

基于多模态动态融合的脑网络学习方法

马芮, 龚津南

(成都信息工程大学 计算机学院, 四川 成都 610225)

摘要: 针对精神分裂症多模态脑网络特征融合中模态异质性强、结构—功能耦合关系复杂以及多模态特征贡献难以动态建模等挑战, 提出多模态动态融合图网络模型MDF-GNN。该模型通过三重机制实现多模态信息融合。首先, 设计独立和共享的卷积通道, 并结合自适应感知池化(ASAP)提取功能连接(FC)和结构连接(SC)的子网络特征; 其次, 利用双重注意力机制分别动态平衡共享通道和多通道中的特征贡献权重; 最后, 通过构建对比学习约束的联合表示空间来增强类别区分度。该模型在自采精神分裂症数据集上取得了93.55%的分类准确率, 相较于最佳单模态基线模型GCN(准确率为77.42%)实现了16.13%的性能增长。可视化分析结果表明, 患者组结构(皮层厚度)与功能(局部一致性)特征联合贡献占比65.3%, 暗示了灰质萎缩与功能代偿失衡的协同作用; 多通道权重分析结果显示, 患者更依赖SC(权重较健康组提升17%), 而健康组依赖FC(占比62.9%), 印证了疾病的神经发育机制; 共享通道权重的组间差异($\Delta+4\%$)提示患者存在结构—功能失耦。以上结果为跨模态生物标志物开发与精准诊疗提供了新思路。

关键词: 磁共振影像; 图卷积神经网络; 多模态融合; 对比学习; 注意力机制

DOI: 10.11907/rjdk.251224

扫描二维码阅读全文:

中图分类号: TP391

文献标识码: A

文章编号: 1672-7800(2026)007-0022-09



Brain Network Learning Method Based on Multimodal Dynamic Fusion

MA Rui, GONG Jinnan

(School of Computer Science, Chengdu University of Information Technology, Chengdu 610225, China)

Abstract: In view of the challenges of multimodal brain network feature fusion in schizophrenia, such as strong modal heterogeneity, complex structure function coupling relationship, and difficulty in dynamic modeling of multimodal feature contributions, a multimodal dynamic fusion graph network model, MDF-GNN, is proposed. This model realizes multimodal information fusion through a triple mechanism. Firstly, independent and shared convolutional channels are designed and combined with adaptive sensing pooling (ASAP) to extract the sub network characteristics of functional connectivity (FC) and structural connectivity (SC); Secondly, the dual attention mechanism is used to dynamically balance the feature contribution weight in the shared channel and the feature contribution weight in the multi-channel; Finally, the class discrimination is enhanced by constructing a joint representation space of contrastive learning constraints. The model achieved a classification accuracy of 93.55% on the self collected schizophrenia data set, and achieved a performance increase of 16.13% compared with the best single-mode baseline model GCN (accuracy of 77.42%). The results of visual analysis showed that the combined contribution of structural (cortical thickness) and functional (local consistency) characteristics in the patient group accounted for 65.3%, suggesting the synergistic effect of gray matter atrophy and functional compensation imbalance; The results of multi-channel weight analysis showed that patients were more dependent on SC (the weight increased by 17% compared with the healthy group), while the healthy group was dependent on FC (62.9%), which confirmed the neurodevelopmental mechanism of the disease; The difference in the weight of shared channels between groups ($\Delta+4\%$) suggested that there was structural functional decoupling in patients. The above results provide new ideas for the development and precise diagnosis and treatment of multimodal biomarkers.

Key Words: magnetic resonance imaging; graph convolutional network; multimodal fusion; comparative learning; attention mechanism

收稿日期: 2025-05-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(62003058); 四川省科技支撑项目(2021YJ0165); 四川省自然科学基金项目(2023NSFSC0482, 2023NSFSC0037)

作者简介: 马芮(1999-), 女, 成都信息工程大学计算机学院硕士研究生, 研究方向为人工智能、医学影像处理; 龚津南(1989-), 男, 博士, 成都信息工程大学计算机学院副教授、硕士生导师, 研究方向为人工智能、医学图像处理。本文通讯作者: 龚津南。

0 引言

精神分裂症是一种极为复杂的神经发育障碍性疾病,目前其诊断在很大程度上依赖临床医生的主观经验,尚缺乏客观的生物学标志物作为诊断依据^[1]。同时,该疾病具有异质性的病理特征,给神经影像学研究带来重大挑战^[2-3]。近年来,多模态神经影像分析方法逐渐兴起,其利用结构连接(Structural Connection, SC)与功能连接(Functional Connection, FC)相结合的方式探索脑网络特征。其中,基于图神经网络(Graph Neural Networks, GNN)的方法成为一个重要研究方向,其将SC与FC构建为脑网络图,能有效捕捉大脑的拓扑特性;同时,通过SC与FC的双模态表征构建复杂大脑系统的多层次交互模型,提高了分类性能^[4]。

现有多模态融合方法主要沿两个方向展开:第一类是基于静态融合的方法,采用静态权重分配机制,如将SC/FC以加权拼接或加权求和等固定方式融合并作为模型输入。例如, Ktena等^[5]提出基于谱图卷积的Siamese图卷积网络(s-GCN),通过预定义空间图(解剖邻接)和功能图(平均功能连接)的静态结构,结合谱图卷积捕捉图拓扑特征,在ABIDE数据集中实现了12.9%的分类性能提升。然而,其依赖预定义的静态图结构,无法动态适应个体特异性或动态脑网络变化,且功能图易受训练集分布偏差的影响。Popp等^[6]提出基于通信模型的SC-FC耦合度量方法,通过路径传递性等6种通信测度建模SC衍生的功能交互,验证了全脑SC-FC耦合与一般认知能力成正相关,并通过区域特异性耦合策略构建交叉验证预测模型,但该方法受限于静态图拉普拉斯矩阵的预定义,无法动态调整个体化图结构,且计算复杂度较高,限制了其在超大规模图数据中的应用。Ghosh等^[7]提出基于联合子空间映射的SC-FC连接融合方法,通过联合对角化技术构建共同特征模态,并利用谱映射预测FC,在精神分裂症数据集中验证了全脑SC-FC映射的有效性,但该方法依赖预定义的联合特征模态空间,同样也无法动态适应个体特异性,且计算复杂度较高。另一类是基于特征交互的方法。例如, Wang等^[8]提出AM-GCN模型,采用注意力机制实现SC与FC在拓扑与节点特征层面的自适应融合,利用独立通道提取单模态特征,并通过权重共享通道完成跨模态信息整合。该模型在一定程度上缓解了参数膨胀问题,并提升了融合效率,但由于FC数据往往反映了大脑活动的全局相关性,而SC主要捕捉解剖结构上的局部连接特征,若直接共享卷积权重,模型更容易偏向于学习FC的全局分布,导致对SC中细粒度结构信息的提取能力下降。此外,其共享通道仅通过简单拼接的方式进行整合,缺乏跨通道间协同优化机制,难以充分挖掘模态间的互补特征。Yang等^[9]提出一种多模态动态图神经网络MDGCN,通过引入跨模态矩阵来

动态建模SC与FC间的节点匹配关系,并设计双边图卷积机制分别对两种模态进行特征聚合,对模型性能有一定提升作用。

池化方法(Pooling)是深度学习中的一种重要操作,尤其在神经网络中广泛应用,主要用于对数据进行降采样(downsampling),减少数据维度,同时保留关键特征信息。现有池化方法(如全局平均池化)在脑网络应用中面临拓扑信息丢失的问题。在对自适应感知池化(Adaptive Structure Aware Pooling, ASAP)的梯度分析研究中表明,传统池化方法在池化过程中损失了68%的高阶邻域结构信息,严重削弱了子网络特征的判别力^[10]。此外,目前研究多聚焦于特征提取而忽视表示空间的几何约束。研究发现,单模态GNN模型的类内距离方差显著高于类间距离差异,会导致决策边界模糊^[11]。虽然对比学习在计算机视觉领域取得突破,但其在脑网络中的应用仍处于探索阶段,加之现有方法缺乏对生物可解释性的显式约束,难以关联模型决策与已知病理机制,限制了临床转化价值^[12]。

针对上述挑战,本文提出多模态动态融合图神经网络(Multimodal Dynamic Fusion Graph Neural Network, MDF-GNN),主要贡献点为:①提出多通道协同学习机制,设计独立GCN通道与共享GCN通道的并行处理流,并使用ASAP提取每个通道的模态子网络特征;②提出双重动态注意力机制,在节点级别,跨模态注意力模块通过权重实现SC/FC贡献度的自适应分配;在通道级别,使用多通道注意力模块对3个通道嵌入输出向量进行融合学习;③在联合表示空间中引入对比学习损失函数,通过优化类内紧凑性与类间可分性来有效增强模型的判别能力与泛化能力。

1 实验数据与预处理

1.1 实验对象

以70名通过DSM-IV轴I障碍结构化临床访谈临床版(SCID-I-CV)确诊的精神分裂症患者为研究对象,均从成都脑科学研究院临床医院的住院和门诊治疗机构中招募([2020]伦审字(20)号),采集其临床、心理、行为和磁共振成像(Magnetic Resonance Imaging, MRI)数据^[13-14]。另招募73名年龄和性别匹配的健康对照者。所有实验对象的神经影像数据均于中国电子科技大学成都脑科学研究院信息医学研究中心使用3T MRI扫描仪(GE Discovery MR 750, USA)采集。每位患者均在一次半结构化访谈中完成PANSS阳性与阴性症状量表以评估精神症状,健康对照组无需进行该评估^[15]。所有患者均在研究期间接受药物治疗^[16]。表1为实验对象的基本信息。

1.2 数据采集

结构磁共振(Structural Magnetic Resonance Imaging, sMRI)影像采集在GE 3.0 Tesla 超导MRI扫描仪上进行,

Table 1 Basic information of subjects

表1 实验对象基本信息

指标	患者 (均值/标准差)	健康对照组 (均值/标准差)
被试数量	70	73
性别(男/女)	51/19	39/34
教育年限	11.58/2.75	10.69/3.23
年龄	40.82/11.25	38.68/9.64
年龄范围	16-66	19-56
病程	15.82/10.62	/
PANSS 评分	阳性量表	12.88/5.73
	阴性量表	21.1/6.56
总分	28.1/6.10	/

其中高清解剖结构图像采用 FSPGR 3D-T1 序列, TR/TE=6.008 ms/1.984 ms, 翻转角为 9° , 采集矩阵大小为 256×256 , 水平各向同性分辨率为 1 mm, 轴位采集, 全脑共无间隔采集 152 层, 层厚为 1 mm。

静息态功能磁共振 (Resting-state functional Magnetic Resonance Imaging, rs-fMRI) 影像采集在实验对象平躺安静闭眼情况下进行。使用标准 T2* 回波平面成像序列采集, R/TE=2 000 ms/30 ms, 翻转角为 90° , FOV 为 $24 \text{ cm} \times 24 \text{ cm}$, 采集矩阵大小为 64×64 , 采用轴位无间隔采集 35 层。一个被试共采集 255 个连续时间点的全脑图谱, 共计扫描 8 min 30 s。为提高数据的可靠性, 对每个被试采集两组静息态 fMRI 影像。

弥散磁共振 (Diffusion Magnetic Resonance Imaging, dMRI) 影像采集分为两个部分, 均采用弥散加权自旋回波 EPI 序列。第一部分为主要数据, 由 3 个未加权的弥散数据和 64 个梯度方向的弥散加权数据组成, 具体参数为 $b=1\,000 \text{ s/mm}^2$, TR=8 500 ms, 频率编码方向为左/右, 采集矩阵大小为 128×128 , FOV 为 $25.6 \text{ cm} \times 25.6 \text{ cm}$, 层厚为 2 mm, 由 78 个无间隔层覆盖全脑。第二部分数据有 6 个梯度方向, 频率编码方向为前/后, 其他参数与主要数据一致, 采集目的为降低磁敏感对图像的扭曲效应。

1.3 数据预处理

预处理操作旨在消除噪声, 增强对比度并减少图像中的偏斜或失真现象, 从而使原始图像更适合于后续分析与处理。本实验在 MATLAB2019a 平台上使用 SPM12、DPABI 和 fMRIPrep 软件对 fMRI、dMRI 和 sMRI 数据进行预处理。fMRI 数据的预处理步骤为: ①将 DICOM 格式转换为 NIFTI 格式; ②消除前 5 个时间点的数据以消除初始干扰; ③执行时间切片校正以消除切片之间的时间差; ④进行头部运动校正以消除受试者头部移动引起的错误; ⑤将图像空间标准化到 MNI 模板以进行空间匹配; ⑥进行空间平滑以提高信噪比; ⑦去除线性漂移以消除热噪声的影响; ⑧回归噪声协变量以去除头部运动参数、白质和脑脊液信号; ⑨使用 0.01~0.08 Hz 带通滤波器进行时间过滤, 以消除低频漂移和生理噪声。

dMRI 数据的预处理步骤为: ①将 DICOM 数据转换为

NIFTI 格式, 并生成 bval 和 bvec 文件; ②去除非脑组织; ③纠正头部运动和涡流以去除伪影; ④计算扩散张量系数; ⑤排除具有伪影和头部运动曲线大于 3 mm 的数据。

sMRI 数据的预处理步骤为: ①以 BIDS 格式存储数据; ②使用 N4BiasFieldCorrection 进行强度不均匀性校正; ③使用 antsBrainExtraction.sh 工具进行头骨剥离; ④使用 FAST 命令进行脑组织分割; ⑤使用 recon-all 命令重建大脑皮层表面; ⑥使用 antsRegistration 工具进行非线性配准, 将图像配准到 ICBM152 模板; ⑦使用 bbrregister 命令将 T1w 图像配准到 fsaverage 空间。

2 MDF-GNN 构建

MDF-GNN 模型架构如图 1 所示, 其实现了一个多通道学习—动态融合—联合优化的三阶段框架。具体来说, 设计多通道协同学习模块实现不同模态下磁共振数据的特征提取; 设计双重注意力模块实现跨模态的特征融合以及多通道特征融合; 通过多模态特征对比学习损失与分类联合损失函数实现二分类任务的联合优化。

2.1 特征提取与构图

使用 Harvard-Oxford 皮质图谱将大脑分割成 96 个区域, 每个区域被视为图的一个节点, 每个节点的神经影像学属性被提取为节点特征, 表示为无向加权图 $G = \{V, E, X\}$, 其中 $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ 为节点集合, $E = \{e_{ij} | i, j \in \{0, 1, \dots, n\}\}$ 为边的集合, $X = \{x_i | x_i \in \mathbb{R}^d, i \in \{1, 2, \dots, n\}\}$, d 为特征维度, n 为脑区节点个数^[17]。节点特征包含 10 种具有功能性、连接性和结构性的指标, 有 3 种功能连接密度 (Functional Connectivity Density, FCD), 包括长程 FCD (Long FCD)、全局 FCD (Global FCD, gFCD) 和局部 FCD (Local FCD, lFCD)^[18]; 白质体积 (White Matter Volume, WMV); 灰质体积 (Gray Matter Volume, GMV); 皮质厚度 (Thickness); 局部一致性 (Regional Homogeneity, ReHo); 低频振幅 (Amplitude of Low Frequency Fluctuation, ALFF); 分数低频振幅 (Fractional ALFF, fALFF); 局部神经活动时—空四维一致性 (Four-dimensional (spatio-temporal) Consistency of Local Neural Activities, FOCA)^[19]。所有特征均在体素水平上计算, 将每个大脑区域中所有体素特征的平均值作为图的节点特征。

连接权重的选择及其稀疏化处理对于脑网络学习至关重要^[20-21]。因此, 本文首先对大脑连接数据进行权重选择与稀疏化处理, 即图 1 中对 SC 和 FC 的阈值化操作。根据弥散张量成像揭示的白质纤维稀疏分布规律对 SC 进行基于连接强度的排序筛选^[22]。具体来说, 对于每个节点, 仅保留其连接强度排名前 50% 的边, 并将对应边权重设为 1, 其余置 0, 得到 SC 构成的邻接矩阵 A_{sc} 。基于连接强度比例的阈值经仿真验证可维持网络全局效率, 同时有效抑制 FA (Fractional Anisotropy) 值 < 0.2 的低可信度连接噪

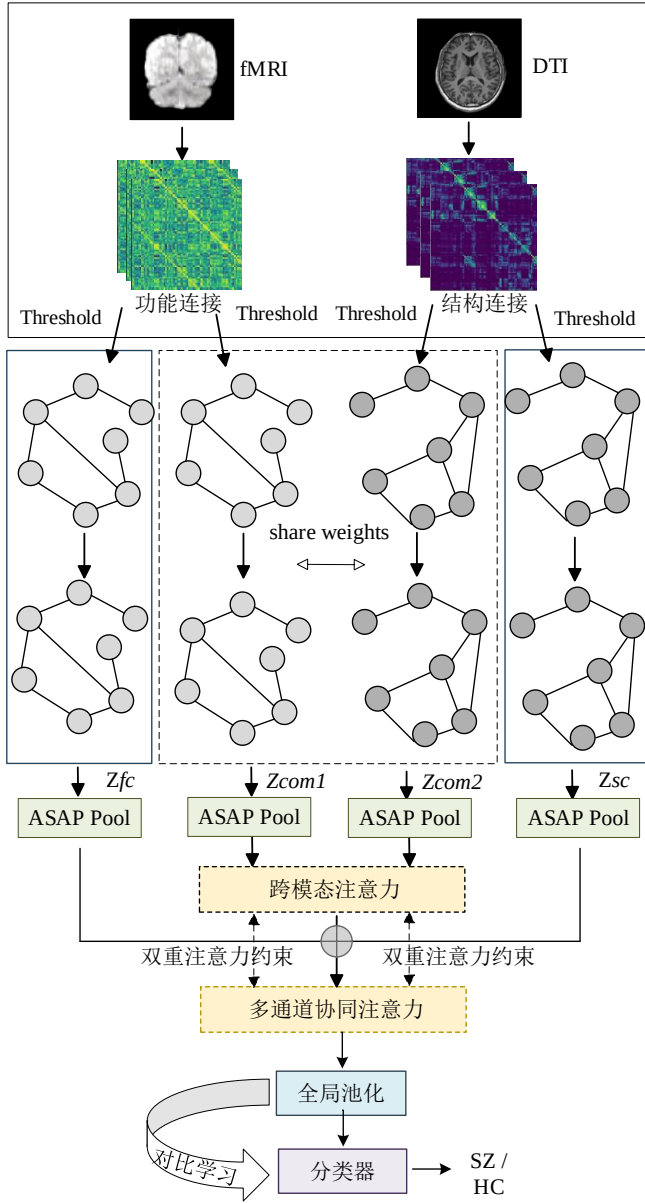


Fig. 1 MDF-GNN model architecture

图 1 MDF-GNN 模型架构

声^[23-24]。表示:

$$A_{sc} = \begin{cases} 1 & \text{if } e_{ij} \text{ is in the top 50\% of } v \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

对于 FC 进行阈值化处理。具体来说,保留绝对值大于 0.25 的边权重不变,其他边权重置为 0,以此保留已知功能模块内部的强连接^[25]。研究表明,绝对值 > 0.25 的 FC 更可能反映稳定的神经活动耦合(如默认模式网络内部连接)以及过滤非特异性弱相关^[26]。最终得到的邻接矩阵 A_{fc} 表示为:

$$A_{fc} = \begin{cases} |e_{ij}| & \text{if } |e_{ij}| > 0.25 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

阈值化处理可滤除噪声相关的弱连接,保留正负相关性相对较强且具有实际功能意义的连接。将稀疏化处理后的 SC 和 FC 视为邻接矩阵,作为多通道协同学习模块的

输入。

2.2 多通道协同学习

多通道协同学习模块旨在充分学习和利用不同模态的特征。该模块有两个独立的 GCN 通道,分别对 FC 和 SC 进行特征学习,以捕获各模态特有的信息,即两个通道的输出 Z_{sc} 和 Z_{fc} 。表示为:

$$Z_{sc} = \text{ReLU}(\hat{A}_{sc} \text{ReLU}(\hat{A}_{sc} X W_{sc1}) W_{sc2}) \quad (3)$$

$$Z_{fc} = \text{ReLU}(\hat{A}_{fc} \text{ReLU}(\hat{A}_{fc} X W_{fc1}) W_{fc2}) \quad (4)$$

式中: $\hat{A}_{sc}$ 为添加自环后的邻接矩阵; X 为输入的特征矩阵; W 为卷积层的权重参数。

此外,本文还引入一个权重共享的 GCN 通道,其使用共享的卷积层权重参数对 FC 和 SC 进行学习,使模型能学习到两种模态之间的内在关联与互补信息,挖掘出引入共享卷积层中对实验有贡献的潜在特征。以上每个通道均使用两层 GCN 实现。共享通道可表示为:

$$Z_{com1} = \text{ReLU}(\hat{A}_{fc} \text{ReLU}(\hat{A}_{fc} X W_{shared1}) W_{shared2}) \quad (5)$$

$$Z_{com2} = \text{ReLU}(\hat{A}_{sc} \text{ReLU}(\hat{A}_{sc} X W_{shared1}) W_{shared2}) \quad (6)$$

式中: Z_{com1} 和 Z_{com2} 为共享通道的输出; W_{shared} 为共享的 GCN 卷积层参数。权重共享不仅降低了模型参数量和过拟合风险,而且增强了模型的泛化能力,使其能够更好地适应不同的数据集和任务。在提取多通道特征后,使用 ASAP 方式对每个通道进行子网络特征提取。池化的输入分别为每个通道的对应输出和邻接矩阵,最终得到 4 个通道的池化输出。表示为:

$$Z_{sc_pool} = \text{ASAP}(Z_{sc}, A_{sc}) \quad (7)$$

$$Z_{fc_pool} = \text{ASAP}(Z_{fc}, A_{fc}) \quad (8)$$

$$Z_{com1_pool} = \text{ASAP}(Z_{com1}, A_{fc}) \quad (9)$$

$$Z_{com2_pool} = \text{ASAP}(Z_{com2}, A_{sc}) \quad (10)$$

该池化操作可对节点重要性进行评估,进而实现脑网络的节点筛选与特征聚合,同时还保留了重要结构和功能节点,提升了模型对脑网络的理解与建模能力。

2.3 双重注意力协同机制

上述模块虽然使用共享卷积层实现了 SC 与 FC 的融合学习,但共享权重会导致两个通道之间的差异并不显著。为此,本文引入跨模态注意力实现两个通道的融合输出,达到更细粒度的特征融合。此外,为充分利用 FC 与 SC 两个独立通道的输出,本文还设计了多通道协同注意力模块,进一步提升模型对不同通道特征的捕捉能力。双重注意力协同机制架构如图 2 所示。

2.3.1 跨模态注意力融合模块

跨模态注意力融合模块允许模型根据局部脑区动态调整模态的贡献,更细粒化地融合两种模态特征。在初级融合阶段,对共享权重 GCN 通道的嵌入向量进行拼接 $[Z_{com1_pool} || Z_{com2_pool}] \in R^{n \times 2d}$ 。公式为:

$$\text{combined} = \text{concat}(Z_{com1_pool}, Z_{com2_pool}) \quad (11)$$

将拼接后的输出通过多层感知机层(Multi-Layer Perceptron, MLP)和 sigmoid 激活函数进行处理,得到模态重要

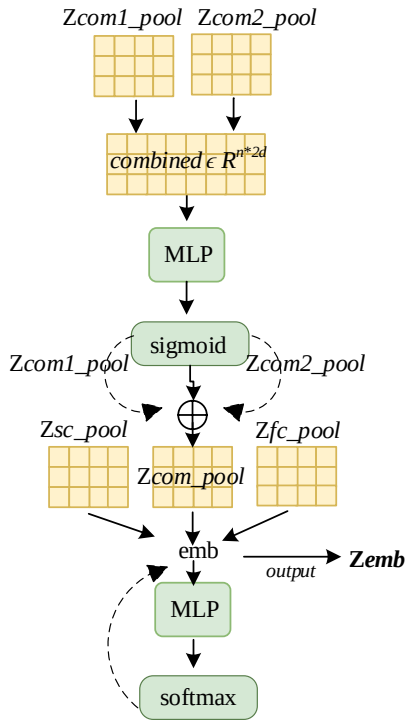


Fig. 2 Dual attention coordination mechanism

图2 双重注意力协同机制

性权重 α , 并将其作用于输入共享通道的池化输出 Z_{com1_pool} 和 Z_{com2_pool} 上, 得到最后的融合表征。表示为:

$$\alpha = \sigma(\text{MLP}(\text{combined})) \quad (12)$$

$$Z_{com_pool} = \alpha \cdot Z_{com1_pool} + (1 - \alpha) \cdot Z_{com2_pool} \quad (13)$$

2.3.2 多通道融合注意力模块

实现共享通道的模态交互后, 使用多通道融合注意力实现不同通道的特征融合, 将 SC 和 FC 两个独立通道池化后的嵌入输出与跨模态注意力融合模块的输出拼接成 $emb \in R^{n*3*d}$ 。公式为:

$$emb = \text{stack}(Z_{sc_pool}, Z_{fc_pool}, Z_{com_pool}) \quad (14)$$

通过 MLP 对输入特征进行变换, 学习得到每个节点对于不同通道的关注度权重矩阵 β 。利用 softmax 激活函数实现每个节点 3 个通道关注度得分的归一化。公式为:

$$\beta = \sigma(\text{MLP}(emb)) \quad (15)$$

$$Z_{emb}(i) = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \odot emb(i, j) \text{ for } i = 1, 2, \dots, n \quad (16)$$

式中: i 为节点个数; j 为特征通道数; $Z_{emb}(i)$ 为节点 i 对应的加权特征, 即 3 个通道特征的加权和。至此, 模型实现了全局通道级权重分配与跨模态注意力融合, 形成特征一通道双层优化, 在微观层面优化特征融合, 在宏观层面协调通道贡献。

2.4 联合优化

联合优化模块由全局特征池化、MLP 分类预测和双目标联合优化 3 个部分组成。通过交叉熵损失直接优化分类性能, 同时利用对比损失约束特征空间结构, 提升模型对精神分裂症病理特征的敏感性和泛化能力。首先, 利用

全局平均池化对多通道融合模块的输出 (即每个图的最终嵌入向量 Z_{emb}) 进行平均池化, 生成图级全局特征 Z_{graph} 。计算公式为:

$$Z_{graph} = \text{GlobalMeanPool}(Z_{emb}) \quad (17)$$

其次, 通过单层 MLP 分类器输出疾病预测概率, 联合交叉熵损失 L_{CE} (优化分类边界) 和对比损失 $L_{contrast}$ (约束特征空间结构), 利用动态权重平衡使模型在提升精神分裂症诊断准确率的同时学习到类内紧密聚集、类间显著分离的病理特征表示。计算公式为:

$$\hat{y} = \text{sigmoid}(W_{mlp} Z_{graph}) \quad (18)$$

$$L_{total} = L_{CE}(y, \hat{y}) + \lambda \cdot L_{contrast}(Z_{graph}, y) \quad (19)$$

式中: λ 为动态平衡权重, 用于控制两者的相对重要性。对比损失 $L_{contrast}$ 的具体实现步骤为: 首先, 针对经过全局平均池化后的图级嵌入 Z_{graph} , 计算其中任意两个图样本之间的欧氏距离, 构建一个距离矩阵 D_{ij} , 用于衡量样本间的相似度; 其次, 根据正样本和负样本标签分别生成正负样本掩码 M , 筛选正负样本距离, 计算正负样本损失, 最终得到总的对比损失。具体计算过程为:

$$D_{ij} = \|Z_{graph}[i] - Z_{graph}[j]\|_2 \quad (20)$$

$$M_{pos}[i, j] = \begin{cases} 1, & \text{if } y[i] = y[j] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (21)$$

$$M_{neg}[i, j] = \begin{cases} 1, & \text{if } y[i] \neq y[j] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (22)$$

$$D_{pos} = M_{pos} \odot D, \quad D_{neg} = M_{neg} \odot D \quad (23)$$

$$L_{contrastive} = L_{pos} + L_{neg} = \frac{\sum_{i,j} D_{pos}[i, j]}{\sum_{i,j} M_{pos}[i, j] + e} + \frac{\sum_{i,j} \max(0, m - D_{neg}[i, j])}{\sum_{i,j} M_{neg}[i, j] + e} \quad (24)$$

对比学习通过最小化正样本对之间的欧氏距离, 迫使同类样本在嵌入空间中彼此靠近, 通过间隔损失强制负样本对之间的距离至少达到阈值 m , 即负样本对之间的最小距离阈值, 目的是为了在嵌入空间中明确拉开不同类别之间的距离, 增强模型对类别的区分能力。约束异类样本, 从而形成具有明确决策边界的特征空间, 增强图级表示的判别性。最后, 联合交叉熵损失进行优化, 使模型能够更好地对多模态图数据进行分类。

3 特征可视化与通道权重分析

3.1 特征显著性分析

为提高模型的可解释性并深入了解精神分裂症的生物学机制, 对精神分裂症患者和正常对照组的特征梯度进行比较分析, 并绘制了热力图和梯度差值, 具体如图 3 所示。可以看出, 患者的 global FCD 具有高贡献度, 表明模型依赖全脑功能整合异常进行分类。精神分裂症患者的全局网络效率降低与过度连接的矛盾状态可能导致自我监控失调。患者的 local FCD 梯度值为 0.046, 健康组为

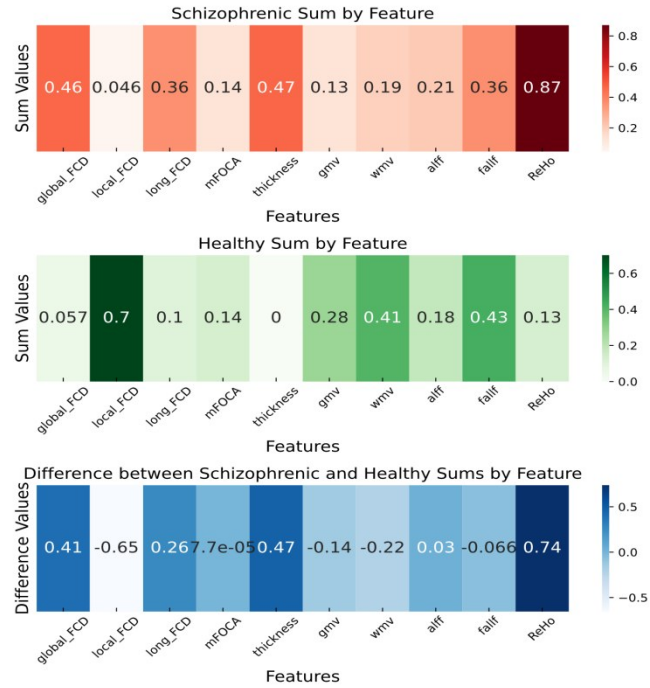


Fig. 3 Visualization of the mean and difference of each feature gradient between patients and healthy subjects

图3 患者与健康被试各特征梯度均值及差值可视化

0.701, $\Delta=-0.654$, 反映了局部网络协调对正常认知的重要性, 而患者该特征贡献度显著下降 ($\Delta=-65.4\%$), 提示局部网络分化受损, 可能与突触修剪异常相关。患者的 thickness 梯度值为 0.466, 健康组为 0.0, $\Delta=0.466$, 表明患者组 thickness 的绝对主导性 (占比 46.6%) 可能指向广泛性灰质萎缩, 尤其是前额叶、颞叶及边缘系统, 这符合之前利用 sMRI 探索精神分裂症进展过程中大脑皮层萎缩的研究结果。皮层厚度的减少与认知功能衰退和阴性症状 (情感淡漠) 显著相关。患者的 ReHo 梯度值为 0.870, 健康组为 0.133, $\Delta=0.737$, 这一显著差异反映了患者局部脑活动同步性异常升高, 导致神经网络过度同步 (如丘脑—皮层回路异常), 与思维解体及知觉扭曲密切相关。thickness (结构) 与 ReHo (功能) 在患者中贡献度最高 (合计占比 65.3%)。灰质萎缩可能迫使功能网络重组 (如 ReHo 升高), 但结构损伤限制了功能代偿效率, 导致资源分配失衡, 使结构—功能失耦。

3.2 多通道注意力权重分析

对多通道协同注意力模块中的三通道权重 (SC 和 FC 独立通道以及 FC/SC 权重共享通道) 分配进行可视化处理, 对患者、健康对照组以及总体被试进行各通道注意力权重的比较。结果见图 4。可以看出, 在总体权重中, SC 通道约占 22.00%, FC 通道约占 53.90%, 共享通道约占 24.10%, 表明模型在分类时较依赖 FC, 其高权重与精神分裂症中功能网络动态紊乱的经典理论一致^[27]。此外, 本文比较了患者和健康被试在不同通道 (SC、FC、共享) 上的权重分布差异, 并分别对 SC 和 FC 通道进行 Welch's *t* 检验,

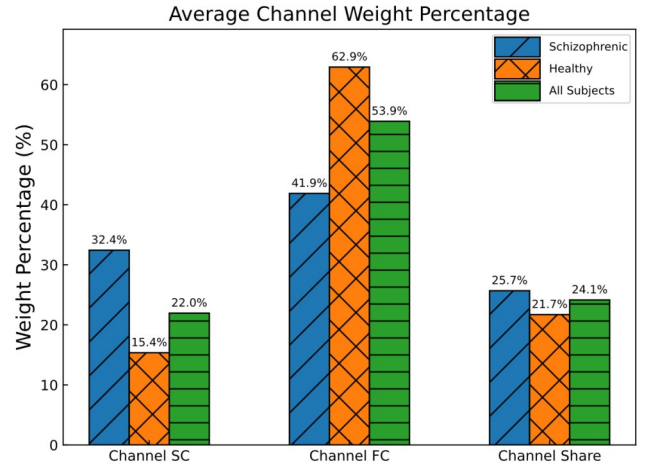


Fig. 4 Visualization of multi-channel collaborative attention weight allocation

图4 多通道协同注意力权重分配可视化

对不满足正态性假设的共享通道进行 Mann-Whitney *U* 检验。考虑到本文进行了 3 次独立的假设检验, 为控制整体的第一类错误率, 选择 Bonferroni 校正方法。该方法通过将显著性水平 α 除以比较次数 *m* 来调整每次检验的显著性水平, 即 $\alpha' = \alpha / m$ 。在本文中, 原始显著性水平为 0.05, 比较次数为 3, 故调整后的显著性水平为 0.016 7。因此, 只有当 *p* 值小于 0.016 7 时, 结果才被认为具有统计学显著性。根据上述检验方法和 Bonferroni 校正结果, 3 条通道的组间差异均达到统计显著水平 (*p* 值均小于 0.016 7), 结果如表 2 所示。具体来看, 患者组在 SC 通道的平均权重显著高于健康对照组 (32.4% vs. 15.4%, $\Delta=0.17$, $p=0.000\ 9$), 表明患者可能更依赖于结构性特征, 这可能与灰质萎缩、白质纤维异常等结构损伤密切相关。而在 FC 通道中, 患者组的权重显著低于健康组 (41.9% vs. 62.9%, $\Delta=-0.21$, $p=0.000\ 3$), 提示其功能网络在时空动态协调方面可能存在严重紊乱, 导致 FC 特征对模型分类的贡献减弱。此外, 共享通道权重在患者组中略有升高 (25.7% vs. 21.7%, $\Delta=0.04$, $p=0.010\ 0$), 提示结构与功能之间的整合关系可能存在失调, 存在一定程度的耦合机制异常。

Table 2 Differences in channel weights

表2 不同通道权重差异

通道	所有被试平均	患者	健康对照	差异 Δ (患者-对照)	<i>p</i>
SC	0.220	0.324	0.154	0.170	0.000 9
FC	0.539	0.419	0.629	-0.210	0.000 3
共享	0.241	0.257	0.217	0.040	0.010 0

4 实验方法与结果分析

4.1 实验环境与参数设置

硬件环境为一台 13th Gen Intel (R) Core (TM) i9-13900HX@ 2.20 GHz、16 GB 内存、GPU GeForce RTX 4060 8 GB 内存的电脑, 用于模型训练与测试。模型在开源的

PyTorch 1.11 平台上运行,卷积层均使用 torch-geometric2.4.0 提供的图卷积方式实现。模型训练参数设置见表3。

Table 3 Model training parameter settings

表3 模型训练参数设置

参数名称	设定值
优化器	Adamax
初始学习率	0.001
权重衰减	5e-4
Epoch	1 500
Momentum	0.9
Batch size	32
Seed	1
GCN隐藏层1/隐藏层2	128/64
λ	0.1

4.2 评价指标

准确率(Accuracy, Acc)为正确分类的样本占总样本的比例。计算公式为:

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{FP + FN + TP + TN} \quad (25)$$

敏感度为正样本被正确识别的比例(真阳性率)。计算公式为:

$$Sensitivity = \frac{TP}{FN + TP} \quad (26)$$

特异度为负样本被正确识别的比例(真阴性率)。计算公式为:

$$Specificity = \frac{TN}{FP + TN} \quad (27)$$

AUC(Area Under Curve)为ROC曲线下面积,综合反映了模型在不同阈值下的分类性能。

F1分数(F1-Score)为精确率与召回率的调和平均。计算公式为:

$$F1 = 2 \times \frac{Precision + Recall}{Precision \times Recall} \quad (28)$$

4.3 实验结果与分析

4.3.1 超参数选择

(1)GCN卷积层。使用两层GCN卷积来实现每个通道中不同模态特征的提取,对其中的隐藏层数进行讨论,观察其对模型性能的影响。结果见表4。可以看出,增加隐藏层的维度,特别是第一层的维度,有助于提升模型性能。当第一层隐藏层维度为128,第二层为64时,模型表现最佳。

Table 4 The impact of the number of hidden layers in GCN on model performance

表4 GCN隐藏层数对模型性能的影响 (%)

隐藏层1	隐藏层2	准确率	敏感度	特异性	F1分数	AUC
64	32	71.554	71.935	83.333	72.165	74.422
64	64	72.581	72.728	79.167	74.666	74.681
128	16	80.184	80.645	86.458	81.673	83.442
128	32	86.021	85.714	92.424	86.755	88.346
128	64	93.548	87.090	95.002	94.444	94.737
128	128	81.389	80.265	83.407	82.465	82.775

(2)对比损失函数。为使对比学习的联合优化方式能帮助模型达到最佳性能,对参数 λ 和 m 两个超参数进行定量评估,其中 λ 为用于平衡不同损失项的权重参数,参数 m 用于在对比损失中控制正样本对与负样本对之间的距离阈值。结果见表5和表6。初始设定 $m=1.0$,这是大多数对比学习方法中常用的默认设置,能够在保持训练稳定性的同时提供良好的判别边界。为评估超参数的敏感性,在 $m \in \{0.1, 0.5, 1.0, 1.5\}$ 范围内进行实验,观察其对最终分类性能的影响。可以看出,当平衡损失项的权重参数 λ 设置为0.1时,模型在准确率、敏感度、特异性、F1分数和AUC等指标上均达到最佳;当 m 设置为1.0时,模型性能最优。适当调整超参数有助于提升对比学习模型的整体性能。

Table 5 Quantitative evaluation results of parameters λ in contrastive learning

表5 对比学习中 λ 参数的定量评价结果 (%)

λ	准确率	敏感度	特异性	F1分数	AUC
0.01	87.100	87.096	93.750	88.086	89.473
0.1	93.548	87.090	95.002	94.444	94.737
0.5	81.637	81.290	87.121	83.265	82.316
1	74.193	75.930	80.952	76.953	76.734

Table 6 Quantitative evaluation results of parameter m in contrastive learning

表6 对比学习中参数 m 的定量评价结果 (%)

Margin/ m	准确率	敏感度	特异性	F1分数	AUC
0.1	69.623	67.741	81.517	71.193	71.893
0.5	83.871	83.371	88.333	84.103	81.579
1.0	93.548	87.090	95.002	94.444	94.737
1.5	72.258	72.521	76.923	74.402	72.672

4.3.2 比较实验

将MDF-GNN与7种经典单模态和多模态模型进行比较,包括MLP、GCN、GAT^[28]、Chebynet^[29]、GIN^[30]、AM-GCN、BrainGNN^[31]。结果如表7所示。对于单模态模型,分别使用SC和FC作为脑网络进行试验,选择效果更好的作为模型的最终结果,并在数据处理和评价指标上均与本文模型保持一致。可以看出,本文模型在各个指标上均有不错表现,相较于单模态模型具有较大程度的提升。

Table 7 Comparative test results

表7 比较实验结果 (%)

模型	准确率	敏感度	特异性	F1分数	AUC
MLP	74.193	70.967	71.667	75.000	77.412
GCN	77.420	74.194	75.670	78.950	76.973
GAT	73.958	75.000	73.624	72.786	74.220
Chebynet	74.480	74.376	71.250	76.153	72.660
GIN	83.870	80.638	75.000	87.638	82.237
AM-GCN	90.012	85.935	90.334	90.147	92.105
Brain-GNN	87.097	85.483	90.677	88.890	87.938
本文模型	93.548	87.090	91.667	94.444	94.737

图5和图6分别展示了MDF-GNN与7种单模态和多模态模型的F1分数和AUC曲线可视化结果。可以看到,本文模型在AUC和F1分数上均有不错表现,整体趋势相

较于其他模型更为稳定。

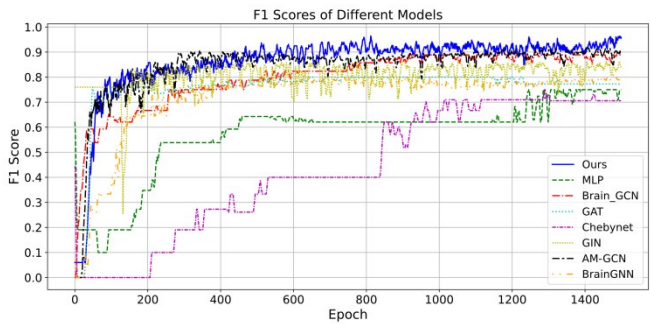


Fig. 5 Visualization result of F1 scores of different models
图 5 不同模型 F1 分数可视化结果

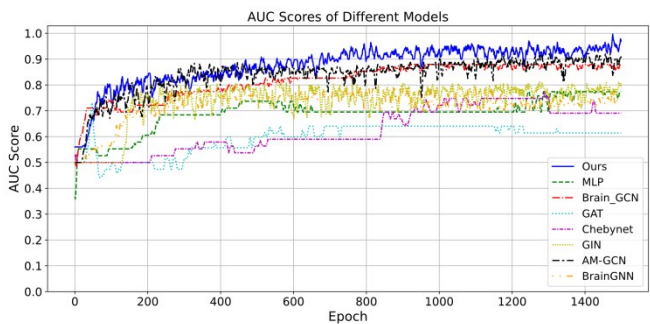


Fig. 6 Visualization result of AUC of different models
图 6 不同模型 AUC 可视化结果

4.3.3 消融实验

为验证模型中多通道协同学习模块、跨模态注意力模块、多通道融合模块、对比学习模块的贡献程度,进行以下消融实验,消融模型包括完整模型以及分别移除单一模块的各种变体,“w/o”表示从模型中移除对应模块。实验结果如表 8 所示。

Table 8 Ablation experiment results
表 8 消融实验结果 (%)

模型	准确率	敏感度	特异性	F1 分数	AUC
w/o 多通道协同学习模块	77.419	76.129	81.666	79.156	79.230
w/o 跨模态注意力模块	87.097	88.172	94.445	88.245	89.217
w/o 多通道融合模块	84.410	85.808	93.055	86.147	86.840
w/o 对比学习	83.578	84.367	88.889	85.117	82.712
本文模型	93.548	87.090	95.002	94.444	94.737

可以看出,完整模型的准确率为 93.548%,而当移除多通道协同学习模块后,模型的准确率显著下降至 77.419%,表明该模块对模型性能有重要贡献。类似地,当移除跨模态注意力模块和多通道融合模块后,模型的准确率分别下降至 87.097% 和 84.410%,亦反映了这两个模块对模型性能的积极影响。当移除对比学习模块后,模型在各项指标上均出现不同程度的下降,尤以 AUC 降幅最为显著。这一现象表明对比学习在优化模型的判别能力方面起到了关键作用,特别是在压缩表示空间、增强类间可分性方面表现突出。对比学习的核心思想为通过拉近同类样本之间的距离、拉远异类样本之间的距离来促使模型在潜在空间中学习到更具判别性的表示。在脑网络分析任务中,尤其

是精神分裂症这样存在高度病理异质性的场景中,不同患者可能存在截然不同的连接模式,这极大增加了模型判别的难度。传统监督学习方法往往只能学习全局的类别边界,无法有效控制类内样本的聚合程度。引入对比学习后,模型在训练过程中通过构建正负样本对显式地施加类内紧凑、类间分离的几何约束,有效压缩了同类样本在特征空间中的分布范围,减少了类间重叠,提升了模型对边界样本的鲁棒性和泛化能力,这也直接反映在 AUC 的提升上。因为 AUC 作为一个衡量整体分类能力的指标,较大程度上受益于模型在所有可能阈值下的稳定判别性能。此外,对比学习的引入还可视作对脑连接特征的一种结构化增强方式。通过动态构建特征间的相似性度量,模型能够识别出具有代表性的病理子网络模式,并将其作为分类依据,提高对精神分裂症这一复杂疾病的识别精度。

本文在实现共享权重通道中 FC 与 SC 通道的跨模态特征融合时还尝试了静态权重融合(引入可学习参数 weight,采用 sigmoid 函数将其约束在[0, 1]范围内得到权重 a)以及拼接—线性变换(拼接后线性变换融合)特征融合方法。模型使用上述不同方法时的性能表现如表 9 所示。可以看出,本文特征融合方法的性能最佳。静态权重融合与拼接—线性变换的性能劣势可能主要源于静态融合策略的适应性不足和线性交互的表达能力有限。而跨模态注意力通过动态权重分配和非线性特征交互显著提升了模型对多模态数据复杂关系的建模能力,从而在各评估指标上取得较好结果。

Table 9 Experimental results of different feature fusion methods
表 9 不同特征融合方法实验结果 (%)

特征融合方法	准确率	敏感度	特异性	F1 分数	AUC
静态权重融合	90.322	85.806	95.000	84.845	86.842
拼接—线性变换	83.871	80.642	88.333	85.714	85.307
本文融合方法	93.548	87.090	95.002	94.444	94.737

5 结语

本文围绕精神分裂症的多模态神经影像分析提出一种新颖的多模态动态图卷积网络模型 MDF-GNN。该模型融合了 SC、FC 及其交互特征,设计了多通道协同结构与跨模态注意力机制,并在对比学习的联合优化下有效提升了模态间的信息交互效率与分类判别能力。实验结果表明,该模型在准确率、敏感度、特异性及 AUC 等多项指标上均优于现有单模态方法,并通过特征可视化和通道权重分析揭示了精神分裂症可能的结构—功能失耦机制,为疾病生物标志物的量化研究提供了新思路。

尽管本文在模型结构设计与实验评估方面取得了较好效果,仍存在一定局限性。例如,样本量仍相对有限,并且样本性别比例存在较大差异,这提示未来研究应在样本招募和模型训练中充分考虑性别因素,在构建数据集时保持性别平衡,并在模型中引入性别作为协变量或采用对抗

性去偏技术,以控制性别对分类结果的潜在影响。此外,本文数据为单中心采集,缺乏多中心验证。未来研究可考虑引入更多样本和多中心数据以增强模型的稳健性与可推广性,并探索更加灵活的模态协同机制与跨模态图建模方法,以进一步提升模型对复杂脑网络结构的刻画能力。同时结合临床变量与随访数据,实现多模态与多任务的联合学习,为精神分裂症的早期识别与个性化干预提供更具临床价值的智能工具。

参考文献:

- [1] CHEN X Y, ZHOU J, KE P F, et al. Research progress in automatic classification and prediction of neuropsychiatric diseases[J]. Chinese Journal of Biomedical Engineering, 2021, 40(6): 752-763.
陈小怡, 周静, 柯鹏飞, 等. 神经精神疾病自动分类与预测研究进展[J]. 中国生物医学工程学报, 2021, 40(6): 752-763.
- [2] WU M X, HONG Y X, HUANG X Y, et al. Progress in pathological mechanisms and treatment methods of schizophrenia[J]. Journal of Guangdong Pharmaceutical University, 2024, 40(6): 136-143.
吴旻熹, 洪语欣, 黄夏仪, 等. 精神分裂症的病理机制及治疗方法进展[J]. 广东药科大学学报, 2024, 40(6): 136-143.
- [3] FANG K, WEN B, NIU L, et al. Higher brain structural heterogeneity in schizophrenia[J]. Frontiers in Psychiatry, 2022, 13: 1017399.
- [4] QU G, ZHOU Z, CALHOUN V D, et al. Integrated brain connectivity analysis with fMRI, DTI, and sMRI powered by interpretable graph neural networks[J]. Medical Image Analysis, 2025, 103: 103570.
- [5] KTEA S I, PARISOT S, FERRANTE E, et al. Metric learning with spectral graph convolutions on brain connectivity networks[J]. NeuroImage, 2018, 169: 431-442.
- [6] POPP J L, THIELE J A, FASKOWITZ J, et al. Structural-functional brain network coupling predicts human cognitive ability [J]. NeuroImage, 2024, 290: 120563.
- [7] GHOSH S, RAJ A, NAGARAJAN S S. A joint subspace mapping between structural and functional brain connectomes [J]. NeuroImage, 2023, 272: 119975.
- [8] WANG X, ZHU M, BO D, et al. AM-GCN: adaptive multi-channel graph convolutional networks[C]//Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2020: 1243-1253.
- [9] YANG Y, GUO X, CHANG Z, et al. Multi-modal dynamic graph network: coupling structural and functional connectome for disease diagnosis and classification[C]//2022 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine, 2022: 1343-1349.
- [10] RANJAN E, SANYAL S, TALUKDAR P. Asap: adaptive structure aware pooling for learning hierarchical graph representations [C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2020: 5470-5477.
- [11] GAO J, QIAN M, WANG Z, et al. Exploring schizophrenia classification through multimodal MRI and deep graph neural networks: unveiling brain region-specific weight discrepancies and their association with cell-type specific transcriptomic features [J]. Schizophrenia Bulletin, 2025, 51(1): 217-235.
- [12] KHOSLA P, TETERWAK P, WANG C, et al. Supervised contrastive learning[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33: 18661-18673.
- [13] HAYASHI N, IGARASHI M, IMAI A, et al. Psychiatric disorders and clinical correlates of suicidal patients admitted to a psychiatric hospital in Tokyo[J]. BMC Psychiatry, 2010, 10: 1-8.
- [14] KENDLER K S, AGGEN S H, KNUDSEN G P, et al. The structure of genetic and environmental risk factors for syndromal and subsyndromal common DSM-IV axis I and all axis II disorders[J]. American Journal of Psychiatry, 2011, 168(1): 29-39.
- [15] NIELSEN C M, KØLBÆK P, DINES D, et al. Validation of ratings on the six-item positive and negative syndrome scale obtained via the simplified negative and positive symptoms interview among outpatients with schizophrenia [J]. Journal of Psychopharmacology, 2022, 36(11): 1208-1217.
- [16] KAY S R, FISZBEIN A, OPLER L A. The positive and negative syndrome scale (PANSS) for schizophrenia [J]. Schizophrenia Bulletin, 1987, 13(2): 261-276.
- [17] KRUPINA E, MANZHURTEV A, UBLINSKIY M, et al. Preliminary study of cerebral myelin content alterations at schizophrenia [C]//Biologically Inspired Cognitive Architectures Meeting, 2023: 485-494.
- [18] TOMASI D, VOLKOW N D. Functional connectivity density mapping [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2010, 107(21): 9885-9890.
- [19] DONG L, LUO C, CAO W, et al. Spatiotemporal consistency of local neural activities: a new imaging measure for functional MRI data [J]. Journal of Magnetic Resonance Imaging, 2015, 42(3): 729-736.
- [20] BASSETT D S, BULLMORE E T. Small-world brain networks revisited [J]. The Neuroscientist, 2017, 23(5): 499-516.
- [21] FORNITO A, ZALESKY A, BREAKSPEAR M. Graph analysis of the human connectome: promise, progress, and pitfalls [J]. Neuroimage, 2013, 80: 426-444.
- [22] HAGMANN P, CAMMOUN L, GIGANDET X, et al. Mapping the structural core of human cerebral cortex [J]. PLoS Biology, 2008, 6(7): e159.
- [23] BASSETT D S, XIA C H, SATTERTHWAIT T D. Understanding the emergence of neuropsychiatric disorders with network neuroscience [J]. Biological psychiatry: Cognitive Neuroscience and Neuroimaging, 2018, 3(9): 742-753.
- [24] JEURISSEN B, DESCOTEAUX M, MORI S, et al. Diffusion MRI fiber tractography of the brain [J]. NMR in Biomedicine, 2019, 32(4): e3785.
- [25] ZALESKY A, FORNITO A, BULLMORE E. On the use of correlation as a measure of network connectivity [J]. Neuroimage, 2012, 60(4): 2096-2106.
- [26] POWER J D, BARNES K A, SNYDER A Z, et al. Spurious but systematic correlations in functional connectivity MRI networks arise from subject motion [J]. Neuroimage, 2012, 59(3): 2142-2154.
- [27] RAMIREZ-MAHALUF J P, TEPPER Á, ALLIENDE L M, et al. Dysconnectivity in schizophrenia revisited: abnormal temporal organization of dynamic functional connectivity in patients with a first episode of psychosis [J]. Schizophrenia Bulletin, 2023, 49(3): 706-716.
- [28] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[DB/OL]. <https://arxiv.org/abs/1710.10903>.
- [29] DEFFERRARD M, BRESSON X, VANDERGHEYNST P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering [C]//Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems, 2016: 3844-3852.
- [30] XU K, HU W, LESKOVEC J, et al. How powerful are graph neural networks?[DB/OL]. <https://arxiv.org/abs/1810.00826>.
- [31] LI X, ZHOU Y, DVORNEK N, et al. Brainngn: interpretable brain graph neural network for fmri analysis [J]. Medical Image Analysis, 2021, 74: 102233.

(责任编辑:尹晨茹)