

面向医药领域数据的GNN模型应用研究

鞠 敏

上海理工大学理学院, 上海

收稿日期: 2025年2月15日; 录用日期: 2025年3月25日; 发布日期: 2025年4月2日

摘 要

在人工智能技术飞速发展的当下, 病理医学领域数据展现出多模态、高维度及复杂关联的特性, 传统机器学习方法处理这类非欧几里得结构数据时困难重重。图神经网络(GNNs)作为新兴深度学习模型, 能够高效处理图结构数据并获取深层次特征。医学领域中蛋白质相互作用网络、基因调控网络等应用场景与图结构天然适配, 促使GNN模型在医学数据分析中的应用成为人工智能与医学交叉研究的热门方向。本文深入剖析近年来GNN模型在医学领域数据的应用, 不仅阐述了其基本原理和模型架构, 还从脑网络分析、疾病诊断与预测、药物发现与相互作用预测以及模型可解释性等多个维度, 对相关研究进行详细解读与深度分析, 提出模型设想, 探讨未来发展方向与面临的挑战。目的在于为医学和人工智能领域的研究者提供全面且系统的参考, 助力GNN模型在医学领域实现更广泛、更深入的应用与发展。

关键词

图神经网络(GNNs), 数据处理, 疾病诊断, 药物发现, 模型可解释性

Research on the Application of GNN Models in Pathological Data

Min Ju

College of Science, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Feb. 15th, 2025; accepted: Mar. 25th, 2025; published: Apr. 2nd, 2025

Abstract

In the current era of the rapid development of artificial intelligence technology, the data in the medical field exhibit characteristics of multimodality, high-dimensionality, and complex correlations. Traditional machine learning methods face numerous difficulties when dealing with this non-Euclidean structured data. As an emerging deep-learning model, Graph Neural Networks (GNNs) can efficiently process graph-structured data and obtain deep-level features. Application scenarios in

文章引用: 鞠敏. 面向医药领域数据的 GNN 模型应用研究[J]. 运筹与模糊学, 2025, 15(2): 154-164.

DOI: 10.12677/orf.2025.152072

the medical field, such as protein-protein interaction networks, gene regulatory networks, etc., are naturally compatible with graph structures. This has made the application of GNN models in medical data analysis a hot topic in the interdisciplinary research of artificial intelligence and medicine. This paper deeply analyzes the applications of GNN models in medical field data in recent years. It not only elaborates on their basic principles and model architectures but also, from multiple dimensions including brain network analysis, disease diagnosis and prediction, drug discovery and interaction prediction, and model interpretability, conducts detailed interpretations and in-depth analyses of relevant research, and explores future development directions and challenges. The aim is to provide a comprehensive and systematic reference for researchers in both the medical and artificial intelligence fields, and to facilitate the more extensive and in-depth application and development of GNN models in the medical field.

Keywords

Graph Neural Networks (GNNs), Data Processing, Disease Diagnosis, Drug Discovery, Model Interpretability

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在医学领域，数据的复杂性体现在多模态、高维度以及内在的关联性，传统的机器学习方法在处理这些非欧几里得结构的数据时面临着巨大的挑战。图神经网络(Graph Neural Networks, GNNs)作为一种新兴的深度学习模型，能够有效地处理图结构数据，并从中学习到深层次的特征表示[1][2]。图数据天然地契合医学领域的许多应用场景，例如，蛋白质相互作用网络、基因调控网络、疾病传播网络以及医学知识图谱等，都可以被表示成图结构。因此，将 GNN 模型应用于医学领域数据分析，成为了当前人工智能和医学交叉研究的热点。

在医学领域，数据类型多种多样，从传统的影像数据(如 MRI、CT)到基因组学、蛋白质组学等多组学数据，再到电子病历、药物相互作用数据等，都蕴含着丰富的图结构信息。例如，在神经影像学中，大脑的连接模式可以自然地表示为图，其中节点代表脑区，边代表脑区之间的连接强度[3]。在药物研发领域，药物分子结构可以被建模为图，用于预测药物性质或药物之间的相互作用[4][5]。在病理学领域，组织病理图像也可以通过构建细胞或区域间的关系图来进行分析[6]。

本文旨在对近年来面向医学领域数据的图神经网络模型应用研究进行全面的分析研究。我们将重点关注 GNN 模型在病理学、神经影像学、药物研发等医学领域的应用，并根据研究主题和方法进行分类讨论。本文将首先概述图神经网络的基本原理和模型架构并阐述不同 GNN 模型的详细分析和比较，然后分别从脑网络分析、疾病诊断与预测、药物发现与相互作用预测以及模型可解释性等方面进行详细解读，对具体案例与实验结果进行分析，在此基础上提出了一种新的多模态 GNN 模型架构设想，并探讨当前所面临的局限性、未来研究方向和挑战。通过本次分析研究，期望能够为医学领域研究者和人工智能领域研究者提供一个系统性的参考，促进 GNN 模型在医学领域的进一步发展和应用。

2. 相关工作

图神经网络模型自提出以来，迅速发展并衍生出多种变体，如图卷积网络(Graph Convolutional

Networks, GCNs)、图注意力网络(Graph Attention Networks, GATs)、图循环网络(Graph Recurrent Networks, GRNs)等[2] [7]。这些模型在图结构数据处理方面展现出了强大的能力,并在诸多领域取得了显著成果,例如社交网络分析、推荐系统、自然语言处理以及生物信息学等[1]。在医学领域,GNN模型也受到了越来越多的关注,并逐渐成为解决医学数据分析难题的有力工具。

2.1. 图神经网络基础

图神经网络的核心思想是在图结构上进行信息传播和聚合,从而学习节点的表示向量。不同类型的 GNN 模型在信息传播和聚合方式上有所不同,但其基本框架是相似的。一个典型的 GNN 层包含以下几个步骤。

2.1.1. 邻居聚合(Aggregation)

对于图中的每个节点, GNN 模型会收集其邻居节点的信息。聚合函数的设计是 GNN 模型的核心,常见的聚合函数包括求和、平均、最大值等。例如,在 GCN 中,每个节点会聚合其邻居节点的特征向量的加权平均值[1]。GAT 则引入了注意力机制,根据邻居节点与中心节点的相关性,赋予不同的聚合权重[7]。

假设图中的每个节点 v 的特征为 $\mathbf{h}_v$, 其邻居节点集为 $\mathcal{N}(v)$, 则聚合函数可以表示为:

$$\mathbf{h}_v^{\text{new}} = \text{Aggregate}(\{\mathbf{h}_u | u \in \mathcal{N}(v)\}) \quad (1)$$

在 GCN 中,聚合函数是加权平均,通常表示为:

$$\mathbf{h}_v^{\text{new}} = \sigma \left(\sum_{u \in \mathcal{N}(v)} \frac{1}{\sqrt{d_v d_u}} \mathbf{h}_u \mathbf{W} \right) \quad (1)$$

其中, d_v 和 d_u 分别是节点 v 和其邻居节点 u 的度, $\mathbf{W}$ 是权重矩阵, σ 是激活函数(例如 ReLU)。这表示节点 v 的新特征是其邻居节点特征的加权平均。

在 GAT 中,聚合是基于注意力机制,定义为:

$$\mathbf{h}_v^{\text{new}} = \sigma \left(\sum_{u \in \mathcal{N}(v)} \alpha_{vu} \mathbf{h}_u \right) \quad (3)$$

其中, α_{vu} 是节点 v 和邻居节点 u 之间的注意力权重,通常通过一个自注意力机制来计算:

$$\alpha_{vu} = \frac{\exp(\text{LeakyReLU}(\mathbf{a}^T [\mathbf{W}\mathbf{h}_v \parallel \mathbf{W}\mathbf{h}_u]))}{\sum_{u' \in \mathcal{N}(v)} \exp(\text{LeakyReLU}(\mathbf{a}^T [\mathbf{W}\mathbf{h}_v \parallel \mathbf{W}\mathbf{h}_{u'}]))} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{a}$ 是注意力权重向量,表示向量拼接。

图卷积网络(GCN)在处理同质图数据时表现出简单高效的特点,在节点分类和图分类任务中表现优异,尤其适用于脑网络和分子图分类任务,但其对异质图数据的处理能力有限且难以捕捉高阶邻居信息。相比之下,图注意力网络(GAT)通过注意力机制动态调整邻居节点的重要性,更适合处理异质图数据,在疾病预测和药物靶点预测中表现突出,但其计算复杂度较高且对大规模图数据的扩展性较差。GraphSAGE 通过采样邻居节点降低计算复杂度,适用于大规模图数据处理,如知识图谱和分子图数据,但在稀疏图数据和小样本医学数据上的表现受限。总体而言,GCN 适合同质图数据,GAT 在异质图数据中表现优异,而 GraphSAGE 则更适合大规模图数据,三者医学领域的应用各有侧重,分别适用于结构化脑网络分析、疾病预测与药物发现以及大规模知识图谱处理等场景。

2.1.2. 特征更新(Update)

聚合邻居信息后, GNN 模型会将聚合后的信息与节点自身的特征信息结合起来,更新节点的表示向

量。更新函数通常是一个非线性激活函数，例如 ReLU，更新规则可以表示为：

$$\mathbf{h}_v^{\text{new}} = \sigma \left(\mathbf{W} \cdot \mathbf{h}_v + \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} \alpha_{vu} \mathbf{h}_u \right) \quad (5)$$

其中， $\mathbf{W}$ 是权重矩阵， σ 是激活函数，通常选择 ReLU 或 Sigmoid。通过多层 GNN 的堆叠，节点可以聚合到更远邻居的信息，从而学习到图的全局结构信息。

例如，LSTM 聚合在处理时间序列脑网络数据时表现尤为出色。脑网络数据通常具有时序性，LSTM 能够有效捕捉时间上的动态变化和长期依赖关系，这对于神经疾病的诊断和预测至关重要。通过 LSTM 聚合，GNN 能够学习到节点特征随时间变化的趋势，从而提升对疾病预测的准确性。

相比之下，均值池化在分子图数据中的表现较为稳定。分子图数据通常包含静态的分子结构信息，且节点之间的关系相对固定，均值池化通过对邻域节点特征的简单平均，有效地减少了模型的复杂度，同时保持了较好的预测性能。最大池化虽然能够聚焦重要节点特征，但在某些情况下可能忽视了分子结构中的细微信息，因此在分子图任务中常常不如均值池化稳定。

2.1.3. 图表示学习(Graph Representation Learning)

在节点表示学习的基础上，GNN 模型还可以学习整个图的表示向量。图表示学习可以通过对节点表示进行池化(pooling)操作(平均池化、最大池化、求和池化等)来实现，例如，平均池化操作可以表示为：

$$\mathbf{h}_G = \frac{1}{|V|} \sum_{v \in V} \mathbf{h}_v \quad (6)$$

其中， $\mathbf{h}_G$ 是整个图的表示， $\mathbf{h}_v$ 是节点 v 的表示向量。

此外，在一些方法中，可以引入虚拟节点或图同构网络(GIN)来增强图的表示能力。GIN 的图表示可以表示为：

$$\mathbf{h}_G = \text{MLP} \left(\sum_{v \in V} \mathbf{h}_v \right) \quad (7)$$

其中，MLP 表示多层感知器(MLP)操作，如图 1 所示为一个只有一层隐藏层的实例，用于增强图表示学习的能力[2]。

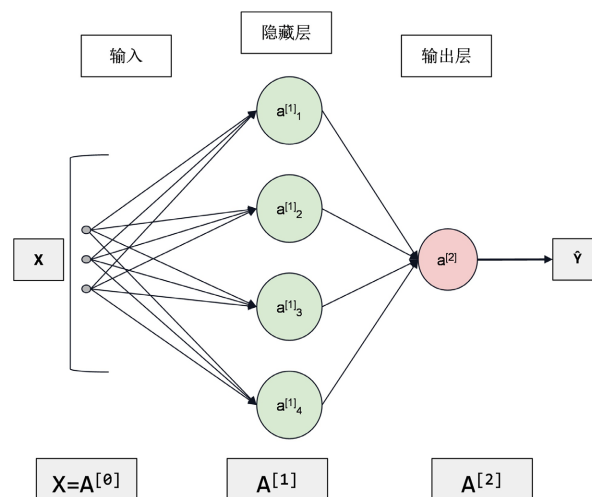


Figure 1. Schematic diagram of neural network (One hidden layer)

图 1. 神经网络示意图(一层隐藏层)

2.2. 医学图数据构建

将 GNN 模型应用于医学领域，首先需要构建合适的医学图数据。医学图数据的构建方式多种多样，取决于具体的应用场景和数据类型。

2.2.1. 脑网络图

在神经影像学中，脑网络图是最常见的医学图数据形式[3] [8]。脑网络图的节点通常代表脑区，边代表脑区之间的连接。连接的定义可以基于不同的脑活动指标，如功能磁共振成像(fMRI)中的功能连接、结构磁共振成像(sMRI)中的结构连接以及脑电图(EEG)/脑磁图(MEG)中的电生理连接。连接强度可以通过相关性、偏相关性、互信息等指标来量化。

2.2.2. 分子图

分子图广泛应用于药物研发及分子生物学研究[9] [10]。在分子图中，节点代表分子的基本构成单位——原子，边则代表原子之间的化学键。分子图不仅能够描述药物分子、蛋白质分子以及生物分子通路等复杂系统，还能携带丰富的化学信息，如原子类型、键类型、原子电荷等，以及生物学功能，如酶活性、受体结合能力等。通过 GNN 在分子图上的建模，研究者可以更好地理解分子之间的相互作用，为药物设计、药物筛选以及疾病机理的研究提供强有力的支持。

2.2.3. 知识图谱

医学知识图谱作为一种结构化的知识表示方法，广泛应用于医学信息的整合和推理任务[5] [11]。在医学知识图谱中，节点通常代表医学领域中的各种实体，如疾病、药物、基因、症状等，而边则表示这些实体之间的多种关系，例如疾病 - 基因的关联、药物 - 疾病的治疗关系、症状 - 疾病的表现关系等。随着医学数据的日益丰富，知识图谱为跨学科的医学研究和精准医疗提供了强大的工具，使得临床决策和个性化治疗方案的制定变得更加科学和高效。

3. 脑网络分析与神经疾病诊断

脑网络分析是 GNN 模型在医学领域应用的热点方向之一。脑网络图能够有效地捕捉大脑的复杂连接模式，GNN 模型则能够从脑网络图中学习到用于神经疾病诊断和机制解析的深层次特征[3]。

3.1. 基于 GNN 的脑网络疾病分类

多种神经疾病，如阿尔茨海默病(Alzheimer's Disease, AD)、帕金森病(Parkinson's Disease, PD)、自闭症谱系障碍(Autism Spectrum Disorder, ASD)等，都与脑网络功能异常有关[3] [8]。

GNN 模型可以用于学习疾病相关的脑网络特征，并实现疾病的分类和诊断。面临数据训练对设备的要求逐渐提高，知识蒸馏这一方法引起大家的注意，Luo [8]提出了一种基于知识蒸馏引导的可解释脑图神经网络(Knowledge Distillation Guided Interpretable Brain Subgraph Neural Networks)。该方法将脑神经影像数据建模为图结构数据，并利用知识蒸馏技术，将预训练教师模型的知识迁移到脑图神经网络中，从而提取患者和健康人脑图之间的判别性子图。这些判别性子图能够解释疾病相关的脑区和异常功能连接。该方法在帕金森病(PD)和注意力缺陷多动障碍(ADHD)的 fMRI 数据集上均取得了优于其他脑图分析方法的疾病预测准确率，并且能够提供与医学研究一致的可解释结果。

将图卷积神经网络(Graph Convolutional Neural Network, GCN)应用于物联网(IoT)传感器数据的心脏病检测[12]也是一项引人关注的成果，该研究使用深度图卷积网络 DG_ConvoNet 对心脏病 IoT 传感器数据进行分类和预测。实验结果表明，该模型在心脏病检测方面取得了较高的准确率(96%)，灵敏度(80%)和特异性(73%)。这些研究表明，GNN 模型能够有效地利用脑网络图的结构信息，学习疾病相关的特征

表示，并在神经疾病分类任务中取得良好的性能。

3.2. 基于超图和有向图的脑网络建模

传统的脑网络研究大多采用简单的无向图模型，忽略了脑连接的方向性和高阶关系。然而，脑连接实际上是有方向的，例如神经信号的传递具有方向性。此外，脑区间可能存在高阶交互关系，例如多个脑区协同参与某项认知功能。

为了更精细地刻画脑网络的复杂性，研究者开始尝试使用超图(hypergraph)和有向图(directed graph)来建模脑网络。超图可以表示节点之间的高阶关系，有向图可以表示连接的方向性。GNN 模型可以扩展到超图和有向图上，从而处理更复杂的脑网络数据。

超图和有向图未来 GNN 在脑网络分析方向的一个重要发展趋势，对于三种不同的图结构，如图 2 所示。

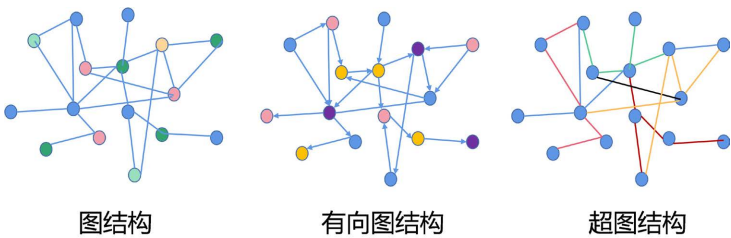


Figure 2. Three different types of graph structure
图 2. 三种不同的图结构类型

虽然目前基于超图和有向图的 GNN 模型在脑网络分析中的应用还相对较少，但随着研究的深入，相信这些方法将会在更精细的脑网络建模和分析中发挥重要作用。例如，与传统的基于节点特征的 GNN 不同，Hodge-GNN [13]利用 Hodge 拉普拉斯算子将脑网络表示为单纯形复合体，从而捕捉更复杂的边缘拓扑特征。该方法能够有效处理脑区间的复杂交互，并在阿尔茨海默病神经影像学倡议(ADNI)数据集上优于现有的 GNN 和图分类方法，证明了其在脑疾病分析中的潜力。

同样地，在[14]的研究中，为了克服传统超图模型仅能分析个体数据的局限，提出了一种基于超图学习的群体层面脑网络分析方法。基于超图学习，研究成功地识别出了与疾病相关的脑区，并通过超图中每条超边的权重反映了脑区间的功能性联系，正如表 1 所示在实验中取得了优秀的结果。

Table 1. Classification effects of several comparison methods on COBRE
表 1. 几种对比方法在 COBRE 数据集上的分类效果

方法	分类精度(%)	灵敏度(%)	特异度(%)	AUC
组 lasso	75.1	73.2	77.0	76
弹性网	71.7	66.2	77.0	0.71
功能加权 lasso	78.6	73.2	83.7	0.79
学习权重	73.8	70.4	77.0	0.74
[14]	92.0	81.7	83.8	0.89

4. 疾病诊断与预测

除了脑网络分析，GNN 模型在其他医学领域的疾病诊断与预测方面也展现出了潜力。例如，GNN 模型可以应用于病理图像分析、基因组学数据分析以及多模态医学数据融合，从而实现更准确、更全面的

疾病诊断和预后预测。

4.1. 基于 GNN 的病理图像分析

病理图像分析是病理学研究的重要组成部分。传统的病理图像分析主要依赖于病理医生的手动观察和诊断,耗时且易受主观因素影响。GNN 模型可以应用于病理图像的自动分析,例如肿瘤分割、细胞检测、病理分级等,从而提高病理诊断的效率和准确性。

Amendola [6]等人研究了 GNN 模型在脑肿瘤分割中的有效性和透明度。该研究比较了多种 GNN 架构在脑肿瘤分割任务中的性能,并利用 GNNExplainer 方法提高了模型的可解释性。实验结果表明,GNN 模型在脑肿瘤分割方面取得了精确的结果,并且通过 GNNExplainer 可以更好地理解模型的决策过程。此外,GraphGONet [15]将基因本体论(Gene Ontology, GO)图嵌入到神经网络的隐藏层中,每个神经元代表一个生物学概念,结合患者的基因表达谱和邻居神经元的信息。GraphGONet 在表型预测方面达到了与现有模型相当的准确率,并且能够自动生成由生物学概念组成的可解释性解释,有助于专家在医学场景中使用该工具。

这些研究表明,GNN 模型在病理图像分析和表型预测方面具有优势。通过构建病理组织图或利用生物学知识图谱,GNN 模型可以有效地学习病理特征和生物学规律,从而提高疾病诊断和预测的准确性和可解释性。

4.2. 基于多模态 GNN 的疾病预测

医学数据通常是多模态的,例如患者可能同时拥有基因组学数据、影像学数据、临床数据等。单一模态的数据往往难以全面反映疾病的复杂性,而多模态数据融合可以提供更丰富、更全面的疾病信息。GNN 模型可以应用于多模态医学数据融合,从而实现更精准的疾病预测,相当于是设计多个单模态的模型并进行特征对齐,如图 3 所示。

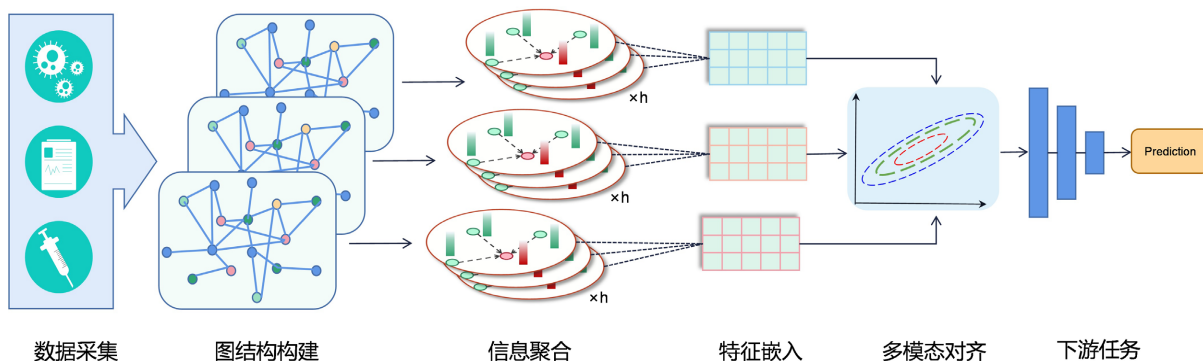


Figure 3. Multimodal GNN model architecture

图 3. 多模态 GNN 模型架构

目前,多模态 GNN 在医学领域的应用还处于起步阶段,但已经展现出了良好的发展前景。例如,可以将脑网络图与基因表达数据、临床信息等多种数据模态结合,构建多模态图神经网络,用于神经疾病的早期诊断和精准分型。

5. 药物发现与药物相互作用预测

药物发现是一个耗时、高成本的过程。传统药物发现方法效率低下,成功率低。人工智能技术,尤其是 GNN 模型,为药物发现带来了新的机遇。GNN 模型可以应用于药物靶点预测、药物性质预测、药

物分子生成以及药物相互作用预测等环节，从而加速药物发现进程，降低研发成本。

5.1. 基于 GNN 的药物靶点亲和力预测

药物靶点亲和力(Drug-Target Affinity, DTA)预测是药物发现的关键步骤之一，旨在预测药物分子与靶点蛋白之间的结合强度。传统的 DTA 预测方法主要基于实验，成本高且耗时。GNN 模型可以应用于 DTA 的计算预测，从而加速药物筛选和优化过程。

基于神经网络和接触图的 DTA 预测方法 DGraphDTA [9]是一种非常有效的方法。该方法利用药物分子和蛋白质分子的结构信息，分别构建药物分子图和蛋白质分子图。蛋白质分子图的构建基于接触图预测方法，能够根据蛋白质序列预测其结构特征。然后，利用 GNN 模型学习药物分子和蛋白质分子的表示向量，并进行 DTA 预测。在基准数据集上的实验结果表明，DGraphDTA 方法具有较强的鲁棒性和泛化能力。

Li [10]介绍了 DGL-LifeSci，一个开源的用于生命科学领域图深度学习的工具包。DGL-LifeSci 基于 Deep Graph Library (DGL)、RDKit 和 PyTorch 构建，提供了用于分子性质预测、反应预测和分子生成的 GNN 模型和工具，并支持用户自定义数据集和模型。实验结果表明，DGL-LifeSci 在分子性质预测任务中取得了与现有模型相当甚至更优的性能，并且具有较高的计算效率。

GNN 模型能够有效地利用药物分子和靶点蛋白的结构信息，学习药物-靶点相互作用的模式，并在 DTA 预测任务中取得良好的性能。

5.2. 基于 GNN 的药物相互作用预测

药物相互作用(Drug-Drug Interaction, DDI)预测是药物安全性和有效性评估的重要组成部分。多种药物联合使用可能会产生复杂的相互作用，例如协同作用、拮抗作用或毒副作用。GNN 模型可以应用于 DDI 预测，从而帮助医生和药剂师评估药物联合用药的风险，指导临床用药。

对于新兴药物的相互作用预测，Y. Zhang [4]等人提出了 EmerGNN，一种基于流的图神经网络。EmerGNN 利用生物医学网络中的丰富信息，通过提取药物对之间的路径，传播信息，并整合路径上的生物医学概念，学习药物对的表示向量。EmerGNN 在新兴药物相互作用预测方面取得了比现有方法更高的准确率，并且能够识别生物医学网络上最相关的信息。例如基于医学知识图谱的图神经网络模型 MK-GNN [11]，用于药物组合预测。MK-GNN 模型将患者的病历信息和医学知识图谱融合到神经网络中，利用先验知识和药物网络学习药物表示，从而实现药物组合预测。实验结果表明，MK-GNN 模型在药物组合预测任务中取得了优于现有基线的性能。

GNN 模型在 DDI 预测和药物组合预测方面具有优势。通过构建药物知识图谱或药物相互作用网络，GNN 模型可以有效地学习药物之间的复杂关系，从而提高药物安全性和有效性评估的准确性和效率。

6. 面向疾病诊断与预测的 GNN 模型架构设想创新

GNN 模型的架构设计和可解释性是 GNN 在医学领域应用的重要研究方向。不同的 GNN 架构适用于不同的医学数据和任务。模型的可解释性对于医学应用至关重要，能够帮助医生和研究人员理解模型的决策过程，增强模型的信任度和临床应用价值。

6.1. GNN 模型架构创新

已有的 GNN 模型架构，如 GCN、GAT、GraphSAGE 等，在医学领域已经取得了一定的应用成果。然而，医学数据的复杂性和多样性，对 GNN 模型架构提出了更高的要求。为了更好地适应医学领域的应用需求，需要不断进行 GNN 模型架构的创新。

Gaggion [16]等人提出了 HybridGNet, 一种混合图神经网络架构, 用于医学图像分割。HybridGNet 结合了卷积神经网络(CNNs)和图卷积神经网络(GCNNs)的优点, 利用 CNNs 进行图像特征编码, 利用 GCNNs 解码解剖结构的合理表示。HybridGNet 还提出了一种新颖的图像到图的跳跃连接层, 允许局部特征从 CNN 块流向 GCNN 块, 从而提高了分割精度。实验结果表明, HybridGNet 在胸部 X 射线图像的解剖分割任务中, 在领域偏移和图像遮挡等具有挑战性的场景下, 能够生成解剖上合理的分割结果, 优于其他基于像素和地标的模型。

几何深度学习框架也同样被用于在图和流形上推广 CNN 架构[1]。该框架基于混合模型 CNNs, 能够学习局部、平稳和组合的任务特定特征。研究表明, 文献中提出的各种非欧几里得 CNN 方法都可以被视为该框架的特定实例。该方法在图像、图和 3D 形状分析的标准任务中均优于以前的方法。虽然这篇文章发表较早, 但其提出的几何深度学习框架为 GNN 模型架构创新提供了理论基础和方法指导。

未来, 可以进一步探索更适合医学数据特点的 GNN 模型架构, 例如, 针对医学图像数据的混合模型、针对时序医学数据的动态 GNN 模型、针对多模态病理数据的多模态 GNN 模型等。

6.2. GNN 模型可解释性研究

医学决策具有高风险性和高敏感性, 因此, GNN 模型在医学领域的应用, 必须具备良好的可解释性。模型的可解释性能够帮助医生理解模型的决策依据, 验证模型的合理性, 并发现新的病理知识。

在脑肿瘤分割研究中, Amendola [6]应用了 GNNExplainer 方法, 提高了 GNN 模型的可解释性, 并揭示了网络内部的决策过程。GNNExplainer 是一种模型后解释方法, 通过学习一个子图掩码, 突出显示对模型预测最重要的子图结构。与此同时 Bourgeois [15]提出的 GraphGONet 模型本身就具有自解释性。GraphGONet 模型将基因本体论图嵌入到神经网络中, 每个神经元代表一个生物学概念, 模型的预测结果可以直接映射回生物学概念, 从而提供易于理解的生物学解释。

GNN 模型的可解释性研究在病理领域具有重要意义。未来, 我们需要探索基于注意力机制、原型学习、因果推断等方法的 GNN 可解释性技术, 并将其应用于疾病诊断、预后预测、药物发现等任务, 为临床医生和研究人员提供更可靠、更可信的决策支持。

6.3. 多模态时序 GNN 模型设想: GAT-Transformer 融合架构

6.3.1. 模型架构设想

为解决多模态医学数据中的时序依赖性和模态间的复杂关系, 提出一种结合图注意力网络(GAT)和 Transformer 架构的融合模型, 旨在处理脑网络图、病理图像和基因组数据等多模态时序数据。该模型的设计目标是充分利用不同模态和时序信息, 提升医学任务中的预测精度, 尤其是针对疾病预测和药物发现的应用场景。

6.3.2. 创新点设想

首先需要建立跨模态注意力机制, 传统的 GNN 模型通常采用固定的图结构来学习节点特征, 但在医学数据中, 不同模态的数据之间的关联非常复杂。为了有效地融合这些多模态数据, 可以设计一个跨模态注意力机制, 使得模型在不同模态间进行动态特征加权。具体而言, 模型能够根据每种模态的特征在每一时刻的贡献来调整它们在融合过程中的权重。比如, 在脑网络分析任务中, 脑图谱数据的时序变化可能对疾病的预测更为关键, 而基因组数据则可以根据不同疾病的遗传背景动态调整其权重。

其次进行分层图结构设计, 在处理多模态时序数据时, 图结构的设计尤为重要。我们设想在模型中引入分层图结构, 分别处理局部和全局图信息。局部图层可以集中于细粒度的节点间关系, 如单个患者的疾病进展; 而全局图层则可捕捉群体层面的宏观规律, 如不同患者群体的疾病趋势。通过分层设计,

模型能够兼顾局部细节与全局趋势，增强对复杂医学数据的建模能力。

之后需要时序信息建模与更新，由于医学数据中存在明显的时序性(如连续的影像数据、病理检查结果等)，时序信息的建模对于准确的疾病预测至关重要。我们设想通过引入类似于 Transformer 中的时间编码机制，使得模型能够捕捉到不同时间点之间的动态依赖。通过这样的时序特征更新，模型能够对患者的健康变化趋势进行准确预测，从而提升长期疾病预测的能力。

6.3.3. 应用场景设想

该模型适用于疾病预测与药物发现领域，尤其是在涉及多模态数据融合的任务中。例如，在神经退行性疾病(如阿尔茨海默症)的早期诊断中，脑网络图(脑电图、功能磁共振图像等)与基因组数据共同提供了患者的生物标志物，模型能够通过融合这些信息进行早期识别。此外，该模型还可用于药物发现，结合分子图和病理数据预测药物的靶点及其可能的副作用。

6.4. 新研究问题：如何设计可解释的 GNN 模型，使其在医学领域的决策过程更加透明

如何设计可解释的 GNN 模型，使其在医学领域的决策过程更加透明，这是一个离我们非常近的问题，尽管 GNN 模型在医学领域已表现出强大的预测能力，但其“黑箱”特性仍然是限制其临床应用的重要因素。未来的研究可以探讨如何设计可解释的 GNN 架构，尤其是在多模态数据和时序信息的背景下。例如，如何利用局部可解释性方法(如 LIME、SHAP)或图可视化技术，揭示模型在每个决策阶段是如何综合不同模态特征和时序信息的。

7. 总结与展望

本文对图神经网络(GNN)在医学领域中的应用进行了分析，重点探讨了脑网络分析、疾病诊断、药物发现等方面的研究进展。尽管 GNN 在病理数据处理方面展示了巨大的潜力，但在实际应用中，GNN 仍面临一些亟待解决的瓶颈。一个重要的挑战是其在临床环境中的转化应用。目前，大多数研究集中在模型的理论推导和实验室验证阶段，而如何将这些技术有效地落地到实际医疗系统中，尤其是在现有医疗数据结构、临床工作流程和设备的适配性上，仍然是一个艰巨的任务。医疗领域的数据具有较强的异质性、缺失性和噪声性，这使得在临床环境中部署 GNN 模型变得更加复杂。

此外，GNN 模型在实际应用中的局限性也不容忽视。例如，在面对医学数据时，模型容易受到数据稀缺性的限制，尤其是高质量的标注数据稀缺，这使得 GNN 在小样本问题上容易出现过拟合，难以泛化。为了解决这一问题，未来的研究可以通过引入迁移学习、数据增强技术以及半监督学习等方法，改善模型的鲁棒性与泛化能力。

另一个关键问题是 GNN 的“黑箱”特性，缺乏足够的可解释性。在临床决策中，医生和医疗专家需要了解模型的决策依据和过程，以确保模型的结果在临床实践中是可接受的。目前，GNN 模型通常难以提供清晰的决策解释，这限制了其在实际诊疗中的应用。针对这一挑战，未来的研究可以通过引入可解释性技术，如模型可视化、层次化的注意力机制、局部可解释模型(LIME)等方法，来提升 GNN 在医学领域的透明度和可操作性，使得医生能够理解模型在诊断、预测中的推理过程。

随着技术的不断进步，我们可以预见更加精细化和个性化的医学图谱将逐步建立。个性化医疗将成为未来医学研究的重要方向，通过 GNN 模型构建患者的“数字化影像”，将基因组、影像学、临床数据等多维度信息紧密结合，为精准医疗提供可靠的技术支持。从数据质量的优化，到模型架构的设计，再到实际应用的转化，每一个细节都需要精心打磨。通过不断创新，GNN 模型无疑将在未来医学的个性化、精准化和智能化方向上扮演越来越重要的角色，推动病理研究和临床实践迈向更加高效、智能的新时代。

参考文献

- [1] Monti, F., Boscaini, D., Masci, J., Rodola, E., Svoboda, J. and Bronstein, M.M. (2017) Geometric Deep Learning on Graphs and Manifolds Using Mixture Model CNNs. 2017 *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, Honolulu, 21-26 July 2017, 5425-5434. <https://doi.org/10.1109/cvpr.2017.576>
- [2] Rong, Y., Xu, T., Huang, J., Huang, W., Cheng, H., Ma, Y., et al. (2020) Deep Graph Learning; Foundations, Advances and Applications. *Proceedings of the 26th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, 6-10 July 2020, 3555-3556. <https://doi.org/10.1145/3394486.3406474>
- [3] Bessadok, A., Mahjoub, M.A. and Rekik, I. (2023) Graph Neural Networks in Network Neuroscience. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **45**, 5833-5848. <https://doi.org/10.1109/tpami.2022.3209686>
- [4] Zhang, Y., Yao, Q., Yue, L., Wu, X., Zhang, Z., Lin, Z., et al. (2023) Emerging Drug Interaction Prediction Enabled by a Flow-Based Graph Neural Network with Biomedical Network. *Nature Computational Science*, **3**, 1023-1033. <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00558-4>
- [5] 叶慧敏. 基于图神经网络的药物与药物相互作用预测方法研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 南京邮电大学, 2022.
- [6] Amendola, D., Basile, A., Castellano, G., Vessio, G. and Zaza, G. (2024) From Voxels to Insights: Exploring the Effectiveness and Transparency of Graph Neural Networks in Brain Tumor Segmentation. 2024 *International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, Yokohama, 30 June-5 July 2024, 1-7. <https://doi.org/10.1109/ijcnn60899.2024.10650146>
- [7] Zhang, X., Liang, L., Liu, L. and Tang, M. (2021) Graph Neural Networks and Their Current Applications in Bioinformatics. *Frontiers in Genetics*, **12**, Article 690049. <https://doi.org/10.3389/fgene.2021.690049>
- [8] Luo, X., Wu, J., Yang, J., Chen, H., Li, Z., Peng, H., et al. (2025) Knowledge Distillation Guided Interpretable Brain Subgraph Neural Networks for Brain Disorder Exploration. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, **36**, 3559-3572. <https://doi.org/10.1109/tnnls.2023.3341802>
- [9] Jiang, M., Li, Z., Zhang, S., Wang, S., Wang, X., Yuan, Q., et al. (2020) Drug-Target Affinity Prediction Using Graph Neural Network and Contact Maps. *RSC Advances*, **10**, 20701-20712. <https://doi.org/10.1039/d0ra02297g>
- [10] Li, M., Zhou, J., Hu, J., Fan, W., Zhang, Y., Gu, Y., et al. (2021) DGL-LifeSci: An Open-Source Toolkit for Deep Learning on Graphs in Life Science. *ACS Omega*, **6**, 27233-27238. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c04017>
- [11] Gao, C., Yin, S., Wang, H., Wang, Z., Du, Z. and Li, X. (2024) Medical-Knowledge-Based Graph Neural Network for Medication Combination Prediction. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, **35**, 13246-13257. <https://doi.org/10.1109/tnnls.2023.3266490>
- [12] Saikumar, K., Rajesh, V., Srivastava, G. and Lin, J.C. (2022) Heart Disease Detection Based on Internet of Things Data Using Linear Quadratic Discriminant Analysis and a Deep Graph Convolutional Neural Network. *Frontiers in Computational Neuroscience*, **16**, Article 964686. <https://doi.org/10.3389/fncom.2022.964686>
- [13] Park, J., Hwang, Y., Kim, M., Chung, M.K., Wu, G. and Kim, W.H. (2023) Convolving Directed Graph Edges via Hodge Laplacian for Brain Network Analysis. In: Greenspan, H., et al., Eds., *Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention—MICCAI 2023*, Springer, 789-799. https://doi.org/10.1007/978-3-031-43904-9_76
- [14] 伍科. 基于超图信号处理的精神分裂症患者脑网络分析[D]: [硕士学位论文]. 武汉: 武汉科技大学, 2023.
- [15] Bourgeais, V., Zehraoui, F. and Hanczar, B. (2022) GraphGONet: A Self-Explaining Neural Network Encapsulating the Gene Ontology Graph for Phenotype Prediction on Gene Expression. *Bioinformatics*, **38**, 2504-2511. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btac147>
- [16] Gaggion, N., Mansilla, L., Mosquera, C., Milone, D.H. and Ferrante, E. (2023) Improving Anatomical Plausibility in Medical Image Segmentation via Hybrid Graph Neural Networks: Applications to Chest X-Ray Analysis. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, **42**, 546-556. <https://doi.org/10.1109/tmi.2022.3224660>