

УДК 616.136.7:616.61-073.75-047.58
<https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-2-21-31>

Математическое моделирование структуры внутрипочечного артериального русла с помощью регрессионных моделей и графовой нейронной сети

Зенин О.К.¹, Горбаченко В.И.¹, Грибков Д.Н.¹, Сергиенко А.А.¹, Ilias Miltiadis²

¹ Пензенский государственный университет (ПГУ)
Россия, 440026, г. Пенза, ул. Красная, 40

² Университет Палермо
Италия, 90133, г. Палермо, ул. Пиацца Марина, 61

РЕЗЮМЕ

Цель – разработать модели для численного моделирования диаметров и длин сегментов бифуркаций – структурных единиц внутрипочечного артериального русла (ВАР).

Материалы и методы. Исследование основано на ранее полученных морфометрических данных о структуре 9 642 артериальных бифуркаций (АБ) 60 коррозионных препаратов ВАР. Артериальная бифуркация – участок ВАР, состоящий из проксимального артериального сегмента (АС) (D), двух дистальных АС (с большей (d_{max}) и меньшей (d_{min}) величиной внутреннего диаметра) и точки ветвления. Для численного моделирования диаметров (АС) использовали регрессионные модели, для моделирования длин АС – графовую нейронную сеть внимания (GAT).

Результаты. Разработаны модели, которые демонстрируют высокую точность прогнозирования: для диаметров АС с d_{max} обучающий набор достиг значения $R^2 = 0,89$, для АС с d_{min} – $R^2 = 0,8$. Для длины АС с d_{max} обучающий набор достигал значения $R^2 = 0,75$, а тестовый набор – $R^2 = 0,74$; для длины АС с d_{min} обучающий набор достиг значения $R^2 = 0,77$, а тестовый набор – $R^2 = 0,73$.

Заключение. Предложенные модели могут быть использованы для численного моделирования структуры ВАР и оценки адекватности почечного кровоснабжения.

Ключевые слова: внутрипочечное артериальное русло, артериальная бифуркация, численное моделирование, нейронные сети

Конфликт интересов. Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Источник финансирования. Авторы заявляют об отсутствии источника финансирования при проведении исследования.

Для цитирования: Зенин О.К., Горбаченко В.И., Грибков Д.Н., Сергиенко А.А., Ilias Miltiadis. Математическое моделирование структуры внутрипочечного артериального русла с помощью регрессионных моделей и графовой нейронной сети. *Бюллетень сибирской медицины*. 2026;25(2):21–31. <https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-2-21-31>.

Mathematical modeling of the intrarenal arterial bed structure using regression models and a graph neural network

Zenin O.K.¹, Gorbachenko V.I.¹, Gribkov D.N.¹, Sergienko A.A.¹, Ilias Miltiadis²

¹ Penza State University (PSU)

40 Krasnaya St., 440026 Penza, Russian Federation

² The University of Palermo

61 Piazza Marina St., 90133 Palermo, Italy

ABSTRACT

The aim was to develop models for numerical modeling of the diameters and lengths of bifurcation segments, structural units of the intrarenal arterial bed (IAB).

Materials and methods. The study is based on previously obtained morphometric data on the structure of 9,642 arterial bifurcations (AB) of 60 corrosion casts of the IAB. AB is a section of the IAB consisting of a proximal arterial segment (AS) (D), two distal AS (with a larger (d_{max}) and smaller (d_{min}) internal diameter) and a branching point. Regression models were used for numerical modeling of the AS diameters, while a graph attention network (GAT) was used for the lengths of AS.

Results. The developed models demonstrate high prediction accuracy: for AS diameters with a larger value (d_{max}), the training set reached an R^2 value of 0.89, for AS with a smaller value (d_{min}) – $R^2 = 0.8$. For the length of the AS with a larger diameter, the training set reached an R^2 value of 0.75, and the test set reached an R^2 value of 0.74; for the length of the AS with a smaller diameter, the training set reached an R^2 value of 0.77, and the test set reached an R^2 value of 0.73.

Conclusion. The proposed models can be used for numerical modeling of the IAB structure and assessment of the adequacy of renal blood supply.

Key words: intrarenal arterial bed, arterial bifurcation, numerical modeling, neural networks

Conflict of interest. The authors declare no apparent or potential conflicts of interest related to the publication of this article.

Source of financing. The authors state that they received no funding for the research.

For citation: Zenin O.K., Gorbachenko V.I., Gribkov D.N., Sergienko A.A., Ilias Miltiadis. Mathematical modeling of the intrarenal arterial bed structure using regression models and a graph neural networks. *Bulletin of Siberian Medicine*. 2026;25(2):22–32. <https://doi.org/10.20538/1682-0363-2026-2-22-32>.

ВВЕДЕНИЕ

Распространенность заболеваний почек неуклонно увеличивается с каждым годом [1–3]. В последнее время концепция 4P – персонализация, прогнозирование, профилактика и участие (participation) – приобретает все более важное значение для современной медицины, в том числе и для борьбы с почечной патологией [4]. Современные цифровые технологии визуализации *in vivo* предлагают новые возможности для диагностики [5, 6]; прогнозирования результатов ангиопластики [7]; решения педагогических задач, связанных с анатомией и патологией внутрипочечного артериального русла (ВАР) [8, 9]. Несмотря на большое количество работ, эти проблемы остаются нерешенными, что, по нашему мнению, во многом связано с отсутствием цифровой модели, адекватно описывающей структуру ВАР.

Ранее предпринимались попытки численного моделирования и создания цифровой модели ВАР, описывающей ее структуру как фрактальную систему, состоящую из артериальных бифуркаций (АБ), в состав которой входят материнский (D) и два дочерних артериальных сегмента (АС): с большим (d_{max}) и меньшим (d_{min}) внутренними диаметрами. Впервые этот вопрос был рассмотрен в докторской диссертации немецкого анатома и эмбриолога Вильгельма Ру (Wilhelm Roux) [10]. На основании своих наблюдений он пришел к выводу, что структура АБ напоминает форму струи жидкости, вытекающей из отверстия трубки. Он первым установил связь между углом ветвления АБ и диаметрами просветов материнского и его дочерних АС [10]. Впоследствии этот вопрос изучали С.Д. Мюррей [11], Х.Б.М. Уйлингс [12], М. Кретовски М. и соавт. [13], Ф. Кассо и соавт. [14], П. Бланко и соавт. [15], Т. Фредрих

и соавт. [16], Ф.М. Кашкули и соавт. [17] и П. Ли и соавт. [18].

Тем не менее адекватное количественное (цифровое) описание ВАР остается нерешенной задачей по двум основным причинам: во-первых, русло охватывает широкий диапазон масштабов диаметров АС – от нескольких микрометров до нескольких миллиметров [19], что незаслуженно игнорируется большинством авторов; во-вторых, сложность визуализации и получения надежных сведений о длинах АС, что крайне необходимо для их численного моделирования.

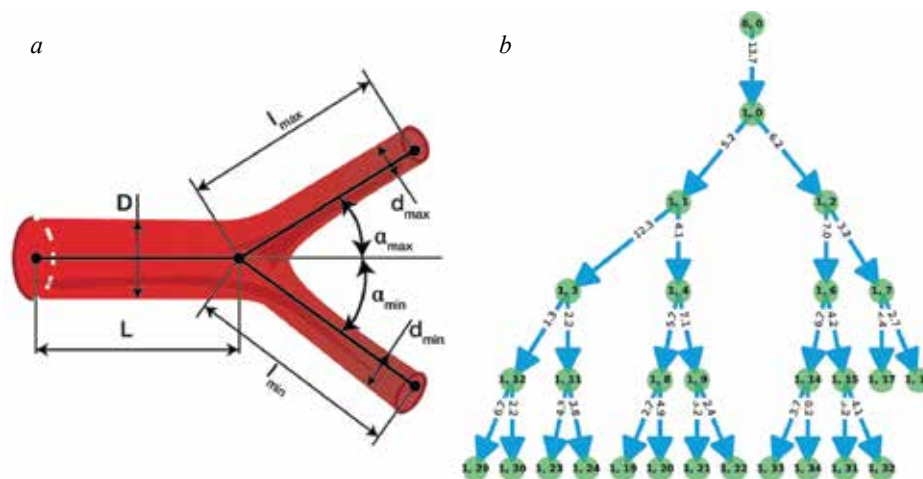


Рис. 1. Схема ВАР как фрактальной системы: *a* – схема АБ ВАР; *b* – графическое представление протокола; 1 – в узлах графа указаны уникальные номера, а ребра – длины АС. D – диаметр проксимального сегмента; d_{max} – диаметр дистального сегмента с большим значением; d_{min} – диаметр дистального сегмента с меньшим значением; L – длина проксимального сегмента; l_{max} – длина дистального сегмента с большим диаметром; l_{min} – длина дистального сегмента с меньшим диаметром; α_{max} – угол ветвления между дистальным сегментом с большим диаметром и проксимальным сегментом; α_{min} – угол ветвления между дистальным сегментом с меньшим диаметром и проксимальным сегментом

В исследование были включены 9 642 АБ ВАР, расположенные на 22 уровнях деления (i) 60 коррозионных препаратов ВАР. Артериальные бифуркации были разделены: на две группы по половому признаку – принадлежащие ВАР мужчин или женщин; две возрастные группы – принадлежащие ВАР лиц 2-го периода среднего возраста (мужчины от 36 до 60 лет, женщины от 36 до 55 лет) и пожилого возраста (мужчины от 61 до 75 лет, женщины от 56 до 75 лет) (Классификация АПН СССР (1965)); а также на АБ, принадлежащие коррозионным препаратам ВАР левой и правой почки. Предыдущие исследования говорят о морфологических отличиях артериального русла почек у лиц разного пола [21], а также левой и правой почки [22].

Для численного описания такой структуры использовали следующие показатели: i – порядковый номер уровня деления – новообразованного ряда АС; D – диаметр материнского проксимального АС, находящегося на исходном уровне деления; d_{max} – диаметр дочернего дистального АС с большим зна-

Чель статьи: разработать модели для численного моделирования диаметров и длин сегментов бифуркаций – структурных единиц ВАР.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Материалом для исследования служили ранее полученные результаты морфометрии 60 коррозионных препаратов ВАР [20]. Эта технология позволяет измерять АС с внутренним диаметром от 0,1 мм с точностью 0,01 мм. ВАР рассматривали как фрактальную систему, состоящую из взаимосвязанных АБ (рис. 1, *a*, *b*).

чением; d_{min} – диаметр дочернего дистального АС с меньшим значением; L – длина материнского проксимального АС, находящегося на исходном уровне деления расстояние между ближайшими точками разветвления; l_{max} – длина дочернего дистального АС с большим диаметром; l_{min} – длина дочернего дистального АС с меньшим диаметром.

Для диаметров сегментов АБ ВАР были произведены расчеты и сравнения нескольких вариантов моделей регрессии. Формальное описание модели в статистике предполагает наличие наблюдений – совокупности всех измеренных пар признаков – отклик, выражающимися в виде $\{(x_i, y_i)\}_{(i=1)}^n$, где вектор наблюдения x_i – это один элемент выборки. В нашем случае это одна строка имеющейся базы данных [20], где i – индекс наблюдения, x_i – значение предиктора (признака) для i -го наблюдения, y_i – значение отклика для данного наблюдения.

При применении модели простой линейной регрессии вектор наблюдения содержит только один

элемент x_i . С математической точки зрения простая линейная регрессия имеет вид $y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i$, где α – интерцепт (свободный член), общий для всех наблюдений, который не зависит от x ; β – коэффициент наклона, описывающий, как в среднем меняется y при изменении x на одну единицу, предполагается, что связь линейная (прямая); ε_i – случайная ошибка (шум), т.е. часть вариации y , не объясненная линейной зависимостью.

Задача регрессии решалась методом наименьших квадратов. Точность каждого предсказанного значения измеряется квадратом его остатка (вертикальным расстоянием между точкой набора данных и построенной линией), а цель метода наименьших квадратов состоит в том, чтобы свести сумму этих квадратов отклонений к минимуму. В случае простой линейно регрессии метод наименьших квадратов приводит к системе двух линейных уравнений, решением которых являются коэффициенты α и β .

Также применялась множественная линейная регрессия, отличающаяся использованием вместо вектора признаков $x_i = [x_{i1} \ x_{i2} \dots \ x_{ip}]^T$ для p признаков.

Тогда уравнение регрессии имеет вид $y_i = \sum_{j=0}^p a_j x_{ji}$, где $x_{0i} = 1$. В матричной форме уравнение регрессии имеет вид $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{y}$, где $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \dots \ y_n]^T$ – вектор значений зависимой переменной, $\mathbf{T}$ – символ транспонирования, $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \dots \ a_k]^T$ – вектор коэффициентов регрессии,

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix}$$

– матрица независимых переменных (матрица плана).

В современных библиотеках уравнение регрессии решается методом сингулярного разложения, а не методом наименьших квадратов.

Кроме того, была предпринята попытка использования полиномиальной регрессии степени 2 и 3. Она представляет собой линейную модель в пространстве расширенных базисных признаков, полученных путем возведения исходных переменных в степень и перемножения их между собой. С математической точки зрения общий вид полиномиальной регрессии будет представляться в виде записи $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_n x^n + \varepsilon$, где y – зависимая переменная отклик, β_n – неизвестные члены, ε – шум, n – степень полинома. В общей матричной форме $\vec{y} = \mathbf{X}\vec{\beta} + \vec{\varepsilon}$, решение: $\hat{\vec{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \vec{y}$.

Для регрессионного моделирования диаметров исходные данные были разбиты в пропорции трени-

ровочные: 7 710, тестовые: 1 930 (80 и 20% от всего набора соответственно). В простом линейном регрессионном подходе в качестве единственного предиктора использовался диаметр родительского сегмента. Для всех остальных моделей использовали полный набор признаков, включавший в себя диаметр родительского сосуда, пол, возраст и уровень деления.

Для проверки качества результатов были выбраны следующие метрики. R^2 – коэффициент детерминации: близко к 1 – модель почти полностью объясняет вариацию, 0 – модель не лучше среднего, меньше 0 – модель хуже, чем простое предсказание среднего. Формула состоит из отношения суммы квадратов остатков и общей суммы квадратов, вычитенных из единицы:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2},$$

где y_i – фактические значения, $\hat{y}_i$ – предсказанные значения, $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$ – среднее значение наблюдаемых данных.

Для оценки точности прогнозирования применялись метрики RMSE и MAE. RMSE – это корень квадратный из среднеквадратичной ошибки, измеряется в тех же единицах, что и целевая переменная. Формула:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2},$$

где n – количество наблюдений, $\hat{y}_i$ – прогнозируемое значение. MAE – средняя абсолютная ошибка, менее чувствительная к выбросам, чем RMSE:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|.$$

Модели реализованы на языке Python версии 3.11.11 в программной среде Ubuntu 24.04 с использованием библиотеки scikit-learn версии 1.7.2. Визуализация прогнозов выполнена с помощью библиотеки matplotlib версии 3.10.6. Для прогнозирования l_{max} и l_{min} были использованы те же модели линейной регрессии, что и для d_{max} и d_{min} . Единственное изменение для простой линейной регрессии – исследовалась зависимость дочерних длин от единственного предиктора L – длины сосуда, а для множественной регрессии и полиномиальной регрессии набор признаков расширился параметрами для d_{max} и d_{min} .

РЕЗУЛЬТАТЫ

Математическое моделирование АБ как структурного элемента фрактальной системы ВАР является непростой задачей. Для построения точной цифровой модели АБ были одновременно решены

четыре задачи. А именно определены: 1) диаметры d_{max} дистальных АС с большими значениями; 2) диаметры d_{min} дистальных АС с меньшими значениями; 3) длины l_{max} дистальных АС с большими диаметра-

ми; 4) длины l_{min} дистальных АС с меньшими диаметрами.

Результаты вычислений для d_{max} и d_{min} представлены в табл. 1 и на рис. 2, а.

Таблица 1

Модель/метрики	Предсказание d_{max}			Предсказание d_{min}		
	R^2	RMSE, мм	MAE, мм	R^2	RMSE, мм	MAE, мм
Линейная регрессия	0,87	0,21	0,15	0,78	0,22	0,15
Множественная линейная регрессия	0,87	0,21	0,15	0,78	0,21	0,14
Полиномиальная 2-й степени регрессия	0,88	0,20	0,15	0,78	0,21	0,14
Полиномиальная 3-й степени регрессия	0,83	0,24	0,17	0,75	0,23	0,16

Примечание. Здесь и в табл. 2, 3: d_{max} – диаметр дочернего дистального АС с большим значением; d_{min} – диаметр дочернего дистального АС с меньшим значением; R^2 – коэффициент детерминации; RMSE – корень квадратный из среднеквадратичной ошибки; MAE – средняя абсолютная ошибка.

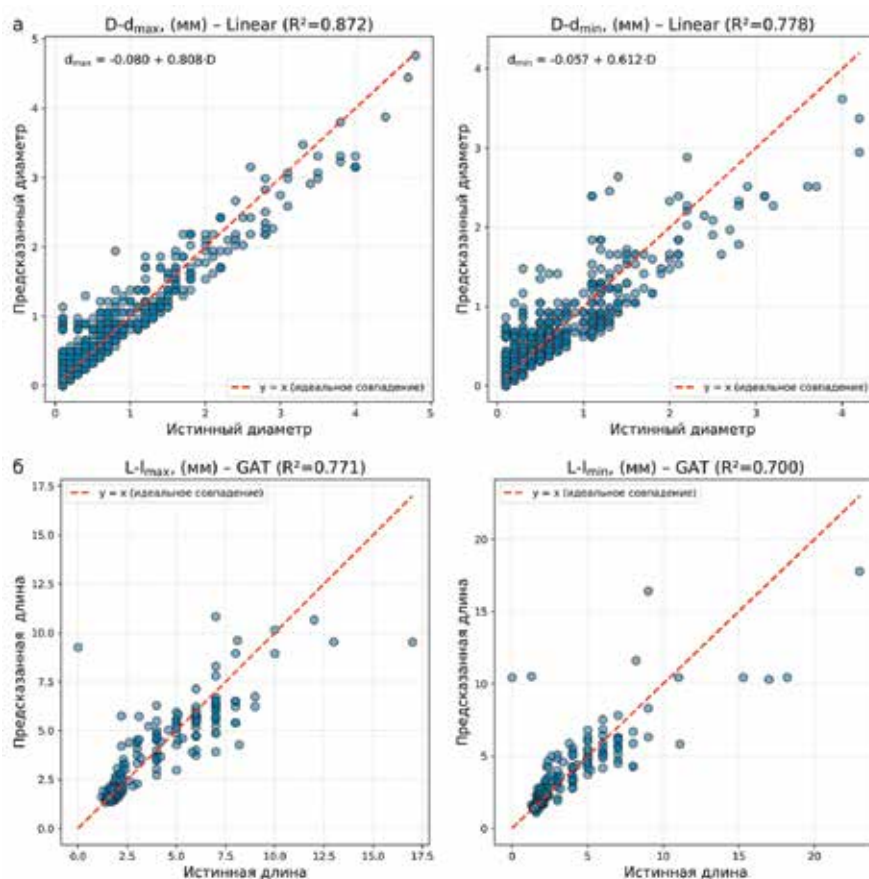


Рис. 2. Графики предсказанные/истинные для: а – простой линейной регрессии для d_{max} и d_{min} уравнения связи: $d_{max} = -0,080 + 0,808D$ ($R^2 = 0,87$) и $d_{min} = -0,057 + 0,612D$ ($R^2 = 0,77$); б – графовая нейронная сеть внимания GAT для l_{max} и l_{min} : коэффициент детерминации для l_{max} – $R^2 = 0,77$ и l_{min} – $R^2 = 0,70$

Как следует из приведенного (см. табл. 1 и рис. 2, а), все модели показывают хорошие результаты ($R^2 \geq 0,70$). Лучшие результаты показывают оба варианта линейной регрессии и полиномиальной регрессии второй степени. Модели полиномиальной регрессии третьей степени переобучаются: R^2 падает до 0,83 (для d_{max}) и 0,75 (для d_{min}), а RMSE возрастает примерно на 10–15% (табл. 1).

Результаты вычислений для l_{max} и l_{min} представлены в табл. 2.

Результаты регрессионного анализа показывают, что для простой линейной регрессии зависимость слишком сложная для обнаружения. По мере усиления архитектуры регрессий результаты улучшаются, но даже для полиномиальной регрессии второй и третьей степени результаты R^2 не превышают 58%.

Таблица 2

Показатели качества моделей для предсказания l_{max} и l_{min}						
Модель/метрики	Предсказание l_{max}			Предсказание l_{min}		
	R^2	RMSE, мм	MAE, мм	R^2	RMSE, мм	MAE, мм
Линейная регрессия	0,55	1,43	0,93	0,42	1,48	0,88
Множественная линейная регрессия	0,57	1,40	0,90	0,51	1,35	0,86
Полиномиальная 2-й степени регрессия	0,58	1,38	0,85	0,55	1,31	0,79
Полиномиальная 3-й степени регрессия	0,56	1,41	0,85	0,56	1,30	0,77

Примечание. Здесь и в табл. 3: l_{max} – длина дочернего дистального АС с большим диаметром; l_{min} – длина дочернего дистального АС с меньшим диаметром.

В связи с этим предлагается использовать нейронные сети, которые могут аппроксимировать произвольно сложные функции [23] и улавливать скрытые зависимости между переменными, недоступные стандартным регрессорам [24].

Это явилось предпосылкой использования нейросетевого подхода для решения данных задач. Первой использованной архитектурой была основа и прародитель всех других сетей – многослойный перцептрон [24]. Преимуществами многослойного перцептрона являются простота реализации, быстрое обучение и легкое встраивание в рабочий пайплайн (так же, как и в регрессорах). Основным недостатком является отсутствие учета структуры входящих данных (к примеру, временная или графовая).

Основная идея многослойного перцептрона – каждый нейрон слоя l соединен со всеми нейронами предыдущего слоя $l-1$. Такая связь задает линейное преобразование, за которым обычно следует нелинейная активация, что с математической точки зрения можно представить как $z^{(l)} = W^{(l)}a^{(l-1)} + b^{(l)}$, $a^{(l)} = f(z^{(l)})$, где $W^{(l)}$ – матрица весов слоя l , $b^{(l)}$ – вектор смещения слоя l , $f(z^{(l)})$ – нелинейная функция активации (ReLU, tanh, sigmoid и др.), $a^{(l-1)}$ – вектор активации предыдущего слоя, $a^{(l)}$ – вектор активации текущего слоя. Обучение MLP реализовано с помощью алгоритма обратного распространения ошибки, который вычисляет градиенты функции потерь по параметрам сети. Оптимизация параметров проводится методами стохастического градиентного спуска или его современными адаптивными вариантами, такими как Adam. Выбор функции потерь зависит от решаемой задачи, для регрессии часто используется MSE.

Следующей архитектурой была выбрана рекуррентная нейронная сеть LSTM [25] – сеть длительной кратковременной памяти. Выбор обусловлен тем, что сегменты сосудистой системы представлены в виде последовательностей, характеристики которых потенциально может прогнозировать LSTM. Главным достоинством LSTM является сохранение длительной зависимости в памяти и устойчивость

к исчезающему градиенту (в отличие от обычных рекуррентных сетей). В применении к сосудистой структуре каждый отдельный сегмент АБ можно представить как временной ряд, где из большего сосуда вырастает дочерний сосуд, и т.д. В моделировании сосудистого русла аналогом шага временного ряда выступает уровень деления сосудистого русла.

В качестве недостатков LSTM следует отметить трудоемкость обучения и ограничение в распараллеливании. Основным преимуществом LSTM является способность эффективно запоминать информацию на протяжении многих шагов, решая проблему затухания градиента. Это позволяет сети выявлять долгосрочные зависимости в данных, что невозможно для обычных рекуррентных сетей. Это достигается за счет введения ячейки памяти, передающей информацию по шагам, и трех управляющих шлюзов, регулирующих поток информации. Шлюзы представляют собой полносвязные слои с сигмоидальными функциями активации, выдающими значения близкие к 0 («закрыт») и к 1 («открыт»).

На шаге t компоненты LSTM работают следующим образом. Шлюз забывания (Forget Gate) f_t определяет, какую долю информации из предыдущего состояния ячейки C_{t-1} необходимо «забыть». Шлюз забывания описывается выражением $f_t \sigma(W_f[h_{t-1}, x_t] + b_f)$, где $[h_{t-1}, x_t]$ – конкатенация предыдущего скрытого состояния h_{t-1} и текущего входа x_t , b_f – вектор смещений. Шлюз входа (Input Gate) $i_t = \sigma(W_i[h_{t-1}, x_t] + b_i)$ решает, какую часть новой информации обновить, а кандидат на обновление (Candidate Value) создает новые значения-кандидаты, которые могут быть добавлены в ячейку $\hat{c}_t = \tanh(W_c[h_{t-1}, x_t] + b_c)$. Обновление состояния ячейки (Cell State Update) производится путем комбинации забывания старой информации и добавления новой $c_t = f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot \hat{c}_t$, где символ $\odot$ обозначает поэлементное умножение. Старая информация умножается на «забывающий» коэффициент, а новая – на «входной». Выходной шлюз (Output Gate) решает, какая часть обновленного состояния ячейки (c_t) будет использована для

формирования выходного сигнала $o_t = \sigma(W_o [h_{t-1}, x_t] + b_o)$. Новое скрытое состояние (Hidden State) формируется по формуле $h_t = o_t$

$$h_t = o_t \odot \tanh(c_t).$$

Обучение LSTM, как и других рекуррентных сетей, происходит с помощью алгоритма обратного распространения ошибки во времени (Back-Propagation Through Time, BPTT). Ключевой механизм LSTM, аддитивное обновление состояния через шлюзы, позволяет распространяться градиентам не затухая. Это дает сети возможность запоминать информацию на большом количестве шагов, поскольку модель сама обучается решать, когда «открывать» или «закрывать» шлюзы.

Для сравнения с многослойным перцептроном была избрана новая архитектура нейронных сетей, названной в честь Колмогорова – Арнольда KAN [26]. Архитектура сети KAN основана на теореме Колмогорова – Арнольда, утверждающей, что любую непрерывную функцию многих переменных можно представить как суперпозицию непрерывных функций одной переменной. Для входного вектора $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ KAN, решающая задачу регрессии для прогноза диаметров сосудов, описывается выражение

$$y = \sum_{j=1}^{2n+1} \Phi_j \left(\sum_{i=1}^n \varphi_{ij}(x_i) \right),$$

где φ_{ij} – В-сплайны (аппроксимирующие базисные функции), Φ_j – нелинейные функции выходного слоя (В-сплайны). Сеть имеет два слоя с активациями на ребрах, а не на узлах. В качестве функций активации используются В-сплайны с обучаемыми коэффициентами. Основным преимуществом сетей Колмогорова – Арнольда является высокая точность при меньшем количестве параметров.

Поскольку АС составляющие АБ в системе ВАР можно представить в виде графа, то для прогнозирования диаметров сосудов предложено использовать графовые нейронные сети (GAT) [27]. Наилучшие результаты были получены при использовании графовых нейронных сетей внимания [28]. В работе для реализации графовой сети внимания использовано специализированное расширение PyTorch для работы с графовыми нейронными сетями – PyTorch Geometric (PyG) [29].

Рассмотрим реализацию графовой нейронной сети внимания с учетом особенностей PyG. Граф на входе графовой нейронной сети представлялся двумя матрицами: матрицей вершин и матрицей смежности. Матрица вершин представляет собой конкатенацию (объединение) векторов (эмбедингов), описывающих вершины. С учетом бифуркаций дли-

ны дочерних сосудов представлялись в эмбедингах узлов, что позволило исключить матрицу ребер. Матрица смежности, как принято в теории графов, это бинарная матрица, в которой элемент (i, j) равен единице, если вершина i соединена с вершиной j . Так как матрица смежности является разреженной, то в PyG она представляется в виде массива ребер, содержащего индексы ребер графа.

Графовая многоголовая сеть внимания (Multi-Head Graph Attention Network) – это архитектура графовых нейронных сетей, в которой каждый узел графа обучается динамически взвешивать важность своих соседей одновременно в нескольких независимых проекциях пространства признаков («головах внимания»). Многоголовое внимание использует K независимых механизмов внимания («голов») параллельно для повышения стабильности и выразительности. Каждая голова k имеет собственные обучаемые матрицу весовых коэффициентов W^k размером $f \times f$, где f – размерность эмбедингов узлов на входе слоя, и обучаемую матрицу внимания A_{att}^k размером $n \times n$, где n – количество узлов графа. Структура матрицы внимания совпадает со структурой матрицы смежности графа, но элементы матрицы смежности являются постоянными, равными 0 или 1, а элементы матрицы внимания – обучаемыми и учитывают различную степень влияния соседних узлов. Каждая голова внимания выполняет следующие операции (в PyG операции векторизованы и выполняются параллельно):

- линейное преобразование $H^k = XW^k$ для $k = 1, K$, где X – матрица входных эмбедингов слоя размером $n \times f$;

- вычисление матриц внимания A_{att}^k ;

- агрегация $Z^k = A_{att}^k H^k$ для $k = 1, \dots, K$.

Результаты работы всех голов объединяются. Для скрытых слоев используется конкатенация $X' = \text{Concat}[\sigma(Z^1), \sigma(Z^2), \dots, \sigma(Z^K)]$, где σ – функция активации, обычно ReLU. Размерность выхода слоя сети при этом увеличивается $n \times (K \cdot f)$. В входном слое используется усреднение

$$X' = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \sigma(Z^k)$$

и размерность выхода сети становится равной размерности входного массива эмбедингов. Так как решается задача регрессии, то в выходном слое используется линейная функция активации.

Эмбединги узлов одного слоя многоголовой графовой сети внимания учитывают свойства соседних узлов. Область восприятия (как далеко распространяется влияние) контролируется количеством слоев сети. Графовая сеть с m слоями будет агрегировать информацию от узлов на расстоянии до m переходов.

Для реализации нейронных сетей к вышеуказанной информации добавляется использование библиотеки cuda версии 12.8 вместе с библиотекой PyTorch для реализации нейросетей на python версии 2.7.0. Для реализации KAN использовалась библиотека Русан версии 0.0.2. В связи с ограничениями данной библиотеки обучение KAN было выполнено на CPU также с использованием библиотеки PyTorch. Для реализации графовой модели GAT использовалась библиотека PyTorch-Geometric версии 2.6.1 [29].

Каждая из четырех нейронных сетей была обучена на идентичном Data Set. Все сети использовали единый набор признаков: диаметр родителя, диаметр дочернего большего и меньшего АС, длина родительского АС, пол, возраст и уровень деления. Искомые данными были длины дочерних АС: большего и меньшего. Для каждой из обучаемой сети был использован оптимизатор Adam и валидация по MSE для ранней остановки, что предотвращает переобучение на тренировочном наборе. MLP представлен из одного скрытого слоя размерностью 128 с функцией активации ReLU, learning rate = 0,0005. LSTM представлена из четырех слоев, скрытых нейронов – 1 024, на выходе линейный слой для сжатия выходных данных в 1 нейрон, learning rate = 0,005. KAN состоит из двух скрытых слоев по два нейрона в каждом, размер сетки (количества «узлов» в каждой функции) равен 5, диапазон сетки от –5 до 5, learning rate = 0,01. GAT представлена двумя слоями с 1 024 нейронами, одной головкой внимания, learning rate = 0,001, угасание весов (L2 регуляризация) – 0,00001.

Графовые модели (GAT) демонстрируют наилучшее качество предсказаний как для максимальной длины АС ВАР (l_{max}) так и для минимальной (l_{min}). Это подтверждает идею о том, что взаимосвязи между отдельными АС играют ключевую роль в оценке морфологии сосудистой системы: на превосходит все остальные модели по всем метрикам; для GAT сохраняет лучшую способность к объяснению ($R^2 = 0,70$) и самый низкий MAE, но ее RMSE (1,46 мм) несколько выше, чем у MLP. Это может указывать на то, что при предсказании меньших длин (l_{min}) модель более чувствительна к «выбросам» в данных, тогда как MLP более стабилен в среднем; слабые результаты LSTM свидетельствуют о том, что в текущем наборе данных нет явно выраженной последовательной структуры, которую могла бы использовать рекуррентная архитектура.

Нейронные сети используют нелинейные преобразования, которые невозможно записать в виде фиксированных аналитических формул без полного раскрытия всех весов и смещений. Поэтому в статье представлено структурное описание моделей, их гиперпараметров и результаты, что полностью отвечает требованиям научной публикации и позволяет воспроизвести эксперимент. В нейронных сетях предсказание представляет собой последовательность матричных умножений и нелинейных функций активации с огромным числом параметров (весов и смещений). Записать их в виде нескольких формул бессмысленно; вместо этого публикуются архитектура, гиперпараметры и результаты метрик, что позволяет другим исследователям воспроизвести модель.

Результаты представлены в табл. 3 и на рис. 2, б.

Таблица 3

Результаты обучения нейронных сетей l_{max} и l_{min}						
Модель/метрики	Предсказание l_{max}			Предсказание l_{min}		
	R^2	RMSE, мм	MAE, мм	R^2	RMSE, мм	MAE, мм
Нейронная сеть MLP	0,61	1,32	0,79	0,61	1,21	0,73
Нейронная сеть LSTM	0,43	1,59	0,95	0,34	1,51	0,93
Нейронная сеть KAN	0,63	1,28	0,78	0,55	1,29	0,77
Нейронная сеть GAT	0,77	1,11	0,56	0,70	1,45	0,66

ОБСУЖДЕНИЕ

Две модели были обучены находить диаметры дочерних АС с большим и меньшим значениями. Для практической реализации можно использовать простые уравнения линейной регрессии: $d_{max} = -0,080 + 0,808 D (R^2 = 0,87)$ и $d_{min} = -0,057 + 0,612 D (R^2 = 0,77)$ (см. рис. 2, а). Две модели были обучены находить длину АС с большим и меньшим диаметрами, обе из которых решают задачу регрессии (см. рис.

2, б). Обучение использовало признаки, которые были явно известны или могли быть точно рассчитаны, включая следующие: текущий диаметр АС; диаметры АС с большими значениями; диаметры АС с меньшими значениями; уровень деления (i); пол; возрастная группа; текущая длина АС.

Исследования показали, что использование положения почки (т.е. правая или левая) ухудшает силу предсказания моделей. Использование длин АС с большими и меньшими значениями диаметров увеличи-

чивает точность прогнозирования модели, но эти характеристики нельзя использовать из-за их неопределенности при прогнозировании длин дистальных АС.

В результате экспериментов лучшим оказалась графовая сеть, состоящая из двух слоев GAT и двух голов внимания, реализованная в библиотеке PyTorch Geometric [29–31]. Лучшие результаты показал оптимизатор Adam [32] с параметрами $\text{learning rate} = 0,001$ и $\text{weight_decay} = 0,00001$. Переобучение контролировали путем мониторинга значений для тестовой выборки – при отсутствии улучшения показателя на дельту 0,01 в течении 100 эпох – обучение прекращали.

Для точного моделирования геометрии ВАР необходимо объединить разработанные модели нейронной сети для определения дистальных АС с максимальным и минимальным диаметрами. Результаты тестирования программы представляли в виде метрик качества обучения модели. Для оценки качества использовали коэффициент детерминации R^2 . Для длины дистального сегмента с большим диаметром обучающий набор достиг значения $R^2 = 0,75$, а тестовый набор достиг значения $R^2 = 0,74$. В качестве функции потерь использовали функцию среднеквадратической ошибки.

Аналогичные метрики и функции потерь использовали для длины дистального сегмента с моделью расчета меньшего диаметра. Обучающий набор достиг значения $R^2 = 0,77$, а тестовый набор достиг значения $R^2 = 0,73$. Результаты нашего исследования подтверждают, что использование GNN для моделирования АБ ВАР является многообещающим подходом. В частности, применение GAT продемонстрировало высокую точность прогнозирования, что согласуется с другими исследованиями в области моделирования сосудистой структуры [33, 34].

Полученные результаты совпадают с результатами предыдущих исследований, таких как исследование П. Бланко и соавт., которые показали, что цифровые модели и компьютерное моделирование могут точно описывать сосудистые русла. Однако, в отличие от этих работ, данное исследование сосредоточено на нейронных сетях, что позволяет рассматривать более сложные взаимосвязи между параметрами АС входящих в состав АБ. Более того, нейросетевой подход позволил впервые количественно прогнозировать модель структуры ВАР – определить значения длины АС для каждой АБ, что дает возможность провести более глубокое исследование и осуществить численное моделирование гемодинамики внутри ВАР.

Использование GAT дает несколько преимуществ по сравнению с традиционными методами моделирования. Во-первых, графовые сети учитывают

топологию ВАР, что имеет решающее значение для моделирования сложных бифуркационных структур [35]. Во-вторых, применение механизмов GAT позволяет более точно учитывать важность связей АС (ребер) и АБ (узлов) в графе, так как GAT вычисляет обучаемые коэффициенты внимания для каждого АС, которые определяют, насколько важна соседняя АБ для текущей, тем самым улучшая качество прогнозирования [28].

Несмотря на эти многообещающие результаты, исследование имеет ряд ограничений. Во-первых, точность прогнозов зависит от качества исходных данных и параметров модели. Во-вторых, использование нейронных сетей требует значительных вычислительных ресурсов, что может ограничить их применение в клинической практике. Дальнейшие усовершенствования будут сосредоточены на использовании более точных данных и оптимизации алгоритмов обучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, были разработаны модели для численного моделирования диаметров и длин сегментов АБ – структурных единиц ВАР. Первый модуль, состоящий из двух уравнений регрессии, позволяет рассчитывать значения диаметров двух дочерних (дистальных) АС исходя из величины диаметра материнского (проксимального) АС. Второй модуль – графовая нейронная сеть внимания – позволяет рассчитывать значения длин двух дочерних (дистальных) АС исходя из величины длины материнского (проксимального) АС для определения длин сегментов АБ ВАР. Использование графовой сети внимания позволило достичь высокой точности прогнозирования, открыв новые возможности для клинических приложений, включая предоперационное моделирование и оценку адекватности почечного кровоснабжения.

Разработанная двух модульная модель может служить основой для создания методов численного прогнозирования объема и площади участка почки, который кровоснабжается данной артерией. Это поможет в планировании и проведении хирургических вмешательств, а также оценке их результатов. Дальнейшие усовершенствования будут направлены на использование более точных данных и оптимизацию алгоритмов обучения.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Borg R., Carlson N., Søndergaard J., Persson F. The growing challenge of chronic kidney disease: an overview of current knowledge. *Int. J. Nephrol.* 2023;9609266. DOI: 10.1155/2023/9609266.

2. Eckardt K.U., Delgado C., Heerspink H.J.L., Pecoits-Filho R., Ricardo A.C., Stengel B. et al. Trends and perspectives for improving quality of chronic kidney disease care: conclusions from a kidney disease: Improving Global Outcomes (KDIGO) Controversies Conference. *Kidney Int.* 2023;104(5):888–903. DOI: 10.1016/j.kint.2023.05.013.
3. Eckardt K.U., Coresh J., Devuyst O., Johnson R.J., Köttgen A., Levey A.S. et al. Evolving importance of kidney disease: from subspecialty to global health burden. *Lancet.* 2013;382(9887):158–169. DOI: 10.1016/S0140-6736(13)60439-0.
4. Jenkins S.L., Ma'ayan A. Systems pharmacology meets predictive, preventive, personalized and participatory medicine. *Pharmacogenomics.* 2013;14(2):119–122. DOI: 10.2217/pgs.12.186.
5. Tsai S.H., Chu S.J., Chen S.J., Fan Y.M., Chang W.C., Wu C.P. et al. Acute renal infarction: a 10-year experience. *Int. J. Clin. Pract.* 2007;61(1):62–67. DOI: 10.1111/j.1742-1241.2006.01136.x
6. Siegel R.L., Miller K.D., Jemal A. Cancer statistics, 2018. *CA Cancer J. Clin.* 2018;68(1):7–30. DOI: 10.3322/caac.21442.
7. Heuer R., Gill I.S., Guazzoni G., Kirkali Z., Marberger M., Richie J.P. et al. A critical analysis of the actual role of minimally invasive surgery and active surveillance for kidney cancer. *Eur. Urol.* 2010;57(2):223–232. DOI: 10.1016/j.eururo.2009.10.023.
8. Pather N., Blyth P., Chapman J.A., Dayal M.R., Flack N.A.M.S., Fogg Q.A. et al. Forced disruption of anatomy education in Australia and New Zealand: an acute response to the Covid-19 pandemic. *Anat. Sci. Educ.* 2020;13(3):284–300. DOI: 10.1002/ase.1968.
9. Baptiste Y.M. Digital feast and physical famine: the altered ecosystem of anatomy education due to the Covid-19 pandemic. *Anat. Sci. Educ.* 2021;14(4):399–407. DOI: 10.1002/ase.2098.
10. Roux W. Ueber die verzweigungen der blutgefäße. *Eine morphologische Studie. Z Naturwiss.* 1878;12:205–266.
11. Murray C.D. The physiological principle of minimum work applied to the angle of branching of arteries. *J. Gen. Physiol.* 1926;9(6):835–841. DOI: 10.1085/jgp.9.6.835.
12. Uylings H.B. Optimization of diameters and bifurcation angles in lung and vascular tree structures. *Bull. Math. Biol.* 1977;39(5):509–520. DOI: 10.1007/BF02461198.
13. Kretowski M., Rolland Y., Bézy-Wendling J., Coatrieux J.L. Physiologically based modeling of 3-D vascular networks and CT scan angiography. *IEEE Trans. Med. Imaging.* 2003;22(2):248–257. DOI: 10.1109/TMI.2002.808357.
14. Cassot F., Lauwers F., Fouard C., Prohaska S., Lauwers-Cances V. A novel three-dimensional computer-assisted method for a quantitative study of microvascular networks of the human cerebral cortex. *Microcirculation.* 2006;13(1):1–18. DOI: 10.1080/10739680500383407.
15. Blanco P.J., de Queiroz R.A., Feijóo R.A. A computational approach to generate concurrent arterial networks in vascular territories. *Int. J. Numer. Method Biomed. Eng.* 2013;29(5):601–614. DOI: 10.1002/cnm.2547.
16. Fredrich T., Welter M., Rieger H. Tumorcode: A framework to simulate vascularized tumors. *Eur. Phys. J. E. Soft Matter.* 2018;41(4):55. DOI: 10.1140/epje/i2018-11659-x.
17. Kashkooli F.M., Abazari M.A., Soltani M., Ghazani M.A., Rahmim A. A spatiotemporal multi-scale computational model for FDG PET imaging at different stages of tumor growth and angiogenesis. *Sci. Rep.* 2022;12(1):10062. DOI: 10.1038/s41598-022-13345-4.
18. Li P., Pan Q., Jiang S., Yan M., Yan J., Ning G. Development of novel fractal method for characterizing the distribution of blood flow in multi-scale vascular tree. *Front. Physiol.* 2021;12:711247. DOI: 10.3389/fphys.2021.711247.
19. Montino Pelagi G., Regazzoni F., Huyghe J.M., Baggiano A., Ali M., Bertoluzza S. et al. Modeling cardiac microcirculation for the simulation of coronary flow and 3D myocardial perfusion. *Biomech. Model. Mechanobiol.* 2024;23(6):1863–1888. DOI: 10.1007/s10237-024-01873-z.
20. Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2021620982 Российская Федерация. Количественная анатомия внутриорганного артериального русла почки человека : № 2021620806 : заявл. 27.04.2021 : опубл. 18.05.2021 / О.К. Зенин, А.В. Дмитриев, И.С. Милых, О.О. Юрченко; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пензенский государственный университет». EDN JDPUFN.
22. Колсанов А.В., Назарян А.К., Воронин А.С., Гелашвили О.А. Изучение вариантной анатомии почечных артерий с помощью КТ-ангиографии. *Журнал анатомии и гистопатологии.* 2020;9(1):43–48. DOI: 10.18499/2225-7357-2020-9-1-43-48
23. Liu C., Tan Z., He M. Overview of Artificial Intelligence in Medicine. In: Raz M., Nguyen T.C., Loh E. Artificial intelligence in medicine: applications, limitations and future directions. Singapore: Springer, 2022:23–34. DOI: 10.1007/978-981-19-1223-8_2.
24. Aggarwal C.C. Neural networks and deep learning: a textbook, 2nd ed. Switzerland: Springer International Publishing AG, 2023:553. DOI: 10.1007/978-3-031-29642-0_13.
25. Nielsen A. Practical time series analysis: prediction with statistics and machine learning. Sebastopol: O'Reilly Media, Inc., 2019:504.
26. Wu Y., Su T., Du B., Hu S., Xiong J., Pan D. Kolmogorov–Arnold network made learning physics laws simple. *J. Phys. Chem. Lett.* 2024;15(50):12393–12400. DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c02589.
27. Wu L., Cui P., Pei J., Zhao L. Graph Neural networks: foundations, frontiers, and applications. Singapore: Springer Nature, 2022:725. DOI: 10.1007/978-981-16-6054-2.
28. Veličković P., Cucurull G., Casanova A., Romero A., Liò P., Bengio Y. Graph Attention Networks. Published as a conference paper at ICLR, 2018:12. arXiv:1710.10903v3 [stat.ML].
29. PyG documentation. URL: <https://pytorch-geometric.readthedocs.io/en/latest/#> (дата обращения: 12.02.2025).
30. Hagberg A.A., Schult D.A., Swart P.J. Exploring Network Structure, Dynamics, and Function using NetworkX. Proceedings of the 7th Python in Science Conference. Pasadena, CA USA. 2008:11–15. URL: <https://aric.hagberg.org/papers/hagberg-2008-exploring.pdf>
31. Harris C.R., Millman K.J., van der Walt S.J., Gommers R., Virtanen P., Cournapeau D. et al. Array programming with

- NumPy. *Nature*. 2020;585(7825):357–362. DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2.
32. Kingma D.P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization. Published as a conference paper at the 3rd International Conference for Learning Representations, San Diego. 2017. DOI: 10.48550/arXiv.1412.6980.
33. Zhang S., Yang G., Qian J., Xiaomei Zh., L J., Li Pu. et al. A novel 3D deep learning model to automatically demonstrate renal artery segmentation and its validation in nephron-sparing surgery. *Front. Oncol.* 2022;12:997911. DOI: 10.3389/fonc.2022.997911.
34. Xu P., Holstein-Rathlou N.H., Søgaard S.B., Gundlach C., Sørensen C.M., Erleben K. et al. A hybrid approach to full-scale reconstruction of renal arterial network. *Sci. Rep.* 2023;13(1):7569. DOI: 10.1038/s41598-023-34739-y.
35. Thomas S.R. Mathematical models for kidney function focusing on clinical interest. *Morphologie*. 2019;103(343):161–168. DOI: 10.1016/j.morpho.2019.10.043.

Вклад авторов

Зенин О.К. – разработка концепции и дизайна, окончательное утверждение для публикации рукописи. Горбаченко В.И. – анализ и интерпретация данных. Грибков Д.Н. – разработка программ, анализ и интерпретация данных. Сергиенко А.А. – проверка критически важного интеллектуального содержания. Ilias Miltiadis – обоснование рукописи.

Информация об авторах

Зенин Олег Константинович – д-р мед. наук, профессор, профессор кафедры «Анатомия человека», ПГУ, г. Пенза, zen.olegz@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5447-1989>

Горбаченко Владимир Иванович – д-р тех. наук, профессор, зав. кафедрой «Компьютерные технологии», ПГУ, г. Пенза, gorvi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1012-8855>

Грибков Дмитрий Николаевич – аспирант, кафедра «Компьютерные технологии», ПГУ, г. Пенза, rororol23@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4728-5923>

Сергиенко Анна Альбертовна – аспирант, кафедра «Анатомия человека», ПГУ, г. Пенза, anya.gurieva00@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0005-1380-8767>

Ilias Miltiadis – магистрант, Университет Палермо Италия, г. Палермо, Италия, contact@miltykh.com, <https://orcid.org/0000-0002-9130-3255>

(✉) **Зенин Олег Константинович**, zen.olegz@gmail.com

Поступила в редакцию 29.06.2025;
одобрена после рецензирования 25.10.2025;
принята к публикации 30.10.2025