

# 通过霍奇-拉普拉奇方法构建异构图卷积神经网络 以处理大脑功能数据

Jinghan Huang<sup>1</sup>, Moo K. Chung<sup>2</sup>, and Anqi Qiu<sup>1,3-6</sup> ( )

<sup>1</sup>新加坡国立大学生物医学工程系

bieqa@nus.edu.sg

<sup>2</sup>美国威斯康星州麦迪逊大学生物统计学和医学信息学系

<sup>3</sup>中国新加坡国立大学（苏州）研究院

<sup>4</sup>新加坡国立大学数据科学研究所，新加坡

<sup>5</sup>新加坡国立大学 N.1 健康研究所，新加坡

<sup>6</sup>美国约翰霍普金斯大学生物医学工程系

**摘要**本研究提出了一种新型异构图卷积神经网络（HGCNN），用于处理区域和跨区域层面的复杂脑部 fMRI 数据。我们通过引入  $k$ -th Hodge- Laplacian（HL）算子，在异构图上引入了光谱滤波器的通用公式。特别是，我们提出了 HL 频谱滤波器的拉盖尔多项式近似值，并证明其在图上的空间局部化与多项式阶数有关。此外，基于单纯形图上边界算子的双射属性，我们引入了一种通用拓扑图池化（TGPpool）方法，该方法可用于任意维度的单纯形图。本研究设计了 HL-节点、HL-边缘和 HL-HGCNN 神经网络，分别学习图节点、边缘和两者的信号表示。我们的实验利用青少年大脑认知发展（ABCD； $n=7693$ ）的 fMRI 来预测一般智力。我们的结果表明，在考虑大脑功能连接特征时，HL-边网络比 HL-节点网络更具优势。HL-HGCNN 优于最先进的图神经网络（GNN）方法，如 GAT、BrainGNN、dGCN、BrainNetCNN 和 Hypergraph NN。从 HL-HGCNN 中学习到的功能连接特征对于解释与一般智能相关的神经回路很有意义。



## 1 引言

功能磁共振成像（fMRI）是测量血氧依赖性（BOLD）信号的无创成像技术之一[8]。fMRI 时间序列信号的波动可以描述大脑活动的特征。fMRI 时间序列的同步性描述了大脑区域之间的功能连接性，有助于了解大脑的功能组织。

人们对使用图神经网络（GNN）学习与认知或精神障碍相关的 fMRI 时间序列和功能连接特征越来越感兴趣 [17,23]。

GNN 通常将大脑功能网络视为二元无向图，其中节点是大脑区域，边表示两个大脑区域在功能上有联系。功能时间序列、功能连通性或图指标（即度、强度、聚类系数、参与度等）在每个节点上都会被细化为多维信号。大量研究在空间主图中的节点上实现了卷积算子，卷积算子通过聚合邻近节点的特征来计算每个节点的 fMRI 特征[23,17]。具有空间图卷积的 GNN 有多种实现形式：1) 通过为邻域中的不同节点指定不同权重（GAT，[9]），为图卷积引入关注机制；2) 在所有节点上引入基于聚类的嵌入方法，并根据节点的重要性对图进行池化（BrainGNN，[17]）；3) 设计一种边缘权重感知的信息传递机制[3]；4) 根据更新的节点特征训练动态脑功能网络（dGCN，[23]）。BrainGNN 和 dGCN 在自闭症谱系障碍（ASD）[17] 和注意力缺陷多动障碍（ADHD）[23] 分类方面取得了优异的成绩。图卷积在谱域中也通过图拉普拉卡矩得到了解决[2]。为了在图较大时提高计算效率，人们引入了切比雪夫多项式和其他多项式来近似 GNN 的谱滤波器 [4,10]。对于大型图而言，多项式近似的谱图卷积具有计算效率高和空间局部化的特点 [10]。

尽管 GNN 技术在认知预测和疾病分类方面取得了成功[17,23]，但图卷积仅在节点上聚合大脑功能特征，并更新图中每个节点的特征。然而，信号从一个脑区传递到另一个脑区是通过它们之间的连接进行的，这在一定程度上可以用它们的功能连接性来表征。连接性的强弱决定了信号通过哪些边。因此，需要在节点（如功能时间序列和节点效率）和边缘（如功能连通性和路径长度）上附加不同类型的内形成异构图。

最近，一些研究集中于通过边缘的拓扑连接来平滑信号 [13,12]。Kawahara 等人[15] 提出了 BrainNetCNN，用于聚合边缘之间的大脑功能连接。然而，由于大脑功能网络的构造性质，每一层的大脑功能连接矩阵不再对称。Jo 等人[13]采用了一个双图，将原始图的节点和边进行切换，从而可以应用上述 GNN 方法（超图 NN）。但是，双图通常会增加图的维度。为了克服这一问题，Jo 等人 [13] 只考虑了重要的边。同样，Jiang 等人[12] 引入了边缘-节点切换卷积，将节点和边缘都嵌入到潜在的特征空间中。当图并不稀疏时，这种方法的计算量会很大。上述基于边缘-节点切换的模型在社交网络和分子科学领域取得了巨大成功 [13,12]，这表明当信息定义好后，基于图边缘的 GNN 方法具有优势

在图边缘上。因此，考虑在节点、边等上定义了多种类型特征的异构图至关重要。这尤其适用于大脑功能数据。

本研究开发了一种新型异构图卷积神经网络（HGCNN），可同时从 fMRI 数据中学习节点和边缘的功能特征，用于预测认知或精神障碍。HGCNN 的设计目的是：1) 根据节点的拓扑连接，从邻近节点的特征中学习节点的特征；2) 根据边缘的拓扑连接，从邻近边缘的特征中学习边缘的特征。为了实现这些目标，HGCNN 将大脑功能网络视为一个单纯形图，允许对节点-节点、节点-边缘、边缘-边缘和高阶拓扑进行表征。我们通过在单纯形图上引入霍奇-拉普拉斯（HL）算子，并设计 HL 频谱图过滤器来聚合基于拓扑连接的节点或边缘特征，从而开发出一种通用卷积框架。特别是，本研究利用了 [4,10] 中的谱图滤波器，并使用这些滤波器空间位置的多项式来近似 HL 谱图滤波器。在本文的其余部分，我们将把我们的 HGCNN 称为 HL-HGCNN。与上述 GNN 不同[12,23]，本研究还根据拓扑结构引入了一种简单的图池化方法，从而可以自动更新连续层中卷积的 HL，并降低图的空间维度。因此，HL-HGCNN 可沿着节点、边缘或高维单纯形学习频谱滤波器，以提取大脑功能特征。

我们基于一项大规模青少年队列研究（青少年脑认知发展（ABCD）， $n=7693$ ），说明了如何在 fMRI 时间序列和功能连接上使用 HL-HGCNN 来预测一般智力。我们还将 HL-HGCNN 与上述最先进的 GNN 技术进行了比较，证明了 HL-HGCNN 的出色性能。因此，本研究提出了以下新技术：

1. 通用图卷积框架，以平滑跨节点、边或更高维度单纯形的信号；
2. 通过 HL 算子对节点、边或高维单纯形进行光谱滤波；
3. 通过多项式  $\alpha$ -proximations 实现具有空间定位特性的 HL-频谱滤波器；
4. 基于图拓扑的空间汇集算子。

## 2 方法

本研究通过霍奇-拉普拉斯算子（Hodge-Laplacian operator，HL-HGCNN）设计了一种异构图卷积神经网络，可以基于图拓扑学习节点级和边缘级的脑功能特征表示。下面，我们将首先介绍一个通用图卷积框架，以设计节点和边上的频谱滤波器，从而通过 HL 算子学习基于拓扑结构的节点级和边级大脑功能表征。我们将介绍 HL 频谱的多项式近似值。

过滤器，以克服空间定位方面的挑战。最后，我们将定义一种基于图拓扑的高效池化操作，用于 HL 算子的图缩减和更新。

## 2.1 通过霍奇-拉普拉斯算子学习节点级和边缘级表示法

在这项研究中，大脑功能网络的特点是异构的

图， $G = \{V, E\}$ ，脑区为节点， $V = \{v_i\}_{i=1}^n$  以及他们的结论  $E = \{e_{ij}\}_{i,j=1,2,\dots,n}$ ，以及定义在节点上的功能时间序列和定义在边上的功能连通性。本研究旨在设计卷积运算，用于学习节点上的功能时间序列表示和基于节点-节点和边-边连接（或图  $G$  的拓扑结构）的边上的功能连接表示。

在数学上，节点和边分别称为 0 维和 1 维单纯形。  $G$  的拓扑结构可以用边界算子  $\partial_k$  来描述。  $\partial_1$  表示两个 0 维单纯形（即节点）如何连接形成一个 1 维单纯形（即边） [6]。在图论 [16] 中，  $\partial_1$  可以表示为大小为  $n \times n(n-1)/2$  的过渡入射矩阵，其中节点按行索引，边按列索引。同样，二阶边界算子  $\partial_2$  表示一维单纯形或边如何连接以形成 3 个节点（二维单纯形或三角形）之间的联系。

频谱滤波器的目标是从邻近节点的 fMRI 特征中学习节点级的 fMRI 特征表示，从邻近边缘的 fMRI 特征中学习边缘级的 fMRI 特征表示。图  $G$  的边界算子  $\partial_k$  可以很好地表征节点和边缘的邻域信息。将图  $G$  的边界算子纳入第  $k$  个霍奇-拉普拉奇算子（HL）是很自然的，其定义为

$$L_k = \partial_{k+1} \partial_{k+1}^T + \partial_k^T \partial_k \quad (1)$$

当  $k=0$  时，第 0 个 HL 算子为

$$L_0 = \partial_1 \partial_1^T \quad (2)$$

在节点上。这种特殊情况等同于标准图形拉普拉斯算子  $L_0 = \Delta_0$ 。当  $k=1$  时，边上的 1-st HL 算子定义为

$$L_1 = \partial_2 \partial_2^T + \partial_1^T \partial_1 \quad (3)$$

通过求解特征系统，我们可以得到正交基  $\psi^0, \psi^1, \psi^2, \dots$ 。  $L_k \psi_k^j = \lambda_k^j \psi_k^j$ 。现在我们考虑一个 HL 频谱滤波器  $h$ ，其频谱  $h(\lambda_k)$  为

$$h(-, -) = \sum_{j=0}^{\infty} h(\lambda_k^j) \psi_k^j (-) \psi_k^j (-) \quad (4)$$

在异质图  $G$  上对信号  $f$  进行频谱滤波的一般形式可定义为

$$f'(-) = h * f(-) = \sum_{j=0}^{\infty} h(\lambda_k^j) c_k^j \psi_k^j(-), \quad (5)$$

其中  $f(-) = \sum_{j=0}^{\infty} c_k^j \psi_k^j(-)$ 。当  $k=0$  时,  $f$  定义在图  $G$  的节点上。

公式 (5) 表示  $V$  上定义的信号  $f$  与滤波器  $h$  的卷积。

同样, 当  $k=1$  时,  $f$  定义在图  $G$  的边上。式 (5) 表示定义在  $E$  上的信号  $f$  与滤波器  $h$  的卷积。不过, 本研究只考虑了异质图中定义在节点和边上的信号 (0 维和 1 维简单图)。在下文中, 我们将分别把它们称为 "HL-节点滤波" 和 "HL-边滤波"。

## 2.2 HL 光谱滤波器的拉盖尔多项式近似值

公式 (5) 中频谱滤波器  $h$  的形状决定了滤波过程中节点或边缘的聚集程度。我们的 HL-HGCNN 目标是去符号化  $h$ , 使节点和边缘的表示通过其邻域学习。这在频谱领域具有挑战性, 因为它要求  $h(\lambda)$  具有宽广的频谱。在本研究中, 我们建议将公式 (5) 中的滤波器频谱  $h(\lambda_k)$  近似为拉盖尔多项式的展开,  $T_p, p=0, 1, 2, \dots, P-1$ , 这样

$$h(\lambda) = \sum_{p=0}^{\infty} \theta_p T_p(\lambda_k), \quad (6)$$

其中,  $\theta_p$  是与  $p^{\text{th}}$  拉盖尔多项式相关的  $p^{\text{th}}$  扩展系数。

中值。  $T_p$  可根据  $T_{p+1}(\lambda_k) = \frac{(2p+1-\lambda_k)}{2} T_p(\lambda_k) - p T_{p-1}(\lambda_k)$  的递推关系计算得出。  $p+1$

$T_0(\lambda_k) = 1, T_1(\lambda_k) = 1 - \lambda_k$ 。

我们可以将公式 (5) 中的卷积重写为

$$f'(-) = h * f(-) = \sum_{p=0}^{\infty} \theta_p T_p(\mathbf{L}_k) f(-). \quad (7)$$

与图拉普拉奇 (0-th HL) 谱滤波器的多项式近似的空间定位特性 [10,4,21] 类似, 1-st HL 谱滤波器的拉盖尔多项式近似也可以实现这种定位特性。假定图  $G$  上有两条边, 即  $e_{ij}$  和  $e_{mn}$ 。  $e_{ij}$  和  $e_{mn}$  之间的最短距离用  $d_G(ij, mn)$  表示, 计算方法是连接  $e_{ij}$  和  $e_{mn}$  的路径上边的最小数目。因此、

$(\mathbf{L}_1^P)_{e_{ij}, e_{mn}} = 0$ , 如果  $d_G(ij, mn) > P$ , 其表示

中  $\mathbf{L}^P$

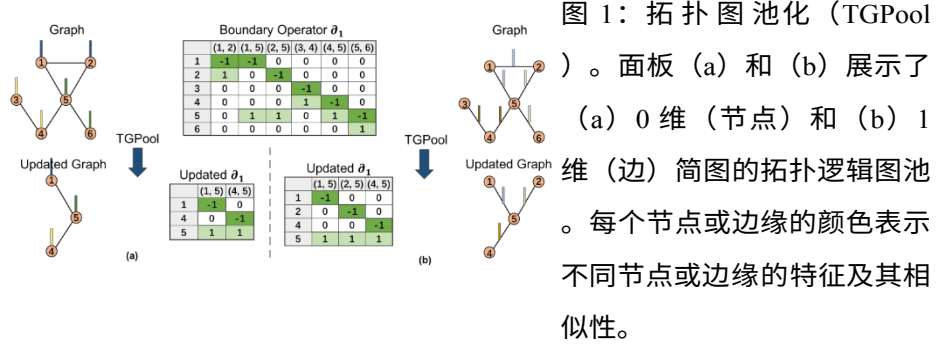
1 阶 HL。因此, 由  $P$ -阶拉盖尔

1-st HL 的多项式被定位在  $P$  跳边缘邻域内。

因此，公式 (6) 中的滤波器具有空间定位特性。这一证明可以扩展到  $k$ -th HL 光谱滤波器。在结果 3 部分，我们将用模拟数据来证明这一特性。

### 2.3 拓扑图池 (TGPool)

池化操作已在网格状图像数据中证明了其有效性 [22]。然而，空间图池化并不简单，尤其是对于异构图。本研究引入了一种通用的拓扑图池化 (TGPool) 方法，包括图的粗化、信号池化和霍奇-拉普拉斯算子的更新。为此，我们利用了边界算子与图  $G$  之间的一一对应关系，并根据边界算子定义了池化的三种操作。由于边界算子编码了图的拓扑结构，因此我们的图池化是基于拓扑结构的。



对于图的粗化，我们将 Graclus 多级聚类算法[5]用于粗化图  $G$  上的  $k$  维简约。我们首先通过局部归一化切分，根据相关特征对相似的  $k$  维简约进行聚类。每粗化一级，就匹配两个具有最大局部归一化切分的相邻  $k$  维简约，直到探索完所有  $k$  维简约[19]。在生成的平衡二叉树中，每个  $k$  维单纯形都有一个 (即单子) 或两个子  $k$  维单纯形。假的  $k$  维简约会被添加进来，与那些单吨的简约配对。涉及假  $k$  维简约的  $k+1$  维简约的权重设为 0。这种二叉树上的池化可以高效地实施为大小为 2 的简单 1 维池化。然后，通过删除度数较低的  $k$  维单纯形和与该  $k$  维单纯形相连的  $k+1$  维单纯形，将两个匹配的  $k$  维单纯形合并为一个新的  $k$  维单纯形。为了粗化图形，我们通过删除边界算子中相应的行和列定义新的边界算子，并通过公式 2 计算 HL 算子。最后，新的  $k$  维单纯形的信号被定义为两个  $k$  维单纯形信号的平均值 (或最大值)。图 1 展示了 0 维和 1 维单纯形的图集合以及集合后更新图的边界算子。

## 2.4 霍奇-拉普拉斯异构图卷积神经网络 (HL-HGCNN)

我们设计的 HL-HGCNN 具有时间层、节点层和边缘卷积层，用于学习大脑功能时间序列和功能连接的时间和空间信息。每一层都包括卷积、漏整型线性单元 (leaky ReLU) 和池化操作。图 2 展示了 HL-HGCNN 模型的整体架构、时间层、节点层和边缘卷积层。

**滤波器。**  $_{tve}h_t$  是一个简单的一维时域滤波器，具有不同的内核大小，用于提取多个时间尺度的大脑功能时间序列信息。 $h_v$  和  $h_e$  的定义如式 (6) 所示，其中  $\theta_p$  是 HL-HGCNN 中需要估计的参数。如前所述， $P$  可确定  $h_v$  和  $h_e$  的核大小，并提取多个空间尺度的大脑功能时间序列和功能连接的高阶信息。

**Leaky ReLU。** 本研究采用泄漏整流线性单元 (ReLU) 作为激活函数  $\sigma$ ，因为负功能时间序列和功能连通性被认为具有生物学意义。

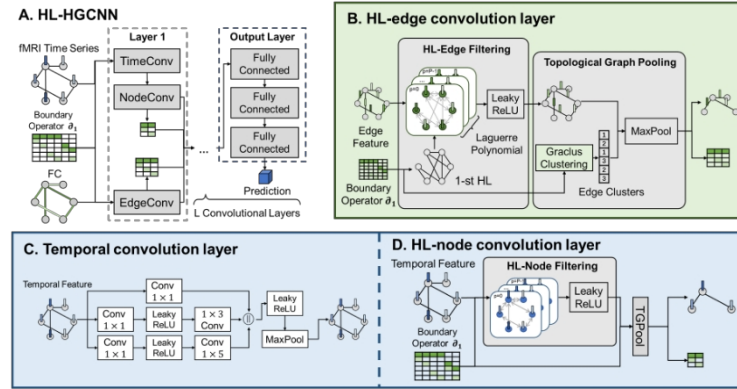


图 2：HL-HGCNN 架构。面板 (A) 展示了 HL-HGCNN 模型的整体架构。面板 (B-D) 分别显示了 HL 边缘层、时序层和 HL 节点卷积层的架构。

**池化。** 在时间卷积层中，对功能时间序列的时间维度采用传统的一维最大池化操作。在边缘和节点卷积层中，使用 TGP Pool 来降低图的维度以及节点和边缘信号的维度。

**输出层。** 我们再使用一个图卷积层，将每个节点或边缘的特征转化为标量。然后，我们将矢量化的节点和边缘表示串联起来，作为输出层的输入。在本研究中，输出层包含全连接层。

## 2.5 实施情况

$L_0$  和  $L_1$ 。给定大脑功能连接矩阵后，我们首先建立一个二元矩阵，将连接矩阵中绝对值大于阈值的元素赋值为 1，否则赋值为 0。我们计算边界算子  $\partial_1$ ，边界算子的大小为脑区数量和功能连接数量。 $\partial_1$  的第  $i$  行编码第  $i$  个顶点的功能连接， $\partial_1$  的第  $j$  列编码两个顶点如何连接形成一条边 [6,7]。因此， $L_0 = \partial_1 \partial_0^T$

根据公式 (1)，计算  $L_1$  需要计算  $\partial_2$ ，表征边缘与三角形的相互作用。大脑的功能连接矩阵并不形成三角形单纯形，因此二阶边界算子  $\partial_2 = 0$ 。因此， $L_1 = \partial \partial_0^T$

**优化。**我们用 Python 3.9.13、Pytorch 1.12.1 和 PyTorch Geometric 2.1.0 库实现了该框架。HL-HGCNN 由两个分别带有  $\{8, 8\}$ 、 $\{16, 1\}$  和  $\{32, 32\}$  滤波器的临时卷积层、节点卷积层和边缘卷积层组成。0-th和1-st HL ap-proximation 的拉盖尔多项式阶数分别设为 3 和 4。输出层包含三个全连接层，分别有 256、128 和 1 个隐藏节点。输出层

每一层都使用 0.5 的泄漏率，所有层都使用泄漏率为 0.33 的 Leaky ReLU。这些模型相关参数是通过贪婪搜索确定的。HL-HGCNN 模型使用配备 32GB RAM 的 NVIDIA Tesla V100SXM2 GPU，通过 ADAM 优化器进行训练，迷你批次大小为 32。初始学习率设定为 0.005，每次历时后衰减 0.95。权重衰减参数为 0.005。

## 2.6 ABCD 数据集

本研究使用的静息态 fMRI (rs-fMRI) 图像来自 ABCD 研究，该研究是一项针对 9-11 岁青少年的开源和持续性研究 (<https://abcdstudy.org/>)。这项研究使用了与 Huang 等人[11]相同的 7693 名受试者数据集和 fMRI 预处理管道。一个节点代表 268 个大脑感兴趣区 (ROI) [18] 中的一个，其平均时间序列作为节点特征。每条边代表任意两个 ROI 之间的功能连接，其功能连接性通过其平均时间序列的皮尔逊相关性计算得出，作为边的特征。一般智力被定义为 5 个 NIH 工具箱认知得分的平均值，包括维度变化卡片分类、侧位记忆、图片序列记忆、列表分类工作记忆和模式比较处理速度[1]。在 7693 名受试者中，一般智力介于 64 至 123 之间，平均值和标准差为  $95.3 \pm 7.3$ 。

## 3 成果

本节首先通过模拟数据展示了 HL 边沿滤波器与拉盖尔多项式阶数有关的空间定位特性。然后，我们利用 ABCD 数据集演示了 HL 边沿滤波及其在 GNN 中的应用，以预测流体智能。



### 3.1 通过拉盖尔多项式逼近实现 HL-Edge 滤波的空间定位

我们通过设计一个单边脉冲信号（图 3 (a)），并通过 HL 边沿滤波器对其进行平滑处理，来说明 HL 边沿滤波器的空间位置特性。当应用通过  $1^{st}$  -、 $2^{nd}$  -、 $3^{rd}$  -、 $4^{th}$  - 阶拉盖尔多项式近似的 HL-edge 滤波器时，图 3 (b-e) 所示的滤波信号表明，HL-edge 滤波器的空间定位由拉盖尔多项式的阶数决定。使用多层 HL 边沿滤波器也可以实现这一现象，其中每一层都包含使用  $1^{st}$  -order Laguerre 多项式近似的 HL 边沿滤波器（见图 3 (f)）

。

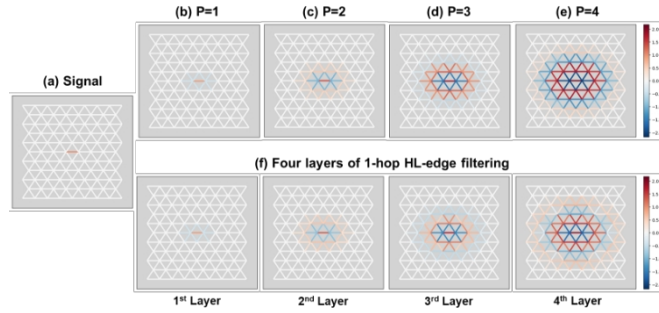


图 3：HL 边缘滤波的空间定位。面板（a）显示的是仅出现在一个边缘的模拟信号。面板（b-e）分别显示了使用  $1^{st}$  -、 $2^{nd}$  -、 $3^{rd}$  -、 $4^{th}$  - 阶拉盖尔多项式近似的 HL 边缘滤波器滤波后的信号。面板 (f) 展示了由 4 层 HL-edge 卷积网络生成的信号。每一层都由使用  $1^{st}$  -order Laguerre 多项式逼近的 HL 滤波器组成。

### 3.2 HL 节点过滤器与 HL 边缘过滤器

我们的目的是研究当 fMRI 数据从本质上描述边缘信息（如功能连通性）时，HL-边缘滤波器相对于 HL-节点滤波器的优势。当功能连通性被定义在一个节点上时，它们就形成了与该节点相关的功能连通性向量。相反，从本质上讲，功能连接性代表了两个大脑区域（即边缘）的功能连接强度。因此，它是一个定义在边缘的标量。我们设计的 HL 节点网络有两个 HL 节点卷积层（见图 2D），输出层有三个全连接层。同样，HL-边缘网络包含两个 HL-边缘卷积层（见图 2B），输出层包含三个全连接层。我们采用了六次五倍交叉验证，根据均方根误差（RMSE）来评估预测智能与实际智能之间的预测精度。表 1 显示，HL-边缘网络的均方根误差较小，表现优于 HL 节点网络（ $p = 1.51 \times 10^{-5}$ ）。这表明，当特征从本质上表征边的权重时，HL-边过滤器具有优势。

3.3 与现有 GNN 方法的比较

现在，我们利用 ABCD 数据集，将我们的模型与上述现有的先进方法进行比较，看看它们对一般智能的预测准确性如何。第一个实验旨在比较 HL 节点网络与 GAT [9]、BrainGNN [17] 和 dGCN [23] 的性能。我们采用了 Li 等人[17]和[23]的 BrainGNN 和 dGCN 的架构，因为这两种方法都用于 fMRI 数据。GAT 设计有两个图卷积层，每个层由 32 个过滤器和 2 头注意力组成，我们的模型通过贪婪搜索确定注意力。每个区域的功能连接向量被用作输入特征。表 1 显示，HL 节点网络的性能优于 GAT ( $p = 0.0468$ ) 和 BrainGNN ( $p=0.0195$ )，与 dGCN 的性能相当 ( $p = 0.0618$ )。

表 1：基于均方根误差（RMSE）的一般智能预测准确率。 $p$  值是通过双样

本  $t$  检验得出的，检验了每种方法与拟议的 HL-HGCNN 的性能对比。

	GNN 模型	均方根误差	$p$ 值
带有节点过滤功能的 GNN	HL 节点网络 (我们的)	$7.134 \pm 0.011$	$4.01 \times 10^{-6}$
	全球通[9]	$7.165 \pm 0.020$	$1.91 \times 10^{-5}$
	脑联网[17]	$7.144 \pm 0.013$	$1.51 \times 10^{-6}$
	dGCN[17]	$7.151 \pm 0.012$	$9.83 \times 10^{-6}$
带有边缘过滤功能的 GNN	HL-Edge 网络 (我们的)	$7.009 \pm 0.012$	$2.48 \times 10^{-2}$
	脑网络[15]	$7.118 \pm 0.016$	$5.34 \times 10^{-6}$
	超图 NN[13]	$7.051 \pm 0.022$	$3.74 \times 10^{-5}$
带有节点和边缘过滤功能的 GNN	HL-HGCNN (我们的)	<b><math>6.972 \pm 0.015</math></b>	-

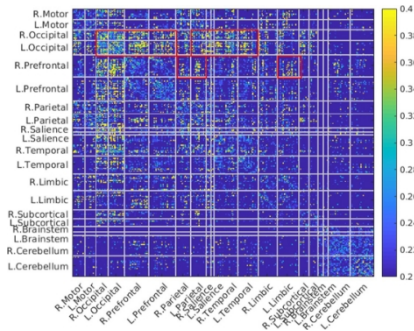


图 4：大脑功能连接的突出图。红色方框突出显示了权重较高的大脑网络，表明其对一般智力预测的贡献较大。

第二个实验比较了 HL-edge 网络与 BrainNetCNN [15] 和 Hypergraph NN [13]。Hypergraph NN 包括两个图卷积层和 32 个过滤器，在第一个图卷积层之后还有一个超簇层。BrainNetCNN 架构沿用了 [15] 中的设计。Table 1 显示，HL-edge 网络的 RMSE 较小，性能优于 BrainNetCNN ( $p = 4.49 \times 10^{-5}$ ) 和 Hypergraph NN ( $p = 0.0269$ )。

最后，我们的 HL-HGCNN 在节点和边缘整合了异构类型的 fMRI 数据。表 1 显示，与上述所有方法相比，HL-HGCNN 的性能最佳（所有  $p$  均小于 0.03）。

### 3.4 口译

我们使用 HL- HGCNN 最后边缘卷积层的图表示来计算连接层面的突出图。组级显著性图是通过对数据集中所有受试者的显著性图进行平均计算得出的。图 4 中的红框突出显示了枕叶区与前额叶、顶叶、显著性和颞叶区的功能连接，这些区域对一般智能的贡献最大。此外，我们的 "显著性图谱" 还突出了右侧前额叶区与双顶叶区的功能联系，这与现有的额叶区和顶叶区神经活动的研究结果基本一致[14,20]。

## 4 结论

本研究针对 fMRI 时间序列和功能连接提出了一种新的 HL-HGCNN 来预测认知能力。我们的实验证明了通过拉盖尔多项式逼近的 HL 频谱滤波器的空间定位特性。此外，我们的 HL-节点、HL-边缘和 HL-HGCNN 在预测一般智能方面的表现优于现有的先进方法，这表明我们的方法在未来基于 fMRI 的预测和诊断方面具有潜力。不过，还需要在不同数据集上进行更多实验，以进一步验证所提模型的鲁棒性。我们的方法提供了一个通用框架，允许在任意维度的简单图上学习异构图表示，并可扩展到复杂图数据。HL-HGCNN 模型为建立多个脑区之间的高阶功能互联提供了机会，这也是我们未来的研究方向。

**致谢。** 本研究/项目由新加坡教育部（一级学术研究基金）和A\*STAR（H22P0M0007）支持。国家自然科学基金会 MDS-2010778、国家卫生研究院 R01 EB022856 和 EB02875 为本研究提供了额外资助。这项研究还得到了 A\*STAR计算资源中心的支持，使用了该中心的高性能计算设施。

## 参考资料

1. Akshoomoff, N., Beaumont, J.L., Bauer, P.J., Dikmen, S.S., Gershon, R.C., Mungas, D., Slotkin, J., Tulsky, D., Weintraub, S., Zelazo, P.D., et al: VIII.NIH 工具箱认知测试 (CB)：结晶、流体和整体 认知的综合评分。Monogr.Soc. Res. Child Dev.78(4), 119-132 (2013)
2. Bruna, J., Zaremba, W., Szlam, A., LeCun, Y.: ArXiv preprint arXiv:1312.6203 (2013)
3. Cui, H., Dai, W., Zhu, Y., Li, X., He, L., Yang, C.: 用于基于连接体的脑失调分析的可解释图神经网络。In: pp.375-385.Springer (2022)
4. Defferrard, M., Bresson, X., Vandergheynst, P.: 具有快速局部频谱滤波功能的图上卷积神经网络。In: 神经信息处理系统进展》，第 3844-3852 页（2016 年）。3844-3852 (2016)

5. Dhillon, I.S., Guan, Y., Kulis, B.: 无特征向量的加权图切割--一种多层次方法。IEEE 关于模式分析和机器智能的交易 29(11), 1944-1957 (2007)
6. Edelsbrunner, H., Letscher, D., Zomorodian, A.: Topological persistence and simplification. In: Proceedings 41st annual symposium on foundations of computer science. pp.454-463.IEEE (2000)
7. Edelsbrunner, H., Letscher, D., Zomorodian, A.: Topological persistence and simplification. Discrete Comput Geom 28, 511-533 (2002)
8. Glover, G.H.: 功能磁共振成像概述。《神经外科临床》, 22 (2) , 133-139 (2011 年)
9. Hu, J., Cao, L., Li, T., Dong, S., Li, P.: Gat-li: 基于图注意网络的脑功能网络分类的学习和解释方法。BMC bioinformatics 22(1), 1-20 (2021)
10. Huang, S.G., Chung, M.K., Qiu, A.: Revisiting convolutional neural network on 拉普拉斯-贝特拉米谱滤波的多项式近似图。《神经计算与应用》 33(20), 13693-13704 (2021)
11. Huang, S.G., Xia, J., Xu, L., Qiu, A.: Spatio-temporal directed acyclic graph learn- 注意机制对大脑功能时间序列和连接性的影响医学影像分析》 77, 102370 ( 2022 年)
12. Jiang, X., Ji, P., Li, S.: Censnet: 图中边缘-节点切换的卷积神经网络。In: IJCAI. pp.
13. Jo, J., Baek, J., Lee, S., Kim, D., Kang, M., Hwang, S.J.: 超图的边缘表示学习。《神经信息处理系统进展》 34, 7534-7546 (2021)
14. Jung, R.E., Haier, R.J.: 智力的顶额整合理论 (p-fit) 。《神经影像学证据》. 30, 135-154 (2007)
15. Kawahara, J., Brown, C.J., Miller, S.P., Booth, B.G., Chau, V., Grunau, R.E., Zwicker, J.G., Hamarneh, G.: BrainNetCNN: 脑网络的卷积神经网络; 走向预测神经发育。NeuroImage 146, 1038-1049 (2017)
16. Lee, H., Chung, M.K., Kang, H., Lee, D.S.: Hole detection in metabolic connectivity using K-laplacian analysis of Alzheimer's disease. In: 17th International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention, MICCAI 2014. pp.297-304.施普林格出版社 (2014 年)
17. Li, X., Duncan, J.: BrainGNN: Interpretable brain graph neural network for fMRI analysis. bioRxiv (2020)
18. Shen, X., Finn, E.S., Scheinost, D., Rosenberg, M.D., Chun, M.M., Papademetris, X., Constable, R.T.: Using connectome-based predictive modeling to predict individual behavior from brain connectivity.Nature Protocols 12(3), 506-518 (2017)
19. Shi, J., Malik, J.: 归一化切割与图像分割。IEEE Transactions on 模式分析与机器智能》 22 (8) , 888-905 (2000 年)
20. Song, M., Zhou, Y., Li, J., Liu, Y., Tian, L., Yu, C., Jiang, T.: Brain spontaneous functional connectivity and intelligence.《神经影像》 41, 1168-1176 (2008)
21. Wee, C.Y., Liu, C., Lee, A., Poh, J.S., Ji, H., Qiu, A., Initiative, A.D.N.: Corti 用于诊断注意力缺失症 (AD) 和注意力缺失症 (MCI) 以及跨人群迁移学习的 cal 图神经网络。NeuroImage: Clinical 23, 101929 (2019)
22. Yu, F., Koltun, V.: Multi-scale context aggregation by dilated convolutions. 预印本 arXiv:1511.07122 (2015)
23. Zhao, K., Duka, B., Xie, H., Oathes, D.J., Calhoun, V., Zhang, Y.: 动态图卷积神经网络框架揭示 adhd 神经功能障碍的新见解。《神经影像》 246, 118774 (2022)