

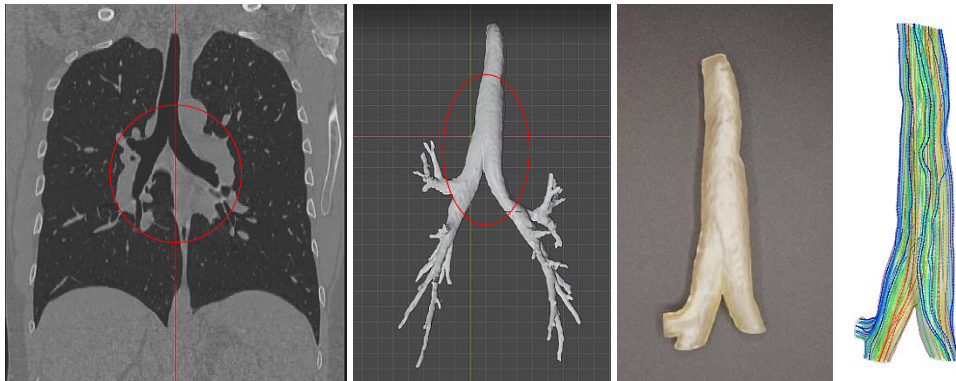


MUCCA – Multi-disciplinary Use Case for Convergent new Approaches to AI explainability

Noi aplicații XAI (Explainable Artificial Intelligence) pe cazuri multidisciplinare,
nr. 206/2020,
desfășurat în cadrul programului PN III Cooperarea Europeană și Internațională
– Subprogram 3.2 - Orizont 2020,

**Raport IV – Analiza și calibrarea rezultatelor numerice;
testarea algoritmului xAI
(Analysis and calibration of numerical results;
testing of the xAI algorithm)**

2023



Partner 5 – University Politehnica of Bucharest, RO
REOROM Laboratory; PI – Prof. Corneliu Balan

Prezentare sintetică a etapei a IV-a

Studiile desfășurate în etapa a 4-a a proiectului se încadrează în tematica prevăzută în contractual de finanțare al proiectului: Etapa IV - *Implementarea și testarea algoritmilor xAI*.

În această etapă principalele activități au fost axate pe două direcții:

1. Implementarea Algoritmului xAI pentru analiza și predicția interfețelor fluide;
2. Analiza și calibrarea rezultatelor numerice ale simulării dinamicii aerului într-un ciclu respirator inspirație-expirație.

Rezultate obținute în urma activităților menționate se încadrează în procedura de analiză imagistică propusă în Tabelul IV.1. Pe baza acestei proceduri, în cooperare cu partenerii din proiect se va implementa algoritmul xAI, în vederea corelării imaginilor CT cu dinamica sistemului respirator și diagnosticul medical, Fig. IV.1.

Menționez că acest proiect, datorită unor disfuncții de finanțare a partenerilor, a fost prelungit cu 6 luni față de termenul prevăzut inițial (noiembrie 2023), termenul de finalizare fiind iunie 2024.

Tabelul IV.1 Procedura de corelarea CT-ului cu funcționarea sistemului respirator
(activitățile desfășurate în 2023 sunt marcate)

Etapă	Activitate	Etapă Proiect/Realizare
1	Reconstrucția geometriei de curgere a aerului din analiza imagistică a CT-ului, cu precădere în zona bifurcației traheale;	Etapa II/Realizat 100%
2	Extragerea și modelarea interfețelor aer – perete – mucus/tumoare în zona bifurcației traheale (dacă este cazul).	Etapa II; Etapa III/ Realizat 100%
3	Obținerea caracteristicilor cinematice (variația în timp a debitului și volumului expirat/inspirat) cu ajutorul spirometrului.	Etapa IV/ Realizat 80%
4	Testarea modelului 3D al bifurcației traheale în standul din laborator, folosind ca date de intrare caracteristicile măsurate cu ajutorul spirometrului. Se va obține variația de presiune din sistem corespunzătoare variației de debit/volum impus.	Etapa III; Etapa IV/ Realizat 90%
5	Simularea numerică a curgerii în bifurcația traheală, în regim de respirație ventilată și în regim de respirație normală; determinarea spectrului curgerii și al variației eforturilor la perete.	Etapa III; Etapa IV/ Realizat 100%
6	Corelarea spectrului curgerii și al variației eforturilor la perete cu imaginea CT și afecțiunile respiratorii ale subiectului.	Etapa IV/ Realizat 90%
7	Implementarea algoritmului xAI pentru analiza interfețelor fluide	Etapa IV Realizat 80%
8	Implementarea algoritmului xAI pentru corelarea imaginii CT a plămânului cu afecțiunile respiratorii	Etapa IV+

Principalele realizări ale etapei IV sunt următoarele:

- 1) Testarea algoritmului xAI pentru analiza interfețelor fluide în diferite configurații de curgere. Procedura are potențial aplicativ în stabilirea și predicția dinamicii mucusului în căile respiratorii.
- 2) Finalizarea procedurii numerice de modelare a ciclului respiratoriu inspirație-expirație în bifurcația traheală, atât în regim de ventilație artificială, cât și în regim de respirație normală. Stabilirea unor criterii cantitative pe baza cărora se poate corela imaginea CT cu funcționarea sistemului respiratoriu, respectiv numărul vorticității și efortul de frecare la perete în zona bifurcației traheale.

Rezultate ale activităților etapei din 2023 au fost diseminate partenerilor din proiect cu ocazia **MUCAA Annual Workshop**, București, 12 - 14.06.2023, fiind de asemenea prezentate la manifestări internaționale prin comunicări științifice suținute oral:

- a) Lucrări publicate
 1. D.D. Cristea, N. O. Tanase, C. Balan, Numerical and Experimental Study of the Airflow in a Square Section Bifurcation, 13th Int. Symp. ATEE, March 23-25, 2023, Bucharest, Romania.
 2. C. Mateescu, N. O. Tanase, C. Balan, CT Image-Based Segmentation, 3D Reconstruction and SLA Printing of Human Trachea, 13th Int. Symp. ATEE, March 23-25, 2023, Bucharest, Romania .
 3. D. Broboana, C-S. Ionescu, C. Balan, Displacement and rupture of viscous interface in vicinity of the wall under an air current, 13th Int. Symp. ATEE, March 23-, 2023, Bucharest, Romania.
- b) Lucrări comunicate (în curs de publicare)
 4. N. O. Tanase, C. Mateescu, D.D. Cristea, Air – Non-Newtonian fluid interaction in bifurcations, 11th Int. Conf. on Energy and Environment - CIEM, Oct. 26-27, 2023, Bucharest, Romania.
 5. I. Magos, D. Broboana, C. Balan, Modelling the fluid interfaces between immiscible fluids, 11th Int. Conf. on Energy and Environment - CIEM, Oct. 26-27, 2023, Bucharest, Romania.
 6. A. Bran, I. Magos, C. Balan, Fluid interface image processing using artificial intelligence, 11th Int. Conf. on Energy and Environment - CIEM, Oct. 26-27, 2023, Bucharest, Romania.
 7. A.-M. Bratu, I. Magos, C. Balan, Dynamics of viscous and viscoelastic fluid surfaces during formation and retraction of filaments, International Congress on Rheology, July 29 – Aug. 4, 2023, Athens, Greece.

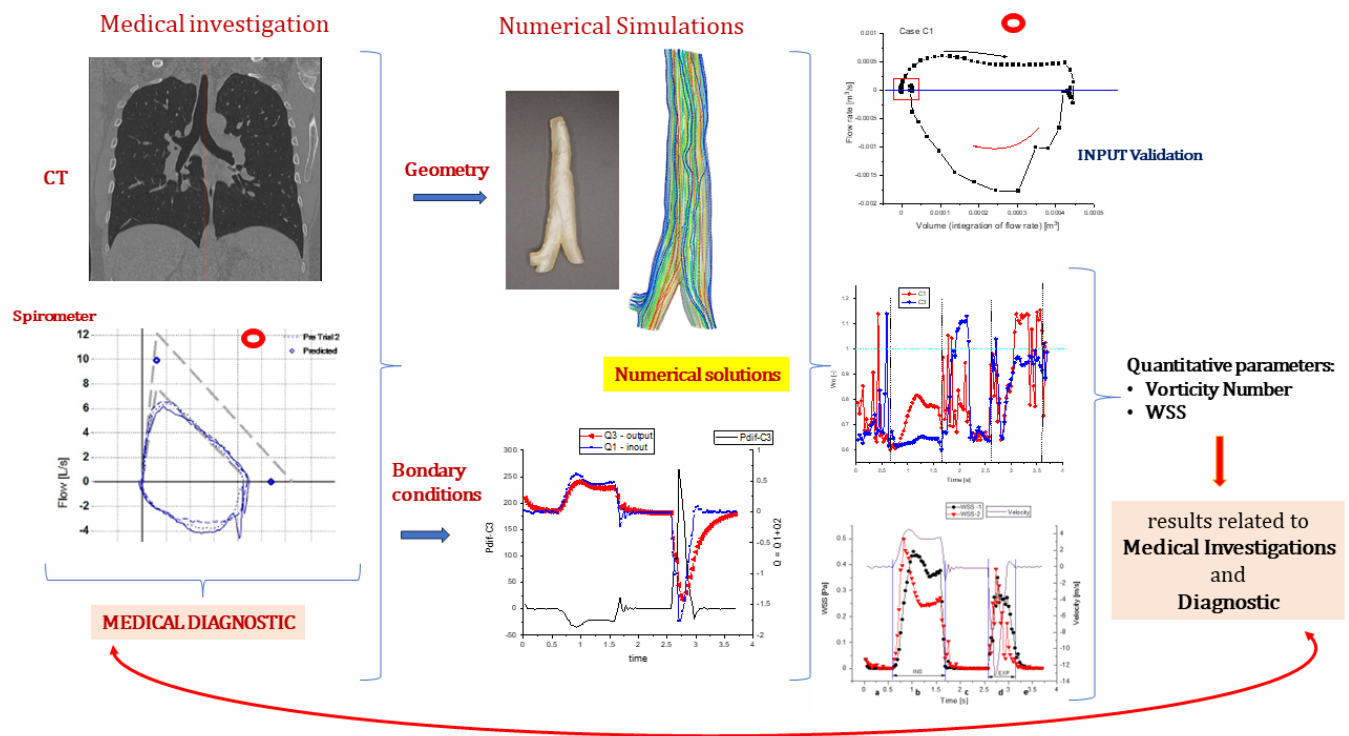


Figura IV.1 Prezentarea sintetică a procedurii de corelare a analizei imagistice cu parametrii cantitativi ce caracterizează dinamica aerului în plămâni. Implementarea procedurii folosind un algoritm xAI poate conduce la stabilirea rapidă a diagnosticului.

RAPORTAREA ȘTIINȚIFICĂ

IV.1 Implementarea Algoritmului xAI pentru analiza și predicția interfețelor fluide

Analiza dinamicii interfeței imiscibile fluid (lichid sau aer)-lichid, respectiv evoluția și predicția în timp a geometriei interfeței în mișcare, se realizează în trei etape distincte:

- 1) Achițiția imaginilor și prelucrarea imagistică.
- 2) Aproximarea interfeței printr-o funcție continuă și derivabilă;
- 3) Generarea unei baze de date imagistice și implementarea unui algoritm ML (machine learning) sau xAI (explainable artificial intelligence) pentru predicția interfeței și analiza cantitativă a acesteia.

Trebuie precizat că în faza inițială se folosesc și simulări numerice ale fenomenului pentru calibrarea algoritmului¹, procedura în final funcționând în lipsa suportului dat de calculul numeric al curgerii.

După achiziția de imagini cu o cameră rapidă a dinamicii interfeței, se aplică o procedură de extracție a conturului interfeței implementată în codul MATLAB^{1,2}, codul numeric folosit fiind prezentat în lucrarea Botta & Balan³. În studiile experimentale au fost analizate patru tipuri de interfețe, Fig. IV. 2, generate în diferite configurații de curgere, atât pentru fluide newtoniene cât și viscoelastice:

- a) Retracțiunea unei interfețe fluid viscoelastic – aer după ruperea filamentului fluid⁴;
- b) Evoluția unei interfețe lichid-aer la contactul unei picături pe un substrat poros³;
- c) Evoluția unei interfețe aer-lichid la impactul unei sfere în lichid²;
- d) Evoluția unei interfețe lichid-lichid într-un microcanal tip-Y².

Problema care ridică problemele cele mai dificile este găsirea unei procedurii optime de aproximare a interfeței fluide printr-o funcție continuă și derivabilă. Pentru o configurație dată a curgerii, se folosesc în prezent polinoame de gradul 5, 7 sau 9, care permit calculul razelor de curbură ale interfețelor cu o aproximație satisfăcătoare. Dificultatea constă în găsirea unei reprezentări cât mai fidele a dinamicii interfețelor în vecinătatea ruperii acestora. Coeficienții polinoamelor se asociază tabelar într-o bază de date cu timpii corespunzători imaginilor achiziționate. Plecând de la baza de date cu coeficienții polinoamelor care descriu interfața, se aplică metoda regresiei pentru selectarea coeficienților la o valoare a timpului (în intervalul analizat) folosind un algoritmul clasic (metoda arborelui de decizie și regresie) programat în limbajul Python².

Funcționarea și testarea algoritmului s-a realizat pentru cazurile c) și d) din Fig. IV.2, rezultatele pentru evoluția a două interfețe în microcanal (cazul d) fiind prezentate în Fig. IV.3. S-au extras pentru analiză 100 de imagini ale interfeței, în intervalul de timp $t \in (10 \div 100) \text{ ms}$, dintre acestea 10 de imagini fiind folosite ca teste pentru funcționarea algoritmului.

¹ D. Broboana, A.-M. Bratu, I. Magos, C. Patrascu, C. Balan, *Kinematics of the viscous filament during the droplet breakup in air*. *Sci Rep* 12, 1774, 2022.

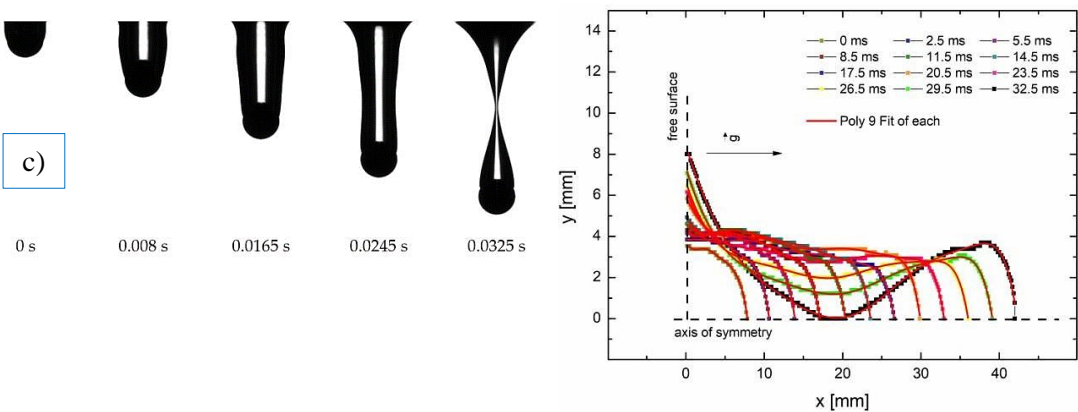
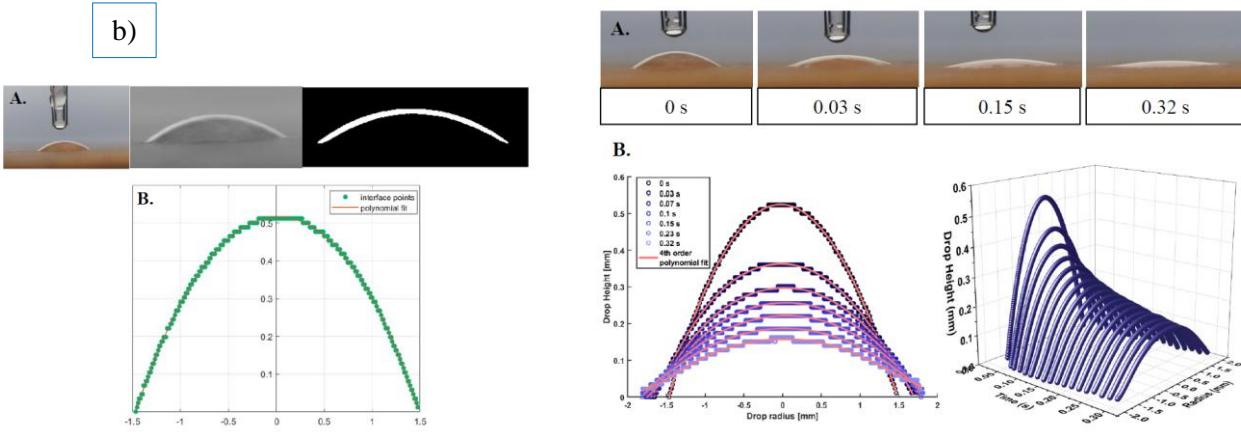
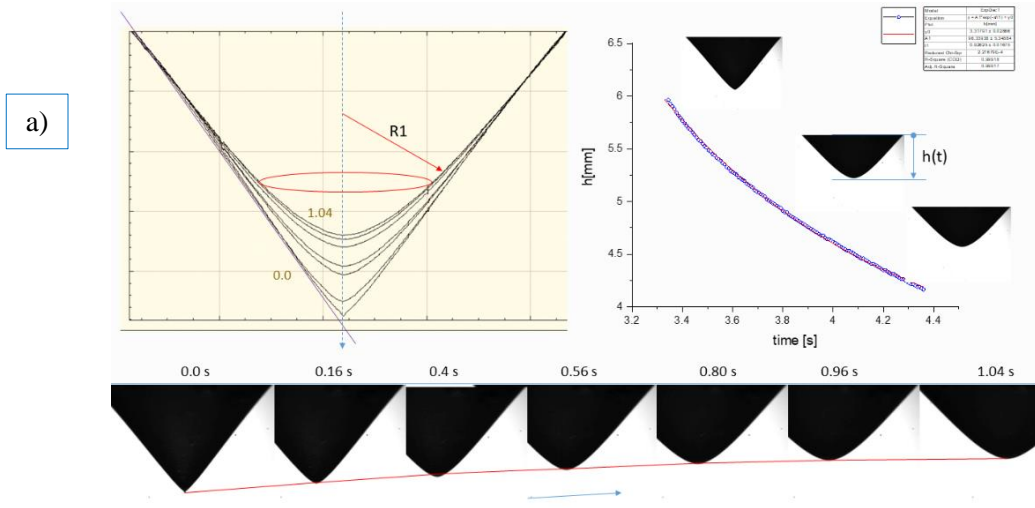
² A. Bran, I. Magos, C. Balan, *Fluid interface image processing using artificial intelligence*, 11th Int. Conf. on Energy and Environment - CIEM, Oct. 26-27, 2023, Bucharest, Romania (în curs de publicare).

³ D. Botta, C. Balan, *Numerical analysis of the drop shape during wicklig in porous media*, U.P.B. Sci. Bull., Series A, Vol. 85(2), 2023.

⁴ A.-M. Bratu, I. Magos, C. Balan, *Dynamics of viscous and viscoelastic fluid surfaces during formation and retraction of filaments*, International Congress on Rheology, July 29 – Aug. 4, 2023, Athens, Greece.

Procedura de testare a algoritmului este următoarea: ca date de intrare se folosesc coeficienții polinomiali corespunzători unei interfețe reale de la timpul t_0 ; valorile respective se introduce în algoritm, care va genera o valoare a timpului t_a ce ar corespunde datelor de intrare.

Din vizualizări se extrage interfața de la timpul t_a și se compară cu interfața de la timpul t_0 . Evident, algoritmul este cu atât mai performant cu cât timpul t_a (prezis de algoritm) este mai apropiat de t_0 .



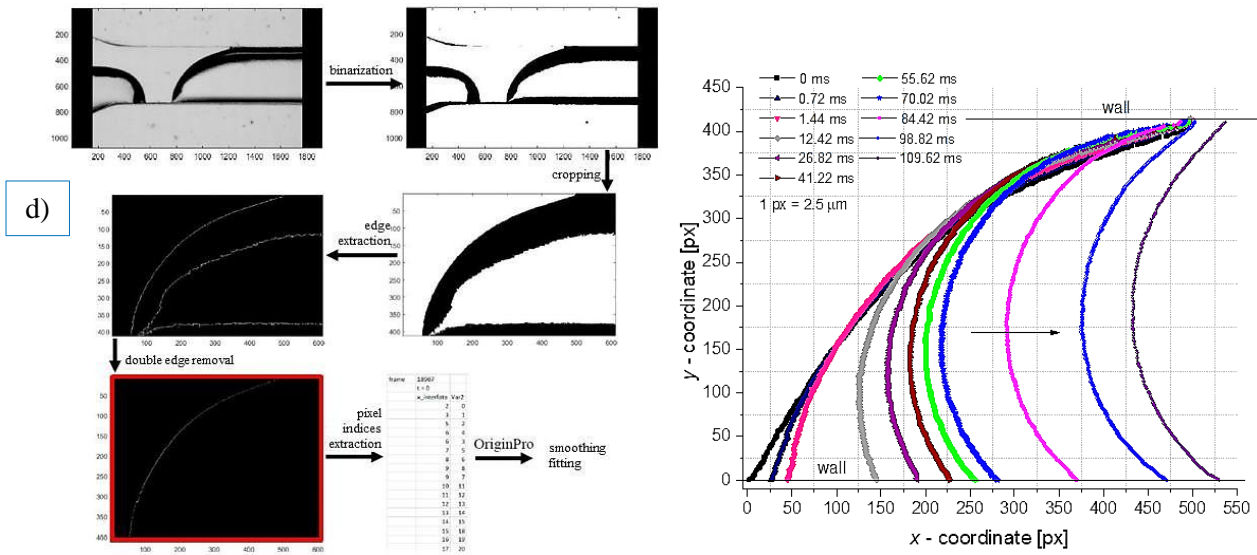


Figura IV.2 Analiza imagistică a cazurilor investigate (imaginile însoțite de reprezentarea dinamicii interfeței): a) retracția unei interfețe fluid viscoelastic – aer; b) interfeța lichid-aer la contactul unei picături pe un substrat poros; c) interfeța aer-lichid la impactul unei sfere în lichid; d) interfeța lichid-lichid într-un microcanal tip-Y.

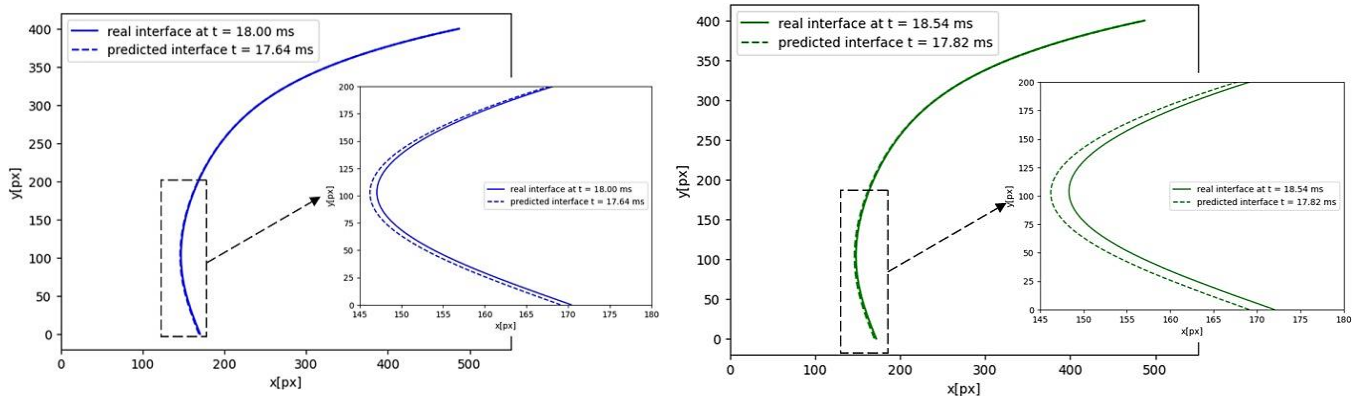


Figura IV.3 Interfața extrasă din vizualizări ce corespunde la timpii $t_a = 17,64\ ms$ și $t_a = 17,82\ ms$, comparativ cu interfața reală (folosită ca INPUT) la $t_0 = 18,00\ ms$, respectiv $t_0 = 18,54\ ms$, v. Fig. IV.2.d ($1\ px = 2,5\ \mu m$), erorile obținute pentru MSE (mean square error) și MAE (mean absolute error) fiind de 0.068 și 0.234.

Algoritmul se testează în prezent pe celelalte cazuri din Fig. IV.2, cu precădere pentru predicția ruperii filamentului de aer în cazul din Fig. IV.2.c. Se preconizează îmbunătățire algoritmului în cooperare cu partenerii din proiect, având în vedere expertiza acestora în domeniul xAI.

IV.2 Analiza și calibrarea rezultatelor numerice ale simulării dinamicii aerului într-un ciclu respirator inspirație-expirație

În această etapă s-au finalizat procedurile experimentale și numerice privind modelarea curgerii aerului în bifurcația traheală. Pe baza măsurătorilor efectuate în regim de ventilație efectuate cu instalația experimentală construită în laboratorul REOROM⁵, Fig. IV.4, s-au calibrat soluțiile numerice corespunzătoare condițiilor la limită impuse și mărimilor măsurate⁶.

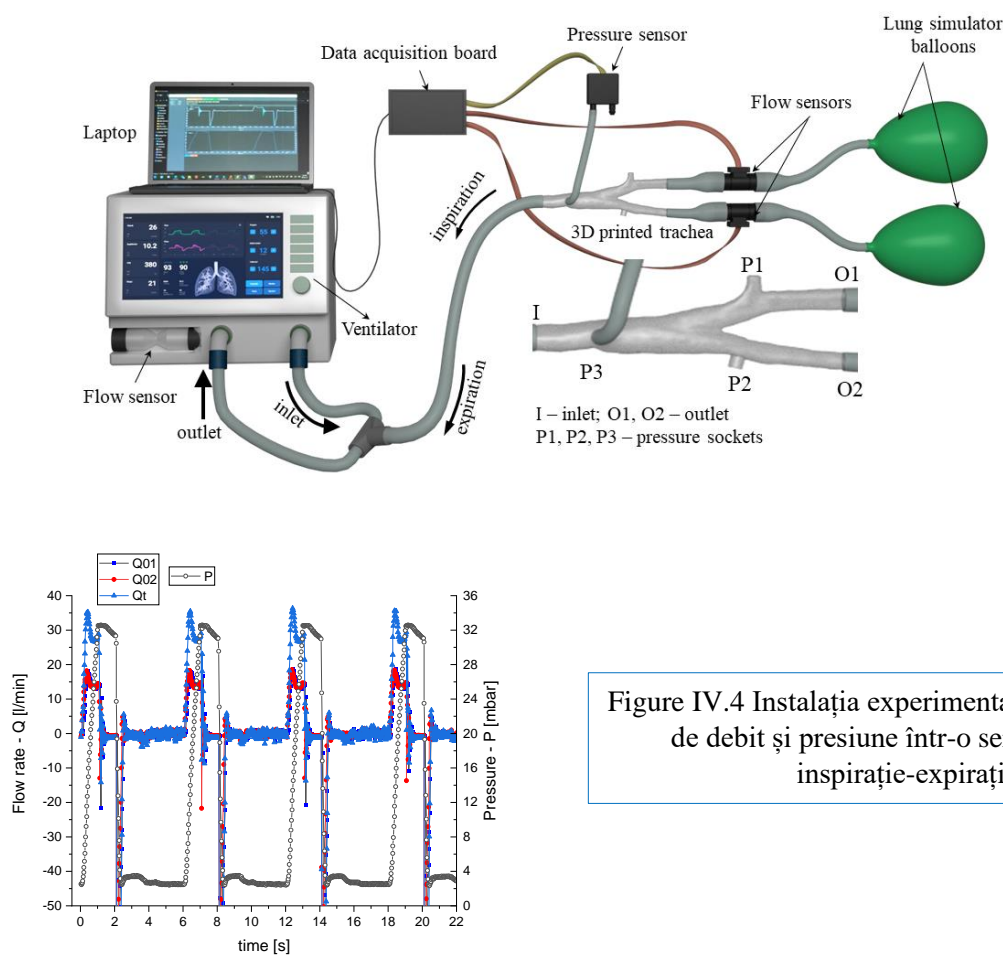


Figure IV.4 Instalația experimentală și măsurătorile de debit și presiune într-o serie de cicluri inspirație-expirație.

În această etapă a proiectului s-a achiziționat un spirometru, Fig. IV.5, dispozitiv care permite măsurarea regimului respirator inspirație-expirație în condiții normale.

S-au efectuat modelări numerice ale unui ciclu respirator pentru două geometrii în regim de ventilație (cazurile C1 și C2) și pentru o geometrie în regim de respirație normală (cazul C3, o geometrie identică cu C1), Fig. IV.6 și Tab. IV.2.

⁵ Raport III MUCCA, *Investigații experimentale in vitro și simulări numerice ale curgerii aerului în trahee generate de sistemul de ventilație SAVINA 300*, 2022

⁶ M. Ramsamy, C. Mateescu, D.D. Cristea, N.O. Tanase, *Experimental and numerical study of the airflow in bifurcations*, 8th Conf. EENVIRO 2022, vol. 1185, 2023

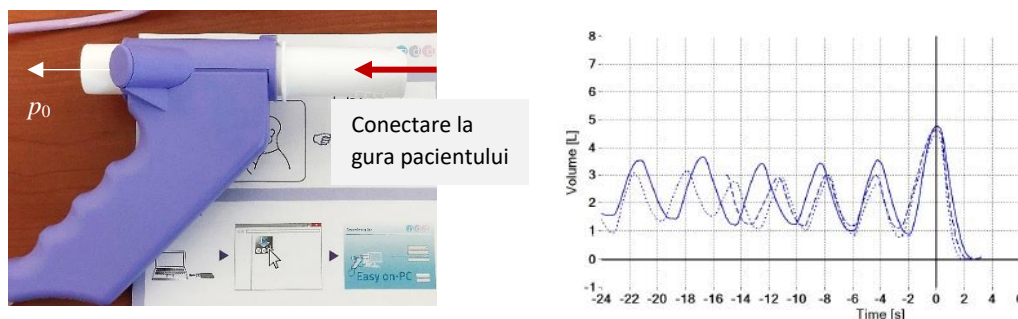


Figura IV.5 Spirometrul și măsurătorile de volum/debit în timpul unei serii de cicluri inspirație-expirație.

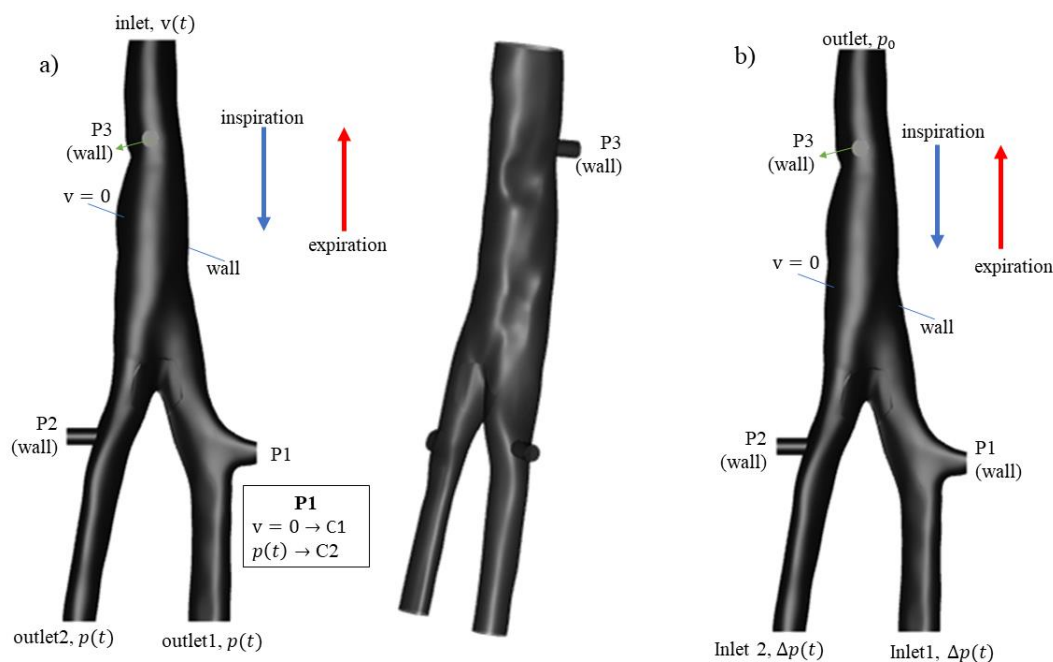


Figura IV.6 Geometria 3D modelată și condițiile la limită impuse, v. Tab. IV.2.

Tabelul IV.2 Cazurile studiate numeric și condițiile la limită impuse.

Caz	INPUT	OUTPUT	Observații
C1 (Fig. IV.6.a)	Inlet: $v_0 = v_0(t)$ viteză	Outlet 1,2: presiune $p(t)$: P1, P2, P3 → perete	Variațiile de viteză și presiune sunt date măsurate
C2 (Fig. IV.6.a)	Inlet: $v_0 = v_0(t)$ viteză	Outlet 1,2, P1: presiune $p(t)$: P2, P3 → perete	P1 – presiune outlet 1,2
C3 (Fig. IV.6.b)	Inlet 1,2: diferență de presiune $\Delta p(t)$	Outlet: presiune p_0 P1, P2, P3 → walls	$\Delta p(t) = p_m - p_c$ p_m = presiunea măsurată (caz C1) p_c = presiunea inlet calculată C1

Soluțiile numerice corespunzătoare cazului C1 (respirație ventilată) au fost calibrate folosind datele măsurate⁵, Fig. IV.7.a. În cazul C3, ce simulează o respirație normală, s-a folosit ca dată de intrare (condiție la limită) diferența de presiune rezultată prin calcul de la cazul C1, Fig. IV.7.b.

Analizând distribuția debitelor în bifurcație în cazurile C1 și C3, se observă: (i) o scădere a debitelor cu până la 15% în cazul C3 și o variație diferită a debitelor la finalul perioadelor de inspirație (I, zona A) și de expirație (III, zona B). Aceste diferențe pot avea două explicații: a) erori numerice, având în vedere folosirea unor condiții la limită diferite (debit-presiune pentru C1, respectiv diferență de presiune pentru C3), b) dinamică diferită în cazul unei respirații normale față de o respirație indusă prin ventilație.

Ne propunem o analiză în detaliu a acestui fenomen observat în rezultatele numerice, având în vedere importanța majoră pentru stabilirea regimului optim de ventilație indusă la pacienții conectați la ATI.

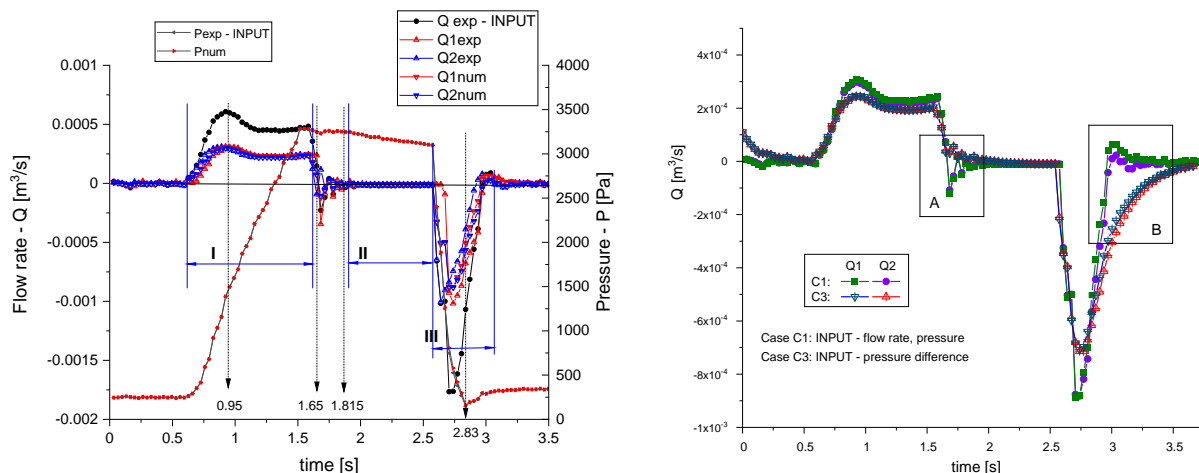


Figura IV.7 a) Compararea variației debitelor experimentale și calculate pentru cazul C1^{5,6}; b) Compararea cazurilor numerice C1 și C3.

Scopul central al studiului și modelării numerice este de a stabili parametrii cantitativi care definesc structura curgerii în bifurcația traheală, atât în regim respirator normal (C3), cât și ventilat (C1)⁷.

Am stabilit două mărimi ce caracterizează acțiunea aerului la perete și spectrul curgerii, Fig. IV.8:

1. Variația în timp a efortului de frecare la perete (WSS), în zona bifurcației.
2. Variația distribuției numărului vorticității⁸ în zona bifurcației.

Aceste mărimi se pot extrage din calculul numeric, ele definind variația dinamicii aerului în configurația traheală. Se preconizează ca valorile obținute să se asocieze cu imagini CT și teste realizate folosind spirometrul, și în final cu diagnosticul medical. Rezultatele sunt relevante și pentru o stabilire mai precisă (personalizată) a parametrilor de intrare ai sistemului folosit pentru asigurarea respirației ventilate.

⁷ N.O. Tanase, C. Mateescu, D.D. Cristea and C. Balan, *Experimental investigations in vitro and numerical simulations of airflow in the real human trachea geometry*, to be submitted to Journal of Biomechanics, 2023

⁸ Numărul vorticității Wo definește raportul local dintre rotația și deformația particulei fluide; $Wo > 1$ caracterizează de regulă zonele unde apare vârtejul, v. Balan, C., Broboana, D., Kadar, R., Giurgea, C., Rafiroiu, D., Bernad, S., *Biomedical vortex flows*, Chapter 9. in *Vortex dominated flows*, edit. by Susan-Resiga R., Bernad S. and Muntean S., Edit. Eurostampa, Timisoara, 2007, pp. 429-492

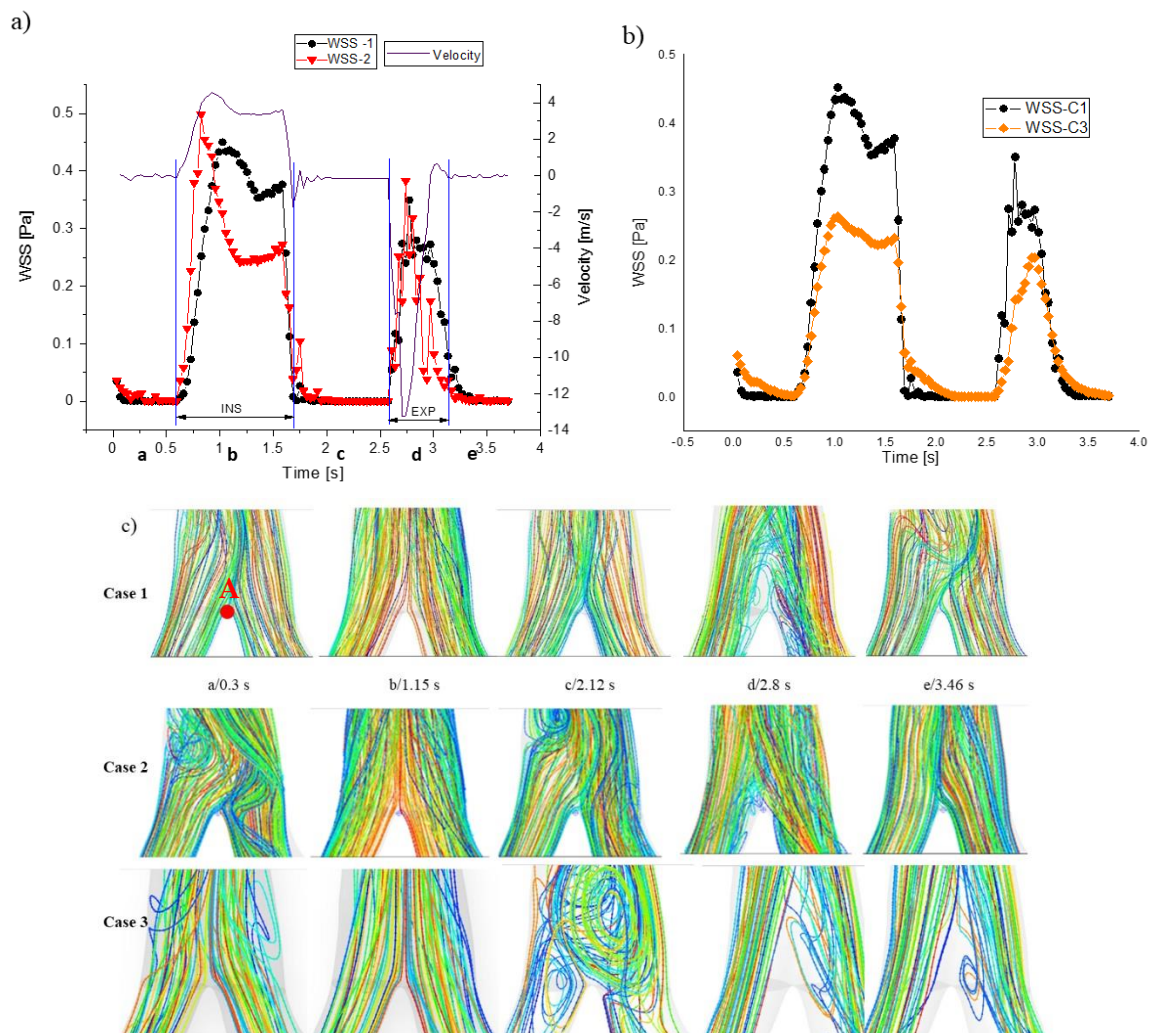


Figure IV.8 Variația în timp a efortului de frecare (WSS) în punctul A pentru cazurile: (a) C1,C2 și (b) C1, C3 și spectrelor de curgere în vecinătatea bifurcației pentru cele 3 cazuri analizate (c). Punctul A în care se face analiza efortului de frecare WSS este marcat.

Analiza rezultatelor numerice pune în evidență diferențe calitative și cantitative între cazurile C1 și C3, respectiv între respirația ventilată și respirația normală. Valorile efortului de frecare sunt considerabil mai mari în cazul regimului de ventilație, Fig. IV.8.b, spectrul curgerii fiind dominat de vârtejuri, în perioada de tranziție între inspirație și expirație, pentru cazul C3 (regim respirator normal) față de cazul C1 (regim de ventilație), Fig. IV.8.c la timpul 2.12 s și în Fig. IV.9.

Precizăm că aceste rezultate sunt originale, după știința noastră rezultate/analize similare nefiind publicate în literatura de specialitate. Considerăm că au un impact ridicat pentru domeniul medical în stabilirea unui regim optim, cât mai apropiat de cel normal, pentru aparatele de ventilație.

De asemenea, un rezultat original este posibilitatea corelării soluției numerice cu rezultatele experimentale obținute la spirometru, Fig. IV.10. În cazul confirmării acestui rezultat, potențialul aplicativ în zona medicală este ridicat, putând fi corelat cu analiza imagistică a CT-ului, v Fig. IV.1.

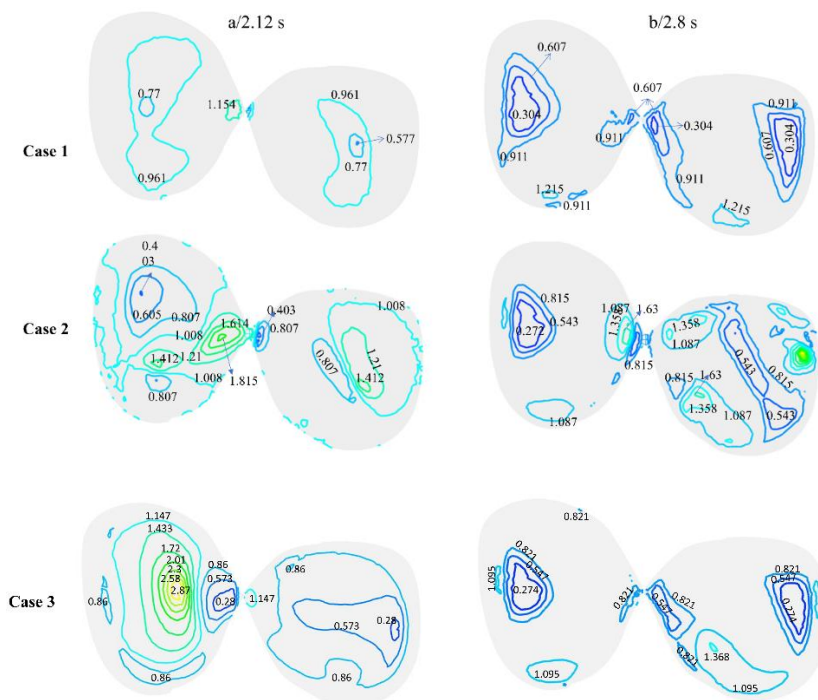


Figura IV.9 Distribuția numărului vorticității Wo în vecinătatea punctului A, într-un plan perpendicular pe bifurcație. Valorile $Wo > 1$ indică prezența vârtejurilor.

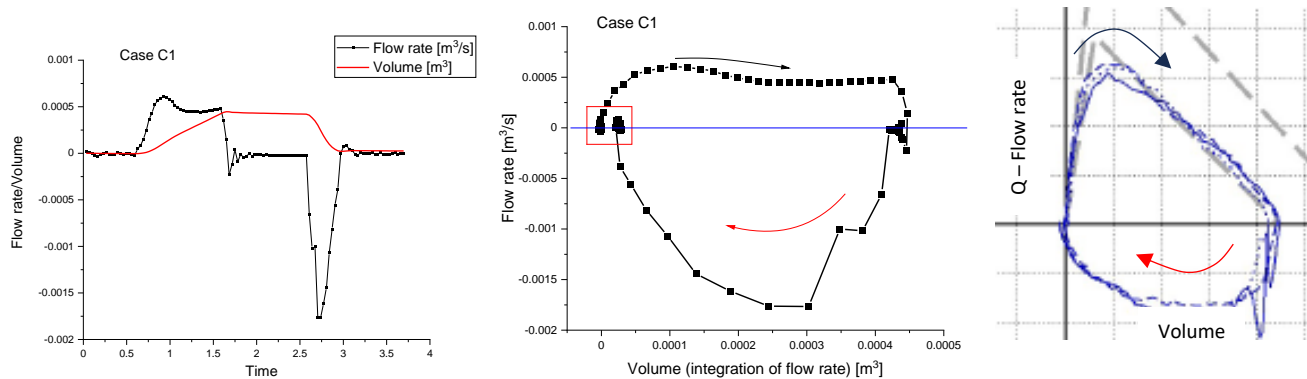


Figura IV.10 Variația debitului și volumului de aer în cazul C1; comparație calitativă cu rezultatul diagramei inspirație-expirație, Debit (Q - flow rate) vs. Volum, măsurată cu ajutorul spirometrului.

Precizăm că varianta în limba engleză a raportului se va finaliza la începutul lunii februarie după consultarea cu partenerii de proiect.

26. noiembrie. 2023

Director de proiect,
Prof. Corneliu Bălan