

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСТКИ ИНФОРМИРОВАННОЙ ГРАФОВОЙ СЕТИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНОЙ ДИНАМИКИ КЛЕТОК

Станиславчук-Абовский Д. Б.¹

Научный руководитель – канд. ф-м. наук, доцент Захаров А. П.¹

¹Университет ИТМО

dmitriy.abovskiy@gmail.com

Введение

Современные методы прогноза траекторий используют пространственно-временные модели, где пространственные связи задаются графом, а временная динамика — рекуррентными или Transformer-блоками с self-attention [1]. К таким подходам относятся STG-LSTM, LITransformer и MTP-STG [2–4]. Однако они требуют больших данных и значительных вычислительных ресурсов, что ограничивает их применение в биомедицинских задачах с малыми выборками [3, 4].

Основная часть

В данном исследовании рассматривается гипотеза о том, что прогнозирование траекторий клеток по видеотрекингу можно сформулировать как предсказание краткосрочной динамики в системе взаимодействующих частиц. С допущением позволяющим рассматривать клетки как недеформируемые взаимодействующие шары. В каждом кадре наблюдаются позиции клеток и их атрибуты, а цель обучения — предсказать одношаговое смещение клетки между кадрами. Движение клеток не является независимым и коррелирует с соседями, природа этих корреляций образована кинетическим вкладом и потенциальной энергией [5, 6]. В работе используется графовая модель с механизмом внимания, где структура соседей задаётся радиусным графом, а веса внимания смещаются так, чтобы выделять физически релевантные связи. Для этого в модель вводится внешний физический приор — прямая корреляционная функция, восстановленная по экспериментальным траекториям клеток. Оценка приора выполняется через структурный фактор с применением соотношения Орнштейна–Цернике и обратного преобразования Ханкеля, что позволяет вносить в модель физически интерпретируемую характеристику короткодействующих межклеточных взаимодействий.

Выводы

Проведенная апробация на наборе данных BF-C2DL-HSC с соревнования Cell Tracking Challenge [7] показала, что предложенная модель обеспечивает устойчивое качество прогноза на валидационной и тестовой выборках, что свидетельствует о хорошей обобщающей способности на ранее не наблюдавшихся данных. Для компонент смещения клеток получены значения R^2 порядка 0.65–0.75, при этом ошибки RMSE и MAE остаются сопоставимыми между разбиениями, включая оценку по модулю смещения, что указывает на стабильность предсказаний.

Полученные результаты подтверждают, что включение внешнего физического приора в механизм графового внимания позволяет учитывать значимую вариативность локальной клеточной динамики и повышает устойчивость модели при работе с ограниченными биомедицинскими данными. Предложенный подход также улучшает интерпретируемость attention-механизма за счет физически осмысленного распределения межклеточных взаимодействий и позволяет управлять балансом между данными и физической индуктивной гипотезой через параметры регуляризации.

Литература

1. Emergent Mind. Spatiotemporal Transformer Model [Электронный ресурс]. 2025. – Режим доступа: <https://www.emergentmind.com/topics/spatiotemporal-transformer-model> (дата обращения: 25.02.2026).
2. Ndunguru D. D., Xing F., Oroni C. Z., Ani A., Li C. STG-LSTM: Spatial-temporal graph-based long short-term memory for vehicle trajectory prediction // Multimodal Transportation. 2025. Vol. 4, no. 3. Art. 100222.
3. Zhong Y., Gui Z., Gao Z., Wang X., Wei J. LITransformer: Transformer-Based Vehicle Trajectory Prediction Integrating Spatio-Temporal Attention Networks with Lane Topology and Dynamic Interaction // Electronics. 2025. Vol. 14, no. 24. Art. 4950.
4. Zhang Z., Cao X., Song Y. et al. MTP-STG: Spatio-Temporal Graph Transformer Networks for Multiple Future Trajectory Prediction in Crowds // Sensors. 2025. Vol. 25, no. 24. Art. 7466.
5. Méhes E., Vicsek T. Collective motion of cells: from experiments to models // Integrative Biology. 2014. Vol. 6, no. 9. P. 831–854.
6. Styer D. F. Statistical Mechanics [Электронный ресурс]: lecture notes / open textbook. 2008. – Режим доступа: <https://physics.oberlin.edu/~dfstyer/StatMech/StatMech.pdf> (дата обращения: 25.02.2026).
7. Cell Tracking Challenge. Mouse hematopoietic stem cells in hydrogel microwells (BF-C2DL-HSC) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://celltrackingchallenge.net/2d-datasets/> (дата обращения: 09.02.2026).