

面向自闭症辅助诊断的深度对比模糊神经网络

陆昭吾, 王 骏, 施 俊

(上海大学 通信与信息工程学院, 上海 200444)

摘 要: 静息态功能磁共振成像(rs-fMRI)可有效反映大脑活动状况,然而rs-fMRI数据的高随机性和自闭症谱系障碍(ASD)内在的高异质性给ASD计算机辅助诊断带来了不确定性。提出一种基于对比损失的Takagi-Sugeno-Kang(TSK)深度模糊神经网络CL-DeepTSK,结合多输出TSK(MO-TSK)模糊系统与多层感知机(MLP)有效缓解数据不确定性对模型的影响,提升TSK模糊系统的表达能力,并使模型更具可解释性。使用对比损失目标学习准则对MO-TSK与MLP进行联合优化,提高训练样本缺乏时的模型泛化性能。在ABIDE数据集上的实验结果表明,CL-DeepTSK的平均正确率和AUC指标分别达到70.0%和0.773,同时获得了30个最具鉴别性的功能连接。上述实验结果证明了CL-DeepTSK能够有效地进行自闭症辅助诊断,并且具有较高的可解释性。

关键词: 自闭症谱系障碍;静息态功能性磁共振成像;Takagi-Sugeno-Kang模糊系统;对比损失;计算机辅助诊断

开放科学(资源服务)标志码(OSID):



中文引用格式: 陆昭吾,王骏,施俊.面向自闭症辅助诊断的深度对比模糊神经网络[J].计算机工程,2023,49(4):263-271.

英文引用格式: LU Z W, WANG J, SHI J. Deep contrastive fuzzy neural network for aided diagnosis of Autism[J]. Computer Engineering, 2023, 49(4): 263-271.

Deep Contrastive Fuzzy Neural Network for Aided Diagnosis of Autism

LU Zhaowu, WANG Jun, SHI Jun

(School of Communication and Information Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

[Abstract] Resting-state functional Magnetic Resonance Imaging(rs-fMRI) can effectively reflect brain activity. However, the high randomness in rs-fMRI data and high heterogeneity in autism cases cause high uncertainty in the diagnosis of Autism Spectrum Disorder(ASD). Hence, this study integrates a fuzzy system with a deep neural network and proposes a Takagi-Sugeno-Kang(TSK) deep fuzzy neural network based on Comparative Loss(CL), which is abbreviated as CL-DeepTSK. CL-DeepTSK combines the Multi-Output TSK(MO-TSK) fuzzy system with a Multilayer Perceptron(MLP), which effectively reduces the effect of data uncertainty on the model, improves the expression ability of the TSK fuzzy system, and renders the model interpretable. Additionally, MO-TSK and MLP are jointly optimized using a novel CL objective-learning criterion, which improves the generalization performance of the model when the training samples are insufficient. For the Autism Brain Imaging Data Exchange(ABIDE) dataset, the accuracy and Area Under Curve(AUC) of the CL-DeepTSK are 70.0% and 0.77, respectively, and the 30 most discriminative functional connections are obtained. Experimental results show that the proposed CL-DeepTSK model can be effective and interpretable for the auxiliary diagnosis of ASD.

[Key words] Autism Spectrum Disorder(ASD); resting state functional Magnetic Resonance Imaging(rs-fMRI); Takagi-Sugeno-Kang(TSK) fuzzy system; Comparative Loss(CL); computer aided diagnosis

DOI: 10.19678/j.issn.1000-3428.0063521

0 概述

自闭症谱系障碍(Autism Spectrum Disorder, ASD)是一组以社交障碍、语言交流障碍、兴趣或活动范围狭窄以及重复刻板行为为主要特征的神经发育性障碍^[1]。根据美国疾病控制与预防中心

(Centers for Disease Control and Prevention, CDC)的研究报告,截至2016年,美国每54名8岁儿童中就有一名被诊断为ASD^[2-3]。根据2015年《中国自闭症教育康复行业发展状况报告》数据显示,中国自闭症发病率达0.7%^[4]。目前,ASD患者逐年增多,然而国内外尚无根治自闭症的有效方法,其发病机理也还

基金项目: 上海市自然科学基金(20ZR1419900)。

作者简介: 陆昭吾(1996—),男,硕士研究生,主研方向为人工智能、医疗影像处理;王 骏(通信作者),副教授、博士;施 俊,教授、博士。

收稿日期: 2021-12-14 **修回日期:** 2022-03-24 **E-mail:** wangjun_shu@shu.edu.cn

不够明晰,对于早期诊断出 ASD 的儿童,一些干预措施可以帮助他们减轻症状、提高认知能力和学习日常生活所需的技能^[5]。

静息态功能磁共振成像(resting-state functional Magnetic Resonance Imaging, rs-fMRI)通过检测受试者大脑神经元激活时的血氧水平依赖(Blood Oxygen Level Dependent, BOLD)信号,间接反映大脑各区域的神经活动情况^[6]。临床上通过计算脑区 BOLD 信号之间的相关性来分析各脑区之间的功能连接(Functional Connectivity, FC),以此作为 ASD 辅助诊断的生物标志物^[7]。但是,人类神经活动具有很大的随机性及临床上采集 rs-fMRI 数据时不可避免地受到设备噪声以及各种生理噪声的影响,这使得获取的 rs-fMRI 信噪比很低^[8-9],难以体现真实的神经活动。另外,ASD 由多种亚型组成带来的不稳定性^[5]、复杂的致病机理以及 ASD 患者之间在神经活动方面明显的个体差异,给 ASD 的辅助诊断建模提出了新难题。

Takagi-Sugeno-Kang (TSK) 模糊系统因出色的不确定性建模能力、可解释性和泛化能力在各类不确定性建模问题中应用广泛。近年来,学者们对数据驱动的 TSK 模糊系统建模方法进行研究^[10-11]。其核心思想是通过对训练数据的输入/输出集合进行合理划分来提取“IF-THEN”模糊规则,在此基础上进行后件参数学习。已有研究表明,将 TSK 模糊系统用于 ASD 辅助诊断可有针对性地解决辅助诊断建模中的不确定性问题,但 TSK 模糊系统通常要求较为充分的训练数据,当训练数据不足时所得模型容易发生过拟合。在实际临床中,由于 rs-fMRI 获取成本较高^[12]及个人隐私保护等原因,rs-fMRI 训练数据通常难以获取,这对构建强泛化能力的 ASD 辅助诊断模型带来了巨大挑战。

本文提出一种基于对比损失(Comparative Loss, CL)的深度 TSK 模糊神经网络 CL-DeepTSK。在目标学习准则中引入对比损失,有助于从有限的数据中发掘更多有利于分类任务的潜在信息,同时使用多输出 TSK (Multi-Output TSK, MO-TSK) 模糊系统和多层感知机(Multilayer Perceptron, MLP)进行参数训练,以克服误差累积问题。

1 相关工作

1.1 TSK 模糊系统

模糊系统以模糊逻辑和模糊集理论为基础,旨在对一些模糊或不精确的陈述进行逻辑推理建模,TSK 模糊系统^[13]规则主要由两部分组成,前件部分用来对原始数据模糊化,后件部分负责决策与推导。目前,学者们已经提出了多种 TSK 模糊系统建模方法。例如:文献[14]提出结合软子空间划分和稀疏学习来对 TSK 模糊系统建模;文献[15]通过跨类别贝叶斯模糊聚类 and 加权迭代的最小二乘法来学习 TSK 模糊系统的参数。

TSK 模糊系统是不确定性建模的有效工具^[16],具

有很好的可解释性,已被用于癫痫^[17]、ASD^[11,18]、多动症^[19]等神经疾病的辅助诊断建模。传统 TSK 模糊系统等价于一个三层神经网络,但是其在处理 ASD 分类这类复杂问题时,三层神经网络结构不足以表示其中所包含的复杂知识,阻碍了 TSK 模糊系统在复杂问题中的进一步应用,因此深度模糊神经网络获得了极大关注。文献[20]提出稀疏深度信念网络(Deep Belief Network, DBN),并将其与模糊系统相结合,该方法首先将特征输入经过预训练的稀疏 DBN 中获取密集的特征表示后,再使用模糊系统执行后续任务,然而稀疏 DBN 输出的特征表示已经失去了原有的意义,从而减弱了模型的可解释性。文献[21]构建模糊系统和深度神经网络的并行结构,在这种结构下模糊系统和神经网络只在最后输出前进行连接,两部分难以紧密融合。更重要的是,深度神经网络和模糊系统的结合大幅增加了模型的参数量,这对训练模型所需的样本量提出了更高的要求。

1.2 自监督对比学习

自监督学习从未标记的数据中学习有用的特征表示,除了能解决标记大样本的数据量巨大的问题外,也能缓解有监督学习中模型存在的泛化误差、虚假攻击和对抗攻击的问题^[22]。对比学习通过拉近相似样本在潜在空间中特征表示之间的距离,以拉远它们与不相似样本的特征表示之间的距离,在不使用样本真实标签的情况下挖掘数据的潜在信息。自监督对比学习的通用表达如下:

$$\text{score}(f(x), f(x^+)) > \text{score}(f(x), f(x^-)) \quad (1)$$

其中: x^+ 是与 x 相似的正样本; x^- 是与 x 不相似的负样本; $f(\cdot)$ 是编码器; $\text{score}(\cdot)$ 用来度量样本间的相似度。

自监督对比学习已在自然语言处理^[23]、计算机视觉^[24]等领域得到广泛应用并在一些任务上取得了接近有监督学习的性能,但目前将对比学习思想与模糊系统相结合用于 ASD 辅助诊断建模的研究还相对较少。为了利用有限的 rs-fMRI 数据,在 rs-fMRI 的 ASD 诊断中,将自监督对比损失融入网络,从而提高模型的鲁棒性和泛化性。

2 CL-DeepTSK 整体架构

2.1 工作流程

本文提出的 CL-DeepTSK 工作流程如图 1 所示(彩色效果见《计算机工程》官网 HTML 版),具体为:1)数据预处理,对获取的 rs-fMRI 原始数据进行预处理,基于自动解剖标记(Automated Anatomical Labeling, AAL)模版对大脑感兴趣区域(Region of Interest, ROI)进行划分,提取对应 ROI 的 BOLD 时间序列;2)功能连接特征提取,构建功能连接矩阵并提取功能连接特征;3)MO-TSK 特征学习,将这些功能连接特征输入 MO-TSK 得到低维的混合特征;4)MLP 分类,将混合特征数据输入 MLP 并预测分类结果,其中, P_{NC} 表示样本为健康对照的概率, P_{ASD} 表示样本为 ASD 患者的概率。

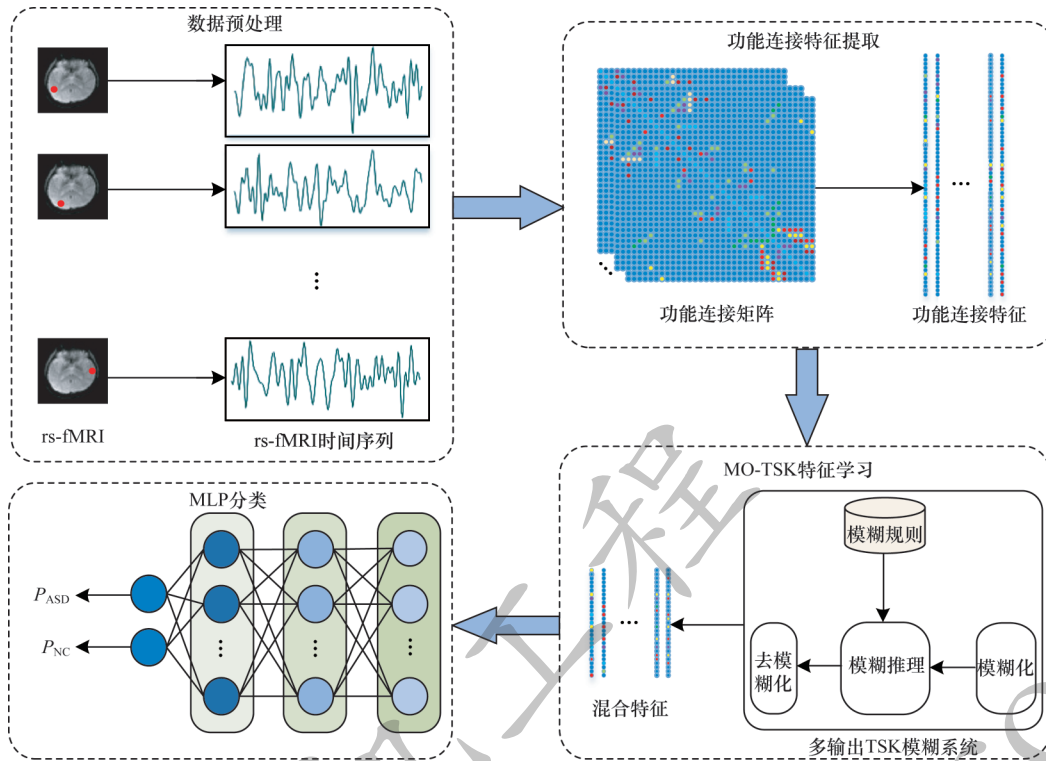


图1 CL-DeepTSK 工作流程

Fig.1 CL-DeepTSK workflow

2.2 基于MO-TSK的特征提取

MO-TSK 是对传统 TSK 模糊系统的扩展,整合了多个单输出 TSK 模糊系统,本文将用于特征学习^[18]。首先,MO-TSK 将输入数据空间划分为多个模糊区域;然后,在每个模糊区域中分别建立模型,从而得到低维输出特征;最后,根据这些特征对各模糊区域的隶属度进行加权求和,得到低维输出空间中的混合特征。

在多输出 TSK 模糊系统中,第 r 条规则具体如下:

IF x^1 is $A^{r,1}, x^2$ is $A^{r,2}, \dots, x^d$ is $A^{r,d}, \dots, x^D$ is $A^{r,D}$

THEN $f^{r,1}(\mathbf{x}) = \beta_0^{r,1} + \beta_1^{r,1}x^1 + \dots + \beta_d^{r,1}x^d + \dots + \beta_D^{r,1}x^D$

$f^{r,2}(\mathbf{x}) = \beta_0^{r,2} + \beta_1^{r,2}x^1 + \dots + \beta_d^{r,2}x^d + \dots + \beta_D^{r,2}x^D$

$\vdots$

$f^{r,s}(\mathbf{x}) = \beta_0^{r,s} + \beta_1^{r,s}x^1 + \dots + \beta_d^{r,s}x^d + \dots + \beta_D^{r,s}x^D$

$\vdots$

$f^{r,S}(\mathbf{x}) = \beta_0^{r,S} + \beta_1^{r,S}x^1 + \dots + \beta_d^{r,S}x^d + \dots + \beta_D^{r,S}x^D$

(2)

其中: $f^{r,s}(\mathbf{x})$, $r = 1, 2, \dots, R$, $s = 1, 2, \dots, S$ 表示第 r 条规则对应的第 s 个输出; $A^{r,d}(\mathbf{x})$, $d = 1, 2, \dots, D$ 表示输入数据的第 d 个特征对应的模糊集; $\beta_0^{r,s}$ 是 $f^{r,s}(\mathbf{x})$ 的后件参数中的常数项; $\beta_d^{r,s}$ 是 $f^{r,s}(\mathbf{x})$ 的后件参数中第 d 个特征对应的系数。

给定输入 $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^D)^T$, 它属于第 r 条规则的模糊隶属度 $\mu^r(\mathbf{x})$ (如式(3)所示), 并对其进行归一化 (如式(4)所示)。

$$\mu^r(\mathbf{x}) = \prod_{d=1}^D \mu_{A^{r,d}}(x^d) \quad (3)$$

$$\tilde{\mu}^r(\mathbf{x}) = \frac{\mu^r(\mathbf{x})}{\sum_{r=1}^R \mu^r(\mathbf{x})} \quad (4)$$

通常 $\mu_{A^{r,d}}(\cdot)$ 采用高斯隶属度函数进行计算, 如式(5)所示:

$$\mu_{A^{r,d}}(x^d) = \exp\left(\frac{-(x^d - c^{r,d})^2}{2\delta^{r,d}}\right) \quad (5)$$

其中: 均值 $c^{r,d}$ 和方差 $\delta^{r,d}$ 由聚类或数据划分方法计算得到, 本文使用模糊 C 均值 (Fuzzy C-Means, FCM)^[25] 算法进行数据划分。 $c^{r,d}$ 和 $\delta^{r,d}$ 计算如式(6)、式(7)所示:

$$c^{r,d} = \frac{\sum_{i=1}^N u_i^r x_i^d}{\sum_{i=1}^N u_i^r} \quad (6)$$

$$\delta^{r,d} = \frac{h \sum_{i=1}^N u_i^r (x_i^d - c^{r,d})^2}{\sum_{i=1}^N u_i^r} \quad (7)$$

其中: h 是可调尺度参数, 用来控制隶属度函数的宽度。 FCM 在处理功能连接特征这类高维数据时, 所有的聚类中心都收敛在数据集的重心处, 每条规则的隶属度 $\mu^r(\mathbf{x})$ 都趋近于 $1/R$ 。 因此, 只依据功能连接特征的一个子集来进行模糊划分。 具体而言, 首先把全部的功能连接特征根据它的方差从大到小排

列,然后选择前 D' 个方差最大的功能连接进行模糊划分。根据WINKLER等^[26]研究结果,当 $D'=5$ 时通常可以得到理想的划分结果。

在确定隶属度 $\tilde{\mu}^r(\mathbf{x})$ 后,MO-TSK的第 s 个输出可以表示如下:

$$\mathbf{x}^{c,s} = \sum_{r=1}^R \tilde{\mu}^r(\mathbf{x}) f^{r,s}(\mathbf{x}), s=1, 2, \dots, S \quad (8)$$

综上所述,给定输入样本 $\mathbf{x} = (x^1, x^2, \dots, x^D)^T$, MO-TSK生成混合特征的过程可以表示如下:

$$\tilde{\mathbf{x}}^r = \tilde{\mu}^r(\mathbf{x}) \cdot (1, \mathbf{x}^T)^T \in \mathbb{R}^{D+1}, r=1, 2, \dots, R \quad (9)$$

$$\mathbf{x}^g = \left((\tilde{\mathbf{x}}^1)^T, (\tilde{\mathbf{x}}^2)^T, \dots, (\tilde{\mathbf{x}}^R)^T \right)^T \in \mathbb{R}^{R(D+1)} \quad (10)$$

$$\boldsymbol{\beta}^{r,s} = (\beta_0^{r,s}, \beta_1^{r,s}, \dots, \beta_D^{r,s})^T \in \mathbb{R}^{D+1} \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\beta}^{g,s} = \left((\boldsymbol{\beta}^{1,s})^T, (\boldsymbol{\beta}^{2,s})^T, \dots, (\boldsymbol{\beta}^{R,s})^T \right)^T \in \mathbb{R}^{R(D+1)} \quad (12)$$

$$\mathbf{B}^g = (\boldsymbol{\beta}^{g,1}, \boldsymbol{\beta}^{g,2}, \dots, \boldsymbol{\beta}^{g,S}) \in \mathbb{R}^{R(D+1) \times S} \quad (13)$$

$$\mathbf{x}^c = (x^{c,1}, x^{c,2}, \dots, x^{c,S})^T = (\mathbf{B}^g)^T \mathbf{x}^g \in \mathbb{R}^S \quad (14)$$

其中: $\mathbf{B}^g$ 表示MO-TSK的后件参数; $\mathbf{x}^g$ 表示输入的经过前件参数映射所得的中间层变量; $\mathbf{x}^c$ 表示MO-TSK输出的混和特征。

2.3 基于MLP的分类

MLP用于对MO-TSK得到的混合特征进行分类,由全连接的多层节点组成,每个节点接收前一层

所有节点的输出作为输入,由相邻两层之间的连接权重加权后经过非线性的激活函数输出。

第 l 层第 k 个节点的输出如式(15)所示:

$$o_k^{(l)} = \sigma_l \left(\sum_j o_j^{(l-1)} \theta_{jk}^{(l-1,l)} \right) \quad (15)$$

其中: $o_k^{(l)}, l=1, 2, \dots, L, k=1, 2, \dots, K$ 表示第 $l-1$ 层的第 j 个节点; $\theta_{jk}^{(l-1,l)}, j=1, 2, \dots, J$ 表示第 l 层的第 k 个节点之间的连接权重; σ_l 表示第 l 层的激活函数。

最后一层节点不经过激活函数,使用Softmax函数转化为对应类别的概率,如式(16)、式(17)所示:

$$P_{\text{ASD}} = \frac{\exp(o_0^{(L)})}{\exp(o_0^{(L)}) + \exp(o_1^{(L)})} \quad (16)$$

$$P_{\text{NC}} = \frac{\exp(o_1^{(L)})}{\exp(o_0^{(L)}) + \exp(o_1^{(L)})} \quad (17)$$

3 CL-DeepTSK 联合优化

3.1 联合优化框架

MO-TSK和MLP分别进行特征学习和分类。如果将它们作为两个独立的模块单独训练,由于它们所使用的目标学习准则不同,则可能会造成误差累积,导致模型收敛于次优解^[27],因此本文提出基于对比损失的联合优化框架,CL-DeepTSK网络结构如图2所示(彩色效果见《计算机工程》官网HTMA版)。

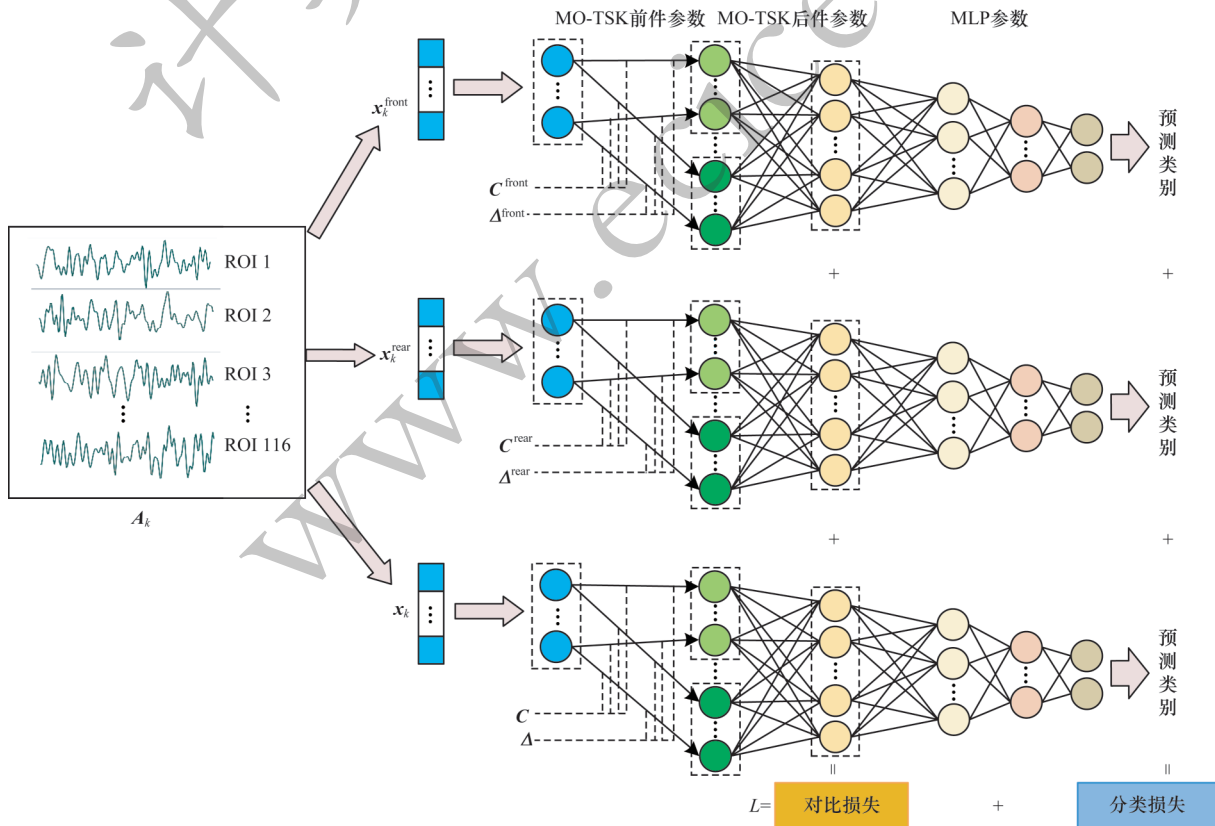


图2 CL-DeepTSK网络结构

Fig.2 CL-DeepTSK network structure

将 MO-TSK 输出层参数和 MLP 参数作为整体进行联合优化,其中待优化的参数包括 MO-TSK 前件部分、后件部分和 MLP 参数。采用第 2.2 节中的方法学习得到 MO-TSK 的前件参数。对于 MO-TSK 后件参数和 MLP 参数的联合训练,在训练样本数量有限的情况下容易出现过拟合问题。本文提出对比损失目标学习准则,将后件参数融入 MLP,实现网络联合优化。

3.2 正负例构建

为了将对比损失引入 CL-DeepTSK 的目标函数,需要在训练过程中构建相应的正负例,如图 3 所

示(彩色效果见《计算机工程》官网 HTML 版)。根据 rs-fMRI 数据,引入滑动时间窗,基于原 BOLD 时间序列生成相应的子序列。给定第 k 个对象,其 BOLD 时间序列长度为 M , $A_k \in \mathbb{R}^{116 \times M}$ 为对应的 BOLD 时间序列矩阵, $\eta \in [0, 1]$, 其前 ηM 个时间点构成的时间子序列矩阵为 $A_k(:, 1: \eta M)$; 后 ηM 个时间点构成的时间子序列矩阵 $A_k(:, (1-\eta)M+1: M)$ 。对于第 k 个对象,采用第 2.3 节中的方法分别得到功能连接特征 $\mathbf{x}_k^{\text{front}}$ 和 $\mathbf{x}_k^{\text{rear}}$ 。此外,将由 A_k 得到的功能连接特征向量记为 $\mathbf{x}_k$ 。将来自同一对象的 $\mathbf{x}_k^{\text{front}}$ 和 $\mathbf{x}_k^{\text{rear}}$ 作为正例,将来自两个不同对象的 $\mathbf{x}_i^{\text{front}}$ 和 $\mathbf{x}_i^{\text{rear}}$, $i \neq k$ 作为负例。

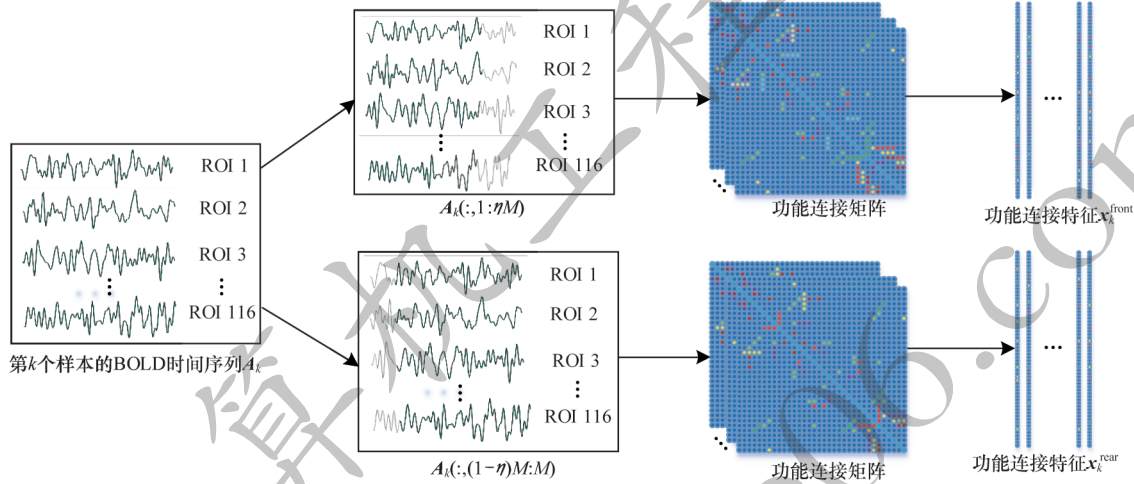


图3 CL-DeepTSK 中正负例的构建

Fig.3 Construction of the positives and negatives in the CL-DeepTSK

3.3 优化目标

令:

$$l^{\text{front}}(\mathbf{x}_k^{\text{front},c}, \mathbf{x}_k^{\text{rear},c}) = -\text{lb} \left(\frac{\text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}, \mathbf{x}_k^{\text{front},c})}{\sum_{i=1}^N \mathbb{I}_{[i \neq k]} \text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{front},c}, \mathbf{x}_i^{\text{front},c}) + \sum_{i=1}^N \text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{front},c}, \mathbf{x}_i^{\text{rear},c})} \right) \quad (18)$$

$$l^{\text{rear}}(\mathbf{x}_k^{\text{front},c}, \mathbf{x}_k^{\text{rear},c}) = -\text{lb} \left(\frac{\text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{front},c}, \mathbf{x}_k^{\text{rear},c})}{\sum_{i=1}^N \text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}, \mathbf{x}_i^{\text{front},c}) + \sum_{i=1}^N \mathbb{I}_{[i \neq k]} \text{sim}(\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}, \mathbf{x}_i^{\text{rear},c})} \right) \quad (19)$$

$$\text{sim}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \exp \left(\frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{\tau \cdot \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|} \right) \quad (20)$$

其中: $\text{sim}(\cdot, \cdot)$ 用于计算向量间的相似度; $\mathbf{x}_k^{\text{front},c}$ 、 $\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}$ 分别表示 $\mathbf{x}_k^{\text{front}}$ 和 $\mathbf{x}_k^{\text{rear}}$ 经过 MO-TSK 后得到的混合特征; 当 $k \neq i$ 时, $\mathbb{I}_{[k \neq i]} = 1$, 否则 $\mathbb{I}_{[k \neq i]} = 0$; N 是训练样本的数量。

令 $\mathbf{B}^g$ 为 MO-TSK 的后件参数, 根据式 (18) 和

式 (19) 构造对比损失, 如式 (21) 所示:

$$l_c(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},c}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}\}, \mathbf{B}^g) = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [l^{\text{front}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},c}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}\}) + l^{\text{rear}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},c}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}\})] - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [l^{\text{front}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},c}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}\}) + l^{\text{rear}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},c}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},c}\})] \quad (21)$$

采用交叉熵损失函数最小化 MLP 的预测误差, 如式 (22) 所示:

$$l_{\text{CE}}(\{\mathbf{x}_k^g\}, \boldsymbol{\theta}') = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \text{lb}(P(y_k | \mathbf{x}_k^g; \boldsymbol{\theta}')) = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y_k \cdot \text{lb} \hat{y}_k + (1 - y_k) \cdot \text{lb}(1 - \hat{y}_k)) \quad (22)$$

其中: $\boldsymbol{\theta}' = \{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{B}^g\}$ 表示由 MLP 的参数集合和 MO-TSK 的后件参数集合 $\mathbf{B}^g$ 组成参数集合; $\mathbf{x}_k^g$ 由 $\mathbf{x}_k$ 经过 MO-TSK 前件参数映射后得到; y_k 表示真实标签, 为模型预测结果; $P(y_k | \mathbf{x}_k^g; \boldsymbol{\theta}')$ 表示在参数为 $\boldsymbol{\theta}'$ 的情况下 $\mathbf{x}_k^g$ 被预测为 y_k 的概率。

最终得到模型的损失函数, 如式 (23) 所示:

$$L(\{\mathbf{x}_k^g\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{front},g}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},g}\}, \boldsymbol{\theta}') = \frac{\kappa}{3} \cdot (l_{\text{CE}}(\{\mathbf{x}_k^g\}, \boldsymbol{\theta}') + l_{\text{CE}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},g}\}, \boldsymbol{\theta}') + l_{\text{CE}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{rear},g}\}, \boldsymbol{\theta}')) + (1 - \kappa) \cdot l_{\text{C}}(\{\mathbf{x}_k^{\text{front},g}\}, \{\mathbf{x}_k^{\text{rear},g}\}, \mathbf{B}^g) \quad (23)$$

其中: $\kappa \in (0, 1)$ 为比例系数, 用来调整对比损失在模型损失中的占比。

式(23)将 MO-TSK 后件参数和 MLP 参数相融合, 整个网络通过梯度下降过程进行联合优化。这不仅保证了联合优化过程中 MO-TSK 和 MLP 两个模块的一致性, 避免了模型次优解, 而且通过无监督的对比损失, 进一步对模型参数施加了约束, 缓解了过拟合现象, 提高了模型的泛化性能。已有的对比学习方法通常被视为预训练过程, 但由于本文将对对比损失融入目标函数, 因此无需 fine-tuning 调参过程。

4 实验验证

4.1 实验数据集

实验数据来自 ABIDE 数据库^[28], 使用其中 NYU、USM、UMI 和 YALE 4 个站点的数据构造一个新的数据集进行实验。该数据集共 445 个样本, 包含 218 名 ASD 患者, 227 名健康对照。

4.2 实验设置

为了验证模型的有效性, 针对 ASD 分类问题, 首先将 CL-DeepTSK 与经典的机器学习算法、TSK 模糊系统进行比较, 然后设计实验验证联合优化和对比损失能够有效提高模型的性能。为了减少数据的不同划分和神经网络的初始化对实验结果的影响, 所有实验均基于五折嵌套交叉验证, 并重复 10 次, 每折都使用 Kaiming 初始化^[29]对 MO-TSK 后件部分和 MLP 参数进行随机初始化。优化器使用随机梯度下降 (Stochastic Gradient Descent, SGD), 设置学习率为 0.005, 权重衰减为 $1e-5$, 动量为 0.9, 共训练 500 个 epoch。选取正确率 (Accuracy, ACC)、敏感度 (Sensitivity, SEN)、特异性 (Specificity, SPE) 和 ROC 曲线下面积 (Area Under Curve, AUC) 4 个指标作为模型性能的评价指标。ACC、SEN 和 SPE 的计算公式如式(24)~式(26)所示:

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

$$S_{\text{SEN}} = \frac{T_{\text{TP}}}{T_{\text{TP}} + F_{\text{FN}}} \quad (25)$$

$$S_{\text{SPE}} = \frac{T_{\text{TN}}}{T_{\text{TN}} + F_{\text{FP}}} \quad (26)$$

其中: T_{TP} 表示真正例; F_{FP} 表示假正例; T_{TN} 表示真反例; F_{FN} 表示假反例。

实验代码基于 Python 3.7 以及 PyTorch、Numpy、SciPy、Scikit-Learn、Scikit-Fuzzy 库, 并在 NVIDIA RTX3070Ti GPU 和 AMD Ryzen 5 5600X CPU 的硬件平台上运行。

4.3 与其他方法的比较

将 CL-DeepTSK 与 5 种经典的机器学习算法 (SVM^[30]、RF^[31]、NB^[32]、MLP^[33] 和 SAE^[34])、3 种 TSK 模糊系统 (TSKFS^[35]、L2-TSKFS^[10] 和 TSKFS-SVM^[36]) 和 2 种基于反向传播 (Back-Propagation, BP) 的模糊神经网络 (ANFIS^[35] 和 FDNN^[37]) 进行对比, 同时各方法在五折嵌套交叉验证内循环进行网络参数寻优的参数范围设置。各方法具体描述如下:

1) SVM, 支持向量机。惩罚因子 $C = \{1, 10, 100\}$, 核函数系数 $\gamma = \{0.01, 0.1, 1, 10\}$ 。

2) RF, 随机森林。决策树数量 $n = \{20, 40, 60, 80, 100\}$ 。

3) NB, 朴素贝叶斯分类器。无可调参数。

4) MLP, 通过多个前向传播的节点层和非线性激活函数为复杂的非线性系统建模。从输入层到输出层的节点数设置依次为 1 024、512、128、2, 使用双曲正切函数 (tanh) 作为激活函数。

5) SAE, 对原始特征稀疏编码后通过 MLP 进行分类。稀疏编码节点数为 6 670 和 1 024, MLP 从输入层到输出层的节点数设置依次为 1 024、512、128、2, 使用 tanh 作为激活函数。

6) TSKFS, 使用标准的最小二乘法优化的 TSK 模糊系统。模糊规则数 $r = \{4, 6, 8\}$, 可调尺度参数 $h = \{1, 10, 100\}$ 。

7) L2-TSKFS, 引入 L2 范数正则化获得稀疏解和 ϵ 不敏感准则的 TSK 模糊系统。模糊规则数 $r = \{4, 6, 8\}$, 可调尺度参数 $h = \{1, 10, 100\}$, 正则化项系数 $\tau = \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0, 10^1\}$ 。

8) TSKFS-SVM, 结合 TSK 模糊系统和 SVM 支持向量机的分类器。模糊规则数 $r = \{4, 6, 8\}$, 可调尺度参数 $h = \{1, 10, 100\}$, 正则化项系数 $\tau = \{10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^0, 10^1\}$ 。

9) ANFIS, 经典的自适应模糊神经网络。由 BP 算法更新参数, 模糊规则数 $r = \{4, 6, 8\}$, 模糊层的输出维度设置为 256。

10) FDNN, 将自适应模糊神经网络和 MLP 以并联方式结合的混合神经网络。模糊规则数 $r = \{4, 6, 8\}$, 模糊层的输出维度设置为 256, MLP 的输出

维度设置为 256。

11)CL-DeepTSK,本文提出网络。模糊规则数 $r=\{4,6,8\}$,可调尺度参数 $h=\{1,10,100\}$,对比损失在模型损失中的占比 $\kappa=\{0.3,0.5,0.7\}$,子时间序列在总时间序列中的占比 $\eta=\{0.25,0.50,0.75\}$ 。

CL-DeepTSK 与其他方法的分类性能比较结果如表 1 所示,其中最优值用加粗字体标示,各性能指标值均以均值±标准差的形式进行记录。

表 1 CL-DeepTSK 与其他方法的分类性能比较
Table 1 Comparison of classification performance among CL DeepTSK and other methods

方法名称	ACC	AUC	SPE	SEN
SVM	0.677±0.016	0.753±0.012	0.650±0.025	0.703±0.014
RF	0.671±0.011	0.738±0.008	0.600±0.020	0.740±0.015
NB	0.678±0.011	0.729±0.005	0.587±0.016	0.764±0.009
MLP	0.681±0.009	0.751±0.007	0.606±0.016	0.753±0.006
SAE	0.690±0.010	0.752±0.009	0.657±0.011	0.722±0.017
TSKFS	0.661±0.016	0.737±0.016	0.757±0.020	0.569±0.021
L2-TSKFS	0.676±0.013	0.751±0.011	0.789±0.015	0.568±0.015
TSKFS-SVM	0.673±0.016	0.744±0.015	0.644±0.028	0.700±0.014
ANFIS	0.665±0.021	0.735±0.013	0.633±0.030	0.695±0.019
FDNN	0.673±0.016	0.740±0.011	0.660±0.037	0.677±0.025
CL-DeepTSK	0.700±0.015	0.773±0.009	0.684±0.015	0.715±0.018

由表 1 可以看出：

1)将 CL-DeepTSK 与 SVM、RF 和 NB 等经典机器学习算法进行比较可以发现,CL-DeepTSK 明显优于这些算法。主要因为这些算法没有考虑因 BOLD 信号不稳定而带来的数据不确定性,而 CL-DeepTSK 充分考虑了这一不确定性因素,引入 MO-TSK 进行特征学习,从而有效处理了 ASD 诊断中因数据的不稳定性而带来的误差。

2)将 CL-DeepTSK 与经典深度神经网络 MLP 与 SAE 进行比较可以发现,CL-DeepTSK 能够取得更好的分类结果,可见 MO-TSK 作为一个鲁棒的特征学习模块,减少了所生成特征中的不确定性,有效提高了 MLP 的分类性能。

3)将 CL-DeepTSK 与各 TSK 模糊系统进行比较发现,CL-DeepTSK 性能优于其他 TSK 模糊系统。TSKFS 直接由前件参数映射得到的高维数据经过线性变换得

到预测结果;L2-TSKFS 在损失函数中引入了 L2 范数正则化项和 ϵ 不敏感损失准则;TSKFS-SVM 使用线性 SVM 分类器对前件参数映射出的高维数据进行分类。L2-TSKFS 和 TSKFS-SVM 均基于类间间隔最大准则来学习模糊系统后件参数,然而它们的分类性能均差于 CL-DeepTSK。主要因为它们它们在 TSK 模糊系统后件部分直接使用线性变换获得分类结果,对于 ASD 这类复杂疾病而言表达能力有限,本文方法将 MO-TSK 与 MLP 结合加深其表达能力,同时联合自监督学习从数据本身挖掘出更多的监督信息,从而获得了更优的 ASD 分类性能。

4)将 CL-DeepTSK 与两种基于 BP 的模糊神经网络进行比较发现,CL-DeepTSK 能够取得更好的分类结果。ANFIS 具有典型的三层结构,对 ASD 这类复杂疾病而言表达能力有限,这使得它难以在 ASD 的分类中达到较好的效果。FDNN 使用模糊神经网络和 MLP 的并联结构,但仅采用交叉熵损失作为目标函数,而 CL-DeepTSK 使用对比损失,以自监督的方式从特征中获取更多有利于分类的信息,从而取得了比 FDNN 更好的分类效果。另外,在这两种网络中,每次迭代都需要更新模糊隶属度函数的参数和模糊层的参数,但这种复杂计算会极大增加网络训练时间,而 CL-DeepTSK 只确定一次模糊化的参数,网络训练时间更短。

5)CL-DeepTSK 在 10 次嵌套交叉验证中的实验结果波动较小,说明了 CL-DeepTSK 利用 Kaiming 初始化使其对初始参数的设置不敏感。

4.4 对比损失的有效性验证

通过实验验证对比损失对于模型的有效性,将 CL-DeepTSK 损失函数分为有监督损失和自监督损失两部分,有监督损失基于原 BOLD 序列和 BOLD 子序列构建,因此分别考虑不同损失的组合进行实验,实验参数设置与结果如表 2 所示,其中最优值用加粗字体标示。实验 1 只使用原 BOLD 序列构建的功能连接特征作为输入数据训练模型;实验 2 在实验 1 的基础上加入了对比损失进行模型训练;实验 3 是本文提出的损失函数,包含了由原 BOLD 序列 BOLD 子序列构建的功能连接特征构成的有监督损失以及对比损失。

表 2 对比损失有效性验证实验的参数设置与结果
Table 2 Parameter settings and results of the contrastive loss effectiveness evaluation experiment

实验序号	损失函数	ACC	AUC
1	$l_{CE}(\{\mathbf{x}_k^g\}, \boldsymbol{\theta}')$	0.687±0.009	0.755±0.010
2	$\eta \cdot l_{CE}(\{\mathbf{x}_k^g\}, \boldsymbol{\theta}') + (1-\eta) \cdot l_C(\{\mathbf{x}_k^{front,c}\}, \{\mathbf{x}_k^{rear,c}\}, B^g)$	0.699±0.015	0.772±0.008
3	$\frac{\eta}{3} \cdot (l_{CE}(\{\mathbf{x}_k^g\}, \boldsymbol{\theta}') + l_{CE}(\{\mathbf{x}_k^{front,g}\}, \boldsymbol{\theta}') + l_{CE}(\{\mathbf{x}_k^{rear,g}\}, \boldsymbol{\theta}')) + (1-\eta) \cdot l_C(\{\mathbf{x}_k^{front,c}\}, \{\mathbf{x}_k^{rear,c}\}, B^g)$	0.700±0.015	0.773±0.009

从表2可以看出,如果将BOLD子时间序列生成的功能连接特征直接用于有监督的损失,则模型性能提升不明显。这是由于BOLD子序列构建的功能连接矩阵与原BOLD序列构建的功能连接矩阵包含的有监督信息是接近的,而引入对比损失后,相对于有监督的损失,在有限训练条件下,对比损失以自监督的方式在优化过程中获得了比有监督学习更丰富的信息。另外,对比损失过程也是对深度模型的正则化过程,有利于提高模型的

泛化性能和鲁棒性。

4.5 最具鉴别性的功能连接

MO-TSK为整个神经网络赋予了可解释性。通过分析模型中MO-TSK的后件参数来寻找最具鉴别性的功能连接,这对探索ASD的致病机理具有重要作用。对于每个功能连接特征,分别找到它所对应的MO-TSK后件参数,取绝对值并求和作为权重。在得到所有功能连接的权重后,取前30个具有最大权重的功能连接作为最具鉴别性的功能连接,结果如表3所示。

表3 最具鉴别性的30个功能连接
Table 3 30 most discriminative functional connections

序号	ROI 1	ROI 2	序号	ROI 1	ROI 2
1	Lingual_L	Putamen_R	16	Precentral_L	Cerebelum_6_R
2	Frontal_Mid_Orb_L	Pallidum_R	17	Frontal_Mid_R	Heschl_L
3	Rolandic_Oper_R	Occipital_Mid_L	18	Fusiform_L	Temporal_Inf_L
4	Occipital_Inf_L	Precuneus_R	19	Frontal_Mid_Orb_R	Cerebelum_Crus2_R
5	Hippocampal_R	Paracentral_Lobule_L	20	Olfactory_R	Cerebelum_10_L
6	Precuneus_L	Cerebelum_10_R	21	Frontal_Inf_Tri_L	Heschl_R
7	Frontal_Mid_Orb_L	Vermis_6	22	Rectus_R	SupraMarginal_L
8	Rolandic_Oper_R	Vermis_8	23	Frontal_Inf_Oper_L	Cerebelum_7b_L
9	Hippocampus_R	Lingual_L	24	Frontal_Sup_R	Precuneus_R
10	Frontal_Mid_Orb_R	Parietal_Sup_R	25	Temporal_Sup_R	Temporal_Pole_Mid_R
11	Frontal_Med_Orb_L	Caudate_R	26	Cuneus_R	Pallidum_L
12	Rolandic_Oper_R	Amygdala_R	27	Rolandic_Oper_R	Vermis_10
13	Cuneus_R	Cerebelum_Crus1_R	28	Parietal_Sup_R	Vermis_9
14	Frontal_Inf_Orb_L	Cuneus_R	29	ParaHippocampal_L	Vermis_3
15	Frontal_Inf_Oper_R	Lingual_L	30	Temporal_Pole_Sup_R	Cerebelum_3_R

5 结束语

本文从ASD诊断中rs-fMRI的不确定性出发,提出一种基于对比损失的TSK模糊神经网络CL-DeepTSK。通过在深度神经网络中引入MO-TSK降低rs-fMRI数据的不确定性并增强模型的可解释性。在训练阶段,设计融合对比损失的联合优化准则,引入对比损失使网络学习以自监督的方式挖掘先验信息,提高了模型泛化性能。通过模糊系统和神经网络的联合优化有效缓解了模型误差积累现象。在ABIDE数据集上的实验结果验证了CL-DeepTSK的有效性。下一步将在CL-DeepTSK中引入新的正则化项来缓解多中心数据集的分布差异,同时利用图卷积网络融入与疾病相关的表型信息,进一步提升模型泛化能力与分类性能。

参考文献

[1] PARK H R,LEE J M,MOON H E,et al. A short review on the current understanding of autism spectrum disorders[J]. Experimental Neurobiology, 2016, 25(1): 1-13.
[2] RICE C. Prevalence of autism spectrum disorders—autism and developmental disabilities monitoring network, United

States, 2006[J]. Morbidity and Mortality Weekly Report Surveillance Summaries, 2009, 58(10): 1-20.
[3] BAIO J,WIGGINS L,CHRISTENSEN D L,et al. Prevalence of autism spectrum disorder among children aged 8 years—autism and developmental disabilities monitoring network, 11 sites, United States, 2014[J]. Morbidity and Mortality Weekly Report Surveillance Summaries, 2018, 67(6): 1-23.
[4] WANG F,LU L,WANG S B,et al. The prevalence of autism spectrum disorders in China: a comprehensive meta-analysis[J]. International Journal of Biological Sciences, 2018, 14(7): 717-725.
[5] LORD C,BRUGHA T S,CHARMAN T,et al. Autism spectrum disorder[J]. Nature Reviews Disease Primers, 2020, 6: 5.
[6] LÜ H,WANG Z,TONG E,et al. Resting-state functional MRI: everything that nonexperts have always wanted to know[J]. AJNR American Journal of Neuroradiology, 2018, 39(8): 1390-1399.
[7] HULL J V,DOKOVNA L B,JACOKES Z J,et al. Resting-state functional connectivity in autism spectrum disorders: a review[J]. Frontiers in Psychiatry, 2016, 7: 205.
[8] DE ZWART J A,GELDEREN P V,FUKUNAGA M,et al. Reducing correlated noise in fMRI data[J]. Magnetic

- Resonance in Medicine, 2008, 59(4): 939-945.
- [9] LUND T E. Non-white noise in fMRI; does modelling have an impact?[J]. NeuroImage, 2006, 29(1): 54-66.
- [10] DENG Z H, CHOI K S, CHUNG F L, et al. Scalable TSK fuzzy modeling for very large datasets using minimal-enclosing-ball approximation[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2011, 19(2): 210-226.
- [11] HU Z Y, WANG J, ZHANG C X, et al. Uncertainty modeling for multicenter autism spectrum disorder classification using Takagi-Sugeno-Kang fuzzy systems[J]. IEEE Transactions on Cognitive and Developmental Systems, 2022, 14(2): 730-739.
- [12] TURNER B O, PAUL E J, MILLER M B, et al. Small sample sizes reduce the replicability of task-based fMRI studies[J]. Communications Biology, 2018, 1: 62.
- [13] TAKAGI T, SUGENO M. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 1985, SMC-15(1): 116-132.
- [14] XU P, DENG Z H, CUI C, et al. Concise fuzzy system modeling integrating soft subspace clustering and sparse learning[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2019, 27(11): 2176-2189.
- [15] GU X Q, CHUNG F L, ISHIBUCHI H, et al. Imbalanced TSK fuzzy classifier by cross-class Bayesian fuzzy clustering and imbalance learning[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 2017, 47(8): 2005-2020.
- [16] CERVANTES J, YU W, SALAZAR S, et al. Takagi-Sugeno dynamic neuro-fuzzy controller of uncertain nonlinear systems[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2017, 25(6): 1601-1615.
- [17] DENG Z H, XU P, XIE L X, et al. Transductive joint-knowledge-transfer TSK FS for recognition of epileptic EEG signals[J]. IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering, 2018, 26(8): 1481-1494.
- [18] WANG J, ZHANG Y, ZHOU T, et al. Interpretable feature learning using multi-output Takagi-Sugeno-Kang fuzzy system for multi-center ASD diagnosis[M]. Berlin, Germany: Springer, 2019.
- [19] KARIMU R Y, AZADI S. Diagnosing the ADHD using a mixture of expert fuzzy models[J]. International Journal of Fuzzy Systems, 2018, 20(4): 1282-1296.
- [20] WANG G M. A sparse deep belief network with efficient fuzzy learning framework[J]. Neural Networks, 2020, 121: 430-440.
- [21] SHABAN W M. Detecting COVID-19 patients based on fuzzy inference engine and deep neural network[J]. Applied Soft Computing, 2021, 99: 106906.
- [22] LIU X, ZHANG F J, HOU Z Y, et al. Self-supervised learning: generative or contrastive[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(1): 857-876.
- [23] FANG H C, WANG S C, ZHOU M, et al. CERT: contrastive self-supervised learning for language understanding[EB/OL]. [2021-11-04]. <https://arxiv.org/abs/2005.12766>.
- [24] CHEN T, KORNBLITH S, NOROUZI M, et al. A simple framework for contrastive learning of visual representations[EB/OL]. [2021-11-04]. <https://arxiv.org/abs/2002.05709>.
- [25] DUNN J C. A fuzzy relative of the ISODATA process and its use in detecting compact well-separated clusters[J]. Journal of Cybernetics, 1973, 3(3): 32-57.
- [26] WINKLER R, KLAWONN F, KRUSE R. Fuzzy C-means in high dimensional spaces[J]. International Journal of Fuzzy System Applications, 2011, 1(1): 1-16.
- [27] WANG Z W, LIU C Y, CHENG D P, et al. Automated detection of clinically significant prostate cancer in mp-MRI images based on an end-to-end deep neural network[J]. IEEE Transactions on Medical Imaging, 2018, 37(5): 1127-1139.
- [28] DI MARTINO A, YAN C G, LI Q, et al. The autism brain imaging data exchange: towards a large-scale evaluation of the intrinsic brain architecture in autism[J]. Molecular Psychiatry, 2014, 19(6): 659-667.
- [29] HE K M, ZHANG X Y, REN S Q, et al. Delving deep into rectifiers: surpassing human-level performance on ImageNet classification[C]//Proceedings of IEEE International Conference on Computer Vision. Washington D. C., USA: IEEE Press, 2015: 1026-1034.
- [30] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks[J]. Machine Learning, 1995, 20(3): 273-297.
- [31] CUTLER A, CUTLER D R, STEVENS J R. Random forests[M]. Berlin, Germany: Springer, 2012.
- [32] DOMINGOS P M, PAZZANI M. On the optimality of the simple Bayesian classifier under zero-one loss[J]. Machine Learning, 1997, 29: 103-130.
- [33] HINTON G E, SALAKHUTDINOV R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks[J]. Science, 2006, 313(5786): 504-507.
- [34] NG A. Sparse autoencoder[EB/OL]. [2021-11-04]. <https://www.doc88.com/p-3562925983842.html>.
- [35] JANG J S. ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference system[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 1993, 23(3): 665-685.
- [36] JUANG C F, CHIU S H, SHIU S J. Fuzzy system learned through fuzzy clustering and support vector machine for human skin color segmentation[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 2007, 37(6): 1077-1087.
- [37] DENG Y, REN Z Q, KONG Y Y, et al. A hierarchical fused fuzzy deep neural network for data classification[J]. IEEE Transactions on Fuzzy Systems, 2017, 25(4): 1006-1012.