

饼状图

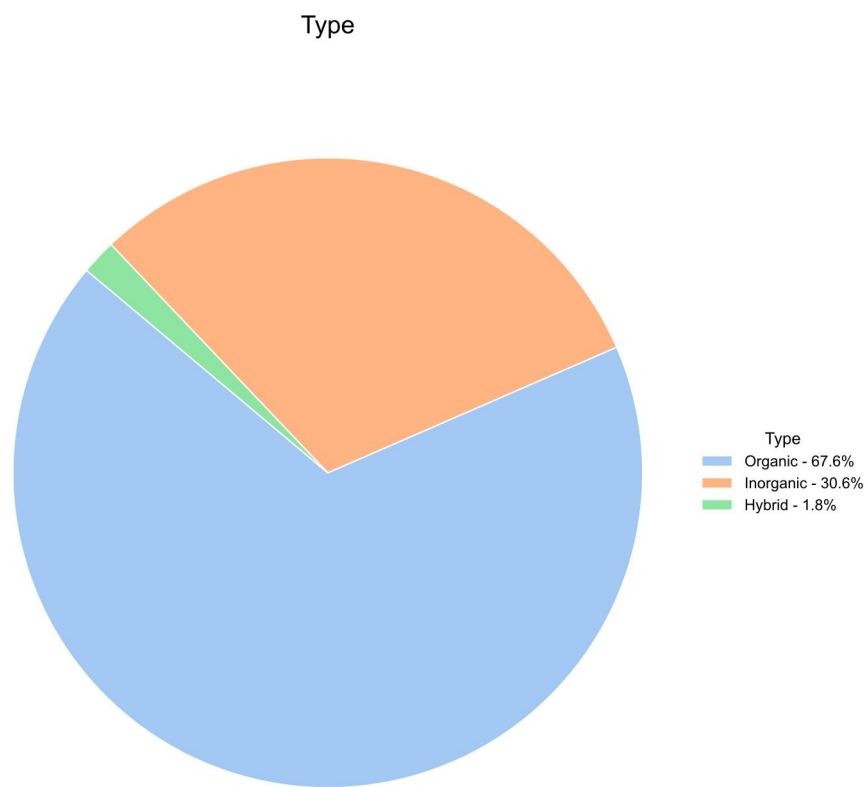


图 1 纳米颗粒载体类型（Type）的比例分布

MAT

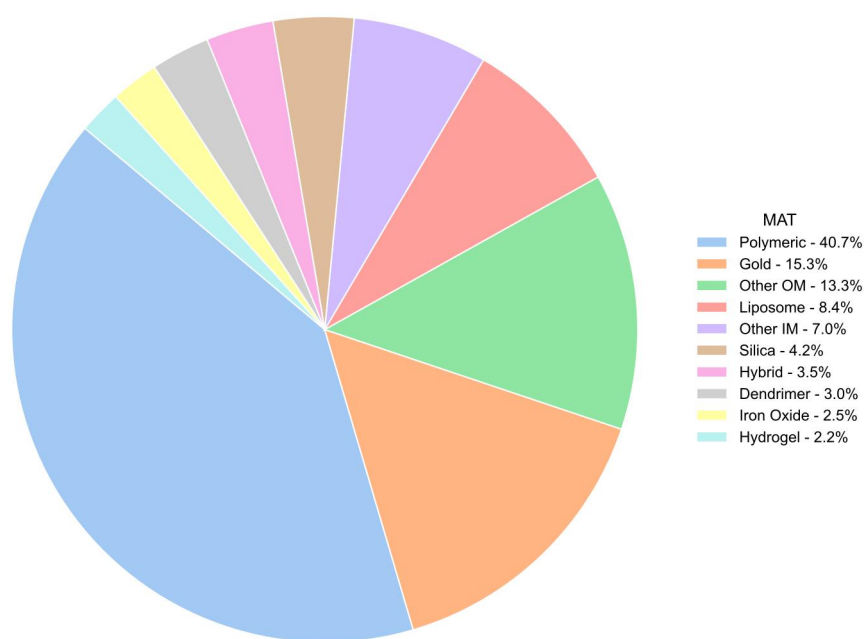


图 2 纳米颗粒材料类别（MAT）的比例分布

TS

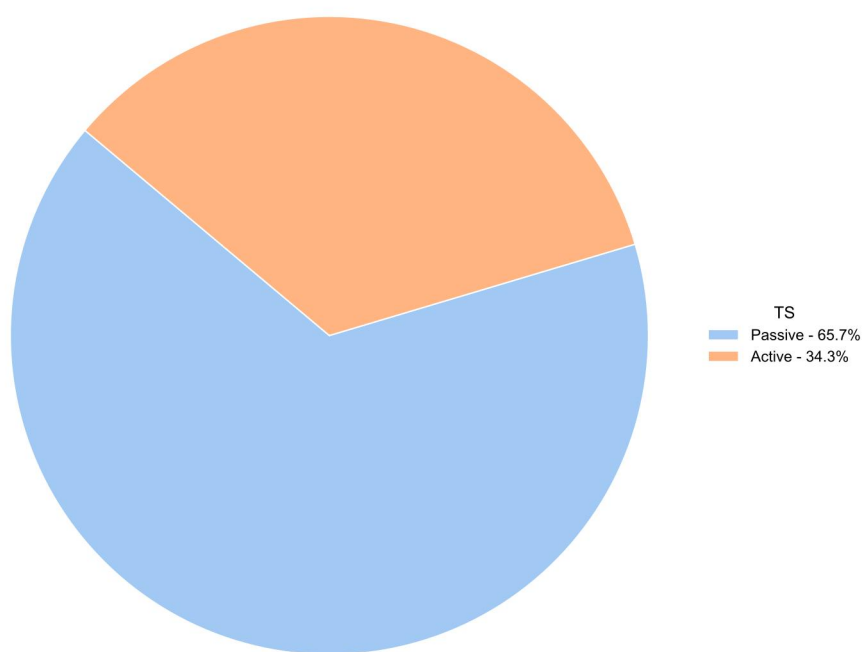


图 3 纳米颗粒靶向策略 (TS) 的比例分布

CT

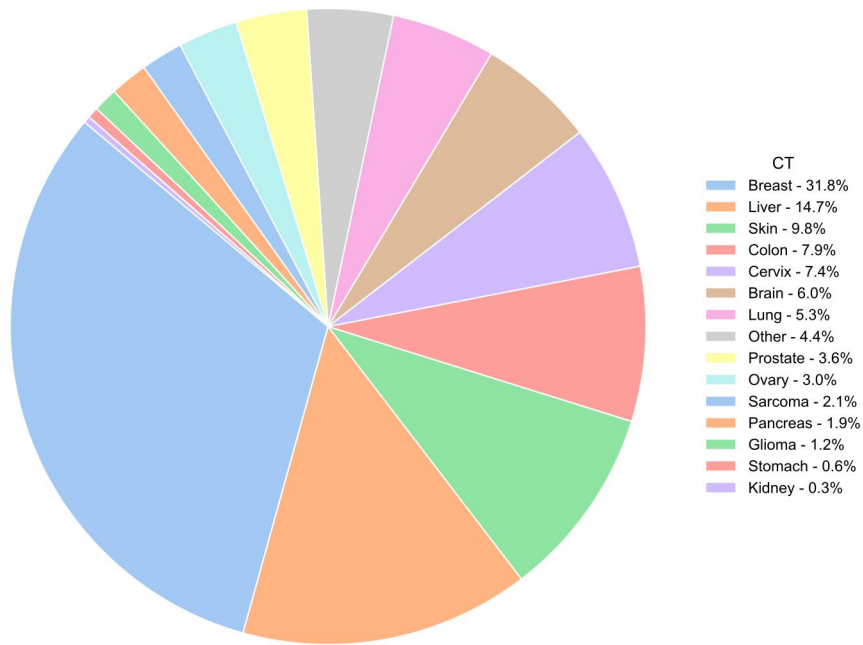


图 4 不同肿瘤类型（CT）的比例分布

TM

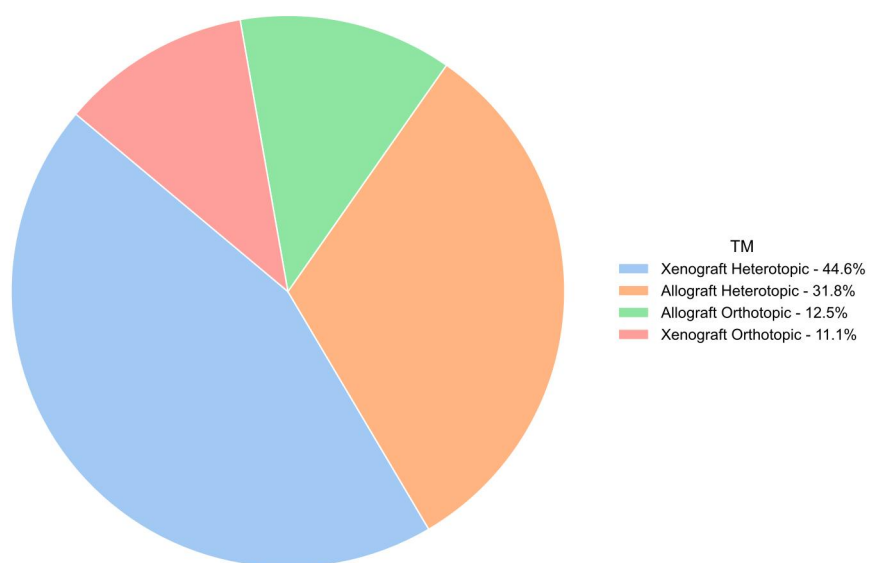


图 5 不同肿瘤模型（TM）的比例分布

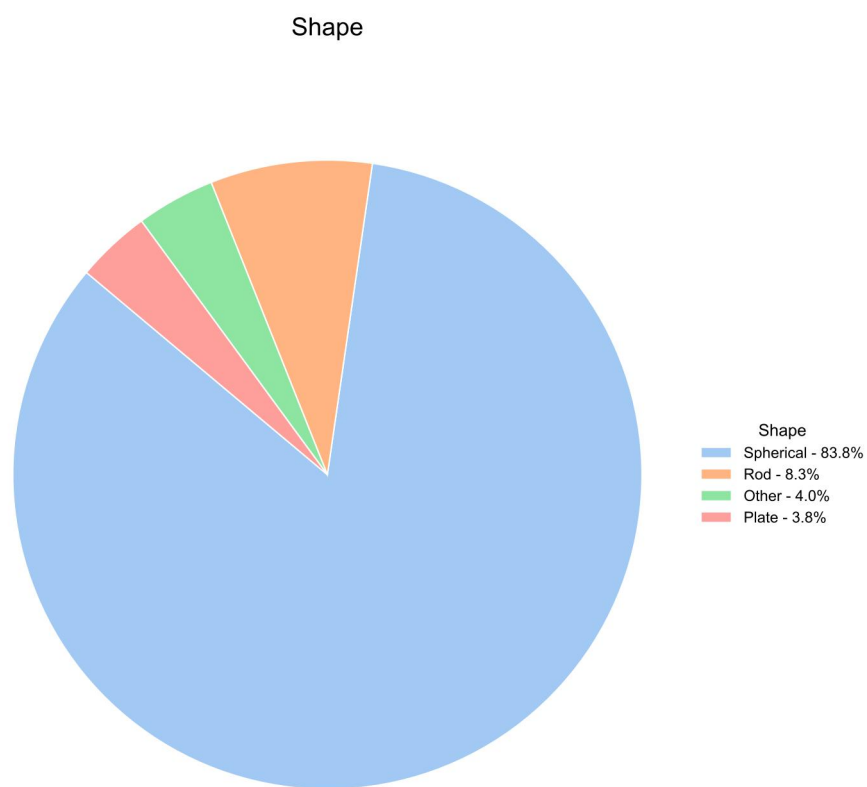


图 6 纳米颗粒形状 (Shape) 的比例分布

箱线图

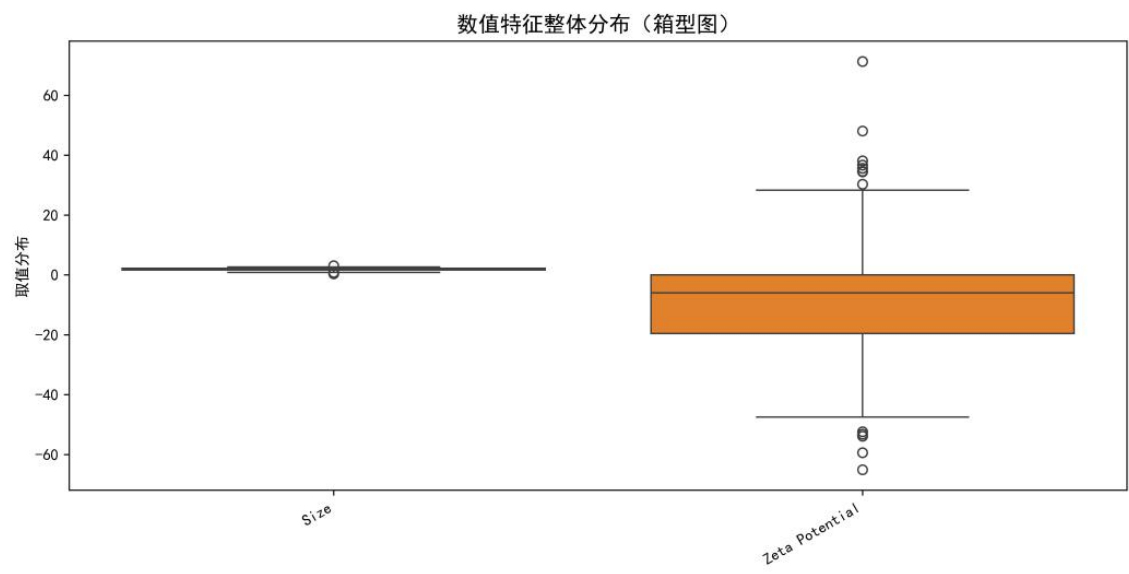


图 7 数值特征整体分布（箱型图）

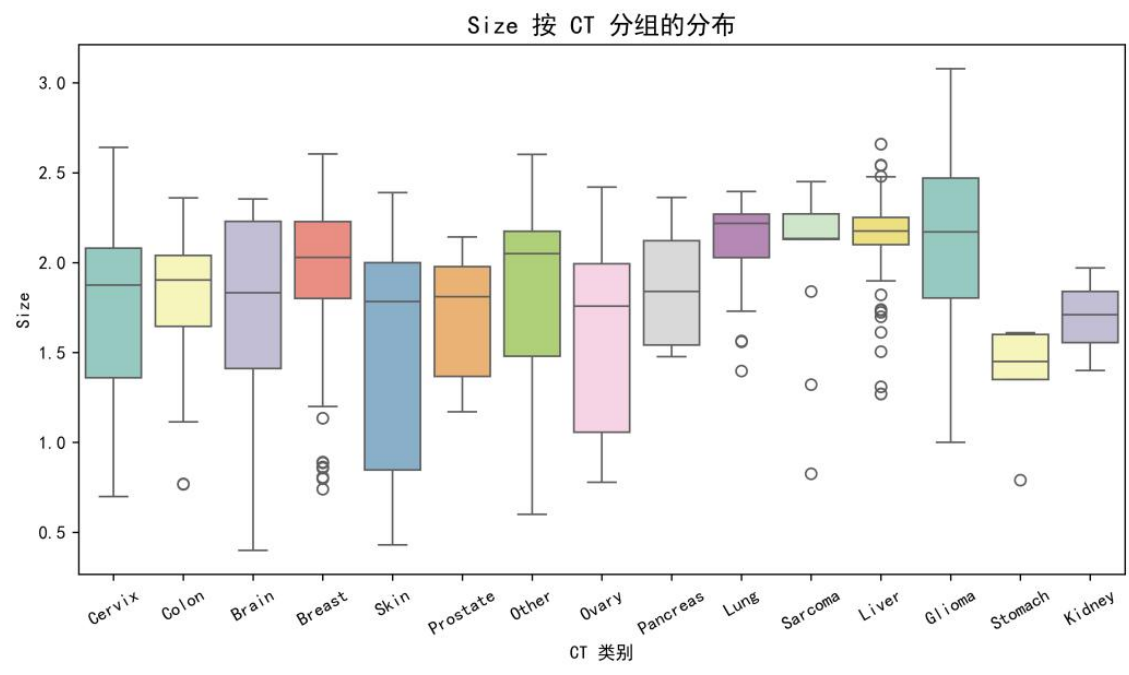


图 8 粒径（Size）按肿瘤类型（CT）分组的分布

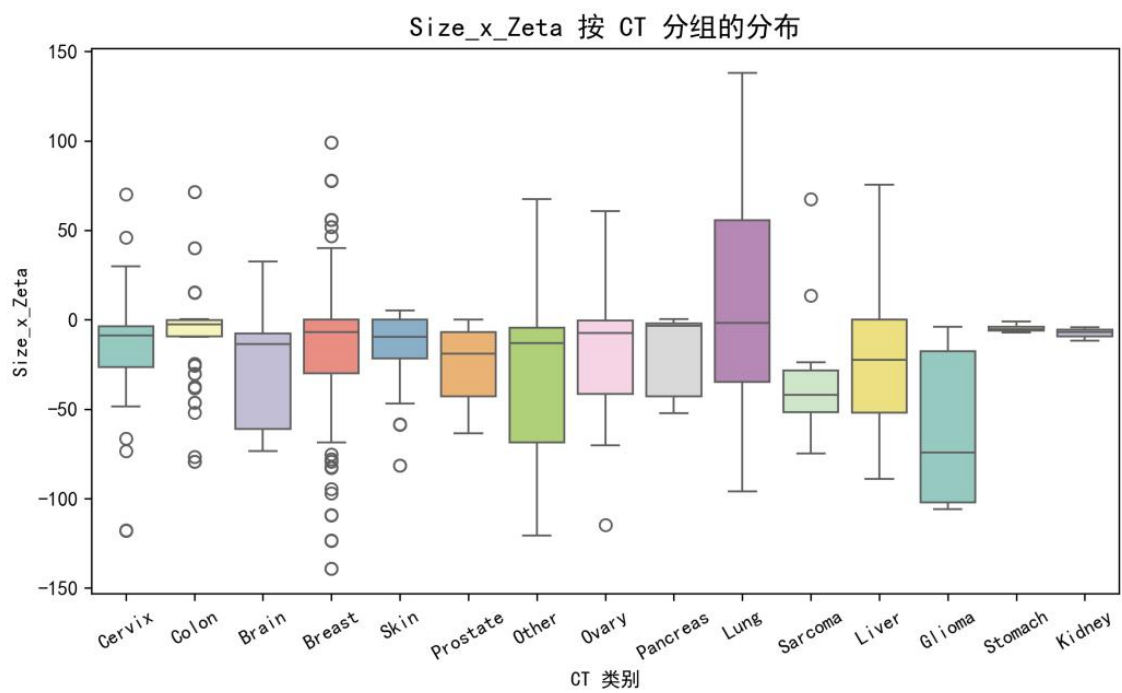


图 9 Zeta 电位 (Zeta Potential) 按肿瘤类型 (CT) 分组的分布

CatBoost 有无交互特征对比图

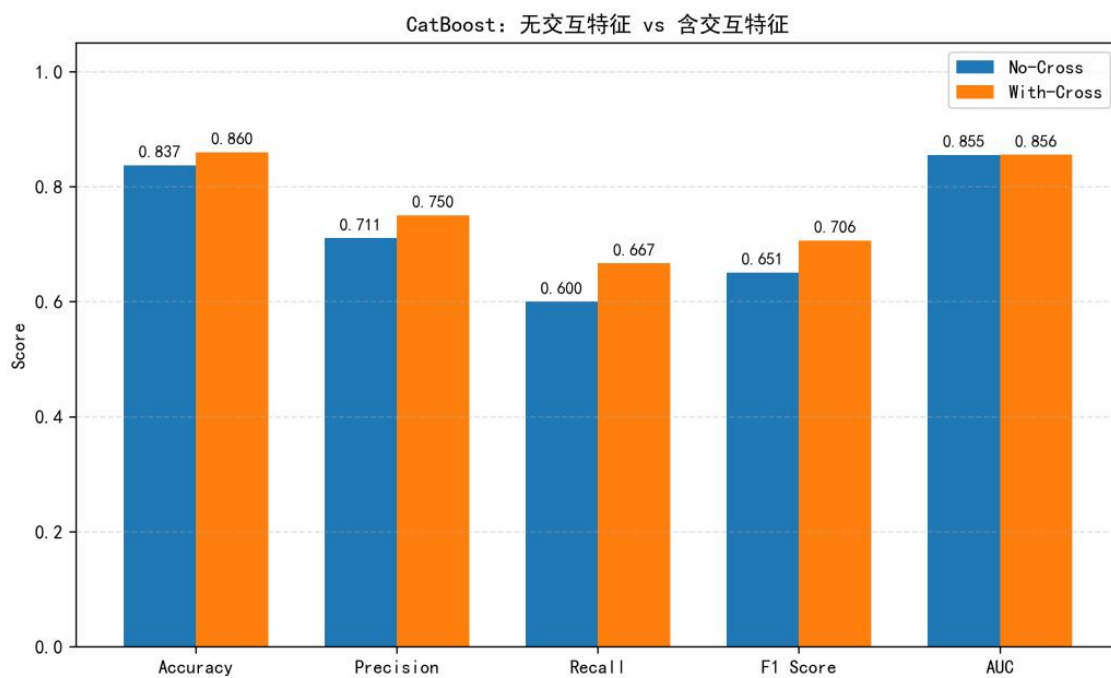


图 10 CatBoost 含/不含交互组合特征的测试集指标对比

特征分布

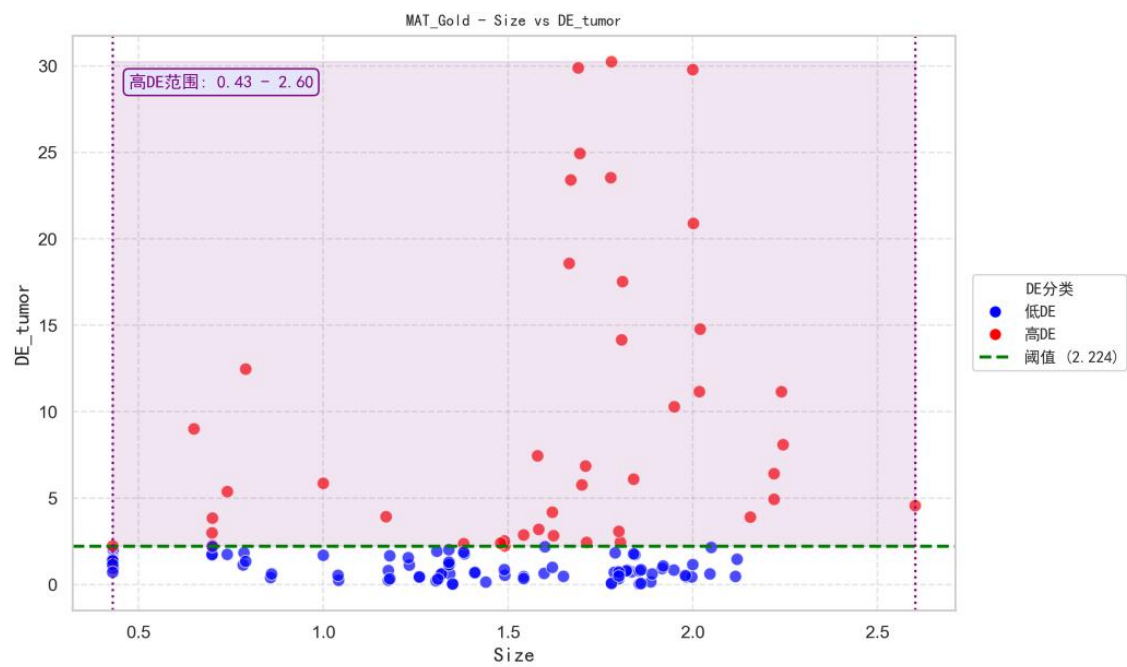


图 11 MAT_Gold 分组下粒径与肿瘤递送效率的关系

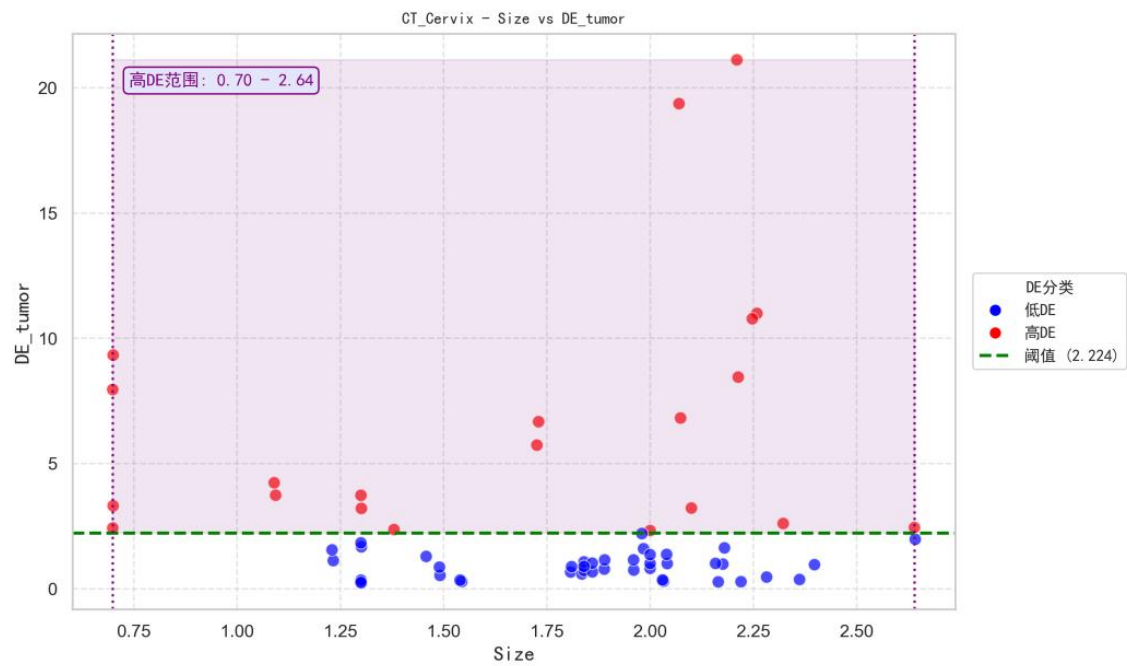


图 12 CT_Cervix 分组下粒径与肿瘤递送效率的关系

相关性分析

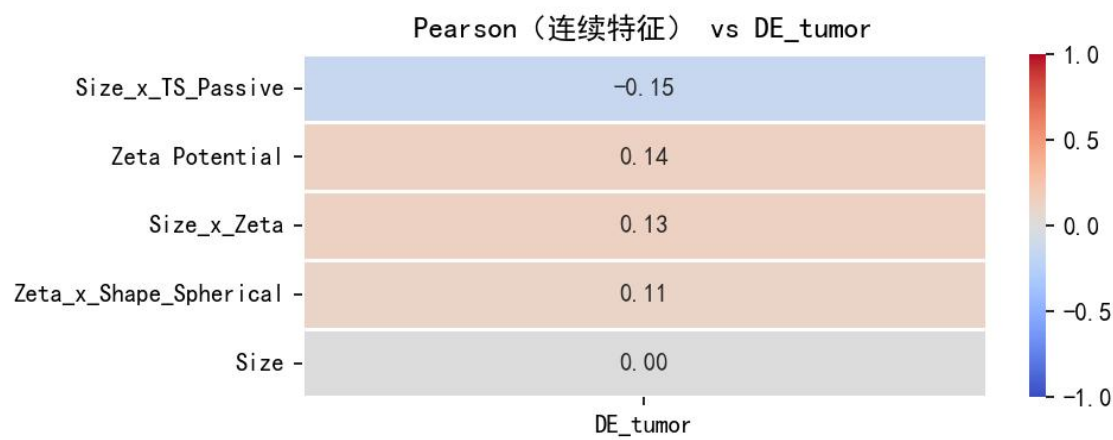


图 13 连续型特征与 DE_tumor 的 Pearson 相关系数热力图

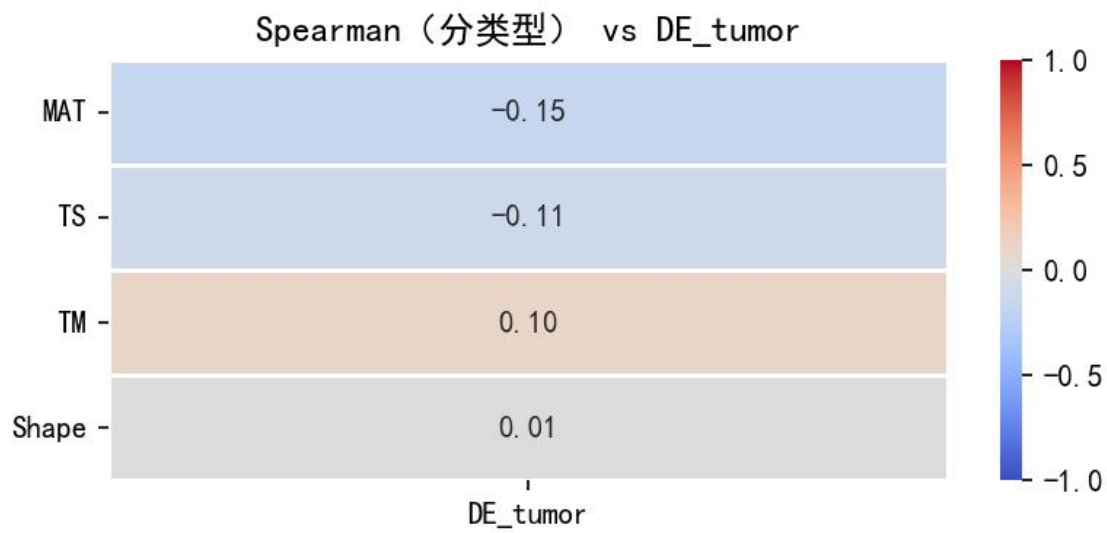


图 14 分类型特征与 DE_tumor 的 Spearman 相关系数热力图

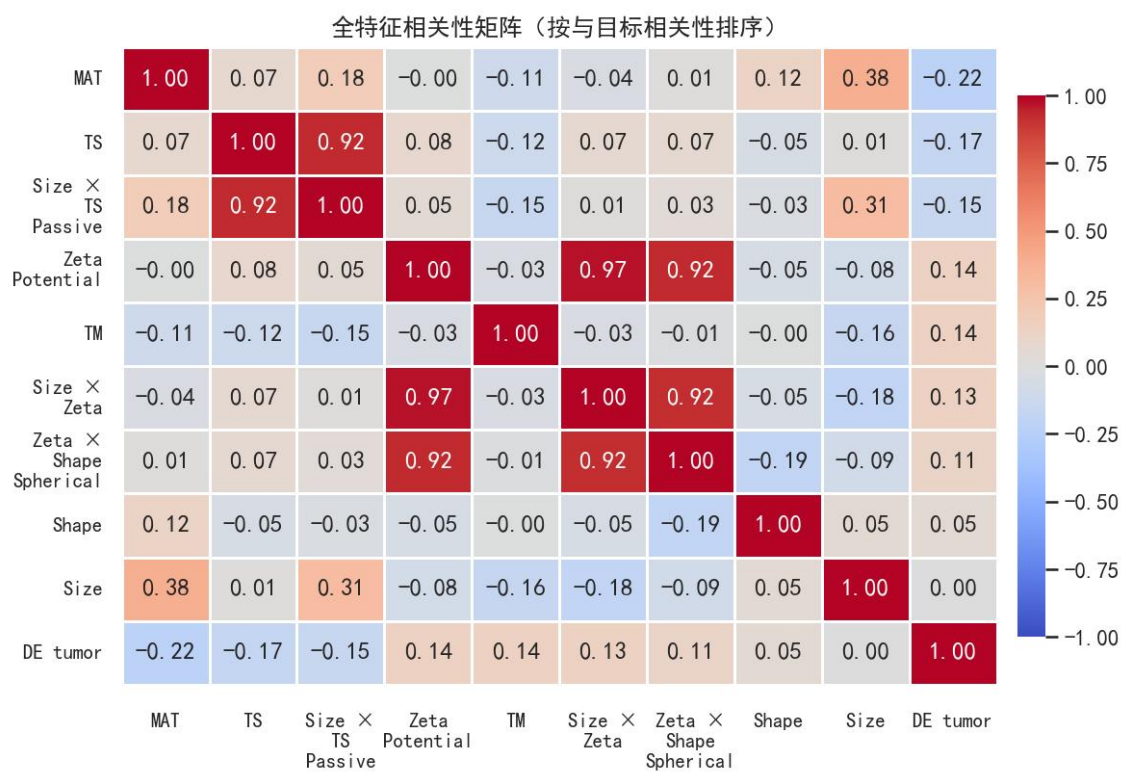


图 15 全特征 Pearson 相关系数矩阵热力图

ROC 曲线

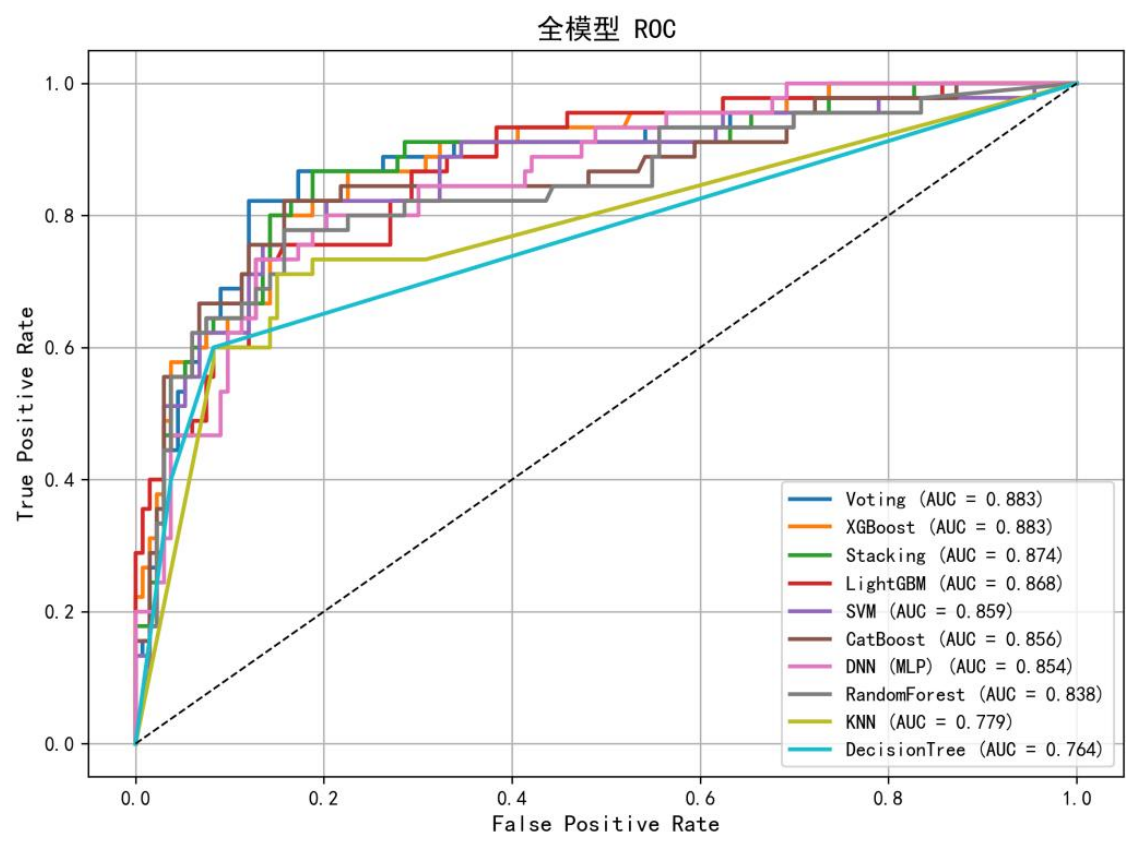


图 16 全模型 ROC 曲线对比

性能指标

表 1 各候选模型在测试集上的性能比较

Model	Accuracy	Precision	Recall	F1 Score	AUC
CatBoost	0.859551	0.750000	0.666667	0.705882	0.855556
Stacking	0.853933	0.756757	0.622222	0.682927	0.874353
Voting	0.848315	0.736842	0.622222	0.674699	0.883375
RandomForest	0.831461	0.674419	0.644444	0.659091	0.837678
DNN(MLP)	0.803371	0.589286	0.733333	0.653465	0.853801
XGBoost	0.831461	0.682927	0.622222	0.651163	0.883124
DecisionTree	0.837079	0.710526	0.600000	0.650602	0.763910
SVM	0.837079	0.735294	0.555556	0.632911	0.858814
KNN	0.803371	0.604167	0.644444	0.623656	0.779282
LightGBM	0.820225	0.69697	0.511111	0.589744	0.868087

表 2 CatBoost 5 折交叉验证结果

指标	平均值 ± 标准差	单折结果范围
F1	0.941 ± 0.025	0.916~0.966
AUC	0.975 ± 0.015	0.960~0.990

SHAP 值分析

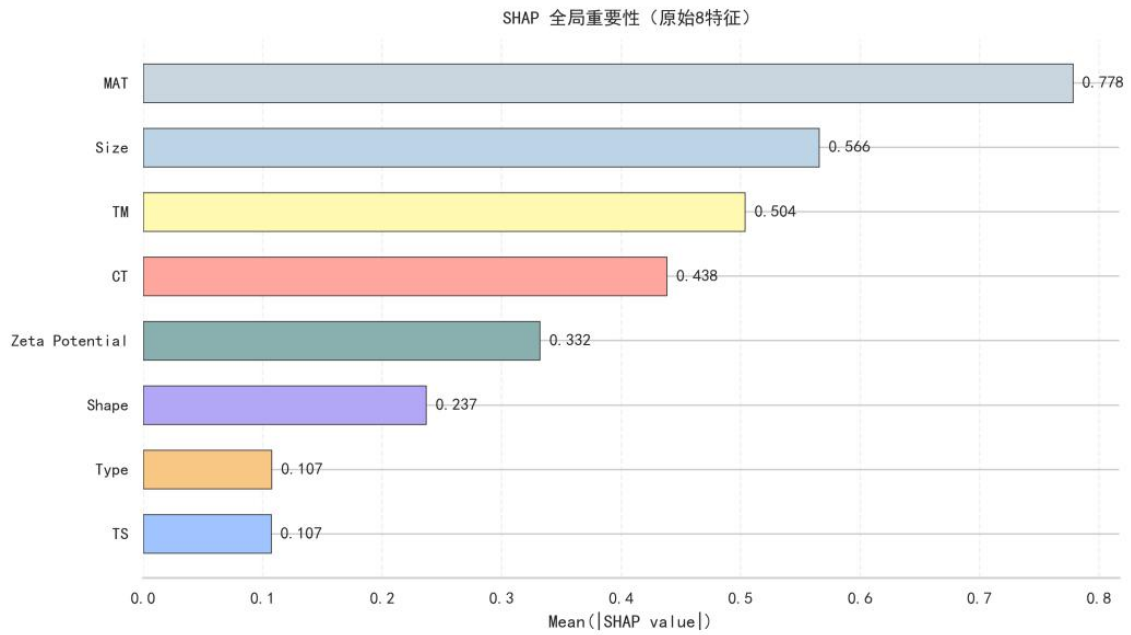


图 17 仅使用原始 8 个特征的 SHAP 全局重要性排序图

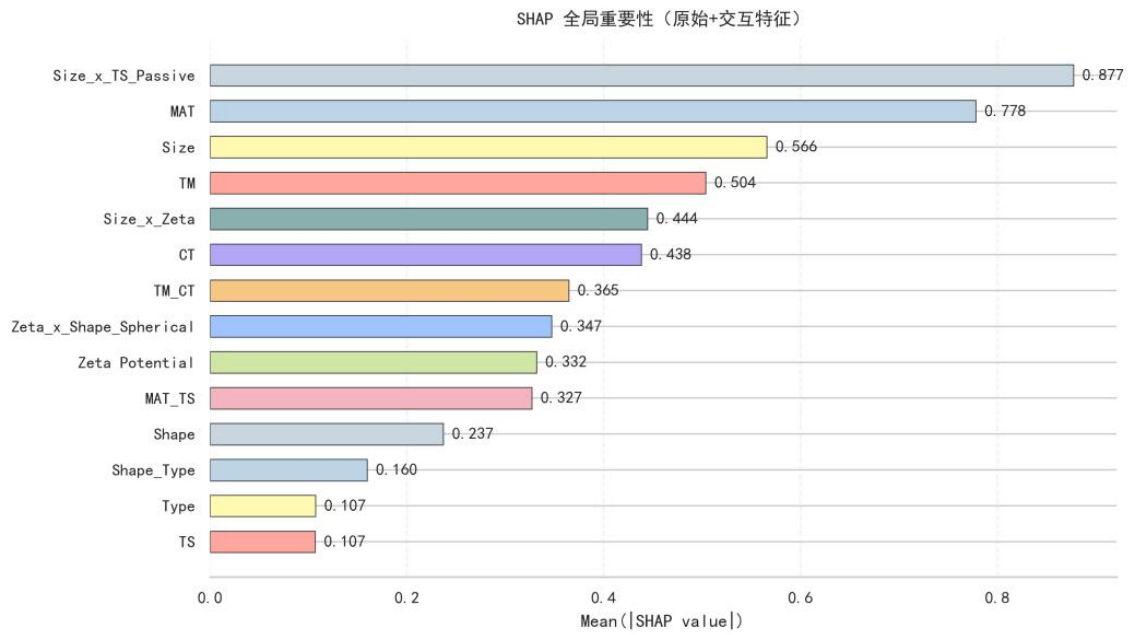


图 18 使用原始特征与交互特征的 SHAP 全局重要性排序图

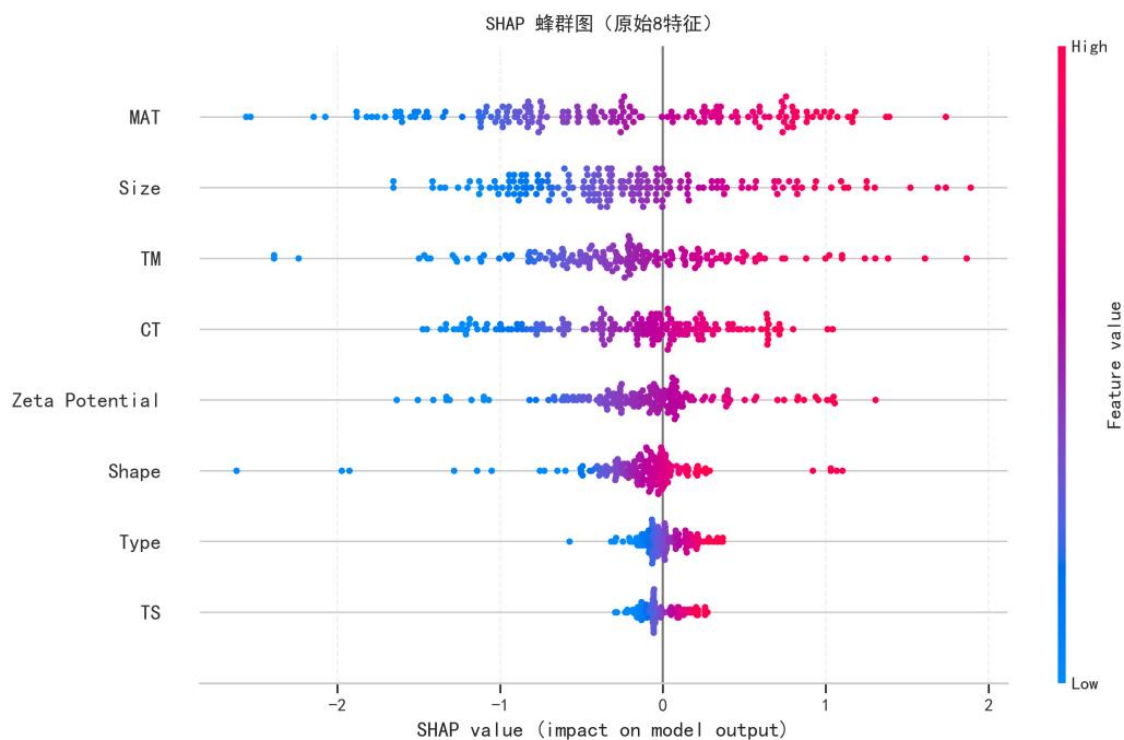


图 19 SHAP 蜂群图 (原始特征)

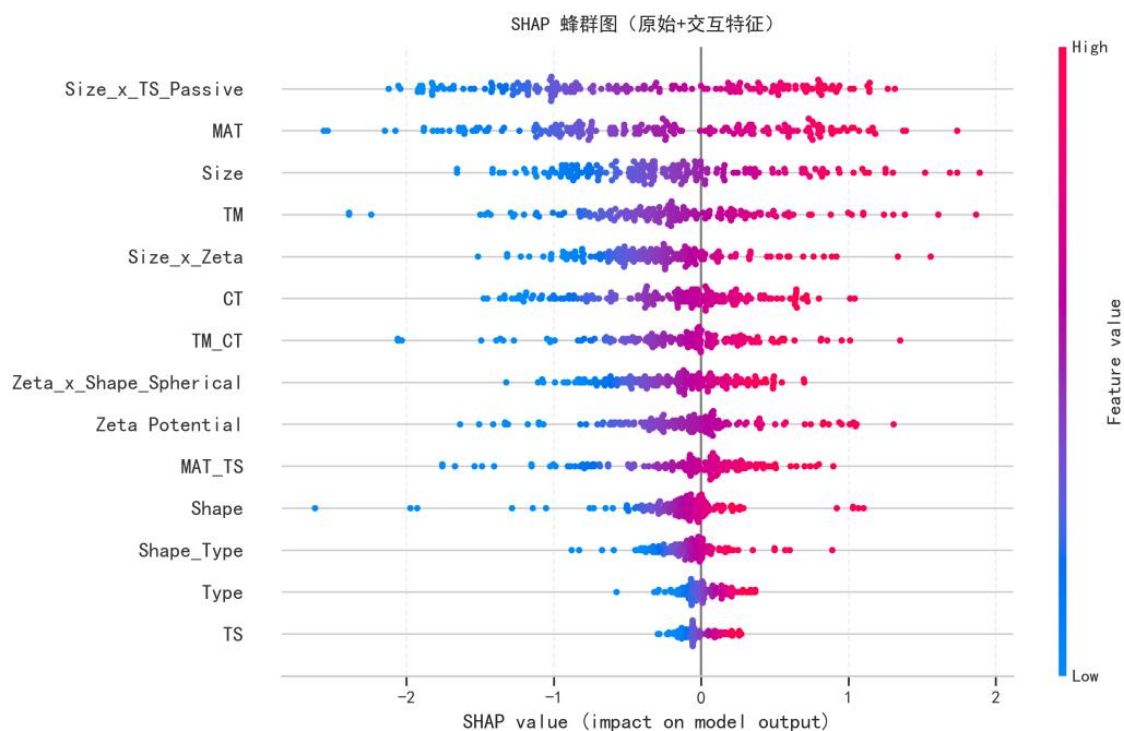


图 20 SHAP 蜂群图 (原始+交叉特征)

强化学习

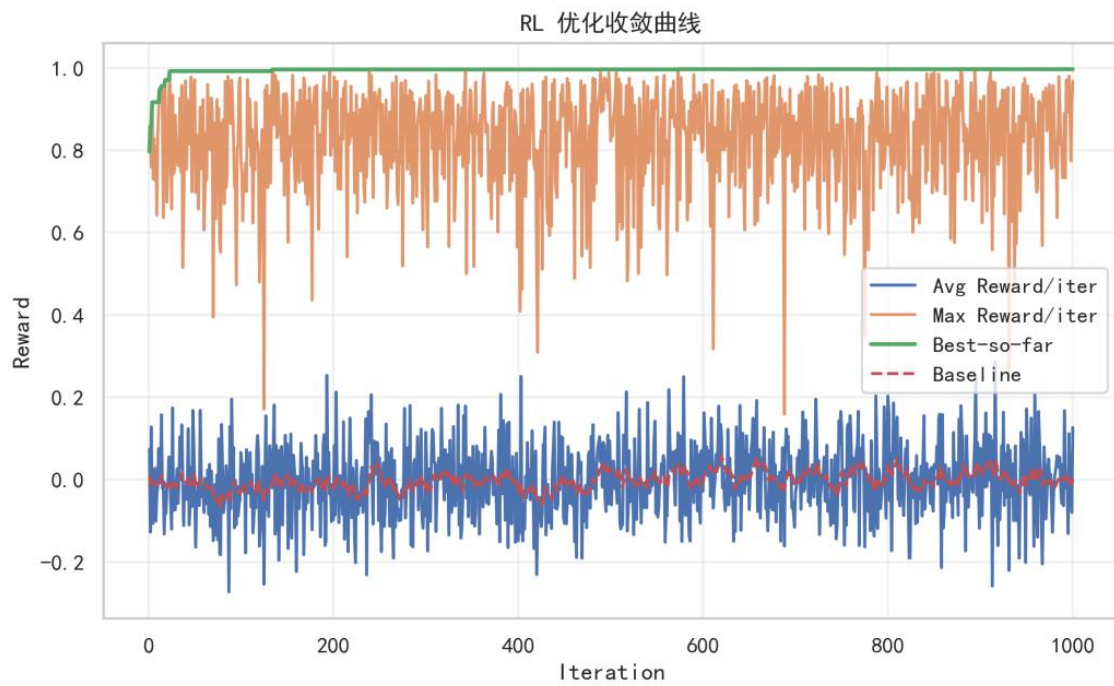


图 21 强化学习参数优化的奖励收敛曲线

表 3 基于强化学习的纳米药物递送 Top 10 设计配方

配方 参数	配方 1	配方 2	配方 3	配方 4	配方 5	配方 6	配方 7	配方 8	配方 9	配方 10	配方 11	配方 12
Size	170	90	140	90	160	180	170	90	160	130	180	150
Zeta Potential	5	40	10	5	25	5	40	40	40	40	5	25
Type	Organic	Organic	Organic	Inorganic	Organic	Hybrid	Hybrid	Hybrid	Hybrid	Hybrid	Hybrid	Inorganic
MAT	Dendrimer	Other IM	Dendrimer	Silica	Gold	Dendrimer	Hybrid	Other IM	Silica	Hybrid	Dendrimer	Other IM
TS	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive	Passive
CT	Breast	Breast	Breast	Breast	Breast	Prostate	Prostate	Breast	Prostate	Prostate	Prostate	Breast
TM	Allograft Heterotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Heterotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Heterotopic	Allograft Orthotopic	Allograft Orthotopic
Shape	Rod	Rod	Rod	Rod	Rod	Rod	Rod	Rod	Other	Other	Other	Rod
PredProb	0.996913	0.996293	0.995965	0.992324	0.991919	0.991561	0.991162	0.990699	0.990602	0.990245	0.990233	0.988683
Reward	0.996913	0.996293	0.995965	0.992324	0.991919	0.991561	0.991162	0.990699	0.990602	0.990245	0.990233	0.988683

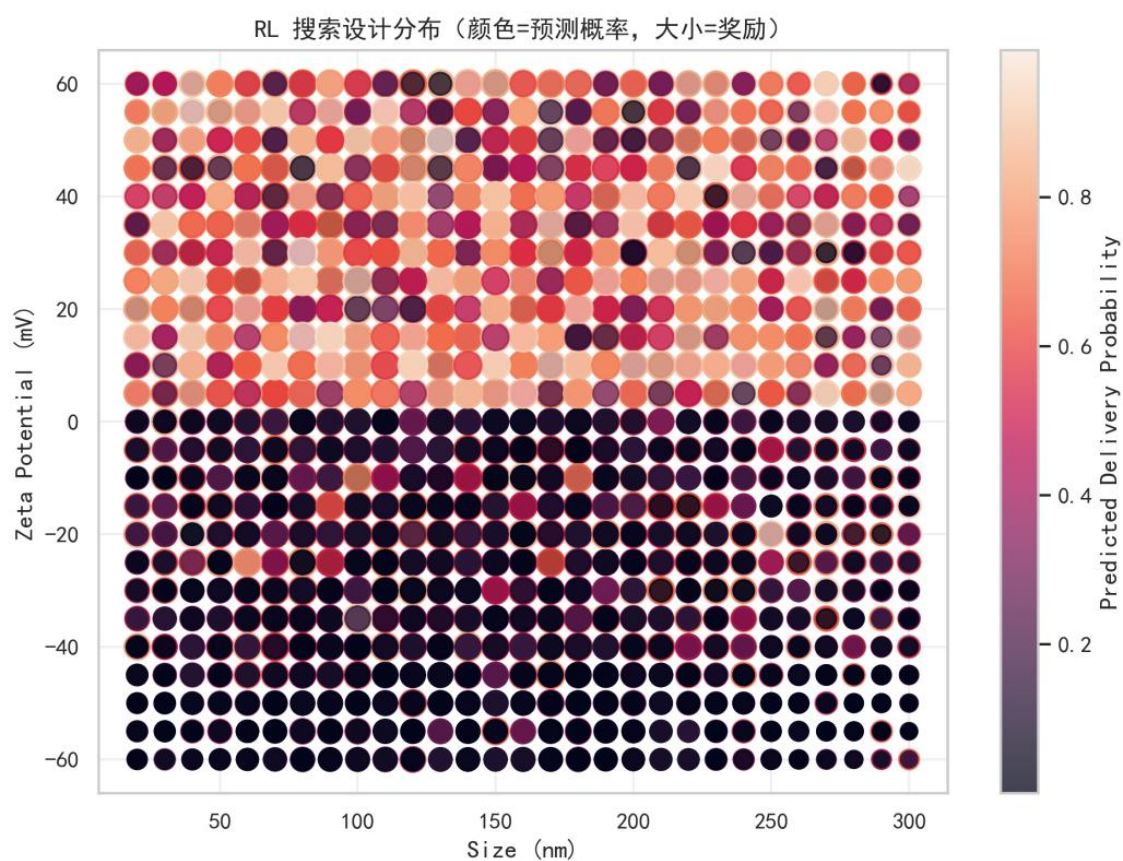


图 22 “粒径 - 表面电位” 参数平面的搜索与评估可视化