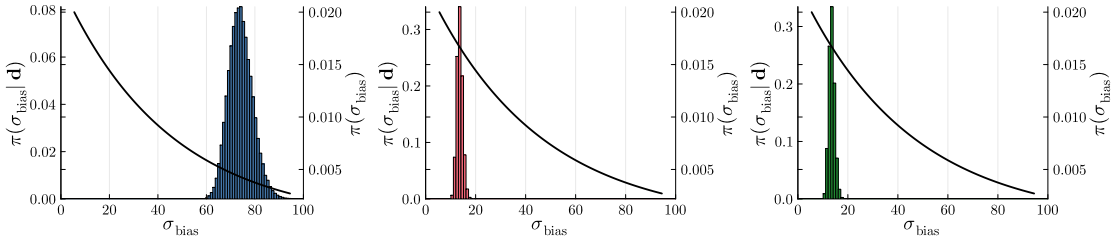


(d) Herschel-Bulkley

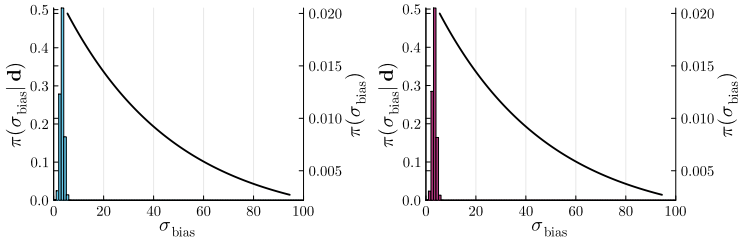


(e) 双黏度幂律

图7：推断模型偏差时各模型的预测后验分布。左列以线性尺度显示所有模型，右列则以对数尺度显示相同的结果。



(a) 牛顿型　(b) 宾汉　(c) 双黏度



(d) Herschel-Bulkley　(e) 双黏度幂律

图8：所有流变模型推断出的模型偏差的后验分布（直方图）与先验分布（黑线）。

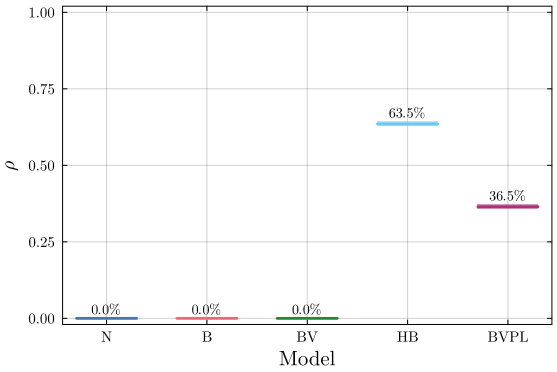
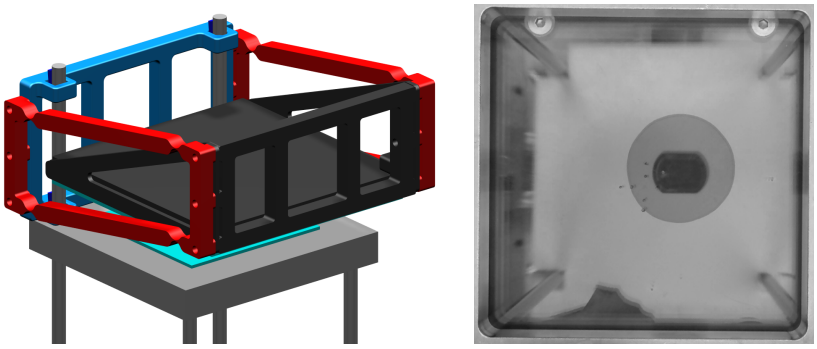
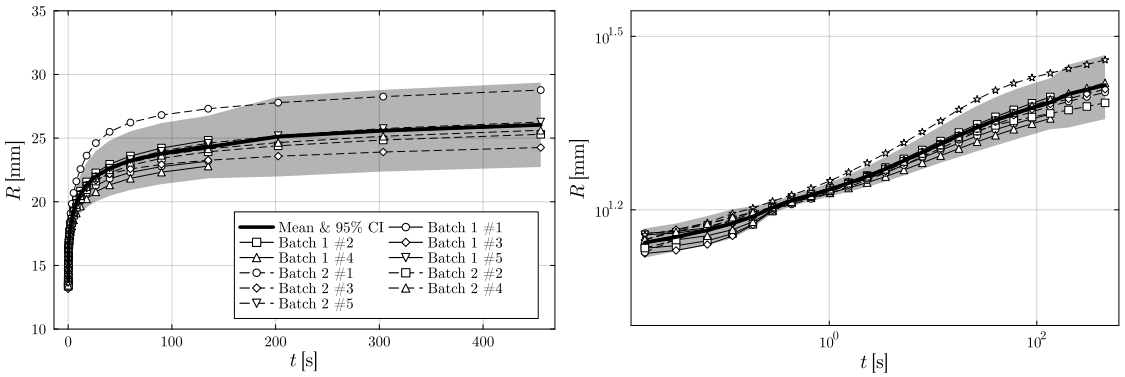


图9：牛顿型（N）、宾汉（B）、双黏度（BV）、Herschel-Bulkley（HB）和双黏度幂律（BVPL）流变模型及其推断出的模型偏差的可信度。



(a) 装置示意图　　(b) 相机图像

图10：挤压流实验。



(a) 线性尺度　　(b) 对数尺度

图11：两个材料批次的 Carbopol 980 挤压流数据。

装置能够捕捉流体的运动，如图10b所示。通过一组板簧保持平板平行运动。顶板安装在支撑结构上，该结构特意涂成黑色，以便对记录的图像进行后处理。装置上部的自重约为350 g。通过施加配重来减小作用于流体上的力。经实验发现，净重为150 g（即配重为200 g）时，适合研究屈服应力效应显著的流动区域。也就是说，施加的力既足够小，能够保持屈服行为，又足够大，能够降低与板簧刚度等因素相关的实验不确定性。

我们研究的屈服应力流体与第4.1节流变测量中使用的相同，即质量分数为0.5%的 Carbopol 980。由于使用注射器沉积这种流体并不实用，我们使用可拆卸的圆柱形容器来准确控制材料的体积。流体放置到位后，移除圆柱形容器，并降低顶板，直至其接触释放机构。顶板缓慢下降，样品静置五分钟后再开始实验，以尽量减小预加载效应。

我们通过释放上平板开始实验，使其压缩流体。我们使用底部安装的相机记录流体的运动。从视频中提取初始帧和后续帧，以进行后处理。根据这些帧检测流体层的半径 $R(t)$。我们在时间呈指数分布的各个时刻确定半径，即，$t_{j+1} = t_j + \Delta t_j$ 其中 $\Delta t_j = 1.5^j \Delta t_0$ 和 $\Delta t_0 = 17.7$ 毫秒，并将这些数据收集到观测向量 $\boldsymbol{y}_i$ 中。我们共进行了 $n = 10$ 次实验，分为两批，结果如图11所示。请注意，两批实验的持续时间有所不同。

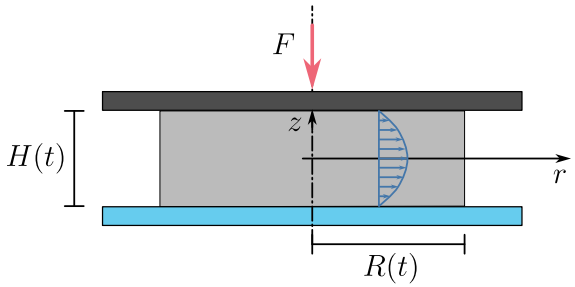


图 12：挤压流模型示意图。

5.2 挤压流模型

我们考虑随时间演变的轴对称区域 $[0, R(t)] \times [-H(t)/2,\ H(t)/2] \ni (r,\ z)$（图12）。由于流体不可压缩，假设沉积流体的体积 V 保持不变。区域的初始高度设为 H_0，对应的半径为 $R_0 = \sqrt{V/(\pi H_0)}$。假设高度远小于半径，因此润滑假设成立 [56]。具体而言，假设区域高度方向上的压力恒定，并且除剪切应力 τ 和剪切速率 $\dot{\gamma} = \frac{\partial v}{\partial z}$ 之外，应力张量和应变率张量的所有分量均可忽略。我们在附录 B.3 中验证这些假设的有效性，并请参阅 Rinkens 等人 [37] 了解详情。在流体与平板的接触处，我们假设满足无滑移条件。在流体前沿处，我们假设毛细效应较小，因此流体压力等于环境压力。

在上述条件下，区域和压力场随时间的演化由以下初边值问题支配：

$$
\begin{cases}
\text{Find } p(r,t) \text{ and } H(t) \text{ for all } r \in [0, R(t)] \text{ and} \\
t \in [0,T], \text{ with } R(t) = \sqrt{V/(\pi H(t))}, \text{ such that:} \\
\quad Q\left(\dfrac{\partial p}{\partial r}\right) = -\dfrac{r}{2}\dfrac{\partial H}{\partial t} \qquad r \in (0, R(t)),\ t \in [0,T], & \text{(30a)} \\
\displaystyle\int_0^{R(t)} pr\,dr = \frac{F}{2\pi} \qquad t \in [0,T], & \text{(30b)} \\
\quad p = 0 \qquad r = R(t),\ t \in [0,T], & \text{(30c)} \\
\quad H = H_0 \qquad t = 0. & \text{(30d)}
\end{cases}
$$

通量与

$$
Q(r) = \int_{-H/2}^{H/2} v(r,z)\,dz \tag{31}
$$

压力梯度 $\frac{\partial p}{\partial r}$ 之间的函数关系可由动量平衡得出：

$$
\begin{cases}
\text{Given } \frac{\partial p}{\partial r},\ \text{find } v(z) \text{ such that:} \\
\tau\left(\dfrac{\partial v}{\partial z}\right) = \dfrac{\partial p}{\partial r} z \qquad z \in (-H/2, H/2), & \text{(32a)} \\
\quad v = 0 \qquad z = \pm H/2. & \text{(32b)}
\end{cases}
$$

代入第3节中介绍的某一种流变模型后，可对该动量平衡方程积分，得到速度分布 $v(z)$ 与压力梯度 $\frac{\partial p}{\partial r}$ 的函数关系；再将其代入方程（31），即可得到通量表达式。

要使挤压流模型（30）在数学上适定，通量与压力梯度之间的函数关系必须可逆。换言之，对于每一个允许的通量，都必须存在唯一对应的压力梯度。宾汉模型和 Herschel-Bulkley 模型等假定材料在低于临界屈服应力时呈现刚性行为（即零流动）的模型，不满足这一条件。在这些模型中，一定范围内的压力梯度都对应零通量，因此不符合可逆性要求。从物理上看，这会导致所谓的挤压流悖论 [57, 58], ，即断言在这类模型下挤压流无法发生。在挤压板中心，剪切速率始终低于屈服阈值，这意味着材料表现为固体而无法被压缩，这与实际挤压流场景中观察到的行为相矛盾。因此，我们在分析中排除宾汉模型和 Herschel-Bulkley 模型。

对于所有考察的模型，即牛顿模型、双黏度模型和双黏度幂律模型，均可解析求解流动剖面问题（32）。求解挤压流模型（30）的主要难点在于，除牛顿型情况外，通量与压力梯度之间的关系都是非线性的，详见附录B.1。附录B.2详细介绍了我们求解这一非线性问题的数值方法。

备注 5（挤压流问题中的剪切速率）。 对于挤压流问题，会出现负剪切速率 $\dot{\gamma}$。因此，必须修订第*3*节中简化的数学描述，以涵盖这些负值。详情请参阅第*3*节中的参考文献。

5.3 概率建模

在贝叶斯框架中，我们对与挤压流实验相关的参数进行概率建模。下文将说明实验参数的先验信息，但不包括与流变模型相关的参数。我们还将定义似然函数，以同时考虑实验噪声和模型偏差。在流变信息引导的推断 （第5.4.1节）和专家信息推断（第5.4.2节）这两种方法中，均使用这些先验分布和似然函数的构造。由于这两种方法中流体参数的先验信息有所不同，因此将在相应章节中分别说明其设定。

5.3.1 设置的先验信息 $\mathbf{p}$

实验参数的先验信息通过额外的独立测量获得。施加力 F 由配重确定。为了施加力，需要从平衡系统中移除配重。移除的配重随后直接决定施加力。为 F 指定对数正态先验分布，以确保其数值符合物理实际。流体体积 V 通过称量样品并除以已知密度来确定，并采用基于十次测量的对数正态分布作为其先验分布。初始半径 R_0 从挤压流实验的初始帧中提取，这里同样采用基于十次测量的对数正态分布。先验分布汇总于表2中。

由于宾汉模型和 Herschel-Bulkley 模型不能用于挤压流（第5.2节），因此我们将这些模型类别的先验概率设为零。对于其他模型类别，我们采用均匀离散先验，即牛顿型、双黏度和双黏度幂律模型，这体现了我们对它们是否适用没有先验信息。

5.3.2 似然函数

挤压流实验的似然函数定义方式与第4.2.2节所述流变测量的似然函数完全相同。似然函数（29）的协方差矩阵同样由实验噪声分量 $\mathbf{\Sigma}_{\boldsymbol{y}}$（基于挤压流实验，第5.1节）以及模型偏差分量组成，其标准差为 σ_{bias} ，并且

表2：不同模型下流变信息分析和专家信息分析的挤压流实验后验。

参数	先验分布	流变信息后验分布			专家信息后验分布		
		Mean	标准差	变异系数	*Mean*	标准差	变异系数
牛顿型							
V [米^3]	$\log\mathcal{N}(7.57\times10^{-7}, 2.78\times10^{-9})$	7.53×10^{-7}	3.58×10^{-9}	0.5%	7.57×10^{-7}	2.60×10^{-9}	0.3%
R_0 [米]	$\log\mathcal{N}(1.37\times10^{-2}, 4.25\times10^{-5})$	1.37×10^{-2}	4.41×10^{-5}	0.3%	1.37×10^{-2}	4.08×10^{-5}	0.3%
F [N]	$\log\mathcal{N}(1.50, 0.15)$	3.79×10^{-1}	6.68×10^{-2}	17.6%	1.55	1.74×10^{-1}	11.3%
双黏度							
V [米^3]	$\log\mathcal{N}(7.57\times10^{-7}, 2.78\times10^{-9})$	7.58×10^{-7}	2.82×10^{-9}	0.4%	7.57×10^{-7}	2.78×10^{-9}	0.4%
R_0 [m]	$\log\mathcal{N}(1.37\times10^{-2}, 4.25\times10^{-5})$	1.38×10^{-2}	3.94×10^{-5}	0.3%	1.37×10^{-2}	3.50×10^{-5}	0.3%
F [N]	$\log\mathcal{N}(1.50, 0.15)$	3.02	1.95×10^{-1}	6.4%	1.53	1.45×10^{-1}	9.5%
双黏度幂律							
V [m^3]	$\log\mathcal{N}(7.57\times10^{-7}, 2.78\times10^{-9})$	7.57×10^{-7}	3.43×10^{-9}	0.5%	7.57×10^{-7}	2.64×10^{-9}	0.3%
R_0 [m]	$\log\mathcal{N}(1.37\times10^{-2}, 4.25\times10^{-5})$	1.37×10^{-2}	5.10×10^{-5}	0.4%	1.37×10^{-2}	3.88×10^{-5}	0.3%
F [N]	$\log\mathcal{N}(1.50, 0.15)$	3.63	1.99×10^{-1}	5.5%	1.48	1.73×10^{-1}	11.7%

表 3： 流变信息和专家信息挤压流动分析的流变学后验分布 .

参数	流变信息后验分布			专家信息后验分布		
	Mean	标准差	变异系数	*Mean*	标准差	变异系数
牛顿型						
η [帕·秒]	6.66	5.88×10^{-1}	8.8%	4.43×10^{1}	5.65	12.8%
σ_{bias} [米]	1.12×10^{-3}	2.06×10^{-4}	18.3%	1.16×10^{-3}	9.37×10^{-5}	8.0%
双黏度						
$\log_{10}\eta_0$ [帕·秒]	2.89	7.97×10^{-3}	0.3%	1.96	7.33×10^{-2}	3.7%
η_1 [帕·秒]	1.66	8.24×10^{-2}	5.0%	6.51	1.02	15.7%
τ_y [帕斯卡]	1.25×10^{2}	2.52	2.0%	5.08×10^{1}	8.12	16.0%
σ_{bias} [米]	1.33×10^{-3}	1.40×10^{-4}	10.5%	2.84×10^{-4}	4.85×10^{-5}	17.0%
双黏度幂律						
$\log_{10}\eta_0$ [帕·秒]	2.95	1.21×10^{-2}	0.4%	2.53	4.23×10^{-1}	16.7%
K [帕·秒^n]	5.07×10^{1}	6.21	12.2%	4.37×10^{1}	7.52	17.2%
τ_y [帕斯卡]	7.51×10^{1}	3.54	4.7%	8.80	5.79	65.7%
n [-]	5.92×10^{-1}	2.61×10^{-2}	4.4%	4.47×10^{-1}	3.64×10^{-2}	8.1%
σ_{bias} [米]	2.84×10^{-4}	6.52×10^{-5}	22.9%	2.03×10^{-4}	4.22×10^{-5}	20.7%

相关函数

$$\rho(t,t') = \exp\left(-\frac{|t-t'|}{l_{\text{bias}}}\right). \tag{33}$$

我们将 相关时间设为 $l_{\text{bias}} = 1\text{s}$，并使用指数
分布 其先验标准差为 $2\times10^{-2}\text{m}$。

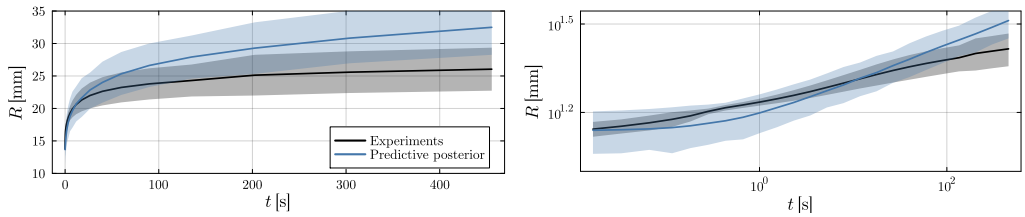
5.4 结果

贝叶斯设定完全确定后，我们现在考虑两种推断情形：流变信息引导的（第5.4.1节）和专家信息引导的（第5.4.2节）。两种情形中，我们都将模型偏差作为超参数。所有结果均基于 MCMC 模拟，每个参数使用两个行走者，每个行走者运行 1000 步。所有链的 Gelman-Rubin 诊断均已收敛，容差为 1.1。

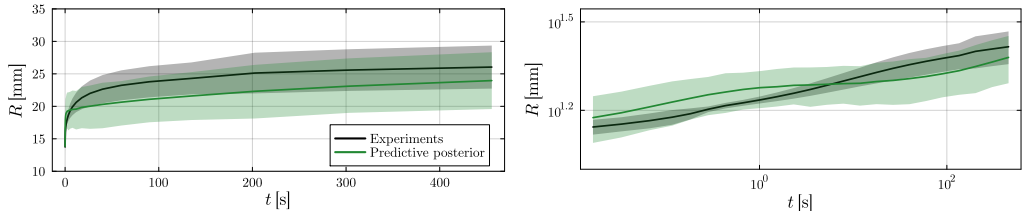
5.4.1 流变信息引导的推断

对于流变信息引导的模型选择，我们将流变测量所得到的后验分布用作先验信息。具体而言，我们考虑纳入模型偏差时得到的后验分布（第4.3.2节）。表1总结了这一先验选择。

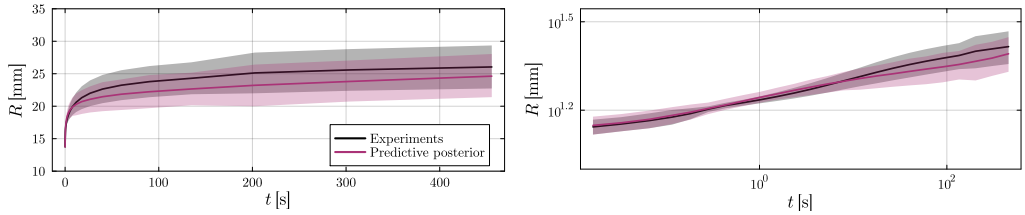
图13展示了牛顿模型、双黏度模型和双黏度幂律模型的预测后验分布。对于前两个模型，在实验的大部分持续时间内，观测到的 95% 可信区间都显著宽于相应实验的置信区间，这表明模型偏差是这些模型不确定性的主要来源。这一点也得到了模型



(a) 牛顿型

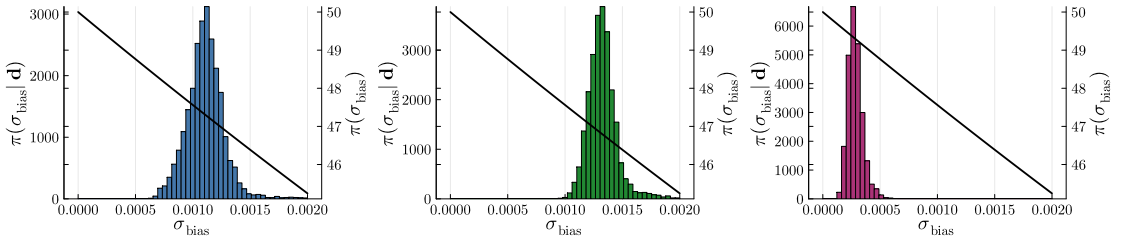


(b) 双黏度



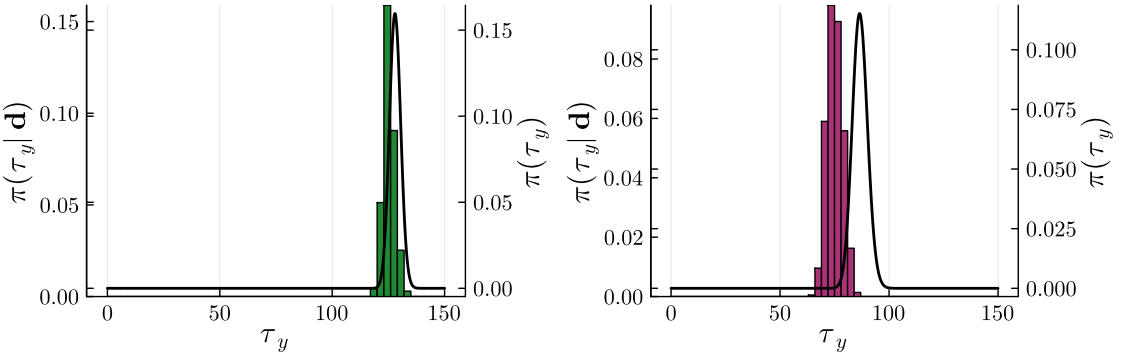
(c) 双黏度幂律

图13：各模型的流变信息驱动的预测后验分布。左列以线性尺度显示所有模型，右列则以对数尺度显示相同的结果。



(a) 牛顿型　　(b) 双黏度　　(c) 双黏度幂律

图14：所有流变学信息辅助模型中推断出的模型偏差的后验分布（直方图）与先验分布（黑线）。



(a) 双黏度　　(b) 双黏度幂律

图15：流变信息模型中推断的屈服应力的后验分布（直方图）与先验分布（黑线）对比。

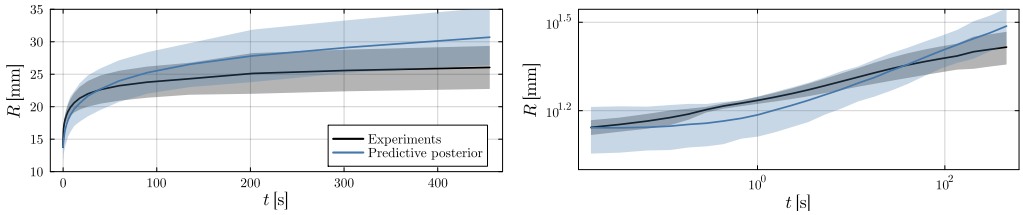
图14所示的偏差分布。对于双黏度幂律模型，可以观察到其模型偏差显著低于另外两个模型，这一点也体现在图13c中其与实验结果的拟合有所改善。在计算模型可信度时，双黏度幂律模型的概率为1，而其他模型的概率为0。然而，即使对于双黏度幂律模型，与实验数据之间的不匹配仍然十分显著。

校准模型与实验之间存在显著不匹配的主要原因在于，先验屈服应力是根据流变稳态剪切测量确定的。这些数值（例如，双黏度模型中屈服应力的均值为128帕，标准差为2.5帕）并不能代表此处所研究的挤压流，因为该流动是非黏度计式的，并且涉及不均匀且混合的变形模式以及瞬态效应。对图15中屈服应力后验分布的考察表明，挤压流推断倾向于降低屈服应力，但其流变信息先验阻止屈服应力降低到足以解释挤压流数据的程度。这意味着屈服应力先验存在严重偏差，导致校准后的力值不切实际地偏高（表2），并造成模型预测不准确。

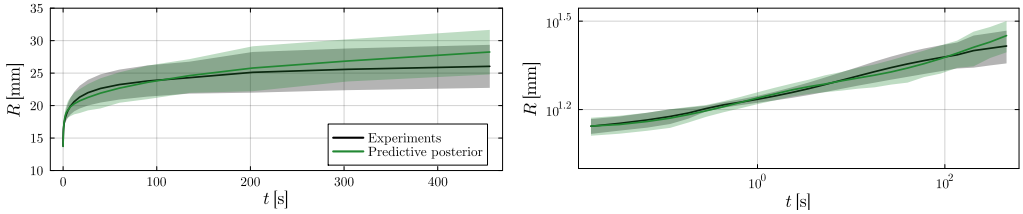
5.4.2 专家信息推断

对于专家信息推断，我们省略了从流变测量中获得的信息。流变模型参数的先验分布与第4节流变推断所用的先验分布相同，汇总见表1。

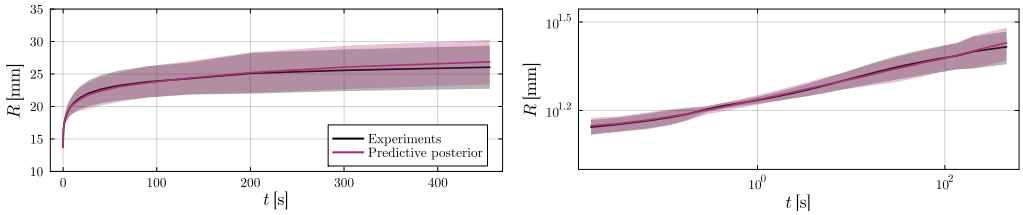
在图　图16展示了此处考虑的专家信息情景的预测后验分布



(a) 牛顿型



(b) 双黏度



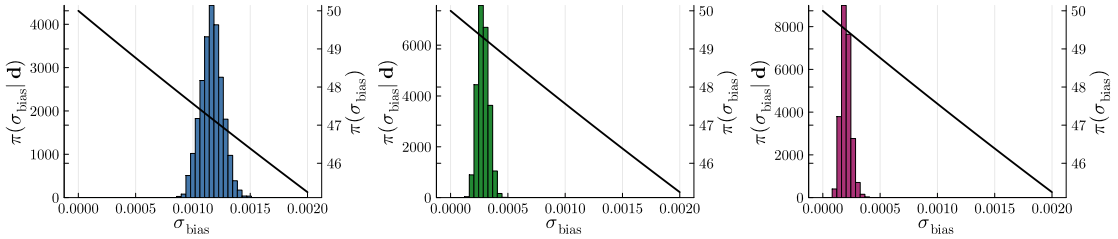
(c) 双黏度幂律

图16：各模型的专家信息引导预测后验分布。左列以线性尺度显示所有模型，右列则以对数尺度显示相同的结果。

。根据所示的可信区间，现在可以清楚地区分所考虑的三种模型。尽管忽略剪切变稀效应的双黏度模型在实验早期能够很好地拟合实验数据，但在后期会偏离数据。这与包含剪切变稀效应的双黏度幂律模型的表现形成对比。图17中的模型偏差分布证实了这一观察结果：推断得到的后者模型偏差低于前者。对于双黏度幂律模型，可以观察到，采用专家信息先验分布时的模型偏差显著小于采用流变信息先验分布时的偏差。在评估可信度时，三种流变模型的专家信息引导案例的概率均为1，而流变信息引导案例的概率均为0。这表明，使用不具代表性的流变信息误导复杂流体流动分析，可能会损害建模准确性并增加不确定性。

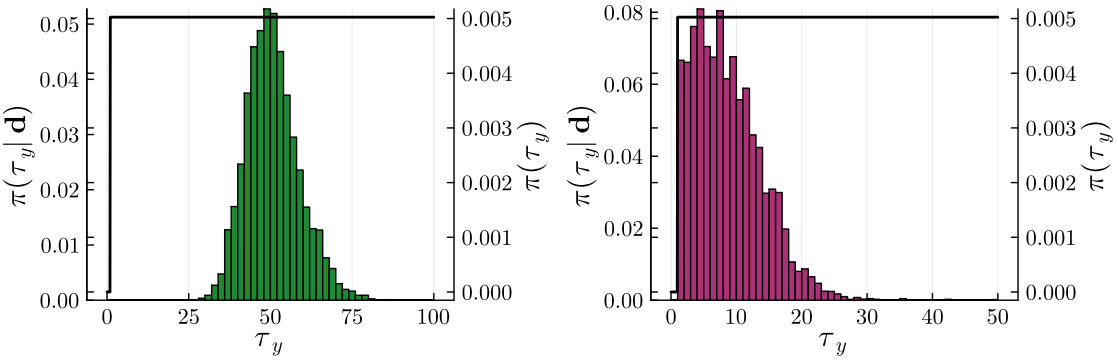
图18展示了双黏度模型和双黏度幂律模型的校准屈服应力。与图15中的流变信息引导案例相比，此处考察的专家信息引导案例得出的屈服应力显著较低。这是因为所有流变参数（包括屈服应力）均采用了较宽的先验分布。校准后的力值（表2）对于专家信息引导案例而言是合理的——这与流变信息引导案例形成对比——因为现在可以通过校准流变参数来解释数据。因此，推断出的流变参数（尤其是屈服应力）的不确定性大幅增加。

需要注意的是，推断出的屈服应力降低，是在整个参数空间内进行校准的结果。该空间上的后验分布显示，各组参数之间存在很强的相关性；见图19。这些相关性使得



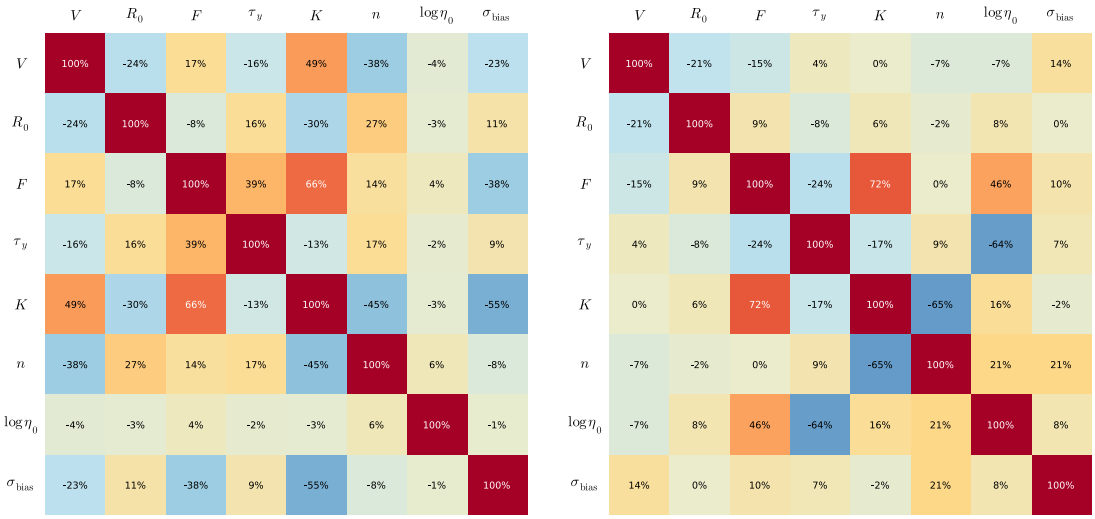
(a) 牛顿型　　(b) 双黏度　　(c) 双黏度幂律

图17：所有专家信息辅助模型推断出的模型偏差的后验分布（直方图）与先验分布（黑线）。



(a) 双黏度　　(b) 双黏度幂律

图18：专家信息模型推断出的屈服应力后验分布（直方图）与先验分布（黑线）。



(a) 流变信息引导案例　　(b) 专家信息引导案例

图19：双黏度幂律模型的相关矩阵。

对校准结果的解读，因为参数的变化并非相互独立。此外，后验分布的相关结构会受到先验分布的强烈影响，因此在流变信息引导案例与专家信息引导案例之间存在显著差异。例如，在专家信息引导案例中，双黏度幂律模型的屈服应力与屈服前黏度之间呈现出强负相关（图19b）。这意味着，如果降低屈服前黏度，屈服应力就会升高。这意味着，当引入倾向于较低屈服前黏度的先验分布时，将会得到较高的屈服应力。将该相关结构与流变信息引导案例（图19a）进行比较时，可以清楚地看到这种对解的引导作用；例如，从中可以观察到，专家信息引导案例中屈服应力与屈服前黏度之间的强相关性，被针对流变参数所设定的高度信息化先验分布抑制了。这凸显了在贝叶斯分析中谨慎选择先验分布的重要性。

6 结论与建议

我们采用贝叶斯模型选择，对比了适用于屈服应力流体的多种广义牛顿型本构模型，涵盖流变学和更复杂的流体流动情形。本研究包括使用旋转流变仪对 Carbopol 980 进行的流变测量，并以同一流体的挤压流实验作为复杂流动案例。

在流变学情形中，我们考察了在推断过程中纳入模型偏差的影响。在挤压流情形中，我们探讨了两种不同的方法：流变信息引导的推断和专家信息推断。在流变信息方法中，我们将基于流变测量进行贝叶斯推断所得的后验分布，作为挤压流分析的先验信息。在专家信息方法中，我们采用无信息先验。第一种方法模拟了可进行详细实验室实验的情形，而第二种方法则对应于缺乏流体详细特性表征、需要预测复杂流动的情形。

在流变学背景下，我们发现，纳入或排除模型偏差对模型相对可信度排名的影响有限。然而，排除模型偏差会造成预测置信度较高的误导性印象，尤其是在对超出

观测数据范围的情况进行外推时。未能捕捉所研究屈服应力流体关键流变特征的模型，例如牛顿型、宾汉和双黏度模型，表现出显著的建模误差。这些误差直接导致较低的可信度得分。拟合数据良好的模型，即即Herschel–Bulkley模型和双黏度幂律模型，无法仅根据建模误差加以区分。在这些情况下，观测噪声主导了不确定性，而贝叶斯模型选择倾向于避免不必要的复杂性参见 奥卡姆剃刀。

关于引入不必要的复杂性，我们发现双黏度幂律模型的可信度对屈服前黏度先验分布的选择十分敏感。当将先验分布引向相对较大的数值时，Herschel-Bulkley模型与双黏度幂律模型的可信度趋于一致，因为此时双黏度幂律模型会收敛至Herschel-Bulkley模型。当将先验分布引向较小的数值时，Herschel-Bulkley模型变得更有可能，因为此时先验分布涵盖了与实验数据不一致的屈服前黏度。这些观察结果凸显了先验分布设定与模型排序之间的相互作用，并强调了在贝叶斯框架中谨慎选择先验分布的重要性。

对于挤压流问题，流变学信息方法所得的模型预测与实验观测之间存在显著差异，即使是纳入了关键物理机制的模型也不例外。相比之下，专家信息方法对挤压流数据的拟合效果显著更好。流变学信息方法无法解释数据的根本原因在于其先验分布，这些先验分布使模型倾向于给出远高于专家信息方法推断值的屈服应力值。这种差异归因于挤压流中存在的应力状态比标准流变测量中遇到的更为复杂。专家信息的双黏度幂律模型对挤压流数据的解释效果最佳。研究发现，该模型的偏差远低于其他任何模型，因此其模型可信度非常高。

这些发现凸显了在复杂流动情景中对屈服应力流体进行建模所面临的众所周知的挑战：仅基于简单流变测试进行流体表征，可能会导致误导性预测。虽然通过流变测量似乎能够准确推断屈服应力，但将其直接应用于复杂流动环境会引入偏差，进而可能导致预测结果与观测行为显著不符。贝叶斯模型选择框架的一项主要优势，是能够量化这种模型偏差，从而揭示在复杂流动环境中进行流变推断的局限性。如果无法获得详细的流变学表征，贝叶斯框架则允许专家明确考虑不确定性，从而有助于在本质上充满不确定性的环境中开展决策。

我们的贝叶斯框架依赖马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）采样器，而要获得准确结果，至少需要进行数千次模型评估。因此，该框架目前依赖于能够快速评估的模型，这对可纳入框架的模拟复杂度造成了实际限制。为应对这一挑战，需要采取若干互补措施。首先，高性能计算技术（如并行化和GPU加速）能够显著缩短计算时间。其次，开发降阶建模（ROM）方法至关重要，这有助于在不损害计算可行性的前提下，集成更先进的模拟，例如基于有限元的模型。第三，更高效的贝叶斯定理计算方法可进一步加快推断过程。这些技术共同助力将该框架拓展至具有工业应用价值的场景。要确保在实际部署中的稳健性和可靠性，评估收敛性与采样质量方面的理论进展仍至关重要。

从屈服应力流体本构建模的角度来看，可以考虑广泛的其他效应，包括弹黏塑性、触变性、时效、空间非均匀性和温度依赖性。其他效应，如复杂的边界条件（例如壁面滑移）和几何效应，也可以纳入模型。贝叶斯不确定性量化通过其内在的奥卡姆剃刀效应，为评估此类模型扩展是否有可用数据支持提供了一种自然的方法；这些模型扩展通常会引入额外的复杂性。最后，我们注意到，正如在VPF研讨会期间进行了深入讨论的那样，材料制备和实验设置中的实验室间和实验室内变异性可能导致显著的不确定性。

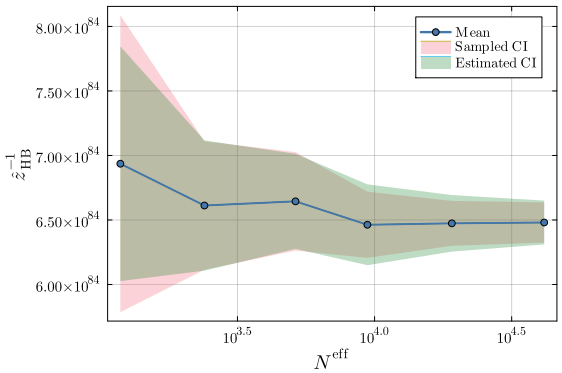


图20：逆证据估计量对（有效）样本量的依赖关系。所示的95%置信区间（CI）基于十条独立链的方差（抽样 CI）以及方差估计 Var $\left[\hat{z}^{-1}{}_{\mathrm{HB}}\right]$（估计 CI）。

贝叶斯不确定性量化为应对这些挑战提供了一个结构化且严谨的框架。

致谢

CV 和 NJ 的研究工作部分由埃因霍温人工智能系统研究所（EAISI）EMDAIR 计划中的 DA MOCLES 项目资助。

关于在稿件准备过程中使用生成式 AI 和 AI 辅助技术的声明

在准备这项工作期间，作者使用 Microsoft Copilot 进行文本编辑。使用该服务后，作者对内容进行了审阅并按需编辑，并对已发表文章的内容承担全部责任。

模型证据方差估计量

为评估模型证据估计量（9）的质量，我们在此研究其在不同样本量下的近似表现；针对每种样本量，使用十条独立生成的马尔可夫链。我们的分析基于对粗糙板流变测量数据进行 Herschel-Bulkley 模型校准，并纳入模型偏差。

图20展示了不同样本量下估计的逆证据，$\hat{z}^{-1}{}_{\mathrm{HB}}$。所示均值为十条独立链的平均值。抽样得到的95%置信区间基于各链的标准差，而估计的置信区间则对应于证据方差估计量（13）在独立链上的平均值。图20表明，随着样本量增加，估计量逐渐收敛。此外，观察发现，证据方差估计值与基于十条独立链计算的结果吻合良好。

在图21中，通过将基于十条独立链计算得到的证据估计量的标准差，与使用公式（13）计算得到的标准差进行比较，详细研究了样本量增加所带来的精度提升。可以观察到，这些方差估计值具有良好的一致性，并且二者都随着样本量的平方根收敛，这与理论预期一致。总之，可以观察到，估计量（13）能够提供证据估计量（9）的方差的良好估计，而且该估计量可基于单条链进行评估。

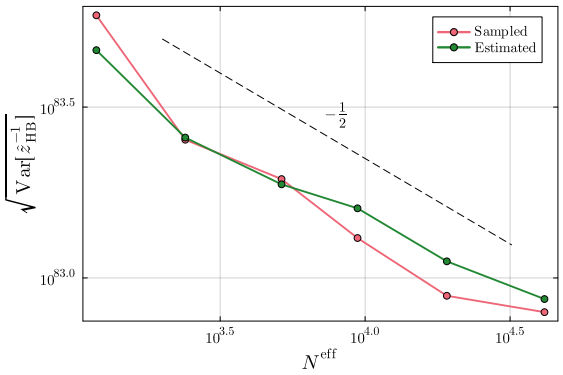


图21：证据估计量方差的收敛性，将十条独立链得到的方差（采样值）与使用估计量 $\mathrm{Var}\left[\hat{z}^{-1}_{\mathrm{HB}}\right]$ 计算的方差（估计值）进行比较。

B 挤压流求解器

本附录讨论所开发的挤压流求解器。在附录B.1中，我们首先详细介绍各种流变模型的通量关系。在附录B.2中，我们随后详细介绍数值求解过程。最后，在附录 B.3中，我们对数值挤压流模型进行验证与确认。

B.1 速度分布与通量

对于第3节中的每种流变模型，均可使用方程（32）求得挤压流速度分布。这里推导双黏度幂律模型的速度分布，因为其他所有流变模型都是它的特例。

对方程（32）积分可得 $z \in [-H/2, H/2]$ 的速度分布 $v(z)$，其表达式为

$$v(z) = \begin{cases} v_u(z) & |z| < w_y \quad \text{(unyielded)}, \\ v_y(z) & |z| \geq w_y \quad \text{(yielded)}, \end{cases} \tag{34}$$

其中

$$w_y = \begin{cases} \frac{H}{2} & \tau_y \geq |p'|\frac{H}{2}, \\ \frac{\tau_y}{|p'|} & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{35}$$

是中心未屈服区与平板附近屈服区之间的边界。方程（34）中的速度贡献为

$$v_u(z) = \frac{n}{(n+1)\sqrt[n]{K}p'}\left(\left(|p'|w_y - \tau_0\right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(|p'|\tfrac{H}{2} - \tau_0\right)^{\frac{n+1}{n}}\right) + \frac{p'}{2\eta_0}\left(z^2 - w_y^2\right), \tag{36a}$$

$$v_y(z) = \frac{n}{(n+1)\sqrt[n]{K}p'}\left(\left(|p'|z - \tau_0\right)^{\frac{n+1}{n}} - \left(|p'|\tfrac{H}{2} - \tau_0\right)^{\frac{n+1}{n}}\right), \tag{36b}$$

其中 $p' = \frac{\partial p}{\partial \bar{r}}$。

请注意，对于正的屈服应力和有限的压力梯度，中心处始终会存在一个小的未屈服区域。随着压力梯度的大小减小，未屈服区域的宽度会增大参见 方程（35），直到 $w_y = \frac{H}{2}$ 时不再发生屈服。另请注意，屈服边界定义（35）考虑的是剖面上半部的边界位置，而在剖面下半部 $z = -w_y$ 处还存在一个对称的屈服边界。

将方程（36b）代入方程（31）后，可得到双黏度幂律模型的通量关系解析形式：

$$Q = Q_u + Q_y, \tag{37}$$

with

$$Q_u = \frac{2nw_y\left((|p'|w_y-\tau_0)^{\frac{n+1}{n}} - (|p'|\frac{H}{2}-\tau_0)^{\frac{n+1}{n}}\right)}{(n+1)\sqrt[n]{K}p'} - \frac{2p'w_y^3}{3\eta_0}, \tag{38a}$$

$$Q_y = \frac{2n^2\left((|p'|\frac{H}{2}-\tau_0)^{\frac{2n+1}{n}} - (|p'|w_y-\tau_0)^{\frac{2n+1}{n}}\right)}{(n+1)(2n+1)\sqrt[n]{K}p'|p'|} - \frac{n(H-2w_y)(|p'|\frac{H}{2}-\tau_0)^{\frac{n+1}{n}}}{(n+1)\sqrt[n]{K}p'}. \tag{38b}$$

Herschel-Bulkley模型的通量可通过设定 $\eta_0 \to \infty$ 并将 τ_0 替换为τ_y得到。将 n 设为 1 可得到双黏度模型。结合这些修改即可得到宾汉模型。最后，将 $w_y = \frac{H}{2}$ 设定并用 η替换 η_0 ，即可得到牛顿模型。需要注意的是，通过对方程（38b）进行其他简化，也可以得到牛顿模型。

B.2 非线性求解过程

为求解非线性问题（30），我们将区域离散为 N_r 个大小为 ΔR（t_i） $=R$（t_i）$/N_r$的网格段，其中 t_i 为按照大小为 N_t的几何级数排列的离散时间点，初始时间步长设为 $\Delta t_0 = t_1 - t_0$。

对于每个时间点，我们通过求解方程（30a）至（30c）来计算高度变化率，并显式更新高度，公式为

$$H(t_{i+1}) = H(t_i) + \Delta t\dot{H}(t_i), \tag{39}$$

which we initialize using equation (30d). The corresponding radius follows as $R(t_i) = \sqrt{V/(\pi H(t_i))}$.为了确定任意时刻的高度变化率 H，我们求解方程(30b)的离散形式，即，

$$\sum_{j=1}^{N_r} \bar{p}_j(\dot{H})\bar{r}_j\Delta R = \frac{F}{2\pi}, \tag{40}$$

其中，$\bar{p}_j = \frac{1}{2}(p_{j-1}+p_j)$ 和 $\bar{r}_j = \frac{1}{2}(r_{j-1}+r_j)$ 以及 $j = 1$、.....、N_r 分别为中点压力和半径。利用边界条件 (30c)，可得离散压力：

$$p_j = \Delta p(H) - \Delta R\sum_{k=j+1}^{N_r} \bar{p}'_k, \tag{41}$$

其中，中点压力梯度由方程 (30a) 得出：

$$\bar{p}'_k = Q^{-1}\left(-\frac{\bar{r}_k\dot{H}}{2}\right). \tag{42}$$

我们使用 Newton-Raphson 迭代求解非线性问题 (40)，并用于通量关系 (42) 的反演。为提高这一嵌套牛顿迭代过程的稳健性，我们在牛顿算法中加入一个解的搜索区间；如果牛顿步给出的更新值超出该区间 [59]，则改用二分更新。此外，我们根据外层牛顿算法的迭代次数和预测的高度变化率，对几何级数进行自适应时间步细化。如果相对高度变化 $|H\Delta t_i/H(t_i)|$大于设定的最大值，则限制时间步，使其与该最大值相匹配。

我们使用高性能的 Julia [60] 软件包实现了挤压流求解器。

表4：验证与核验场景的参数。

参数		数值
流体		
	η_0	1.00×10^{5} 帕·秒
	K	5.00×10^{1} 帕·秒^{n}
	τ_y	1.00×10^{1} 帕·秒$^{-1}$
	n	5.00×10^{-1}
实验		
	R_0	1.00×10^{-2}米
	V	1.00×10^{-6}米^3
	F	1.00 牛
	T	1.00×10^{2}秒

参数		数值
参考情形		
	N_t	8192
	N_r	256
	Δt_0	1.22×10^{-4}秒
优化情形		
	N_t	256
	N_r	8
	Δt_0	1.95×10^{-3}秒

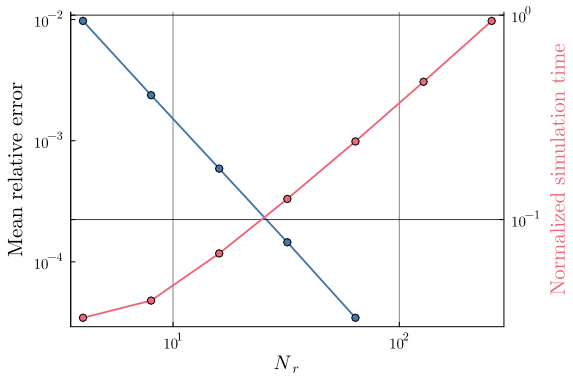


图 22：网格收敛结果

B.3 验证与确认

为了优化挤压流求解器的网格尺寸和时间步长，我们分别在附录 B.3.1 和附录 B.3.2 中研究了这些离散化参数。在附录 B.3.3 中，我们使用高保真有限元解验证了求解器的结果。

在验证与核验研究中，我们采用表4中的代表性测试场景。在 $t \in [0.125, 0.25, 0.5, \ldots, 32.0, 64.0]$ [s],处测量半径的相对误差，这与我们后处理实验结果的方式相似。误差是相对于表4中的参考设置定义的。仿真时间按参考情形进行归一化。

B.3.1 网格收敛

图 22 显示了不同网格尺寸下，所有测量时间的半径相对误差平均值。时间步数和初始时间步长保持为参考值。可以观察到，误差随网格尺寸线性收敛；当网格段数为 $N_r = 8$ 时，误差为 0.2 %。图中还显示了对应的相对仿真时间，结果表明其随网格段数线性缩放。当网格段数为 $N_r = 8$ 时，仿真时间比参考设置短一个数量级。

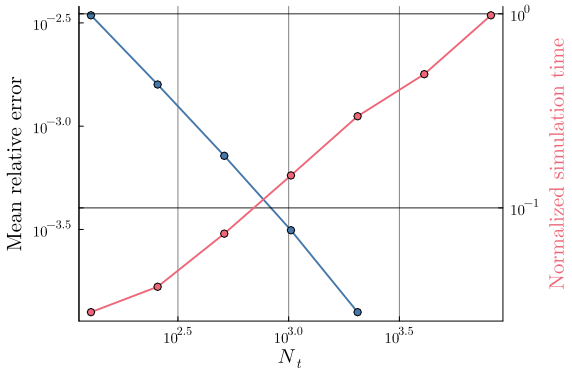


图2 3：时间步数收敛性结果

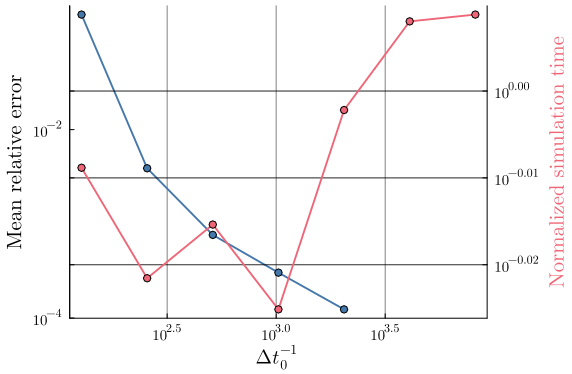


图2 4：初始时间步长收敛性结果

B.3.2 时间步长收敛性

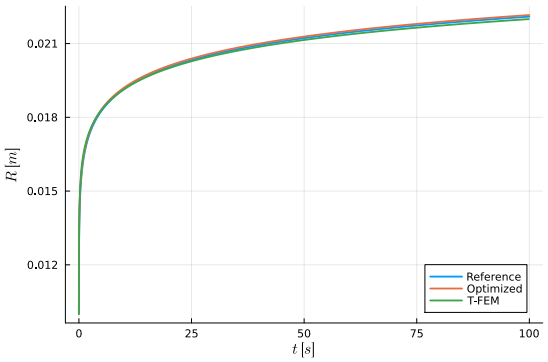
图23显示了误差随时间步数的变化，其中网格尺寸和初始时间步长保持为参考值。可以观察到，误差随时间步长线性减小。当时间步数为 $N_t = 256$ 时，相对误差为 0.2%。图中还显示了对应的仿真时间，其呈线性缩放；当时间步数为 $N_t = 256$ 时，仿真时间比参考情形短一个数量级。

图2 4展示了初始时间步长的收敛行为。当初始时间步长为 $\Delta t_0 = 1.95$毫秒时，观察到平均误差相较于参考解小于0.1%。仿真时间几乎不受初始时间步长的影响，因为它不会影响时间步数。

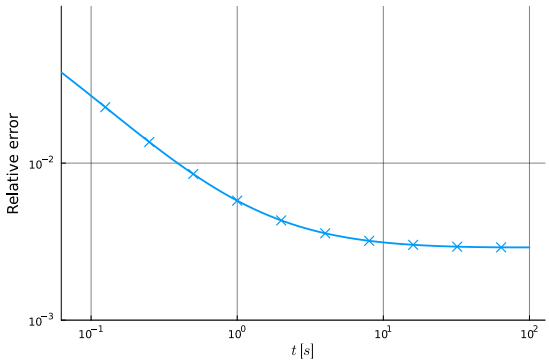
B.3.3 与全维有限元解的比较

基于上述收敛性研究，我们确定了表4所列的优化设置。如图25所示，相对半径误差平均约为 0.2%，与我们研究的不确定性相比可以忽略不计。事实上，检查半径演化曲线（图25a）时，几乎观察不到参考情形与优化情形之间的差异。优化情形的仿真时间比参考情形短200倍，这意味着在现代个人计算机上的优化单核模拟时间远低于一秒。

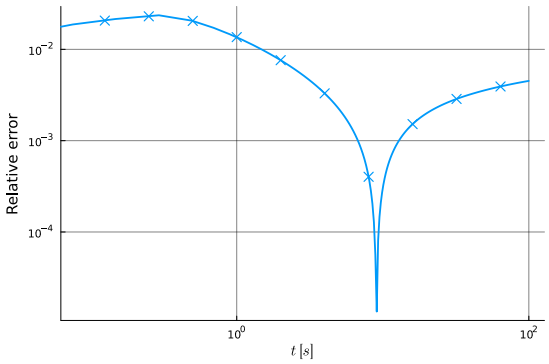
为验证我们的挤压流模型，我们将其结果与基于全维斯托克斯方程的高保真有限元（FEM）结果进行比较。在有限元模拟中，采用柱坐标系求解动量平衡和质量守恒，并使用



(a) 半径演化



(b) 优化误差



(c) T-FEM误差

图25：时间误差分析

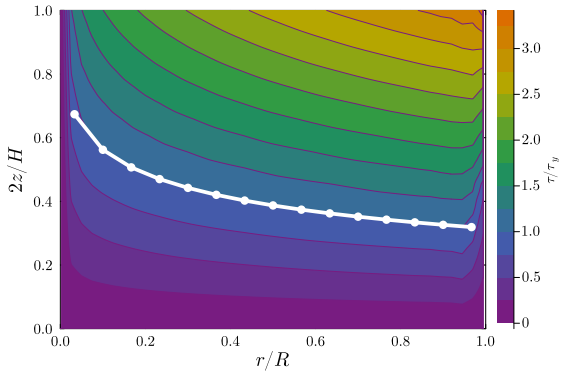


图26：高保真有限元模拟（等值线）与我们的挤压流模型（白线）的屈服边界对比。

利用轴对称性，该问题在二维区域上求解。保留完整的变形率张量 $\boldsymbol{D}$ 和应力张量 $\boldsymbol{\tau}$，即不假设其中任何分量可以忽略。与润滑假设不同，这意味着在此处使用的柱坐标系中，除了剪切分量外，应力张量的对角线上也可以有非零分量。

为保证数值稳定性，我们采用 Papanastasiou [54] 对 Herschel-Bulkley模型进行正则化，得到应力：

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta(\dot{\gamma}_{\mathrm{e}})\boldsymbol{D} \quad \text{with} \quad \eta(\dot{\gamma}_{\mathrm{e}}) = K\dot{\gamma}_{\mathrm{e}}^{n-1} + \frac{\tau_{\mathrm{y}}(1-\exp(-\varrho\dot{\gamma}_{\mathrm{e}}))}{\dot{\gamma}_{\mathrm{e}}}, \tag{43}$$

其中，$\dot{\gamma}_{\mathrm{e}} = \sqrt{2\boldsymbol{D}:\boldsymbol{D}}$为有效剪切速率，$\varrho$ 为正则化参数。当 ϱ 趋于无穷大时，Papanastasiou模型趋近于 Herschel-Bulkley 模型。

非线性方程组采用自编有限元代码求解。为处理非线性，先进行若干次 Picard迭代，然后进行 Newton-Raphson迭代。为提高模拟效率，我们利用问题关于中平面的对称性，即仅模拟区域的一半。在顶壁上施加一个力，并设置约束以确保整个壁面以相同速度移动。随后将壁面的速度作为未知量求解，并使用前向欧拉时间推进格式更新区域。流体的自由表面保持平直，并通过移动自由表面来守恒体积。速度/压力采用等参数四边形 Q_2/Q_1 （Taylor-Hood）单元。使用由 20×20 个单元构成的网格，结果表明该网格可获得收敛解。

有限元模拟对半径演化的预测如图25a所示，可以看出两者仅存在细微差异。半径随时间变化的相对误差如图25c所示，平均误差保持在1%以下。图26比较了我们的优化的挤压流求解器与有限元模拟在 $t = T$ 时对屈服面的预测。有限元结果由剪切应力等值线表示，τ_{rz}，并以屈服应力 τ_y 归一化。也就是说，屈服面对应数值为1的等值线。对于我们的挤压流模型，屈服面的高度由方程（35）给出。可以看出，我们的模型在整个区域内都能非常准确地预测屈服面，最明显的差异来自边界条件的施加方式。查看图27中的速度剖面时，也可以观察到我们的优化模型与完整有限元模拟之间存在细微差异。

参考文献

[1] P.-G. d e Gennes. 软物质（诺贝尔演讲）。《德国应用化学》国际版 *i* 英语31(7):842–845，1992年。

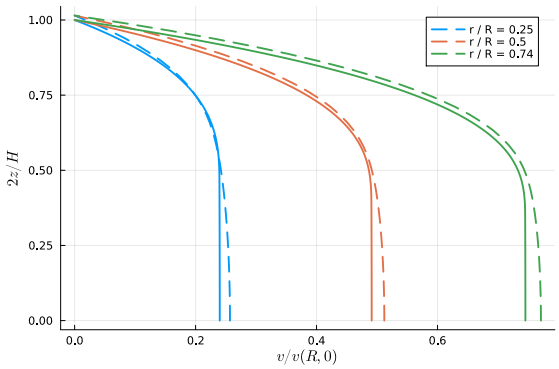


图27：高保真有限元模拟（虚线）与我们的挤压流模型（实线）的速度分布对比。

[2] D. Bonn、M. M. Denn、L. Berthier、T. Divoux 和 S. Manneville。《软凝聚态物质中的屈服应力材料》。《现代物理评论》，89(3):035005，2017年。[3] R. G. Larson。《复杂流体的结构与流变学》。牛津大学出版社，1999年。[4] P. Coussot。屈服应力流体流动：实验数据综述。《非牛顿流体力学杂志》，211:31–49，2014年。doi：10.1016/j.jnnfm.2014.05.006。[5] D. De Kee。屈服应力测量技术：综述。《流体物理学》，33(11)，2021年。[6] J. T. Oden、I. Babuˇska 和 D. Faghihi。预测计算科学：存在不确定性时的计算机预测。《计算力学百科全书》，第1–26页，2017年。[7] D. J. C. MacKay。《信息论、推理与学习算法》。剑桥大学出版社，英国剑桥，2003年。[8] M. Dinkgreve、J. Paredes、M. M. Denn 和 D. Bonn。关于测量“屈服应力”的不同方法。《非牛顿流体力学杂志》，238:233–241，2016年。[9] M. Dinkgreve、M. Fazilati、M. M. Denn 和 D. Bonn。卡波姆：从简单屈服应力流体到触变性屈服应力流体。《流变学杂志》，62(3):773–780，2018年。[10] P. R. Varges、Camila M. Costa、B. S. Fonseca、M. F. Naccache 和 P. R. de Souza Mendes。水及水/甘油溶液中Carbopol®分散体的流变学表征。《流体》，4(1):3，2019年。[11] I. A. Gutowski、D. Lee、J. R. de Bruyn 和 B. J. Frisken。卡波姆分散体的标度与介观结构。《流变学学报》，51(5):441–450，2012年。[12] Z. Jaworski、T. Spychaj、A. Story 和 G. Story。卡波姆微凝胶作为屈服应力流体模型。《化学工程评论》，38(7):881–919，2022年。[13] B. Rabideau、C. Lanos 和 P. Coussot。挤压流作为测定屈服应力的可行技术之研究。《流变学学报》，48(3):245–253，2009年。[14] M. T. Hossain 和 R. H. Ewoldt。原流变学。《流变学杂志》，68(1):113–126，2024年。[15] M. T. Hossain、R. Tiwari 和 R. H. Ewoldt。实践中的原流变学：避免误解。《胶体与界面科学当前观点》，74:101866，2024年。[16] M. C. Marsh、M. T. Hossain 和 R. H. Ewoldt。蛋黄作为凝胶化模型：从流变测量到流动物理学。《流体物理学》，37(4)，2025年。

[17] P. Coussot。《屈服应力流体的五十种面貌：流变学挑战与工程视角》。《流变学学报》，64:167–193，2025。[18] E. C. Bingham。《塑性流动定律的研究》。第278号。美国政府印刷局，1917。[19] E. C. Bingham。《流动性与塑性》。麦格劳-希尔图书公司，1922。[20] W. H. Herschel 和 R. Bulkley。橡胶-苯溶液的稠度测量。《胶体杂志》，39(4):291–300，1926。[21] P. C. F. Møller、J. Mewis 和 D. Bonn。屈服应力与触变性：实践中测量屈服应力的困难。软物质，2(4):274–283，2006。[22] Paulo R. de Souza Mendes 和 R. L. Thompson。弹黏塑性触变建模的批判性综述。《非牛顿流体力学杂志》，187:8–15，2012。[23]Paulo R. de Souza Mendes 和 R. L. Thompson。弹黏塑性触变屈服应力材料与表观屈服应力流体的统一建模方法。《流变学学报》，52(7):673–694，2013。[24] Y. M. Joshi 和 G. Petekidis。屈服应力流体与老化。《流变学学报》，57(6):521–549，2018。[25] R. G. Larson 和 Y. Wei。触变性及其流变建模综述。《流变学杂志》，63(3):477–501，2019。[26] P. Saramito。弹黏塑性流体流动的新本构方程。《非牛顿流体力学杂志》，145(1):1–14，2007。[27] G. Pagani、M. Hofmann、L. E. Govaert、T. A. Tervoort 和 J. Vermant。无需屈服应力：简单屈服应力流体中的应力激活流动。《流变学杂志》，68(2):155–170，2024。[28] K. M. Kamani 和 S. A. Rogers。软物质中的脆性与延性屈服。《美国国家科学院院刊》，121(22):e2401409121，2024。[29] J. B. Freund 和 R. H. Ewoldt。定量流变模型选择：利用贝叶斯推断比较良好拟合与可信模型。《流变学杂志》，59(3):667–701，2015。[30] J. Kim、P. K. Singh、J. B. Freund 和 R. H. Ewoldt。广义牛顿流体流动模拟预测中的不确定性传播。《非牛顿流体力学杂志》，271:104138，2019。[31] P. K. Singh、J. M. Soulages 和 R. H. Ewoldt。关于用于参数估计的数据拟合：残差加权与数据表示。《流变学学报》，58(6-7):341–359，2019。[32] S. Ranftl、T. S. M¨uller、U. Windberger、G. Brenn 和 W. von der Linden。主动脉血流动力学中血液流变学不确定性的贝叶斯方法。《生物医学工程数值方法国际期刊》，39(4):e3576，2023。[33] A. Chakraborty 和 M. C. Messner。用于估计弹黏塑性材料模型统计参数分布的贝叶斯分析。《概率工程力学》，66:103153，2021。[34] S. Paul、N. Narinder、A. Banerjee、K. R. Nayak、J. Steindl 和 C. Bechinger。利用光镊对杰弗里流体的黏弹性进行贝叶斯推断。《科学报告》，11(1):2023，2021。

[35] R. Ran、S. Pradeep、S. Kosgodagan Acharige、B. C. Blackwell、C. Kammer、D. J. Jerolmack 和 P. E. Arratia。利用贝叶斯推断理解高岭土悬浮液的流变学。《流变学杂志》，67(1):241–252，2023。[36] I. Y. Miranda-Valdez、T. M¨akinen、J. Koivisto 和 M. J. Alava。通过贝叶斯优化推断黏弹性参数。*arXiv*预印本 *arXiv:2502.19132*，2025。[37] A. Rinkens、C. V. Verhoosel 和 N. O. Jaensson。广义牛顿流体挤压流的不确定性量化。《非牛顿流体力学杂志》，322:105154，2023。[38] A. Kontogiannis、R. Hodgkinson、S. Reynolds 和 E. L. Manchester。根据测速数据学习非牛顿流体的流变参数。《流体力学杂志》，1011: R3，2025。[39] M. Saadat、M. Mahmoudabadbozchelou 和 S. Jamali。通过流变学信息神经网络（rhinns）进行数据驱动的本构模型选择。《流变学学报》，61(10):721–732，2022。[40] M. Lardy、S. Tlili 和 S. Gsell。根据速度场推断黏塑性模型：一种基于物理信息神经网络的方法。《非牛顿流体力学杂志》，346:105512，2025。ISSN 0377-0257。[41] G. H. Covey 和 B. R. Stanmore。使用平行板塑性计表征具有屈服应力的黏性流体。《非牛顿流体力学杂志》，8(3-4):249–260，1981。[42] B. Lambert。《贝叶斯统计学生指南》。SAGE Publications Ltd，2018。[43] J. P. Kaipio 和 E. Somersalo。《统计与计算反问题》。Springer，2005。[44]D. Gamerman 和 H. F. Lopes。《马尔可夫链蒙特卡罗：用于贝叶斯推断的随机模拟》。Chapman and Hall/CRC，2006。[45] J. Goodman 和 J. Weare。具有仿射不变性的系综采样器。《应用数学与计算科学通讯》，5(1):65–80，2010。[46] A. Rinkens、R. L. S. Silva、C. V. Verhoosel、N. O. Jaensson 和 E. Quaeghebeur。针对反挤压流问题的MCMC算法比较。载于《物理科学论坛》，第12卷，第4页。MDPI，2025。[47] M. A. Newton 和 A. E. Raftery。使用加权似然自助法进行近似贝叶斯推断。《皇家统计学会会刊*B*辑：统计方法学》，56(1): 3–26，1994。[48] R. M. Neal。对 Newton MA、Raftery AE 所著《使用加权似然自助法进行近似贝叶斯推断》的讨论所作贡献。《皇家统计学会会刊*B*辑（方法学）》，56(1):41–42，1994。[49] A. E. Gelfand 和 D. K. Dey。贝叶斯模型选择：渐近理论与精确计算。《皇家统计学会会刊*B*辑（方法学）》，56(3):501–514，1994。[50] R. van Haasteren。使用MCMC方法计算边际似然。载于《脉冲星计时阵列的引力波探测与数据分析》，第99–120页。Springer，2013。[51]J. D. McEwen、C. G. R. Wallis、M. A. Price 和 A. S. Mancini。机器学习辅助的贝叶斯模型比较：学习得到的调和均值估计量。*arXiv*预印本 *arXiv:2111.12720*，2021。

[52] C. J. Geyer. 实用马尔可夫链蒙特卡罗。《统计科学》，7(4):473–483，1992。[53] C. R. Beverly 和 R. I. Tanner. 三维宾汉塑性流动的数值分析。《非牛顿流体力学杂志》，42(1-2):85–115，1992。[54] T. C. Papanastasiou. 屈服材料流动。《流变学杂志》，31:385–404，1987。[55] F. H. Marchesini、M. F. Naccache、A. Abdu、A. A. Alicke 和 P. R. Mendes de Souza. 屈服应力材料的流变学表征：流动模式与表观壁面滑移。《应用流变学》，25(5):32–41，2015。[56] A. Z. Szeri. 流体膜润滑。剑桥大学出版社，2010。ISBN 9781139495196。[57] S. D. R. Wilson. 宾汉材料的挤压流动。《非牛顿流体力学杂志》，47:211–219，1993。[58] P. Estell´e 和 C. Lanos. 带摩擦滑移边界条件下宾汉流体的挤压流。《流变学学报》，46(4):397–404，2007。[59] W. H. Press、S. A. Teukolsky、W. T. Vetterling 和 B. P. Flannery.《数值方法：科学计算的艺术》。剑桥大学出版社，英国剑桥，第三版，2007。ISBN 9780521880688。[60] J. Bezanson、A. Edelman、S. Karpinski 和 V. B. Shah. Julia：一种全新的数值计算方法。《*SIAM*评论》，59(1):65–98，2017。