

# 基于 XGBoost 机器学习模型的住院药房口服药拆零用量预测效果分析

钮建会\*, 徐姗姗\*(首都医科大学附属北京同仁医院药学部, 北京 100730)

中图分类号 R97;R952 文献标志码 A 文章编号 1672-2124(2026)04-0389-04

DOI 10.14009/j.issn.1672-2124.2026.04.002



**摘要** 目的:探讨使用极端梯度提升(XGBoost)机器学习模型预测住院药房口服药拆零用量需求的可行性,提升药品拆零计划的科学性。方法:基于该院20种常用拆零口服药52周(2024年7月至2025年6月)的拆零用量数据,采用XGBoost算法建立未来1周口服药拆零用量的预测模型。模型纳入了历史用量和长假等特征,并通过比较不同历史数据长度(预测周前1~5周)的预测效果,确定最优模型,并将该模型预测与传统药师人工预测进行对比。结果:在与4个周次的人工预测对比中,XGBoost模型展现出显著的优越性。模型的平均绝对误差显著低于人工预测[98.65(95%CI=70.19~127.12) vs. 2 001.21(95%CI=1 344.26~2 658.17)],差异有统计学意义( $P<0.001$ )。同时,模型预测的平均绝对百分比误差远低于人工预测(21.09% vs. 314.16%)。结论:与传统药师人工预测相比,XGBoost机器学习模型在住院药房口服药拆零用量需求中的预测性能更加优越,可以更好地辅助口服药拆零计划的制定,提升药品质量管理水平。

**关键词** XGBoost模型;智慧药学;药品需求预测

## Analysis of Prediction Performance for Inpatient Pharmacy Oral Medication Split-Packaging Demand Based on XGBoost Machine Learning Model

NIU Jianhui, XU Shanshan (Dept. of Pharmacy, Beijing Tongren Hospital, Capital Medical University, Beijing 100730, China)

**ABSTRACT** **OBJECTIVE:** To explore the feasibility of using the XGBoost machine learning model to predict the Inpatient Pharmacy oral medication split-packaging demand, and to improve the scientific basis of medication repackaging plans. **METHODS:** Based on 52 weeks (from Jul. 2024 to Jun. 2025) of split-packaging data for 20 commonly used oral drugs in the hospital, the XGBoost algorithm was used to establish the prediction model of the next week's oral split-packaging dosage. Historical utilization data and public holiday information were included as features. The prediction performance of models using different historical data windows (from 1 to 5 weeks prior to the forecast week) was compared to determine the optimal model, which was evaluated against traditional pharmacist manual forecasting. **RESULTS:** In comparison with four weeks of manual forecasts, the XGBoost model demonstrated significant superiority. The mean absolute error of the model was significantly lower than that of manual forecasts [98.65 (95% CI = 70.19-127.12) vs. 2 001.21 (95% CI = 1 344.26-2 658.17)], with statistically significant differences ( $P<0.001$ ). Meanwhile, the mean absolute percentage error of the model was significantly lower than that of manual forecasts (21.09% vs. 314.16%). **CONCLUSIONS:** Compared with the traditional pharmacist manual forecasting, the XGBoost machine learning model has a more superior prediction performance in Inpatient Pharmacy split-packaging demand, which can better assist the formulation of oral medication repackaging plans and enhance the overall quality management of medication.

**KEYWORDS** XGBoost model; Smart pharmacy; Medication demand forecasting

为满足临床用药需求并避免资源浪费,住院药房需对部分口服药进行拆零处理<sup>[1]</sup>。拆零药品脱离原包装后易受环境影响<sup>[2]</sup>。若拆零过多,可能带来稳定性及质量安全风险<sup>[3-4]</sup>;拆零不足,则影响摆药效率<sup>[5]</sup>。当前拆零计划主要依赖药师

经验,存在主观性和差异性,难以精准预测药品需求<sup>[6]</sup>。极端梯度提升(extreme gradient boosting, XGBoost)算法作为一种常用的机器学习方法,具备良好的非线性建模能力和预测精度,已广泛应用于药学数据预测<sup>[7-11]</sup>。本研究基于住院药房口服药的历史用药数据,构建XGBoost模型预测未来1周的拆零需求,探索其在辅助科学制定拆零计划中的可行性,为优化药品质量管理与提升用药安全提供数据支持。

\* 主管药师。研究方向:医院药学。E-mail:njhhappy@sina.com

# 通信作者:副主任药师。研究方向:临床药学、慢病治疗管理、抗感染药物治疗等。E-mail:shan-shan1111@163.com

# 1 资料与方法

## 1.1 资料来源

回顾性收集 2024 年 7 月至 2025 年 6 月(共 52 周)我院住院药房 20 种常用拆零口服药(均为核心品种,其筛选兼顾了高消耗频率与 52 周数据的完整性,能代表拆零工作主体的各主要治疗领域常用药)的周拆零用药数据(以单片计)。考虑到本研究数据具有明确的时间序列特征,为模拟真实世界中“用历史预测未来”的应用场景并避免数据泄漏,本研究采用时间顺序划分法,将前 42 周(约 80%)的数据作为训练集,后 10 周(约 20%)的数据作为独立的外部验证集。该划分比例旨在平衡模型训练与性能评估的需求,即在确保模型有充足历史数据学习规律的同时,预留一段显著的时间跨度以充分验证其泛化能力。此外,为了与人工预测性能进行对比,本研究还额外收集了上述药品在特定 4 个周次内的药师人工预测数据。

## 1.2 模型特征变量

本研究构建预测模型时,主要纳入了历史用量特征、时间序列特征等 2 类特征。(1)历史用量特征:以历史拆零用药量作为模型的主要输入变量。为探究最优的预测效果,本研究分别测试了采用预测周前 1~5 周不同长度的历史数据作为特征的情况。(2)时间序列特征:为捕捉节假日对用药量的影响,本研究构建了“是否包含长假(>3 d)”这一二元特征(1 代表是,0 代表否),并将其作为额外变量一同输入模型。

## 1.3 性能评估指标

为全面、客观地评价不同预测方法的性能,并最终比较模型与人工预测的优劣,本研究选取了平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)及平均绝对百分比误差(MAPE)3 个核心指标。(1)MAE:表示预测结果与实际值之间的平均差距,数值越

小说明预测越准确<sup>[12]</sup>。计算公式为  $MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|$ 。

(2)RMSE:不仅考虑了预测误差的大小,还更重视较大误差的影响,能够反映模型在面对用药量大幅波动时的稳定表现;数值越小,表示模型稳定性越好。计算公式为  $RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$ 。

(3)MAPE:表示预测误差占实际值的百分比,方便在不同方法间比较预测准确性;数值越低,表示预测结果与实际情况越接近<sup>[13]</sup>。计算公式为  $MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|$ 。上述公式中, $n$  为样本总数; $y_i$  为第  $i$  个

样本的真实值; $\hat{y}_i$  为第  $i$  个样本的预测值。MAPE 是衡量预测模型准确性的指标,学者 Lewis 在 1982 年提出基于 MAPE 的预测准确性分级标准,MAPE < 10% 为高度准确,MAPE 在 10%~<20% 为良好,MAPE 在 20%~50% 为可接受,MAPE > 50% 则表示预测不准确<sup>[14]</sup>。

## 1.4 建模与评价流程

1.4.1 最优历史数据长度的筛选:为确定模型预测时参考多长的历史数据效果最佳,本研究构建并比较了 5 种情况。在这 5 种情况下,“是否包含长假”这个特征都始终被纳入模型,唯一的不同之处在于,模型分别参考了预测周前 1~5 周的历

史用量数据。随后,在同一个外部验证集上,依据 MAE、RMSE 及 MAPE 等 3 个核心指标,评估并比较这 5 种情况下的预测性能,最终筛选出表现最佳的历史数据长度(即预测未来 1 周拆零用量时应参考过去几周的数据)。

1.4.2 模型与人工预测对比:选取数据完整的 4 个周次,收集同期药师人工预测数据。采用筛选出的最优历史数据长度,使用 XGBoost 模型对这 4 周的药品未来 1 周的拆零需求进行预测,并计算两种方法的各项误差指标,进行性能比较。

1.4.3 统计学检验:为在品种层面进行比较,本研究计算两种预测方法下每种药品(共 20 种)在上述 4 周内的平均 MAE,从而获得 20 组配对数据。对 20 组配对数据的差值采用 Shapiro-Wilk 检验进行正态性检验,若符合正态分布,则采用配对样本  $t$  检验;若不符合正态分布,则采用配对样本 Wilcoxon 符号秩检验分析两组数据差异的统计学显著性。

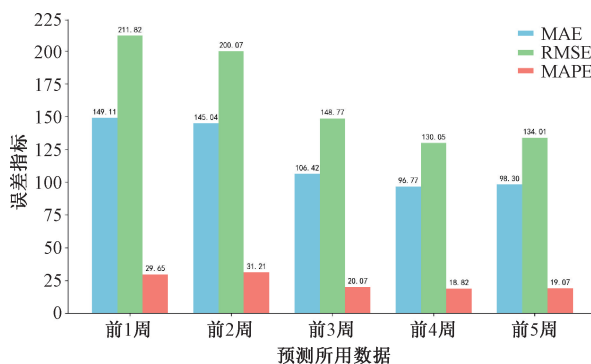
## 1.5 统计学方法

本研究采用 Python 3.9 (Anaconda Distribution) 软件进行数据分析。数据处理与模型构建主要基于 pandas、scikit-learn 及 xgboost 等开源科学计算库完成。统计检验的检验水准统一设为  $\alpha = 0.05$ ,  $P < 0.05$  为差异有统计学意义。

# 2 结果

## 2.1 最优历史数据特征长度的筛选与确定

为了确定模型预测时参考多长的历史数据效果最佳,本研究比较了 5 种历史数据长度(预测周前 1~5 周)的预测情况,其在外部验证集上的性能评估结果见图 1。结果表明,所参考的历史数据长度对模型的预测精度有影响。其中,采用预测周前 4 周历史用药量作为输入特征的预测方法,在所有评估指标上均表现最佳,其 MAE 为 96.77, RMSE 为 130.05, MAPE 为 18.82%;根据 Lewis 分级标准<sup>[14]</sup>,该方法的预测准确性良好。

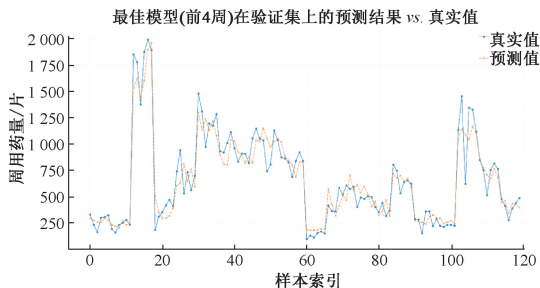


该图展示了基于不同历史数据长度(预测周前 1~5 周)的预测方法在外部验证集上的各项误差指标。

图 1 不同历史数据长度(预测周前 1~5 周)下的模型预测误差比较

采用最优方法(即参考前 4 周历史数据)时,模型在外部验证集上的预测值与真实值的拟合情况见图 2。可以看出,模型的预测曲线能够较好地跟随真实拆零用量曲线的波动趋势,在用量的高峰和低谷期均能做出较为准确的响应,显示出良好的趋势捕捉能力。

综合各项误差指标和拟合图像,最终确定“参考预测周前



横坐标表示各药品在不同周的拆零数据序列;纵坐标为该周的拆零用量。

图2 最优预测方法下模型预测值与实际值的拟合对比图

4周的历史用量”为本研究预测未来1周拆零用量的最佳预测方法,并将其用于后续与人工预测的准确度比较分析。

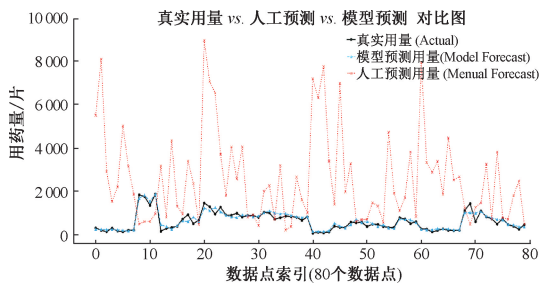
### 2.2 最佳预测方法模型与人工预测的准确度比较

为评估 XGBoost 机器学习模型在实际工作中的应用潜力,本研究将筛选出的最佳预测方法(即参考前4周历史数据)应用于4个完整周次的预测,并与同期的药师人工预测进行比较。两种预测方法在3种误差指标方面的比较见表1。可见,XGBoost模型在所有评估维度上均展现出显著的优越性,该模型的MAE和RMSE相较于人工预测的降幅均>95%,而MAPE也相对降低了93.29%,说明该模型的预测结果不仅在平均误差上显著低于人工预测,并且产生极端偏差的可能性更小。

表1 两种预测方法的误差指标对比

误差指标	XGBoost 模型预测	药师人工预测
MAE	98.65	2 001.21
RMSE	135.00	2 707.10
MAPE/%	21.09	314.16

真实拆零用量与 XGBoost 模型预测、人工预测的趋势对比见图3。由图3可见,XGBoost模型的预测曲线能紧密跟随真实用量的变化趋势;而人工预测的曲线则大幅偏离,其误差和波动性均明显更高。表明相较于传统的人工经验,XGBoost模型在预测中具有显著的准确性与稳定性优势。



横坐标表示各药品在不同周的拆零数据序列;纵坐标为该周的拆零用量。

图3 真实拆零用量与 XGBoost 模型预测、人工预测的趋势对比图

### 2.3 预测误差的统计学检验分析

为从统计学层面进一步验证两种预测方法的性能差异,本研究对20种药品的MAE进行了配对比较。由于MAE的差值经 Shapiro-Wilk 检验不满足正态分布( $P=0.0053$ ),故最终

采用配对样本 Wilcoxon 符号秩检验分析两组数据差异的统计学显著性。结果显示,XGBoost模型的平均MAE显著低于人工预测[98.65(95%CI=70.19~127.12) vs. 2 001.21(95%CI=1 344.26~2 658.17)];配对样本 Wilcoxon 符号秩检验表明,该差异有统计学意义(Statistic=0.0, $P<0.001$ )。置信区间的对比进一步证明了模型预测的稳定性,模型MAE的95%CI宽度(56.93)远小于人工预测(1 313.91),表明其预测结果的波动范围更窄,可靠性更高。

## 3 讨论

科学合理地制定药品拆零计划,是保障药品质量与用药安全的重要环节<sup>[15]</sup>。我院住院药房通常提前制定下一周口服药拆零计划,并按计划完成拆零操作,以保障药品质量和工作效率。拆零后的药品脱离原包装,易受湿度、光照、氧化等环境影响<sup>[16]</sup>。若拆零计划不合理,可能导致部分药品提前拆零或短时间内集中拆零,尤其对于稳定性要求高、易吸潮、易降解、易氧化的药品,存在较大质量风险和用药安全隐患<sup>[17-19]</sup>。例如,曾有患者反映阿卡波糖片“口感不同”,可能与该药作为高吸湿性药物脱离原包装后易吸潮有关<sup>[20]</sup>;吠塞米片脱离原包装时间过长易黄变<sup>[21]</sup>;有文献报道,替米沙坦片拆零后约2d即发生潮解变质<sup>[22]</sup>。以上问题提示,为了保证药品的质量,科学制定拆零计划至关重要。然而,本研究结果显示,药师人工预测的误差较大。分析其原因,主要是在实际工作中,为保障发药工作的连续性,药师往往存在“宁多勿少”的心理倾向,导致计划拆零量远超实际需求。这反映了人工预测依赖个人经验,存在主观性且缺乏科学性的局限。

针对上述局限性,本研究引入了 XGBoost 机器学习模型。该算法是一种基于决策树的集成算法,通过逐步修正预测误差提升预测准确性<sup>[23]</sup>。将该模型应用于住院药房口服药未来1周拆零用量预测,有望为药师科学制定药品拆零计划提供一种新的思路和潜在的技术支持。

本研究结果表明,采用最优历史数据长度(参考预测周前4周)的 XGBoost 模型,在独立的外部验证集上表现出良好的预测性能。为进一步验证其在真实工作场景中的应用潜力,本研究开展了模型预测与传统药师人工预测的对比研究。为实现公平比较,本研究将人工预测值定义为药师当周的拆零计划与已有拆零库存之和,以真实还原其对未来药品用量的判断。对比结果显示,XGBoost模型的预测准确性优于人工经验,这一差异也得到了配对样本 Wilcoxon 符号秩检验的统计学支持。本研究发现,XGBoost模型预测误差的95%CI远比人工预测更为狭窄,表明模型提供的预测结果不仅更准,而且更稳定、更可靠。该模型的引入有望为药师提供更加科学、可靠的数据支持,以辅助拆零计划的制定,降低因过度拆零可能带来的药品稳定性与使用安全风险,提升药品质量管理水平与工作效率。

本研究存在一定局限性:(1)本研究仅纳入了部分常用药品,模型对于用量小或需求波动剧烈的特殊药品的泛化能力有待进一步验证。(2)本研究虽已将长假作为时间特征纳入模型,但对于其他如季节性疾病(如流感季)等关键外部因素,仍未能实现有效量化。(3)本研究采用了固定的训练集与验

证集比例,未来的研究可尝试不同的划分点进行敏感性分析,以进一步验证模型性能的稳健性。后续工作还将致力于扩大药品覆盖范围,并构建更精细、更多维度的特征集,以增强XGBoost机器学习模型在真实临床场景中的预测稳定性与实用价值。

综上所述,基于历史用药数据和节假日特征构建的XGBoost机器学习模型,在住院药房口服药拆零用量预测中表现出较好的准确性,且其预测结果的稳定性与可靠性也显著优于药师人工经验。该模型作为一种有效的预测工具,在辅助科学制定拆零计划方面展现出巨大的应用潜力。该模型的引入,有望帮助药师更精准地预测药品拆零需求,减少因过度拆零导致的药品浪费与质量风险,进而减少患者用药安全隐患,为提升住院药房的药品质量管理水平提供新的思路与方法。

(利益冲突声明:本文所有作者均声明不存在利益冲突)

## 参考文献

[1] 光琴,张蕾,卢今,等. 药房拆零药品精细化管理模式探索[J]. 中国药业, 2022, 31(13): 25-29.

[2] 国家药监局. 化学药物稳定性研究技术指导原则[EB/OL]. (2005-03-18) [2025-10-09]. <https://www.nmpa.gov.cn/wwwroot/gsz05106/01.pdf>.

[3] 朱彰彰,叶小燕,徐璐,等. 精细化管理模式在药房拆零药品管理中的应用[J]. 中医药管理杂志, 2023, 31(17): 141-143.

[4] 吴珍花. 中心药房拆零药品存在的隐患及其处置[J]. 中国处方药, 2021, 19(11): 42-43.

[5] 曹凯,钱佩佩,田京辉,等. 库存周转率用于自动片剂摆药机药品库存管理的探讨[J]. 中国药事, 2018, 32(2): 256-259.

[6] 冉婕,刘吉芳,龙葵英,等. 住院药房口服药品拆零管理现状与改进措施[J]. 中国药业, 2025, 34(1): 29-31.

[7] 齐巧娜,刘艳,陈霁晖,等. 探讨一种机器学习方法在临床药理学领域的应用进展[J]. 实用药物与临床, 2022, 25(6): 563-567.

[8] FOURKIOTIS K P, TSADIRAS A. Applying machine learning and statistical forecasting methods for enhancing pharmaceutical sales predictions[J]. Forecasting, 2024, 6(1): 170-186.

[9] 李建斌,雷鸣颖,戴宾,等. 考虑促销因素的医药电商平台需求预测研究[J]. 中国管理科学, 2022, 30(12): 120-130.

[10] 付洛宇,朱一阳,吴春勇,等. 基于机器学习的药物血浆蛋白结合率的预测[J]. 中国药科大学学报, 2021, 52(6): 699-706.

[11] 吴行伟,刘馨宇,龙恩武,等. 机器学习在临床药物治疗中的研究进展[J]. 中国全科医学, 2022, 25(2): 254-258.

[12] 刘佳,江慧琳,王静,等. 基于机器学习的区域救护车需求量预测模型比较[J]. 中国急救医学, 2022, 42(10): 893-898.

[13] ENSAFI Y, AMIN S H, ZHANG G Q, et al. Time-series forecasting of seasonal items sales using machine learning—a comparative analysis[J]. Int J Inf Manag Data Insights, 2022, 2(1): 100058.

[14] LEWIS C D. Industrial and business forecasting methods [M]. London: Butterworth Scientific, 1982: 40-41.

[15] 谭洁英,梁伟亮,张淑敏,等. 精细化管理与品管圈在药品拆零管理中的联合应用研究[J]. 海峡药学, 2021, 33(10): 192-194.

[16] 李云娣,邱婷婷,孔宪伟,等. 医疗失效模式与效应分析在口服拆零药品中的应用[J]. 中国合理用药探索, 2022, 19(5): 96-101.

[17] 孙雪林,钱东方,赵文靖,等. 医疗机构药品使用风险管理立意探究[J]. 中国食品药品监管, 2024(9): 34-39.

[18] 陈海群,郑则辉,林凯. 药房拆零药品的质量影响因素分析及质量风险管理的效果观察[J]. 中国处方药, 2022, 20(3): 67-69.

[19] 黄雅晴. 住院药房拆零药品存在的问题分析[J]. 中医药管理杂志, 2023, 31(14): 92-94.

[20] 杭州华东医药集团生物工程研究所有限公司. 阿卡波糖咀嚼片及其制备方法: CN200810063335. 2[P]. 2009-01-07.

[21] GIANNETTI M, CANALE V C, MICHELI L, et al. An insight into the degradation processes of the anti-hypertensive drug furosemide[J]. Molecules, 2023, 28(1): 381.

[22] 崔满仓,魏伟,刘弘. 全自动片剂摆药机对药品拆零管理的利与弊[J]. 中国药事, 2014, 28(8): 896-898.

[23] CHEN T Q, GUESTRIN C. XGBoost: a scalable tree boosting system[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2016: 785-794.

(收稿日期:2025-10-09 修回日期:2025-12-08)

(上接第388页)

[8] 中国医药教育协会. 个体化用药基因检测及应用规范: T/CMEAS 015—2023[S]. 北京:中国医药教育协会, 2023: 1-19.

[9] 中国标准化协会. 液相色谱-质谱联用用于临床治疗药物监测通用技术要求: T/CAS 678—2023[S]. 北京:中国标准化协会, 2023: 1-16.

[10] 中国医疗保健国际交流促进会基层检验技术标准化分会, 中国医院协会临床检验专业委员会. 液相色谱-串联质谱法临床样品前处理专家共识[J]. 中华预防医学杂志, 2023, 57(12): 2073-2085.

[11] 中华医学会检验医学分会临床生化检验学组, 中国医学装备协会检验医学分会. 医疗机构临床质谱实验室建设共识[J]. 中华检验医学杂志, 2023, 46(8): 783-791.

[12] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典: 四部[S]. 2025年版. 北京:中国医药科技出版社, 2025: 62-90.

[13] 国家质量监督检验检疫总局, 国家标准化管理委员会. 医学实验室 安全要求: GB 19781—2005[S]. 北京:中国标准出版社, 2005: 1-15.

[14] 国家卫生健康委员会. 药事管理专业医疗质量控制指标(2025版)[EB/OL]. (2025-08-04) [2026-02-09]. [https://www.nhc.gov.cn/zyygc/c100068/202509/56aedbf79f6e476f89\\_657d61e466f95a/files/1.%E8%8D%AF%E4%BA%8B%E7%AE%A1%E7%90%86%E4%B8%93%E4%B8%9A%E5%8C%BB%E7%96%97%E8%B4%A8%E9%87%8F%E6%8E%A7%E5%88%B6%E6%8C%87%E6%A0%87%EF%BC%882025%E5%B9%B4%E7%89%88%EF%BC%89.pdf](https://www.nhc.gov.cn/zyygc/c100068/202509/56aedbf79f6e476f89_657d61e466f95a/files/1.%E8%8D%AF%E4%BA%8B%E7%AE%A1%E7%90%86%E4%B8%93%E4%B8%9A%E5%8C%BB%E7%96%97%E8%B4%A8%E9%87%8F%E6%8E%A7%E5%88%B6%E6%8C%87%E6%A0%87%EF%BC%882025%E5%B9%B4%E7%89%88%EF%BC%89.pdf).

(收稿日期:2026-02-09 修回日期:2026-03-25)