

肖继尧, 丁长松. MKGHR: 元路径知识增强的中药推荐模型研究[J]. 智能计算机与应用, 2026, 16(4): 187-194. DOI: 10.20169/j. issn. 2095-2163. 25103102

MKGHR: 元路径知识增强的中药推荐模型研究

肖继尧¹, 丁长松^{1,2}

(1 湖南中医药大学信息科学与工程学院, 长沙 410208; 2 湖南省中医药大数据分析实验室, 长沙 410208)

摘要: 针对现有处方推荐模型在利用知识图谱时存在信息提取浅层化、语义关联挖掘不足的问题, 利用元路径在知识图谱中提取结构化信息的优势, 构建中药推荐模型。首先整合 ETCM、TCMSP 数据库提取中药的药性、化学成分等属性信息构建中药知识图谱。随后利用元路径提取与整合知识图谱中子图结构特征, 通过图卷积神经网络从症状、中药二部图中提取关系信息, 并对两种特征进行信息融合, 最终实现基于元路径知识增强的中药推荐模型 MKGHR。公共数据集对比实验表明, 相较于次优的基准模型, MKGHR 在 Precision@5、Recall@5 和 F1-Score@5 指标上分别提升了 7.80%、10.15% 和 9.17%。案例分析与富集分析进一步验证了模型推荐结果的合理性。MKGHR 通过融合元路径引导的知识信息, 在推荐准确性和模型泛化能力方面均展现优势, 也为中医药知识图谱与推荐模型的融合提供了新的范式。

关键词: 处方推荐; 知识图谱; 元路径; 图卷积神经网络

中图分类号: TP391

文献标志码: A

文章编号: 2095-2163(2026)04-0187-08

MKGHR: A traditional Chinese medicine recommendation enhanced by meta-path knowledge

XIAO Jiyao¹, DING Changsong^{1,2}

(1 School of Information Science and Engineering, Hunan University of Chinese Medicine, Changsha 410208, China;
2 Hunan Provincial Laboratory of Traditional Chinese Medicine Big Data Analysis, Changsha 410208, China)

Abstract: To address the limitations of existing prescription recommendation models in leveraging knowledge graphs, such as shallow information extraction and insufficient semantic association mining, this study utilizes the advantages of meta-paths in extracting structured information from knowledge graphs to construct a traditional Chinese medicine (TCM) recommendation model. First, the ETCM and TCMSP databases were integrated to build a TCM knowledge graph containing attributes such as medicinal properties and chemical components. Subsequently, meta-paths were employed to extract and integrate subgraph structural features from the knowledge graph. Graph convolutional neural networks were used to extract relational information from symptom-TCM bipartite graphs, and the two types of features were fused to develop the meta-path knowledge-enhanced TCM recommendation model MKGHR. Comparative experiments on public datasets showed that, compared to the suboptimal baseline model, MKGHR improved Precision@5, Recall@5, and F1-Score@5 by 7.80%, 10.15%, and 9.17%, respectively. Case studies and enrichment analyses further validated the rationality of the model's recommendations. By integrating meta-path-guided knowledge, MKGHR demonstrates advantages in recommendation accuracy and model generalization capability, while also providing a new paradigm for the integration of TCM knowledge graphs.

Key words: prescription recommendation, knowledge graph, meta-path, graph convolutional neural network

0 引言

中医学源远流长, 对世界医学有深远影响。然而中医诊疗极度依赖医生的临床经验与主观判断。

随着深度学习等人工智能技术取得显著进步^[1]。研究人员提出一系列机器学习和深度学习的方法来解决中医处方生成问题。早期研究基于主题模型, Yao 等^[2]通过主题建模挖掘症状关联规律及潜在特

基金项目: 湖南省自然科学基金(2023JJ60124); 湖南省中医药管理局重点课题(A2024011)。

作者简介: 肖继尧(2002—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向: 处方推荐。

通信作者: 丁长松(1975—), 男, 博士, 教授, 主要研究方向: 中医药信息学, 机器学习。Email: dingcs1975@hnu cm. edu. cn。

收稿日期: 2025-10-31

哈尔滨工业大学主办 ◆ 科技创见与应用

征进行推荐。然而主题模型基于词袋假设难以捕捉中医处方中的上下文配伍关系。近年来,深度学习模型凭借神经网络架构在中医领域表现出优越的数据适应性。Zhao 等^[3]通过图卷积网络聚合症状-证型-症状等图的特征预测中药处方。Liu 等^[4]提出了一种融合文本卷积神经网络和长短期记忆网络的混合模型,联合建模症状的语义信息和处方的序列特征。然而仅依靠中药-症状共现关系的方法存在语义关联不明确、上下文信息缺失等问题。

知识图谱结构化的知识表示方法能有效增强中药与症状间的上下文关联。Jin 等^[5]通过图注意力网络在文献和处方构建的中医知识图谱上进行学习;Jin 等^[6]通过注意力机制学习症状的差异性,并引入中医知识图谱作为外部信息源增强表示;Zhang 等^[7]利用中医知识图谱来引导一个扩散模型学习草药与症状的综合表示。但对知识图谱的利用停留在浅层知识整合,而未能深入挖掘中药性味、归经、化学成分、分子靶点等多维属性所蕴含的结构化信息。

元路径作为异构图神经网络中的核心机制,其特点在于能捕捉节点间的语义和结构信息。李政等^[8]在知识图嵌入基础上运用层次化注意力网络来聚合不同元路径下的邻居信息。杨真真等^[9]将知识图谱嵌入过程分解为独立的节点学习与元路径学习分支,分别用于捕获节点的局部上下文特征与元路径的多尺度语义。Jin 等^[10]利用元路径引导图注意力网络,通过预定义的元路径来指导图上的邻居选择与信息传播过程。但因其人工干预过程,在自动化与泛化现有方法在中医知识挖掘深度上存在局限,且知识图谱的浅层应用常导致信息缺失。为解决深层结构利用不足及元路径依赖人工定义的问题,本文利用元路径捕获特定语义,提出知识增强 MKGHR。主要贡献如下:

(1)整合 ETCM、TCMSP 数据库的中药的疗效、化学成分,治疗疾病等属性,构建中药知识图谱;基于共现关系构建中药、症状、中药-症状二部图。

(2)元路径知识提取。基于原路径聚合子图,提取图谱中中药及甚属性的结构化特征,图嵌入模拟,该模块使用图卷积神经网络提取症状、中药、中药-症状二分图的关系信息,区分不同维度的关系信息。

(3)本研究通过中药知识图谱辅助增强推荐模型,实验结果表明该模型性能优于基线方法。消融实验验证了模块的有效性,案例分析验证了结果的

合理性与可解释性。

1 方法

1.1 多图构建

1.1.1 知识图谱

本研究整合 ETCM 与 TCMSP 数据库,筛选处方所涉中药的药性、归经及成分等信息,并转化为三元组格式。据此构建了包含多类型实体与关系的中药知识图谱,具体类型和数量的详细统计数据见表 1。

表 1 中药知识图谱详细信息

Table 1 Detailed information of TCM knowledge graph

节点类型	数量	边类型	数量
channelTropism	12	H-channel_tropism	1 143
chemical	5 950	H-chemical	9 843
disease	2 698	H-disease	190 896
effect	1 870	H-effect	20 800
herb	692	H-flavor	1 646
flavor	24	H-taboo	592
taboo	50		

1.1.2 中药、症状二分图

症状与中药可以被抽象为图结构^[11]。通过处方中症状和中药的共现关系^[12],构建中药-症状二分图(S-H),根据处方中症状之间和中药之间的共现关系,构建症状二分图(S-S)和中药二分图(H-H)。详细信息见表 2。

表 2 二分图统计信息

Table 2 Bipartite graph statistics

类型	节点总数	边总数
S-H	1 195	79 870
S-S	390	2 546
H-H	805	9 038

1.2 问题定义

处方推荐的核心是根据患者的症候表现,选出有效的中药配伍组合^[13]。给定中药全集 $H = \{h_1, h_2, \dots, h_N\}$,其中, N 为中草药的总数。对于患者,其症状集合表示为 $S_{obs} \subset S$,其中 S 是所有可能症状的集合。目标是学习映射函数 F ,该函数通过患者的症状 S_{obs} ,预测每种中药 h_k 出现的概率。该过程可表示为 $\hat{y} = F(S_{obs}; \Theta)$ 。其中 Θ 是模型的可学习参数,通过在数据集 $D = \{(S_i, H_i)\}_{i=1}^M$ 上进行训练而得到。模型的输出 $\hat{y} \in [0, 1]^N$ 是 N 维的向量,其第 k 个元素 \hat{y}_k 表示中药 h_k 针对症状集 S_{obs} 的推荐概

率。

1.3 模型设计

本文提出了一种基于元路径知识增强的新型处方推荐模型 MKGHR (如图 1 所示), 该模型的整体框架由 3 个模块组成。元路径提取模块利用元路径

将知识图谱分解为子图, 挖掘深层结构特征并生成统一的中药嵌入; 图嵌入模块通过图卷积在二分图上捕捉症状与中药的局部关联; 多层融合模块整合上述多粒度特征, 通过与症状集的交互计算, 预测中药的治疗概率。

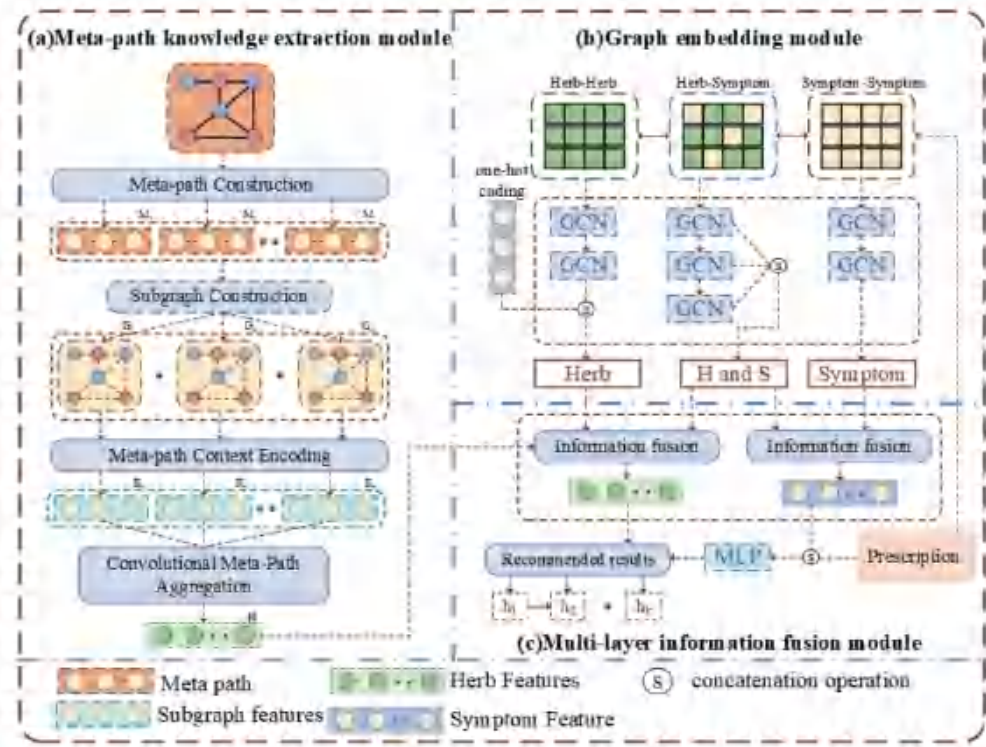


图 1 MKGHR 模型整体网络结构

Fig. 1 Network structure of the MKGHR

1.3.1 元路径知识提取模块

MKG 模块是一个知识图谱特征提取模块, 能够从各种结构化知识图谱中提取特征信息。(1) 元路径实例构建: 根据路径长度从图中提取特定的路径实例。(2) 元路径上下文编码: 利用编码器学习每个路径实例中包含的上下文语义。(3) 卷积元路径融合: 卷积网络最终聚合不同特征生成统一的嵌入向量。

1) 元路径实例构建

对于给定的元路径 P , 节点 v 的元路径上下文是一个以 v 为中心的局部子图 $S_v^P = (v_v^P, \mathcal{E}_v^P)$, 其中边表示为 $(v_1, v_2) \in \mathcal{E}_v^P$ 。经过特征预处理后, MKG 为每个元路径 P 下的每个节点构建一个局部子图, 将目标节点与对应路径的整个结构邻居集连接起来。

对于所考虑的元路径, MKG 使用预定义长度为 k 的所有元路径, 不需要基于人类专业知识的人工选择过程。任何长度小于 k 的元路径都必须是某个长度为 k 的元路径的子序列。

2) 元路径上下文编码

在构建路径上下文 S_v^P 后, MKG 使用上下文编码器来学习其结构和潜在信息的嵌入 (如图 2 所示)。MKG 上下文编码器的公式如下:

$$h_{v,p}^l = \text{READOUT}_P^l(\{h_u^{l-1} \mid u \in v_v^P\}) \quad (1)$$

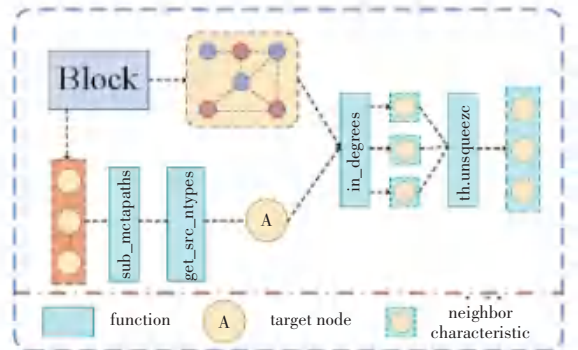


图 2 元路径上下文编码

Fig. 2 Meta-path context encoding

其中, $h_{v,p}^l$ 是节点 v 相对于路径 P 在神经网络第 l 层的表示向量, V_v^P 是路径上下文 S_v^P 中所有节点的

集合。READOUT_{*l*}^{*l*} 是第 *l* 层路径 *P* 的图池化函数, 基于前一层的节点特征表示 h_u^{l-1} 进行计算得到。

3) 卷积元路径聚合

在通过上下文编码获得每条路径 *P* 的节点表示 $h_{v,p}^l$ 后, 将其整合为统一的节点表示, 并在该表示上滑动一维卷积核, 公式如下:

$$\mathbf{H}_v^l = [h_{v,p_1}^l \parallel H_{v,p_2}^l \parallel \dots \parallel h_{v,p_{|P|}}^l] \mathbf{K}_m \quad (2)$$

$$\Gamma^l = \text{Conv1D}(\mathbf{H}_v^l; \{\mathbf{K}_m\}_{m=1}^M) \quad (3)$$

进一步应用投影得到期望输出维度的最终节点向量:

$$\mathbf{e}_m^{bg} = \sigma(\mathbf{W}_{\phi(v)}^l \cdot \Gamma^l + \mathbf{b}_{\phi(v)}^l) \quad (4)$$

其中, $\mathbf{W}_{\phi(v)}^l$ 和 $\mathbf{b}_{\phi(v)}^l$ 分别是权重矩阵和偏置项, $\sigma(\cdot)$ 表示激活函数, 默认情况下为 ReLU。

1.3.2 图嵌入模块

在 S-H 图中使用图卷积学习其中中药和症状的关系信息, 公式如下:

$$\mathbf{e}_u^{\text{SH}} = \tanh\left(\frac{1}{|N_u^{\text{S-H}}|} \sum_{v \in N_u^{\text{S-H}}} p_v \mathbf{W}_{\text{SH}}\right) \quad (5)$$

其中, *u* 表示 S-H 图中的一个节点, 可以属于症状集合或中药集合。 $N_u^{\text{S-H}}$ 表示在 S-H 图中与节点 *u* 相邻的邻居节点集合。

根据公式(6), 图卷积被应用于 S-S 图以聚合症状节点的初始嵌入。对于 H-H 图上的邻居聚合, 根据公式(7), 首先将初始中药嵌入与来自中药知识图的属性信息相结合, 最终生成中药节点的聚合表示。

$$\mathbf{e}_s^{\text{S}} = \tanh\left(\frac{1}{|N_s^{\text{S-S}}|} \sum_{k \in N_s^{\text{S-S}}} \mathbf{x}_k \mathbf{W}_s\right) \quad (6)$$

$$\mathbf{e}_h^{\text{H}} = \tanh\left(\frac{1}{|N_h^{\text{H-H}}|} \sum_{m \in N_h^{\text{H-H}}} [\mathbf{x}_m \parallel \mathbf{e}_m^{bg}] \mathbf{W}_H\right) \quad (7)$$

其中, $N_s^{\text{S-S}}$ 表示在 S-S 图中与症状节点相邻的邻居节点集合; $N_h^{\text{H-H}}$ 表示在 H-H 图中与中药节点相邻的邻居节点集合; \mathbf{x}_k 和 \mathbf{x}_m 表示初始向量; \mathbf{W} 表示权重。

1.3.3 多层信息融合模块

目前已获得了症状嵌入和中药嵌入。如公式(8)和(9)所示, 使用 MEAN 操作来组合获得症状和中药的最终嵌入。

$$\mathbf{Z}_s = \text{OPERATE}(\mathbf{e}_u^{\text{SH}}, \mathbf{e}_s^{\text{S}}) \quad (8)$$

$$\mathbf{Z}_h = \text{OPERATE}(\mathbf{e}_u^{\text{SH}}, \mathbf{e}_h^{\text{H}}) \quad (9)$$

其中, \mathbf{Z}_s 和 \mathbf{Z}_h 分别表示最终的症状和中药嵌入, OPERATE(\cdot) 表示 MEAN 操作。

在获得症状和中药嵌入后, 根据下式将处方中

症状集的 one-hot 编码与所有症状的嵌入进行交互, 以获得症状集的综合嵌入。

$$\mathbf{Z}_{s_set} = \text{ReLU}(\text{MLP}(\text{avg_pool}(\mathbf{P} \cdot \mathbf{Z}_s))) \quad (10)$$

其中 \mathbf{P} 是处方中症状的 one-hot 编码矩阵, ReLU(\cdot) 是激活函数。通过 Sigmoid 函数将结果值转换为概率。最后选择概率最高的前 *K* 个中药作为症状集的推荐结果, 公式如下:

$$\text{Sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (11)$$

$$\hat{R}(s_set) = \text{Sigmoid}(\mathbf{Z}_{s_set} \cdot \mathbf{Z}_h) \quad (12)$$

2 实验设置

2.1 数据集

为全面验证 MKGHR 的有效性和泛化性, 本研究在 Yang 等^[14]使用的公开数据集上进行了定量实验。该数据集包含 33 765 条处方记录, 涵盖了 390 种症状和 805 种中药, 并分为 3 个子集, 即训练集、验证集和测试集, 分割比为 6 : 2 : 2。

2.2 评估指标

为评估 MKGHR 模型的推荐性能, 采用了在 Top-K 推荐任务中广泛使用的 3 个标准评估指标: Precision@K、Recall@K 和 F1 - Score@K, 其正式定义如公式(13)~(15)所示。在这些指标中, 参数 *K* 表示推荐列表的长度, 即推荐的中药数量, 在实验中设置了 *K* 的值为 {5, 10, 20}。

$$\text{Precision } K = \frac{|h_set \cap K|}{|K|} \quad (13)$$

$$\text{Recall } K = \frac{|h_set \cap K|}{|h_set|} \quad (14)$$

$$F1 = \frac{2 \cdot \text{Precision } K \cdot \text{Recall } K}{\text{Precision } K + \text{Recall } K} \quad (15)$$

2.3 基准模型

本研究应用以下基线模型来验证所提出的方法:

NGCF^[15]: 作为协同过滤模型, 通过构建症状-中药二分图并在图上执行嵌入传播。

DNAConv^[16]: 采用由多头注意力机制引导的动态邻居聚合策略来学习图节点的嵌入表示。

LightGCN^[17]: 仅结合 GCN 的邻居聚合来执行协同过滤应用于症状-中药二分图。

SMGCN^[18]: 该模型构建了 S-S、H-H 和 S-H 图, 并利用 GCN 进行特征提取。症状特征融合为一个复合证候。

KDHR^[14]: 该模型是一个中药推荐模型, 应用 GCN

来获取症状和中药特征并整合中药的23维属性。

SMRGAT^[19]: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。

2.4 参数设置

实验基于 Python 3.8 和 PyTorch 2.1 框架,在 Intel i7-10700 CPU 与 RTX 3060 GPU 平台上进行。统一训练配置如下:采用 Adam 优化器, Batch size 设为 512,最大迭代 500 轮;初始学习率 $3e-4$,每 7 轮进行步长衰减。为防止过拟合,引入早停策略(耐受度 10)、L2 正则化(系数 0.007)及 Dropout(0.2)。模型架构方面,嵌入层与隐藏层维度均为 64,GCN 输

出维度设为 256。

3 结果

3.1 对比实验

为了评估 MKGHR 模型的综合性能,在基准数据集上进行了一系列对比实验。实验结果见表 3,根据表 3 可知 MKGHR 在所有评估指标上均显著优于其他基线模型。具体而言,与表现第二好的模型 SMRGAT 相比, MKGHR 在 $P@5$ 、 $P@10$ 和 $P@20$ 上分别实现了 7.80%、9.93% 和 11.24% 的性能提升。同样,其在 $F1@5$ 、 $F1@10$ 和 $F1@20$ 上的性能增益分别达到了 9.17%、10.06% 和 11.31%。

表 3 对比实验结果

Table 3 Comparative experiment results

模型	$P@5$	$P@10$	$P@20$	$R@5$	$R@10$	$R@20$	$F1@5$	$F1@10$	$F1@20$
NGCF	0.132 9	0.115 3	0.094 6	0.094 0	0.163 4	0.269 4	0.110 1	0.135 2	0.140 1
DNACONV	0.185 3	0.150 1	0.111 0	0.119 3	0.192 2	0.286 5	0.145 2	0.168 6	0.160 0
LightGCN	0.110 9	0.073 1	0.051 3	0.082 3	0.107 5	0.149 8	0.094 5	0.087 0	0.076 5
SMGCN	0.193 3	0.156 8	0.115 3	0.126 5	0.203 1	0.302 7	0.152 9	0.177 0	0.167 0
KDHR	0.213 8	0.166 0	0.125 1	0.151 0	0.228 4	0.341 4	0.177 0	0.192 2	0.183 2
SMRGAT	0.246 1	0.187 3	0.134 3	0.182 1	0.277 7	0.397 0	0.209 3	0.223 7	0.200 7
MKGHR	0.265 3	0.205 9	0.149 4	0.200 6	0.306 1	0.442 1	0.228 5	0.246 2	0.223 4

MKGHR 相对于 KDHR 的优越性能主要源于所提出的 MKG 模块。KDHR 模型直接将 23 维属性作为独立的输入特征,未能捕捉到这些特征属性之间的结构化信息。而 MKGHR 通过采用元路径策略挖掘并利用不同属性节点之间的内在结构关联。

3.2 MKG 模块性能评估与参数配置

鉴于处方推荐任务本质上可建模为节点分类问题,本研究采用节点分类作为基础评估任务。为了验证 MKG 在不同领域及规模下的特征提取与泛化能力,选取了 3 个经典的公开基准数据集进行测试(详见表 4)。IMDB 数据集构建了包含电影、演员及导演的影视信息网络;DBLP 和 ACM 数据集则涵盖论文、作者及会议等实体,构建了复杂的学术引文网络结构。

表 4 各领域数据集详细信息

Table 4 Detailed information on datasets across various fields

数据集	IMDB	DBLP	ACM
节点总数	12 722	18 405	8 994
边总数	37 288	67 946	25 922
目标节点	Movie	Author	Paper
训练集	10%	20%	20%
验证集	10%	10%	10%
测试集	80%	70%	70%

选用异构图神经网络作为基准。RGCN^[20]通过特定的权重根据邻居的边类型进行分组和聚合。

HGT^[21]利用由节点类型和边类型参数化的自注意力架构来捕获异构邻域的注意力权重。HAN^[22]通过聚合元路径引导的邻居来学习元路径特定的节点嵌入,并利用注意力机制来融合元路径特征。如表 5 所示, MKG 模块展现出显著优势,这种优势主要归因于两个因素:第一,通过为每条元路径构建子图并整合其上下文信息;第二,未使用参数密集型注意力机制;与其他方法相比, MKG 模块在各种异构图中学习了更具区分性的节点表示,并能有效挖掘节点之间的复杂关系。

表 5 MKG 模块对比结果

Table 5 MKG module comparison results %

模型	IMDB	DBLP	ACM
RGCN	58.84	93.26	92.28
HGT	58.07	94.41	88.64
HAN	58.24	93.13	91.49
MKG	63.94	94.92	92.20

为确定 MKG 模块的最优参数配置,本研究主要考察了网络深度与元路径长度的影响。如图 3 所示,当网络深度为 3 层时,模型在所有测试集上均获最佳性能,这表明该深度在有效捕获多跳结构信息与避免深层网络退化之间达到了理想平衡。在元路径选择上,鉴于所构建的中医药知识图谱呈现以

中药实体为核心的放射状拓扑结构,长度为 1 的元路径足以捕获关键的局部特征。基于此,预训练参数最终设定为网络深度 3、元路径长度 1。如图 4 所

示,前约 300 个中药节点的度值普遍远高于平均水平,构成了图谱中连接最密集的核心区域,因此选取这些高连接性的核心节点进行特征提取。

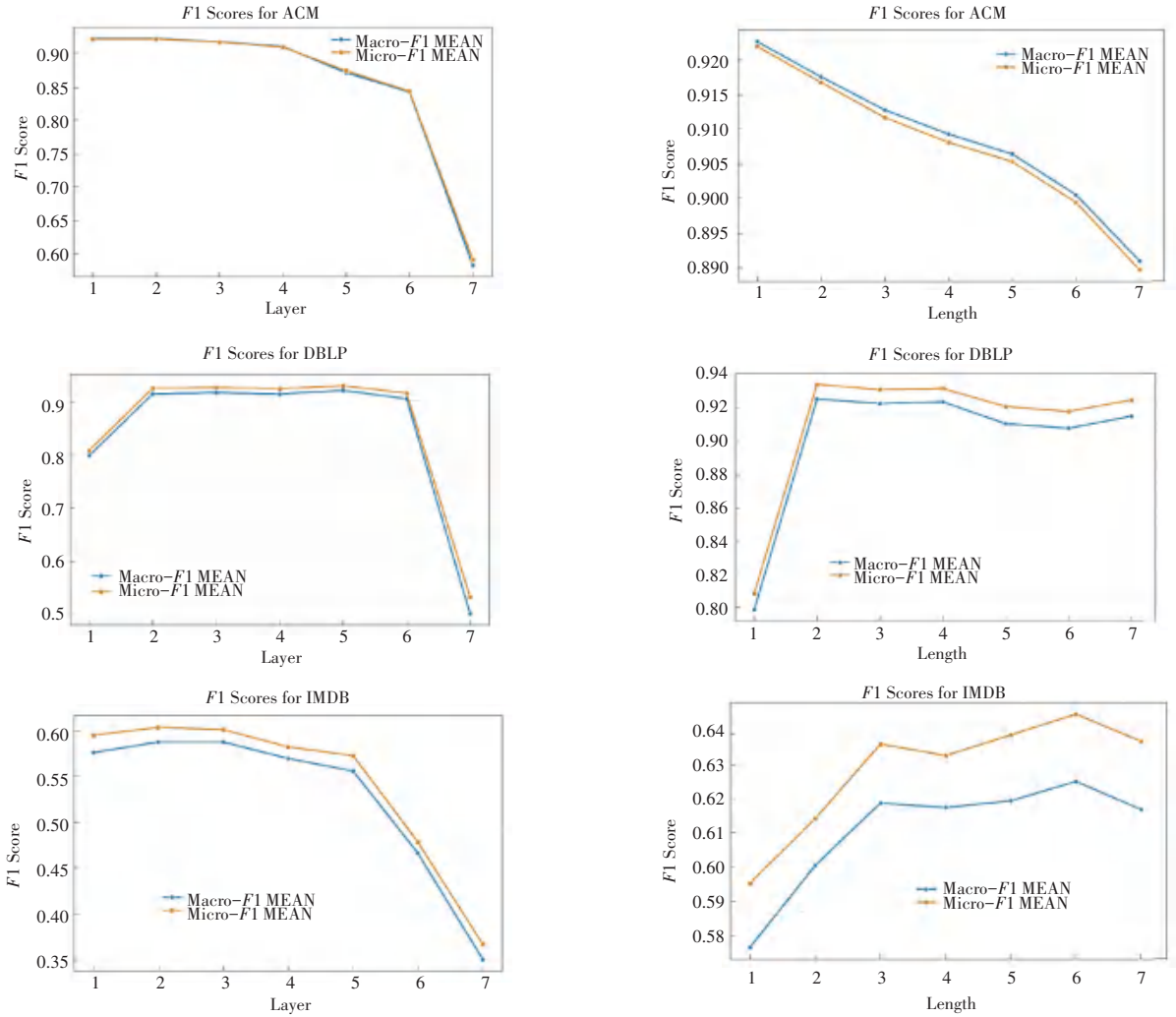


图 3 不同模型深度与元路径长度下 MKG 在各数据集上的效果

Fig. 3 Performance of MKG on various datasets under different model depths and meta-path lengths

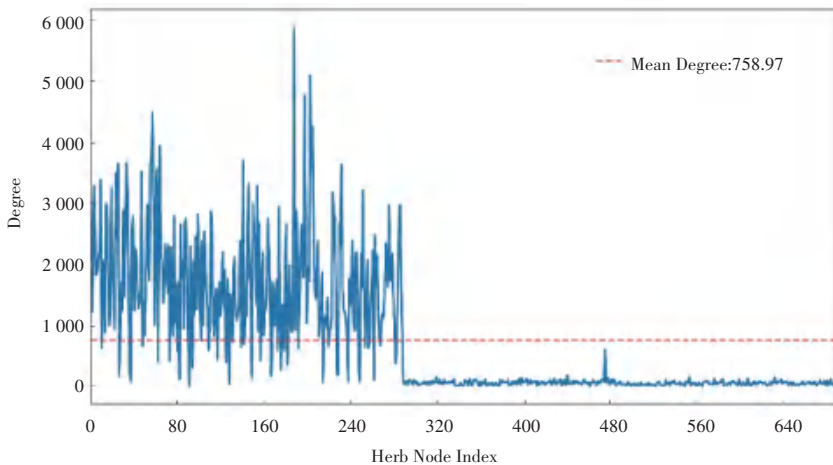


图 4 知识图谱中中药实体的度分布

Fig. 4 Degree distribution of traditional Chinese medicine entities in the knowledge graph

3.3 消融实验

为了研究 MKGHR 模型每个模块的有效性,因此设计并开展消融实验。为验证各个模块的有效性,本研究将 MKGHR 与以下 3 种基线模型进行对比。(1) MKGHR1:禁用 MKG 模块;(2) MKGHR2:将图嵌入模块中的聚合方式更改为 CAT;(3) MKGHR3:禁用多层信息融合模块。

消融实验结果见表 6。结果表明:(1)与

MKGHR1 比较,移除元路径知识提取模块后,模型性能下降,这一结果证实了从知识图谱中提取的结构化特征为模型注入了丰富的语义信息,从而提高模型的表现能力。(2)与 MKGHR2 比较,修改聚合方式后,限制了节点信息在图结构中的有效传播范围,从而削弱了模型捕捉邻近节点间复杂依赖关系的能力。(3)与 MKGHR3 相比,多层信息融合的加入有效整合不同层的特征输出与原始节点特征至关重要。

表 6 消融实验结果

Table 6 Ablation experiment results

模型	P@5	P@10	P@20	R@5	R@10	R@20	F1@5	F1@10	F1@20
MKGHR1	0.251 4	0.196 1	0.142 6	0.192 6	0.294 8	0.423 1	0.218 1	0.235 5	0.213 3
MKGHR2	0.239 9	0.184 7	0.135 4	0.175 7	0.269 7	0.395 4	0.202 9	0.219 3	0.201 7
MKGHR3	0.209 2	0.161 7	0.118 8	0.150 7	0.229 2	0.345 5	0.175 2	0.189 6	0.176 8
MKGHR	0.265 3	0.205 9	0.149 4	0.200 6	0.306 1	0.442 1	0.228 5	0.246 2	0.223 4

4 分析

4.1 案例分析

为具体说明 MKGHR 模型的推荐效果和合理性,本研究选取随机的一个病例(案例 1)及补阳还五汤案例展开分析,具体分析见表 7。案例 1 中模

型针对呕吐畏寒推荐半夏、砂仁;针对气滞暖气推荐陈皮、白术组合,并以厚朴佐助陈皮增强行气效果,精准应对复杂病症。针对半身不遂及遗尿,模型在保留原方补气活血核心的基础上,加白附子、僵蚕祛风通络,改用鸡血藤强化舒筋,加益智仁缩尿。这种精准加减形成了标本同治的治疗方案。

表 7 案例信息

Table 7 Case information

案例	症状集合	真实值	推荐的前十味中药
案例一	暖气、肠鸣、呕吐	川芎、白术、莪术、甘草、神曲、陈皮、青皮、当归、山楂、槟榔、丁香、三棱、草果、药、砂仁、半夏、木香、枳壳	陈皮、白术、甘草、木香、川芎、厚朴、人参、砂仁、枳壳、半夏
补阳还五汤	半身不遂、口眼歪斜、遗尿	黄芪、当归尾、赤芍、地龙、川芎、桃仁、红花	黄芪、白附子、赤芍、地龙、川芎、鸡血藤、桃仁、红花、僵蚕、益智仁

4.2 元路径可解释性分析

图 5 以呕吐治疗为例阐释模型的可解释性。基于"症状-中药-成分"路径,尽管厚朴与呕吐无直接先验关联关系,但模型通过 Sitosterol(谷甾醇)和 Syringin(丁香苷)等共享成分捕捉到了其与有效药物(如木香、砂仁)的深层联系。鉴于已知药物因含上述成分而生效,模型据此推断厚朴具有相似疗效。这一过程表明模型决策并非"黑箱",而是具备明确的知识图谱结构支撑。

Functions, MF)。KEGG 的富集分析结果如图 7 所示。研究表明, MKGHR 通过挖掘症状与中药的深层关联,不仅能生成与基线一致的中药推荐,还能发现具有协同增效潜力的药物组合。

4.3 富集分析

本文将 119 个潜在靶点导入 Metascape 在线平台进行分析,并限定物种为人类,显著性阈值设定为 $p < 0.05$ 。Gene Ontology (GO) 富集分析结果如图 6 所示,共鉴定出 272 个生物过程 (Biological Processes, BP)、10 个细胞组分 (Cellular Components, CC) 和 54 个分子功能 (Molecular

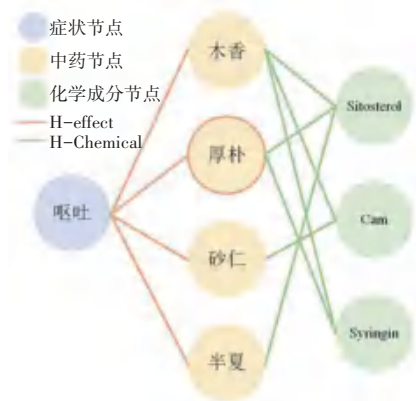


图 5 知识图谱中呕吐的相关通路

Fig. 5 Related pathways of vomiting in the knowledge graph

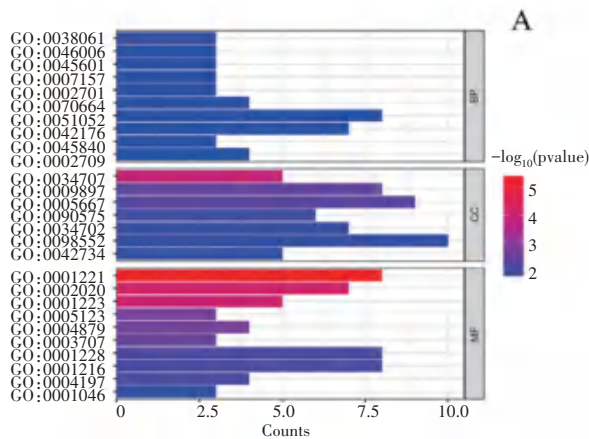


图6 GO富集条形图

Fig. 6 GO enrichment bar plot

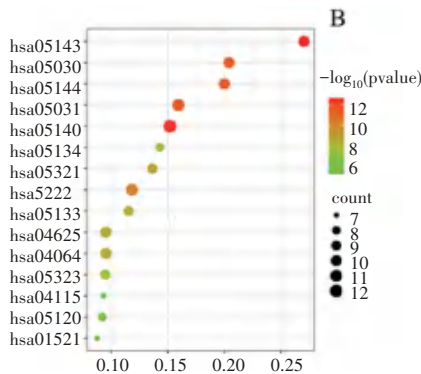


图7 KEGG富集气泡图

Fig. 7 KEGG enrichment bubble plot

5 结束语

针对中医处方推荐中知识图谱利用不充分的问题,本文提出 MKGHR 模型。该模型通过整合元路径引导的深层结构信息与二部图的局部交互特征,显著提升了处方推荐的精度。实验结果显示,模型在准确性与泛化能力上均优于现有基准模型;案例分析与富集分析进一步证实了该模型实际应用的有效性与合理性。本研究不仅为智能中医诊疗的智能化发展提供了有效解决方案,也为异构图谱融合任务提供了新的研究范式。

参考文献

- [1] 夏梦晨. 人工智能在医疗领域应用的研究 [J]. 智能计算机与应用, 2025, 15(8): 136-141.
- [2] 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.
- [3] ZHAO W, LU W, LI Z, et al. TCM herbal prescription recommendation model based on multi-graph convolutional network [J]. Journal of Ethnopharmacology, 2022, 297: 115109.
- [4] LIU D, ZHANG Y, WANG L, et al. A TCM therapeutic methods based on text convolutional neural network [C]//Proceedings of the 2021 36th Youth Academic Annual Conference of Chinese Association

of Automation (YAC). Piscataway, NJ: IEEE, 2021: 751-756.

- [5] JIN Z, ZHANG Y, MIAO J, et al. A knowledge-guided and traditional Chinese medicine informed approach for herb recommendation [J]. Frontiers of Information Technology & Electronic Engineering, 2023, 24(10): 1416-1429.
- [6] JIN Y, JI W, ZHANG W, et al. A KG-enhanced multi-graph neural network for attentive herb recommendation [J]. IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, 2021, 19(5): 2560-2571.
- [7] ZHANG C, TAN L. Knowledge graph-guided diffusion model for prescription recommendation of traditional Chinese medicine [C]//Proceedings of the International Conference on Intelligent Computing. Cham: Springer, 2025: 412-420.
- [8] 李政, 黄勃, 王晨明, 等. 基于异构注意力网络的知识图嵌入元路径推荐算法 [J]. 电子科技大学学报, 2025, 54(5): 776-788.
- [9] 杨真真, 王东涛, 杨永鹏, 等. 基于多嵌入融合的 top-N 推荐 [J]. 计算机科学, 2024, 51(7): 140-145.
- [10] JIN Y, JI W, SHI Y, et al. Meta-path guided graph attention network for explainable herb recommendation [J]. Health Information Science and Systems, 2023, 11(1): 5.
- [11] 赵丹宁, 卢海霞, 白森. 基于图卷积神经网络的中药方剂功效分类与自动推荐 [J]. 中草药, 2024, 55(18): 6298-6304.
- [12] 王辰, 曹小宇, 李亚兰, 等. 中医药治疗炎症性肠病的用药时期演进规律 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(20): 94-102.
- [13] 柴硕, 张晓勇, 黄平, 等. 蝉贝合剂化学成分及其模拟胃肠代谢过程的研究 [J]. 中国药学杂志, 2025, 60(14): 1457-1471.
- [14] YANG Y, RAO Y, YU M, et al. Multi-layer information fusion based on graph convolutional network for knowledge-driven herb recommendation [J]. Neural Networks, 2022, 146: 1-10.
- [15] WANG X, HE X, WANG M, et al. Neural graph collaborative filtering [C]//Proceedings of the 42nd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. New York: ACM, 2019: 165-174.
- [16] FEY M. Just jump: Dynamic neighborhood aggregation in graph neural networks [J]. arXiv preprint arXiv, 1904.04849, 2019.
- [17] HE X, 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. New York: ACM, 2020: 639-648.
- [18] JIN Y, ZHANG W, HE X, et al. Syndrome-aware herb recommendation with multi-graph convolution network [C]//Proceedings of the 2020 IEEE 36th International Conference on Data Engineering (ICDE). Piscataway, NJ: IEEE, 2020: 1438-1449.
- [19] YANG X, DING C. SMRGA T: A traditional Chinese herb recommendation model based on a multi-graph residual attention network and semantic knowledge fusion [J]. Journal of Ethnopharmacology, 2023, 315: 116693.
- [20] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks [C]//Proceedings of the European Semantic Web Conference (ESWC). Cham: Springer, 2018: 593-607.
- [21] HU Z, DONG Y, WANG K, et al. Heterogeneous graph transformer [C]//Proceedings of the Web Conference 2020. New York: ACM, 2020: 2704-2710.
- [22] WANG X, JI H, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network [C]//Proceedings of the World Wide Web Conference. New York: ACM, 2019: 2022-2032.