Физически информированное глубокое обучение для оценки параметров кровотока в бифуркации сосудов человека

ИВМ РАН

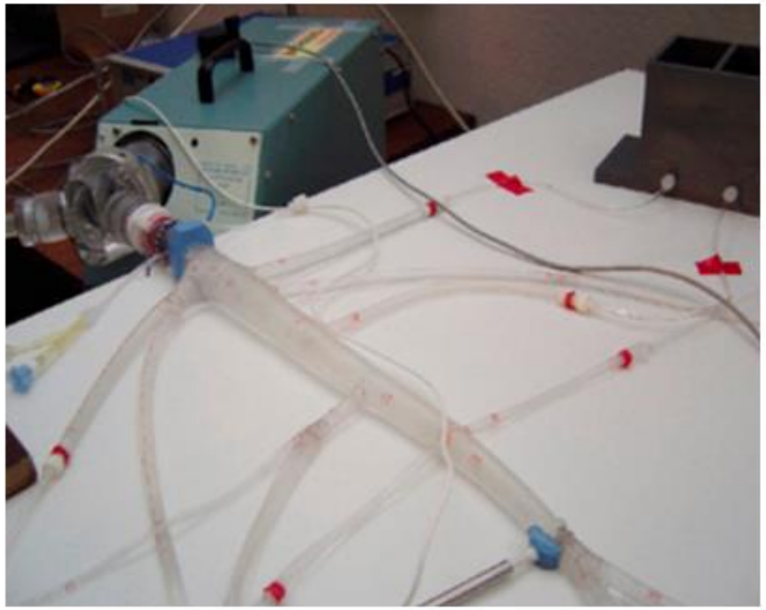
А. А. Исаев (ИВМ РАН)

С.С.Симаков (МФТИ, Сеченовский унив.)

Т.К.Добросердова (ИВМ РАН)

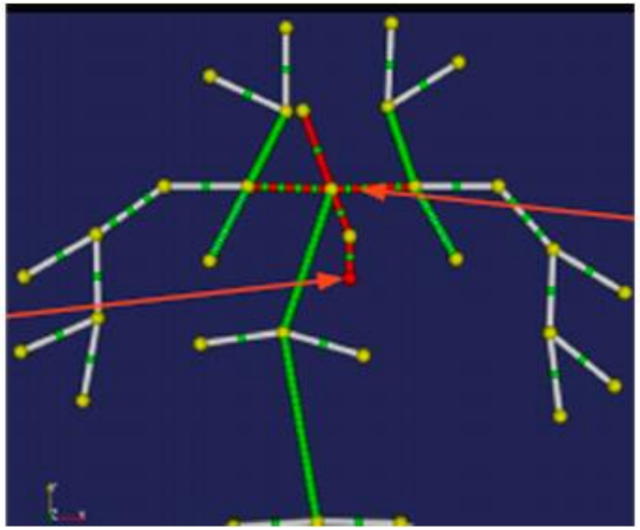
А.А.Данилов (ИВМ РАН)

Модели кровообращения



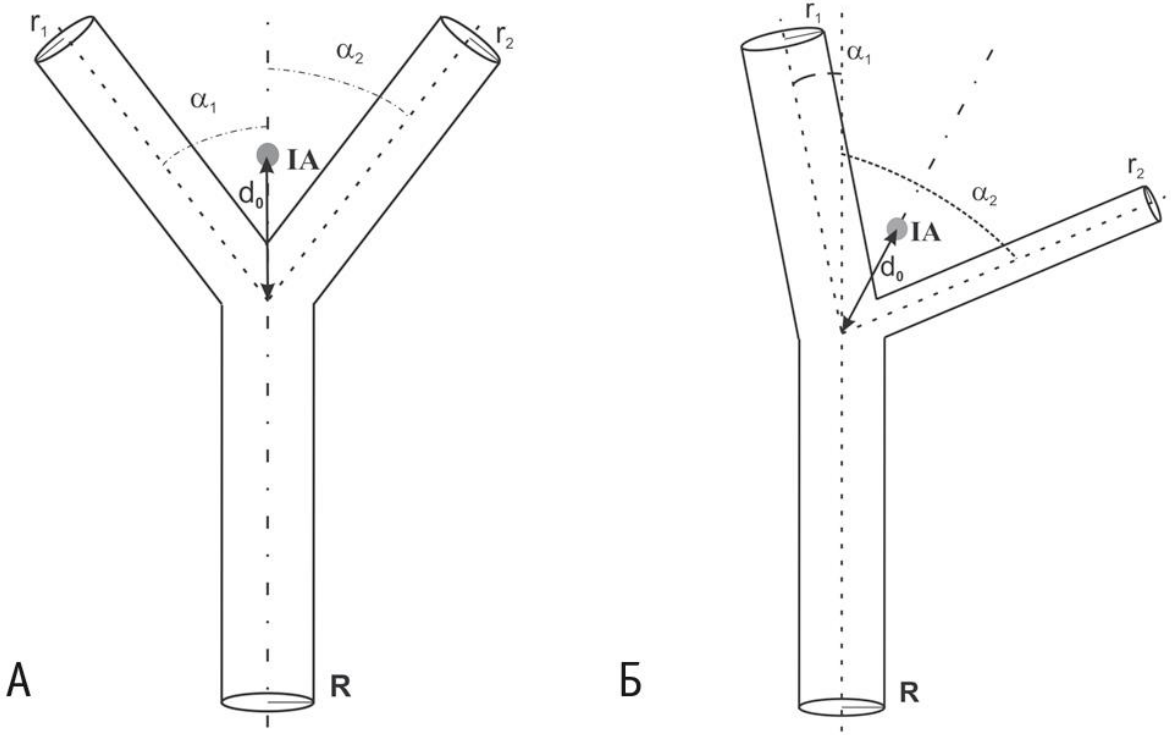
лабороторные модели

трехмерные модели



одномерные модели

Бифуркация сосудов



3D модель течения крови

- Уравнения Навье-Стокса:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu\Delta\mathbf{u} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} + \nabla p = \mathrm{f} \text{ in } \Omega \times [0,T],$$

$$div\,\mathbf{u} = 0 \text{ in } \Omega \times [0,T]$$

- Граничные условия:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_W \times [0,T],$$

$$-\nu\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} + p\mathbf{n} = \mathbf{h} \text{ на } \Gamma_N \times [0,T]$$

1D модель течения крови

1. Баланс массы

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial (uS)}{\partial x} = 0$$

2. Баланс импульса

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{u^2}{2} + \frac{p}{\rho}\right) = -16\mu u \frac{\eta(S)}{Sd^2}, \ \eta(S) = \begin{cases} 2, S > S_0 \\ \frac{S}{S_0} + \frac{S_0}{S}, S \le S_0 \end{cases}$$

3. Уравнение состояния

$$p = \rho c^2 f(S), \ f(S) = \begin{cases} \exp\left(\frac{S}{S_0} - 1\right) - 1, S > S_0 \\ \ln\left(\frac{S}{S_0}\right), S \le S_0 \end{cases}$$

Граничные условия в точках стыковки сосудов

1. Закон сохранения массы:

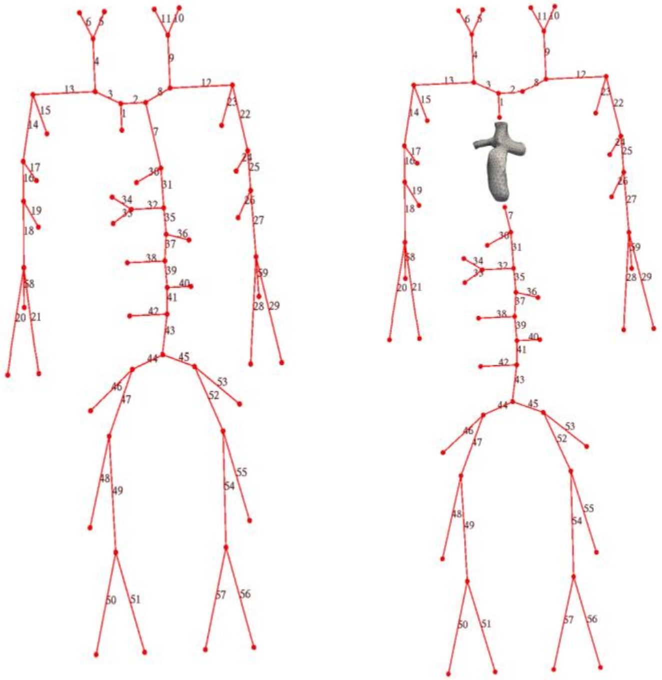
$$\sum_{k=k_1,\dots,k_M} \alpha_k^m Q_k = 0, \alpha_k^m = \pm 1, Q_k = u_k S_k$$

2. Закон Пуазейля:

$$p_k(t, x_k) - p_m^{node}(t) = \alpha_k R_k^m Q_k, x_k = 0, L_k$$

3. Уравнения совместности (условия, накладываемые характеристиками, покидающими область интегрирования)

Двумасштабная модель кровотока конкретного пациента



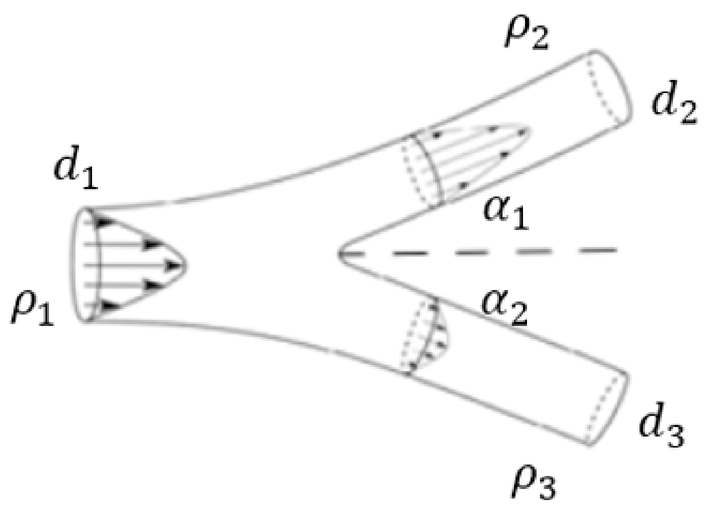
[Two-scale haemodynamic modelling for patients with Fontan circulation]

Tatiana K. Dobroserdova, Yuri V. Vassilevski , Sergey S. Simakov , Timur M. Gamilov , Andrey A. Svobodov and Lyudmila A. Yurpolskaya

Использование нейронных сетей

- В случае большего числа бифуркаций моделировать каждую из них в 3D – дорого
- Поток в бифуркации сложный и те уравнения, которые сейчас используются в качестве граничных условий не достигают идеальной точности в описании этого потока
- Нейронная сеть может сделать процесс дешевле и проще, если она будет иметь точность предсказаний не меньше, чем у 3D модели

Постановка задачи



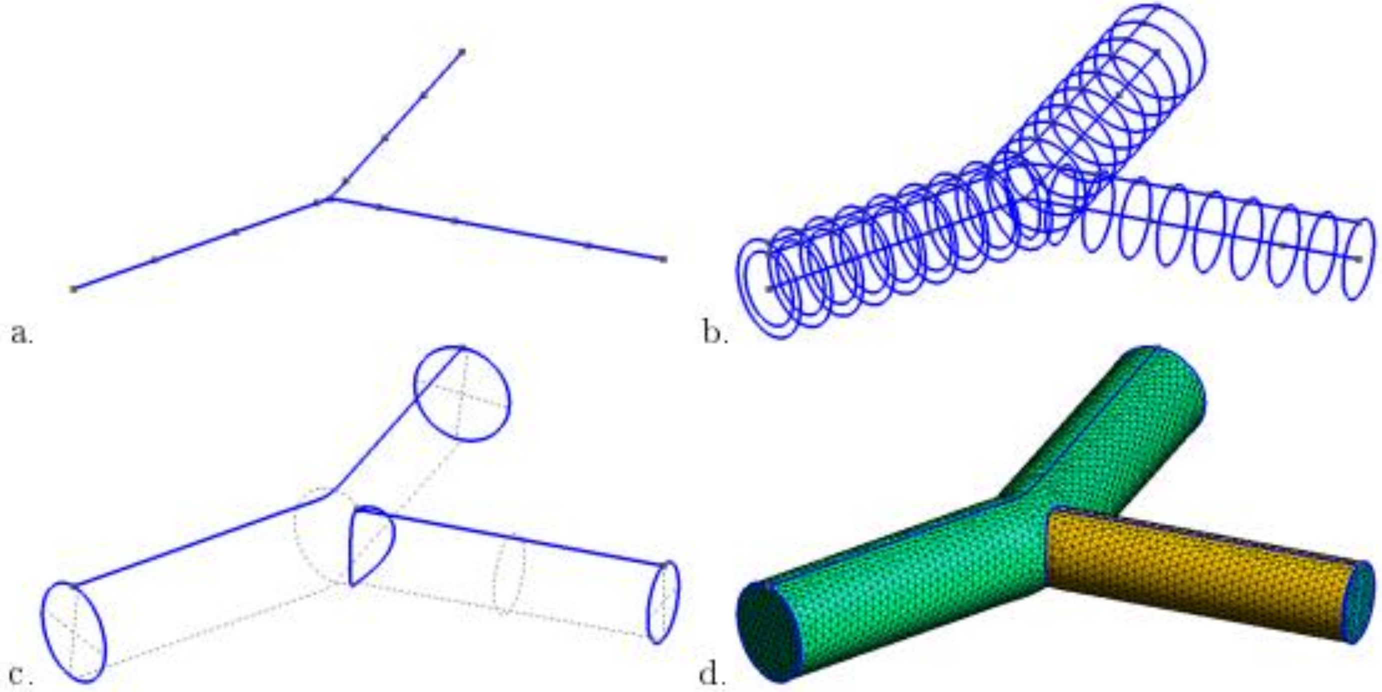
модель бифуркации

Необходимо построить DL-модель, которая на основе:

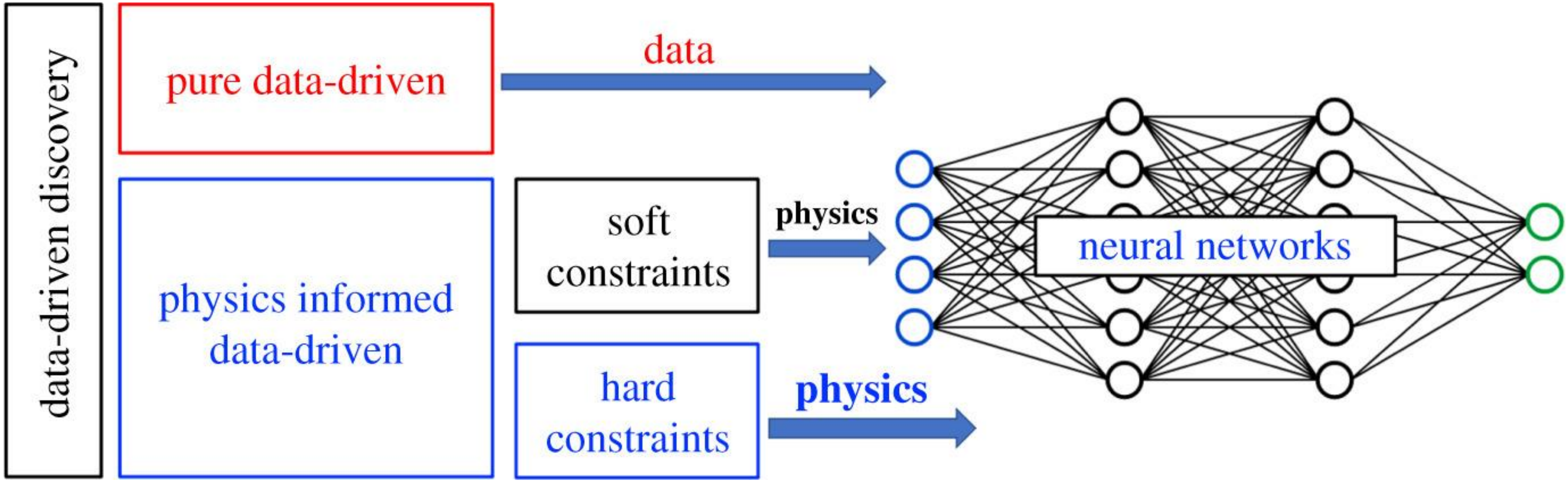
- углов бифуркации
- радиусы на входе и выходах
- давления на входе и выходах

будет приближать значение потоков на входе и выходах

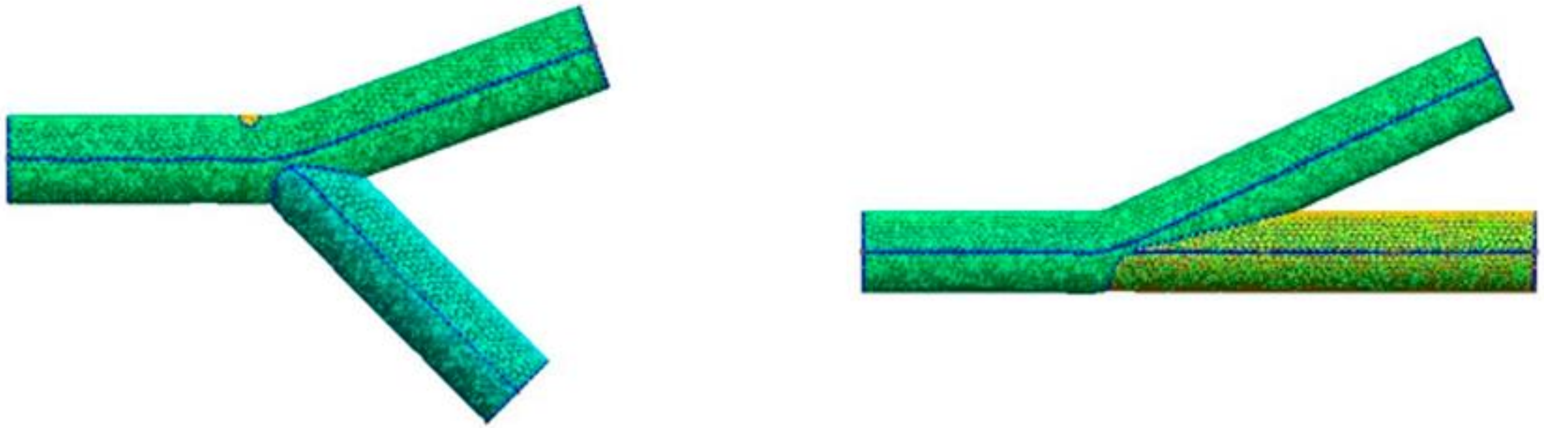
Данные для обучения



Physics-informed neural networks



Первый подход



I=1, примеры сгенерированных сеток

3200 строк данных для обучения
- Фиксированный радиусы и длина сосудов
- Разные углы бифуркации и давление на входе

Первый подход

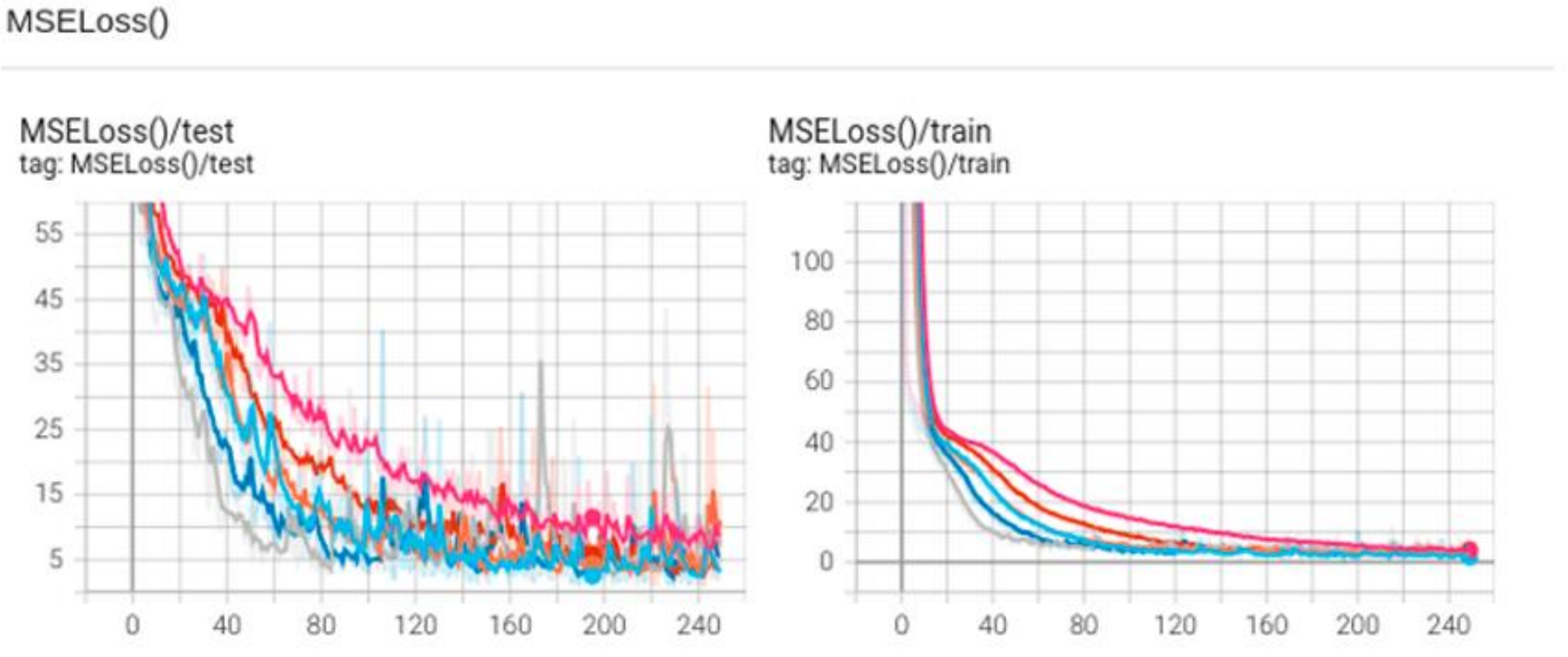
	Q2	Q3	Q4	P2	P3	P4	Mesh
	34.37	-17.23	-17.14	-299.99	-0.01	-0.01	a1=40_a2=-5.ani
	22.91	-11.49	-11.42	-199.99	-0.01	0	a1=40_a2=-5.ani
	11.46	-5.74	-5.71	-100	0	0	a1=40_a2=-5.ani
	0	0	0	0	0	0	a1=40_a2=-5.ani
	-11.46	5.74	5.71	100	0	0	a1=40_a2=-5.ani
	-22.91	11.49	11.42	199.99	0.01	0	a1=40_a2=-5.ani
	-34.37	17.23	17.14	299.99	0.01	0.01	a1=40_a2=-5.ani
	-45.83	22.98	22.85	399.99	0.01	0.01	a1=40_a2=-5.ani
	-57.28	28.72	28.56	499.98	0.01	0.01	a1=40_a2=-5.ani
	-68.74	34.47	34.27	599.98	0.02	0.01	a1=40_a2=-5.ani

I=1, таблица с данными для обучения

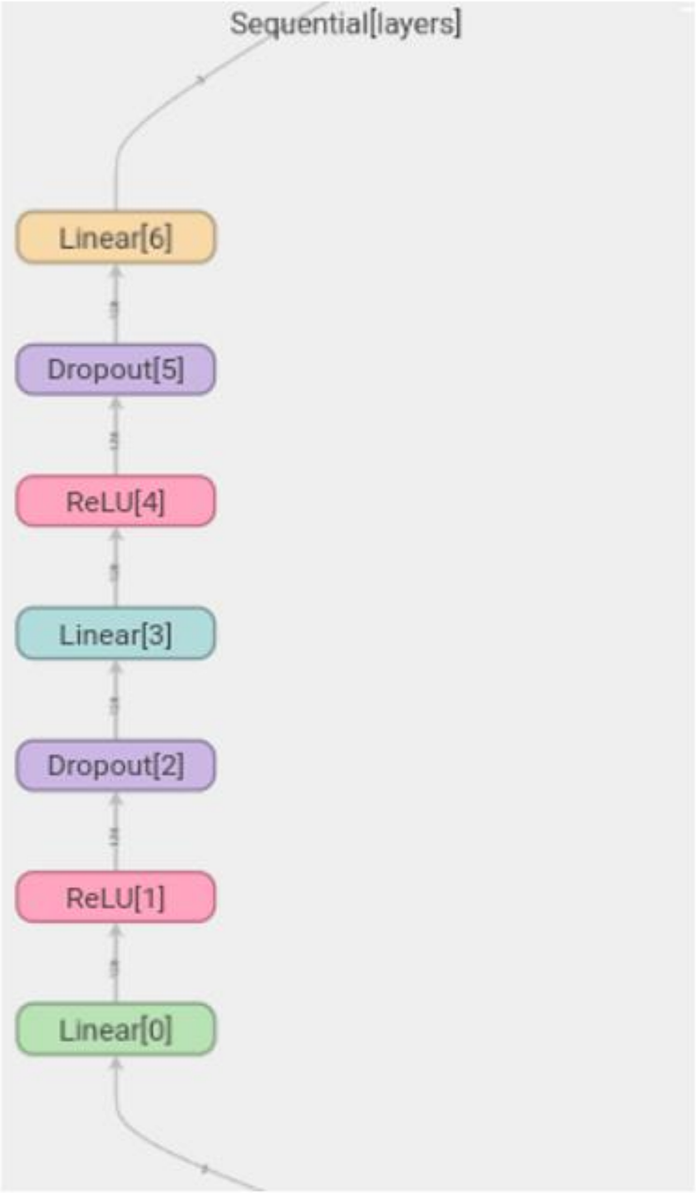
3200 строк данных для обучения

- Фиксированный радиусы и длина сосудов
- Разные углы бифуркации и давление на входе

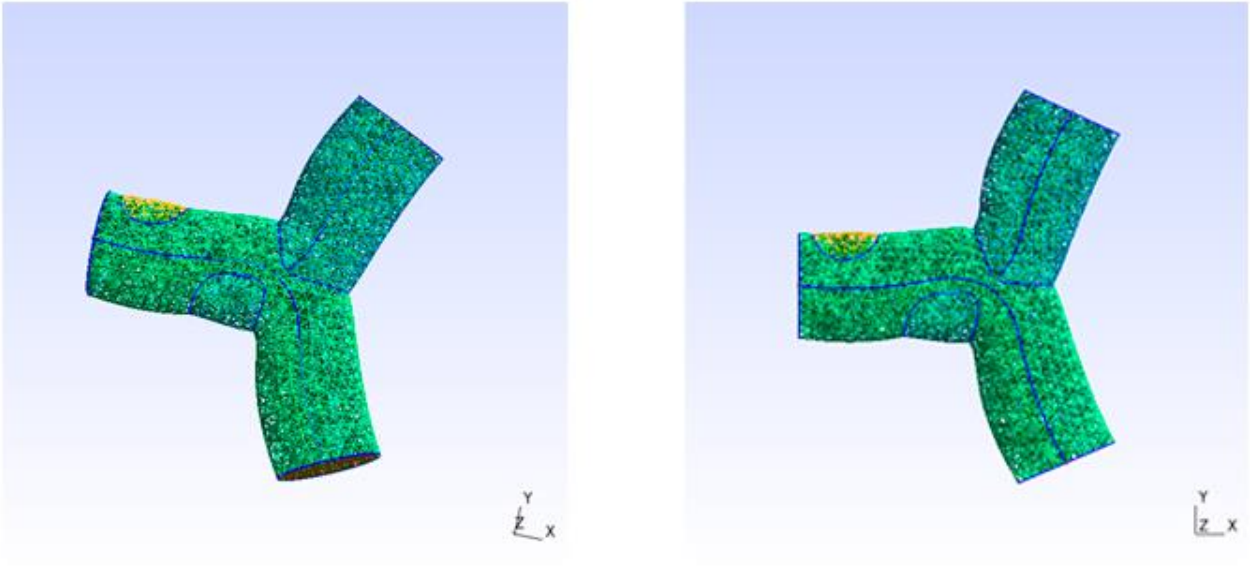
Первый подход



I=1, сходимость функции потерь



Второй подход

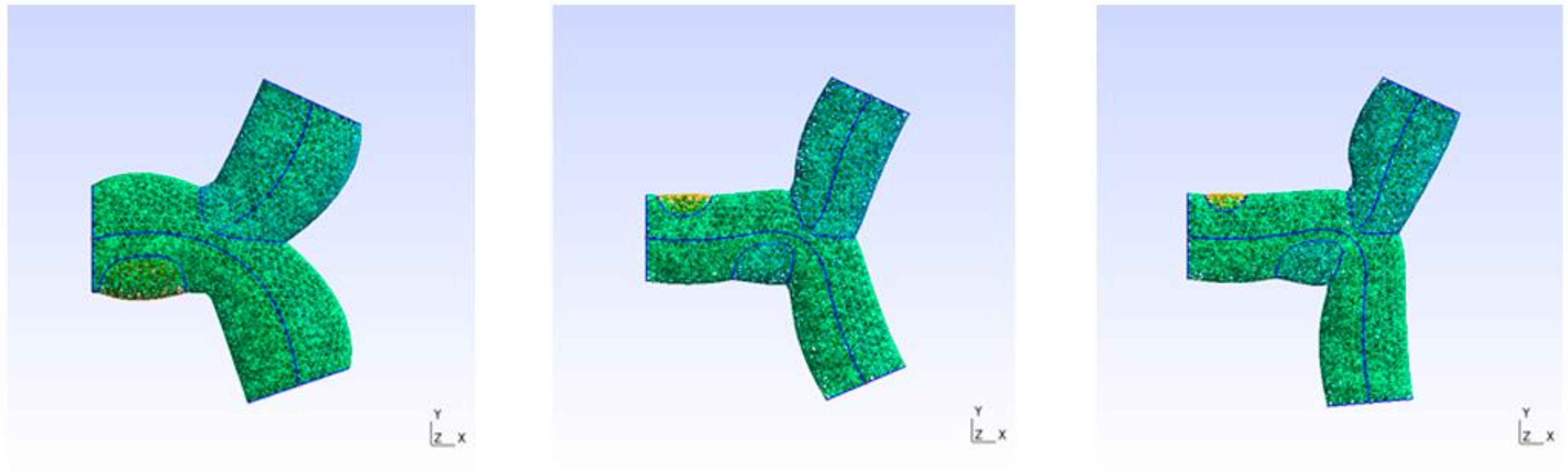


I=2, примеры сгенерированных сеток

27000 строк данных для обучения

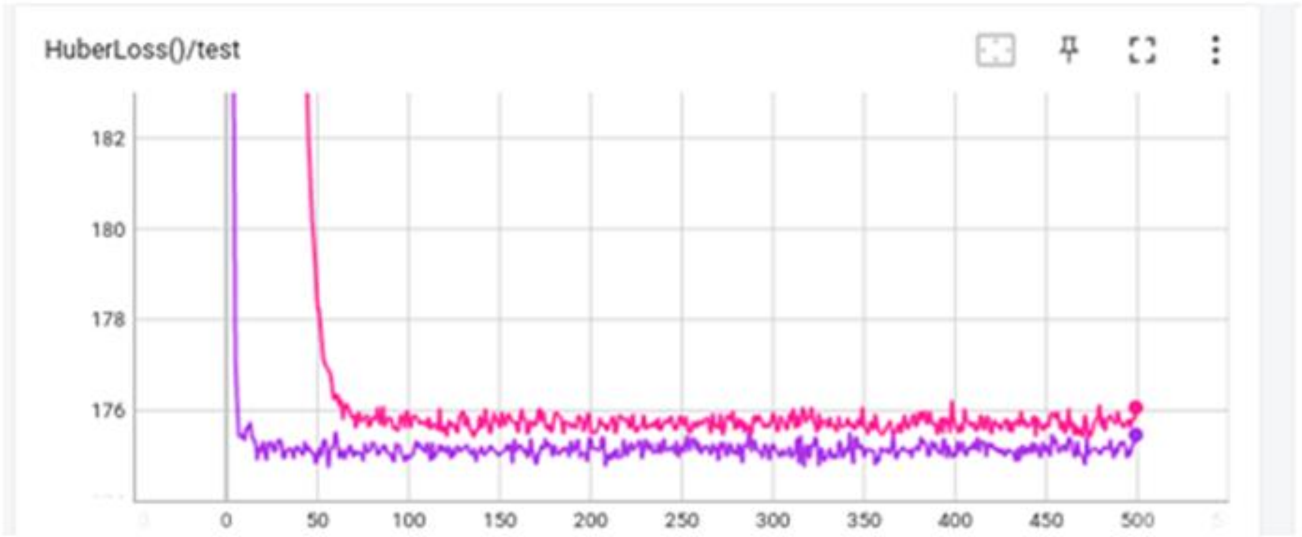
- Фиксированная длина сосудов
- Разные радиусы сосудов
- Разные углы бифуркации и давление на входе

Сложности при массовой генерации



I=2, сложности на этапе генерации

Второй подход



I=2, сходимость функции потерь

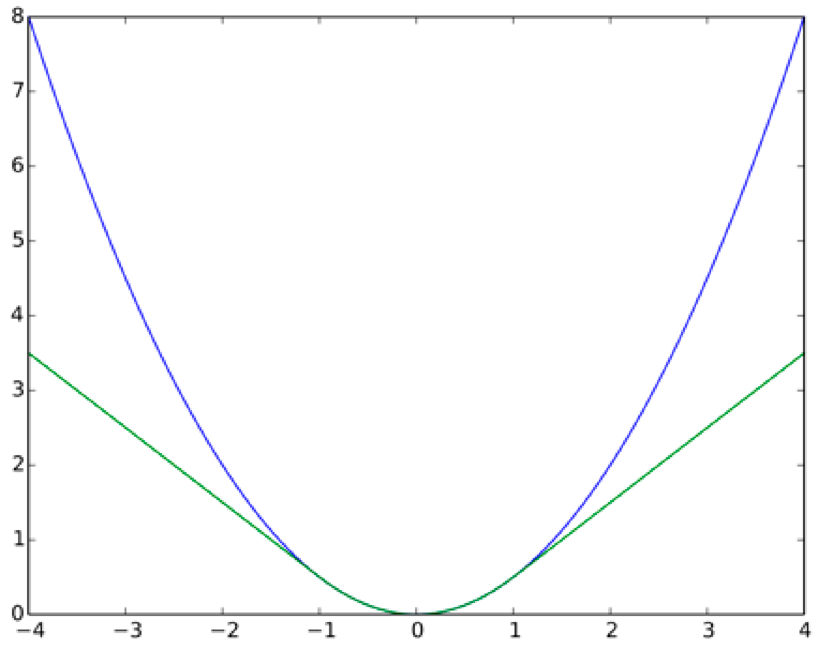
Почти во всех экспериментах достигалась сходимость функции ошибки к одной и той же константе.

Различные эвристические методы не помогли решить эту проблему.

Итоги второго подхода

- Набор данных расширен доп. параметрами (радиусы сосудов)
- Сгенерировано 27 тыс. строк (в первой итерации было 3 тыс.)
- Средняя относительная ошибка модели = 12% (в первой итерации было 5%)
- Модификация модели и дополнительные предобработки данных не привели в улучшению качества

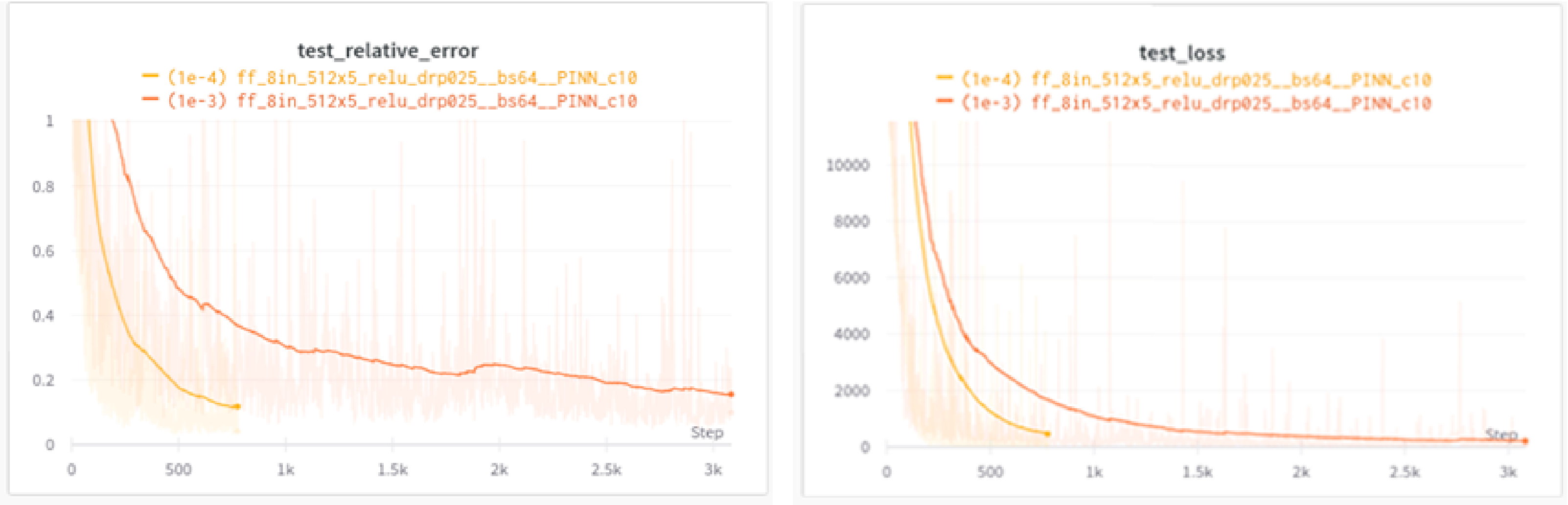
Третий подход



HuberLoss и MSE

$$loss(y_{pred}, y_{true}) = \underbrace{HuberLoss(y_{pred}, y_{true})}_{\text{Базовая функция потерь}} + \underbrace{(q_1 + q_2 + q_3)^2}_{\text{Штраф за нарушение закона сохранения}}$$

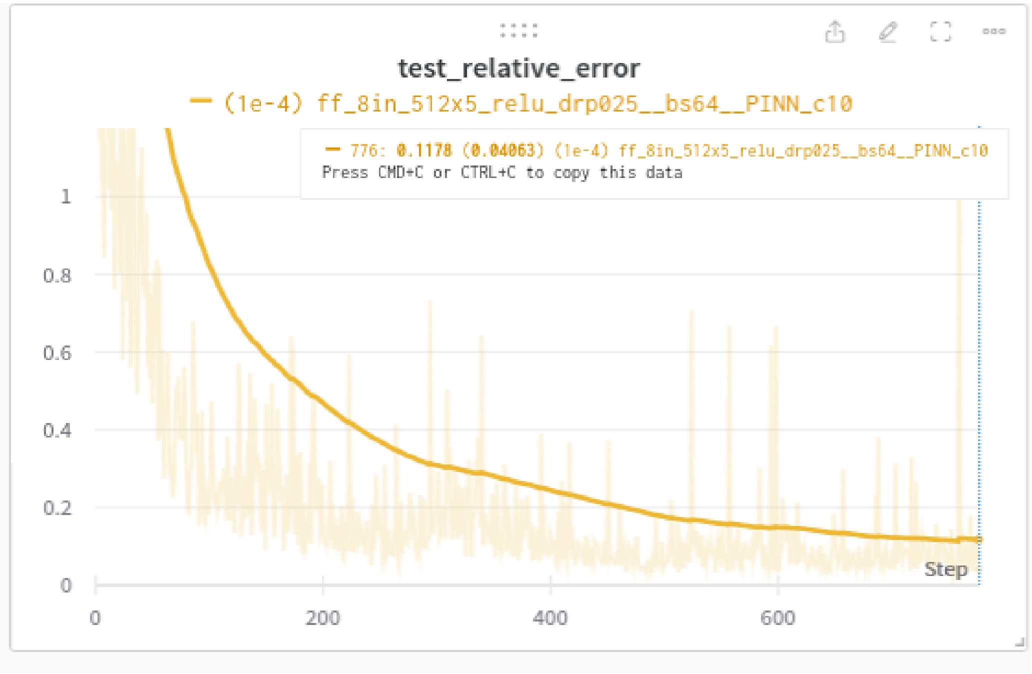
Третий подход



Относительная ошибка и PINN-фунция потерь

Дополнительная генерация данных, всего ~70000

Итоги третьего подхода



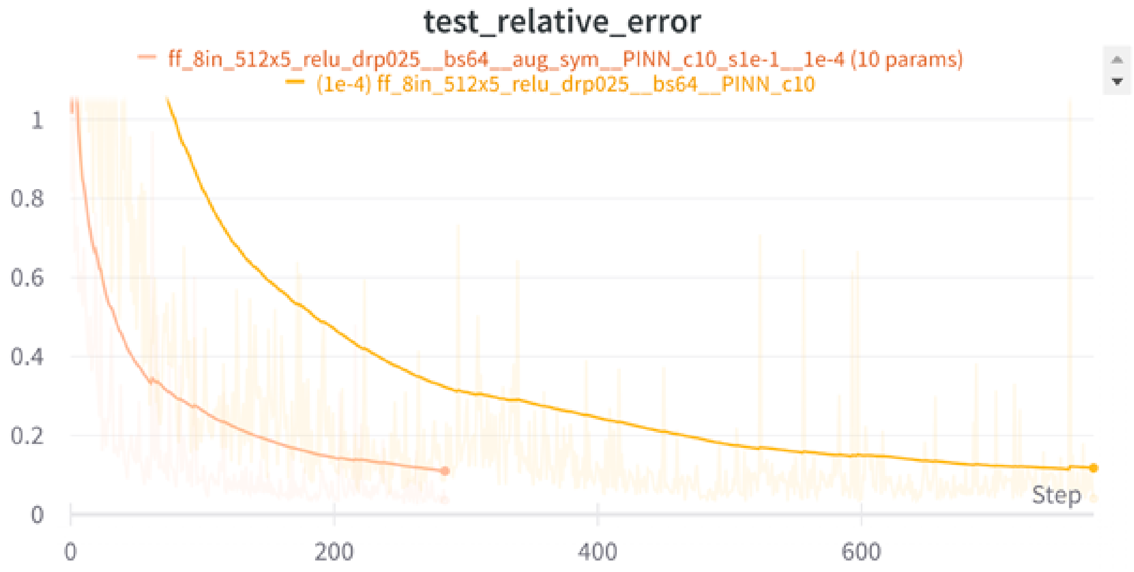
Лучшая итерация (эпоха) обучения

Средняя относительная ошибка модели = 4% за ~800 итераций обучений

Четвертый подход

$$loss(y_{pred}, y_{true}) = \underbrace{HuberLoss(y_{pred}, y_{true})}_{\text{Базовая функция потерь}} + \underbrace{\alpha(q_1 + q_2 + q_3)^2}_{\text{Штраф за нарушение закона сохранения}} + \beta \cdot \underbrace{\mathbb{I}_{\{p2=p3, r2=r3, a1=a2\}} \cdot (q_2 - q_3)^2}_{\text{Штраф за нарушение симметрии системы}}$$

Четвертый подход



I=4, сходимость функции потерь

Введение дополнительного штрафа не только улучшило модель в симметричных системах, но и ускорило сходимость в целом

Следующие шаги

- Решение проблемы симметрии
- Апробация
- Модель для стыка 4х сосудов