即将发表于第19届 IEEE 太平洋可视化会议论文集（PacificVis 2026），澳大利亚悉尼。

REV-INR：用于不确定性感知体可视化的正则化证据隐式神经表示

Shanu Saklani 印度理工学院坎普尔分校 INSIGHT 实验室，印度

Tushar M. Athawale 橡树岭国家实验室，美国

Nairita Pal 印度理工学院卡拉格普尔分校，印度

David Pugmire 橡树岭国家实验室，美国

Christopher R. Johnson 犹他大学，美国

Soumya Dutta*INSIGHT 实验室，印度理工学院坎普尔分校，印度

arXiv:2601.17689v1 [cs.LG] 25 Jan 2026

摘要

隐式神经表示（INR）已成为一种颇具前景的深度学习方法，可用于紧凑地表示大型体数据集。这些模型可作为体数据的代理，以模型预测结果实现高效存储和按需重建。然而，传统的确定性隐式神经表示只能提供值预测，无法揭示模型预测的不确定性，也无法反映数据固有噪声性的影响。这一局限可能导致重建体数据中的预测误差，进而使数据解释和可视化不可靠。由于原始数据规模庞大，可能无法获取，因此也难以从模型预测的数据中识别错误结果。为应对这一挑战，我们提出***REV-INR***，即**正则化证据隐式神经表示**，该方法能够准确预测数据值，同时仅需在推理阶段对训练完成的 REV-INR 进行一次前向传播，即可预测相关的坐标级数据不确定性和模型不确定性。通过将 REV-INR 与现有成熟的深度不确定性估计方法进行全面比较，我们表明，REV-INR 能够以最快的推理速度实现最佳体数据重建质量，并稳健地估计数据（偶然）不确定性和模型（认知）不确定性。因此，我们证明，REV-INR 有助于评估提取的等值面和体可视化结果的可靠性与可信度，使分析完全基于模型预测的数据。

索引词： 计算方法—机器学习；以人为中心的计算—可视化；计算数学—概率与统计；计算方法—计算机图形学

1 引言

隐式神经表示（INR）作为大型体数据集的紧凑替代方案，已在可视化领域广受欢迎 [13–15, 28, 41]。INR 能够有效学习复杂的标量场，并支持按需预测体数据，使等值面提取和体绘制等下游任务能够直接基于 INR 预测的数据执行。尽管 INR 展现出高质量的重建效果，预测误差仍不可避免。在现实场景中，原始高分辨率数据可能因体量过大而无法存储 [9, 24, 50], , 此时误差估计便难以实现，也就难以评估结果的质量、可靠性和可信度。科学可视化领域大多数基于 INR 的研究 [13–15, 28, 41] 采用确定性模型，只预测数值而不量化不确定性。为解决这一局限，近期研究者开始探索不确定性感知 INR，同时预测数据值和相关的模型级不确定性 [9, 34, 35, 50]。迄今为止，这些研究主要考察模型（认知）不确定性，而数据级（偶然）不确定性的量化、应用和可用性尚未得到探索。要生成高质量、可靠且可信的可视化，全面处理认知不确定性和偶然不确定性至关重要 [21]。此外，由于不确定性是模型固有的属性，无需原始数据即可估计，因此它为科学应用生成信息丰富且可信的结果提供了强有力的机制。

一种广泛采用的隐式神经表示不确定性估计方法是使用隐式神经表示集成，并将其预测方差视为不确定性估计。尽管这类深度集成 [25]通常被认为非常有效， [12, 30, 34, 52], 但其优势是以极高的训练时间和更大的存储需求为代价的，因为必须训练并存储多个模型 [9, 34]。因此，在本研究中，我们专注于开发基于单模型的不确定性感知隐式神经表示。据我们所知，这是首项使用单个隐式神经表示量化并研究模型层面（认知）和数据层面（偶然）不确定性估计，并展示其在隐式神经表示驱动的体可视化任务中的解释方式、可用性和适用性的研究。模型不确定性有助于领域专家识别隐式神经表示对预测过度自信或信心不足的区域，而数据不确定性则突显数据中的不可约噪声（随机性），以及此类噪声可能影响分析结果和可视化的区域。因此，明确区分、估计并以可视化方式探索这两种基本的不确定性类型，对于有效评估隐式神经表示的可靠性并理解固有数据噪声的影响至关重要 [21]。

为了全面量化和评估认知不确定性与偶然不确定性在体可视化中的重要性，我们提出了 REV-INR，这是一种经过正则化的证据式隐式神经表示（INR），能够在推理阶段通过单次前向传播，同时生成高质量的数据预测结果以及可靠的认知不确定性和偶然不确定性。通过采用证据学习， [11], REV-INR 学习高阶后验分布的参数，从而为数据值预测以及这两类不确定性提供闭式解。为了生成可解释的不确定性估计，我们为 REV-INR 提出了两种新颖的不确定性正则化技术。为了将 REV-INR 与现有的单模型方法进行比较，我们开发了另外两种不确定性感知 INR。第一种称为*MCD-INR*，基于蒙特卡洛丢弃方法 [10, 34, 50]。由于传统的 MCD-INR 只能估计认知不确定性，我们对其进行了扩展，使其也能捕捉数据（偶然）不确定性。第二种模型改编自 R MDSRN [50] ；该模型同样只用于预测认知不确定性，因此我们构建了一种新的 INR，由

*电子邮件：soumyad@cse.iitk.ac.in（通讯作者。）

本稿由 UT-Battelle有限责任公司根据与美国能源部签订的合同 DE-AC05-00OR22725 撰写。出版商接受本文发表，即表示承认美国政府保留一项非独占、已付清、不可撤销的全球许可，可为美国政府目的发表或复制本稿的已发表版本，或允许他人这样做。能源部将根据能源部公共访问计划（http://energy.gov/downloads/doe-public-access-plan）向公众开放这些结果。

一个共享编码器和多个解码器组成，与 RMDSRN 类似，用于预测认知不确定性和偶然不确定性，并将这一新的正则化模型称为*RMD-INR*。

为了利用 INR 预测结果对体数据进行可靠、稳健的分析，我们全面评估了 REV-INR，并将其与 MCD-INR 和 RMD-INR 进行比较。我们首先评估重建质量以及体可视化结果的准确性。随后，我们采用不确定性感知的等值面可视化 [5, 32] 来解读和评估不确定性估计。通过分析等值面结构及其拓扑，专家可以更好地理解标量场拓扑 [8, 44]。因此，INR 生成的数据驱动等值面必须保留真实结构，并支持识别 INR 置信度不足或过高、容易产生误差的区域。我们还通过考察两种不确定性与预测误差、局部数据方差及基于插值的误差之间的相关性，进一步评估其可解释性和可用性。此外，为求完整，我们还提供了确定性 INR 的结果。全面评估表明，REV-INR 优于 MCD-INR 和 RMD-INR，在重建质量、可视化结果和可靠的不确定性估计方面表现更佳，同时推理速度最快。因此，我们的贡献如下：

1. 我们提出 REV-INR，这是一种新型的、具备不确定性感知能力的正则化证据隐式神经表示，并采用新颖的不确定性正则化方法，能够高效学习大型体数据，同时通过坐标级认知不确定性和偶然不确定性估计，实现快速、高质量的推理以及细粒度的预测质量评估。2. 我们（a）扩展了蒙特卡洛丢弃隐式神经表示，并且（b）构建了另一种不确定性隐式神经表示网络 RMD-INR，该网络改编自 RMDSRN，使这两个模型除了估计认知不确定性之外，还能够估计偶然（数据）不确定性。.

3 我们将 REV-INR 与 MCD-INR、RMD-INR 以及最先进的压缩方法进行了广泛比较，以展示其在快速体数据重建、可靠且有意义的认知不确定性和偶然不确定性估计，以及可信、准确的可视化生成方面的优势。

2 相关研究

2.1 不确定体可视化技术

带有不确定性的体数据可视化是一项重要的可视化任务。这类体数据的典型表示形式是逐点概率分布。Liu 等人通过闪烁来表示此类体数据中的不确定性 [27]。文献 [33] 提出了一种统计体可视化框架。Athawale 等人使用非参数模型研究体绘制中的不确定性可视化 [4]。P¨othkow 等人开发了一种计算水平穿越概率的方法，并进一步改进该方法以确定每个单元的概率 [31, 32]。Whitaker 等人 [47] 研究了轮廓集合中的不确定性可视化。Athawale 等人深入探讨了等值面提取中的不确定性 [2, 3]。

2.2 标量场可视化的深度学习 ion

近年来，深度学习方法在创建标量场数据的紧凑表示方面得到了广泛探索 [15, 28, 46]。Hong 等人 [19], 、He 等人 [18], 和 Berger 等人 [7] 展示了如何利用体绘制图像进行标量数据分析。文献 [36] 引入了潜在空间技术，用于领域知识感知的体数据压缩。文献 [13,16,49] 报告了生成高分辨率时空体数据方面的进展。深度神经网络（DNN）也被用作代理模型，以探索集合数据中的参数空间 [18,38]。Weiss 等人 [45] 使用 DNN 进行等值面可视化，而 Han 等人 [17] 则利用深度学习改进概率行进立方体算法，以实现等值面提取。

近来，研究人员开始探索可视分析中的认知（模型）不确定性。文献 [9], 研究了基于卷积神经网络的视图合成中的模型不确定性，而文献 [37] 和 [35] 则分别探索了超分辨率和参数空间探索中的认知不确定性。文献 [34] 分析了认知不确定性对基于隐式神经表示的体可视化的影响。文献 [24] 探讨了不确定性感知的矢量数据建模。Uncertain-INR 已被用于表示 CT 数据 [42] 和遥感图像 [51] 中的不确定性。此外，文献 [50] 提出了一种用于标量数据可视化的不确定性感知正则化多解码器场景表示网络（RMDSRN）。

我们的综述发现，现有研究仅关注认知（模型）不确定性。然而，在体建模背景下，对数据（偶然）不确定性进行详细研究，并建立一个能够联合估计这两类不确定性的综合框架，仍是尚未探索的领域——这正是我们旨在填补的空白。

3 神经网络中的不确定性

不确定性是指模型对其结果、预测结果或可视化的置信程度（或缺乏置信）。它体现了这样一种观念：我们从模型生成的结果中得出的结论并非总是绝对的，而是会受到预测结果波动和误差的影响。在预测性数据分析领域，不确定性大致可分为两类：（1）认知（模型）不确定性；（2）偶然（数据）不确定性。研究这两类不确定性对于生成有意义、可信且可靠的可视分析结果至关重要 [21]。

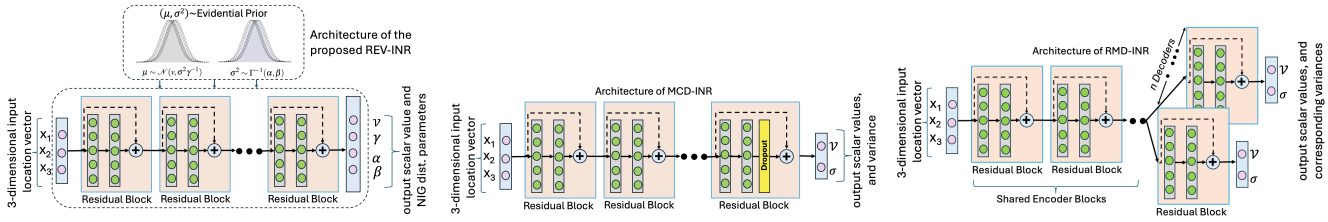
认知（模型）不确定性。认知不确定性，也称为模型不确定性，表示模型在预测值方面的不完善或局限。它量化了模型对其预测结果正确性的置信程度，并为用户提供一种机制，以衡量模型在推理过程中知识的局限性。近期，可视化领域的研究者开始探讨这种认知不确定性及其在体可视化任务中的重要性 [34, 50]。

偶然（数据）不确定性。另一方面，偶然（数据）不确定性在体可视化任务中的重要性尚待研究。偶然不确定性反映了数据中固有的方差或噪声。它体现了数据的随机性，通常归因于数据生成过程的局限性。偶然不确定性分为两种类型：（1）同方差和（2）异方差 [21]。在同方差不确定性中，每个输入数据点的噪声被视为恒定；而在异方差偶然不确定性中，噪声则会变化。请注意，在本研究中，估计得到的偶然不确定性属于异方差，因为噪声量在体数据的不同空间位置各不相同。

3.1 基于隐式神经表示的体数据建模中的不确定性

本研究提出使用隐式神经表示以紧凑格式表示大型体数据集，从而无需访问真实体数据，仅凭 INR 重建数据即可进行下游分析和可视化。为增强对 INR 预测数据的信任并生成可靠的可视化结果，我们主张采用不确定性感知 INR，而非传统的确定性 INR。不确定性感知 INR 的一项主要优势，是能够在分析和可视化结果中传达不确定性信息。例如，在可视化等值面时，不确定性有助于恢复真实形状，并突出显示可能存在错误的区域。同样，在体绘制中，可以量化不确定性并将其传达给领域科学家，以支持明智的决策。

我们提出的 REV-INR 不仅能够预测给定坐标处的数据值，还能学习自身的预测不确定性以及体数据固有的噪声性。模型的预测不确定性，即认知不确定性，量化了其对预测值准确性的置信度。由于无法获得真实数据，计算真实误差是不可行的。然而，



(a) 所提出的 REV-INR 的架构。 (b) MCD-INR 的架构。 (c) RMD-INR 的架构。

图 1：所提出的 REV-INR、MCD-INR 和 RMD-INR 的示意架构。所提出的 REV-INR 经过训练，可预测证据分布的参数，从而对高阶概率分布进行建模。

认知不确定性可以作为真实误差的潜在代理，帮助建立信任并提高可解释性。同时，学习到的偶然不确定性反映了数据中的固有噪声性。这种噪声可能源于：(a) 生成数据的科学模拟所具有的随机性，表现为标量场中不同程度的局部方差；或 (b) 体数据在下采样和上采样操作过程中引入的插值误差。虽然下采样有助于减小数据规模，但在渲染过程中，数据通常会被上采样，而这一变换不可避免地会引入插值误差。我们的目标是使 REV-INR 学习到的偶然不确定性与这类噪声和误差来源相关，从而能够有效估计它们对可视化结果的影响。

4 面向可靠体数据建模与可视化的不确定性感知隐式神经表示

4.1 隐式神经表示（INR）

近期研究表明，对于基于坐标的数据集，采用周期激活函数的隐式神经表示能够高效地学习给定输入坐标到输出数据值空间的映射 [40]。可视化领域提出了此类网络的多种变体，以应对多种科学数据建模问题 [14, 28, 41]。这些确定性 INR 所取得的先进成果促使我们开发 REV-INR，以高效学习体数据表示，并利用偶然不确定性和认知不确定性，实现可靠、可信且具备不确定性感知能力的体数据可视化。我们的基础确定性 INR 遵循 [28] 中提出的残差 SIREN 架构。该 INR 以三维坐标作为输入，并输出相应的标量值。因此，该网络学习函数 $\mathbb{F}(\psi): \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$，其中 ψ 表示 INR 的可学习参数。

4.2 提出的正则化证据隐式神经表示（REV-INR）

基于残差隐式神经表示构建正则化证据隐式神经网络（REV-INR）只需进行极少的架构修改，本质上只需在最后一个解码器层增加四个神经元。其主要创新在于学习算法：REV-INR 使用证据学习方案 [11] 来估计数据值以及另外三个高阶分布参数，随后即可方便地通过闭式解估计每个点的认知不确定性和偶然不确定性。因此，如图 1a 所示，REV-INR 在其解码器层有四个输出神经元。为训练 REV-INR，我们采用 [1]提出的证据学习方案。假设网格点处的各个数据值独立同分布地取自均值（μ）和方差（σ^2）未知的高斯分布，这两个参数需要学习。为学习这些参数，我们对每个变量都设定一个证据先验：对未知均值（μ）设定高斯先验，对未知方差（σ^2）设定逆伽马先验。学习算法旨在逼近真实的后验分布，z（μ，σ^2）。因此，公式如下：

$$\mu \sim \mathcal{N}(v, \sigma^2\gamma^{-1}),\ \ \sigma^2 \sim \Gamma^{-1}(\alpha, \beta) \tag{1}$$

其中，$\Gamma()$ 为伽马函数，$Q = (v\ \gamma, \alpha, \beta)$ 和 $v \in R$，$\gamma > 0$，$\alpha > 1$ $\beta > 0$ [1] ，。Amini 等人在文献中表明，近似后验分布为高斯共轭先验，即正态逆伽马（NIG）分布；后验分布可以用四个参数 $Q = (v\ \gamma, \alpha, \beta)$ 表示，其中后验 NIG 分布函数表示为：

$$p(\mu, \sigma^2 \mid v, \gamma, \alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha \sqrt{\gamma}}{\Gamma(\alpha)\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^{\alpha+1} \exp\left\{\frac{-2\beta + \gamma(v-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{2}$$

根据公式 2，我们可以看到该 NIG 分布有四个参数 $Q = (v\ \gamma, \alpha, \beta)$。这四个参数针对体数据的每个网格点进行学习，从而能够在坐标级别预测值，并估计数据不确定性和模型不确定性。

4.2.1 值预测与不确定性估计

所提出的 REV-INR 的一项关键优势是，训练完成后，只需一次前向传播即可同时估计不确定性值并预测数据值，从而使推理效率大幅提升，进而加速体数据重建。利用 REV-INR 学得的 NIG 分布参数，我们使用以下闭式表达式计算每个网格点的预测值及其对应的不确定性估计 [1]:

$$\mathbb{E}[\mu] = v, \quad AU = \frac{\beta}{\alpha - 1}, \quad EU = \frac{\beta}{\gamma(\alpha - 1)}$$

其中，$\mathbb{E}[\mu]$表示预测的期望标量值，偶然不确定性 表示偶然不确定性（$\mathbb{E}[\sigma^2]$），而认知不确定性 表示认知不确定性（$\mathrm{Var}[\mu]$）。请注意，在体数据中，偶然不确定性 用于建模每个网格点固有的数据值方差，而认知不确定性 则反映 REV-INR 的预测变化性。

4.2.2 损失函数

从图 1a 可以看出，要从基础隐式神经表示构建 REV-INR，需要修改最后一个解码器层，增加四个神经元，以便学习预测后验 NIG 分布的四个参数。为学习这些证据分布参数，我们提出使用 KL 散度损失，并结合 [1] 中提出的正则化器。我们构建一个目标 NIG 分布，在预测准确时，该分布表示较低的不确定性。然后，通过最小化该目标 NIG 分布与 REV-INR 预测的预测 NIG 分布之间的 KL 散度来进行训练。此外，我们还引入一个正则化项，对错误预测施加不正确证据惩罚，以减少错误预测的证据 [1]。若 $\mathscr{L}_{KL}$ 表示 KL 散度损失，$\mathscr{L}_{Reg}$ 表示证据正则化项，则完整的证据损失 $\mathscr{L}_{EV}$ 可表示为

写为如下形式：

$$\mathscr{L}_{EV} = \mathscr{L}_{KL} + \delta \cdot \mathscr{L}_{Reg}$$

$$\mathscr{L}_{KL} = D_{\mathrm{KL}}\big(\mathrm{NIG}(v,\gamma,\alpha,\beta) \parallel \mathrm{NIG}(y,\gamma_t,\alpha_t,\beta_t)\big)$$

$$\mathscr{L}_{Reg} = |y - v| \cdot (2\gamma + \alpha)$$

其中，$NIG(v\ \gamma,\alpha,\beta)$ 和 $NIG(y\ \gamma_t,\alpha_t,\beta_t)$ 分别表示预测 NIG 分布和目标 NIG 分布，y 表示真实数据值，δ 是证据正则化项的权重；在所有实验中，我们根据经验将其设为 $\delta = 0.1$。由于我们既希望获得较高的重建质量，也希望得到有意义的不确定性估计，因此将传统的均方误差损失（$\mathscr{L}_{MSE}$）与证据损失结合起来。因此，我们的损失函数为：

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{MSE} + \lambda_1 \cdot \mathscr{L}_{EV}$$

其中，λ_1 是证据损失分量的权重，用于使 REV-INR 的训练损失函数保持平衡且稳定。

4.2.3 REV-INR 的正则化

使用上述损失函数（$\mathscr{L}$）训练 REV-INR，可得到稳定的 INR 模型，在实现高重建质量的同时，还能够对每个点进行认知不确定性和偶然不确定性量化。认知不确定性（EU）反映 REV-INR 对预测数据准确性的信心，而偶然不确定性（AU）则捕捉数据固有的噪声性。在使用 REV-INR 的预测结果生成可视化结果时，这两种不确定性都可能发挥至关重要的作用，因为纳入不确定性信息有助于领域专家更好地解读结果，并做出有依据且可靠的决策。然而，先前研究表明 [50]，这些代表模型方差或数据方差的预测不确定性值可能过度自信或信心不足，从而导致误导性解读。因此，必须进行适当的校准，以获得可解释的不确定性估计。为应对这一挑战，我们针对认知不确定性 和偶然不确定性提出了新的正则化方法。与典型的训练后校准方法不同，后者会调整预测不确定性值，使其与预测误差相符 [50], ，我们在训练过程中进行校准。具体而言，我们在损失函数中引入新的正则化项，直接约束认知不确定性 和偶然不确定性，从而得到可解释且可靠的不确定性估计。

认知不确定性正则化。由于认知不确定性代表 REV-INR 对预测数据值准确性的信心，因此预计它会与预测误差相关。然而，由于可视分析仅依赖 REV-INR 生成的数据，而这些数据没有真实值，因此无法直接估计真实误差。在这种情况下，认知不确定性可作为误差值的潜在代理 [50]。因此，在训练过程中，针对预测误差对原始认知不确定性值进行正则化是合适的。为此，我们在预测的认知不确定性值与对应的真实误差值之间引入相关性损失项。此举是可行的，因为在训练过程中，我们可以访问原始数据并计算实际误差。因此，我们的认知不确定性正则化损失 ($\mathscr{L}_{EU}$) 定义如下：

$$\mathscr{L}_{EU} = 1 - \rho(EU, \xi)$$

其中，ρ(认知不确定性 ξ) 表示预测误差 (ξ) 与认知不确定性之间的皮尔逊相关系数。请注意，当认知不确定性与 ξ 呈正相关时，$\mathscr{L}_{EU}$ 较低；而当二者呈负相关时，$\mathscr{L}_{EU}$ 则会产生较高的损失。该损失项促使 REV-INR 生成与预测误差相一致的认知不确定性。

偶然不确定性正则化。偶然不确定性 刻画了体数据在每个网格点处固有的噪声性。在体数据集中，这类噪声可能源自不同因素，也可能有多种解释。在训练过程中，所提出的 REV-INR 学习标量函数的连续表示，使其能够根据任意输入的三维坐标预测相应的标量值。在学习该标量函数的同时，REV-INR 还以偶然不确定性的形式对逐点噪声进行建模。因此，相较于标量值快速变化或存在边缘的区域，体数据的均匀区域预计噪声更少。故偶然不确定性 应忠实地反映这些变化。通过计算小范围局部邻域内每个网格点的梯度值，可以识别均匀区域或快速变化的区域。梯度幅值是数据的固有属性，可用于指示可能同时出现较高偶然不确定性 的区域。因此，为了正则化 REV-INR 预测的偶然不确定性，我们将偶然不确定性 值与局部梯度幅值相关联。我们的假设是，这种正则化能够得出更有意义的偶然不确定性 估计，进而作为体数据固有噪声性的可靠代理。为证明所学习的偶然不确定性 值的有效性和实用性，我们将在后文展示，这些经过正则化的偶然不确定性估计与局部数据方差以及基于插值的不准确性均具有较高相关性；当体数据为渲染而经过下采样并随后上采样时，可能会产生这类不准确性。因此，偶然不确定性 正则化损失 ($\mathscr{L}_{AU}$) 定义如下：

$$\mathscr{L}_{AU} = 1 - \rho(AU, \nabla f(\cdot))$$

其中，ρ(偶然不确定性 $\nabla f(\cdot)$) 表示梯度幅值（$\nabla f(\cdot)$）与偶然不确定性之间的皮尔逊相关系数，其中$f(\cdot)$ 为标量函数。请注意，若偶然不确定性 与 $\nabla f(\cdot)$ 正相关，则 $\mathscr{L}_{AU}$ 较低；而若偶然不确定性 与 $\nabla f(\cdot)$ 负相关，则 $\mathscr{L}_{AU}$ 较高。

4.2.4 使用组合损失函数训练 REV-INR

所提出的正则化证据INR模型（REV-INR）通过组合多个损失函数进行训练，以同时实现较高的重建质量以及有意义、可靠的不确定性估计。我们发现，在所有训练轮次中始终使用全部损失项训练 REV-INR，可能会略微降低重建质量，并显著增加训练时间。为缓解这一问题，我们采用两阶段训练策略。第一阶段仅使用 $\mathscr{L}_{MSE}$训练 REV-INR，使模型达到稳定状态并获得较高的预测质量。第二阶段则引入 $\mathscr{L}_{EV}$ 以及两个不确定性正则化项 $\mathscr{L}_{AU}$ 和 $\mathscr{L}_{EU}$，并在剩余训练轮次中继续训练。该策略可得到稳定可靠的 REV-INR 模型，在实现优异预测质量的同时，生成有意义且经过校准的不确定性估计。因此，若 REV-INR 的总训练轮次为n，则最终训练策略定义如下：

$$\mathscr{L}_{REV-INR} = \mathscr{L}_{MSE}, \quad \text{for } 1 < \text{epoch} < n/2$$

$$\mathscr{L}_{REV-INR} = \mathscr{L}_{MSE} + \lambda_1\mathscr{L}_{EV} + \lambda_2\mathscr{L}_{EU} + \lambda_3\mathscr{L}_{AU}, \quad \text{for } n/2 \le \text{epoch} \le n$$

其中，λ_1、λ_2和 λ_3 是三个权重参数，用于在训练过程中平衡证据损失与两个不确定性正则化组件的影响。这些权重通过经验确定，更多信息请参阅补充材料。

4.3 结合偶然不确定性估计能力增强的蒙特卡洛 Dropout INR（MCD-INR）

为了构建基于蒙特卡洛丢弃的隐式神经表示（MCD-INR），我们首先在基础残差 INR 模型中插入 Dropout 层。Kendall 等人 [20] 和 Saklani 等人 [34] 证明，在每一层之后应用 Dropout 都能起到强正则化作用，但往往会降低预测质量。因此，可以只在部分层之后，或仅在最后一层之后添加 Dropout 层，以模拟部分贝叶斯神经网络。遵循这一策略，我们仅在最后一个残差块应用激活后 Dropout，从而获得高质量的预测结果 [34]。通过这种设计，MCD-INR 仅预测数据值，并可在推理过程中激活 Dropout，通过计算多次前向传播所得预测结果的方差来估计认知不确定性

。在本研究中，我们将传统的 MCD-INR 扩展为还能估计偶然不确定性，使模型能够学习体数据在每个网格点上的固有噪声性。为此，我们在输出解码器层中添加一个额外的神经元，使模型能够同时预测标量值及其对应的逐点方差。联合学习均值和方差的一种标准方法是将高斯负对数似然（NLL）用作损失函数。因此，MCD-INR 经过训练后，会输出每个网格点的预测均值和方差。整体 MCD-INR 架构如图 1b 所示。

4.3.1 值预测与不确定性估计

推理时，我们首先启用 Dropout。对于给定的输入坐标，n 次预测通过对模型进行n 次随机前向传播获得。这n 次预测的平均值作为期望标量值，而n 个预测方差的平均值则表示偶然不确定性。最后，n 次前向传播中预测标量值的方差表示认知不确定性。因此，对于一个输入，考虑n 次随机前向传播，若 $\hat{y}_i$ 表示预测的标量值，σ_i^2表示第i次前向传播对应的方差，则使用以下表达式计算期望标量值（μ）、认知不确定性和偶然不确定性：

$$\mathbb{E}[\mu] = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n}\hat{y}_i, \quad AU = \frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n}\sigma_i^2, \quad EU = Var(\hat{y}_i)$$

4.3.2 损失函数

为了同时学习值及其对应的方差，采用高斯负对数似然（NLL）作为损失函数。高斯负对数似然损失函数定义如下：

$$\mathscr{L}_{\text{GaussNLL}} = \frac{1}{2}\log\left(2\pi\sigma^2\right) + \frac{(y-\mu)^2}{2\sigma^2}$$

遵循与 REV-INR 类似的策略，我们加入传统的均方误差损失，以实现高质量重建和可靠的不确定性估计。因此，用于训练 MCD-INR 的最终损失函数（其中 λ_1 是 $\mathscr{L}_{\text{GaussNLL}}$ 的权重）如下：

$$\mathscr{L}_{MCD-INR} = \mathscr{L}_{MSE} + \lambda_1 \cdot \mathscr{L}_{\text{GaussNLL}}$$

4.4 具备偶然不确定性估计能力的正则化多解码器隐式神经表示（RMD-INR）

我们采用 [50] 提出的共享编码器多解码器架构，构建正则化多解码器隐式神经表示（RMD-INR）。在我们的实现中，RMD-INR 的编码器和解码器均采用多层感知机。我们将这一新模型称为 RMD-INR，并赋予其偶然不确定性估计能力，以弥补 RMDSRN 缺少这一能力的不足。RMD-INR 由五个解码器头组成，每个解码器都独立预测标量值。为了使每个解码器头能够同时预测标量值及其对应的偶然不确定性，我们在每个解码器的输出层额外添加一个神经元。修改后的模型架构如图 1c 所示。

4.4.1 值预测与不确定性估计 tion

在推理过程中，RMD-INR 的每个解码器头都会预测标量值及其对应的偶然不确定性。最终的期望标量值是对所有解码器头预测的标量值取平均得到的。同样，偶然不确定性是通过对解码器头预测的偶然不确定性值取平均来估计的，而标量值的方差则表示认知不确定性。因此，考虑D 个解码器头，若 $\hat{y}_i$ 表示预测的标量值，σ_i^2表示第i个解码器头对应的方差，则可使用以下表达式计算期望标量值（μ）、偶然不确定性和认知不确定性：

$$\mathbb{E}[\mu] = \frac{1}{D}\sum_{i=0}^{D}\hat{y}_i, \quad AU = \frac{1}{D}\sum_{i=0}^{D}\sigma_i^2, \quad EU = Var(\hat{y}_i)$$

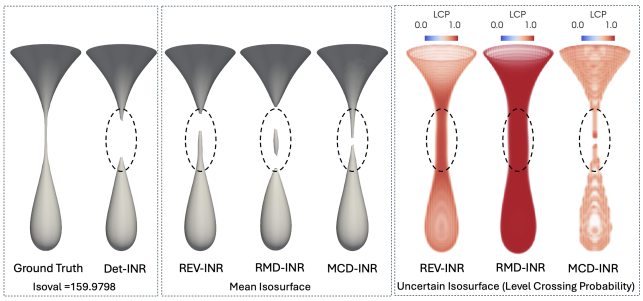


图 2：等值为 159.9798 时 Teardrop 数据集的可视化。中间部分分别显示 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 生成的平均等值面，并突出显示了与真实值的差异（虚线圆圈）。右侧部分显示了使用水平穿越概率（LCP）得到的相应不确定等值面。可以看到，REV-INR 生成的 LCP 可视化结果最准确。

4.4.2 损失函数

RMD-INR 使用与上文 4.3.2 节所述 MCD-INR 相同的损失函数进行训练。为确保能够有效估计认知不确定性，我们采用 [50] 中针对 RMDSRN 提出的正则化策略。因此，我们在 RMD-INR 的损失函数中加入 KL 散度正则化项，以促使预测方差（认知不确定性）与预测误差值之间的差异最小化。我们采用 [50] 提出的指数增长权重调度器，在训练过程中调整正则化项的权重。因此，最终的损失函数如下：

$$\mathscr{L}_{RMD-INR} = \mathscr{L}_{MSE} + \lambda_1 \cdot \mathscr{L}_{\text{GaussNLL}} + \lambda_2 \cdot D_{KL}(EU, error)$$

其中，λ_1 是 $\mathscr{L}_{\text{GaussNLL}}$ 损失分量的权重，λ_2 是 KL 散度的权重，D_{KL}(认知不确定性，误差)。

4.5 超参数

基础确定性 INR 采用基于残差块的架构，每个残差块包含两层，每层有 100 个神经元。按照 [15], 中的建议，我们将隐式神经表示设计得更宽而非更深，以实现更好的存储–质量权衡。我们使用三个残差块构建 REV-INR 和 MCD-INR。为便于在参数数量和存储需求相近的条件下比较所有方法，我们将 RMD-INR 设计为与 MCD-INR 和 REV-INR 占用相同的模型参数存储空间。因此，按照 [50]中的建议，RMD-INR 的每层包含 70 个神经元，并设有五个解码器头（见图 1c）。针对所有数据集上的所有模型（包括我们的 REV-INR），我们进行了经验实验，以选取合适且一致的学习率和批量大小，从而获得稳定且高质量的预测结果。我们使用 Adam 优化器 [22]，学习率设为 0.00005，两个优化器系数 β_1 和β_2 分别设为 0.9 和 0.999。对于所有方法，均采用学习率衰减方案，衰减因子为 0.8，步长为 15。所有模型最多训练 300 个训练轮次，以确保收敛。对于所有数据集，MCD-INR 和 RMD-INR 的高斯负对数似然损失分量权重均设为 0.001。

5 结果

本节将展示定性和定量结果。空间分辨率、每个隐式神经表示的大小以及原始数据均列于表1。实验使用配备 NVIDIA RTX A6000 GPU 的 GPU服务器，每块 GPU 显存为 48 GB。

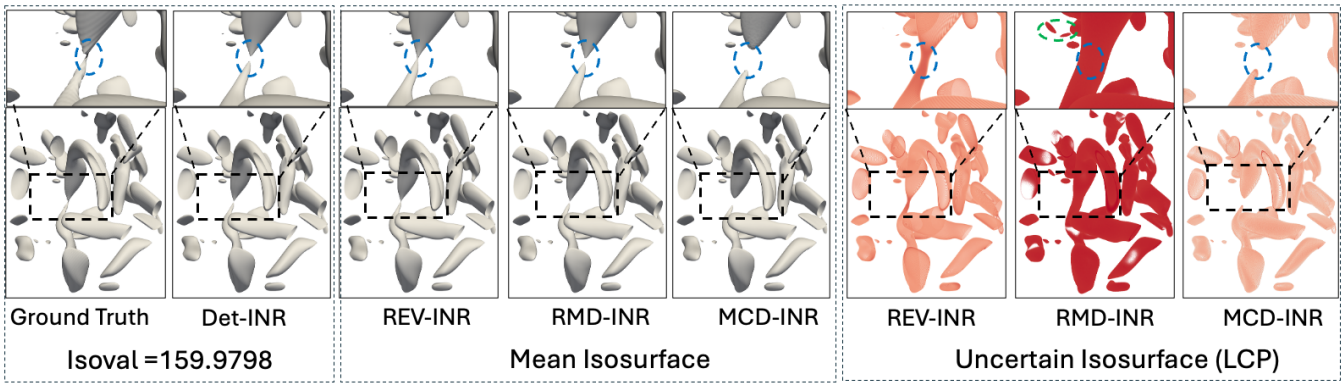


图 3：等值为 5.8 时 Vortex 数据集的可视化。中间列分别展示 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 生成的平均等值面，其中与真实值的差异以虚线圆圈标出。右侧列展示使用水平穿越概率（LCP）得到的对应不确定等值面，呈现最可能的等值面。可以看出，REV-INR 生成的 LCP 可视化最准确。Det-INR 生成的等值面也未能保留细窄的连接部分。

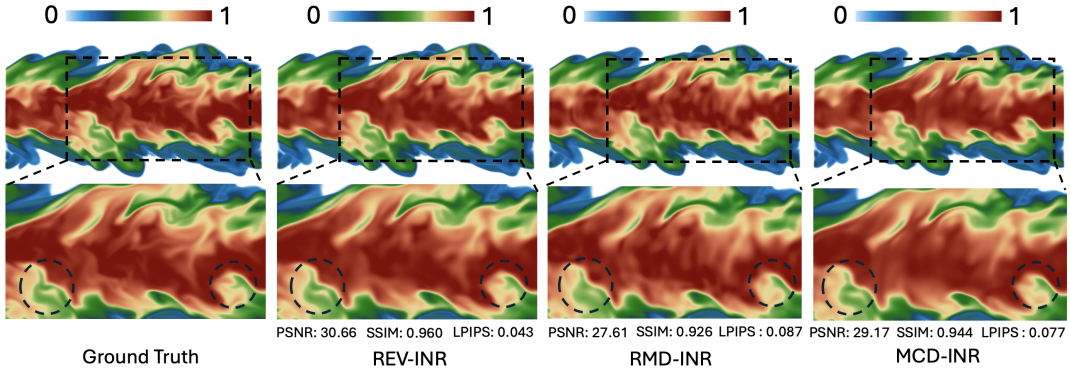


图 4：燃烧 数据集的可视化。将真实值标量场与 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-IN R. REV-INR 更好地保留了复杂 的火焰结构，如黑框标记的放大区域所示。

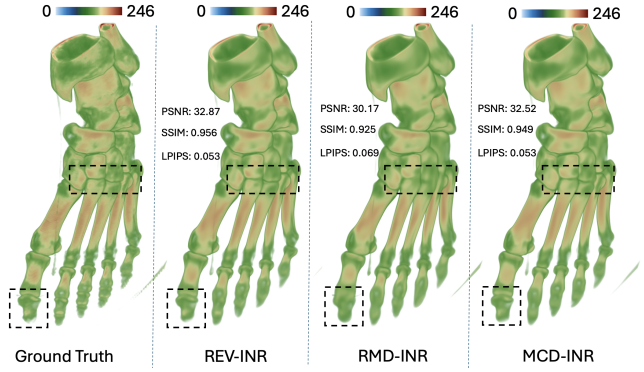


图 5：足部数据集的可视化。将真实值标量场（左）与 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 的重建结果进行比较。骨段关节周围突出显示的区域表明，与其他方法相比，REV-INR 实现了与真实值最接近的匹配。

5.1 不确定性感知的等值面可视化

我们展示不确定性估计如何帮助改进等值面提取与可视化，使其更加可靠且信息更加丰富。我们发现，仅使用预测均值场提取的等值面存在误差。相比之下，不确定性这些信息有助于识别预测置信度不足或过高的等值面区域，使用户能够定位潜在误差。由于我们的不确定性感知 INR 会在每个网格位置生成不确定性估计，因此我们采用等值面不确定性量化与可视化技术，以生成信息丰富且可信的结果。这种方法还有助于验证 REV-INR 生成的不确定性估计具有实际意义，并且对于创建不确定性感知的可视化至关重要。因此，我们对从隐式神经表示重建的标量场中提取的等值面应用不确定性可视化技术；通过有效传达不确定性，这些技术对于提高 INR 预测的可靠性和可信度至关重要。为完整起见并便于比较，我们还纳入了确定性 INR（Det-INR）的结果。从表 1 可以观察到，尽管确定性 INR 的重建 PSNR 略高或相当，但它们仍会生成错误的等值面，从而可能导致不准确的特征解释。因此，不确定性感知 INR 对于解决此类问题至关重要。

由于不确定性隐式神经表示会产生基于分布的体数据，我们采用不确定性等值面算法 [5, 43] 来生成不确定性感知可视化。我们可视化单元内的水平穿越概率（*LCP*）。LCP 通过计算等值面穿过网格单元的概率，隐式地传达不确定性。因此，较高的 LCP 值表示等值面存在的可能性更高。我们的不确定性感知 INR 会在每个网格位置生成预测均值 μ 和方差 σ^2。因此，我们采用基于参数化高斯分布的不确定性建模来提取等值面。

Teardrop 数据集。我们在图 2 中展示了 Teardrop 数据集 [23] 在等值 159.9798 处的不确定性感知等值面可视化结果。为生成不确定等值面，我们将每个网格位置的 EU 值作为方差，并将预测标量值视为高斯分布的均值。与真实值相比，我们观察到，三种方法预测的均值等值面在中心区域均出现断裂。Det-INR 生成的等值面也存在错误。这表明，仅使用均值或采用确定性 INR 来确定性地提取等值面可能会产生错误。检查这三种方法的 LCP 场后，我们发现 REV-INR 和 RMD-INR 均能以较高概率恢复细窄的连接区域，但 RMD-INR 倾向于高估连接结构，导致其空间扩展范围大于 REV-INR。相比之下，MCD-INR 的 LCP 完全未能恢复该连接区域。这些结果凸显了 REV-INR 相较于 MCD-INR、RMD-INR 和 Det-INR 的优越性，进一步印证了不确定性感知 INR 的优势，并展示了不确定性信息如何提升等值面可视化的可靠性。

Vortex 数据集。在图 3 中，我们展示了 Vortex 数据集 [39] 在等值 5.8 处的均值与不确定性等值面可视化结果。在探索涡旋特征时，一个重要任务是正确检测合并与分裂事件。考虑到这一任务，从均值等值面中可以观察到，RMD-INR 和 MCD-INR 都未能捕捉两个管状涡旋之间的连接，如放大图中蓝色圆形区域所示。Det-INR 生成的等值面同样未能保留该连接，导致特征解释不准确。LCP 场显示，REV-INR 和 RMD-INR 都恢复了细薄的连接区域，但 RMD-INR 在空间上高估了等值面。MCD-INR 的 LCP 未能恢复该连接。我们还标出了 RMD-INR 的 LCP 中另一个显示 LCP 不准确的区域。相比之下，REV-INR 提供了清晰且准确的等值面表示，展现出 REV-INR 的优越性，即使其整体重建 PSNR 略高于 Det-INR。

5.2 重建体可视化

首先，我们使用重建的标量场进行直接体可视化，以展示 REV-INR 相较于 MCD-INR 和 RMD-INR 的优越性。从表1可以看出，在峰值信噪比方面，REV-INR 在不确定性 INR 中实现了最佳的重建质量。为进一步验证这一点，我们通过体绘制开展定性可视分析。在图4和图5中，我们分别展示了 Combustion 和 Foot 数据集的体绘制结果。对于所有方法，我们采用一致的传递函数设置和颜色尺度，以确保比较公平。从图4可以看出，与 MCD-INR 和 RMD-INR 相比，REV-INR 更好地保留了包含复杂火焰结构的多个区域。黑框标出的放大区域展示了这些差异。同样，在图5中，与另外两种方法相比，REV-INR 为 Foot 数据集生成了最准确的体可视化结果。图5中不同骨段关节周围的高亮区域清楚地表明，REV-INR 与真实值最为接近。我们进一步计算了图像级指标——峰值信噪比、SSIM 和 LPIPS——并在图4和图5中报告了三种方法的对应数值。我们观察到，在这三项指标上，REV-INR 均优于 MCD-INR 和 RMD-INR，生成了最准确的体可视化结果。

5.3 不确定性估计的评估

5.3.1 认知不确定性（EU）估计的评估

评估不确定性估计的质量，对于理解其可用性至关重要。认知不确定性反映了模型的预测不确定性，体现了模型对预测值准确性的信心。这是模型的一项固有属性。由于我们处理的是大型体数据，并主张

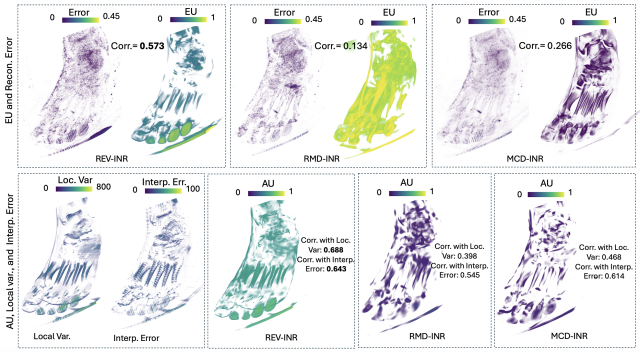


图6：足部数据集（上）中 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 的认知不确定性与误差场的体可视化。REV-INR 的认知不确定性与高误差区域高度吻合，而 RMD-INR 和 MCD-INR 在低误差区域表现出过度自信的预测。底行展示了局部方差、插值误差和偶然不确定性的可视化。REV-INR 的偶然不确定性场与局部方差和插值误差的吻合度最高，相关性也最高。

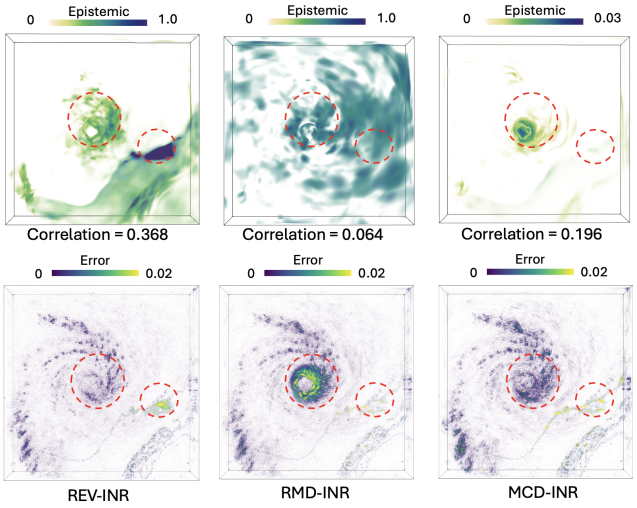


图7：REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 为飓风 Isabel 数据集的速度场生成的认知不确定性与误差场可视化。REV-INR 的认知不确定性与误差场吻合度最高，相关性数值也证实了 REV-INR 的优越性。

下游分析任务完全由模型预测数据驱动，因此我们意识到，在可视分析过程中，原始数据可能无法用于误差量化。在这种情况下，认知不确定性可作为预测误差的代理，并用于生成易于理解且信息丰富的可视化，以突出显示领域专家可能关注的错误区域。此处，我们比较了 REV-INR、RMD-INR 和 MCD-INR 的认知不确定性体可视化与相应误差场，以考察这三种方法中认知不确定性与误差场之间的空间相关性。空间相关性越高，认知不确定性估计就越容易解释。

图 6 上半部分展示了足部数据集的认知不确定性场和误差场可视化结果。可以观察到，与 RMD-INR 和 MCD-INR 生成的认知不确定性场和误差场相比，REV-INR 生成的认知不确定性场与高误差区域具有更高且更有意义的空间重叠。RMD-INR 和 MCD-INR 的认知不确定性场中存在一些认知不确定性较高但误差较低的区域，这表明 RMD-INR 和 MCD-INR 可能产生了过度自信的预测。相比之下，REV-INR 预测的认知不确定性

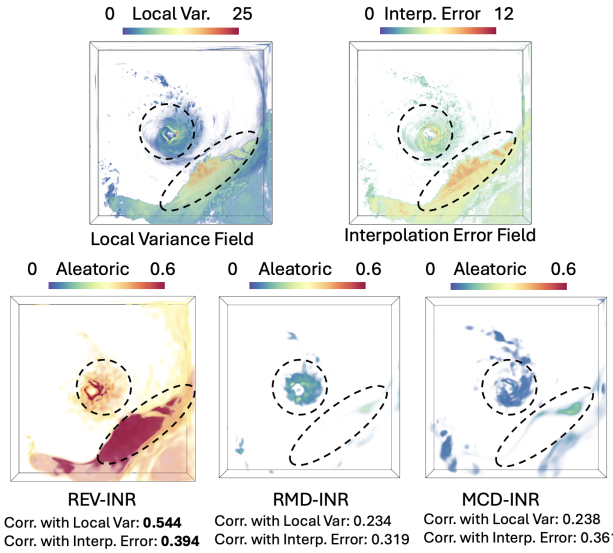


图 8：Isabel 数据集速度场的偶然不确定性、局部方差和插值误差可视化。与 RMD-INR 和 MCD-INR 相比，REV-INR 的空间重叠度和相关性最高，表明其偶然不确定性估计更可靠。

与高误差区域吻合良好。我们还在图 6 中报告了相关性的定量数值，结果同样显示 REV-INR 的相关性更高。图 7 展示了针对伊莎贝尔飓风数据集速度场进行的类似分析。我们观察到相似的趋势：与 RMD-INR 和 MCD-INR 相比，REV-INR 生成的认知不确定性场与误差场对齐得更好。如图 7 所示，RMD-INR 生成的认知不确定性场空间相关性较差。报告的相关性数值也支持这些观察结果，表明 REV-INR 生成的认知不确定性估计能够更恰当地作为预测误差的代理，并可用于生成可靠且信息丰富的可视化结果。

5.3.2 偶然不确定性（AU）的评估

偶然不确定性（AU）用于描述数据中的噪声。在体数据中，此类噪声可能源于模拟的随机性，而基于局部邻域的方差值可作为其指示指标。为了减小数据量，体数据也常会先进行下采样，随后在渲染过程中插值回原始分辨率，以实现高质量可视化。下采样及后续上采样的过程会引入插值误差，我们将其视为另一种潜在噪声来源。由于偶然不确定性用于描述数据不确定性，因此预期它能够反映这些类型的噪声。在正则化 REV-INR 时，我们假设，在训练过程中利用梯度幅值对偶然不确定性值进行正则化，有助于生成有意义且易于解释的偶然不确定性值。我们的假设是，局部梯度幅值可作为潜在线索，用于识别在插值驱动的上采样或下采样等数据变换过程中可能引入高噪声的区域。从概念上说，梯度幅值也应与局部数据方差值相关。为研究估计所得偶然不确定性的质量，我们计算了以下两组相关性：（1）偶然不确定性与局部方差；（2）偶然不确定性与插值误差。

图 6 下半部分展示了 Foot 数据集的结果。我们采用 $8\times8\times8$ 下采样来计算插值误差场，并使用 $2\times2\times2$ 窗口进行局部方差估计。与 RMD-INR 和 MCD-INR 相比，REV-INR 生成的偶然不确定性场与局部方差场和插值误差场均呈现出最高的空间重叠。相应地，偶然不确定性与

(1) 局部方差以及 (2) 偶然不确定性与插值误差之间的相关性，对于 REV-INR 也均为最高，如图 6 所示。图 8 展示了对 Isabel 数据集的速度场进行的类似分析，其中使用了 $5\times5\times5$ 下采样和 $2\times2\times2$ 窗口。视觉比较表明，在所有方法中，REV-INR 与局部方差和插值误差均实现了最强的重叠。更高的相关性数值进一步证实，与 RMD-INR 和 MCD-INR 相比，REV-INR 能够提供更优的偶然不确定性估计。

5.4 与压缩方法的比较

在图 9 中，我们将提出的 REV-INR 与两种最先进的压缩方法：TTHRESH [6] 和 Zfp [26]进行了比较。对于 Zfp，我们分别采用固定精度和固定比特率设置进行压缩。比较使用 Vortex 和 Heptane 数据集进行。从图 9 可以看出，REV-INR 生成的等值面可视化最为准确，而 TTHRESH 和 Zfp 无法保留精细的等值面特征（红色虚线区域所示）。我们还观察到，Zfp 会在等值面中引入明显的视觉伪影。图 9 还给出了重建 PSNR 和压缩比，以进行定量比较；结果表明，与 TTHRESH 和 Zfp 相比，REV-INR 实现了最佳的压缩比（CR）与 PSNR 权衡。

6 定量评估

模型大小与重建。表 1 展示了模型大小相当时体数据重建质量的定量评估。为评估总体体数据重建质量，我们计算峰值信噪比（PSNR）。我们发现，尽管 REV-INR 在不确定性隐式神经表示中取得了最高的 PSNR，但对于 Combustion、Isabel、Foot、Vortex 和 Heptane 数据集，其 PSNR 与 Det-INR 相当或略低。对于 Teardrop 数据集，REV-INR 的 PSNR 最高。需要指出的是，尽管 Det-INR 在少数测试数据上取得了略高的 PSNR，但我们已在第 5.1 节证明，即使 PSNR 较高，Det-INR 仍可能生成错误的等值面。因此，我们主张采用不确定性感知 INR，而非其确定性对应方法，以提高隐式神经表示预测结果的可靠性。在不确定性隐式神经表示中，REV-INR 的结果更优，压缩比最高可达 2100×。图 10a 也显示了这种存储与 PSNR 之间的优越权衡：REV-INR 始终位于散点图的左上区域，表明其存储–峰值信噪比权衡更佳。

不确定性估计。为评估 AU 和 EU 值的可解释性与可用性，我们计算 EU 与误差场之间的皮尔逊相关系数，以评估二者的一致性。为展示 AU 值的质量，我们计算 AU 与（1）局部方差和（2）基于插值的误差之间的相关性。后者通过先对体数据进行下采样，再使用线性插值将其上采样至原始分辨率获得。我们发现，REV-INR 生成的偶然不确定性估计与局部方差值的相关性最高。计算与插值误差的相关性时，除 Vortex 数据集外，REV-INR 在所有数据集上均取得最高相关性；在 Vortex 数据集上，MCD-INR 的相关性最高。图 10b 中也能看出 AU-局部方差、AU-插值误差与 EU-预测误差之间较高的相关性，雷达图显示了相同的结果。评估不确定性的另一种方法是，使用 AU 和 EU 的预测均值与方差参数化高斯分布，并据此计算负对数似然（NLL），如 [50] 所示。表1报告了结果。REV-INR 在 Isabel 和 Foot 数据集上的 EU 负对数似然表现最佳，而 MCD-INR 在其余数据集上表现最佳。对于 AU 负对数似然，RMD-INR 和 MCD-INR 的 NLL 均低于 REV-INR；这符合预期，因为这两种方法都通过高斯负对数似然损失进行显式优化。

训练和推理时间。从表1中可以看出，REV-INR的训练时间最长，训练时间达到

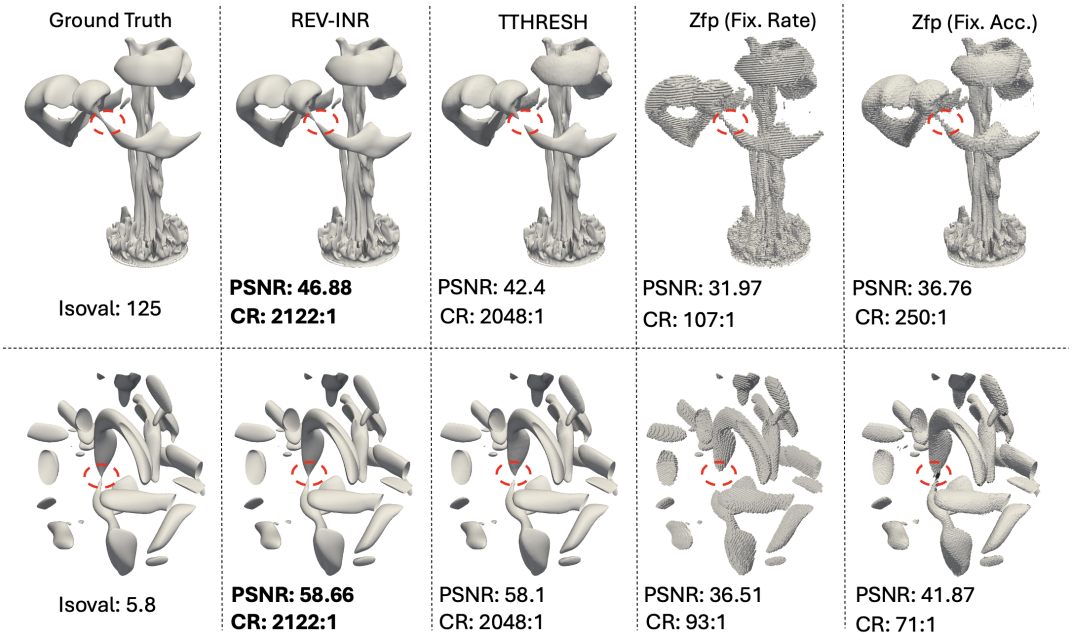


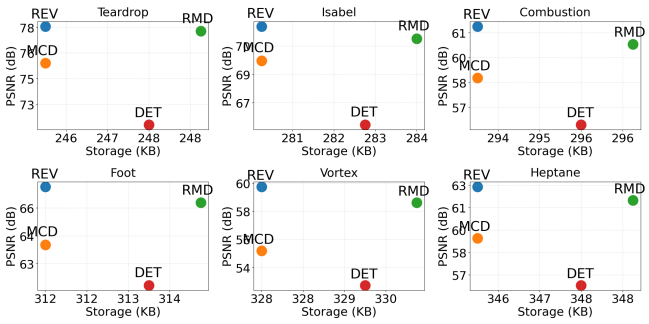
图9：REV-INR 与 TTHRESH 和 Zfp 的比较。可以观察到，REV-INR 在压缩比（CR）与峰值信噪比（PSNR）的权衡方面表现最佳，同时实现了最准确的等值面可视化。

表1：定量评估的　　使用多种性能指标，在多个数据集上评估REV-INR、MCD-INR和RMD-INR。在PSN　　R和重建时间列中，最　　优值以粗体并加下划线显示，次优值仅以粗体显示。

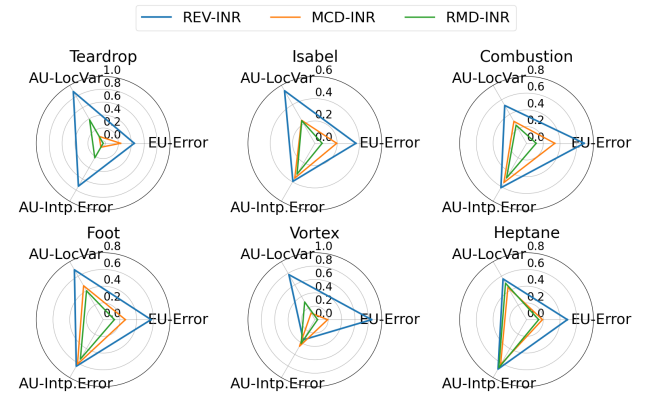
数据集	模型	模型大小（KB）	峰值信噪比（dB） ↑	相关系数（认知不确定性和误差） ↑	相关系数（偶然不确定性和局部方差） ↑	相关系数（偶然不确定性和插值误差） ↑	欧盟负对数似然 ↓	AU负对数似然 ↓	训练时间（小时）	重建时间（秒） ↓
Teardrop 128x128x128 8MB	REV-INR	246	**78.06**	**0.445**	**0.889**	**0.73**	-0.973	-0.35	1.16	**0.13**
	MCD-INR	246	75.91	0.234	0.086	0.034	**-6.17**	-5.95	0.43	3.77
	RMD-INR	249	**77.79**	-0.037	0.384	0.223	0.421	-5.95	0.42	0.28
	Det-INR	248	72.29	-	-	-	-	-	0.374	**0.11**
Isabel 500x500x100 100MB	REV-INR	247	**47.17**	**0.368**	**0.544**	**0.394**	**-1.668**	-1.01	15.34	**1.66**
	MCD-INR	246	45.09	0.196	0.238	0.361	40.45	-3.539	7.91	88.55
	RMD-INR	249	43.79	0.065	0.234	0.319	-0.195	-3.462	4.16	2.92
	Det-INR	248	**47.61**	-	-	-	-	-	4.82	**1.59**
Combustion 480x720x120 158.2兆字节	REV-INR	246	**45.55**	**0.688**	**0.522**	**0.613**	-1.188	-0.951	10.87	**2.75**
	MCD-INR	245	42.68	0.338	0.303	0.542	**-5.172**	**-4.785**	5.23	138.25
	RMD-INR	249	43.01	0.115	0.25	0.478	0.47	-4.51	3.48	4.84
	Det-INR	248	**47.7**	-	-	-	-	-	3.002	**4.44**
Foot 500x500x360 343.32兆字节	REV-INR	246	**43.34**	**0.573**	**0.688**	**0.643**	**-2.337**	-1.551	21.94	**3.73**
	MCD-INR	245	43.04	0.266	0.468	0.614	5.431	**-3.617**	8.73	997.02
	RMD-INR	249	42.39	0.134	0.398	0.545	0.183	-3.51	8.13	10.45
	Det-INR	248	**44.83**	-	-	-	-	-	9.93	**5.85**
Vortex 512x512x512 512兆字节	REV-INR	247	**58.66**	**0.848**	**0.776**	0.348	-2.869	-1.979	37.95	**11.8**
	MCD-INR	246	53.05	0.191	0.113	**0.46**	**-4.34**	-4.355	15.93	455.19
	RMD-INR	249	58.39	0.04	0.305	0.409	-0.118	**-4.89**	9.43	15.52
	Det-INR	248	**60.02**	-	-	-	-	**-**	14.87	**8.98**
庚烷 512x512x512 512兆字节	REV-INR	247	**46.88**	**0.488**	**0.562**	**0.682**	-2.119	-1.494	21.14	**5.56**
	MCD-INR	246	43.84	0.19	0.446	0.621	**-5.6**	**-5.371**	15.96	455.74
	RMD-INR	249	41.22	0.145	0.503	0.663	0.419	-5.06	8.84	15.58
	Det-INR	248	**47.35**	-	-	-	-	-	14.59	**8.84**

最高可达其他不确定性隐式神经表示的 2–3× 倍，但其推理阶段的速度要么最快，要么与 Det-INR 不相上下。对于 Combustion、Foot 和 Heptane 数据集，REV-INR 的推理速度最快。REV-INR 训练时间较长的主要原因是它采用了复杂的证据损失函数，该函数需要计算两个 NIG 分布之间的 KL 散度，这一操作的计算开销很大。此外，偶然不确定性和认知不确定性的正则化还会引入额外计算，进一步增加 REV-INR 的训练成本。不过，训练如今是在离线状态下执行的一次性操作，而推理阶段的速度对于可视分析更为关键。鉴于 REV-INR 的推理速度要么最快，要么与 Det-INR 相当，同时还能提供稳健的不确定性估计，我们认为 REV-INR 可被视为不确定性感知体建模与可视化的首选方案。

消融研究：采用和不采用不确定性正则化的 REV-INR。我们通过消融研究评估所提出的认知不确定性和偶然不确定性正则化损失的有效性。我们在 Teardrop、Isabel、Foot 和 Heptane 数据集上分别采用和不采用正则化来训练 REV-INR。结果见表 2。我们观察到，不采用不确定性正则化时，REV-INR 的相关性较低，这使得对未经正则化的不确定性估计进行解释更具挑战性。因此，我们认为，所提出的不确定性正则化对于训练 REV-INR 并获得有意义的不确定性估计至关重要。



（a）峰值信噪比与存储的权衡散点图。



（b）相关性强度雷达图。

图 10：图 10a 显示，REV-INR 的权衡效果最佳，因为它位于左上角，表明其存储开销最小，且峰值信噪比高于所有其他方法。图 10b 展示了在所有方法中，REV-INR 的偶然不确定性-局部方差、偶然不确定性-插值误差和认知不确定性-预测误差之间的相关性最高。

表 2：认知不确定性与偶然不确定性正则化对 REV-INR 的影响。

数据集	相关系数（认知不确定性与预测误差）↑		相关系数（偶然不确定性与局部方差）↑		相关系数（偶然不确定性与插值误差）↑	
	With 正则化	无 正则化	With 正则化	不使用 正则化	With 正则化	不使用 正则化
泪滴 P	0.445	0.317	0.889	0.351	0.73	0.192
Foot	0.573	0.04	0.688	0.119	0.643	0.291
Isabel	0.368	0.012	0.544	0.077	0.394	0.122
庚烷	0.488	0.07	0.562	0.163	0.682	0.391

7 讨论与局限性

我们的结果证实了 REV-INR 的整体优势：它能够生成经过校准且可解释的不确定性场，并在一次前向传播中实现稳健的数值和不确定性预测。我们还观察到，尽管确定性 INR（Det-INR）偶尔会报告略高的峰值信噪比（PSNR），但也可能生成错误或拓扑不正确的等值面，导致误导性解读。这一观察强调，PSNR 只是全局质量指标，无法反映提取的等值面的结构正确性。相比之下，REV-INR 等不确定性感知模型能够生成可解释且拓扑正确的结果，凸显了不确定性建模对于实现可靠的基于 INR 的可视化至关重要。

REV-INR 的一个潜在局限是训练成本较高，主要原因是证据损失和不确定性正则化的计算开销。不过，由于训练是一次性的离线过程，而且在实际应用中，更快地重建体数据更为理想；考虑到 REV-INR 整体优于现有技术，因此 REV-INR 可以成为不确定性感知体建模的首选。未来，我们将探索多分辨率哈希编码 [29,48], 基于特征网格的 INR 构建，并尝试近似 KL 散度损失计算，以缩短 REV-INR 的训练时间，同时保留其优势。

我们发现，在所有测试体数据集上，使用梯度作为正则化度量来对齐偶然不确定性估计都效果良好；但某些体数据集中的梯度可能与数据方差的相关性较弱。在此类情况下，估计的偶然不确定性可能无法很好地泛化，以捕捉局部数据方差。最后，在所有三种方法中，不确定性正则化都会在重建保真度与不确定性校准之间引入权衡。未来工作将探索自动化策略来平衡这些相互竞争的目标，使 REV-INR 更加稳健，同时在不牺牲可靠性的前提下提升重建质量。

8 结论与未来工作

本研究凸显了在基于隐式神经表示的可视分析中纳入不确定性的重要性。我们提出了 REV-INR，这是一种具备不确定性感知能力的正则化隐式神经表示，并展示了其优于两种不确定性隐式神经表示。未来的工作将着重于加速 REV-INR，并将其扩展至多变量数据集和集成数据集。这些融合不确定性信息的可视化揭示了需要进一步训练的区域，并暴露了模型的局限性，凸显了模型置信度对于科学决策中信任与可靠性的重要意义。

致谢

本研究由印度理工学院坎普尔分校启动基金资助（项目编号 *IITK/CS/2022307*）。我们感谢匿名评审提供的真知灼见，帮助改进本文。伊莎贝尔飓风数据集由美国国家大气研究中心的 Wei Wang、Cindy Bruyere、Bill Kuo 等人慷慨提供。美国国家大气研究中心的 Tim Scheitlin 将数据转换为上述浮点砖块格式。Combustion 数据集由桑迪亚国家实验室的 Jacqueline Chen 博士通过美国能源部的 SciDAC 超大规模可视化研究所提供。足部数据集由德国汉堡的飞利浦研究院提供，并取自体数据图书馆（http://volume.open-terrain.org/）。我们感谢犹他大学意外火灾与爆炸模拟中心提供 Heptane 数据集。

参考文献

[1] A. Amini、W. Schwarting、A. Soleimany 和 D. Rus。深度证据回归。载于神经信息处理系统国际会议第*34*届会议论文集，NIPS'20。Curran Associates Inc.，美国纽约州雷德胡克，2020年。[2] T. Athawale 和 A. Entezari。等值面提取中线性插值的不确定性量化。*IEEE Transactions on Visu- alizationand Computer Graphics*，19(12)：2723–2732，2013年。doi：10. 1109/TVCG.2013.208[3] T. Athawale、E. Sakhaee 和 A. Entezari。采用不确定性非参数模型的数据等值面可视化。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，22(1)：777–786，2016年。doi：10.1109/TVCG.2015.2467958[4] T. M. Athawale、B. Ma、E. Sakhaee、C. R. Johnson 和 A. Entezari。面向不确定性非参数模型的直接体绘制。*IEEETransactions on Visualization and Computer Graphics*，27(2)：1797– 1807，2021年2月。[5] T. M. Athawale、S. Sane 和 C. R. Johnson。行进正方形与行进立方体拓扑情形的不确定性可视化。载于*2021 IEEE* 可视化会议 *(VIS)*，第106–110页，2021年。doi：10. 1109/VIS49827.2021.9623267[6] R. Ballester-Ripoll、P. Lindstrom 和 R. Pajarola。TTHRESH：多维可视化数据的张量压缩。*IEEE Transactions on Visualization andComputer Graphics*，26(9)：2891–2903，2020年。doi：10 .1109/TVCG.2019.2904063[7] M. Berger、J. Li 和 J. A. Levine。用于体绘制的生成模型。*IEEE transactions onvisualizationand computer graphics*，25(4)：1636–1650，2018年。

[8] H. Carr、J. Snoeyink 和 M. van de Panne。使用局部几何度量简化灵活等值面。载于*IEEE Visualization 2004*，497–504, 2004 10 1109 2004 96 第–页。doi：。/[9] VISUAL。。S. Dutta、F. Nizar、A. Amaan 和 A. Acharya。神经网络深度图像合成中预测不确定性的可视分析。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，第1 13页，2024年 10 1109 2024 3406959 – 。doi：。/TVCG。。[10] Y. Gal 和 Z. Ghahramani。Dropout 作为贝叶斯近似：表示深度学习中的模型不确定性。载于*ICML*论文集，第1050–1059页，2016年。[11] J. Gao、M. Chen、L. Xiang 和 C. Xu。证据深度学习及其应用的综合综述，2024年。[12] F. K. Gustafsson、M. Danelljan 和 T. B. Schon。评估用于稳健计算机视觉的可扩展贝叶斯深度学习方法。载于*2020 IEEE/CVF*计算机视觉与模式识别会议研讨会*(CVPRW)*，第1289–1298页，2020年。doi：10.1109/ CVPRW50498.2020.00167[13] J. Han 和 C. Wang。SSR-TVD：用于时变数据分析与可视化的空间超分辨率。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，28(6)：2445–2456，2020年。[14] J. Han 和 C. Wang。CoordNet：通过基于坐标的神经网络实现时变体数据的数据生成与可视化生成。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，29 12 4951 4963, 2023 10 1109 2022 3197203 ( )：–。doi：。[15] /TVCG。。J. Han 、 H. Zheng 和 C. Bi。KD-INR：基于知识蒸馏的隐式神经表示实现时变体数据压缩。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，30 10 6826 6838, 2024 10 1109 2023 3345373 ( )：–。doi：。[16] /TVCG。。J. Han 、 H. Zheng 、 D. Z. Chen 和 C. Wang。STNet：用于合成时空超分辨率体数据的端到端生成式框架。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，28(1)：270–280，2021年。[17] M. Han、T. M. Athawale、D. Pugmire 和 C. R. Johnson。通过深度学习加速时变标量集合的概率行进立方体。载于*2022 IEEE*可视化与视觉分析会议*(VIS)*，第 155 159, 2022 10 1109 54862 2022 00040 –页。doi：。[18] /VIS 。。W. He 、 J. Wang 、 H. Guo 、 K.-C. Wang 、 H.-W. Shen 、 M. Raj、Y. S. Nashed 和 T. Peterka。InSituNet：用于集合模拟参数空间探索的深度图像合成。*IEEE transactions on visualization and computer graphics*，26(1)：23–33，2019年。[19] F. Hong、C. Liu 和 X. Yuan。DNN-VolVis：由深度神经网络支持的交互式体可视化。载于*2019 IEEE*太平洋可视化研讨会*(PacificVis)*，第 282–291 页。IEEE，2019 年。[20] A. Kendall 、 V. Badrinarayanan 和 R. Cipolla。贝叶斯SegNet：用于场景理解的深度卷积编码器—解码器架构中的模型不确定性。载于英国机器视觉会议*2017, BMVC 2017*，英国伦敦，*2017*年*9*月*4*日至*7*日。BMVA Press，2017年。[21] A. Kendall 和 Y. Gal。贝叶斯深度学习在计算机视觉中需要哪些不确定性？载于神经信息处理系统国际会议第*31*届会议论文集，NIPS'17，第5580–5590页。Curran Associates Inc.，美国纽约州雷德胡克，2017年。[22] D. P. Kingma 和 J. Ba。Adam：一种随机优化方法。*arXiv*预印本 *arXiv:1412.6980*，2014年。[23] A. Knoll、Y. Hijazi、A. Kensler、M. Schott、C. Hansen 和 H. Hagen。使用区间算术和仿射算术对任意隐式曲面进行快速光线追踪。*Computer Graphics Forum*，28(1)：26–40，2009年2月。doi：10.1111/j.1467-8659.2008.01189.x [24] A. Kumar、S. Garg 和 S. Dutta。面向矢量场数据可视分析的不确定性感知深度神经表示。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，31(1)：1343–1353，2025年。doi：10.1109/TVCG.2024.3456360[25] B. Lakshminarayanan、A. Pritzel 和 C. Blundell。使用深度集成进行简单且可扩展的预测不确定性估计。载于神经信息处理系统进展，第6402–6413页，2017年。[26] P. Lindstrom。定比特率压缩浮点数组。*IEEETransactions on Visualization and Computer Graphics*，20(12)：2674–2683, 2014 10 1109 2014 2346458 。doi：。/TVCG。。S. [27] Liu、J. Levine、P. Bremer 和 V. Pascucci。基于高斯混合模型的体可视化。载于*2012 IEEE*大数据分析与可视化研讨会*(LDAV)*，第73–77页，2012年。[28] Y. Lu、K. Jiang、J. A. Levine 和 M. Berger。体标量场的压缩神经表示。Computer Graphics Forum，40 3 135 146, 2021 10 1111 14295 ( ): – 。doi: . /cgf。T. [29] Müller、A. Evans、C. Schied 和 A. Keller。采用多分辨率哈希编码的即时神经图形基元。ACM Trans. Graph.，41 4 2022 10 1145 3528223 3530127 ( )，7月。doi: . / 。Y. [30] Ovadia、E. Fertig、J. Ren、Z. Nado、D. Sculley、S. Nowozin、J. V. Dillon、B. Lakshminarayanan 和 J. Snoek。你能相信模型的不确定性吗？数据集偏移下预测不确定性的评估。Curran Associates Inc.，美国纽约州雷德胡克，2019年。[31] K. P¨othkow 和 H.-C. Hege。等值线的位置不确定性：条件分析与概率度量。IEEE Trans. on Vis. and Comp. Graphics，17:1393–1406，2011年。[32] K. P¨othkow、B. Weber 和 H.-C. Hege。概率行进立方体。载于第13届 Eurographics / IEEE - VGTC 可视化会议论文集（EuroVis'11），第931–940页，2011年。[33] E. Sakhaee 和 A. Entezari。用于不确定数据可视化的统计直接体绘制框架。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，23(12):2509–2520，2017年。doi: 10.1109/TVCG.2016.2637333[34] S. Saklani、C. Goel、S. Bansal、Z. Wang、S. Dutta、T. M. Athawale、D. Pugmire 和 C. R. Johnson。使用隐式神经表示进行不确定性感知体可视化。载于2024 IEEE 不确定性可视化：应用、技术、软件与决策框架研讨会，第62–72页，2024年。doi: 10.1109/UncertaintyVisualization 63963 2024 00013 . 。J. Shen、Y. Duan 和 [35] H.-W. Shen。Surroflow：用于参数空间探索和不确定性量化的基于流的代理模型。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，31 1 635 644, 2025 10 1109 2024 3456372 ( ): – 。doi: . /[36] TVCG. 。J. Shen、H. Li、J. Xu、A. Biswas 和 H.-W. Shen。IDLat：一种面向科学数据的重要性驱动潜变量生成方法。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，29 689，2022 1 679( ): – 。[37] J. Shen 和 H.-W. Shen。PSRFlow：利用基于流的模型对科学数据进行概率超分辨率。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，30(1):986–996，2024年。doi: 10. 1109/TVCG.2023.3327171 [38] N. Shi、J. Xu、H. Li、H. Guo、J. Woodring 和 H.-W. Shen。VDL-Surrogate：用于集合模拟参数空间探索的视点相关潜变量模型。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，29(1):820–830，2022年。[39] D. Silver 和 X. Wang。跟踪并可视化湍流三维特征。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，3(2):129–141, 1997 10 1109 2945 597796 。doi: . / 。V. Sitzmann、J. N. [40] Martel、A. W. Bergman、D. B. Lindell 和 G. Wet-zstein。具有周期性激活函数的隐式神经表示。载于 NeurIPS 论文集，2020年。[41] K. Tang 和 C. Wang。STSR-INR：通过隐式神经表示对多变量时变体数据进行时空超分辨率。Computers & Graphics，119:103874，2024年。doi: 10.1016/j.cag.2024.01.001[42] F. Vasconcelos、B. He、N. M. Singh 和 Y. W. Teh。UncertaINR：计算机断层扫描端到端隐式神经表示的不确定性量化。Transactions on Machine Learning Research，2023年。[43] Z. Wang、T. M. Athawale、K. Moreland、J. Chen、C. R. Johnson 和 D. Pugmire。FunMC^2：用于多核设备上行进立方体不确定性可视化的滤波器。载于 R. Bujack、D. Pugmire 和 G. Reina 编，Eurographics 并行图形与可视化研讨会。The Eurographics Association，2023年。doi: 10.2312/pgv.20231081[44] G. Weber、G. Scheuermann、H. Hagen 和 B. Hamann。使用临界等值探索标量场。载于 IEEE Visualization，2002年。VIS *2002* 171 178, 2002 10 1109 2002 1183772 .，第 – 页。[45] doi: . /VISUAL. 。S. Weiss、M. Chu、N. Thuerey 和 R. Westermann。利用基于深度学习的超分辨率进行体等值面渲染。IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics，27(6):3064–3078，2019年。[46] S. Weiss、P. Herm¨uller 和 R. Westermann。用于直接体绘制的快速神经表示。

Computer Graphics Forum，41(6):196–211，2022年。[47] R. T. Whitaker、M. Mirzargar 和 R. M. Kirby。等高线箱线图：一种用于表征模拟集合中特征集不确定性的方法。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，19(12):2713–2722，2013年。[48] Q. Wu、D. Bauer、M. J. Doyle 和 K.-L. Ma。基于多分辨率哈希编码神经表示的交互式体可视化。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，

30 8 5404 5418, 2024 10 1109 2023 3293121 ( ): – 。[49] doi: . /TVCG. 。S. W. Wurster、H. Guo、H.-W. Shen、T. Peterka 和 J. Xu。面向科学数据的深度分层超分辨率。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，2022年。[50] T. Xiong、S. W. Wurster、H. Guo、T. Peterka 和 H.-W. Shen。面向误差感知场景表示网络的正则化多解码器集成。*IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*，第

1 11, 2024 10 1109 2024 3456357 –页。doi: . /[51] TVCG. 。S. Xu、Y. Wang、M. Fan、B.-J. Yoon 和 X. Qian。用于遥感目标计数的不确定性感知连续隐式神经表示。载于国际人工智能与统计学会议，第4105–4113页。PMLR，2024年。[52] S. Zaidi、A. Zela、T. Elsken、C. Holmes、F. Hutter 和 Y. W. Teh。用于不确定性估计和数据集偏移的神经集成搜索。载于第*35*届神经信息处理系统国际会议论文集，NIPS '21。Curran Associates Inc.，美国纽约州雷德胡克，2021年。