DOI:10.13193/j.issn.1673-7717.2026.01.005

图神经网络在中医药领域应用现状与前景展望

祁嘉文,刘毅
(成都中医药大学基础医学院,四川 成都 611137)

摘要:随着人工智能的兴起与高速发展,深度学习作为人工智能领域中的重要一环已在材料学、生物医学、文学艺术等多方面、多领域取得了大量成果,体现了极高的泛用性与价值。图神经网络(Graph Neural Networks,GNN)作为一种新兴的深度学习方法,克服了以往深度学习只能在欧式数据框架下的缺点,展现出其在处理非欧式复杂数据,尤其是图数据时的强大能力,显示出其巨大的潜力。当前,图神经网络已被较广泛地应用于医疗领域,并初步运用于中医药临床与基础研究,在中医处方推荐、疾病证候诊断、中药靶点预测等方面取得了一定的成果。通过对图神经网络在中医药领域的应用现状进行梳理,结合目前图神经网络技术的特点展望该技术在中医药领域的未来发展,认为图神经网络在临床诊断、处方施治、中药研究、典籍利用等方面具有广阔的应用前景。以期为之后的基于图神经网络的中医药相关研究提供思路与启发,使中医学能够与时俱进,提升智能化与客观化,更好地为人民医疗卫生与祖国健康事业服务。

关键词:深度学习;图神经网络;中医学
中图分类号:R2-03 **文献标志码**:A **文章编号**:1673-7717(2026)01-0024-06

Current Status and Prospects of Application of Graph Neural Networks in The Field of Traditional Chinese Medicine

QI Jiawen, LIU Yi
(Basic Medical School, Chengdu University of Traditional Chinese Medicine, Chengdu 611137, China)

Abstract: With the rise and rapid development of artificial intelligence, deep learning, as an important part of the field of artificial intelligence, has achieved significant results in various fields such as materials science, biomedicine, literature, and art, demonstrating high versatility and value. As an emerging deep learning method, Graph Neural Network (GNN) overcomes the limitation of traditional deep learning that can only be applied to Euclidean data frameworks, demonstrating its powerful ability to handle non-Euclidean complex data especially graph data, and demonstrating its enormous potential. Currently, GNN has been widely applied in the medical field and has been preliminarily applied in clinical and basic researches of traditional Chinese medicine. They have achieved certain results in traditional Chinese medicine prescription recommendation, symptom diagnosis and target prediction of traditional Chinese medicine. By reviewing the current application status of GNN in the field of traditional Chinese medicine and combining the characteristics of current GNN technology, it looks forward to the future development of this technology in the field of traditional Chinese medicine. It is believed that GNN has broad application prospects in clinical diagnosis, prescription treatment, traditional Chinese medicine research and utilization of classics. It is to provide ideas and inspiration for future research on Traditional Chinese Medicine based on graph neural networks so that traditional Chinese medicine can keep pace with the times, enhance intelligence and objectivity, and better serve the people's medical and health care and health cause of the motherland.

Keywords: deep learning; Graph Neural Network; traditional Chinese medicine

自20世纪50年代以来,人工智能逐渐成为研究的热点与重点,深度学习作为人工智能研究中的重要部分,也取得了显著成果,并被广泛运用于计算机视觉[1]、自然语言处理[2]、推荐系统[3]等领域。深度学习通过运用人工神经网络,对图像、信号、文本等信息逐层进行提取和筛选,最终获得分类或预测等预先设计任务的结果[4]。因此,人工神经网络的建立与迭代对深度学习的发展起到了关键作用。目前典型的神经网络有卷积神经网络(Convolutional Neural Networks,CNN)[5]、循环

基金项目:国家重点研发计划项目(2018YFC1704104);四川省中医药管理局中医药科研专项课题重点项目(2024zd024);成都中医药大学"杏林学者"学科人才科研提升计划项目(XKTD2022014)
作者简介:祁嘉文(1998-),男,陕西咸阳人,硕士在读,研究方向:中医医史文献,中医信息学。
通讯作者:刘毅(1964-),男,四川成都人,教授,硕士,研究方向:中医医史文献。E-mail:tcmly@163.com。

神经网络(Recurrent Neural Networks,RNN)[6]、生成对抗网络(Generative Adversarial Networks,GAN)[7]等,这些人工神经网络在许多领域的研究中都起到了重要的作用[8]。

然而上述神经网络对数据的格式与形式要求较为严格,需要数据具有统一而规整的尺寸与维度,即欧式数据,因此其应用领域与范围受到了明显的限制。尤其在医学领域,如蛋白质分子等非欧数据相当常见,迫切需要一种能够处理非欧数据,尤其是图数据的人工神经网络。2005年,Gori最早提出了图神经网络(Graph Neural Networks,GNN)这一概念[9],并在2008年由Scarelli等进行了进一步的完善[10],经过多年的积累与发展,图神经网络已成为人工神经网络研究中的重要分支,目前包括图卷积网络[11](Graph Convolutional Neural Networks,GCN)、图注意力神经网络[12](Graph Attention Networks,GAT)、图生成网络[13](Graph Generative Network,GGN)、图循环网络[14](Graph Recurrent Networks,GRN)等。在图神经网络算法发展的同时,针对非欧数据的复杂性与多样性,也衍生出了专门处理随时间变化的图数据动态图神经网络;处理具有几何特性的图数据几何图神经网络;处理数据点中存在复杂交互超图结构数据的超图神经网络等新的方向。这些人工神经网络的出现与发展弥补了传统神经网络难以处理非欧式数据的空白,并被广泛运用于包括生物医学在内的诸多领域,是现阶段深度学习中最优秀的学习框架之一。无独有偶,中医药领域中也有许多数据具有非欧式的特征,如方药配伍、望诊形态、病因病机、兼证夹证等。这样的特点使中医学与GNN高度契合,具有广泛的运用前景。

中医药传承千年,正是靠着历代医家的积极进取,开拓创新,才能让中医学历久弥新,与时俱进,符合时代发展的潮流与特色。2023年2月,国家《中医药振兴发展重大工程实施方案》公布,方案指出,要加强中医药科技创新体系建设,提升传承创新能力,加快推进中医药现代化,跨领域、跨行业整合多学科资源,优化中医药领域科技布局[15]。这与国务院《新一代人工智能发展规划》中提出的"为了发挥人工智能在医疗领域的作用,应探索智能诊疗技术对于大规模医学数据的分析、挖掘和理解能力"[16]不谋而合,因而推动中医药领域的数字化、智能化对中医药的长远健康发展具有重要的作用。目前,深度学习已被运用于包括中医诊断、方剂、针灸等在内的多个领域并取得了一定成就[17-19],而运用新型GNN的中医研究则尚属开创阶段,缺乏统筹。基于此,本文对GNN结合中医学的研究情况进行梳理汇总与分析,基于应用现状与技术特点展望GNN在中医药领域的发展方向与前景,让中医药能够更好地传承精华、守正创新。

1 中医药领域GNN应用现状

1.1 中医诊断学

中医诊断学作为依据中医理论诊察病情、判断病种、辨识证候的重要学科,是中医学领域的重要一环,是中医学"辨证论治"的重中之重。早在春秋时期,扁鹊就确定了中医诊断学的基本方法,即"切脉、望色、听声、写形",演化至今便是望、闻、问、切四种诊法。通过四诊合参,就可以获知患者病变的部位、原因、性质、邪正以及脏腑的气血盛衰等信息[20]。中医诊断学的客观化、智能化起步较早,作为中医现代化的主要内容之一,从20世纪80年代以来就陆续有相关文章问世[21-22]。近年来,中医诊断学的研究者更是将深度学习广泛运用于这一领域,收获颇丰[23]。GNN作为新一代人工神经网络,在中医诊断中的部分方向也有所运用,主要体现在望诊、问诊、切诊与综合诊断方面。

1.1.1 望诊 《难经》曰:"望而知之谓之神",望诊在中医学"神圣工巧"之中居于首位,是诊断学中的重要方法之一。中医学认为,人体诸如脏腑盛衰、气血充竭、筋脉荣枯等的病理变化能够通过面部、舌体等与脏腑关系密切的体表形态与神色改变体现出来。正合《灵枢》"视其外应,以知其内脏,则知其所病"之义。然而望诊具有基于视觉进行描述的表达特性,因此其结果往往受医生的主观因素影响,使得过往评估方法缺乏客观性与可重复性。需要采取新技术、新方式进行解决,深度学习与人工神经网络便是一剂良药。随着GNN的逐渐成熟,其首先在医学影像学领域得到了越来越广泛的运用[24],如李恒信[25]基于医学图像样本间差异较大,图像标注难度较高,导致传统深度学习训练出的模型分类性能低下等特点,提出了一种新型的双图神经网络(Interpretable Dual-Graph Convolutional Network,FSNet),可以为图像的特征与样本分配权重,提高模型性能。并在此基础上为FSNet添加了任务间信息融合的注意力单元,进一步提出了可解释的多任务图神经网络(Interpretable Multi-task Graph Convolutional Network,IMTGCN),将医学图像的观察分类与医学指标的回归预测结合,并通过采用不同的学习方法与神经网络针对阿尔茨海默病患者颅脑核磁图像进行训练,比较得出IMTGCN的学习结果优于其他方式。具体到临床学科,丁峻鹏[26]针对湿性年龄相关性黄斑变性病灶体积小,光学相干层析成像干扰因素多等问题,在传统卷积神经网络识别系统中引入注意力机制与图卷积神经网络模型,弥补了以往自动化识别系统对患者所患疾病细粒度识别的不足。同时挖掘了疾病与症状间的隐藏关联关系,将患者症状与医学影像相关联,提高了模型识别的准确率与可解释性,最终设计了针对湿性年龄相关性黄斑变性的自动诊断系统并成功运用于临床,提供病症辅助诊断、用户管理、报告生成等服务。

GNN与医学影像学结合的成功使其在医学图像识别与处理上的强大能力被发掘出来,并被初步运用于中医影像诊断系统中,颜成刚等[27]通过舌象处理对舌颜色特征、几何特征(舌形舌态)、纹理特征(芒刺、瘀斑、裂纹、齿痕)等进行参数提取,并结合流调数据(年龄、身高、体质量、性别、BMI指数)构建超图数据结构,最终运用超图卷积网络进行辅助舌象识别,得出患者的体质。冯军等则更进一步,设计了一种基于医学图像分割的中医舌象智能辨治系统,在得出患者体质的同时能够得到脏腑辨证结果[28]。该系统由获取模块、提取模块、计算模块与判断模块构成,通过对不同舌体、舌形、舌质、舌苔特征的提取,运用图神经网络来提取体质类型、脏腑辨证和舌象特征之间的图表达关系,并将此数据与涵盖舌体特征、症状信息和证候对应关系的知识图谱相结合,计算舌象特征所对应的各脏腑辨证与各体质类型的权重,训练舌诊辨证模型,最终达到通过获取

患者舌象特征来判断患者的体质并得出辨证结论的效果。

上述研究都在一定程度上提升了望诊的客观性与准确性，提升了中医诊断的智能化、便捷化。然而目前该领域的研究仍处于开创阶段，研究内容局限于舌诊方向，面诊、目诊等其他望诊内容尚未见引入GNN的模型，如近年来痤疮中医证型诊断模型[29]、高血压病肝火亢盛证面部图像诊断模型[30]等的构建仍使用卷积神经网络进行，在数据选用、图像分析、模型训练等方面具有一定局限，从而影响了模型的准确性与可解释性，未来仍有较大研究空间。

1.1.2 问诊 问诊自古便是中医运用的主要诊断方式之一，《内经》中即有“问其病，知其处，名曰工”的描述。明代张景岳十分重视问诊，称其为“诊病之要领，临证之首务”，并专创《十问歌》以做指导。问诊的精准度和完整度与疾病诊断和后续治疗的成功息息相关。然而问诊内容涵盖广泛，信息获取复杂，且受患者主观感受、医生技术水平、自身经验习惯等多方面因素影响，导致其往往难以完全发挥功能，收集足够有效信息，因此也是中医诊断智能化、客观化的研究热点。

目前问诊领域引入GNN的研究主要包括中医文本处理和中医问诊系统两方面，这些内容都属于自然语言处理的范畴，前者主要包括分词处理、特征提取等；后者主要包括关系抽取、阅读理解与问答系统等，其中分词处理是将自然语言数字化的过程，也是自然语言处理的重要基础任务，分词的正确、规范切分对人工神经网络与深度学习的下游任务至关重要。现有的一些人工神经网络已经可以在具有丰富资源的条件下在某些学科领域达到较为先进的分词性能[31]。然而医疗，尤其是中医领域专业术语众多，涵盖内容丰富，训练数据匮乏，难以做到文本的精确分割与语义的正确识别，而图神经网络能够挖掘文本语言中复杂的文义关系，在自然语言处理领域具有优越的性能。基于此，余浩[32]设计了一种面向中医领域的，融合词典信息的基于图神经网络中文分词方法，该方法将词典信息纳入有监督神经网络的中文分词模型中，提出了一种基于词典增强的图卷积网络，该模型通过对词典的文本结构图进行建模，捕获词典中的词边界信息和上下文特征以增强分词模型，有效提升了中文分词模型在中医领域内与跨领域场景中的分词性能，在与现有先进分词方法的对比中取得最佳，并在测试阶段通过扩充外部领域词典进一步增强了中医领域内的分词精度。在特征提取方面，胡意仪等通过对中医诊断文本进行识别，获取标准中医术语词词典，继而构建运用中医术语词典字典树训练的图神经网络模型以进行特征提取，得到中医术语中每个字符对应的字符特征向量，并最终得到中医诊断文本的目标识别结果，在识别中医诊断文本中的中医术语实体的基础上，进一步识别中医术语实体对应的所有标准中医术语词，解决了无法识别中医术语词中的合并缩写的术语的情况，提高了中医术语实体识别的准确率[33]。

在问诊的实际应用方面，得益于近年来知识图谱的飞速发展，许多中医问答系统也被开发出来[34-36]，这些系统的研发促进了中医知识的普及与中医智能化的发展，具有一定的意义与价值，然而在文义识别、意图分类、问答智能化等方面稍显不足，仍具有进一步改进的空间。由于医疗问题与中医领域的特殊性，带有复杂问题的长难句与语意稀疏，信息不足的短句都会在诊疗过程中被频繁使用，为问答系统识别文义带来了较大难度，影响了问答系统的性能。为此，吕颖[37]设计并实现了一种基于门控图神经网络的问题语义图表示模型。该模型首先能够提取问题中的语义关系并进行建模，生成问题的语义图，进而通过门控图神经网络对语义图进行学习并得出语义图表示。实验结果表明，该模型能够更好地获取问题中实体之间以及实体关系之间的指向，提升问答任务中面对复杂问题的问答系统的性能与准确率。杨世刚[38]则针对问句长度较短造成的语义稀疏性问题，结合图注意力网络在模型训练中在精度与准确度上的优势，提出了一种融合语料库特征与图注意力网络的意图分类模型（Intention Classification Model by Fusing Corpus Features and Graph Attention Networks，CF-GAT），该模型首先运用无监督方法学习语料库特征，构建语料库的无向图，将数据转化为图结构，并运用引力模型对其中节点进行评分，运用点互信息计算无向图中的边权值，同时融入点权重与边权重，得出图分类，以实现文本的语义分类与辨识。有效提升了问答系统针对短文本辨识的准确性。然而上述模型重点在于问答，其一问一答的处理方式与问诊通过一系列的问答和逻辑推理以逐步缩小诊断范围的模式有所区别，不能很好地反映中医问诊的具体情况。李杨辉[39]设计的智能问诊模型则与临床实际更为贴合，这种模型对自监督模型DOM（Distance Optimization Model）进行改进，生成了基于知识图谱和图神经网络的自监督模型GBM（Graph-based Model），该模型能够有效利用原始词嵌入特征与图谱上的邻近点词嵌入特征，提升了模型的自然语言处理能力并降低了误诊率。在实际运用中，用户首先进行自我描述，对身体概况与现有症状进行介绍，之后系统根据用户的基本状况深入询问相关症状，根据已有信息与用户反馈向其提出后续问题，并最终进行疾病预测。其流程与问诊流程基本一致，且在与其他多型智能问诊模型的比较中处于领先水平。然而该模型虽然可以运用于中医领域，却并未在中医领域的问诊数据中进行实验，有待于进一步发掘研究。李明欢[40]设计的中医问诊证候辨识模型综合运用了图神经网络与循环神经网络，在自己构建的中医诊断数据集中运用情况良好。然而该系统在运用中非常依赖患者历史病症信息，并不完全符合临床实践与初诊患者需要。由此可见，图神经网络运用于智能问诊能够显著提升问诊的有效率与准确率，然而目前该领域仍缺乏系统性的、针对中医问诊的运用GNN智能问诊模型的开发，如何将相关研究成果与模型进行有机结合，仍需进一步的深入探索。

1.2 方剂学

方剂学是研究和阐明治法与方剂配伍规律和临床运用的一门学科[41]，是中医学的重要内容，是中医理、法、方、药相结合的重要体现。正如徐灵胎所言：“药有个性之专长，方有合群之妙用”，针对不同的患者、症状与证候如何处方与化裁一直是临床诊疗中的重点和难点。所开处方取得效果的优劣也一直是鉴别医者良庸的金标准。由于方剂学不论是在临床应用还是方药研究中都会涉及如症状、证候、药物种类、剂量等多种、多格式的复杂数据分析与处理，因此与GNN的应用场景相

当契合,近年来相关研究亦是层出不穷。

1.2.1 方剂临床应用 与方剂学学科研究内容相类,方剂学结合GNN研究也可以分为临床应用与方剂研究两个大类,其中尤以临床应用研究为多。GNN作为相关研究的关键技术,被主要运用于包括中医药知识图谱构建、患者意图识别、中药处方推荐等多个方面。在此基础之上,李书晨[42]运用生成对抗网络与增量更新图指针网络这两种特殊GNN提升了计算效率和生成处方的准确度。周开元[43]与中医诊断相结合,设计了一种基于图神经网络和强化学习的中医处方对话推荐方法,通过多轮对话交互,模拟中医的"望闻问切"诊断流程,实现有导向性的症状询问和中药推荐。耿佳豪[44]引入了图注意力机制,增强了模型在预测时对知识图谱中结构化知识的运用与考虑。饶玉龙[45]设计了一种基于GNN的多层信息融合机制,通过多层感知机融合不同层次的图神经网络训练得到的信息,能够获得更丰富、更准确的节点特征表示,进而提升模型的有效性与先进性。陈燕[46]为模型添加了方剂智能评价机制,实现了对方剂治疗效果的客观评价。徐文萱[47]通过多头注意力机制和图神经网络结合的方式,实现了知识图谱特征与推荐系统的融合,提升了方剂推荐的精度与可解释性。张舒菡[48]针对现有研究中临床诊疗语义信息常被忽略的问题,提出了融合语义信息与结构信息的处方推荐方法。靳远远[49]构建了中西医结合知识图谱,搭建了中西医多视角药方推荐系统,提升了系统的应用观广度与推荐准确性。除此之外,黄佳胤[50]注重病证、证候和中药之间的关系,建立了基于证候感知的中药推荐模型,模拟了中医辨证论治的过程。李春雨[51]专注于方剂中补益剂与补益类中药的研究,构建了针对补益类药物的基于多图卷积的处方推荐系统。李升圆[52]设计了基于多图卷积网络的中药推荐模型,将患者个体特征与中药特征相关联,有效解决了以往模型中患者个体属性缺失的问题。赵文[53]建立了基于《伤寒论》的电子诊疗数据集,并构建了一种基于多图神经网络的中医智能诊疗模型,能够有效模拟《伤寒论》的诊疗思维与逻辑规律。通过上述研究不难看出,在人工智能处方领域运用GNN技术的研究与探索已经相当广泛且普遍,并在部分问题与难点上进行了深入研究。然而上述系统多数都着力于症状-药物对应,颇有些"头痛医头,脚痛医脚"的意思,对中医学的辨证论治与整体观念关注不足,缺乏中医思维。且在药物配伍上缺乏深入,各项研究内容也缺乏整合,因此一定程度上影响了研究的实用性与先进性。

1.2.2 方剂研究 作为方剂学的另一项重要内容,对方药本身的配伍、用法、药量、剂型、功效等进行研究也是学科的重点。基于此,刘佳俊[54]设计了一种基于多层特征融合与网络加权的GCN的药性-功效预测模型,能够较为准确地预测方剂功效,为分析方剂配伍与中医理论提供了新的思路与途径。刘世雄[55]聚焦于方剂的煎服方法,运用异构图神经网络构建了包含2000余首方剂,9种服药实体的共计21 609个关系对的中药用药知识库,既对多数经典古方的煎服方法进行了梳理,又能够帮助患者合理用药,实现了研究价值与临床价值的统一。然而相较于结合GNN的处方推荐系统的开发与构建,此类研究开展时间较短,研究深度较浅,研究内容尚不够丰富,有待于未来进一步充实提升。

1.3 中药学

随着近年来中药药理学、网络药理学等相关领域的发展,中药现代化、智能化的程度不断加深,中药研究对深度学习的需求也持续提高,GNN在复杂数据处理中的优势与中药多成分、多靶点的特点完美契合,成为包括中药靶点预测、活性成分分析、毒性毒理预警[56]等研究中首选的人工智能神经网络模型。如段鹏博[57]搭建了一种融合GNN和知识预训练的中药靶点关系预测框架;龚倬[58]提出了一种基于知识图谱和关系路径网络的中药复方标靶预测模型。两者都能够对中药靶点进行高效预测,并通过实验证明了其模型的优越性与可靠性,为中药药理学研究与揭示中药-靶点-疾病的潜在关系提供帮助。杜梦妍[59]与刘葛安旗[60]分别构建了融合网络药理学与图自编码器/融合GCN与GAT的中药-靶点相互作用模型,均在测试中取得了良好的效果。李玉明[61]通过GNN构建了一个包含中药分子、西药分子、靶标、通路和基因的异质网络,并运用网络表示学习对药对中的活性成分群进行预测,有助于提升对中药活性成分进行筛选的效率。朱润[62]利用GNN从构建的中药异质信息网络中学习药方和疾病的嵌入表示,提取高层结构与语义关系,进而对药方与疾病间的潜在关系进行预测,协助中药重定位的相关研究。综上所述,GNN在中药学研究中发挥着相当关键的作用,相关成果不断赋能中药现代化进程,为该领域研究助力颇多。

1.4 其他学科

除开上述学科,GNN也在中医药其他领域的研究中发挥了重要作用,如张乃心[63]提出了基于知识图谱和关联依据建模的中医症状-基因预测模型,并在此基础上引入了超图卷积模块,有效提升了模型性能,有助于挖掘中医症状与基因的潜在关联模式,为相关研究提供便利。赵宇丹[64]将GNN运用于中医体质学领域,结合眼部特征建立了基于注意力机制的GCN体质分类模型,并通过实验证明了该模型的有效性。何继宇[65]运用GCN对针灸治疗中采用的针刺手法进行量化、识别与预测,可以有效辅助学生对针刺手法与手指运动规律的学习。吴思佳等设计了一种基于图像融合和注意力机制的手部穴位检测方法,运用GNN进行手部穴位的识别与检测,能够提升手部穴位的定位精度。这些研究拓展了GNN在中医药领域的作用与应用范围,为后续研究的展开与深入奠定了基础[66]。

1.5 专病研究

在聚焦于学科领域的运用GNN的研究取得成果的同时,针对专门疾病的中医学相关的基于GNN技术的研究也取得了长足发展。如杜梦男[67]运用GCN建立了面向中医脑瘤医案知识图谱的链接预测模型,有助于相关知识图谱的搭建、完善与应用。刘雪丽[68]提出了一种基于多方嵌入的逐步实体对齐方法,能够将多个心血管疾病的中医知识图谱进行融合,而对GCN的应用有助于提高实体对齐任务的准确性,进而提高心血管领域中医知识图谱的科学性、先进性与全面性。耿介[69]设计了一种基于GNN的针对慢性阻塞性肺疾病(Chronic Obstructive Pulmonary Disease,COPD)的证型分类与处方推荐系

统。颜兴宇[70]通过运用GCN与GAT对COPD的中药与症状数据进行训练学习,将COPD中医临床诊治数据划分为七类症状群和七类中药组,并通过真实世界检验表明其对患者的证治分析具有较高的准确度,这些研究能够为COPD的中医智能诊疗提供辅助与支持。陈永波[71]构建了一种基于度和信息熵的图注意力网络的中医立法模型,对慢性肾小球肾炎的中医治法进行预测,准确度达到了82.15%。许鸿本[72]构建了一种基于图神经网络的便秘健康管理模型,该模型能够预测便秘患者的证型,并提供相应的健康管理方案。上述研究针对病种单一,研究程度深刻,在其专科领域往往能够发挥较好的作用,然而总研究数量较少,仍有许多疾病的中医智能诊疗可以采用类似的思路进行探索,有待于未来的进一步研究。

2 刻下问题与前景展望

从已有研究来看,目前中医学界对GNN的探索与运用仍存在不足,主要包含以下几个方面:(1)研究内容较为集中在如处方推荐、靶点预测等领域,研究同质化明显。(2)医学知识数据集在医学领域深度学习中起着重要作用,然而目前缺乏高质量的中医数据集,在研究中研究人员往往采用自己构建中医数据集的方式进行替代,不论是数据量还是严谨程度都会受到影响。(3)由于研究人员学科背景的影响,部分研究忽略了中医学的学科属性与逻辑思维,导致结果与临床有所偏差。(4)相关研究缺乏真实世界检验,临床转化率不高。多数研究的成果检测都是通过数据模拟的形式,在临床实践方面有所缺失,无法保证研究的切实有效。

然而瑕不掩瑜,GNN作为一种近年来新兴的人工神经网络,在近年来的深度学习研究中扮演了不可或缺的角色。其在处理非欧数据与复杂数据中的优越性能使其在医学领域应用广泛[73],同时也在中医学领域的研究中发挥了重要作用。GNN自身也具备蓬勃的生命力,其模型的创新与应用领域的拓展层出不穷,具有广泛的研究前景,因此,坚持对GNN的探索、应用与研究对中医药智能化、现代化大有裨益。解决中医学领域结合GNN相关研究中的技术难题,完成对上述问题的修复与改进,推进GNN赋能中医智能诊疗是推进中医药客观化进程,实现中医药行业良性发展,传承创新的必经之路。

参考文献

[1] SIMONYAN K, ZISSERMAN A. Very deep convolutional net - works for large - scale image recognition[J]. ArXiv Preprint ArXiv, 2014, 2014:1556.
[2] GOLDBERG Y. A primer on neural network models for natural language processing[J]. Jair, 2016, 57:345 - 420.
[3] YING R, HE R N, CHEN K F, et al. Graph convolutional neural networks for web - scale recommender systems[C]//Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery&Data Mining. London: ACM, 2018:974 - 983.
[4] 孙志远,鲁成祥,史忠植,等. 深度学习研究与进展[J]. 计算机科学,2016,43(2):1 - 8.
[5] GU J X, WANG Z H, KUEN J, et al. Recent advances in convolutional neural networks[J]. Pattern Recognit, 2018, 77:354 - 377.
[6] MEDSKER L R, JAIN L C. Recurrent neural networks[J]. Design and Applications, 2001, 5:64 - 67.
[7] GOODFELLOW I, POUGET - ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial networks[J]. Commun ACM, 2020, 63(11): 139 - 144.
[8] 侯磊,刘金环,于旭,等. 图神经网络研究综述[J]. 计算机科学,2024,51(6):282 - 298.
[9] GORI M, MONFARDINI G, SCARSELLI F. A new model for learning in graph domains[C]//Proceedings of 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks. Montreal, QC: IEEE, 2005: 729 - 734.
[10] SCARSELLI F, GORI M, TSOI AC, et al. The graph neural network model[J]. IEEE Trans Neural Netw, 2009, 20(1):61 - 80.
[11] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs[C]. Banff: Proceedings of the 2nd International Conferenceon Learning Representations, 2014.
[12] VELICKOVIC P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[C]. Vancouver: In Proceedings of 6th International Conference on Learning Representations, 2018:1 - 12.
[13] LI C, WELLING M, ZHU J, et al. Graphical generative adversarial networks[C]. Montreal: Proceeding of the 32nd Conference on Neu - ral Information Processing Systems, 2018:6072 - 6083.
[14] LI Y, TARLOW D, BROCKSCHMIDT M, et al. Gated graph sequence neural networks[J]. arXiv preprint arXiv: 2015, 2015:1511.
[15] 国务院办公厅关于印发中医药振兴发展重大工程实施方案的通知[EB/OL]. (2023 - 02 - 28)[2024 - 04 - 28]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2023 - 02/28/content_5743680.htm.
[16] 国务院关于印发新一代人工智能发展规划的通知[EB/OL]. (2017 - 07 - 20)[2024 - 04 - 28]. https://www.gov.cn/zhengce/content/2017 - 07/20/content_5211996.htm.
[17] 杨涛,朱学芳. 中医辨证智能化研究现状及发展趋势[J]. 南京中医药大学学报,2021,37(4):597 - 601.
[18] 高婉卿,程宁,李力松,等. 机器学习在方剂研究中的应用概述[J]. 中国中医药信息杂志,2021,28(6):131 - 137.
[19] 梁吉,韩名媛,王承斌,等. 机器学习与针灸学领域结合的研究进展[J]. 针刺研究,2021,46(6):460 - 463.
[20] 杨杰,牛欣,徐元景,等. 中医诊断信息数字化发展[J]. 中医药学刊,2006,24(5):810 - 812.
[21] 郭振球. 中医辨证学与人工智能[J]. 中医药信息,1986,3(5): 6 - 8.
[22] 魏善初,曹树元,朱祝生. 试论中医现代化的三项具体内容[J]. 上海中医药杂志,1981,15(6):27.
[23] 佘楷杰,袁芳君,马庆宇,等. 机器学习驱动中医诊断智能化的发展现状、问题及解决路径[J]. 中国中医基础医学杂志,2024, 30(3):398 - 406.
[24] 张姣,邵立江,乔琛,等. 深度学习在医学影像研究中的应用[J]. 数学建模及其应用,2023,12(3):15 - 32.
[25] 李恒信. 基于图神经网络的医学图像诊断分析[D]. 成都:电子科技大学,2023.
[26] 丁峻鹏. 基于图神经网络的眼底医学影像多标签病征分类模型的研究与实现[D]. 北京:北京邮电大学,2023.

[27] 杭州电子科技大学. 一种基于人工智能的舌诊图像识别方法: CN202110302081.0[P]. 2021-07-16.
[28] 海南榕树家信息科技有限公司. 一种基于医学图像分割的中医舌像智能辨治方法及系统: CN202210780260.X[P]. 2024-05-03.
[29] 盛瑜. 基于卷积神经网络的寻常痤疮中医证型诊断模型与红外热成像影响因素研究[D]. 成都: 成都中医药大学, 2023.
[30] 曹紫嫣. 基于卷积神经网络的高血压病肝火亢盛证面部图像诊断模型研究[D]. 北京: 中国中医科学院, 2022.
[31] MENG Y, WU W, WANG F, et al. Glyce: Glyph-vectors for chinese character representations[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2019, 32(4): 8-12.
[32] 余浩. 面向医疗领域的中文分词研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2022.
[33] 平安科技(深圳)有限公司. 中医术语识别方法、装置、设备及存储介质: CN202310622149.2[P]. 2023-5-30.
[34] LIU Z, PENG E, YAN S, et al. T-Know: a knowledge graph-based question answering and information retrieval system for Traditional Chinese Medicine[C]. Santa Fe: In Proceedings of the 27th International Conference on Computational Linguistics, System Demonstrations, 2018: 15-19.
[35] MIAO F, WANG X T, ZHANG P, et al. Question-answering system based on the knowledge graph of traditional Chinese medicine[C]// 2019 11th International Conference on Intelligent Human-Machine Systems and Cybernetics (IHMSC). Hangzhou: IEEE, 2019: 264-267.
[36] ZOU Y, HE Y, LIU Y. Research and implementation of intelligent question answering system based on knowledge Graph of traditional Chinese medicine[C]//2020 39th Chinese Control Conference (CCC). Shenyang: IEEE, 2020: 4266-4272.
[37] 吕颖. 面向中医问答的知识图谱构建及问题表示算法研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2020.
[38] 杨世刚. 基于循环神经网络的中医问答模型研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2023.
[39] 李杨辉. 基于知识指导的智能问诊研究与实现[D]. 广州: 华南理工大学, 2021.
[40] 李明欢. 中医领域知识驱动的智能辅助诊断方法[D]. 广州: 华南理工大学, 2023.
[41] 李冀. 方剂学[M]. 2 版. 北京: 中国中医药出版社, 2016: 1.
[42] 李书晨. 基于知识图谱的中药药方推荐方法研究与实现[D]. 南京: 东南大学, 2022.
[43] 周开元. 基于图神经网络的中医处方对话推荐[D]. 广州: 广州大学, 2023.
[44] 耿佳豪. 基于深度学习的中医智能处方的研究与应用[D]. 哈尔滨: 黑龙江大学, 2024.
[45] 饶玉龙. 基于图神经网络多层信息融合以及知识驱动的中医处方推荐算法研究[D]. 昆明: 云南大学, 2022.
[46] 陈燕. 基于图神经网络与知识图谱的诊疗规则挖掘与智能推荐的研究[D]. 南京: 南京中医药大学, 2022.
[47] 徐文萱. 基于知识图谱的中医智能诊疗方法研究[D]. 洛阳: 河南科技大学, 2023.
[48] 张舒菡. 基于图表示学习的中医处方推荐方法研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2023.
[49] 靳远远. 基于图神经网络的中医药方推荐技术研究[D]. 上海: 华东师范大学, 2022.
[50] 黄佳胤. 融合证候信息的中医药方推荐技术[D]. 上海: 华东师范大学, 2023.
[51] 李春雨. 基于知识图谱的补益剂推荐方法的研究[D]. 兰州: 甘肃中医药大学, 2024.
[52] 李升圆. 融合个体特征的中医药方推荐技术[D]. 上海: 华东师范大学, 2022.
[53] 赵文. 基于中医状态辨识的《伤寒论》诊疗思维与逻辑及智能诊疗模型研究[D]. 福州: 福建中医药大学, 2021.
[54] 刘佳俊. 基于图神经网络的方剂功效分析[D]. 长沙: 湖南中医药大学, 2023.
[55] 刘世雄. 基于中医药文本的用药知识发现与知识库建立研究[D]. 南昌: 江西中医药大学, 2023.
[56] 颜彩琴, 范睿琦, 宁雨坪, 等. 深度学习模型在中药毒性预警中的应用和前景[J]. 中国药理学与毒理学杂志, 2022, 36(3): 231-240.
[57] 段鹏博. 结合知识图谱与图神经网络的中药靶点预测研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2023.
[58] 龚倬. 基于知识图谱的中药复方靶标预测模型研究与实现[D]. 南京: 东南大学, 2021.
[59] 杜梦妍. 融合中药网络药理学与图自编码器的靶点相互作用预测方法研究[D]. 长春: 长春工业大学, 2024.
[60] 刘葛安旗. 融合图和序列特征的中药成分靶点相互作用预测方法研究[D]. 长春: 长春工业大学, 2024.
[61] 李玉明. 基于异质网络的药对经典名方活性成分群预测方法研究与实现[D]. 南京: 东南大学, 2022.
[62] 朱润. 基于异质网络表示学习的中药药方重定位方法研究与实现[D]. 南京: 东南大学, 2022.
[63] 张乃心. 基于知识图谱的中医症状基因预测模型研究[D]. 南京: 东南大学, 2023.
[64] 赵宇丹. 基于图神经网络的中医体质分类方法研究[D]. 廊坊: 北华航天工业学院, 2023.
[65] 何继宇. 基于空间多尺度运动特征交互融合的针刺手法识别方法[D]. 北京: 北京化工大学, 2024.
[66] 电子科技大学. 一种基于图像融合和注意力机制的手部穴位检测方法: CN202410242704.3[P]. 2024-04-19.
[67] 杜梦男. 名老中医诊治脑瘤的知识图谱学习和推理算法研究[D]. 南京: 南京中医药大学, 2024.
[68] 刘雪丽. 基于表示学习的心血管疾病中医知识图谱融合研究[D]. 兰州: 甘肃中医药大学, 2024.
[69] 耿介. 基于图神经网络的慢性阻塞性肺疾病中医智能诊疗研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2022.
[70] 颜兴宇. 基于多元知识结构的慢性阻塞性肺疾病诊治分析模型研究[D]. 武汉: 湖北中医药大学, 2023.
[71] 陈永波. 基于机器学习的慢性肾小球肾炎中医辅助诊疗模型研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2022.
[72] 许鸿本. 便秘中医健康管理模型构建研究[D]. 福州: 福建中医药大学, 2022.
[73] 王瑞松, 王胜男, 石铁流. 深度学习在生物医学领域中的应用简介[J]. 中国科学: 生命科学, 2025, 55(6): 1268-1287.