

中药处方审核中配伍禁忌的数字化预警模型研究

王磊

民办四川天一学院健康产业学院，四川省德阳市绵竹市，618200；

摘要：近些年来，信息技术快速发展，人工智能、大数据以及机器学习等新兴技术陆续被引入到医学领域，这为中药处方配伍禁忌的分析给予了新的解决办法，借助大数据分析以及深度学习算法，可从众多的中药学文献、数据库以及临床数据里提取出有价值的信息，接着建立起智能化的配伍禁忌预警系统。这种系统可以依靠自动化手段实时检测药物配伍禁忌，辅助医师做出更科学、更精确的配伍判断，减少人工判断中的误差与遗漏，本文设计并实现一个基于大数据和人工智能技术的中药处方配伍禁忌数字化预警模型，运用现代信息技术的优势，对中药配伍禁忌开展智能化分析与预警，提高中药治疗的安全性、有效性以及个性化程度。

关键词：中药处方；配伍禁忌；预警；人工智能

DOI：10.69979/3029-2808.25.05.039

前言

中药身为中华传统医学的关键构成部分，有着绵延数千年的历史以及丰富的理论体系，随着现代医学与科技的不断发展，中药的治疗功效和应用越来越受到更多的关注，虽说中药在诸多疾病的治疗方面发挥着关键作用，可是中药的配伍禁忌问题始终是中药临床使用过程中所面临的一项重大挑战。中药的配伍禁忌关乎药物之间的相互作用，要是配伍不合适，就可能致使药效降低，甚至引发毒性反应或者不良反应，严重情况下还可能对患者的生命安全造成威胁，以往医师和药师凭借经验以及文献来判断配伍禁忌，然而随着中药使用变得日益广泛，处方组合变得越发复杂，人工判断的局限性渐渐显现出来。中药配伍禁忌的知识庞大又繁杂，仅仅依靠传统经验和文献已无法契合现代临床的高效需求，像患者的年龄、性别、体质等个体差异因素的影响，也让单纯借助传统方法来识别配伍禁忌变得更为险阻，构建一套科学且智能的配伍禁忌预警系统，成了提升中药处方安全性的急切需求。

1 中药处方配伍禁忌的特点

中药处方的配伍禁忌指的是在运用不同中药材时，因为药物之间相互作用不恰当，有可能引发不良反应、毒性作用或者致使疗效降低的状况，中药配伍禁忌的特点主要呈现于药性相克、相辅相成、药效互补以及药物彼此间的相互制约等层面，充分理解这些特点有益于正确运用中药配伍理论，保障患者用药安全。中药依据其性味归经，一般有一定的药理作用，某些药物的性味或许相反或者相制，使得其配伍之后相互抵消药效，甚至引发毒性反应，比如某些寒性药物与热性药物一同使用

时，可能会相互对抗，致使治疗效果减弱，甚至可能引发肠胃不适、食欲减退等副作用，部分药材的毒性或副作用在与其他药物配伍后可能会被放大，产生严重的不良反应。

中药配伍禁忌呈现出药物之间相辅相成的关系，在特定情形下，不同药物组合可发挥提高疗效的效果，此类配伍称作“相使”，然而要是药物配伍不当，就可能出现“相畏”或者“相反”的作用，对药效的发挥造成影响，比如柴胡和黄芩配伍有疏肝解表的功效，而要是把这些药物与有镇静作用的药物配伍，就可能致使效果欠佳，甚至产生不良反应。另外中药配伍禁忌的特点以及药物间的相互制约性，有些药物在配伍时，因为药性彼此对立，容易引发配伍禁忌，有些药物有强烈的排毒作用，要是和有保守作用的药物一同使用，可能会影响排毒效果，让药效发挥受到限制，而且实际上部分药物因为含有活性成分，可能会和其他药物的有效成分发生化学反应，致使药效降低或者出现毒副作用。

2 中药处方审核中配伍禁忌的数字化预警模型的设计

2.1 模型原理

中药处方审核里，配伍禁忌的数字化预警模型运用数据驱动方式，把传统中医药学理论同现代人工智能技术相结合，借助智能化算法来分析评估药物配伍关系，实时识别潜在配伍禁忌。

模型的构建依托于数量众多的中药学文献以及数据库，借助对中药配伍禁忌信息展开收集与整理工作，形成标准化的配伍禁忌数据集，每一种中药材的药性、功效、适应症以及其配伍禁忌均历经了精确的标注与处

理, 这些数据为后续模型的训练奠定了基础, 模型运用深度学习算法, 基于图神经网络以及关联规则挖掘来剖析中药材之间的关系。在中药的配伍分析里, 药物之间的相互关系并非单纯的线性关系, 而是呈现出复杂的多维网络结构, 借助图神经网络, 可更有效地揭示不同药物之间的潜在关联, 判断它们在特定病症下的配伍禁忌, 比如某些药物的禁忌配伍或许并非单一药性所致, 而是药物在具体病理状态下的交互作用。图神经网络可依据药物节点及其连接关系, 识别出潜在的风险, 模型的核心算法依靠实时监测药物间的相互作用以及患者的个体差异, 给出针对个体患者的定制化药物配伍建议, 当输入一个新的处方时, 系统会依据药物间的关系及其已知的禁忌配伍, 自动进行分析并给出预警, 提示某一中药配伍可能与患者的身体状态不相符, 或者与其他药物存在不良交互作用, 避免潜在的药物不良反应。另外模型在输出预警信息时, 会对可能的禁忌配伍及其原因进行详细阐释, 以便医师和药师理解药物配伍禁忌的来源, 提供更为直观的决策支持, 该原理是借助高效的算法与大数据的融合, 提升中药处方审核的精确性和智能化水平。

2.2 基本架构

中药处方配伍禁忌的数字化预警模型架构由多个功能模块构成, 这些模块在整个系统里各自发挥着不一样的作用, 以此保证系统可以高效且准确地针对处方中的药物配伍关系展开分析并进行预警, 具体的架构情况如下所示:

2.2.1 数据采集与预处理模块

此模块承担着从众多中药数据库里获取药物配伍禁忌信息的工作, 所获取的数据当中, 有药材的基本属性, 而且囊括了配伍禁忌、相互作用以及可能引发的不良反应等一系列内容。

2.2.2 知识图谱构建模块

依据数据采集模块所获取的数据, 着手构建中药材的知识图谱, 此图谱把中药材当作节点, 而节点之间的连接就表示药物之间存在的关系, 像是相克、相制、相畏、相使这类关系, 该模块借助图神经网络也就是 GNN 来学习药物之间的复杂关系, 可以更精准地识别出可能出现的配伍禁忌。

2.2.3 配伍禁忌分析模块

此模块作为模型的关键部分, 借助集成多种算法, 来剖析中药材之间的配伍关系, 在输入新处方之际, 系统会依据配伍禁忌分析模块所给出的数据, 自动对药物之间的禁忌配伍给予检测。

2.2.4 个性化预警模块

鉴于患者存在个体差异情况, 像年龄、体质以及所患疾病等方面, 此模块在分析药物配伍禁忌时纳入了个性化相关因素, 借助对患者信息展开收集并加以分析, 系统会依据患者的具体情形, 针对药物配伍开展定制化的评估工作。

2.2.5 反馈与优化模块

此模块承担着收集医师以及药师针对系统输出结果所给出反馈信息的任务, 借助用户反馈, 系统可持续对算法与模型给予优化, 以此提升预警的精确程度以及有效性能, 在实际应用进程当中, 系统可依据反馈持续调整药物之间的禁忌配伍规则, 保证模型在不断变动的临床环境里始终维持高效且精准的状态。

2.2.6 界面与交互模块

为提高用户体验, 系统需简洁且易用的用户界面, 提供直观操作流程, 此模块涉及数据输入、结果展示、预警提示等功能, 方便医师、药师及其他临床人员使用系统。

3 中药处方审核中配伍禁忌的数字化预警模型的功能实现

3.1 数据采集与标准化处理

数据采集与标准化处理模块承担着关键任务, 即从各类医学文献、数据库以及科研报告里, 获取关于中药材及其配伍禁忌的详尽信息, 接着对这些数据展开整理、清洗以及标准化处理, 以用于后续的分析 and 建模, 要达成此目标, 首先得构建一个自动化的爬虫系统, 从各大中药学数据库, 像《中国药典》《中药配伍禁忌大辞典》等当中, 提取结构化数据, 涉及中药材的基本属性, 比如性味、归经、功效, 以及配伍禁忌、相互作用等信息。获取原始数据之后, 数据清洗和标准化成为极为关键的步骤, 数据清洗的主要工作是处理重复数据、缺失值以及错误数据, 举例来说, 要是在不同数据库里, 某一药物存在多个名称或者不同的性味归经数据, 那就得依据标准文献进行统一处理, 标准化的核心以便把所有药材的属性归一化, 可统一对接不同的数据源。在这个步骤里, 运用自然语言处理技术, 也就是 NLP 技术, 对非结构化文本数据进行分词、去噪等处理, 使其转变为可分析的结构化信息, 为保证数据的准确性和时效性, 系统还需要定期自动更新数据源, 每当有新的药物配伍禁忌或者相互作用的研究成果发布时, 系统可自动爬取并更新数据库, 保证预警模型可实时呈现最新的药物配伍禁忌信息。

3.2 知识图谱构建与图神经网络学习

知识图谱构建以及图神经网络也就是 GNN 学习模块乃是该系统的关键部分,承担着对药物之间配伍关系进行建模的任务,借助深度学习算法去识别潜在的禁忌配伍情况,该模块依据药物之间的多维关系展开设计,构建出一个关于中药材的知识图谱,每一种药物都被当作图里的一个节点来表示,而药物节点之间所存在的边则代表着它们彼此之间的配伍关系,像“相克”“相使”“相畏”等之类的关系。

收集来自中药学文献以及数据库里的配伍禁忌信息,以此构建出一个完整的药物关系图谱,每一条配伍禁忌关系都作为一个边与药物节点相连,为保证图谱精准,运用图数据库例如 Neo4j 来存储和管理,方便后续查询与更新,借助图神经网络也就是 GNN 对这个知识图谱展开学习。GNN 可以捕捉图中节点间的复杂关系,凭借反向传播算法自动调整图谱里节点间的权重,识别药物间的潜在交互,GNN 可学习药物节点间的直接关系,还可以凭借节点的邻接关系学习到更深层次的隐性配伍禁忌信息,这种深度学习方式让系统可以识别出传统配伍禁忌以外的潜在药物间相互作用。GNN 在处理药物间复杂配伍关系时,还可以考虑药物的多维特性像性味、功效、适应症等,借助节点的属性提升预测的准确性和精度。

3.3 配伍禁忌分析与预警推送

配伍禁忌分析与预警推送模块属于系统核心功能范畴,其职责是针对处方里的药物组合展开实时分析,判定有无配伍禁忌情况,该模块借助接收用户所输入的中药处方信息,针对处方内全部药物间的配伍关系自行实施分析,一旦探测到存在潜在的禁忌配伍情形,系统便会即刻触发预警机制,为医师或者药师给予相应建议。配伍禁忌分析的关键之处在于把药物节点间的配伍关系同图神经网络模型的输出相互结合,依据药物的属性、患者的体质状况、疾病所处状态以及药物彼此间的相互作用,自动对药物配伍的合理性作出评估,比如当输入一个由多种中药构成的处方之后,系统会依据数据库里的配伍规则,辨别药物之间是否存在相克、相制、相畏等禁忌关系。要是某种药物配伍有可能对患者产生毒性反应或者引发不良反应,系统会依靠图神经网络给出警告,并推送如更换某一味药材或者调整剂量等建议。

3.4 个体化推荐与决策支持

个体化推荐与决策支持模块属于系统关键功能部

分,其作用是针对不同患者给出定制化配伍建议,模块依据患者具体状况像年龄、性别、体质、病理状态等展开个性化分析,结合药物属性以及配伍禁忌,推送最为适宜的配伍方案,在该模块里,患者基本信息与病史是关键输入数据。借助患者年龄、性别、体质等信息,系统可判断何种配伍最为合适,比如针对年老体弱患者,系统会避开一些药效过强的药物组合,对于孕妇或哺乳期妇女,系统会着重关注药物安全性,防止使用禁忌药物,为达成此功能,系统还需依据临床病例库训练,让模型借助学习大量实际临床案例来预测药物个体化效果。在决策支持上,系统能提供药物副作用评估、疗效评估等功能,协助医师全面知晓药物使用风险,做出更精准治疗决策。

4 结语

本文聚焦于中药处方配伍禁忌的数字化预警模型,借助数据采集、知识图谱构建、深度学习算法以及智能预警推送等技术方式,达成了配伍禁忌的智能识别以及实时监控,将传统中医药学理论与现代人工智能技术相结合,该模型可依据患者个体差异,精准辨别潜在的配伍风险,提升临床中药使用的安全性与疗效。引入图神经网络后,系统提高了对药物间复杂关系的理解能力,还可以进行自我学习与优化,以适应变得日益复杂的临床需求,此模型的达成,为中药领域的数字化转型提供了理论依据和技术支撑,同时也为未来中药治疗方案的智能化、个性化开创了新途径。

参考文献

- [1] 洪顺福,郑颖,阮菲,等.基于人工智能构建“两审两拦”模式的中药饮片处方前置审核实践效果[J].中国乡村医药,2024,31(03):42-44.
- [2] 谢灵波,何莹.基于人工智能的处方审核实践与药师干预结果分析[J].中国处方药,2021,19(10):52-54.
- [3] 胡恒昶,莫沙,苏可,等.中医大脑-人工智能在中医临床中的创新性应用[J].中国民间疗法,2021,29(19):90-93.
- [4] 邱季,李睿,朱文靖,等.我院 PIVAS 个体化输液顺序调控实践研究[J].中国药房,2020,31(01):117-122.

作者简介:王磊(1986.7--),男,汉族,黑龙江鹤岗人,中级中药师,执业中药师,硕士,主要从事中药学专业教育研究。