

引用:赵紫一,丁长松.融合多视图图对比学习的中医脑卒中个性化处方推荐模型[J].中医药导报,2025,31(4):231-237.



融合多视图图对比学习的中医脑卒中个性化处方推荐模型^{*}

赵紫一¹, 丁长松^{1,2}

(1.湖南中医药大学信息科学与工程学院,湖南 长沙 410208;

2.湖南省中医药大数据分析实验室,湖南 长沙 410208)

[摘要] 目的:基于真实世界脑卒中临床数据,构建一种融合多视图图对比学习(MVCL)的个性化处方推荐模型。方法:根据脑卒中病例临床数据集建模多图结构,并融合中药属性及症状语义信息,以获得具有中医特征的节点嵌入向量。随后提出一种相似视图生成器用于视图增强,并在症状空间与中药空间分别开展局部对比学习,从而使模型能够更深入地挖掘数据中的配伍规律,提升处方推荐的准确性。结果:脑卒中数据集对比实验结果表明,相较于性能较优的SMRGAT, MVCL在Precision@5、Recall@5和F1-Score@5指标上分别提升了5.01%、5.43%和5.30%。公共数据集(PTM)对比实验结果表明,MVCL在Precision@5、Recall@5和F1-Score@5指标上分别提升了7.92%、9.94%和9.08%。结论: MVCL模型在推荐准确性和模型泛化能力方面均展现优势,为中医脑卒中的辅助诊疗决策提供了更可靠的支持及新的研究思路。

[关键词] 脑卒中;中医处方推荐;推荐模型;多视图;图对比学习;辅助诊疗

[中图分类号] R2-03 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1672-951X(2025)04-0231-07

DOI:10.13862/j.cn43-1446/r.2025.04.044

A Personalized Prescription Recommendation Model for Stroke in Traditional Chinese Medicine by Integrating Multi-View Graph Contrastive Learning

ZHAO Ziyi¹, DING Changsong^{1,2}

(1.School of Informatics, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha Hunan 410208, China; 2.Hunan Province Traditional Chinese Medicine Big Data Analysis Laboratory, Changsha Hunan 410208, China)

[Abstract] Objective: To construct a personalized prescription recommendation model that integrates multi-view graph contrastive learning (MVCL) based on real-world stroke clinical data. Methods: The stroke clinical dataset is modeled as a multi-graph structure, combining the properties of traditional Chinese medicine (TCM) and symptom semantic information to generate node embeddings with TCM characteristics. Subsequently, a similar view generator is proposed for view augmentation, and local contrastive learning is conducted separately in the symptom space and the TCM space to enable the model to uncover the compatibility patterns in the data better, thereby improving the accuracy of prescription recommendation. Results: The results of the comparative experiment on the stroke dataset show that compared with the relatively better performing SMRGAT, MVCL has improved by 5.01%, 5.43%, and 5.30% respectively in the Precision@5, Recall@5, and F1-Score@5 indicators. The results of the comparative experiment on the public dataset (PTM) show that MVCL has improved by 7.92%, 9.94%, and 9.08% respectively in the Precision@5, Recall@5, and F1-Score@5 indicators. Conclusion: The MVCL model shows advantages in both the accuracy of recommendation and the generalization ability of the model, providing more reliable support and new research ideas for the auxiliary diagnosis and treatment decision-making of stroke in traditional Chinese medicine.

[Keywords] stroke; prescription recommendation in traditional Chinese medicine; recommendation model; multi-view; graph contrastive learning; auxiliary diagnosis and treatment

*基金项目:湖南省中医药管理局重点课题(A2024011);湖南省自然科学基金项目(2023JJ60124);湖南省教育厅科学研究重点项目(22A0255);长沙市自然科学基金项目(kq2202265)

通信作者:丁长松,男,教授,研究方向为中医药信息学和机器学习

临床医案蕴藏了丰富的临床配伍规律,这些规律能够为医生提供循证决策的锚点^[1]。作为人工智能在中医领域的应用之一,处方推荐^[2-3]能通过对临床医案的自动化分析,挖掘出潜在的配伍规律,根据患者的具体症状智能匹配最合适的中药组合,从而为中医临床提供精准、个性化的决策支持。然而,临床数据集往往面临数据量不足、数据分布不均衡等问题,导致传统推荐模型难以从有限的数据中学习到足够的配伍规律,进而影响推荐的准确性和全面性。近年来,图对比学习^[4-5]被证明即使在数据稀缺的情况下,也能通过图结构建模和自监督学习有效提取出数据中的潜在规律。基于这一优势,本研究提出了一种多视图图对比学习(multi-view graph contrastive learning, MVCL)框架。该框架分别在中药和症状两个层面进行局部对比学习,从而帮助模型学习更丰富的特征表示。

本研究基于收集的脑卒中临床数据,首先将中药属性和症状语义进行初始化表征,然后将中药和症状之间关系进行图结构建模,并构建了融合图对比学习、图神经网络和自注意力机制等技术的MVCL框架,旨在更好地从脑卒中临床数据集中挖掘潜在的配伍规律进行处方推荐任务,起到辅助诊断和决策支持的作用。

1 资料与方法

1.1 研究流程 研究流程见图1。

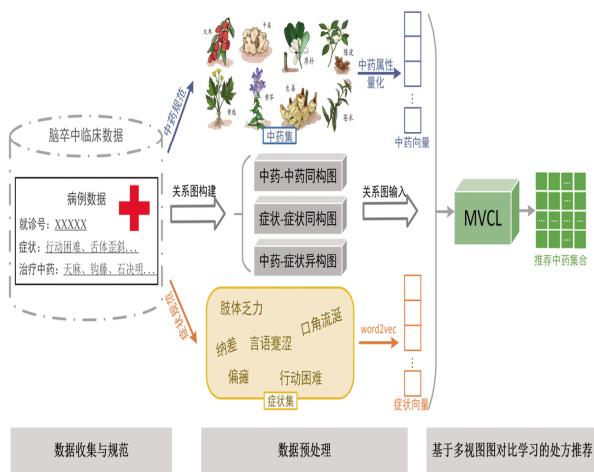


图1 研究流程图

1.2 数据来源 7 224例脑卒中病例数据来源于湖南中医药大学第一附属医院的病例数据库,采集时间范围为2015年11月至2023年1月。数据采集过程中严格遵循隐私保护原则,未收集患者的个人隐私信息,仅采集就诊号作为唯一标识,以及中西医诊断信息和中医处方的关键字段,以确保数据的安全性和研究分析的完整性。本研究已通过湖南中医药大学第一附属医院伦理委员会审查(HN-LL-LW-2025-016)。为验证本研究所提出模型的泛化性能,额外纳入中医方剂公共数据集PTM^[6],该标准化数据集收录方剂33 765首。PTM为公共数据集,可直接用于模型验证无需二次处理。脑卒中数据为医院临床记录的病例数据,需进一步规范化处理。

1.3 脑卒中数据筛选 (1)出院诊断中中医诊断为“中风”,

或者西医诊断为“脑卒中/脑梗塞/脑梗死”的患者。(2)剔除患有其他重大疾病或严重感染者。(3)患者有接受中医或中西医结合治疗。(4)病历资料完整(诊断、西药及剂量、中药及剂量等)。

1.4 脑卒中数据的术语规范 中药名称、症状名称分别参照2020年版《中华人民共和国药典》^[7]和2005年版《中医常见症状术语规范》^[8]中的有关标准进行规范和统一。如中药“川红花”规范为“红花”,症状“半身不遂”规范为“偏瘫”。

1.5 数据预处理与关系图构建

1.5.1 中药与症状特征向量初始化 中药的性、味、归经等属性是对药物作用方向的一种概括和分类^[9]。利用这些属性构建中药向量,不仅可以在数据层面丰富中药的特征表征,而且能让模型更紧密地贴合中医理论。因此,本研究基于本课题组前期研究^[10],将中药属性进行量化构建药向量。同时利用Word2vec^[11]对症状进行特征初始化。

1.5.2 中药、症状关系图构建 症状与中药可以被抽象为图结构,这种结构能够有效地建模和分析处方中症状与中药之间的相互作用关系。利用处方中症状和中药的共现关系,可构建症状-中药异构图(SH-HG)。基于处方中中药之间及症状之间的共线关系,分别能构建中药-中药同构图(HH-IG)和症状-症状同构图(SS-IG)。图的构建公式见公式(1),其中 $CoO(x,y,p)=1$ 表示在处方 P 中中医实体 x 和 y 存在共现关系。

$$Graph = \begin{cases} 1 & CoO(x,y,p) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

1.6 问题定义 处方推荐任务的目标是根据患者的症状,在遵循中医配伍原则的前提下,推荐最合适的中药组合。现有的处方数据集中包含 M 个症状和 N 个中药。症状集合为 $S=\{s_i, 1 \leq i \leq M\}$, 中药集合为 $H=\{h_j, 1 \leq j \leq N\}$ 。对于每个患者的症状集 $s_set \subseteq S$, 有一个对应的中药集合 $h_set \subseteq H$, 定义为处方 $P=(s_set, h_set)$ 。处方推荐任务是根据患者的症状 s_set , 从中药集合中推荐一组中药 h_set' , 为最佳治疗患者并且与 h_set 差异最小。

模型的输入为症状集合 S 、中药集合 H 和 处方集合 P , 模型训练的目标是训练一个预测函 $\hat{y}_{s_set}=f(s_set, H | \theta)$, 其中 $f(\cdot)$ 是处方推荐模型, θ 是模型训练时的参数。经过训练后, 模型的输出 \hat{y}_{s_set} 是一个 N 维向量, 每一维表示中药 h_i 治疗 s_set 的概率。

2 模型设计与方法

模型的主要结构见图2。模型构建过程可分为3部分。(1)相似视图生成器: 在SH-HG视图中, 通过多头注意力机制(MH_GAT)^[12]学习症状和中药的表示, 然后使用余弦相似度方法生成相似性视图。(2)局部对比学习: 首先使用MH_GAT对构建的多个视图进行编码, 然后在中药和症状的层面分别进行局部对比学习, 以学习更具判别性的中药和症状节点表示。(3)嵌入融合和预测层: 通过自注意力机制融合从各个视图学习到的特征, 并将融合得到的症状特征与中药特征进行交互, 以预测最终分数。

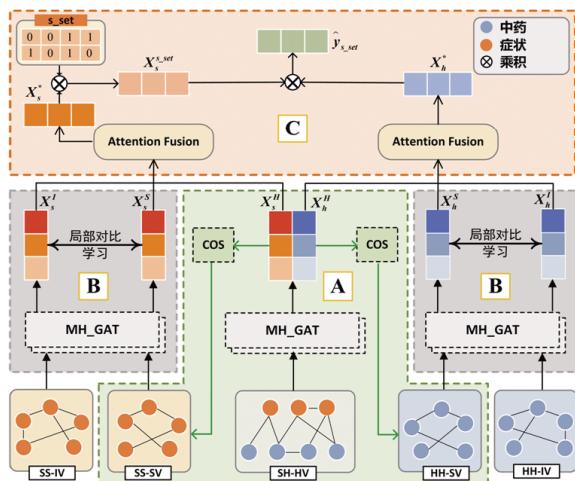


图2 MVCL模型结构图

2.1 相似视图生成器 首先在SH-HV图上采用MH_GAT捕捉节点之间的关系,从而获得更为细粒度的症状和中药向量表示: $(x_h^H, x_s^H) = \text{MH_GAT}(h_i, s_j, \text{SH-HV})$ 。相似的特征向量通常具有相似的语义相关性,也意味着它们可能具备类似的作用机制^[13]。然后通过余弦相似度(COS)计算,找出每个节点特征向量最相似的Top-K个节点,并将这些节点连边构建出相似性视图。

以生成中药-中药相似性视图(HH-SV)为例,余弦相似度的计算公式如公式(2)所示。基于计算得到的中药节点间相似性值,为每个节点选取Top-K个最相似的节点,并将它们连接构建HH-SV视图[公式(3)所示]。同理,通过相同的操作,也可得到症状-症状相似性视图(SS-SV)。

$$s(x_{h_i}^H, x_{h_j}^H) = \frac{(x_{h_i}^H)^T x_{h_j}^H}{\|x_{h_i}^H\| \|x_{h_j}^H\|} \quad (2)$$

$$\text{HH-SV} = \begin{cases} 1, & j \in \text{topk}(S_i) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

2.2 图对比学习

2.2.1 图编码 基于图增强模块生成的HH-SV和SS-SV,以及构建的HH-IV和SS-IV,使用MH_GAT进行编码嵌入,学习得到相似图中药嵌入 x_h^* ,相似图症状嵌入 x_s^* ,同构图中药嵌入 x_h' ,以及同构图症状嵌入 x_s' 。

2.2.2 局部对比学习 本研究在症状层面和中药层面分别构建了局部对比学习任务。以中药层面为例,将HH-SV和HH-IV两个视图中相同节点视为正对,而将其他节点视为负样本。(见图3)通过明确正负样本的定义,并采用对比学习损失函数进行训练,模型能够进一步强化中药向量的表达能力。判别器用于衡量不同样本之间的相似性和差异性,定义判别器 θ 见公式(4)。

$$\theta(x_{h_i}^s, x_{h_i}^l) = s[p(x_{h_i}^s), p(x_{h_i}^l)] \quad (4)$$

其中 s 是余弦相似度, p 是非线性映射。映射 p 使用两层多层感知器(MLP)实现。然后根据定义的正样本和负样本有以下对比损失:

$$\varphi_{pos} = e^{\theta(x_{h_i}^s, x_{h_i}^l)/\tau} \quad (5)$$

$$\varphi_{neg} = \sum_{k \neq i} e^{\theta(x_{h_i}^s, x_{h_k}^l)/\tau} + \sum_{k \neq i} e^{\theta(x_{h_i}^l, x_{h_k}^l)/\tau} \quad (6)$$

$$\mathcal{L}^h = -\log \frac{\varphi_{pos}}{\varphi_{pos} + \varphi_{neg}} \quad (7)$$

其中, τ 是温度系数, φ_{pos} 为正样本对,而负样本对则可以来自两个来源:视图间节点或视图内节点。 φ_{neg} 的第一项和第二项分别为视图间节点和视图内节点负样本对。最后得到中药的对比损失 L^h ,以及症状对比损失 L^s 。

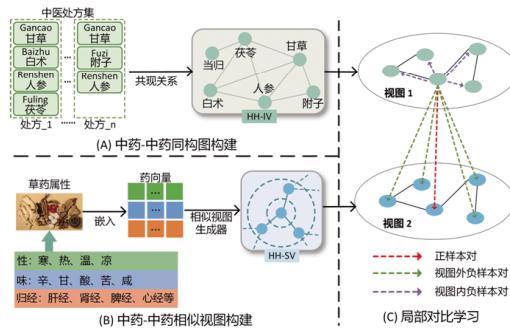


图3 中药层面局部对比学习

2.3 特征融合和预测层 经过MH_GAT传播层的学习及对比学习任务后,得到优化后从各个视图学习的向量表示。使用一种无监督自注意力机制^[14]对各个视图学习的向量进行融合。以中药视图为例,用计算出的各个视图注意力权重 $Att(i)$ 对特征向量进行加权平均,得到中药特征的最终表示: $x_h^* = \sum_{i \in n} Att(i)x_{h_i}^i$ 。症状特征的最终表示: $x_s^* = \sum_{i \in n} Att(i)x_s^i$ 。

由于每个处方实例 P 是由一组症状集 s_{set} 表示,如果仅仅将 s_{set} 中的症状向量进行简单线性相加,则无法准确捕捉症状之间的相互作用和内在关联。因此本研究通过一个MLP以获取更具表现力的综合特征表示[见公式(8)]。在获得每组症状的表征后,计算所有中药都能治愈该症状组的概率[见公式(9)]。

$$x_{s_{set}} = \text{ReLU}[W^T(x_s^* * s_{set}) + b] \quad (8)$$

$$\hat{y}_{s_{set}} = x_{s_{set}} \cdot x_h \quad (9)$$

在计算出最终预测结果后,使用二元交叉熵(BCE)损失函数 \mathcal{L}^{BCE} 对模型进行优化[见公式(10)]。其中, X 表示训练样本集, N 表示中药的数量。对于给定的样本 x , $y_i(x)$ 表示第*i*类的真实标签,而 $\hat{y}_i(x)$ 表示该类别的预测概率。最后,联合优化总损失函数 \mathcal{L} ,该损失函数由 \mathcal{L}^{BCE} 及对比损失 \mathcal{L}^h 和 \mathcal{L}^s 组成,其表达式如公式(11)所示。

$$\mathcal{L}^{BCE} = -\sum_{x \in X} \sum_{i=1}^N y_i(x) \log [\hat{y}_i(x)] \quad (10)$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}^{BCE} + \lambda_1(\mathcal{L}^h + \mathcal{L}^s) + \lambda_2 \cdot \|\theta\|_2^2 \quad (11)$$

其中, Θ 表示模型参数集合,超参数 λ_1 用于调节局部对比损失的影响,而 λ_2 则作为应用于 Θ 的 \mathcal{L}_2 正则化系数。

3 结 果

3.1 数据概况 为了充分验证模型的有效性和泛化性,在脑卒中和PTM两个数据集进行定量实验。其中脑卒中数据经数据处理后含2 572例患者、375个症状、356种中药,且覆盖了气虚血瘀证、痰瘀互结证和肝阳上亢证等脑卒中主要证型。PTM数据集包含33 765首方剂、390种症状和805种中药。两个数据集被分为3个子集,即训练集、验证集和测试集,分割比为6:2:2。

3.2 实验设置

3.2.1 评估指标 本研究使用Precision@K、Recall@K和F1-Score@K来评估MVCL的性能。其定义如下式所示;Precision@K衡量模型预测的前K个中药中实际正确的比例;Recall@K衡量实际正确的中药中,有多少被模型成功预测出来;F1-Score@K则是一个综合评价指标,将精度和召回率相结合,从而在考虑预测准确性与覆盖率的基础上,衡量模型的整体性能。在这些定义中, $f^K(s_set)$ 表示模型针对输入症状集合 s_set 预测的前K个中药,而 h_set 表示实际用于治疗该症状集的中药。在实验中,K表示推荐中药的数量,其取值为{5,10,20}。

$$\text{Precision}@K = \frac{|f^K(s_set) \cap h_set|}{|K|} \quad (12)$$

$$\text{Recall}@K = \frac{|f^K(s_set) \cap h_set|}{|h_set|} \quad (13)$$

$$\text{F1-Score}@K = \frac{2 \cdot \text{Precision}@K \cdot \text{Recall}@K}{\text{Precision}@K + \text{Recall}@K} \quad (14)$$

3.2.2 比较模型 为验证MVCL的有效性,本研究将其与以下方法进行对比分析。LightGCN^[15]是经典的推荐模型;MH_GAT作为基础嵌入层,其单独评估可确定性能下界;SMGCN^[16]和KDHR^[6]是广泛采用的经典处方推荐模型,通常用作基准比较模型;SMRGAT^[17]则代表了当前处方推荐研究领域中的最先进模型。

LightGCN^[15]:通过构建症状-中药相互作用矩阵并执行线性传播来应用它来学习症状和中药的嵌入。

MH_GAT^[12]:构建了症状-中药交互矩阵,并应用图注意力网络学习症状和中药的嵌入表示。

SMGCN^[16]:构建了一个多图图卷积模型用于特征提取,

并通过MLP层从症状组中归纳出证候。

KDHR^[6]:构建了一个整合中药属性的知识图谱,以获取中药的特征信息,并在S-S、S-H和H-H图上应用卷积运算,分别获得症状和中药特征。

SMRGAT^[17]:是一种多图中药推荐模型,首先对中药和症状进行嵌入预训练,然后通过残差注意力传播层在多个图中学习中药症状之间潜在关系。

3.2.3 实验与参数设置 本研究使用PyTorch 3.7实现MVCL及所有基准模型,运行环境为配备Intel(R) Core(TM) i5-12500H CPU和GeForce RTX 3060 GPU的计算机。所有模型的嵌入维度均固定为100,并使用Adam优化器进行训练。学习率在 10^{-4} 到 10^{-2} 范围内调整,MH_GAT层的深度从{1,2,3}中选择,批量大小(batchsize)设定为{128,256,512}。dropout率固定为0.6。

3.3 结果分析 本节首先报告各方法在两个数据集上的性能表现。随后,通过消融分析探讨各个模块的有效性。最后,进行案例分析并给出总结。

3.3.1 对比实验分析 表1中显示了各方法在两个数据集上的性能表现。所提出的MVCL模型在所有指标上均取得了更优的表现。在脑卒中数据集上,相较于性能最佳的SMRGAT模型,MVCL在Precision@5、Recall@5和F1-Score@5指标上分别提升了5.01%、5.43%和5.30%。在PTM数据集上,该模型在这3项指标上的提升幅度分别为7.92%、9.94%和9.08%。

相比之下,LightGCN和MH_GAT由于未考虑症状-症状及中药-中药之间的关系,导致模型性能欠佳。SMGCN、KDHR和SMRGAT通过构建多图结构,并在图上应用图神经网络或图卷积网络来学习中药与症状的节点表示,在一定程度上取得了良好的效果,但整体表现仍不及MVCL。表明本研究提出的MVCL框架通过对比学习引入无监督任务来辅助推荐任务,使模型能够学习到更具判别力的嵌入表示,从而在推荐效果上取得更优的表现。

3.3.2 消融实验分析 MVCL模型主要由相似性视图生成模块、局部对比学习模块及注意力机制融合模块3个核心组件组成。为验证各模块的贡献,本研究将MVCL与以下3种基线模型进行对比。(1)MVCL1禁用对比学习模块;(2)MVCL2禁

表1 对比实验结果

数据集	模型	Precision@5	Recall@5	F1-Score@5	Precision@10	Recall@10	F1-Score@10	Precision@20	Recall@20	F1-Score@20
脑卒中数据集	LightGCN	0.343 9	0.123 2	0.181 4	0.261 2	0.187 6	0.218 3	0.192 7	0.276 3	0.227 0
	MH_GAT	0.386 7	0.138 5	0.204 0	0.301 7	0.217 3	0.252 6	0.233 0	0.334 1	0.274 5
	SMGCN	0.380 9	0.136 3	0.200 7	0.295 3	0.211 9	0.246 7	0.223 4	0.320 1	0.263 1
	KDHR	0.402 7	0.143 4	0.211 5	0.328 9	0.234 3	0.273 7	0.263 3	0.375 4	0.309 5
	SMRGAT	0.435 7	0.154 8	0.228 5	0.348 8	0.248 1	0.290 0	0.271 4	0.386 3	0.318 8
	MVCL	0.457 5	0.163 2	0.240 6	0.374 7	0.267 9	0.312 4	0.294 5	0.419 5	0.346 0
PTM数据集	LightGCN	0.110 9	0.082 3	0.094 5	0.073 1	0.107 5	0.087 0	0.051 3	0.149 8	0.076 5
	MH_GAT	0.195 8	0.146 3	0.167 4	0.144 0	0.211 2	0.171 3	0.101 1	0.295 8	0.150 7
	SMGCN	0.193 3	0.126 5	0.152 9	0.156 8	0.203 1	0.177 0	0.115 3	0.302 7	0.167 0
	KDHR	0.213 8	0.151 0	0.177 0	0.166 0	0.228 4	0.192 2	0.125 1	0.341 4	0.183 2
	SMRGAT	0.246 1	0.182 1	0.209 3	0.187 3	0.277 7	0.223 7	0.134 3	0.397 0	0.200 7
	MVCL	0.265 6	0.200 2	0.228 3	0.205 5	0.306 5	0.246 0	0.148 5	0.438 4	0.221 8

表2 消融实验结果

数据集	模型	Precision@5	Recall@5	F1-Score@5	Precision@10	Recall@10	F1-Score@10	Precision@20	Recall@20	F1-Score@20
脑卒中数据集	MVCL1	0.4536	0.1616	0.2384	0.3756	0.2685	0.3132	0.2936	0.4183	0.3451
	MVCL2	0.4431	0.1578	0.2328	0.3706	0.2649	0.3089	0.2913	0.4150	0.3423
	MVCL3	0.4509	0.1607	0.2369	0.3710	0.2650	0.3091	0.2922	0.4157	0.3432
	MVCL	0.4575	0.1632	0.2406	0.3747	0.2679	0.3124	0.2945	0.4195	0.3460
PTM数据集	MVCL1	0.2637	0.1993	0.2274	0.2049	0.3059	0.2454	0.1467	0.4346	0.2194
	MVCL2	0.2569	0.1903	0.2186	0.1958	0.2907	0.2340	0.1400	0.4126	0.2091
	MVCL3	0.2622	0.1956	0.2241	0.2008	0.2973	0.2397	0.1423	0.4192	0.2124
	MVCL	0.2656	0.2002	0.2283	0.2055	0.3065	0.2460	0.1485	0.4384	0.2218

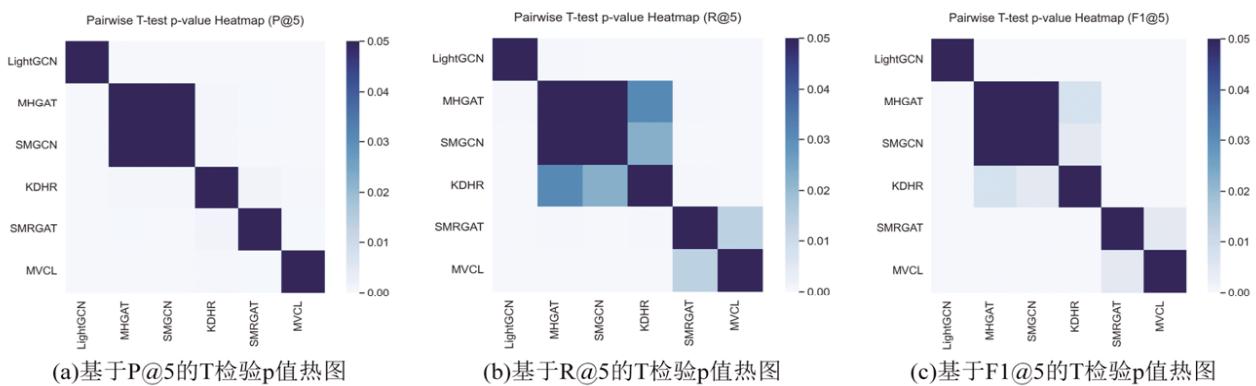


图4 各方法t检验的P值热图

用相似性视图生成模块;(3)MVCL3禁用注意力机制融合模块,并以特征平均替代。

消融实验结果见表2。(1)与MVCL1比较,移除对比学习模块后,模型性能下降,表明同构图与相似性视图之间的对比学习有助于更有效地捕捉数据中的相似性与差异性,从而提升模型的表示能力。(2)与MVCL2比较,MVCL取得了显著的性能提升,说明生成的相似性视图能很好地捕捉中药与症状之间的高阶关系。(3)与MVCL3比较,注意力机制的引入使得模型在融合语义特征时能够更有效地关注对中药推荐有益的特征。

3.3.3 显著性研究 为评估MVCL方法与其他基线方法在脑卒中数据集上的性能差异,本研究采用成组t检验(pairwise t-test)进行统计分析。选取Precision@5, Recall@5和F1-Score@5作为评测指标,对“3.2.2”项下比较的所有模型进行两两比较,计算P值矩阵并可视化为热图,以直观展示不同方法之间关系。结果见图4。

MVCL与其他方法在性能差异上的P值均处于0.02至0.00之间($P<0.05$),表明MVCL方法优于其他对比方法。

3.3.4 节点嵌入可视化分析 为了直观展示模型的特征学习情况,本研究采用文献[18]中的方法,通过奇异值分解(SVD)将高维嵌入矩阵降维至二维空间。生成的可视化图像中,PC1(第一主成分)和PC2(第二主成分)分别代表数据在两个最重要方向上的投影,其中PC1主要捕捉全局的语义信息,PC2则反映次要但仍具辨识度的语义特征。图中的每个点对应一个嵌入向量(如中药或症状的嵌入),其位置由其在PC1和PC2上的投影值决定。若点分布均匀且扩散,表明嵌入矩阵的语义信息分布良好;而如果点集中在某一方向,则可能存在表示

退化问题,表明模型在某些维度上的学习存在信息损失或欠表达现象。

将MVCL与对比实验中表现次优的模型SMRGAT及消融实验中的MVCL2进行可视化分析,结果见图5。SMRGAT的节点嵌入分布较为密集,相比之下,MVCL无论是中药还是症状的嵌入在PC1和PC2维度上的分布更加均匀。表明MVCL能够更有效地学习和区分特征嵌入,使嵌入向量在语义空间中保持合理分布,从而提升模型的表达能力和泛化性。进一步对比MVCL与其变体MVCL2,结果显示,在去除相似视图生成器和局部对比学习后,模型的特征表达能力有所下降,嵌入分布趋于收缩。这表明相似视图生成器和局部对比学习在维持嵌入表示的多样性和语义分离性方面发挥了关键作用,有助于模型学习到更加稳健且区分度更高的特征。

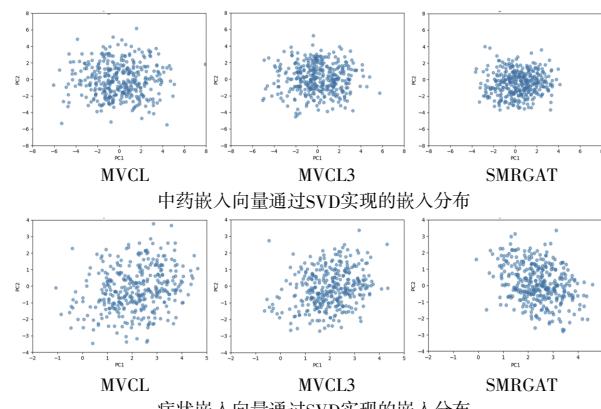


图5 中药和症状节点嵌入可视化图

3.3.5 案例分析 为了更直观地评估MVCL推荐中药组合的效果,本研究随机选取了两组实验数据进行分析。实验结果

表3 案例分析

案例	症状集合	真实值	推荐的前10味中药
案例1 肢体乏力;握力减弱;大便干燥;言语不利	黄芪;赤芍;红花;川芎;桃仁;牛膝;当归;地龙;鸡血藤;甘草;僵蚕;络石藤;全蝎;桑枝;侧柏叶		红花;赤芍;当归;地龙;川芎;桃仁;甘草;黄芪;石斛;鸡血藤
案例2 言语蹇涩;肢体乏力;咳嗽;尿频;口干;口苦;行动不利	天麻;钩藤;槲寄生;石决明;黄芪;黄芩;栀子;法半夏;陈皮;茯苓;白术;杜仲;牛膝;桔梗;苦杏仁;甘草		天麻;钩藤;甘草;杜仲;牛膝;黄芩;栀子;全蝎;黄芪;川贝母

中,红色的中药表示MVCL推荐的正确中药。MVCL推荐的中药组合在大多数情况下与真实值中的中药相吻合。

案例1中,患者的主要症状为肢体乏力、握力减弱、大便干燥、言语不利。这些症状通常与气虚血瘀、津液不足等有关。MVCL推荐的中药组合与补阳还五汤相似,并在此基础上增加了鸡血藤、甘草、石斛,更注重滋养津液,通络止痛。案例2中,患者的主要症状为言语蹇涩、肢体乏力、咳嗽、口干、口苦、尿频、行动不利。这些症状通常与血瘀、风阳上扰等有关。MVCL推荐的中药组合与天麻钩藤饮相似,并在此基础上增加了川贝母、全蝎,增强了活血通络、清热化痰止咳的作用。因此,MVCL通过学习症状与中药之间的相互作用,能实现有效的中药推荐,其推荐结果对临床医生在中药选择上具有一定的参考价值。(见表3)

4 讨 论

大多数中学生虽然掌握了中药方剂的组成,但在实际临床中往往难以实现精准的“方证对应”,从而陷入决策困境。本研究以这一挑战为切入点,借助人工智能方法,深入挖掘医案中潜在的配伍规律,以期为中学生提供精准、个性化的处方推荐决策支持,帮助他们更快适应并应对实际临床中的复杂挑战。

处方推荐作为人工智能推荐算法在中医领域的应用之一,能够利用推荐算法,根据患者的具体症状智能匹配合适的中药组合。在处方推荐领域,目前的研究多采用传统机器学习模型、神经网络模型、图神经网络模型。然而,基于传统的机器学习处方推荐算法^[19-20]由于模型层数较浅、特征表达能力有限,难以充分捕捉中药与症状之间的高阶关联,导致推荐效果较差。基于神经网络的处方推荐模型^[21-22]通常采用序列到序列(Seq2Seq^[23])模型来生成中药序列。然而,这类方法通常采用按序编码症状并依次解码为中药的方式,将重点放在顺序上,未能充分考虑中药配伍的多样性和复杂性。基于图神经网络的处方推荐模型^[24-25]将中药与症状之间关系建立为图结构,并利用图神经网络技术捕捉它们之间的相互作用关系。然而,临床数据集往往面临数据量不足、数据分布不均衡等问题,导致传统推荐模型难以从有限的数据中学习到足够的配伍规律。

图对比学习能通过图结构建模和自监督学习有效提取数据中的潜在规律^[26]。因此本研究借助图对比学习这一优势,构建了基于图对比学习的处方推荐模型。本研究首先充分挖掘并整合中药丰富的外部属性及症状之间的语义关系,利用这些先验知识对模型进行初始化,为模型提供了符合中医逻辑的语义基础。在此基础上,本研究基于收集的临床脑卒中数据集进一步构建了患者症状-中药之间的多层次图结构。

同时本研究基于图对比学习提出了MVCL框架,在中药层面和症状层面分别进行局部对比学习,以辅助处方推荐任务,使模型能够学习更具判别力的节点表示。此外,本研究提出了一种相似性视图增强模块,以改善传统对比学习方法依赖随机图增强^[27]所导致的关系断裂或噪声引入问题。结果表明,MVCL在脑卒中及经典方剂数据集上均展现出较好的推荐性能。消融实验进一步验证了各个模块的有效性。本研究不仅为中医药智能化诊疗提供了新的技术路径,也为临床辅助决策提供了可靠支持。

然而,本研究还存在一定的局限。(1)当前研究主要关注中药与症状之间的关系,未考虑证型、功效,模型难以全面学习中医辨证论治的逻辑。(2)模型缺乏对推荐结果的可解释性支持。未来的研究将重点围绕以下方向展开:(1)优化模型架构,探索更先进的深度学习技术。(2)采用SHAP或LIME等可解释性模型,对模型进行全局和局部的可解释性分析,提高模型的透明度和可信度。(3)融合更多的中医知识,如中药功效、配伍禁忌、证型等,进一步丰富模型的特征表达,推动智能中医诊疗的应用发展。(4)探索跨病种用药规律的可迁移性。当前实验聚焦于脑卒中领域,未来研究需在更多病种(如糖尿病、高血压)中验证模型的通用性。

参 考 文 献

- [1] 苗春龙,沈融,兰杰,等.基于软阈值领域聚合图网络的《伤寒论》方剂推荐方法[J].上海中医药大学学报,2024,38(6):8-18.
- [2] LI S Y, YUE W J, JIN Y Y. Patient-oriented herb recommendation system based on multi-graph convolutional network[J]. Symmetry, 2022, 14(4):638.
- [3] LI S C, WANG W, HE J Y. KGAPG: Knowledge-aware neural group representation learning for attentive prescription generation of traditional Chinese medicine[C]//2021 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM). Houston, TX: IEEE, 2021:450-455.
- [4] ZHU Y Q, XU Y C, YU F, et al. Deep graph contrastive representation learning [EB/OL].(2020-07-13)[2025-02-10].<https://arxiv.org/abs/2006.04131v2>.
- [5] XIE X, SUN F, LIU Z Y, et al. Contrastive learning for sequential recommendation[C]//2022 IEEE 38th International Conference on Data Engineering (ICDE). Kuala Lumpur: IEEE, 2022:1259-1273.
- [6] YANG Y, RAO Y L, YU M H, et al. Multi-layer

- information fusion based on graph convolutional network for knowledge-driven herb recommendation[J]. *Neural Netw*, 2022, 146: 1–10.
- [7] 国药典委员会.中华人民共和国药典[S].北京:中国医药科技出版社,2020.
- [8] 黎敬波,马力.中医临床常见症状术语规范[M].北京:中国医药科技出版社,2005.
- [9] 俞仲毅,王博,陆敏,等.中药性味归经作用的现代含义及其实现机制[J].中医学,2017,6(5):254–266.
- [10] 邓乐,丁长松,黄辛迪,等.基于多层前馈神经网络的中药药性量化研究[J].中草药,2020,51(16):4277–4283.
- [11] MIKOLOV T, CHEN K, CORRADO G, et al. Efficient estimation of word representations in vector space[EB/OL]. (2013–09–07)[2025–02–10].<https://arxiv.org/abs/1301.3781v3>.
- [12] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[EB/OL].(2018–02–04)[2025–03–10]<https://arxiv.org/abs/1710.10903v3>.
- [13] ZHANG Y, ZHANG X, WANG J, et al. Generalized relation learning with semantic correlation awareness for link prediction[J]. *Proc AAAI Conf Artif Intell*, 2021, 35 (5):4679–4687.
- [14] VASWANI A, SHAZEEER N, PARMAR N, et al. Attention is All you Need[C]//Advances in Neural Information Processing Systems. Long Beach, 2017:5998–6008.
- [15] HE X N, DENG K, WANG X, et al. LightGCN: Simplifying and powering graph convolution network for recommendation[C]//Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. Virtual Event China: ACM, 2020:639–648.
- [16] JIN Y Y, ZHANG W, HE X N, et al. Syndrome-aware herb recommendation with multi-graph convolution network[C]//2020 IEEE 36th International Conference on Data Engineering (ICDE). Dallas, TX: IEEE, 2020:145–156.
- [17] YANG X Y, DING C S. SMRGAT: A traditional Chinese herb recommendation model based on a multi-graph residual attention network and semantic knowledge fusion[J]. *J Ethnopharmacol*, 2023, 315:116693.
- [18] QIU R H, HUANG Z, YIN H Z, et al. Contrastive learning for representation degeneration problem in sequential recommendation[C]//Proceedings of the Fifteenth ACM International Conference on Web Search and Data Mining. Virtual Event AZ USA: ACM, 2022:813–823.
- [19] WU Y P, PEI C H, RUAN C Y, et al. Bayesian networks and chained classifiers based on SVM for traditional Chinese medical prescription generation [J]. *World Wide Web*, 2022, 25(3):1447–1468.
- [20] QIN Y, MA Z R. A traditional Chinese medicine prescription recommendation method based on mutual information clustering[J]. *J Phys: Conf Ser*, 2020, 1544(1): 012065.
- [21] LI C J, LIU D, YANG K X, et al. Herb–know: Knowledge enhanced prescription generation for traditional Chinese medicine [C]//2020 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM). Seoul: IEEE, 2020:1560–1567.
- [22] LI W, YANG Z. Exploration on generating traditional Chinese medicine prescriptions from symptoms with an end-to-end approach[C]// Natural Language Processing and Chinese Computing. Cham: Springer International Publishing, 2019:486–498.
- [23] SUTSKEVER I, VINYALS O, LE Q V. Sequence to sequence learning with neural networks[C]// Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems–Volume 2. Montreal: ACM, 2014:3104–3112.
- [24] JIN Y Y, JI W D, SHI Y, et al. Meta-path guided graph attention network for explainable herb recommendation[J]. *Health Inf Sci Syst*, 2023, 11(1):5.
- [25] QI J Z, WANG X Y, YANG T. Traditional Chinese medicine prescription recommendation model based on large language models and graph neural networks [C]// 2023 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM). Istanbul: IEEE, 2023:4623–4627.
- [26] WU J C, WANG X, FENG F L, et al. Self-supervised graph learning for recommendation[C]//Proceedings of the 44th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. Virtual Event: ACM, 2021:726–735.
- [27] CAI X H, HUANG C, XIA L H, et al. LightGCL: Simple yet effective graph contrastive learning for recommendation[EB/OL].(2023–06–14)[2025–03–10]<https://arxiv.org/abs/2302.08191v3>.

(收稿日期:2025-03-10 编辑:蒋凯彪)