

DOI:10.19651/j.cnki.emt.2417643

基于 MS-SAGCNs 的自闭症诊断研究^{*}

蔺博文¹ 曹先庆¹ 杨欢¹ 赵峰²

(1. 沈阳化工大学信息工程学院 沈阳 110142; 2. 山东工商学院计算机科学与技术学院 烟台 264005)

摘要: 针对自闭症诊断研究中脑网络建模过程存在的多尺度特征挖掘不充分、皮尔逊相关算法的功能连接估计不准确等问题,提出了一种基于多尺度自注意力图卷积网络 MS-SAGCN 的自闭症诊断算法框架。首先,使用 Morlet 小波变换与动态时间规整,提取大脑血氧水平依赖信号的时频信息与基于此信息的多尺度功能连接,随后,通过预训练嵌入模型增强时频特征,与功能连接组合为多尺度脑网络。最终,使用 MS-SAGCN 对数据进行融合增强,以实现自闭症患者的自动诊断。通过 ABIDE 数据集进行实验验证,结果表明,MS-SAGCN 可有效增强多尺度脑网络,总体框架在分类任务中取得了 95.1% 准确率、97.4% 真阳率和 94.9% 的 F1 分数,显著优于其他诊断模型,体现了该模型良好的应用前景。

关键词: 自闭症谱系障碍; 脑网络; 图神经网络; 多头自注意力; 动态时间规整; 长短期记忆网络; 连续小波变换; 数据挖掘

中图分类号: TN919.5; TP391.4 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 520.2040

Research of autism diagnosis based on MS-SAGCNs

Lin Bowen¹ Cao Xianqing¹ Yang Huan¹ Zhao Feng²

(1. College of Information Engineering, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142, China;

2. School of Computer Science and Technology, Shandong Technology and Business University, Yantai 264005, China)

Abstract: To address the limitations in autism diagnosis, such as insufficient multi-scale feature extraction and the inaccuracy of functional connectivity estimation using Pearson correlation, this study proposes a novel diagnostic framework based on the Multi-Scaled Self-Attention Graph Convolution Network (MS-SAGCN). The framework begins by applying Morlet wavelet transform and dynamic time warping to extract the time-frequency information of Blood-Oxygen-Level-Dependent (BOLD) signals and their multi-scale functional connectivity. A pre-trained embedding model is then used to enhance time-frequency features, which are combined with functional connectivity to construct multi-scale brain networks. Finally, MS-SAGCN is employed to integrate and enhance the data for the automatic diagnosis of autism. Experiments were conducted using the ABIDE dataset, and the results show that MS-SAGCN can effectively enhance the multi-scale brain network. The overall framework achieved an accuracy of 95.1%, a true positive rate of 97.4%, and an F1 score of 94.9% in the classification task, significantly outperforming other diagnostic models, demonstrating the promising application prospects of this model.

Keywords: autism spectrum disorder; brain network; graph neural network; multi-head self-attention; dynamic time warping; long short-term memory; continuous wavelet transform; data mining

0 引言

自闭症谱系障碍 (autism spectrum disorder, ASD) 是一种体现在社交、语言与行为上的严重精神障碍^[1]。早期诊断与干预对提高患者生活质量、减轻社会和家庭负担至

关重要。传统 ASD 诊断依赖于临床症状和神经影像学检查,但这些方法主观性强,易漏诊。近年随着神经成像技术与计算机技术的进步,基于深度学习的神经影像学分析在 ASD 诊断应用中体现出很大潜力^[2]。其中,基于静息态功能核磁共振成像 (resting-state functional MRI, rs-fMRI)

收稿日期:2024-12-17

* 基金项目:国家自然科学基金(62176140)、中央引领地方(山东省)科技发展资金项目(YDZX2022093)、烟台市科技创新发展计划(校地融合类)(2023XDRH001)项目资助

的血氧水平依赖 (blood oxygenation level-dependent, BOLD) 信号被广泛用于探索脑网络的活动模式, 为神经系统疾病的诊断提供了一种新的可靠方式^[3]。

传统基于 fMRI 的大脑疾病诊断主要聚焦于大脑兴趣点 (regions of interest, ROI) 或大脑功能连接网络 (functional connection network, FCN) 两种模态^[4-5]。近年来, 图神经网络 (graph neural network, GNN) 因其能够融合 ROI 和 FCN 特征而成为研究热点, 相关研究通常包含数据预处理和编码分类两个模块。在预处理模块中, 研究人员通过 FCN 估算和图节点特征提取, 将 rs-fMRI 数据转换为图数据。例如, Wang 等^[6] 通过脑空间位置编码节点与协方差算法估计 FCN, 以提高 GCN 建模能力; Zhao 等^[7] 使用多重 Pearson 相关算法结合原始 ROI 信号构建多阶脑图; Liu 等^[8] 通过 Pearson 相关估算 FCN 后引入一维卷积增强多阶功能连接, 与患者表型信息为节点构建图数据。这些方法虽然在图数据构建方面取得进展, 但 ROI 信号的非线性与时序特征未被充分挖掘, 且功能连接估算方法对时延和信号变形的抗扰性不足; 对于编码分类模块, GNN 方法是其核心算法, 研究者基于此并结合自身任务特点开发了多种模态融合架构, 例如, Han 等^[9] 开发了一种基于密集连接网络的图卷积网络框架, 来实现老年痴呆的风险评估; Wen 等^[10] 开发了一种用于多层次脑结构功能连接的图卷积网络模型, 用以预测受试者个体行为; Ma 等^[11] 设计了基于先验理论的多视图卷积网络, 并引入外部注意力网络读出机制来缓解多尺度数据的异质性问题。这些研究在编码多尺度图的网络设计上取得了一定进展, 但现有方法在多尺度频率特征增强角度仍有进一步优化空间。综上所述, 现有基于 GNN 的 ASD 自动诊断算法架构存在以下问题: 1) 在 ROI 信号处理上, 大多数研究忽略 ROI 信号特征或仅使用原始信号及低阶特征作为图节点输入, 导致 GNN 算法较难拟合时序特征, 引发过拟合问题; 2) 在功能连接网络估算方面, 文献普遍使用的 Pearson 相关与协方差等方法难以处理由血液动力学因素导致的信号时延和变形, 降低了网络估计的准确性; 3) 现有脑图建模方法忽略了 BOLD 信号在多频率尺度下的隐含信息, 该信号在每种频段上都具有不同医学含义, 提取这些频段下的序列信息将有助于模型学习到更多特征。

针对上述问题, 本文提出了一种基于多尺度自注意力图卷积网络 (multi-scaled self-attention graph convolution network, MS-SAGCN) 的 ASD 自动诊断框架。具体而言, 本文的主要贡献包括以下三点: 1) 提出了一种新型的端到端 ASD 诊断框架, 其包括多尺度数据预处理模块与 MS-SAGCN 编码分类模块; 2) 针对 ROI 间的信号延迟变形问题, 引入基于动态时间规整 (dynamic time warping, DTW) 的功能连接估计算法, 通过计算 ROI 的最优归一化距离构建 FCN; 3) 针对序列信号表征问题, 提出一种基于自适应残差长短时记忆网络 (adaptive residual long short-term

memory network, AR-LSTM) 的预训练嵌入模型 (pre-train embedding model, PEM), 用于增强 ROI 信号的线性化特征表示, 提升整体模型的诊断性能与鲁棒性。

1 模型架构

本文提出的基于 MS-SAGCN 网络 ASD 诊断算法整体架构如图 1 所示。其主要由预处理架构和基于 MS-SAGCN 网络的编码分类架构两部分组成。

预处理架构中, 采用连续小波变换 (continuous wavelet transform, CWT) 提取 BOLD 信号的小波时频图, 并分割多个频率尺度分量。这些尺度分量经过 DTW 算法估计 FCN 与 PEM 模型生成图节点嵌入, 组合为多尺度的图数据结构, 输入编码分类模块进行特征提取与分类。

编码分类架构将多尺度图数据输入 MS-SAGCN 编码器中, 进行特征融合增强编码, 生成的空间编码通过多层次感知机进行线性拟合与分类, 最终输出样本的分类结果。

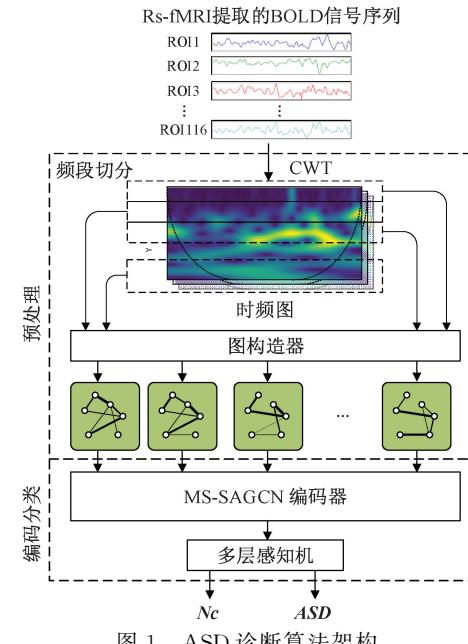


图 1 ASD 诊断算法架构

Fig. 1 Architectural framework of ASD diagnosis algorithm

2 模型建立

2.1 数据预处理

数据预处理架构分为两部分: CWT 与图构造模块。首先, CWT 用于分析时间序列以生成时频图。将其基于相应频率范围裁剪为多个时频分量。随后, 图构造模块接收这些分量, 生成多尺度图, 图构造模块的结构如图 2 所示。该模块由多组并行图构造管线构成, 管线中包含两个处理分支, 分别为基于 PEM 的嵌入生成与基于 DTW 的 FCN 分析。其中, PEM 由级联 AR-LSTM 网络构成, 用于生成表示序列的嵌入作为节点特征。对于同尺度 ROI 时频分量, 使用 DTW 进行归一化相关估计, 获得功能连接矩阵, 阈值

化处理形成稀疏的邻接矩阵。最终,不同尺度的 ROI 节点嵌入组与对应邻接矩阵相结合,得到图结构数据。

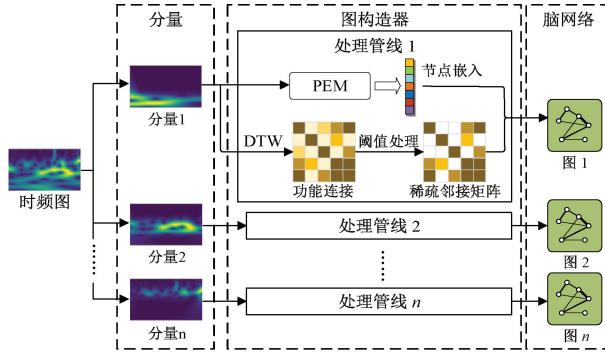


图 2 图数据构造模块结构

Fig. 2 Module structure for graph data constructor

1) 连续小波变换

CWT 是一种用于信号分析的强大工具,能够将信号分解为不同尺度和时间的成分。因其在时频分析中具有较高分辨率,非常适用于处理非平稳信号。使用基于 Morlet 小波的 CWT 对 BOLD 原始信号进行多尺度分析,提取不同频段的特征。对于 BOLD 序列 $f(t)$,CWT 定义^[12]为:

$$\text{CWT}_f[a, \tau, f(t)] = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \psi^* \left(\frac{t - \tau}{a} \right) dt \quad (1)$$

其中, a 为尺度因子, τ 为平移因子, $\psi(t)$ 为小波基函数。使用 Morlet 小波作为小波基,其在频域上的定义^[13]为:

$$\psi(t) = \pi^{-1/4} e^{i\omega_0 t} \cdot e^{-t^2/2} \quad (2)$$

式中: ω_0 为无维度频率。由此,将所有尺度和所有时间点的小波系数绘制在二维平面上形成时频图,再使用频段蒙版方法裁剪提取相应频段分量,获得多尺度时频图组。

2) 动态时间规整

基于 ROI 中的多尺度时频分量,计算相同尺度分量下 ROI 之间的 DTW 归一化距离。首先,对于 ROI 组中一对二维时频序列 $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_t], \mathbf{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_j, \dots, y_t], x_i, y_j \in \mathbb{R}^d$, 定义其欧氏距离 $d(x_i, y_j)$ 为:

$$d(x_i, y_j) = \sqrt{\sum_{k=1}^d (x_{i,k} - y_{j,k})^2} \quad (3)$$

获得两序列距离后,构造累计距离矩阵 \mathbf{D} ,递归公式为:

$$D(i, j) = d(x_i, y_j) + \\ \min[D(i-1, j), D(i, j-1), D(i-1, j-1)] \quad (4)$$

找到从 $D(1,1)$ 到 $D(n,m)$ 的最优路径 P ,计算累积距离作为归一化最优距离,路径 P 定义与归一化最优距离公式如式(5)~(6)所示,其中, L 为路径长度, $\sum_{k=1}^L d(x_{ik}, y_{jk})$ 为路径上的累积距离。

$$P = [(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_L, j_L)] \quad (5)$$

$$\text{DTW}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L d(x_{ik}, y_{jk}) \quad (6)$$

通过这种方式,计算所有 ROI 间归一化最优距离,默认相同 ROI 之间的距离为 0,组成归一化距离矩阵。最后,将矩阵数值线性放缩至 $[0,1]$ 区间并二值化去除弱连接,得到图结构数据的加权稀疏邻接矩阵 A_w ,该步骤的计算公式如式(7)所示,其中, D_{\max}, D_{\min} 分别为归一化距离矩阵的最大、最小值, λ 为设置阈值。

$$A_w(i, j) = \begin{cases} 1 - \text{maxmin}(\mathbf{D}), & 1 - \text{maxmin}(\mathbf{D}) \geq \lambda \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (7)$$

$$\text{maxmin}(\mathbf{D}) = (D_{ij} - D_{\min})(D_{\max} - D_{\min})^{-1}$$

3) 预训练嵌入模型 PEM

为了解决编码器无法表达时间序列数据的局限性,减轻小样本容量带来的过拟合风险,本文提出了以自适应残差网络改进的 LSTM 模型—AR-LSTM,作为 PEM 的主体模型。如图 3(a)所示为 PEM 网络结构,其由多个级联的残差块组成。残差块中,序列输入状态 \mathbf{X} 进行层归一化(layer norm, LN)后注入 AR-LSTM 网络,网络输出特征通过缩放指数线性激活函数 SELU。LN 层与 SELU 函数的表达式如式(8,9)^[14-15]所示,其中, $E[\mathbf{X}]$ 为样本均值, $\text{Var}[\mathbf{X}]$ 为样本方差, γ, β 为线性变换权重与偏置,常数 $\lambda \approx 1.0507, \alpha \approx 1.6733$ 分别为 SELU 函数的缩放因子与负斜率常数。

$$\text{LN}(\mathbf{X}) = \frac{\mathbf{X} - E[\mathbf{X}]}{\sqrt{\text{Var}[\mathbf{X}] + \epsilon}} \cdot \gamma + \beta \quad (8)$$

$$\text{SELU}(\mathbf{X}) = \lambda \cdot \begin{cases} x_{i,j}, & x_{i,j} > 0 \\ \alpha \cdot (\exp(x_{i,j}) - 1), & x_{i,j} \leq 0 \end{cases} \quad (9)$$

AR-LSTM 作为该 PEM 网络中的核心,其结构如图 3(b)所示,包含 LSTM 网络与自适应残差连接。自适应残差连接引入了线性变换与非线性激活函数,来将输入特征映射至与 LSTM 输出同维度的线性空间,每个时间单元中的线性变换权值共享,以降低训练参数量并稳定表达映射特征。时间截 t 的自适应残差连接表达式为:

$$\tilde{x}_t = \tanh(\mathbf{W}_r \cdot \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_r) \quad (10)$$

其中, \tilde{x}_t 为残差连接的输出, $\mathbf{W}_r, \mathbf{b}_r$ 为线性变换权重与偏置。综上所述,PEM 中残差块的输出特征 \mathbf{H} 定义如式(11)所示。

$$\mathbf{H} = \text{SELU}[(\tilde{x}_1 + h_1), \dots, (\tilde{x}_t + h_t), \dots, (\tilde{x}_L + h_L)] \quad (11)$$

2.2 MS-SAGCN 融合编码

MS-SAGCN 编码器主要结合多尺度图卷积网络(multi-scale GCN, MS-GCN)与多头自注意力机制(multi-head self-attention, MHSA)对多尺度图数据编码增强。通过融合编码多模态、多尺度数据,能有效捕捉隐藏的脑网络活动状态,增强模型对复杂脑疾病诊断任务的适应性。如图 4 所示为编

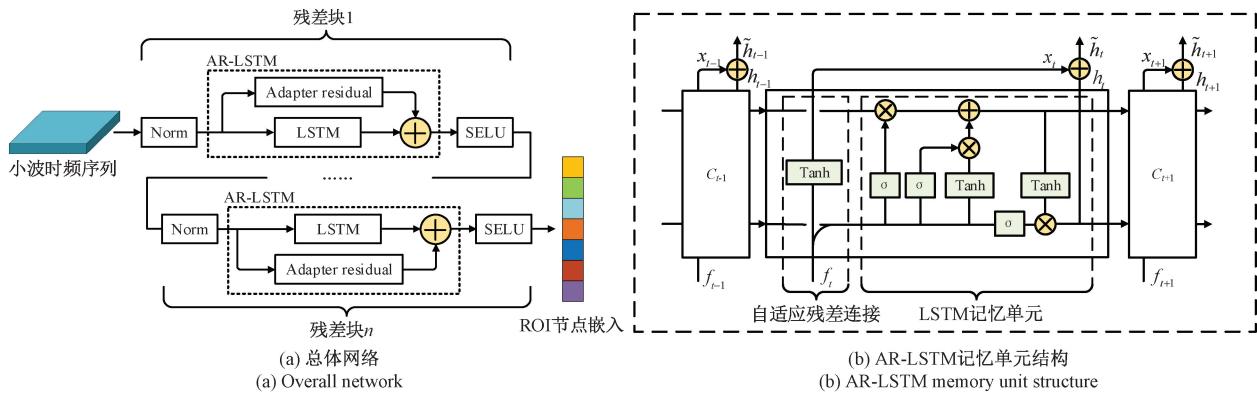


图 3 PEM 网络结构

Fig. 3 PEM network structure

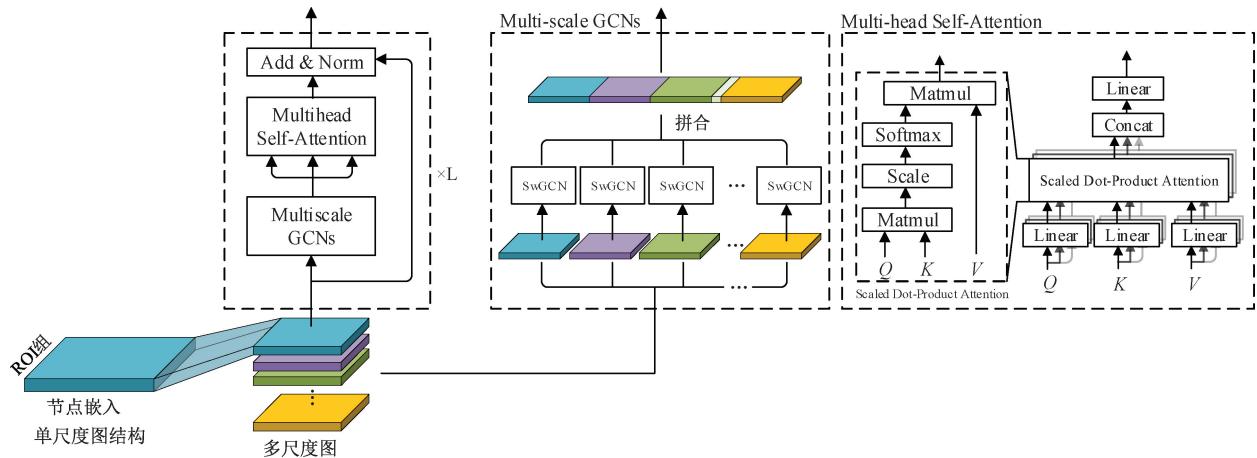


图 4 MS-SAGCN 编码器结构

Fig. 4 Structure of MS-SAGCN encoder

码器的总体结构与主要模块,从左到右分别为编码器基础结构与 MS-GCN、MHSA 层。另外,架构中设置了加法归一化 (add & norm, AN) 与特征拼接分解算法,以增加网络深度并提高模型构建灵活性。

1) 多尺度图卷积 MS-GCN

图卷积网络(graph convolutional network, GCN)对具有图拓扑结构的非欧空间数据表现出了广泛的适用性,是 ROI 嵌入与 FC 模态融合的桥梁。本研究针对保留脑网络中高相关性连接的权重并增强 MHSA 模块中对网络连接的注意力指导作用,提出以权值稀疏图卷积网络(sparse weighted graph convolutional network, Sw-GCN)为基本图卷积单元的 MS-GCN 网络,其将稀疏加权矩阵作为邻接矩阵进行卷积运算,Sw-GCN 的运算公式如下^[16]:

$$\mathbf{H}^{(l+1)} = \sigma(\tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}}_w \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{H}^{(l)} \tilde{\mathbf{W}}^{(l)}) \quad (12)$$

其中, $\mathbf{H}^{(l+1)}$ 表示第 l 层增强的节点特征组, $\mathbf{W}^{(l)}$ 为第 l 层的权重矩阵, $\tilde{\mathbf{A}}_w = \mathbf{A} + \mathbf{I}$ 为式(7)中添加自环的权值稀疏邻接矩阵, $\tilde{\mathbf{D}}$ 是 $\tilde{\mathbf{A}}_w$ 的度矩阵, $\sigma(\cdot)$ 为 sigmoid 激活函数。MS-GCN 的 GCN 层由多个并行 Sw-GCN 模块组成,

模块并行数量由输入尺度数量决定,以灵活增强多尺度图数据的节点与网络连接信息。为了避免不同尺度图之间互相影响。每个 Sw-GCN 拥有独立权值。

2) 加法归一化与特征拼接分解

为了灵活地对特征进行多尺度间的通信与增强,并且稳定模型训练过程与增加网络深度,模型中分别设计了特征维度拼合拆分算法和 AN 层。其中,特征拼合拆分算法主要用于输入 MHSA 层之前的特征拼合与 AN 层后的特征拆分。设 n 个二维特征矩阵 $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_n$, 其特征维度均为 d , 矩阵拼合与拆分公式如式(13)、(14)所示。

$$\mathbf{H}_{concat} = [\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_n] \quad (13)$$

$$\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{concat}[:, (i-1) \cdot d : i \cdot d] \quad (14)$$

加法归一化结构是受到 Vaswani 等^[17]学者提出的 transformer encoder 的启发,为保留原始信息、稳定训练过程并增加网络深度而设置。加法归一化层主要包含两个部分:残差连接与层归一化(LN)算法,LN 层已在式(8)提到,假设 MS-SAGCN 的编码网络输入为 \mathbf{X} , 多头自注意力的输出为 \mathbf{H} , 则加法归一化层前向传播过程为:

$$\tilde{\mathbf{H}} = GELU\{\text{LN}[(\mathbf{W}_R \mathbf{X} + \mathbf{b}_R) + \mathbf{H}]\} \quad (15)$$

其中, GELU(\cdot) 为高斯误差线性单元激活函数^[18], \mathbf{W}_R 、 \mathbf{b}_R 为残差连接过程的线性变换权重与偏置。编码器网络中, 特征集合通过式(13)、(14)进行拼合与均分, 增加了网络灵活性。

3) 多头自注意力

MHSA 层在编码器网络中起到了重要作用, 对于多尺度数据, 该层可以通过横向拼接的多尺度图数据实现尺度间信息传递, 并获取 ROI 之间的上下文依赖。编码器中, MHSA 层设置在 MS-GCN 层之后, 核心思想是通过多个注意力头(attention head)捕捉不同特征子空间并融合, 实现更有效的特征筛选效果。设输入特征矩阵 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times d}$, 其中 N 为节点数量, d 为节点维度, MHSA 层输出为 $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{N \times d}$, 其维度与输入相同。对于第 i 个注意力头, 将输入特征 \mathbf{X} 通过 3 个不同线性变换, 得到查询(Query)、键(Key)与值(Value)矩阵, 如式(16)所示。

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_i = \mathbf{X} \cdot \mathbf{W}_i^Q \\ \mathbf{K}_i = \mathbf{X} \cdot \mathbf{W}_i^K \\ \mathbf{V}_i = \mathbf{X} \cdot \mathbf{W}_i^V \end{cases} \quad (16)$$

其中, $\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{W}_i^K, \mathbf{W}_i^V \in \mathbb{R}^{d \times d_k}$ 为权重矩阵, d_k 为 $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$ 矩阵维度。根据 3 种矩阵, 可以计算得到注意力分数 $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{N \times N}$:

$$\mathbf{A}_i = \text{softmax}\left(\frac{\mathbf{Q}_i \mathbf{K}_i^T}{\sqrt{d_k}}\right) \quad (17)$$

将 \mathbf{A}_i 与值矩阵 \mathbf{V}_i 相乘, 得到第 i 注意力头输出:

$$\mathbf{Z}_i = \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{V}_i \quad (18)$$

拼接所有头的输出, 应用线性变换, 得到模块最终输出:

$$\mathbf{H} = \text{concat}(\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, \dots, \mathbf{Z}_i, \dots, \mathbf{Z}_h) \cdot \mathbf{W}^O \quad (19)$$

其中, $\mathbf{W}^O \in \mathbb{R}^{hd_k \times d}$ 为输出线性层权重, h 为总注意力头数。综上所述, MHSA 层在编码器网络中实现了多种尺度下图数据的相互融合, 同时注意力分数计算可以作为节点或该节点与邻居节点特征的贡献分数, 强化了网络可解释性。

3 实验分析

3.1 数据集与实验环境

本文使用的数据集来自美国自闭症脑成像交换项目 (autism brain imaging data exchange, ABIDE), 该数据库由 17 个国际成像站点组成。实验选择数据量最大的纽约大学位点(NYU)rs-fMRI 数据库, 筛选出包含有 92 个样本的数据集进行模型验证, 数据包含 45 名 ASD 患者与 47 名正常对照, 年龄在 7~15 岁之间。受试者人口信息统计结果如表 1 所示。两组在年龄、性别、智商、诊断访谈和诊断观察方面没有显著差异(p 值 > 0.05)。

数据采集与预处理工作参考文献的标准处理流程^[19-21]。处理结果使用自动解剖标记图谱标准模板

(AAL116)划分为 116 个大脑兴趣点(ROI), 采集每个 ROI 在 5 min 内的 BOLD 信号序列。所有 ROI 的信号序列组成为该样本的数据矩阵 $\mathbf{D}_s \in \mathbb{R}^{116 \times 170}$, 即每个样本包含 116 个大脑 ROI, 每个 ROI 含有数据长度为 170 的信号序列, 样本总数为 92。

表 1 受试者人口信息

Table 1 Demographic information of the subjects

特征	自闭症	正常对照	P 值
性别比(男/女)	36/9	36/11	0.213 5
平均年龄	11.1	11.0	0.773
平均智商	106.8	113.3	0.051 0
诊断访谈(得分)	32.2	—	—
观察量表(得分)	13.7	—	—
FD 值	0.14	0.15	0.36

本研究的所有实验均在配备 AMD EPYC 9754、nVIDIA RTX4090D 与 60GB RAM 的深度学习服务器上进行, 系统版本为 Ubuntu 20.04.5 LTS, CUDA 版本为 11.7。实验过程使用 Matlab wavelet time-frequency analyze 应用进行时频分析, python 3.9 与 Numpy、Scipy 函数库进行数据预处理, 模型训练与验证使用 Pytorch 深度学习框架, 版本为 1.13.1。

3.2 评价指标

本文通过计算全局效率(global efficiency)、聚类系数(clustering coefficient)、特征路径长度(characteristic path length)与小世界系数(small-world coefficient)进行不同 FCN 估计算法的性能对比。其中, 全局效率衡量整个网络的信息传递效率, 其反映了脑网络全局整合能力; 聚类系数衡量网络中节点聚集程度, 反映了网络的局部连接特性; 特征路径长度衡量网络中所有节点间平均最短路径长度, 反映了脑网络的整合性; 小世界系数衡量网络是否具有高局部连接与短路径性的指标, 该指标也反映大脑的小世界特性是否能被稳定还原。在模型训练方面, 本文选用四类指标评价模型在训练过程中的性能, 即准确率(accuracy, ACC)、敏感性(true positive rate, TPR)、特异性(true negative rate, TNR)与 F1 分数(F1 score)。其中, 准确率是衡量模型分类性能最直观的指标, 其反应了模型在所有样本中的正确预测概率; 敏感性表示在所有正样本中的正确预测概率, 特异性反映了在所有负样本中的正确预测概率; F1 分数反映了在样本不平衡时的更准确的模型性能。以上所提指标的定义如式(20)~(27)所示。

$$E = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} \frac{1}{d_{ij}} \quad (20)$$

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i \quad (21)$$

$$L = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} d_{ij} \quad (22)$$

$$\omega = \frac{C/C_{rand}}{L/L_{rand}} \quad (23)$$

$$ACC = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad (24)$$

$$TPR = \frac{TP}{TP + FN} \quad (25)$$

$$TNR = \frac{TN}{TN + FP} \quad (26)$$

$$F1 = \frac{2PR}{P+R} \quad (27)$$

其中, E 、 C 、 L 、 ω 分别为全局效率、聚类系数、特征路径长度与小世界系数, N 为网络总节点数, d_{ij} 为节点 i 到 j 的最短路径长度, C_{rand} 、 L_{rand} 为随机网络的聚类系数和特征路径长度, TP 、 TN 、 3.5×10^{-6} 、 FN 分别为真阳性样本量、真阴性样本量、假阳性样本量、假阴性样本量。

3.3 数据预处理

1) 连续小波变换与样本增强

对于 BOLD 信号的多频段的数据挖掘,本文使用主流的低频振幅 (amplitude of low-frequency fluctuations, ALFF) 分析方案。首先对序列执行 0.00~0.25 Hz 带通滤波去除异常噪声,随后对所有 ROI 信号执行 CWT,设置分析范围为 ALFF 中的 Slow2-Slow5 频道 (0.01~0.25 Hz),生成小波时频图,再根据 Slow2-Slow5 频道的亚频率范围,裁剪时频图为 4 个频道分量^[22],如图 5 所示为 ROI 信号的小波变换与频道分量提取结果。该小波时频图将作为 PEM 预训练数据集,注入模型进行训练,PEM 模型训练将在 3.3 节中进行详细分析。为了保证嵌入模型的泛化与抗过拟合能力,在预训练前对时频分量图使用“滑动窗口”切分策略进行数据扩增。

2) 邻接矩阵构造

提取小波时频图多尺度分量之后,基于时频分量计算 ROI 在相同频段下的 DTW 最优归一化相关系数,以此分析大脑功能连接。为了评估 DTW 算法对不同频段分量下的 FCN 估计性能,本文与常见的 Pearson、Spearman 与稀疏逆协方差 (sparse inverse, SI) 相关估计方法进行了对比分析,并通过 4 种量化指标对对照组 47 个样本进行量化分析,如图 6、7 所示分别为一个对照组样本的 FCN 分析可视化结果与不同方法在 4 个指标上数据分布。可视化结果中,高亮度的像素表示该对节点之间的相关性较高,反之则较低。由图 7 可知,Pearson 方法与 Spearman 方法的估计结果高度相似,其相似性在相关矩阵可视化中也有体现,在量化结果对比中显示二者在不同频率上的量化指标均表现出较大波动,其原因在于 Pearson 和 Spearman 方法对时序的延迟与变形鲁棒性不足,导致不同频段分量的网络估计中体现的中体现的相位同步信息产生了失真;稀疏逆协方差矩阵过于稀疏,无法完全刻画脑网络功能分区,其体现在该组数据在小世界系数上的数据缺失;相比之下,DTW 算法在四项指标中每一个分量网络的指标均体现出较为稳定

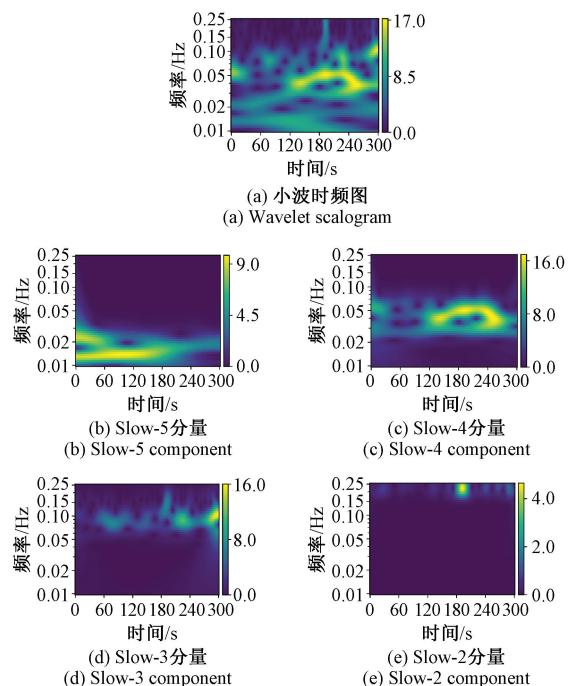


图 5 连续小波变换与频段分量提取结果

Fig. 5 Results of continuous wavelet transform and frequency band component extraction

的分布,表明该算法在 FCN 估计中具有更好的精确度与鲁棒性。此外,在图构建过程中,式(7)中提到的阈值设置可能对分类模型的性能产生重要影响,小的阈值可能引入过多虚假连接,而大的阈值可能忽略关键连接。针对这一问题,本文将在 3.4 节中进一步探讨其对分类性能的影响。

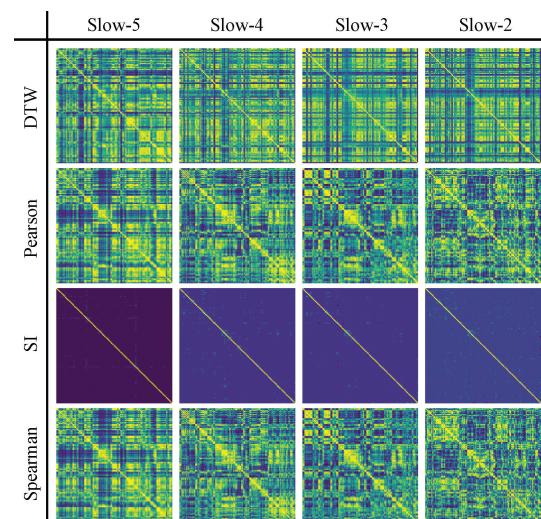


图 6 FCN 可视化结果

Fig. 6 FCN visualization results

3.4 模型训练与对比实验

为了验证所提出 MS-SAGCN 分类模型的有效性,本文设计了如下分析与对比实验: 对基于 AR-LSTM 的 PEM

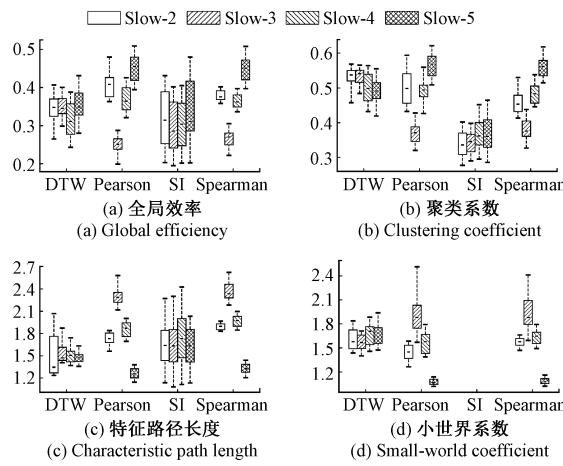
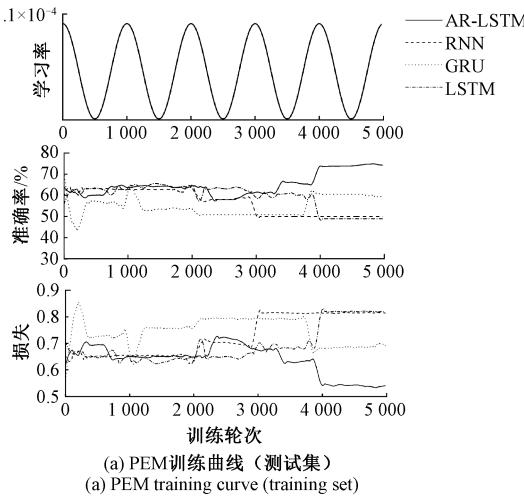


图 7 FCN 样本量化指标对比

Fig. 7 Comparison of quantitative indicators of FCN samples

模型与主干网络 MS-SAGCN 的训练曲线进行可视化分析;与之前文献所提出的分类模型进行分类性能对比。训练曲线通过展示模型训练过程中的准确率(accuracy, ACC)与损

(a) PEM训练曲线 (测试集)
(a) PEM training curve (training set)

失(Loss)来进行可视化分析。首先对 PEM 进行预训练,设置优化算法为 Adam, 使用余弦退火策略, 如图 8(a)所示为本文所提出 AR-LSTM 与其他基线序列模型的预训练曲线对比, 可见相比其他基线模型, AR-LSTM 训练曲线相对稳定, 并取得了最高测试集准确率(ACC)74.7%。完成 PEM 训练后, 移除分类器并冻结参数。

接下来训练 MS-SAGCN 编码器, 设置优化算法为 Adam, 固定学习率为 3.5×10^{-6} , 训练轮数 5 000 轮, 训练过程中加入 3.3 节中提到的阈值参数和不同大小的批数量进行性能对比。训练曲线如图 8(b)所示, 可见, 所有参数下网络均在前 100 轮开始迅速收敛, 并稳定准确率在 90.1%~95.1% 之间, 在不同的批大小参数中, 批大小为 64 时网络整体性能优于其他参数。最终, 本文提出的自闭症分类框架在 ABIDE 数据集上实现了最高 95.1% 的准确率, 显著优于其他文献提出的模型性能。如表 2 所示, 与其他文献所提出的模型相比, 本文的分类模型在准确率方面具有 3.5%~18.7% 的性能提升, 证明了本方法在处理自闭症诊断任务中的优越性与潜力。

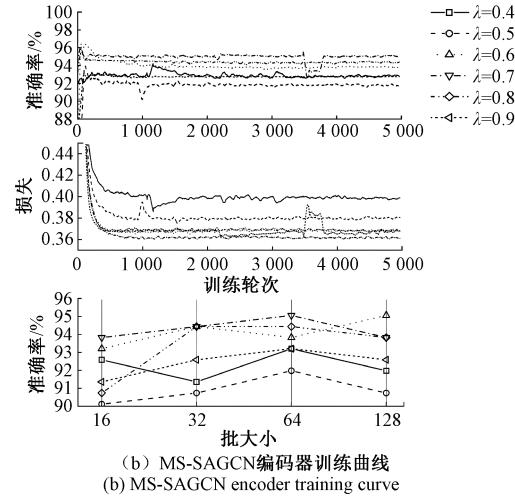


图 8 模型训练曲线

Fig. 8 Model training curves

3.5 消融实验

为了深入了解总体模型中每个部分对于性能的贡献, 本文设计了一系列消融实验。由于该模型的顺序性与强耦合性, 模块不能完全移除, 因此实验使用多层感知机来替代相关模块作为移除模块操作。以 3.4 节中训练的模型作为基线模型, 移除 2.2 与 2.3 节提到的 PEM, MS-GCN, MHSA 与加法归一化模块进行对比试验。实验结果如表 3 所示, 每个模块对分类性能均有显著影响。具体而言, 基于 AR-LSTM 的 PEM 模块能够对非线性时序数据进行线性化编码, 移除后 GCN 难以准确表示此类数据, 导致性能下降 15.5%。从表 3 中第 2~5 行可以看出, 移除 MS-GCN 和 MHSA 模块后, 准确率降至 85.2%。单独加入 MS-GCN 模

块后, 模型获得图建模能力, 性能提升 5.5%; 而单独加入 MHSA 模块后, 尽管准确率提升 4.3%, 但由于缺乏相关性矩阵作为先验知识, 未达最佳性能。两模块同时加入时, 模型性能达到最佳。此外, 移除加法归一化模块(AN)使模型增加过拟合风险, 导致准确率下降 5.6%, 至 89.5%。表中还展示了在 3.3 节中筛选出的具有可应用性与代表性的 DTW 与 Pearson 方法在编码分类模型中的训练结果对比。可知 DTW 方法在各项指标上均优于 Pearson 方法, 尤其在准确率(ACC)、真阳性率(TPR)和 F1 分数上表现突出, 分别达到 95.1%、97.4% 和 94.9%。这些结果证明, 本算法各模块在整体编码器中均是必要且相互作用的, 且 DTW 方法相比 Pearson 在总体模型性能上更具优势。

表 2 与其他文献所提出模型的性能对比

Table 2 Comparison of performance with the models presented in other literatures

相关文献	脑图谱	模型	ACC	TPR	TNR	F1 Score	%
文献[6]	CC200	PLSNet	76.4	73.3	78.6	—	
文献[7]	AAL116	H&L-SAGCN	79.9	75.6	78.6	76.1	
文献[8]	AAL116	VMM-DGCN	91.6	92.1	92.5	92.2	
文献[23]	AAL116	MHSA-FCN	81.4	83.0	80.1	81.3	
本文	AAL116	MS-SAGCN	95.1	97.4	92.9	94.9	

表 3 消融实验结果

Table 3 Ablation experiment results

PEM	MS-GCN	MHSA	AN	DTW				Pearson			
				ACC	TPR	TNR	F1	ACC	TPR	TNR	F1
×	✓	✓	✓	79.6	80.8	78.6	79.3	75.9	75.0	76.9	76.4
✓	✗	✗	✓	85.2	83.5	87.0	85.5	82.7	81.2	84.4	83.1
✓	✗	✓	✓	89.5	94.4	85.6	88.9	88.3	91.9	85.2	87.7
✓	✓	✗	✓	90.7	94.6	87.5	90.3	90.1	88.2	92.2	90.4
✓	✓	✓	✗	89.5	89.0	90.0	89.6	87.7	85.9	89.6	88.0
✓	✓	✓	✓	95.1	97.4	92.9	94.9	93.2	93.8	92.7	93.2

3.6 可视化分析

为了深入理解 MS-SAGCN 脑疾病诊断模型的数据处理方法和内部机制, 并发掘 ASD 病灶与相关活动异常, 本节针对模型的前向传播过程和注意力分数进行了可视化分析, 并基于注意力分数分析筛选了相关病变区域, 直观地观察模型的筛选与决策过程。

使用主成分分析(PCA)方法, 将高维的数据特征映射到二维空间, 分析模型编码能力。选取原始数据与模型 PEM 分支, MS-GCN 与 MHSA 的编码输出。前向传播过程可视化后的散点图如图 9 所示。可见, 初始时序数据在线性空间的分布完全混合, 难以区分, 进入 PEM 后输出的嵌入开始出现特征分离。这些特征集合在与邻接矩阵组合后输入 MS-GCN 与 MHSA, 输出的特征与其他尺度与模态的信息融合增强, 使特征在空间中逐渐分离, 最终形成了明显的决策边界。

下面进一步研究 MHSA 模块对不同尺度数据的决策表征过程, 通过采集所有样本产生的自注意力分数矩阵, 可以可视化相关节点与其他节点的注意力分数。如图 10 所示为样本中正负 3 组样本前向传播的注意力分数可视化结果。其中亮度越高表示该节点与其连接信息在模型中拥有越高的比重, 可见, 在 ASD 分类过程中, 一些节点和连接在所有样本中普遍具有较高的权重, 这预示着 ASD 患者的相关区域可能出现病变。为了探究病变可能出现的区域, 统计了所有样本的节点注意力得分, 得到了排名前十的相关脑区, 表 4 与图 11 分别展示了这些区域的注意力得分与其在大脑中的位置。可知, 小脑蚓部(Vermis)、回直肌(REC)、后扣带回(PCG)等 ROI 取得了较高的注意

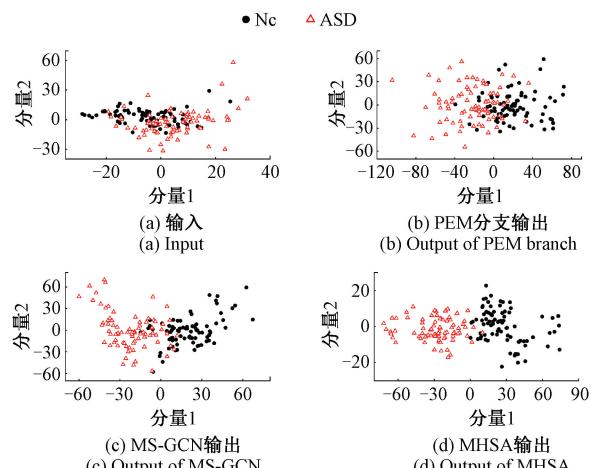


图 9 散点可视化结果

Fig. 9 Visualization results of scatter plots

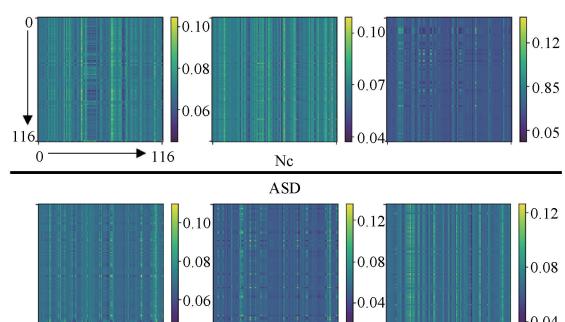


图 10 注意力分数矩阵可视化结果

Fig. 10 Visualization results of attention score matrix

力得分,这些区域大多负责人的逻辑、语言与社交功能,其病变后的症状与 ASD 患者症状高度重合,且在文献[24]的相关综述中阐明了 ASD 患者存在这些区域的功能缺失。综上所述,MS-SAGCN 诊断模型能够有效地增强并分离特征,为理解 ASD 的病理机制提供了临床指导。证明了该模型在 ASD 诊断领域的有效性。

表 4 高注意力得分 ROI (Top10)

Table 4 Top 10 high attention score ROIs

ROI	分数
Vermis12	0.904 9
REC. L	0.897 2
PCG. L	0.882 9
ACG. L	0.871 2
ORBsupmed. L	0.870 5
CRBL3. R	0.865 3
SFGmed. L	0.851 3
AMYG. L	0.846 0
CUN. L	0.829 9
ORBmid. R	0.822 4

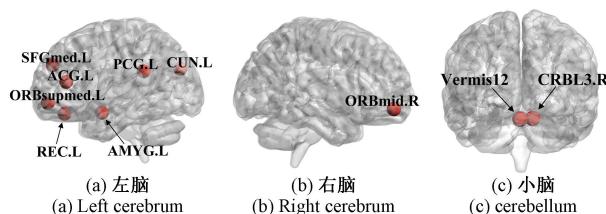


图 11 高得分 ROI 位置图示

Fig. 11 Positional illustration of ROI with high score

4 结 论

本文提出一种基于 MS-SAGCN 的 ASD 分类模型,用于对 ASD 患者的诊断与分析。试验结果表明:本文所提出的分类诊断模型能够有效地对多尺度图数据融合编码,并取得了卓越的分类性能,同时 MHSAs 模块显著提升了模型可解释性,有助于研究者深入分析 ASD 的病灶区域;基于 DTW 的 FCN 估计算法在脑网络特性捕捉上相比其他算法更具准确性与鲁棒性,并在总体分类准确性上优于 Pearson 相关;基于 AR-LSTM 的 PEM 模型能够更加有效捕捉序列的时间依赖特征,且改进自适应残差架构能够有效缓解过拟合问题。最后,本文所提出算法框架中 MS-SAGCN 编码器可以应用在更多尺度上的特征增强任务,也可以通过微调训练等方式扩展到其他神经系统疾病分类任务的脑区数据表示上,例如阿尔兹海默病、抑郁症和神经系统器质性损伤等。本研究只是初步探究脑网络中 ROI 的表示与基于图神经网络的多模态数据融合方法,对

于该模型的泛用性仍需进一步研究。未来的研究将尝试将该模型扩展至更多的自闭症数据集甚至其他脑疾病领域中,以探索该模型的泛用能力并应用至更多领域。

参考文献

- [1] CHOUEIRI R N, ZIMMERMAN A W. New assessments and treatments in ASD [J]. Current Treatment Options in Neurology, 2017, 19(2): 6.
- [2] HAN SH N, SUN ZH, ZHAO K H, et al. Early prediction of dementia using fMRI data with a graph convolutional network approach[J]. Journal of Neural Engineering, 2024, 21(1): 016013.
- [3] LAUMANN T O, SNYDER A Z, MITRA A, et al. On the stability of BOLD fMRI correlations [J]. Cerebral Cortex, 2017, 27(10): 4719-4732.
- [4] CUI R X, LIU M H. Hippocampus analysis by combination of 3D denseNet and shapes for Alzheimer's disease diagnosis[J]. IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics, 2018, 23(5): 2099-2107.
- [5] FENG M, XU J C. Detection of ASD children through deep-learning application of fMRI[J]. Children-Basel, 2023, 10(10): 1654.
- [6] WANG Y B, LONG H X, ZHOU Q W, et al. PLSNet: Position-aware GCN-based autism spectrum disorder diagnosis via FC learning and ROIs sifting[J]. Computers in Biology and Medicine, 2023, 163:107184.
- [7] ZHAO F, LI N, PAN H X, et al. Multi-view feature enhancement based on self-attention mechanism graph convolutional network for autism spectrum disorder diagnosis [J]. Frontiers in Human Neuroscience, 2022, 16: 918969.
- [8] LIU SH Q, WANG S Q, SUN CH L, et al. DeepGCN based on variable multi-graph and multimodal data for ASD diagnosis [J]. CAAI Transactions on Intelligence Technology, 2024, 9(4): 879-893.
- [9] HAN SH N, SUN ZH, ZHAO K H, et al. Early prediction of dementia using fMRI data with a graph convolutional network approach[J]. Journal of neural engineering, 2024, 21(1): 016013.
- [10] WEN X Y, CAO Q M, JING B, et al. Multi-scale FC-based multi-order GCN: A novel model for predicting individual behavior from fMRI[J]. IEEE Trans on Neural Systems and Rehabilitation Engineering, 2024, 32: 548-558.
- [11] MA CH R, LI W J, KE SH, et al. Identification of autism spectrum disorder using multiple functional connectivity-based graph convolutional network [J]. Medical & Biological Engineering & Computing, 2024, 62(7): 2133-2144.

- [12] 张旭,许昕,潘宏侠,等. 基于 CWT 和 CooAtten-Resnet 的弧齿锥齿轮箱故障诊断方法研究[J]. 电子测量技术, 2023, 46(3): 182-189.
ZHANG X, XU X, PAN H X, et al. Research on fault diagnosis method of spiral bevel gear box based on CWT and CooAtten-Resnet [J]. Electronic Measurement Technology, 2023, 46(3): 182-189.
- [13] 赵小强,安贵财. 基于 MADSC 和 SIDSwinT 的滚动轴承故障诊断[J]. 电子测量与仪器学报, 2024, 38(11): 58-69.
ZHAO X Q, AN G C. Rolling bearing fault diagnosis based on MADSC and SIDSwinT [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2024, 38(11): 58-69.
- [14] BA J L, KIROS J R, HINTON G E. Layer normalization[J]. ArXiv preprint arXiv:1607.06450, 2016.
- [15] 周顺勇,陆欢,胡琴,等. 基于 SVD 与混合神经网络模型的自动调制识别[J]. 电子测量技术, 2024, 47(21): 111-121.
ZHOU SH Y, LU H, HU Q, et al. Automatic modulation recognition based on SVD and hybrid neural network model [J]. Electronic Measurement Technology, 2024, 47(21): 111-121.
- [16] KIPF T, WELLING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[J]. ArXiv preprint arXiv:1609.02907, 2016.
- [17] VASWANI A, SHAZER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need[J]. ArXiv preprint arXiv: 1706.03762, 2023.
- [18] BA L J, KIROS J R, HINTON G E. Gaussian error linear units (GELUs) [J]. ArXiv preprint arXiv: 1606.08415, 2016.
- [19] RAY S, GOHEL S, BISWALET B B, et al. Altered functional connectivity strength in abstinent chronic cocaine smokers compared to healthy controls [J]. Brain Connectivity, 2015, 5(8): 476-486.
- [20] URBAIN C, VOGAN V M, YE A X, et al. Desynchronization of fronto-temporal networks during working memory processing in autism [J]. Human Brain Mapping, 2016, 37(1): 153-164.
- [21] REINHART R M G, NGUYEN J A. Working memory revived in older adults by synchronizing rhythmic brain circuits [J]. Nature Neuroscience, 2019, 22(5): 820-827.
- [22] 阮杏林,车春晖,林海龙,等. 静息态功能磁共振观察基底节区脑梗死后不同频段低频振幅变化[J]. 福建医科大学学报, 2020, 54(6): 411-416.
RUAN X L, CHE CH H, LIN H L, et al. Amplitude of low-frequency fluctuation changes in patients with basal ganglia region infarction in different frequencies base on resting-state functional magnetic resonance imaging[J]. Journal of Fujian Medical University, 2020, 54(6): 411-416.
- [23] ZHAO F, FENG F, YE SH X, et al. Multi-head self-attention mechanism-based global feature learning model for ASD diagnosis [J]. Biomedical Signal Processing and Control, 2024, 91: 106090.
- [24] 郑玉玮,王盛华,崔磊. 自闭症谱系障碍的理论阐释、神经机制及干预进展[J]. 济南大学学报:自然科学版, 2017, 31(5): 452-458.
ZHENG Y W, WANG SH H, CUI L. Progress in theory, neural mechanism, and intervention of autism spectrum disorder[J]. Journal of University of Jinan (Science and Technology), 2017, 31(5): 452-458.

作者简介

- 蔺博文,硕士研究生,主要研究方向为模式识别与人工智能。
E-mail:lbwerty@126.com
- 曹先庆(通信作者),副教授,博士,主要研究方向为图像识别和虚拟仪器研发。
E-mail:1097091402@qq.com
- 杨欢,硕士研究生,主要研究方向为深度学习算法。
E-mail:1694401008@qq.com
- 赵峰,教授,博士,主要研究方向为人工智能、机器学习、医学图像分析、金融大数据分析。
E-mail:zhaofeng1016@126.com