

文章编号:1007-5321(2025)05-0128-08

DOI:10.13190/j.jbupt.2025-001

# 基于药性驱动配伍机制语义建模的处方推荐算法

耿雪茹<sup>1</sup>, 张建桐<sup>1</sup>, 侯鉴宸<sup>2</sup>, 陶晓华<sup>2</sup>, 罗涛<sup>1</sup>

(1. 北京邮电大学信息与通信工程学院, 北京 100876; 2. 北京中医药大学中医学院, 北京 102488)

**摘要:** 深入分析中医(TCM)处方中包含的语义信息,对中医临床应用和新方剂的发现具有重要意义。现有中医处方推荐算法仅基于是否共现来定义所有症状-药物对的同一交互关系,且未考虑药性类别,针对该问题提出了一种基于药性驱动配伍机制语义建模的处方推荐算法(HPDCM)。首先,处方分析时区分药性类别,并在构建知识图谱(KG)时将其定义为实体;其次,融合配伍规律对症状-药物之间的交互进行加权建模,然后再通过图卷积网络(GCN)模型聚合节点的高阶异构路径信息;最后,使用注意力机制融合症状交互图、症状药物交互图、药物交互图信息,区分不同维度中医语义信息的影响。与现有处方推荐算法的对比实验结果表明,HPDCM具有更高的准确度,更加贴合中医诊疗的辨证论治思维。

**关键词:** 中药组方; 中医诊疗; 知识图谱; 图卷积神经网络; 注意力机制

中图分类号: TP183

文献标志码: A

## Prescription Recommendation Algorithm Based on Herbal Property-Driven Compatibility Mechanism Semantic Modeling

GENG Xueru<sup>1</sup>, ZHANG Jiantong<sup>1</sup>, HOU Jianchen<sup>2</sup>, TAO Xiaohua<sup>2</sup>, LUO Tao<sup>1</sup>

(1. School of Information and Communication Engineering, Beijing University of Posts and Telecommunications, Beijing 100876, China;

2. School of Traditional Chinese Medicine, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 102488, China)

**Abstract:** The in-depth analysis of the semantic information contained in traditional Chinese medicine (TCM) prescriptions is of great significance for both clinical applications and the discovery of new formulas. Existing TCM prescription generation algorithms define the interactions between all symptom-herb pairs solely based on co-occurrence, without considering the categorization of herbal properties. To address this issue, this paper proposes a prescription recommendation algorithm based on herbal property-driven compatibility mechanism semantic modeling (HPDCM). First, the analysis of prescriptions takes into account the herbal property categories, which are defined as entities when constructing the knowledge graph (KG). Second, the algorithm integrates compatibility rules to model the interactions between symptoms and herbs with weighted connections. This is followed by aggregating higher-order heterogeneous path information of nodes through a graph convolutional network (GCN) model. Finally, an attention mechanism is employed to fuse information from symptom interaction graphs, symptom-herb interaction graphs, and herb interaction graphs, distinguishing the influence of different dimensions of TCM semantic information. Experimental results, compared with existing formula generation algorithms, demonstrate that HPDCM achieves higher accuracy and is more in line with the TCM diagnostic and

收稿日期: 2025-01-03

基金项目: 国家语委科研项目(ZDA145-21);北京中医药大学校级科研纵向发展基金课题(2024-ZXFZJJ-003)

作者简介: 耿雪茹(2000—),女,硕士生。

通信作者: 罗涛(1971—),男,教授,博士生导师,邮箱:ltuo@bupt.edu.cn。

therapeutic principles of syndrome differentiation and treatment.

**Key words:** traditional Chinese medicine prescriptions; traditional Chinese medicine diagnosis and treatment; knowledge graph; graph convolutional network; attention mechanism

中医是基于中国古代朴素唯物主义思想的指导,发展出的一种独特的医学体系,旨在研究人类生命活动的规律及其疾病防治。中医诊疗体系遵循“理、法、方、药”的整体框架,临床医生通过辨证<sup>[1]</sup>施治,依据患者的症状和体征推断其疾病的根本原因,进而制定个性化的治疗方案。在辨证过程中,由于症候的归纳具有较高的复杂性和模糊性,中医诊疗极度依赖医生的临床经验与主观判断。随着人工智能技术,特别是深度学习方法的迅速发展,构建基于智能化模型的辅助决策系统,旨在为中医临床提供科学依据与治疗方案的优化,已成为当前中医智能医疗研究的重要方向。

## 1 现有处方推荐算法概述

现有处方推荐算法大致分为3类:基于传统频率统计与数据挖掘、基于主题模型和基于深度学习。基于传统频率统计与数据挖掘算法通过统计药物、症状共同出现的频率(共现频率)、挖掘症状与药物的治疗关系。Zhang等<sup>[2]</sup>提出基于复杂网络的中医治疗肺癌的处方推荐算法,根据处方中药物出现频次确定核心药物,从而确定可信度较高的方剂进行推荐;Ruan等<sup>[3]</sup>通过聚类算法学习症状和药物之间的共现规律实现推荐。主题模型是指针对某一种疾病,将大量处方数据转换为文本语料库进行建模,通过检查主题词汇分布识别与患者症状相关的药物主题实现推荐。Yao等<sup>[4]</sup>构建主题模型挖掘症状与药物的相关性以及方剂的潜在规律进行推荐。但主题模型是典型的词袋模型,对于中医处方的文本数据有较大的局限性,难以学习处方数据中的上下文关系。上述2类算法仅从统计学角度构建症状与药物之间的关系,无法学习症状与药物间的语义关系,未能细粒度建模中医诊疗中证候的复杂推导过程,因此推荐效果并不理想。

基于神经网络的深度学习推荐模型在中医领域中展现出优越的数据适应性、强大的语义表示能力和出色的特征学习能力,能够有效捕捉中医数据中复杂的语义关系。如Liu等<sup>[5]</sup>结合文本卷积神经网络(TextCNN, text convolutional neural networks)与长短记忆网络(LSTM, long short-term memory)融合

症状语义特征和处方文本序列特征获取全面的症状和药物特征,相较于前2类方法更全面地挖掘了处方文本中症状和药物的语义关联。但处方文本数据存在大量噪音、上下文关系模糊等问题,降低了神经网络对中医知识提取和关联的能力,影响了模型推荐的性能。

相较于文本数据,知识图谱基于结构化的知识表示方式,采用3元组描述多种实体及对应关系,有效避免了文本数据中存在的大量噪声。从海量处方数据中提取症状与药物实体构建中医知识图谱,并运用深度学习技术挖掘症状与药物的潜在语义关联,可提升处方推荐模型的性能。如Dong等<sup>[6]</sup>提出了一种基于子网络的症状词映射方法,基于元路径思想充分利用症状特征信息有效表示临床症状术语;Jin等<sup>[7]</sup>提出证候感知多图卷积网络,基于处方中症状和药物的共现频率构建症状交互图与药物交互图,利用图卷积神经网络(GCN, graph convolutional network)对2者的潜在关系进行建模;在此基础上,为了丰富药物的特征表示,Yang等<sup>[8]</sup>引入27种药性,提出了一种基于图卷积网络的多层次信息融合模型,但该模型忽略了药性对症状的影响。Li等<sup>[9]</sup>提出了一种基于知识感知的中医处方生成神经群表征学习模型,构建症状-药物-药性知识图谱获取不同实体之间的语义关系,但该模型仅考虑了症状、药物共同出现时的单一交互关系,并未考虑其基于多种配伍规律的交互关系。

综上所述,基于深度学习的处方推荐算法通过提取中医实体构建知识图,从多个维度挖掘症状与药物之间的潜在关联,显著提升了推荐结果的准确性。然而,该类算法仅从药物名称和药物属性2方面将症状与药物进行了关联,缺乏基于中医理论、配伍规律的处方推荐研究,使得处方推荐结果可能存在药物间矛盾、药效间重叠的问题,降低了处方推荐结果的精准度和可靠性。

由相关中医处方理论知识<sup>[10-11]</sup>可知,性、味、归经、毒性4种药性是影响药物配伍的重要因素。针对现有研究中未深入挖掘处方配伍原理的问题,基于4种药性,综合考虑中医配伍规律和临床诊疗原理,提出一种基于药性驱动配伍机制语义建模的处

方推荐算法 (HPDCM, prescription recommendation algorithm based on herbal property-driven compatibility mechanism semantic modeling), 主要贡献如下。

1) 基于药物配伍规律, 引入性、味、归经、毒性 4 种 (共 39 类) 药物性质, 构建面向处方推荐的症状-药物-药性多关系图谱; 基于药物共同出现的关系 (共现关系), 构建药物图谱; 基于症状共现关系, 构建症状图谱。

2) 定义配伍规律  $\mathcal{C}$  (compatibility law) 为药物和药性之间多种关系的耦合; 将症状药物对 (症药对) 之间的交互建模为多种配伍规律  $c_v$  的加权融合, 其中  $c_v \in \mathcal{C}$ 。通过基于症药对交互关系挖掘的图卷积神经网络 (GCN-MISHP, graph convolutional neural network for mining the interactions between syndrome-herb pairs) 聚合多关系图谱中症状节点和药性节点间的高阶异构路径信息, 挖掘症药对交互背后潜在的复杂配伍。使用注意力机制融合分别从症状-药物-药性多关系图谱、症状图谱、药物图谱中得到的症状、药物特征向量, 区分不同维度的中医语义信息。

3) 实验结果表明, HPDCM 在精准率、召回率和  $F_1$  分数高达 0.262 1, 0.182 1 和 0.217 4, 相较于现有模型分别提升了 10.26%, 8.21% 和 9.08%。

## 2 系统模型

### 2.1 问题描述

在处方数据集  $P$  中, 设  $S = \{s_1, s_2, \dots, s_m, \dots, s_M\}$  和  $H = \{h_1, h_2, \dots, h_n, \dots, h_N\}$  分别表示所有症状和草药,  $M$  和  $N$  分别为数据集中所有症状和草药的数量。每一条处方数据  $p$  都包含症状集  $s_{\text{set}} = \{s_1, s_2, \dots, s_i\}$  和药物集  $h_{\text{set}} = \{h_1, h_2, \dots, h_j\}$ , 其中  $p \in P$ ,  $s_i \in S$ ,  $h_j \in H$ , 可得  $p = \langle s_{\text{set}}, h_{\text{set}} \rangle$ 。在中医诊疗思维和处方数据的指导与规范下, 处方生成模型的任务是基于给定的症状集推荐特定的药物集, 目标是学习 1 个预测函数为

$$\hat{G}(s_{\text{set}}) = f(s_{\text{set}}, H | \theta) \quad (1)$$

其中:  $\hat{G}(s_{\text{set}})$  是 1 个  $N$  维概率向量, 第  $n$  个维度的值以概率形式给出所有药物治疗该给定症状集  $s_{\text{set}}$  的贡献,  $\theta$  表示函数  $f(\cdot)$  的可训练参数。

### 2.2 HPDCM 概述

针对现有算法未能区分药性的不同类别, 且未深入挖掘症药对之间潜在的交互机制, 特别是在中医语义层面的潜力未得到充分发挥的问题, 将多种

药性定义为不同类别的实体, 并构建了面向处方推荐的症状-药物-药性多关系图谱。同时, 定义配伍规律  $c_v$  为药物和药性 3 元组中多类关系的耦合, 并将症药对之间的交互定义为多种  $c_v$  的加权融合, 提出了一种基于药性驱动配伍机制语义建模的处方推荐算法 HPDCM, 模型架构设计如图 1 所示。

首先, 为了使药物和药性之间的交互具备有向性和多样性, 将味 ( $f$ )、性 ( $n$ )、归经 ( $t$ )、毒性 ( $x$ ) 4 种药性定义为 4 类实体, 构建药物外部知识图谱  $\mathcal{S}_H$ , 以弥补现有算法未充分考虑症药对交互背后潜在在配伍原理的不足; 针对以往算法中将所有症药对交互看作基于共现原理的单一交互关系, 引入配伍规律  $c_v$ , 建模症药对交互为多种  $c_v$  的加权融合, 构建面向处方推荐的症状-药物-药性多关系图谱。同时, 遵循以往模型中基于共现频率构建症状交互图和药物交互图的方法来构建症状图谱和药物图谱, 分别展示症状间的并发性和药物间的配伍关系。

然后, 分别使用 GCN-MISHP、基于症状对交互关系挖掘的图卷积神经网络 (GCN-MISP, graph convolutional network for mining the interactions between symptom pairs) 和基于药物对交互关系挖掘的图卷积神经网络 (GCN-MIHP, graph convolutional network for mining the interactions between herb pairs) 学习多关系图谱、症状图谱和药物图谱中所有节点的嵌入表示。

最后, 使用注意力机制融合来自于 3 个图谱中的症状节点和药物节点的特征向量, 区分来自不同维度的中医语义信息。融合每条处方数据中症状集包含的多个症状得到症状集向量, 与药物向量矩阵进行内积运算得到每种药物治疗该症状集的概率。

### 2.3 多图构建

为充分提取处方数据中症状、药物和用药规律之间的中医知识, 基于药物配伍规律构建症状-药物-药性图谱; 基于共现关系构建症状图谱和药物图谱。

#### 2.3.1 基于药物配伍规律的对称-药物-药性多关系图谱的构建

中药具有性、味、归经、毒等多种药性, 药物配伍规律<sup>[12]</sup>对中医开具处方起着重要的作用。为充分表征药物配伍规律, 体现药物组合、药性搭配对不同症状集的治疗作用, 构建症状-药物-药性多关系图谱。

将症药对交互集合  $\mathcal{O}$  与药物外部知识图谱  $\mathcal{S}_H$

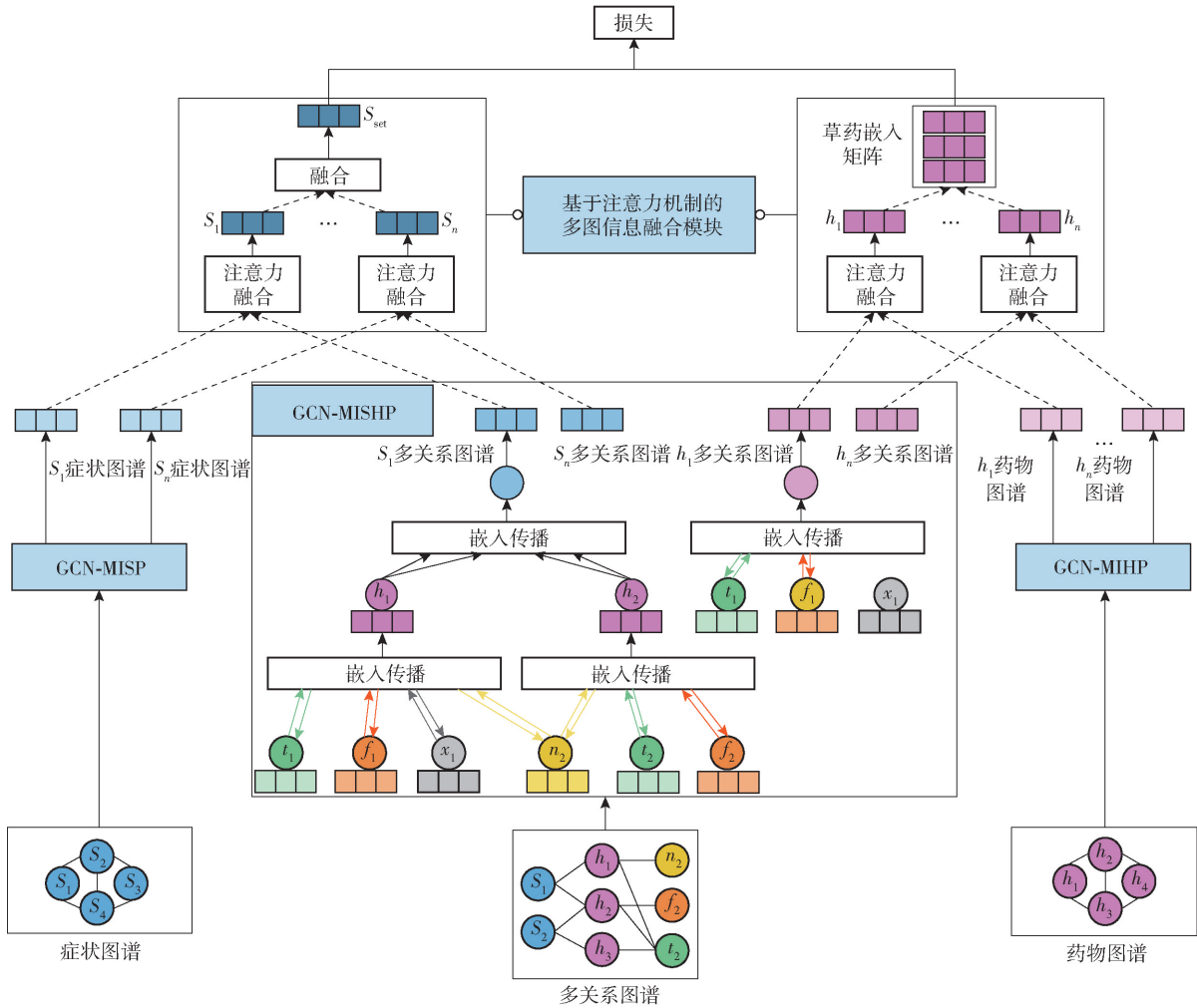


图 1 HPDCM 架构图

进行融合, 可得到症状-药物-药性多关系图谱  $\mathcal{S}^1 = \{\mathcal{S}, \mathcal{R}_1^1, \mathcal{H}, \mathcal{R}_1^2, \mathcal{Q}\}$ 。

设  $\mathcal{S}(\mathcal{S} \in \mathcal{S})$  为 1 组症状,  $\mathcal{H}(\mathcal{H} \in \mathcal{H})$  为 1 组药物,  $\mathcal{O} = \{(s_i, r_{im}, h_j) | s_i \in \mathcal{S}, r_{im} \in \mathcal{R}_1^1, h_j \in \mathcal{H}\}$  是症药对交互集合, 此处  $r_{im}$  仅表示症状  $s_i$  与药物  $h_j$  共现于处方数据集  $P$  中的任意 1 条处方  $p$  中, 如表 1 所示, 症状身热和药物银花共现于该处方中, 则 2 者构成症药对(身热, 银花)。

表 1 处方数据示例

症状集	药物集
身热, 恶风, 头痛, 面赤, 咳嗽, 咽燥, 鼻塞, 流涕, 口干, 脉浮数, 舌苔薄白	银花, 连翘, 黑山栀, 薄荷, 牛蒡子, 桔梗, 甘草

设药物节点与药性节点间的关系集为  $\mathcal{R}_1^2 = \{r_1, r_2, \dots, r_u, \dots, r_U\}$ , 其中  $r_u$  表示关系类型,  $U$  表示关系类型的数量, 包含性、味、归经、毒性 4 种类型,

$Q(Q \in \mathcal{Q})$  为 1 组药性实体, 可得药物外部知识图谱  $\mathcal{S}_H = \{(h_j, r_u, q_k) | h_j \in \mathcal{H}, r_u \in \mathcal{R}_1^2, q_k \in \mathcal{Q}\}$ 。

### 2.3.2 基于共现关系的药物图谱与症状图谱的构建

为有效提取症状间的共现关系, 贴合中医诊疗理论<sup>[13]</sup>, 构建症状图谱  $\mathcal{S}^2 = \{\mathcal{S}, \mathcal{R}^2\}$ , 其中  $\mathcal{R}^2 = \{r_{s_m, s_{m'}}^2 | r_{s_m, s_{m'}}^2 = 1 \left( \sum_{i=1}^l s_{i,m} s_{i,m'} \geq T_1 \right)\}_{m=1, m'=1}^{M, M'}$  描述了图谱中任意 2 个症状节点之间的关系, 其中  $T_1$  为 2 症状之间的共现频率阈值。如果症状  $s_m$  和症状  $s_{m'}$  在  $P$  中的共现频率超过  $T_1$ , 则  $r_{s_m, s_{m'}}^2 = 1$ , 否则为 0。

为有效提取药物之间的共现关系, 挖掘组方规律, 构建药物图谱  $\mathcal{S}^3 = \{\mathcal{H}, \mathcal{R}^3\}$ , 其中  $\mathcal{R}^3 = \{r_{h_n, h_{n'}}^3 | r_{h_n, h_{n'}}^3 = 1 \left( \sum_{i=1}^l h_{i,n} h_{i,n'} \geq T_2 \right)\}_{n=1, n'=1}^{N, N'}$  描述了图谱中

任意2个药物节点之间的关系,其中 $T_2$ 为2药物之间的共现频率阈值。如果药物 $h_n$ 和药物 $h_{n'}$ 在 $P$ 中的共现频率超过 $T_2$ ,则 $r_{h_n, h_{n'}}^2 = 1$ ,否则为0。

## 2.4 嵌入学习

本小节讨论症状-药物-药性多关系图谱、症状图谱和药物图谱的节点嵌入学习过程。

### 2.4.1 GCN-MISHP 的信息聚合机制

症状-药物-药性多关系图谱由症状-药物交互和药物-药性交互2部分组成,为了区分2种交互蕴含的不同中医语义,使用GCN-MISHP来学习症状、药物、药性节点的嵌入表示。

首先,为细粒度建模药物和药性之间的复杂语义关系,基于2.3小节 $\mathcal{S}_H$ 的构建中使用4种关系类型 $r_u$ 来区分药物的不同药性,笔者在图谱节点信息聚合过程中新增关系类型 $r_u^{-1}$ , $r_u^{-1}$ 和 $r_u$ 是互逆的2种关系类型,如白果 $\xrightarrow{\text{味}}$ 苦,苦 $\xrightarrow{\text{是...的味}}$ 白果。通过聚合药物实体连接的药性实体,可以挖掘药物间的相似性与差异性。整合来自1阶连接实体的关系感知信息生成 $h_j$ 的1阶连通性信息表示为

$$\mathbf{e}_{h_j}^{(1)} = \frac{1}{|N_{h_j}|} \sum_{(r_u, q_k) \in \mathcal{N}_{h_j}} \mathbf{e}_{r_u} \odot \mathbf{e}_{q_k}^{(0)} \quad (2)$$

其中: $\mathcal{N}_{h_j} = \{(r_u, q_k) | (h_j, r_u, q_k) \in \mathcal{S}_H\}$ 表示药物 $h_j$ 的1阶连通性, $\mathbf{e}_{q_k}^{(0)}$ 是药性节点 $q_k$ 的初始嵌入表示, $\mathbf{e}_{r_u}$ 为关系 $r_u$ 的初始嵌入表示。同理,通过聚合药性实体连接的药物实体挖掘药性对不同药物的影响,得到药性 $q_k$ 的1阶连通性信息表示为

$$\mathbf{e}_{q_k}^{(1)} = \frac{1}{|\mathcal{N}_{q_k}^*|} \sum_{(r_u^{-1}, h_j) \in \mathcal{N}_{q_k}^*} \mathbf{e}_{r_u^{-1}} \odot \mathbf{e}_{h_j}^{(0)} \quad (3)$$

其中: $\mathbf{e}_{h_j}^{(0)}$ 是药物节点 $h_j$ 的初始嵌入表示, $\mathcal{N}_{q_k}^* = \{(r_u^{-1}, h_j) | (q_k, r_u^{-1}, h_j) \in \mathcal{S}_H\}$ 表示 $h_j$ 的1阶连通性。

其次,为了细粒度建模每个 $(s_i, r_{\text{int}}, h_j)$ 之间独特的中医语义,定义配伍规律 $c_v$ 为所有药物和药性节点间关系 $r_u$ 特征向量的加权融合,以此表示症药对之间基于多种药性配伍驱动的交互,得到 $c_v$ 的嵌入表示为

$$\mathbf{e}_{c_v} = \sum_{r_u \in \mathcal{R}_1^2} \frac{\exp(\omega_{r_u c_v})}{\sum_{r'_u \in \mathcal{R}_1^2, r'_u \neq r_u} \exp(\omega_{r'_u c_v})} \mathbf{e}_{r_u} \quad (4)$$

其中: $r'_u$ 是 $\mathcal{R}_1^2$ 中不同于 $r_u$ 的其他关系类型, $\omega_{r_u c_v}$ 是特定关系 $r_u$ 和特定配伍规律 $c_v$ 的可训练权值,用来量化不同 $r_u$ 对 $c_v$ 的重要性。为了能够使每一个 $c_v$ 所携带的配伍规律信息具有独特性,引入距离相关

函数<sup>[14]</sup>为

$$\mathcal{L}_{\text{IND}} = \sum_{c_v, c'_v \in C, c_v \neq c'_v} \frac{\text{dCov}(\mathbf{e}_{c_v}, \mathbf{e}_{c'_v})}{\sqrt{\text{dVar}(\mathbf{e}_{c_v}) \text{dVar}(\mathbf{e}_{c'_v})}} \quad (5)$$

其中: $\text{dCov}(\cdot)$ 是2个向量的距离协方差, $\text{dVar}(\cdot)$ 是距离方差。通过最小化 $\mathcal{L}_{\text{IND}}$ ,可以最大限度减少 $c_v$ 之间的相似性。为了捕获每个症药对交互背后潜在的复杂语义,使用 $c_v$ 细粒度建模 $r_{\text{int}}$ 。对于1个特定的症状,不同配伍规律 $c_v$ 对其选择药物具有不同的激励作用,因此引入注意力得分

$$\alpha(s_i, c_v) = \frac{\exp(\mathbf{e}_{c_v}^T \mathbf{e}_{s_i}^{(0)})}{\sum_{c_v, c'_v \in C, c_v \neq c'_v} \exp(\mathbf{e}_{c'_v}^T \mathbf{e}_{s_i}^{(0)})} \quad (6)$$

建模 $r_{\text{int}}$ 的嵌入表示为

$$\mathbf{e}_{r_{\text{int}}} = \alpha(s_i, c_v) \mathbf{e}_{c_v} \quad (7)$$

由此将症状 $s_i$ 的1阶连通性信息表示为

$$\mathbf{e}_{s_i}^{(1)} = \frac{1}{|\mathcal{N}_{s_i}^*|} \sum_{h_j \in \mathcal{N}_{s_i}^*} \mathbf{e}_{h_j}^{(0)} \quad (8)$$

分别对药物 $h_j$ 和症状 $s_i$ 节点的1阶连通性建模后,进一步叠加更多的聚合层收集来自于高阶邻居的信息。设路径 $l = s_i \xrightarrow{\gamma_1} l_1 \rightarrow \dots \rightarrow l_{n-1} \xrightarrow{\gamma_n} l_n$ 是1条以症状节点 $s_i$ 为根的 $n$ -hop路径,该路径包含1个连接多个节点的关系序列 $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ ,由此可得到 $s_i$ 的 $l$ 阶连通性表示为

$$\mathbf{e}_{s_i}^{(l)} = \sum_{l \in \mathcal{N}_{s_i}^l} \frac{\mathbf{e}_{\gamma_1}}{|\mathcal{N}_{l_1}^*|} \odot \frac{\mathbf{e}_{\gamma_2}}{|\mathcal{N}_{l_2}^*|} \odot \dots \odot \frac{\mathbf{e}_{\gamma_n}}{|\mathcal{N}_{l_n}^*|} \odot \mathbf{e}_{l_n}^{(0)} \quad (9)$$

其中: $\mathcal{N}_{s_i}^l$ 是 $s_i$ 的所有 $n$ -hop路径 $l$ 的集合, $\gamma_n$ 是上文提到的节点间所有关系类型中的任一种,基于路径 $l$ 确定。通过这种表示,可以学习路径中多种关系间的相互作用,保留了路径的整体语义。同理,可得 $h_j$ 的 $l$ 阶连通性表示为

$$\mathbf{e}_{h_j}^{(l)} = \sum_{l \in \mathcal{N}_{h_j}^l} \frac{\mathbf{e}_{\gamma_1}}{|\mathcal{N}_{l_1}^*|} \odot \frac{\mathbf{e}_{\gamma_2}}{|\mathcal{N}_{l_2}^*|} \odot \dots \odot \frac{\mathbf{e}_{\gamma_n}}{|\mathcal{N}_{l_n}^*|} \odot \mathbf{e}_{l_n}^{(0)} \quad (10)$$

经过 $l$ 层的信息聚合之后,可得到症状 $s_i$ 和药物 $h_j$ 在不同层上的表示,将这些表示相加得到多关系图谱 $\mathcal{S}^1$ 中 $s_i$ 和 $h_j$ 的最终嵌入表示为

$$\mathbf{e}_{s_i}^{\mathcal{S}^1} = \mathbf{e}_{s_i}^{(1)} + \dots + \mathbf{e}_{s_i}^{(l)} \quad (11)$$

$$\mathbf{e}_{h_j}^{\mathcal{S}^1} = \mathbf{e}_{h_j}^{(1)} + \dots + \mathbf{e}_{h_j}^{(l)} \quad (12)$$

### 2.4.2 GCN-MISP 和 GCN-MIHP 的信息聚合机制

基于症状图谱 $\mathcal{S}^2$ 和药物图谱 $\mathcal{S}^3$ 的构建原理,分别使用GCN-MISP和GCN-MIHP挖掘症状间的共现关系和药物间的配伍关系,得到症状嵌入和草药

嵌入。

对症状图谱  $\mathcal{S}^2$  (药物图谱  $\mathcal{S}^3$ ) 中任一症状 (药物) 节点的所有 1 阶邻居节点进行信息聚合, 再依次通过线性变化层与激活层得到该症状 (药物) 节点的最终嵌入为

$$e_{s_i}^{\mathcal{S}^2} = \tanh \left( \sum_{s'_i \in \mathcal{N}_{\mathcal{S}^2}(s_i)} e_{s'_i}^{(0)} \omega_1 \right) \quad (13)$$

$$e_{h_j}^{\mathcal{S}^3} = \tanh \left( \sum_{h'_j \in \mathcal{N}_{\mathcal{H}^3}(h_j)} e_{h'_j}^{(0)} \omega_1 \right) \quad (14)$$

其中:  $\omega_1$  是当前节点的 1 阶邻居节点的训练权重参数, 代表了邻居节点对当前节点特征更新的贡献大小。

### 2.5 多图信息融合

为分别体现症药交互、主次症状和药物配伍关系, 获得不同维度的语义, 使用注意力机制融合 3 种图中各自得到的节点嵌入向量, 并将完整症状和药物的嵌入表示为

$$e_{s_i}^* = \lambda_1 e_{s_i}^{\mathcal{S}^1} + (1 - \lambda_1) e_{s_i}^{\mathcal{S}^2} \quad (15)$$

$$e_{h_j}^* = \lambda_2 e_{h_j}^{\mathcal{S}^1} + (1 - \lambda_2) e_{h_j}^{\mathcal{S}^3} \quad (16)$$

其中:  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  是可训练的权重参数。

## 3 实验设计及结果分析

### 3.1 实验设计

数据集采用 Li 等<sup>[9]</sup>使用的中医基准数据集并进行药性补充。使用数据集包含 26 360 条处方, 其中共 360 种症状, 753 种药物, 4 类药性共 39 种。基于药物和药性信息构建药物外部知识图谱。

评价指标采用 Li 等<sup>[9]</sup>使用的中医基准数据集

并进行药性使用精准率 Precision @ K, 召回率 Recall @ K 和  $F_1$  分数  $F_1$ -Score @ K 作为模型的衡量指标, K 指推荐药物列表的前 K 项。

笔者主要考虑以下基线模型。

1) LightGCN<sup>[15]</sup>: 简化 GCN 的架构, 只包含最重要的组成部分-邻域聚合。

2) 基于多图卷积网络的中医证候感知推荐 (SMGCN, syndrome-aware herb recommendation with multi-graph convolution network)<sup>[7]</sup>: 利用 GCN 获取症状和药物的嵌入信息, 并将多个症状融合成证候, 建模证候节点与药物节点的中医语义联系。

3) 用于注意力处方生成的知识感知神经组表示学习 (KGAPG, knowledge-aware neural group representation learning for attentive prescription generation)<sup>[9]</sup>: 构建知识图建模症状和药物之间复杂的语义信息, 采用基于注意力机制的分组聚合方法对证候信息进行聚合。

4) 知识驱动的草药推荐算法 (KDHR, knowledge-driven herb recommendation)<sup>[8]</sup>: 引入 27 种药性作为附加的辅助信息, 提出了一种多层信息融合的图卷积模型。

5) KDHR\_39: 将 KDHR 引入的药性值扩充至 39 种进行 one-hot 编码, 其他保持不变。

### 3.2 结果分析

#### 3.2.1 HPDCM 的有效性与可靠性

表 2 中增益 (Gains) 是 HPDCM 与基线模型的最优结果 (下划线加粗进行标注) 进行计算所得。

表 2 模型性能比较

模型	精准率			召回率			$F_1$ 分数		
	$P@5$	$P@10$	$P@20$	$R@5$	$R@10$	$R@20$	$F_1@5$	$F_1@10$	$F_1@20$
LightGCN	0.227 0	0.171 0	0.127 9	0.155 7	0.234 4	0.350 4	0.184 7	0.197 7	0.187 4
SMGCN	0.228 5	0.167 6	0.114 4	0.155 9	0.225 9	0.304 8	0.185 3	0.192 5	0.166 4
KGAPG	0.229 5	0.173 5	0.127 0	0.159 8	0.237 8	0.348 5	0.188 4	0.200 6	0.186 2
KDHR	0.230 9	0.181 4	0.134 0	0.166 2	0.258 7	0.377 9	0.193 3	0.213 3	0.197 9
<b>KDHR_39</b>	<b>0.237 7</b>	<b>0.185 3</b>	<b>0.136 7</b>	<b>0.171 6</b>	<b>0.263 8</b>	<b>0.385 8</b>	<b>0.199 3</b>	<b>0.217 7</b>	<b>0.201 9</b>
HPDCM	0.262 1	0.206 2	0.150 7	0.185 7	0.291 2	0.424 4	0.217 4	0.241 5	0.222 4
Gains	0.102 6	0.112 7	0.102 4	0.082 1	0.100 0	0.100 0	0.090 8	0.109 3	0.101 5

从 3 个评价指标来看, HPDCM 均是最优值, 这表明 HPDCM 更贴合于中医诊疗过程, 推荐效果最好。SMGCN 性能最差, 这是由于该模型未引入药性外部知识, 节点信息单一。LightGCN 性能优于 SMGCN, 是由于信息聚合过程中减少了信息冗余,

但作为一种通用的线性传播学习方式, 它不能深入挖掘中医数据的特有语义信息, 所以推荐效果较差。KGAPG 和 KDHR 性能优于 SMGCN 和 LightGCN, 是因为引入了药性信息, 但 2 者将所有药性不加以区分, 导致未深层次挖掘症药对交互的潜在原因。

### 3.2.2 单症状与多症状集的影响

药物推荐体现了中医证候归纳过程,即为 1 组症状推荐 1 组药物。然而,单症状处方在实际诊疗中极少出现,主要因数据预处理时删除了频率较低的症状。因此,模型的适用性应通过在单症状和多症状处方集上的性能对比进行评估。精准率、召回率和  $F_1$  分数的对比如图 2 所示。

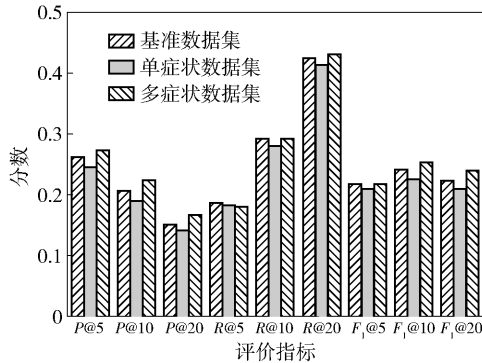


图 2 不同数据集下模型性能对比

可以看出,HPDCM 模型在多症状数据集中的表现最好。这表明,HPDCM 模型在一定程度上模拟了中医证候归纳的过程,有效缓解了由于预处理后的症状集信息缺失而导致证候归纳不准确的问题。

### 3.2.3 配伍规律数量的影响

HPDCM 将症药对之间的交互建模为多种  $c_v$  的加权融合,且每种  $c_v$  对应不同的权重。当  $c_v$  的数量为 1 时,每对症药对仅依据单一的配伍规律进行交互,这与基线模型的效果相同。依次设定  $c_v$  的数量为  $\{1, 2, 4, 8, 10\}$ ,并通过图 3 展示了不同值下的推荐效果。

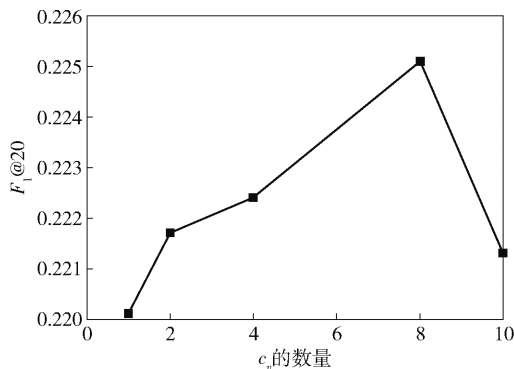


图 3 不同配伍数量对  $F_1@20$  的影响

在  $c_v$  数量为 1 时,推荐效果较差,随着  $c_v$  数量的增加,模型性能逐渐提升,这表明症药对之间的交互受不同配伍规律组合的影响。然而,当  $c_v$  的数量

增加到 10 时,模型的性能开始下降,这是由于引入了  $\mathcal{L}_{IND}$  来保持各个配伍规律独立性的约束,过高的  $c_v$  数量可能导致过度细化建模,进而引发不同配伍规律之间的冲突。 $c_v$  的建模过程结合了药物的 4 种药性,这一过程模拟了中医在开具处方时根据配伍规律来进行综合决策的过程,从而为中医处方推荐提供了更加精确和个性化的解决方案。

## 4 结束语

为了建模中医临床诊疗原理,给医生提供处方参考,提出了一种基于药性驱动配伍机制语义建模的处方推荐算法 HPDCM,通过细粒度建模症状与药物间的交互,挖掘处方数据中潜在的药物配伍规律,丰富了症状与药物的特征表示。此算法贴合中医临床诊疗过程,在中医数据集上验证了模型的优势。

在未来的工作中考虑引入证候信息,现有数据集在预处理时仅保留了主要症状,可能会导致证候推断不准确,如何使处方生成过程更加贴合中医辨证论治思维是未来探究的问题。

### 参考文献:

- [1] ZHANG Q, ZHOU X. Dialectical diagnosis thinking with the main com-plaint as the breakthrough point[J]. China Journal of Traditional Chinese Medicine and Pharmacy, 2021, 36(5): 2811-2814.
- [2] ZHANG Y D, HU K F, YANG T, et al. Prescription recommendation algorithm of traditional Chinese medicine treatment of lung cancer based on complex network[J]. Shizhen Traditional Chinese Medicine and Medicine, 2019, 30(5): 1257-1260.
- [3] RUAN C, WANG Y, ZHANG Y, et al. Exploring regularity in traditional Chinese medicine clinical data using heterogeneous weighted networks embedding[C]// DAS-FAA 2019: Proceedings of the 24th International Conference on Database Systems for Advanced Applications, Piscataway, NJ: IEEE Press, 2019: 310-313.
- [4] YAO L, ZHANG Y, WEI B, et al. A topic modeling approach for traditional Chinese medicine prescriptions[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2018, 30(6): 1007-1021.
- [5] LIU D, ZHANG Y, WANG L, et al. A TCM therapeutic methods based on text convolutional neural network[C]// YAC 2021: Proceedings of the 36th Youth Academic Annual Conference of Chinese Association of Automation, Piscataway, NJ: IEEE Press, 2021: 751-756.

- [6] DONG X, ZHENG Y, SHU Z X, et al. TCM-PR: TCM prescription recommendation based on subnetwork term mapping and deep learning[C]//BIBM 2021: IEEE 21st International Conference on Bioinformatics and Biomedicine, Houston, TX: IEEE Press, 2021: 3776-3783.
- [7] JIN Y Y, ZHANG W, HE X N, et al. Syndrome-aware herb recommendation with multi-graph convolution network[C]//ICDE 2020: IEEE 36th International Conference on Data Engineering, IEEE, 2020: 145-156.
- [8] YANG Y, RAO Y L, YU M, et al. Multi-layer information fusion based on graph convolutional network for knowledge-driven herb recommendation[J]. Neural Network, 2022, 146: 1-10.
- [9] LI S C, WANG W, HE J Y. KGAPG: Knowledge-aware neural group representation learning for attentive prescription generation of traditional Chinese medicine [ C ] // BIBM 2021: IEEE 21st International Conference on Bioinformatics and Biomedicine, Houston, TX: IEEE Press, 2021: 450-455.
- [10] ZHANG F, LIN Y, LEI L, et al. Analysis on medication rules of traditional Chinese medicine for treatment of diabetic peripheral neuropathy based on clinical literature[J]. Chinese Journal of Experimental Traditional Medical Formulae, 2020, 26(13): 199-205.
- [11] HU S, HOU W, HA P, et al. Analysis on tumor-related medicine in Shennong's classic of the materia medica [J]. Journal of Traditional Chinese Medicine, 2021, 62(6): 535-540.
- [12] 王付. 方剂学教材建设的研究与探索[J]. 中医药管理杂志, 2014, 22(3): 468-470.
- WANG F. Research and exploration on the construction of prescriptions textbook[J]. Journal of Traditional Chinese Medicine Management, 2014, 22(3): 468-470.
- [13] ZENG G, JIANG M, LU C, et al. Data analytics for traditional Chinese medicine research [ M ]. Cham: Springer, 2014: 97-109.
- [14] WANG X, JIN H Y, ZHANG A, et al. Disentangled graph collaborative filtering[C]//SIGIR 2020: Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, New York: ACM, 2020: 1001-1010.
- [15] HE X N, DENG K, WANG X, et al. LightGCN: Simplifying and powering graph convolution network for recommendation [ C ] // SIGIR 2020: Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, New York: ACM, 2020: 639-648.

(上接第 97 页)

- [14] SULTAN R, SHAMSELDEEN A. STAR-RIS-aided full-duplex communication for massive MIMO IoT systems [ C ] // 2023 IEEE 15th International Conference on Computational Intelligence and Communication Networks (CICN), Piscataway, NJ: IEEE Press, 2023: 50-55.
- [15] KHISA S, ALMEKHLAFI M, ELHATTAB M, et al. Full duplex cooperative rate splitting multiple access for a MISO broadcast channel with two users [ J ]. IEEE Communications Letters, 2022, 26(8): 1913-1917.
- [16] KHISA S, ELHATTAB M, ASSI C, et al. Joint user pairing and resource allocation optimization in downlink 2-layer cooperative RSMA networks [ C ] // 2024 IEEE Wireless Communications and Networking Conference (WCNC), Piscataway, NJ: IEEE Press, 2024: 1-6.
- [17] LI T, ZHANG H, ZHOU X, et al. Full-duplex cooperative rate-splitting for multigroup multicast with SWIPT [J]. IEEE Transactions on Wireless Communications, 2022, 21(6): 4379-4393.
- [18] ALLU R, KATWE M, SINGH K, et al. RSMA-integrated full-duplex communications for better energy and spectral-efficiency trade-off[C]//2023 IEEE Globecom Workshops (GC Wkshps), Piscataway, NJ: IEEE Press, 2023: 1213-1218.
- [19] ALLU R, KATWE M, SINGH K, et al. Robust beamforming design for RSMA-integrated full-duplex communications: Energy and spectral efficiency trade-off[J]. IEEE Transactions on Green Communications and Networking, 2024, 6(2): 799-814.
- [20] ALLU R, KATWE M, SINGH K, et al. Towards improved spectral efficiency using RSMA-integrated full-duplex communications [ C ] // 2023 IEEE 34th Annual International Symposium on Personal, Indoor and Mobile Radio Communications (PIMRC), Piscataway, NJ: IEEE Press, 2023: 1-6.