
东北林业大学梁大鑫副教授团队-可解释性AI揭示透明质酸-多巴胺水凝胶的粘附与力学性能调控密码

MDPI Gels

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41016.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

东北林业大学梁大鑫副教授团队-可解释性AI揭示透明质酸-多巴胺水凝胶的粘附与力学性能调控密码 MDPI Gels。 论文标题：Interpretable Machine Learning Insights into Adhesion and Modulus of Biomedical HA – Dopamine Hydrogels

论文链接：<https://www.mdpi.com/2310-2861/12/3/206>

期刊名：Gels

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/gels>

一、引言

透明质酸-多巴胺 (HA-Dopa) 水凝胶因其优异的生物相容性、粘附性和可降解性，在伤口敷料、组织密封、可穿戴传感器等生物医学领域展现出良好的应用前景。然而，这类水凝胶的粘附强度与弹性模量受分子量、取代度、交联剂浓度、pH值等多种配方参数的复杂耦合影响，传统试错法难以高效优化，制约了其进一步应用。

针对这一问题，东北林业大学梁大鑫课题组构建了可解释机器学习预测框架，结合SHAP可解释性分析，系统探讨了各配方参数对水凝胶粘附强度与弹性模量的定量贡献及交互作用，为HA-Dopa水凝胶的配方优化提供了数据驱动的参考依据。

二、材料与方法

本研究构建了包含228组实验数据的综合数据集，涵盖HA-Dopa水凝胶配方设计的关键参数，包括透明质酸分子量与浓度、多巴胺取代度、交联剂浓度、pH值以及第二聚合物的浓度与类型等。以粘附强度和弹性模量作为预测目标，系统探讨配方参数与水凝胶性能之间的定量关系。

在建模策略上，研究对比了随机森林、梯度提升回归和多层感知机三种主流机器学习算法的预测性能，综合评估后选用梯度提升回归作为最优模型，并通过网格搜索进行超参数优化。为增强模型的可解释性，引入SHAP方法对模型进行解析，量化各配方参数对预测结果的贡献程度，并分

析参数间的非线性交互效应，从而为配方优化提供可解释的理论依据。

三、分析与结果

结论一：透明质酸分子量与多巴胺取代度对粘附强度影响显著

SHAP分析结果表明，透明质酸分子量和多巴胺取代度是影响粘附强度的主要因素，其贡献程度明显高于其他配方参数。较高的分子量有助于增强分子链缠结并增加界面接触面积，而较高的取代度则提供更多的儿茶酚官能团用于界面粘附。两者的协同作用与粘附性能的提升密切相关。这一结果提示，在配方设计中可优先考虑选用较高分子量的透明质酸并适当提高多巴胺修饰度。

结论二：弹性模量受多参数共同影响，交联剂作用较为突出

与粘附强度不同，弹性模量的特征重要性分布相对均衡，透明质酸分子量、取代度、透明质酸浓度和交联剂浓度均表现出一定的贡献。其中，交联剂浓度对弹性模量的影响较为突出，而其对粘附强度的贡献则相对有限，这表明交联过程主要影响水凝胶的本体力学性能，而非界面粘附特性。因此，在需要调控弹性模量时，可能需要综合考虑多个参数的协同优化。

结论三：配方参数间存在非线性交互效应

SHAP依赖图分析揭示了配方参数间的交互作用规律：

(1) 取代度与分子量的交互：当多巴胺取代度和透明质酸分子量同时处于较高水平时，粘附强度表现出较为明显的提升趋势，提示两者可能存在协同效应。

(2) 透明质酸浓度与取代度的耦合：较高的透明质酸浓度需与较高的取代度配合，才能对弹性模量产生较为明显的正向影响；单独提高透明质酸浓度而取代度不足时，对模量的影响相对有限。这提示我们在实验中应避免盲目单一地增加某一成分的浓度，而是需要关注配比的平衡，从而减少材料浪费和试错成本。

(3) 交联剂浓度的复杂影响：交联剂浓度对弹性模量的影响呈现一定的非单调性，其作用效果与透明质酸分子量和取代度的取值相关，提示交联剂用量需与其他配方参数相匹配。

四、展望与结论

本研究将可解释机器学习方法应用于HA-Dopa水凝胶的性能预测，构建了针对粘附强度和弹性模量的预测模型，测试集 R^2 分别达到0.99和0.94，并通过交叉验证确认了模型的稳定性。模型通过5折交叉验证结合多随机种子初始化策略进行稳健性评估——两种目标模型的交叉验证 R^2 均值均超0.9，且不同种子间性能波动极小，充分验证了模型的优异泛化能力，有效防止了过拟合风险。结合SHAP分析，研究识别了影响粘附强度与弹性模量的主要配方参数，并探讨了其可能的物理化学机制，包括分子链缠结、儿茶酚基团的界面作用以及交联网络的调控作用等。该框架将数据驱动预测与机理层面的解释相结合，为生物医用高分子材料的配方优化提供了一种可参考的方法。

本研究的结果对HA-Dopa水凝胶的应用设计具有一定的参考价值：在伤口敷料与组织密封领域，可根据软组织的力学需求调整粘附强度与弹性模量的配比；在药物缓释载体方面，可通过调控

交联密度影响药物释放速率；在3D生物打印领域，可为墨水配方的设计提供参考依据。

本研究也存在一定的局限性：数据来源于已发表文献，部分参数 (如pH值) 的变化范围较窄，且缺乏独立的外部验证数据集。未来，随着相关数据的进一步积累和实验验证的推进，该框架有望拓展至其他多糖基或蛋白基水凝胶体系，为功能水凝胶的设计提供更广泛的支持。

引用格式：

Zhang, Y.; Xu, Y.; Shi, Y.; Liang, D. Interpretable Machine Learning Insights into Adhesion and Modulus of Biomedical HA – Dopamine Hydrogels. Gels 2026, 12, 206. <https://doi.org/10.3390/gels12030206>.

期刊介绍

主编：Esmail Jabbari, University of South Carolina, USA

Chuanliang Feng, Shanghai Jiao Tong University, China

期刊主题覆盖凝胶、有机凝胶、水凝胶、离子凝胶、干凝胶、胶体凝胶、凝胶化机理相关的计算模型及凝胶材料相关的合成、表征和应用等。

2025 Impact Factor 6.4 2025 CiteScore 10.3 Time to First Decision 13 Days Acceptance to Publication 2.8 Days

来源：Gels

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发