

质子辐射对钙钛矿太阳能电池的影响

导师：溥渊未来技术学院 李聪毅
学生：溥渊未来技术学院 董文立

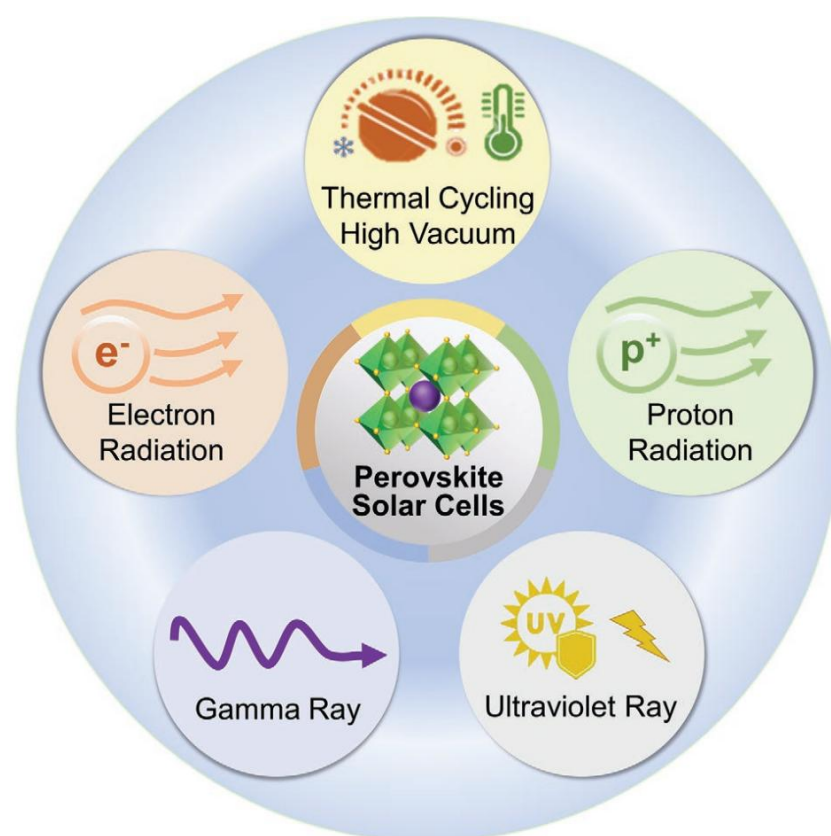
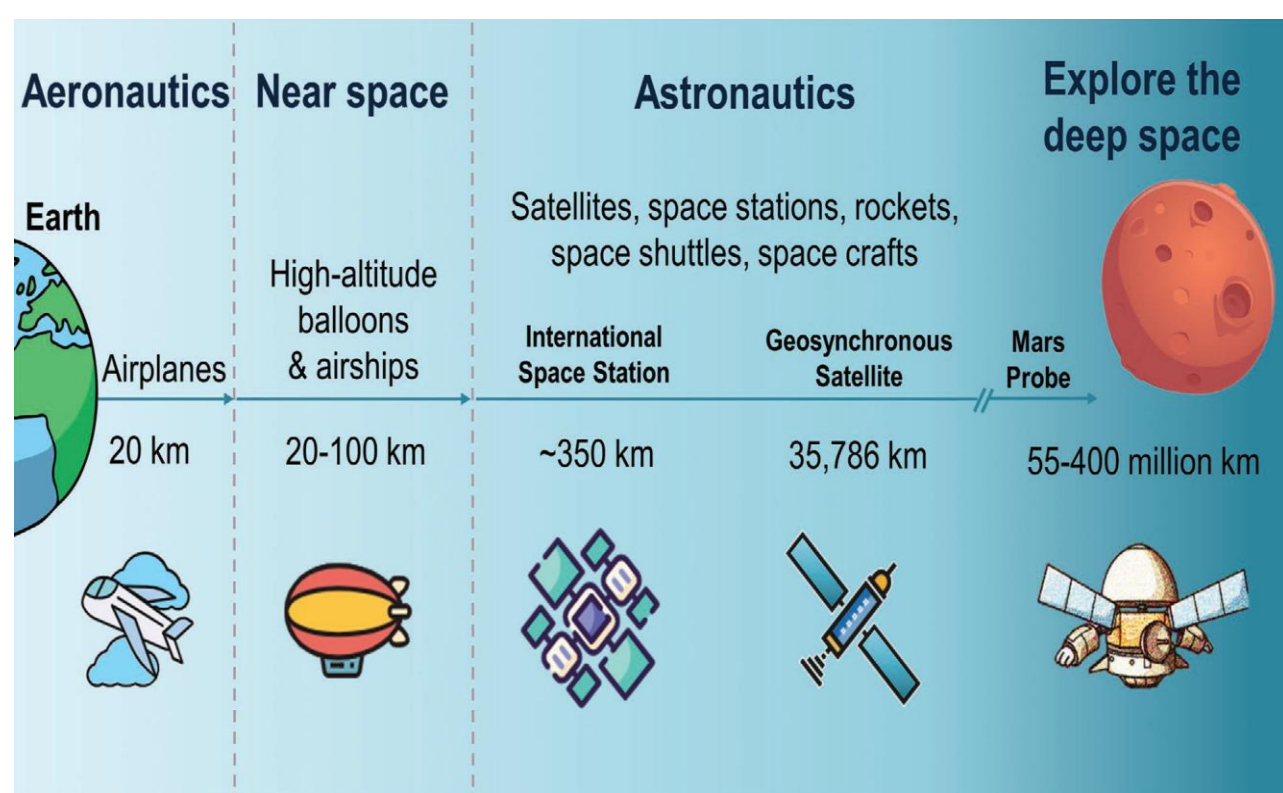


官方二维码 Official WeChat

项目简介

项目背景

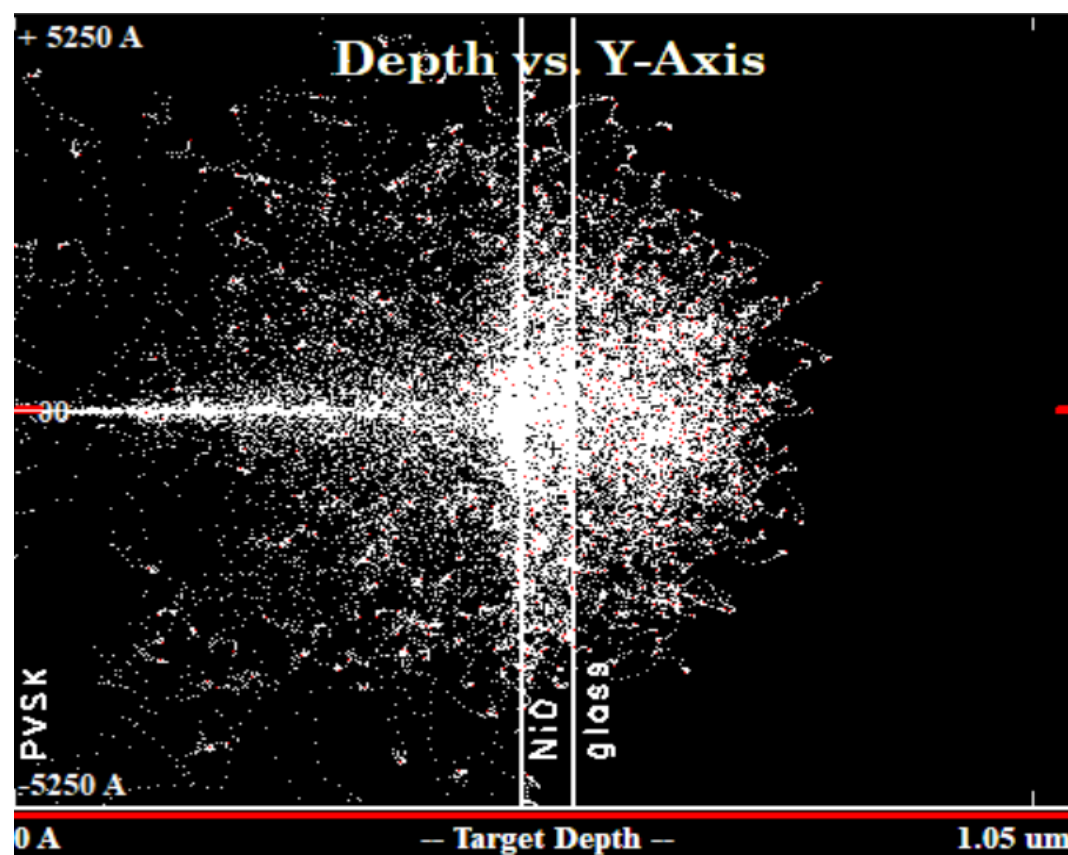
空间环境中的高能质子、中子、 γ 射线、电子等宇宙射线，会通过能量沉积与原子离位，对钙钛矿材料造成损伤，导致钙钛矿光伏器件的故障或加速退化。因此，宇宙射线的辐照效应是需要重点关注的空间环境因子，对钙钛矿在空天环境中的应用至关重要。



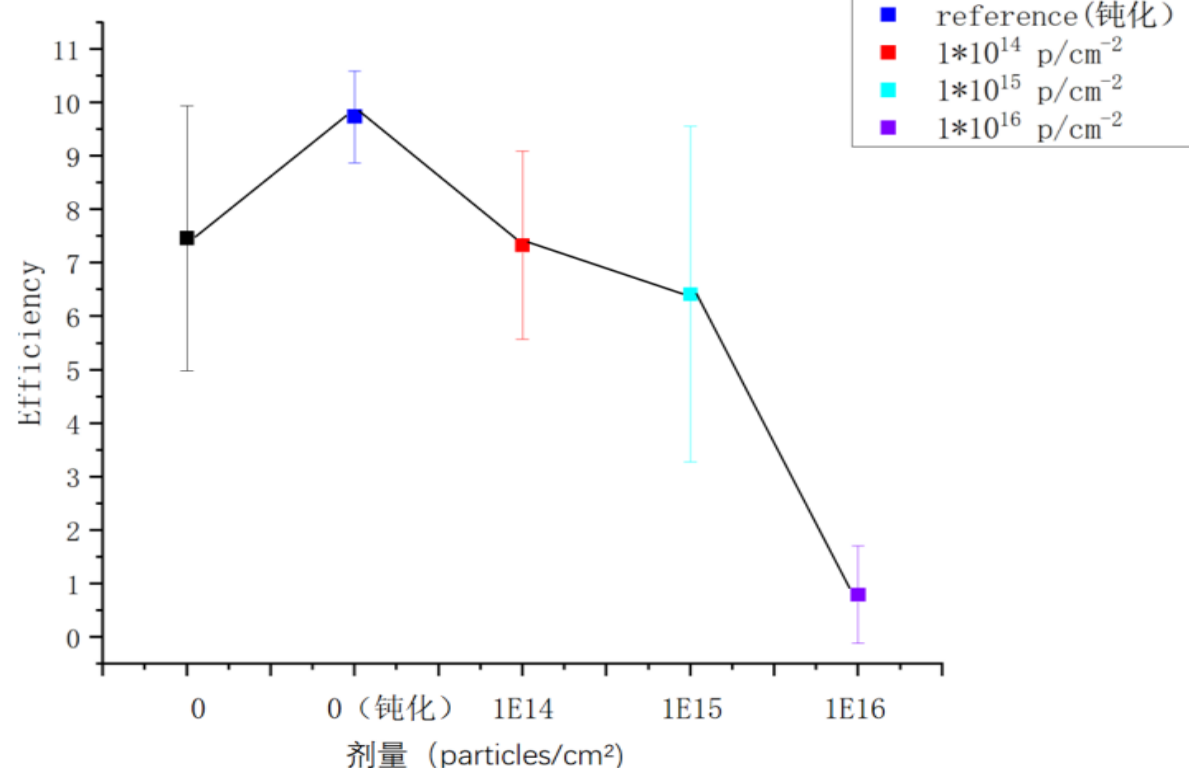
研究方法

SRIM模拟：
揭示质子在钙钛矿中的入射规律

质子辐照：
探究质子辐照对钙钛矿光电性能的影响

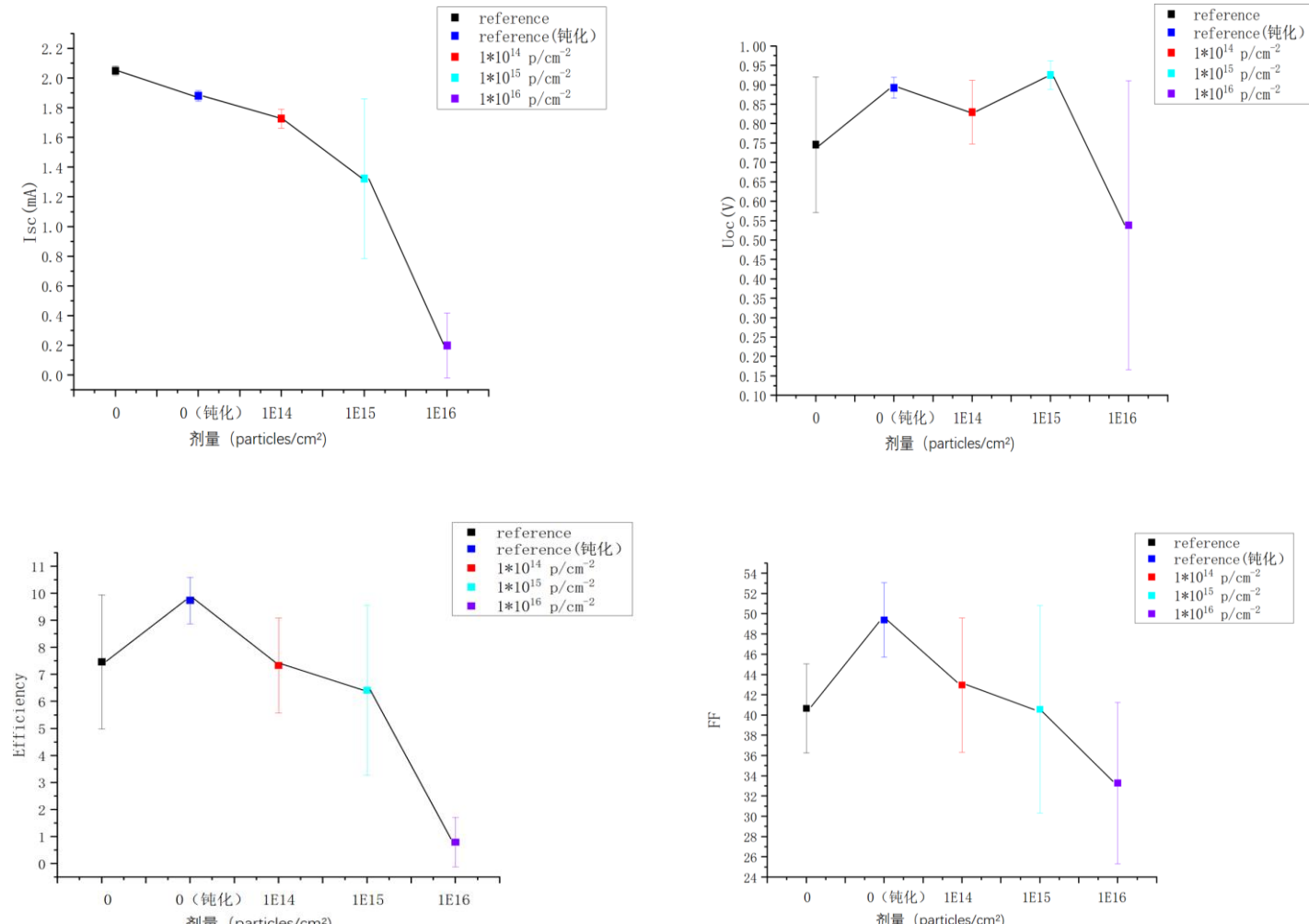


50keV的质子在钙钛矿中的入射轨迹



不同剂量的质子束对钙钛矿效率的影响

研究成果



当50keV的质子束剂量达到 10^{15} 以上时，钙钛矿薄膜出现明显损伤，其光电性能显著下降。该结果揭示了质子辐照对钙钛矿薄膜性能的负面影响，为钙钛矿材料在易受质子辐照环境中的应用提供了重要参考，对推动钙钛矿材料在航天等领域的应用具有指导意义。

Orlon：高通量结构化筛选宏基因组数据集的工作流

导师：溥渊未来技术学院 郑双佳

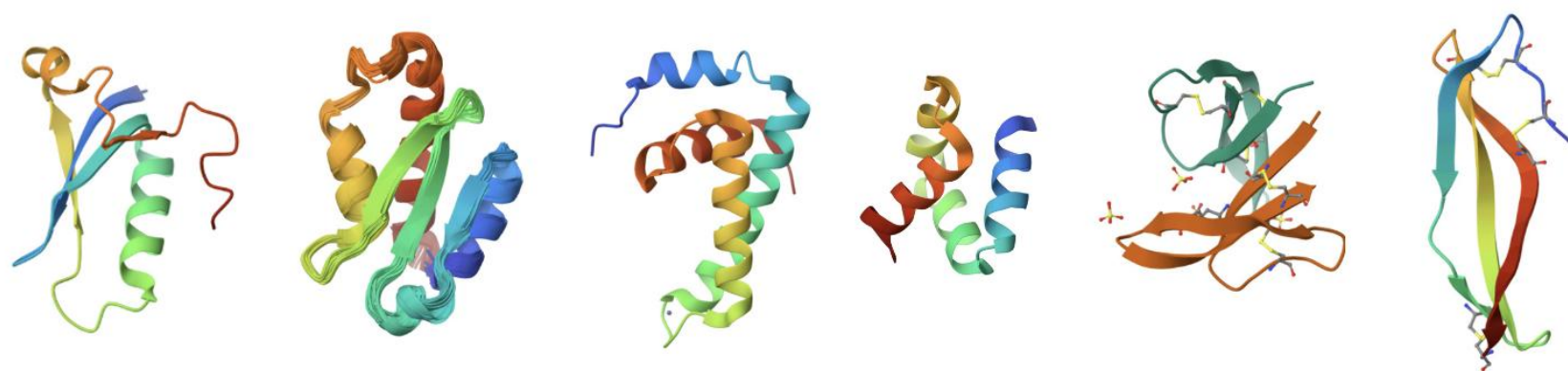
学生：溥渊未来技术学院 李钟旻



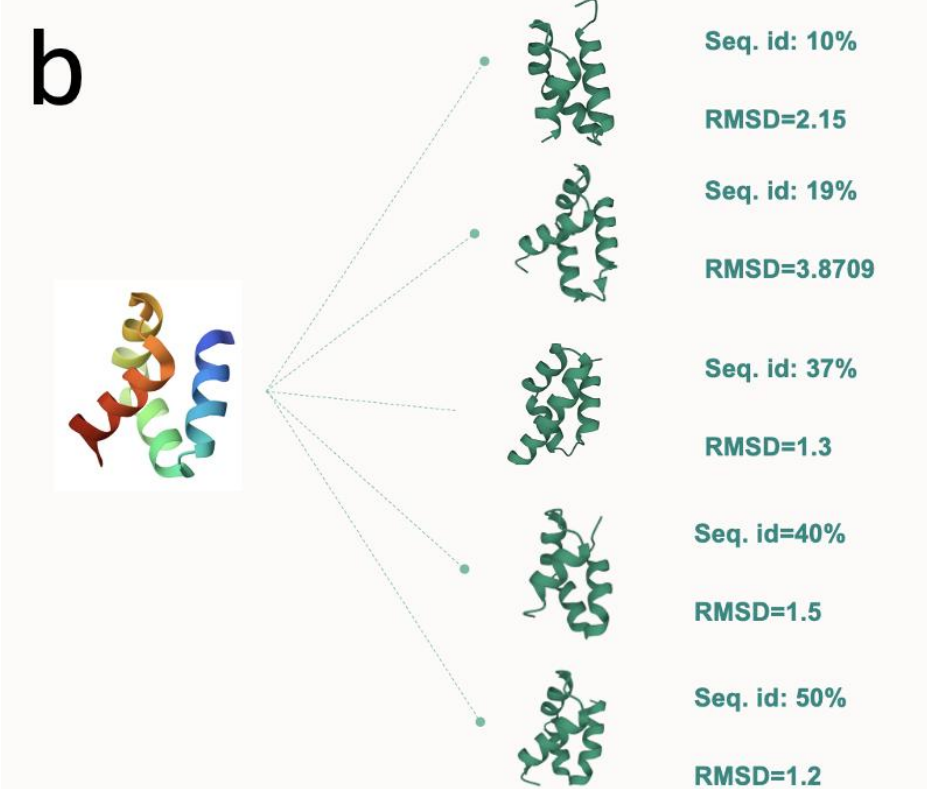
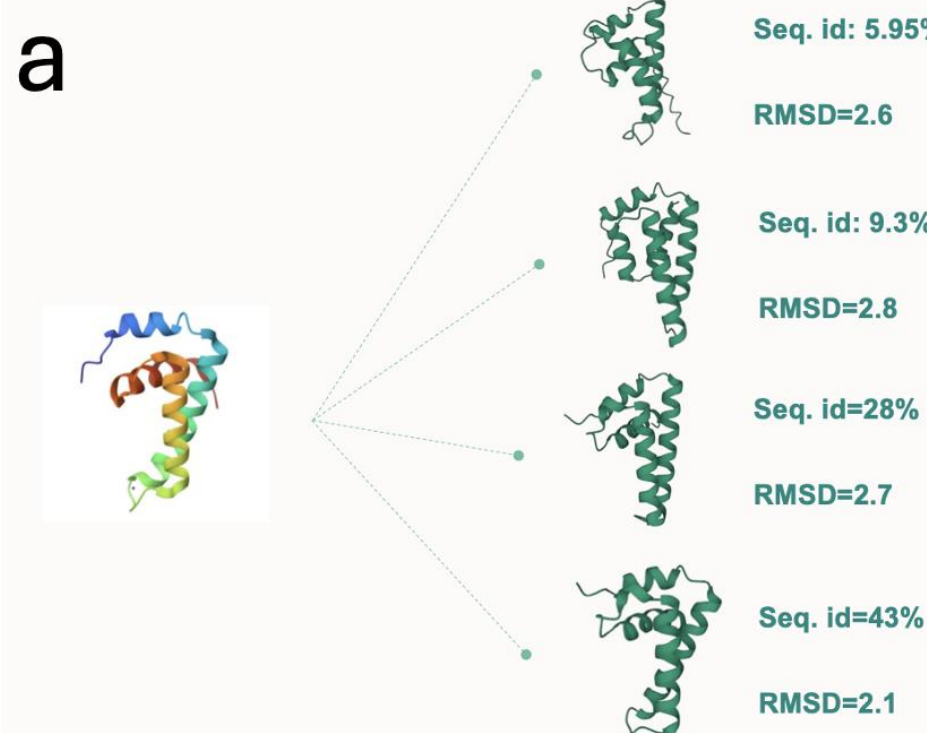
官方二维码 Official WeChat

搜索起始物

以 AcrIC9、AcrIIA4 和 AcrIIA28 这三种典型抗 CRISPR 蛋白为起始，它们均能通过不同方式阻止 SpCas9 与靶标 DNA 结合；抗菌肽选取了 Lantibiotic Epidermicin、Cryptdin-4 和 Laterosporulin，它们分别代表了多种机制下对革兰氏阳性病原体的强效抗菌活性。



搜索结果

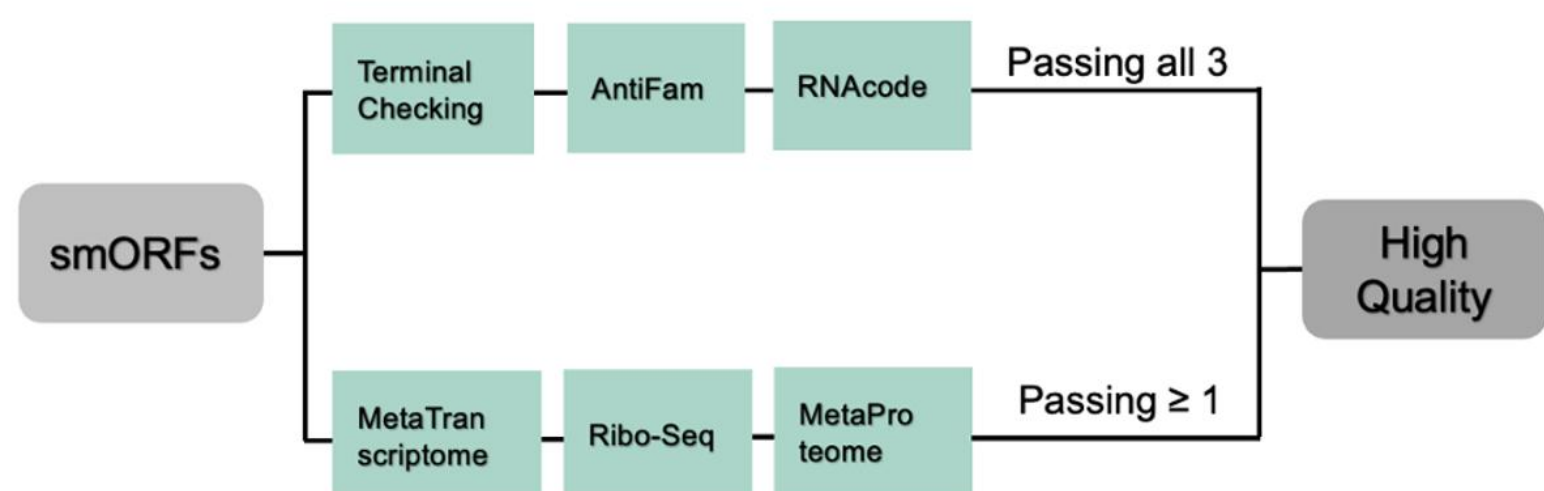


我们的搜索成功地识别了与已知蛋白具有高结构相似性，但序列一致性极低的新型蛋白质。这一结果有力地证明了结构在进化中比序列更保守的观点，并凸显了传统序列搜索方法的局限性。许多潜在的功能性Acr蛋白由于序列的快速进化而无法被传统序列工具发现，但Orion能够通过结构比对将它们挖掘出来。

建库流程

一个smORF必须通过以下所有三项计算质量检查：Terminal Checking（确保有正确的起始/终止密码子）AntiFam（移除与非蛋白序列家族模型的伪匹配）RNAcode（评估编码潜力）。

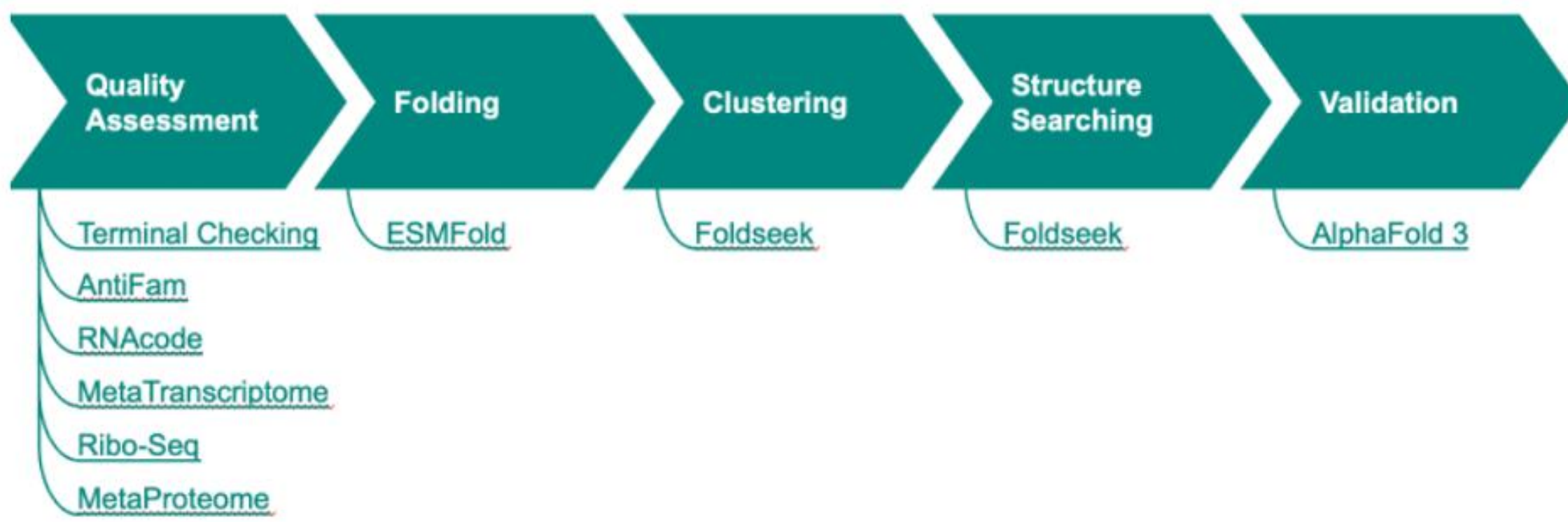
此外，至少有一个来自以下来源的实验证据：Meta Transcriptome, Ribo-Seq或Meta Proteome



搜索流程

Orion 流程首先对smORF进行三重质量筛选并保留存在实验证据的条目，将数据量缩减至4300 万；接着按氨基酸长度将序列分组，并使用 ESMFold 进行三维结构预测，通过 Foldseek 创建预计算 3Di 表示的索引数据库。实际搜索时，根据查询蛋白长度选取对应长度，将其 3Di 序列与数据库中的序列比对并按 TM-score 等指标排序；最后对前几名匹配结果用 AlphaFold3 重新预测并与 ESMFold 结构比对，以低 RMSD 验证预测的可靠性。

Length(aa)	num
1-10	557K
10-20	0.39M
20-30	3.88M
30-40	12M
40-50	26M
50-60	44M
60-70	55M
70-80	62M
80-90	44M
90-100	37M





上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



溥渊未来技术学院
GLOBAL INSTITUTE OF FUTURE TECHNOLOGY



WUXI 锡山
XISHAN

基于大模型深度学习的 非晶态物质原子团簇分析与重建

导师：溥渊未来技术学院 谢宇俊

学生：密西根学院 毛子安



官方二维码 Official WeChat

研究目标与任务

非晶态物质是一种原子排布呈长程无序，短程有序的物质。其具有高耐磨、高韧性、高强度、高磁导等优异性能，在航空航天、医疗器械、军工、锂电池等产业均有关键应用。但由于其结构长程无序，衍射信号微弱、高噪声的特性，传统显微方法无法解析其微观结构，非晶科学问题的解答仍是重大挑战。

项目的目标是从无序中寻找有序，通过四维扫描透射电子显微技术（4D-STEM）与先进视觉大模型的结合探究非晶材料的亚纳米级微观结构，从而指导先进关键战略材料的设计。

目标 - 解析非晶态物质结构

非晶态物质原子排列长程无序，短程有序
材料性能优异，但基础研究相对薄弱

非晶结构解析
解决科学问题
反哺材料设计
关键战略材料

高耐磨 高韧性
高强度 高磁导

难点 - 衍射数据分析

非晶物质的衍射信号微弱，易被噪声淹没
传统方案无法准确解析结构

扫描透射电子显微镜
非晶薄膜
局部衍射图样

任务

训练视觉大模型，识别图像隐藏特征
无序中寻找有序

①建立百万级别非晶衍射数据集

②标注数据集，分类不同团簇

③训练视觉大模型，重建非晶结构

进展及代表性成果

团队采集了超过两百万张非晶材料的衍射光斑，首次建立了非晶衍射数据库。基于全卷积掩码自动编码器（FCMAE）进行自监督与监督学习，克服了非晶衍射图高噪声、高干扰、信号微弱的分析难题，有效恢复了非晶亚纳米级团簇结构。

团队进一步建立了标准非晶衍射数据分析流程，该流程首先通过掩码破坏衍射图像，让深度学习模型恢复原始数据，再通过经过标注的衍射训练集进行团簇分类。该流程可以扩展应用到诸多领域，现已成功应用到2024中国国际大学生创新大赛的锂金属电池界面表征项目中，助力团队取得产业赛道金奖。

最终，团队成功对NiTa非晶合金薄膜进行了全面结构解析，并有学术成果在投。团队将使用该技术继续研究非晶的重大科学问题，助力国家关键战略材料的研发设计。

成果① - 非晶态原子团簇分类网络

卷积自编码器，自监督学习重建衍射图样，进行预训练
使用标注的训练集进行训练，训练精度达到**91.2%**

中国国际大学生创新大赛产业赛道金奖 & 工业软件著作权

成果② - NiTa非晶薄膜结构解析

对于NiTa非晶合金薄膜电镜实验数据，使用该方法进行分析
成功进行团簇重构，成分占比统计与粒径数据分析

Cluster Type	Percentage
BCC 63.9%	63.9%
FCC 23.5%	23.5%
HCP 11.6%	11.6%
ICO 1.8%	1.8%

纳米靶向递送氟西汀：提高抑郁症治愈效率并降低毒性

导师：溥渊未来技术学院 兰兆辉

学生：医学院 吴依霖



官方二维码 Official WeChat

项目背景

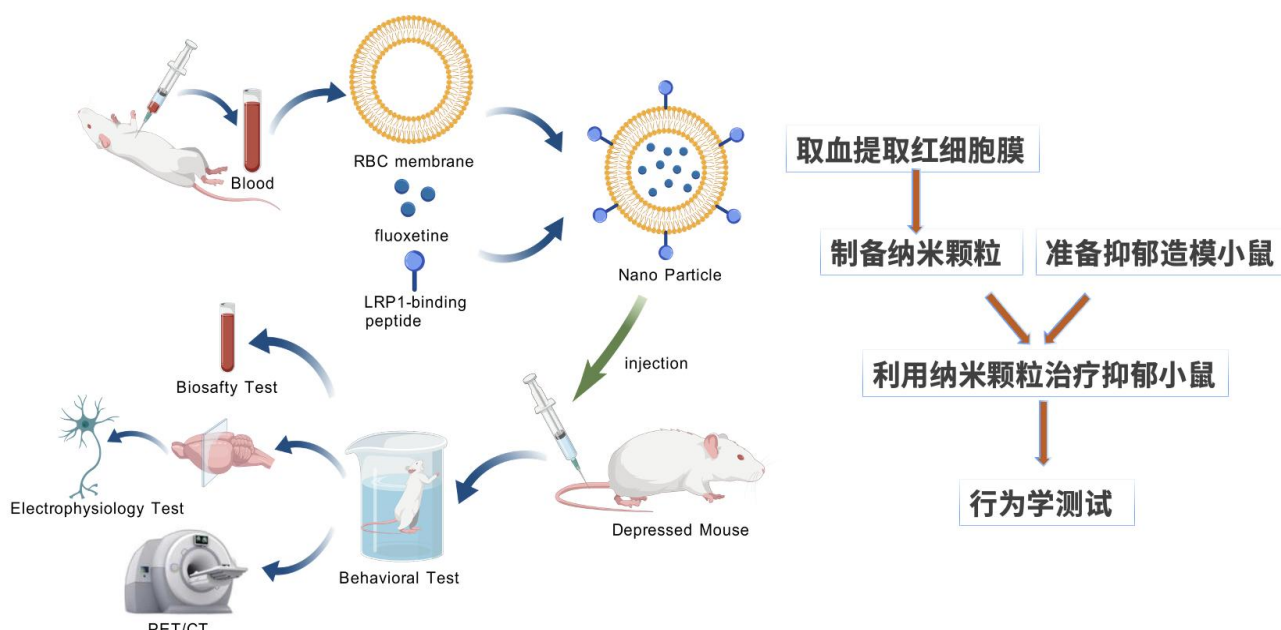
抑郁症是导致全球残疾和自杀的主要原因，负担位列第二，高风险并发糖尿病、心脏病等多种疾病，并使死亡率升高60%~80%。目前治疗以药物治疗为主，药物疗法见效快、疗效相对于心理治疗较确定，但常伴恶心、失眠、性功能障碍等副作用。为减少剂量、延长药效、提高治愈率，亟需生物仿生手段构建药物递送载体。

项目目标

- 1) 构建氟西汀药物递送载体，药物递送载体可有效进入脑实质内，并缓慢释放药物；
- 2) 通过构建氟西汀药物递送载体减少药物在肝、肾、脾等其它外周器官的堆积；
- 3) 通过构建氟西汀药物载体更加高效缓解抑郁症相关表型；

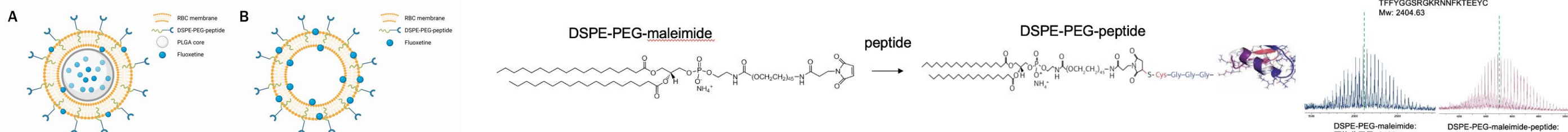
研究思路与方法

- 1) 利用红细胞膜延长纳米药物循环时间，通过靶向肽提高血脑屏障（BBB）穿透效率，改善抗抑郁药物的治疗效果并降低毒性
- 2) 构建抑郁症小鼠模型，分析递送载体是否可高效逆转相关抑郁症表型。

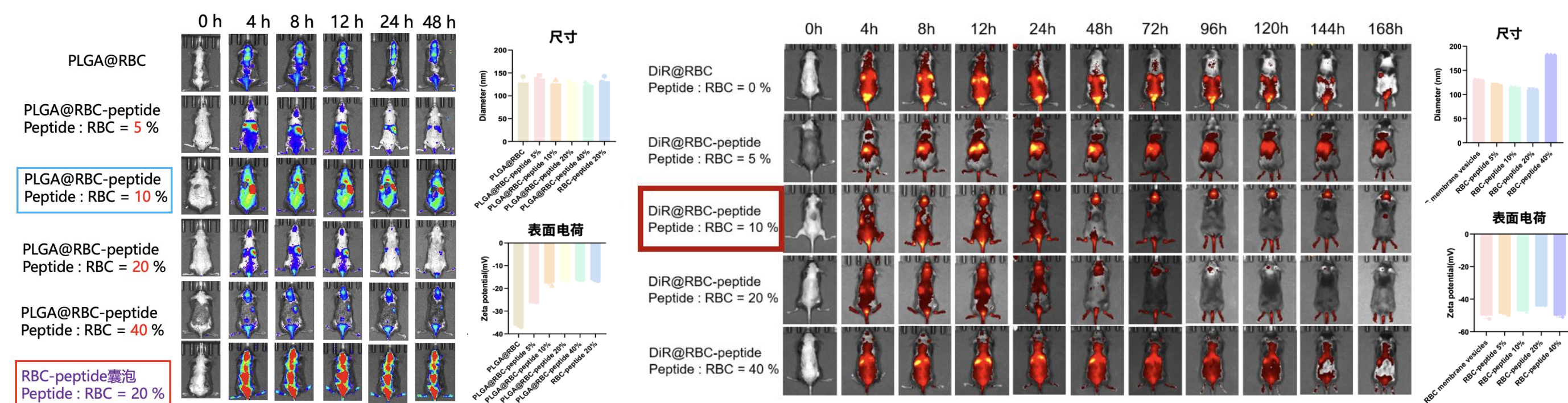


研究内容

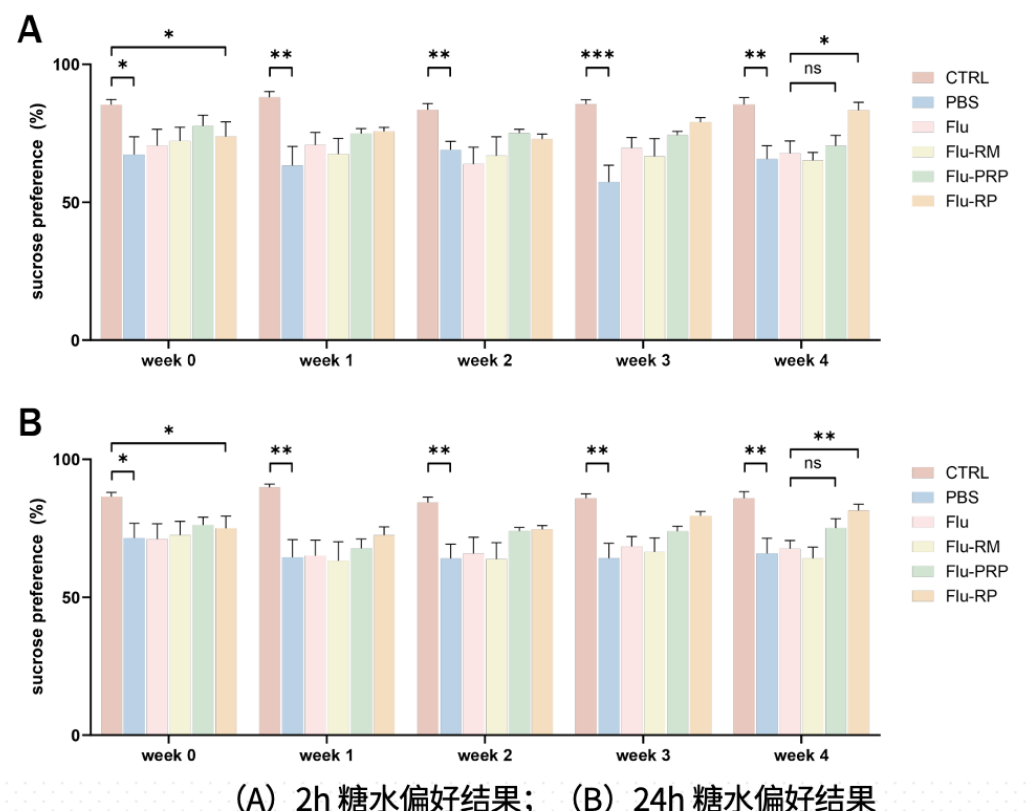
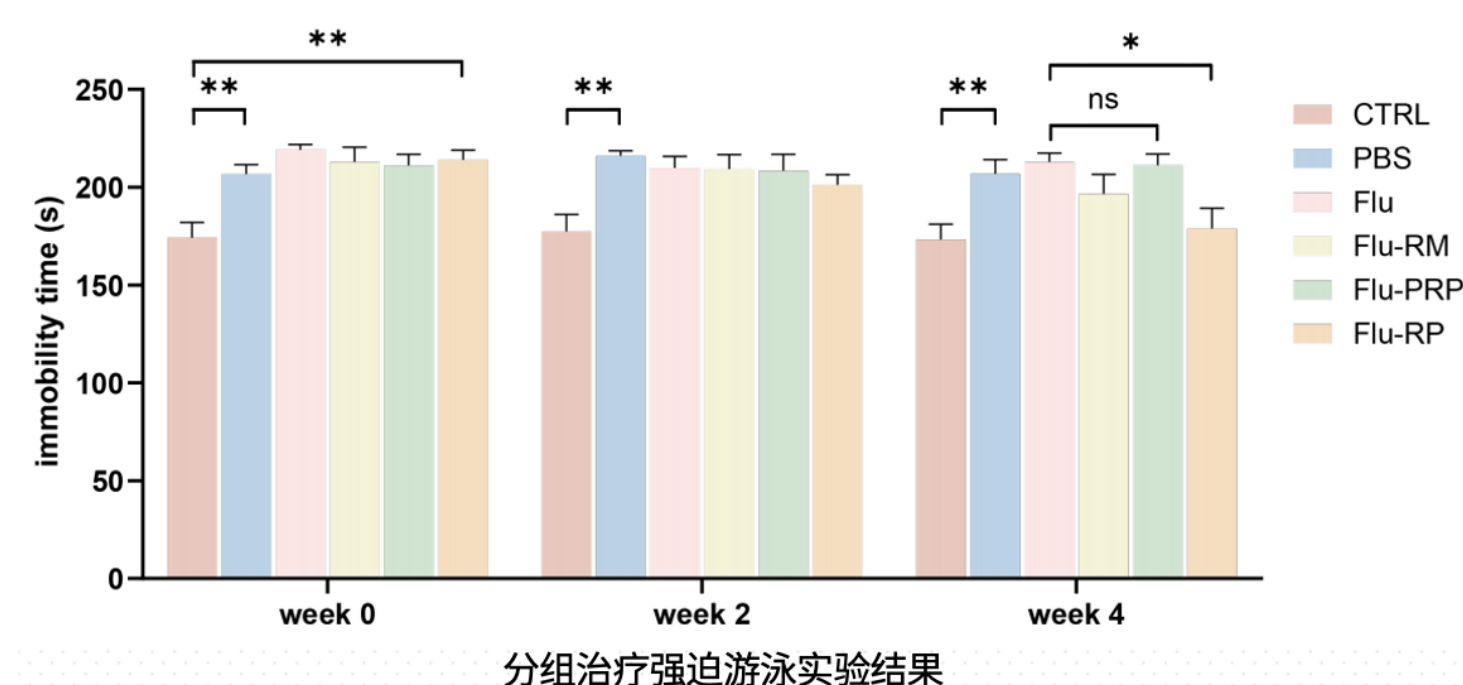
- 1) 纳米粒子设计与脑靶向肽构建



- 2) 脑靶向分布实验中发现：纳米囊泡显著提高了氟西汀的装载量；脑靶向肽的最佳配比是10%；氟西汀的最佳配比是25%



- 3) 抑郁小鼠造模与治疗：采用CUMS抑郁症造模，后用强迫游泳实验和糖水偏好实验进行行为学测试。使用纳米囊泡治疗后的小鼠的抑郁症相关表型得到了缓解，而使用传统药物氟西汀治疗后并未见明显改善，说明使用纳米囊泡可以提高氟西汀的治疗效率。





麻醉对自闭症儿童大脑网络的影响

导师：溥渊未来技术学院 李卫东

学生：溥渊未来技术学院 许可歆



官方二维码 Official WeChat

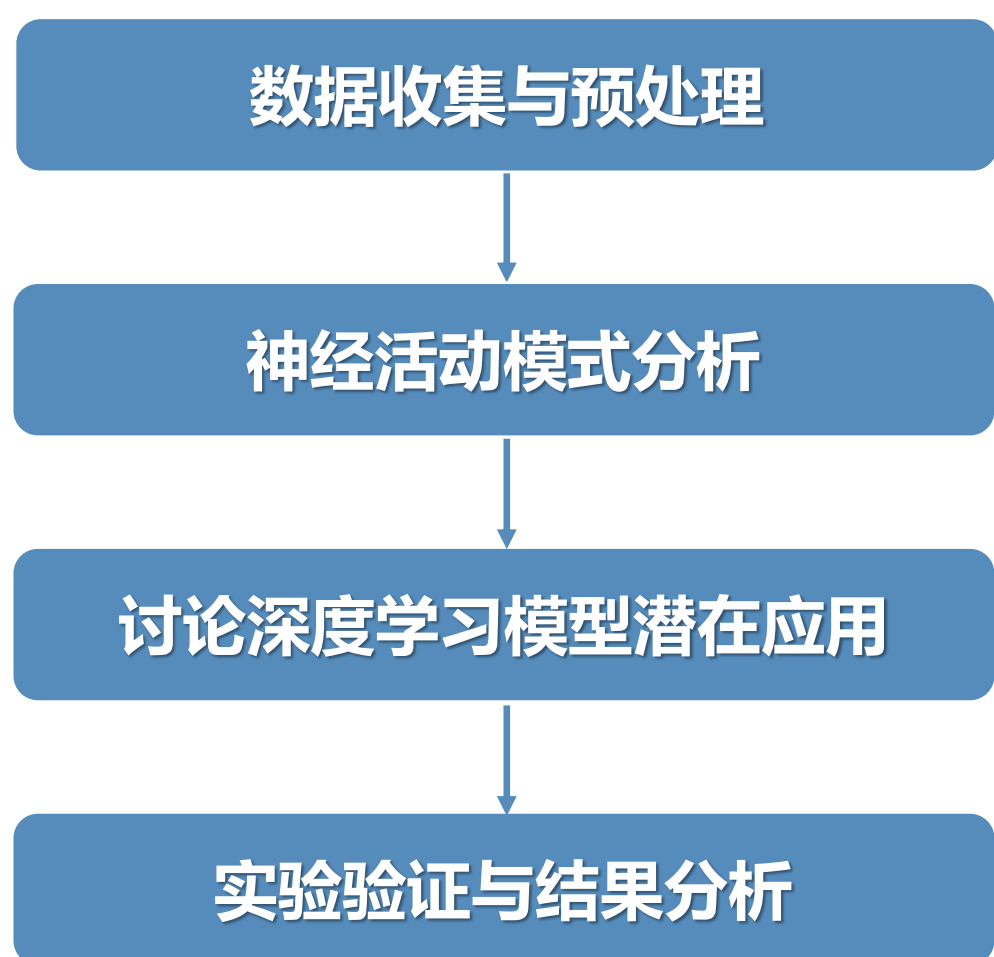
项目目标

本项目旨在通过结合麻醉和EEG技术，深入研究大脑网络重置机制，探索麻醉作为自闭症儿童潜在治疗手段的可行性。通过功率谱密度地形图和行为学分析，对不同麻醉浓度下的数据进行深入研究。此外，项目讨论了深度学习方法在未来EEG 数据分析中的潜在应用，以提高数据处理的精确性和效率。

项目背景

- **自闭症**：发病机制不明，目前缺乏特异性疗法。临床研究发现，麻醉可能成为治疗自闭症儿童的潜在治疗手段。通过分析大量EEG数据，我们研究了麻醉期间大脑网络活动的变化情况。
- **大脑网络重置机制**：大脑通过动态重组其功能结构，以支持不同的认知任务需求。这种功能网络的重置既需要子系统内部的独立信息加工，也依赖于跨系统的高效全局协同。
- **麻醉可调控大脑网络**：麻醉可抑制全脑网络的功能性连接，也可增强功能性脑网络的稳定性（如异丙酚）。
- **麻醉应用于自闭症治疗**：2022年8月，广州妇儿中心启动低浓度七氟烷联合星状神经节阻滞及针灸的综合疗法，治疗27名2-8岁自闭症患儿。随访显示，80%患儿在社交、认知、情绪等方面显著改善，且未报告副作用。

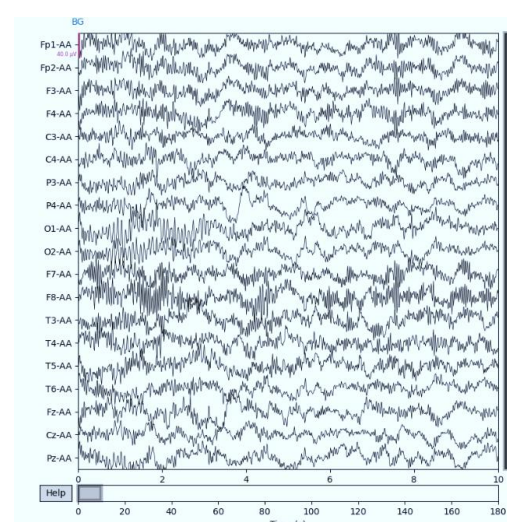
实施途径



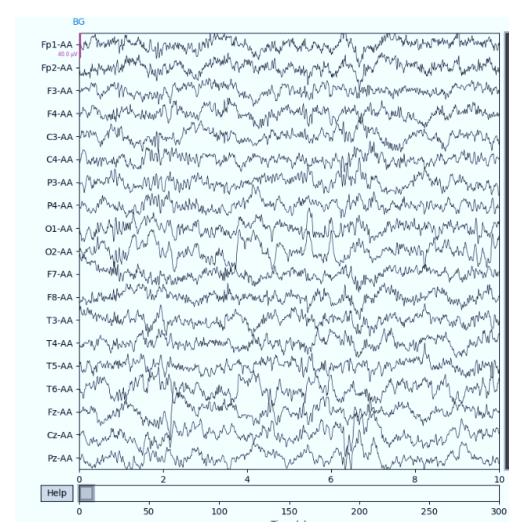
项目进展

• 理论学习

学习神经科学基础知识，了解EEG 技术的原理和应用，熟悉数据采集和分析的基本方法。



（麻醉治疗前EEG）

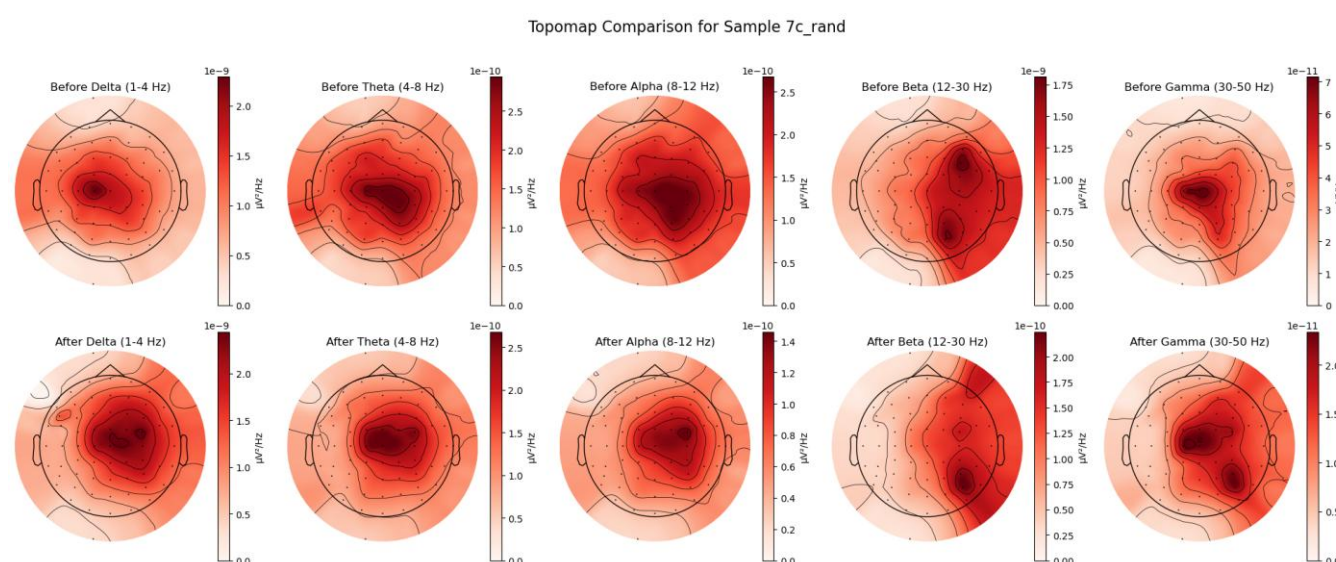
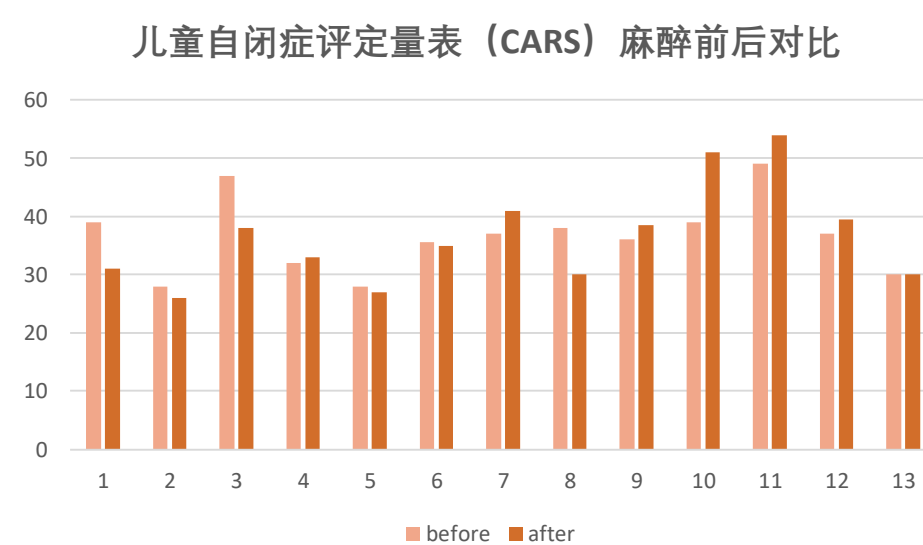


（麻醉治疗后EEG）

• 数据处理

通道定位 → 重参考 → 滤波 → 插值坏导 → ICA（独立成分分析）

• 行为学 & 拓扑图



实验结果

- 麻醉在行为调控方面潜在有效
- 低浓度麻醉可能反映了麻醉对异常脑活动的调节作用

基于深度学习的非晶态物质图像处理 开源工具包PyGlass开发

导师：溥渊未来技术学院 谢宇俊

学生：密西根学院 杨坤燚

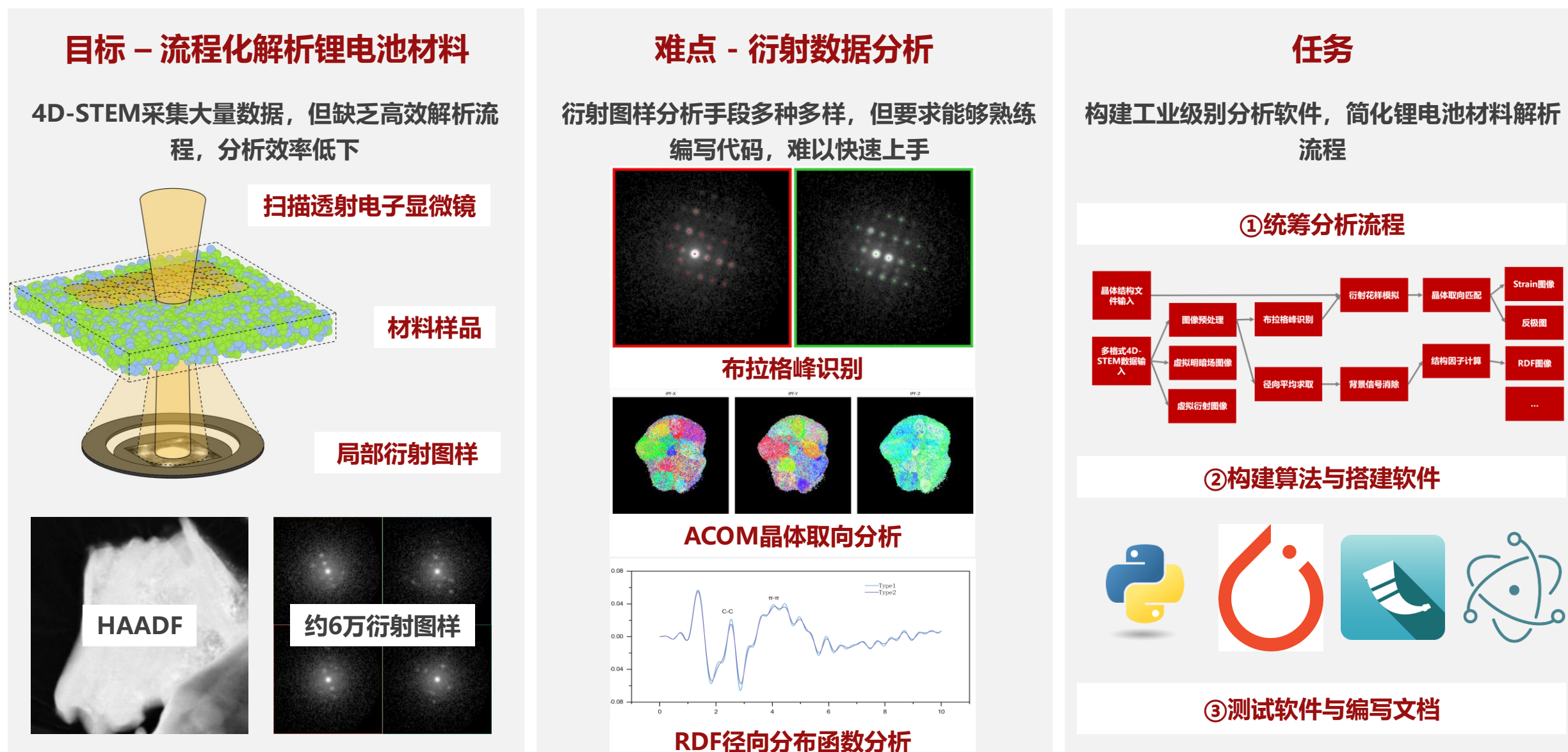


官方二维码 Official WeChat

研究目标与任务

近年来，4D-STEM（四维扫描透射电子显微镜）技术以其强大的数据采集能力，成为了材料科学领域，尤其是锂电池研究中的一把利器。它在传统二维成像的基础上，增加了扫描点位置的衍射信息，从而获得了海量的空间维度和衍射维度数据。然而，传统的数据分析方法严重依赖于手动操作和代码编写，处理流程繁琐、效率低下，成为了制约4D-STEM技术广泛应用的瓶颈。

为了解决这一难题，该项目致力于开发一款工业级别的图像分析软件——PyGlass。它能够将研究人员从繁琐的代码编写和低效的手动分析中解放出来，大幅度的简化和加速对锂电池材料的解析流程。



进展及代表性成果

PyGlass工业软件的开发已经取得重大进展，核心功能已基本实现。软件拥有直观友好的可视化界面，用户无需编写任何代码，即可轻松完成图像处理、晶体结构分析等多项任务，真正实现了“零代码”操作。目前，团队已经成功申请了软件著作权。PyGlass软件也在实际科研中得到了应用，并成功助力两篇学术论文。此外，PyGlass也应用到了2024中国国际大学生创新大赛的锂金属电池界面表征项目中，该项目成功获得产业赛道金奖。



基于大语言模型的 交通事故自动定责与原因分析

导师：溥渊未来技术学院 张颂安

学生：溥渊未来技术学院 周梓谨

Email:787796134@sjtu.edu.cn



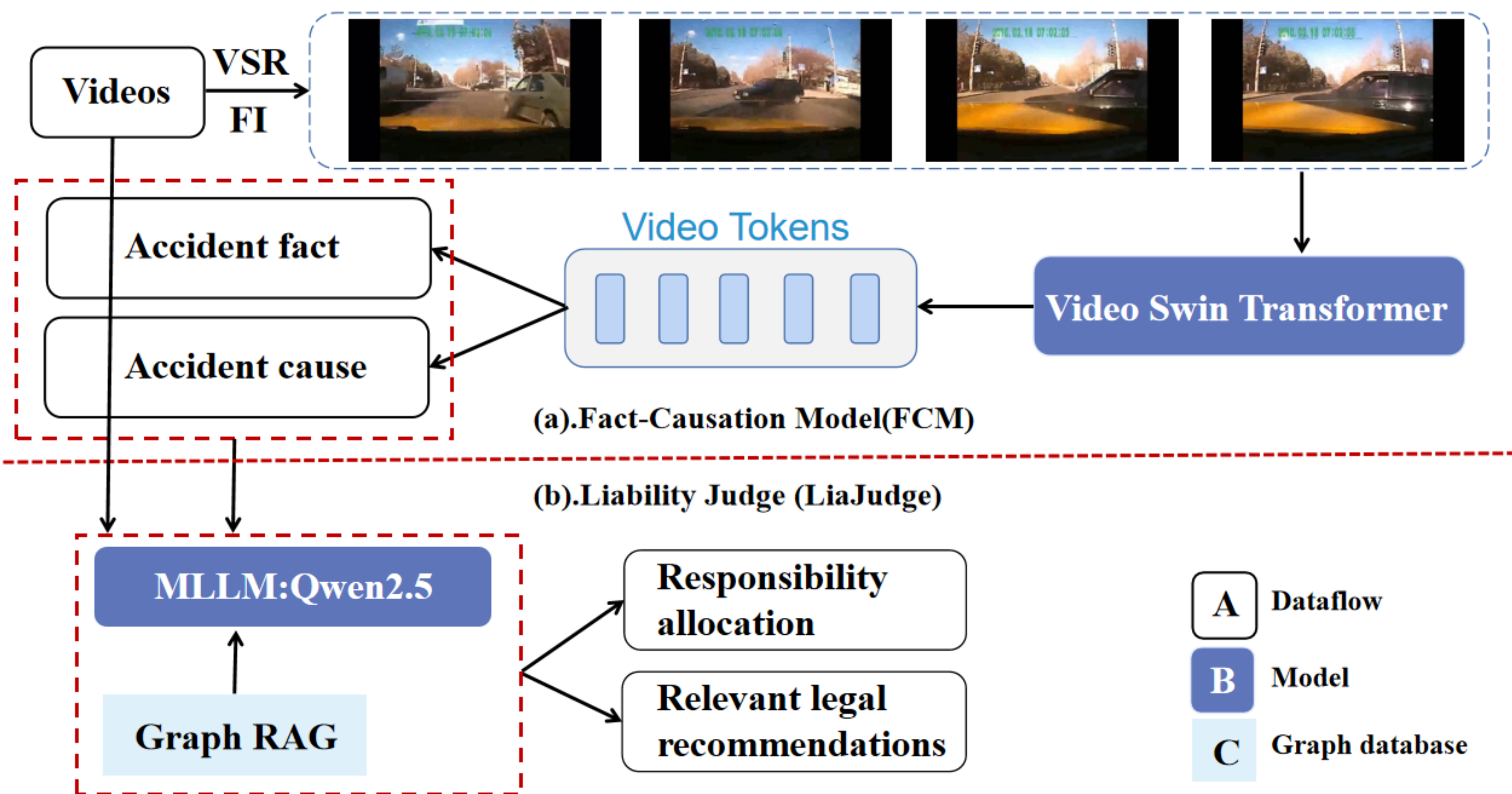
官方二维码 Official WeChat

摘要

随着自动驾驶技术和智能交通系统的快速发展，交通事故责任认定的自动化需求日益凸显。传统的交通事故责任认定依赖于人工分析，效率较低且易受主观因素影响。为解决这一问题，本文提出了一种基于多模态融合的交通事故自动定责方法，综合利用视频和语义分析技术，构建责任认定模型。模型通过深度学习和自然语言处理技术，对交通事故场景进行多层次的特征提取与语义理解，实现了事故责任的智能划分。实验结果表明，该方法在多项真实交通事故数据集上的准确率和鲁棒性均优于传统方法，为交通事故的高效、客观处理提供了新的解决方案。

关键词: Traffic Accident,VLM,AIGC,MLLM,KGRAG

模型结构



主要贡献:

1. 车祸视频由于是行车记录仪记录，需要对视频进行增强，训练了一个VSR（视频超分）和FI（视频插帧）网络
2. 由于车祸视频数据稀少，基于open-sora训练了一个视频生成模型来生成车祸视频
3. 利用已有的视频和生成的车祸视频训练了一个自动定责网络FCM，能根据视频帧输出事故事实和事故原因
4. 基于Qwen2.5VL搭建一个定责模型，基于事故事实，事故责任和事故视频来进行事故责任分配
5. 搭建了一个交通法规知识图谱，使用知识图谱检索增强生成来赋予大模型交通法规知识，并且能够输出相关法规

主要结论: 在测试集上定责准确率达到90%，超过当前所有主流多模态大模型



用于 β 探测的有机钙钛矿量子点薄膜的制备工艺研究

导师：溥渊未来技术学院 李聪毅

学生：材料科学与工程学院 胡智豪



官方二维码 Official WeChat

项目背景

β 射线闪烁探测器在检测核素、材料、环境等方面有广泛应用。

然而目前的闪烁体材料各有其局限性，开发新型 β 射线闪烁体具有重要意义。

金属卤化物钙钛矿是近年来新兴的一种材料，具有优异的光电特性。三维金属卤化物钙钛矿在高能电子束作用下易分解，而纳米尺寸的钙钛矿量子点引入了有机载体，增强了稳定性和实用性，适合用做新型 β 射线闪烁体材料。

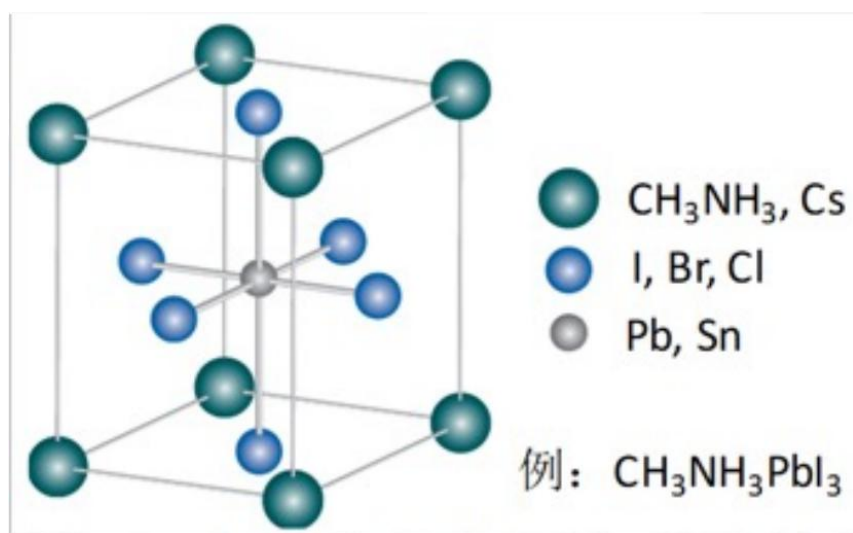


图1 金属卤化物钙钛矿基本结构

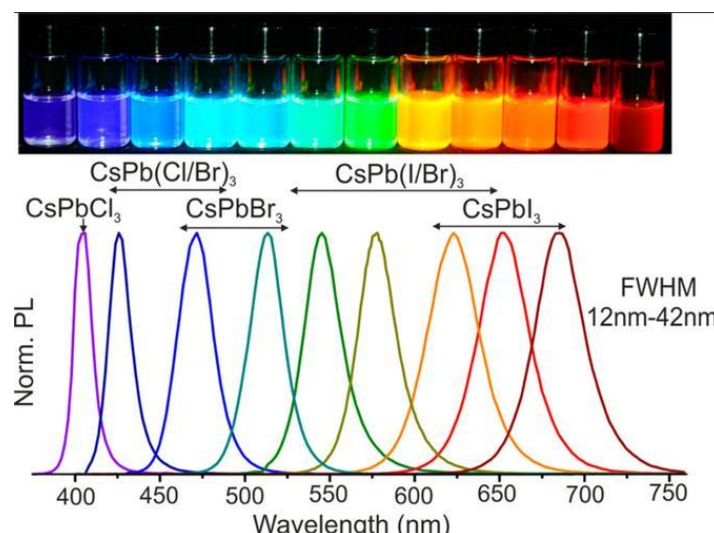


图2 钙钛矿量子点的优异可调性能

项目内容

本项目从计算和实验两个方面对钙钛矿材料的核辐照性能进行研究，希望能结合性能表征与理论模拟，建立构效关系，揭示其效率及稳定性背后的机制。

在计算上，本项目通过第一性原理模拟钙钛矿核辐照时不同缺陷的形成和演化行为，计算钙钛矿的缺陷形成能和离位阈能，研究了钙钛矿核稳定性的根本原理。

在实验上，本项目目标优化钙钛矿量子点的合成方法，实现尺寸均一、表面缺陷少的钙钛矿量子点，增强钙钛矿量子点 β 射线探测闪烁体的发生强度，使用最新的量子点薄膜旋涂工艺，制造可用的光电薄膜器件。

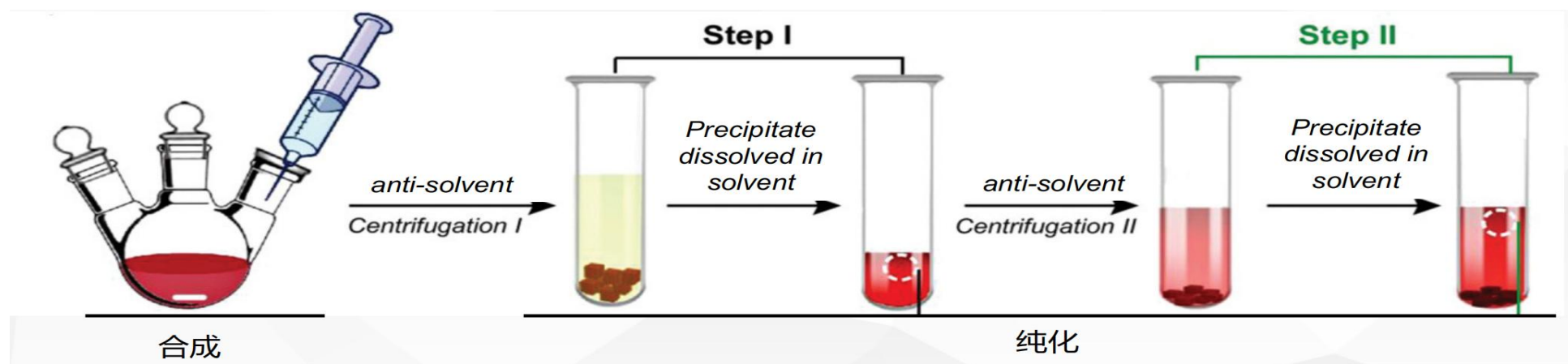


图3 钙钛矿量子点的基本合成与纯化工艺

项目成果

计算方面，DFT计算了 MAPbBr_3 不同原子不同取向的离位阈能 E_d 和缺陷演化情况，得到了较为精确的 E_d 数值，修正了传统的单元素默认值，并根据氢原子的结合和迁移行为，提出了新的钙钛矿自修复机制机理解释，即将投稿发表一篇SCI论文。

实验方面，使用前驱体过饱和析出法制备了多种Pb基钙钛矿量子点，完成了基础形貌和光学特性表征，后续将进行进一步核性能表征优化和器件制备。

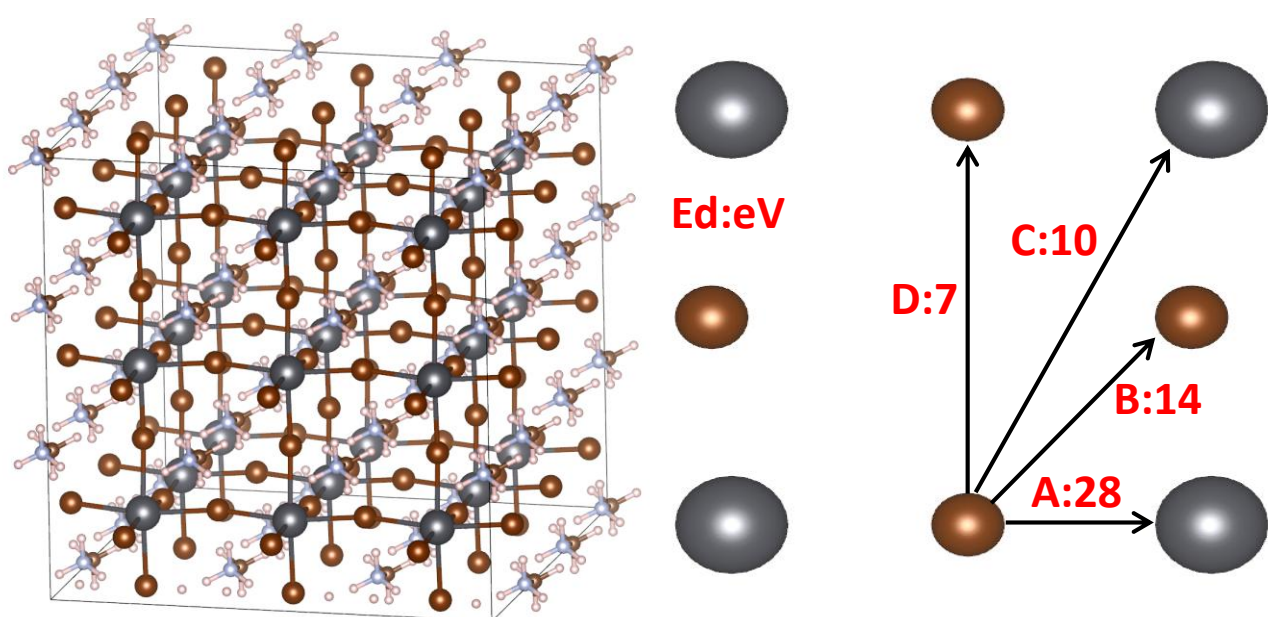


图4 MAPbBr_3 的计算模型和Br离位阈能

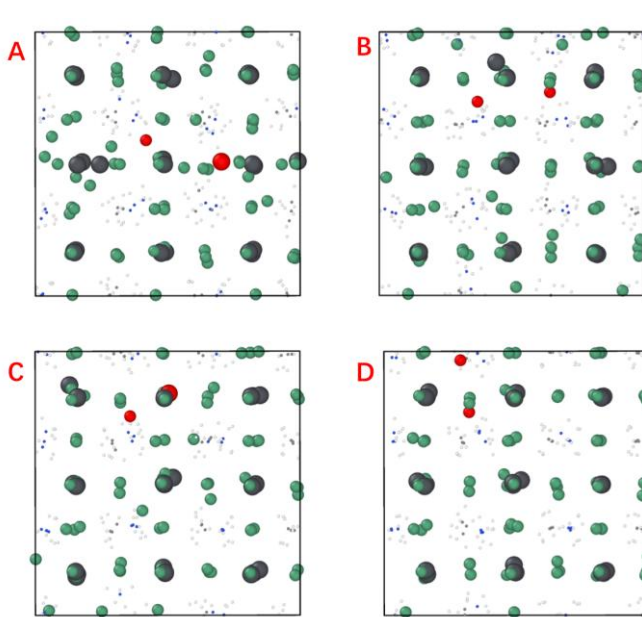


图5 模拟缺陷演化行为

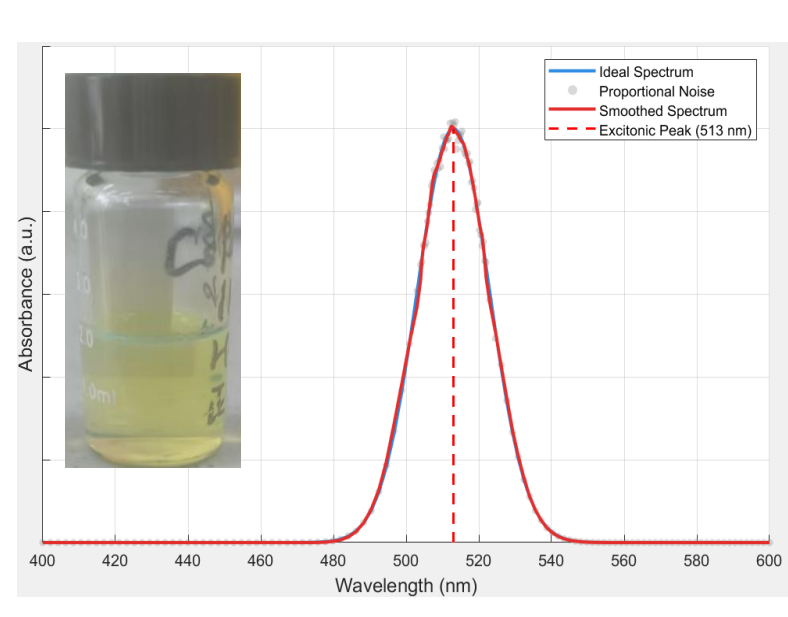


图6 纯化样品及其吸收光谱



固态电解质新材料的计算及其AI预测

导师：溥渊未来技术学院 万佳雨

学生：材料科学与工程学院 刘严柯淏



官方二维码 Official WeChat

VASP计算学习

VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)，即维也纳从头算模拟软件包，是一款基于**密度泛函理论** (DFT) 的第一性原理计算程序，在全球科研领域得到了极为广泛的应用。它由维也纳大学的Peter Blöchl、Georg Kresse等人开发，能够**精确且高效**地处理各种复杂的材料体系计算问题。

目前，已经运用VASP成功计算部分材料的离子扩散率并成功计算出**离子电导率**。

右图为计算离子电导率的部分代码与VASP实际计算得到的部分原子结构表现。

高筛代码复现

为了从大量繁杂的化合物中精准找出具有**潜在优异离子导电性能**的材料。复现了高通量筛选的代码，大致通过如下步骤：1.基础材料检查，2.渗流半径，3.三维扩散网络，4.扩大锂位点，5.实际考虑。

通过高通可以排除不符合要求的化合物，有效缩小研究范围，聚焦于更有可能成为高性能离子导体的材料，极大地提高了材料筛选的效率和针对性。

Crystal Structural Framework of Lithium Super-Ionic Conductors

Xingfeng He, Qiang Bai, Yunsheng Liu, Adelaide M. Nolan, Chen Ling, and Yifei Mo*

高电导率条件复现

超离子锂电导率仅在少数几类材料中被发现，大多存在于硫代磷酸盐中，在氧化物中极为罕见。而该论文揭示了氧化物晶体结构框架的**角共享连接性**可促进超离子电导率。

该论文明确了氧化物晶体结构框架的角共享连接性对超离子电导率的促进作用，并从锂环境和离子间相互作用角度进行了合理阐释。

6-3. Li在B掺杂silicene表面迁移路径与能垒
视频：41分钟58秒

6-4. silicene/graphene异质结构模型构建与结构优化
视频：38分钟55秒

6-5. silicene/graphene异质结构结合能与差分电荷密度
视频：19分钟25秒

6-6. silicene/graphene异质结构与Li相互作用
视频：07分钟05秒

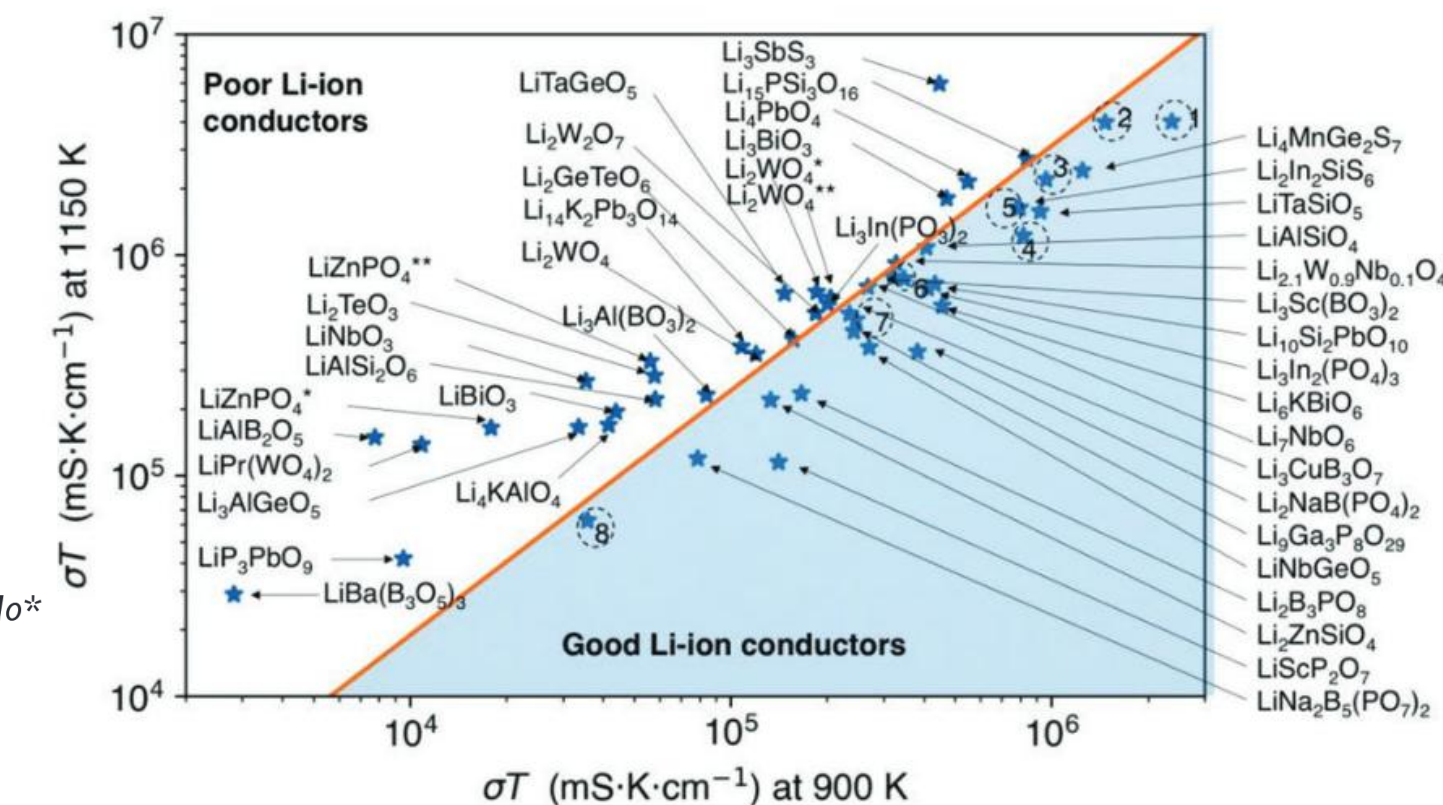
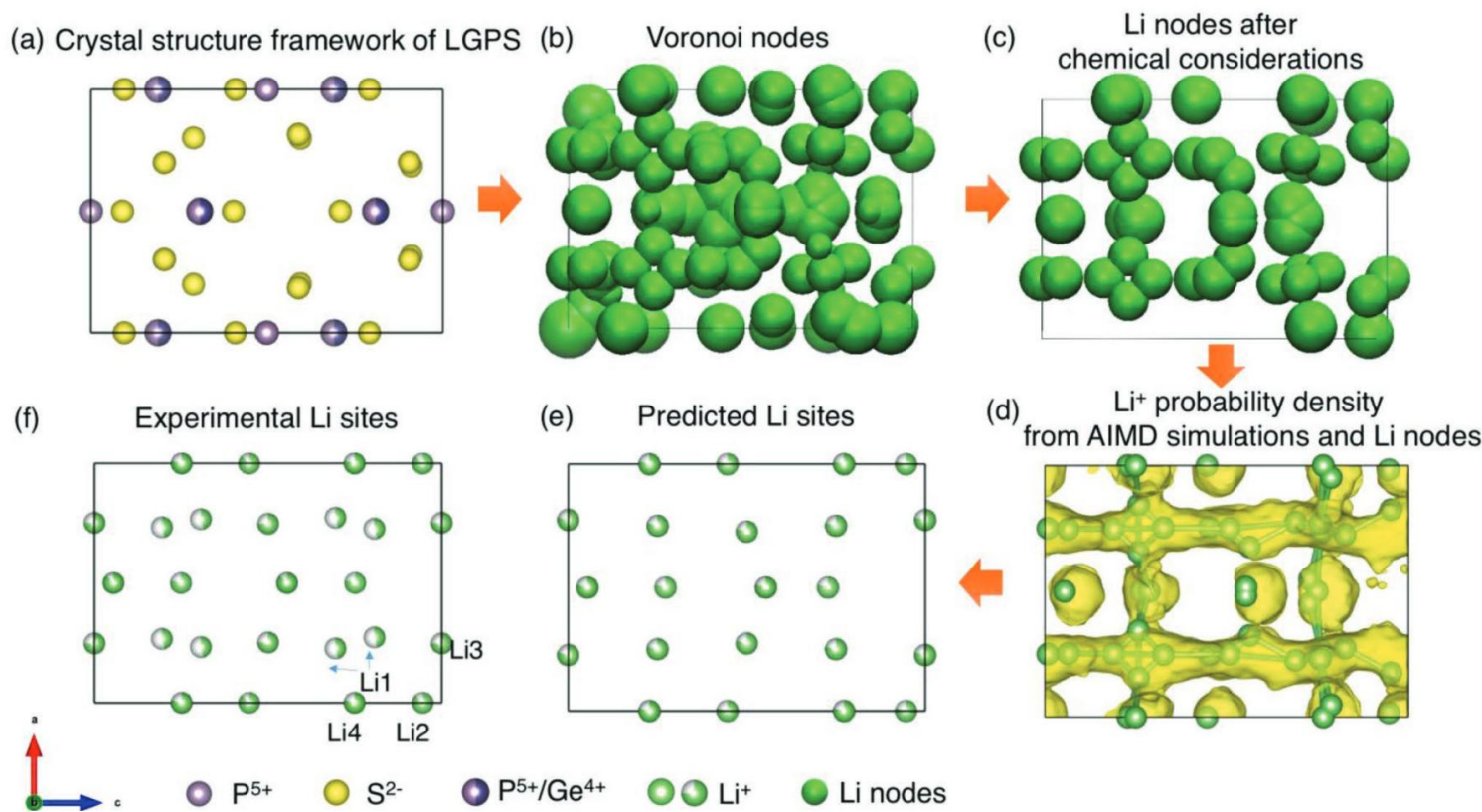
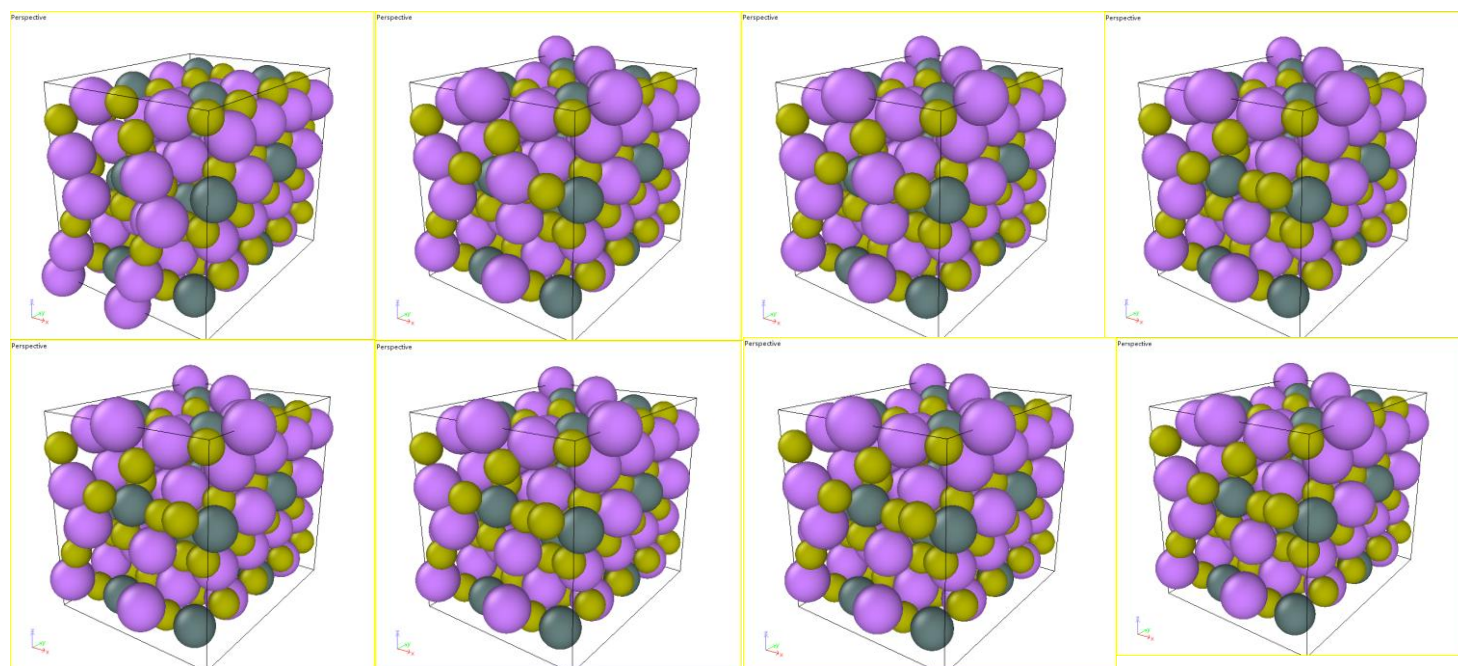
6-7. 应变对silicene/graphene异质结构与Li相互作用的影响
视频：18分钟18秒

6-8. Li在silicene/graphene异质结构界面迁移路径与能垒
视频：05分钟37秒

6-9. F功能化phosphorene模型构建与结构优化
视频：44分钟11秒

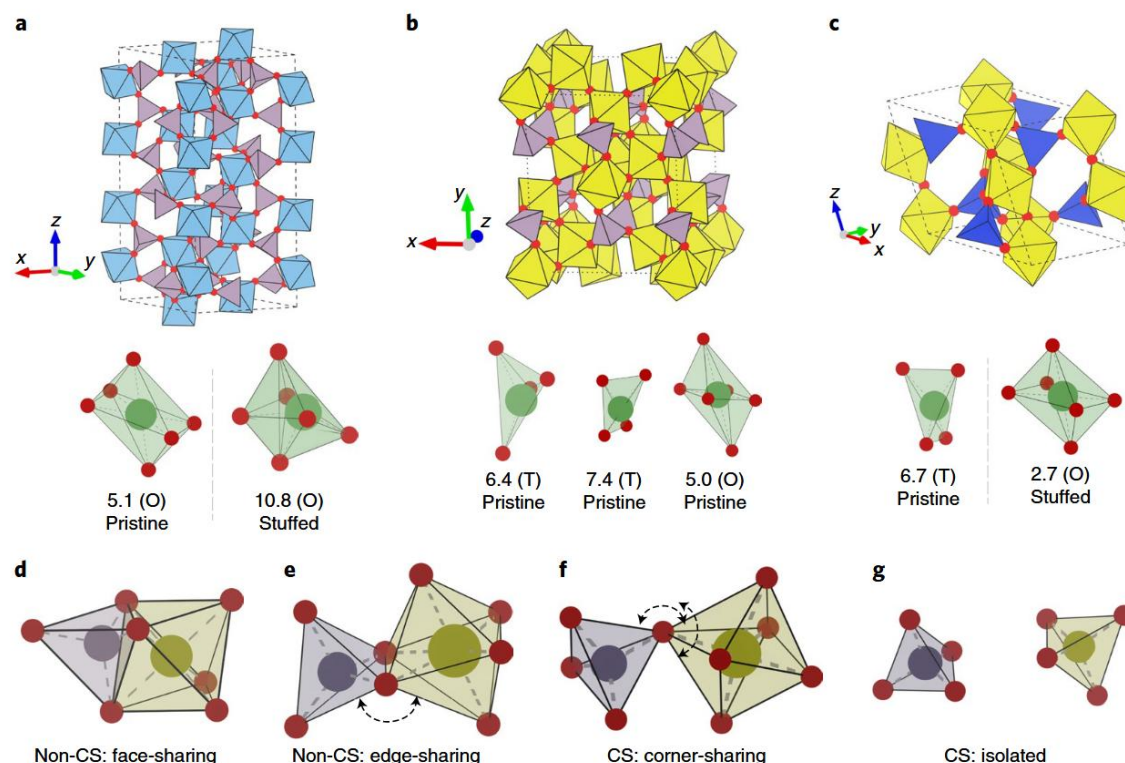
6-10. F功能化phosphorene电子结构
视频：22分钟42秒

```
traj =  
Trajectory.from_file('XDATCAR')  
  
diff =  
DiffusionAnalyzer.from_structures(traj, 'Li', 900, 2, 1)  
diff.plot_msd()  
C = diff.conductivity  
  
with open('result.dat', 'w')  
as f:  
f.write('# AIMD result  
for Li-ion\n')  
f.write('temp\tconductivity\n')  
f.write('%d\t%.2f\n'  
%(900, C))
```



Lithium superionic conductors with corner-sharing frameworks

KyuJung Jun^{1,2,5}, Yingzhi Sun^{1,2,5}, Yihan Xiao^{1,2}, Yan Zeng^{1,2}, Ryounghee Kim³, Haegyeom Kim², Lincoln J. Miara⁴, Dongmin Im³, Yan Wang^{4,2,3} and Gerbrand Ceder^{1,2,3,2}



基于结构启发式生物大语言模型的迷你基因编辑酶挖掘

导师：溥渊未来技术学院 郑双佳

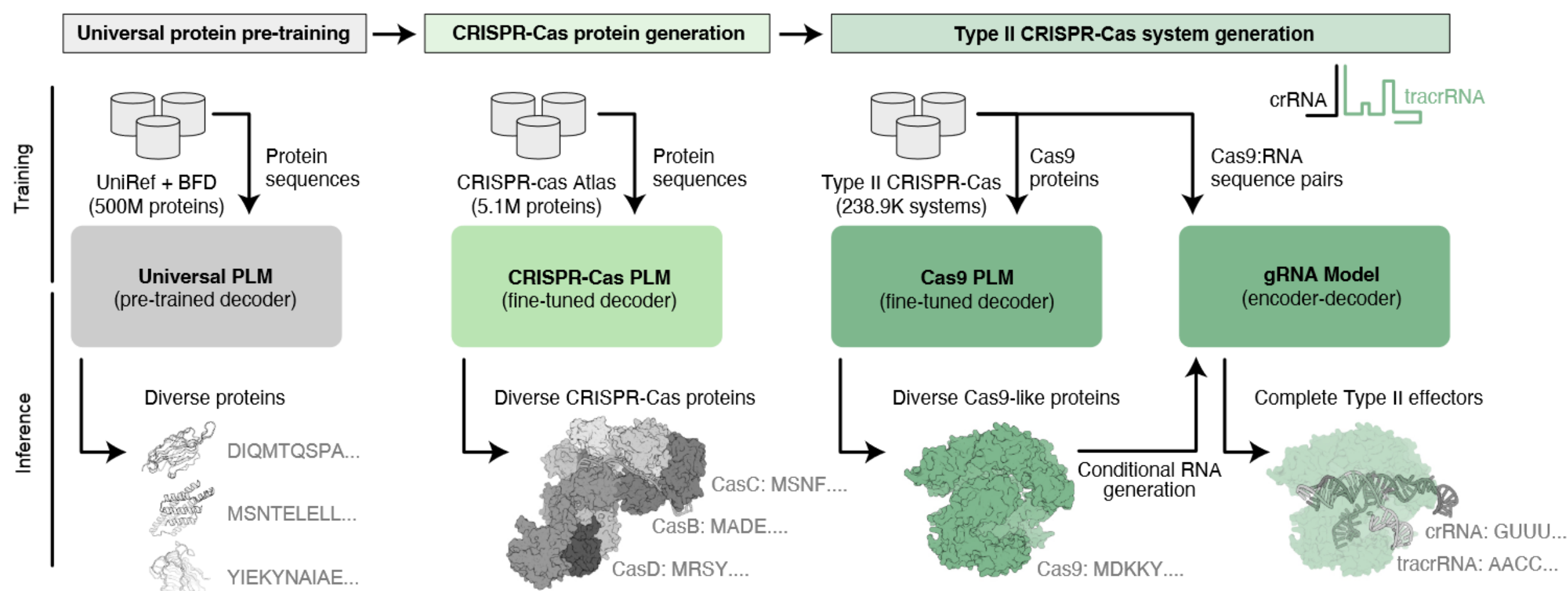
学生：计算机学院 吕光烨



官方二维码 Official WeChat

近年来，基因编辑在生物科技领域的影响已广为人知。CRISPR/Cas系统源于细菌和古细菌的天然免疫系统，这个系统的核心构成包括Cas核酸酶和可编程的向导RNA（gRNA）。当Cas蛋白与gRNA形成复合物后，便可以对特定的目标基因进行精准的编辑。基因编辑酶已经成为了解决一系列复杂疾病的关键工具，包括遗传性疾病、传染病、代谢紊乱和癌症等。在农业领域，基因编辑酶同样起着关键作用，它被广泛应用于创新和优化作物新品种。通过对作物基因组的修改，我们可以培育出抗逆性更强、品质更优良的新品种，从而提高农作物的产量和品质。

然而，采用传统方法发现和优化基因编辑酶都面临着众多的挑战。例如，酶的发现过程常常复杂且费时，需要大量的实验和筛选。传统的酶发现方法，比如定向进化随机筛选或者基于经验的实验，这些方法往往效率低下，成功率低，以及需要大量的时间和资金。特别是在基因编辑领域，寻找到具有特定功能的酶往往更加困难，因为这些酶需要经过复杂的进化过程才能获得。值得注意的是，当今世界的基因编辑酶核心专利主要掌握在以MIT Feng Zhang和Broad Institute David Liu为代表的课题组中，中国的基因编辑相关企业每年需支付高昂的专利费用。因此，设计出具有国际竞争力的基因编辑酶被国家工业和信息化部列为推动未来产业创新发展的关键新赛道之一。



针对基因编辑酶设计领域的国际竞争格局与技术瓶颈，本研究将系统梳理基于蛋白语言模型的酶功能预测与设计方法，以及CRISPR-Cas系统的最新研究进展。重点分析现有文献中基因编辑酶的活性位点、底物特异性及结构-功能关系，总结当前大模型在酶工程中的应用潜力与局限性。同时，结合中国企业在基因编辑专利领域的困境，文献综述将聚焦于突破传统定向进化路径的创新策略，例如通过深度学习挖掘未被表征的CRISPR酶资源，为后续自主知识产权酶的设计提供理论支撑。基于课题组已建立的CRISPR-Cas宏基因组图谱资源，构建CRISPR-Cas数据库。数据库将涵盖Cas9、Cas12等核心家族及其变体的序列数据。利用蛋白语言大模型对CRISPR酶进行全局表征，结合低秩自适应（LoRA）技术对模型进行领域微调，使其专注于基因编辑酶的活性预测与可编辑性评估。通过整合宏基因组数据与AI大模型技术，本研究有望突破传统酶发现范式，系统性挖掘具有自主知识产权的CRISPR新酶资源。迷你酶设计可降低基因治疗载体的递送难度，而结构多样性拓展将助力开发针对复杂疾病的新型编辑策略。技术成果预期降低国内企业对海外专利的依赖，推动我国在基因编辑底层工具领域的国际竞争力。



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



溥渊未来技术学院
GLOBAL INSTITUTE OF FUTURE TECHNOLOGY



WUXI 锡山
XISHAN

基于OpenVLA的智能移动分拣小车

导师：溥渊未来技术学院 张颂安

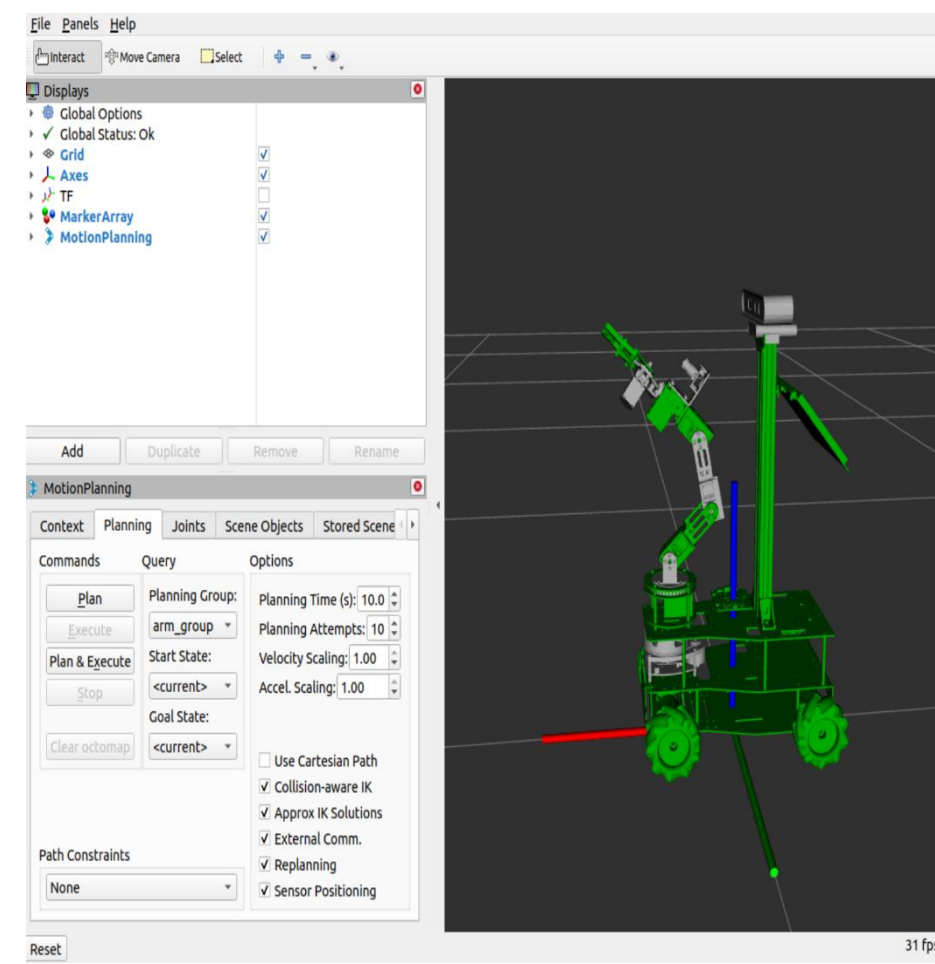
学生：机械与动力工程学院 沈康



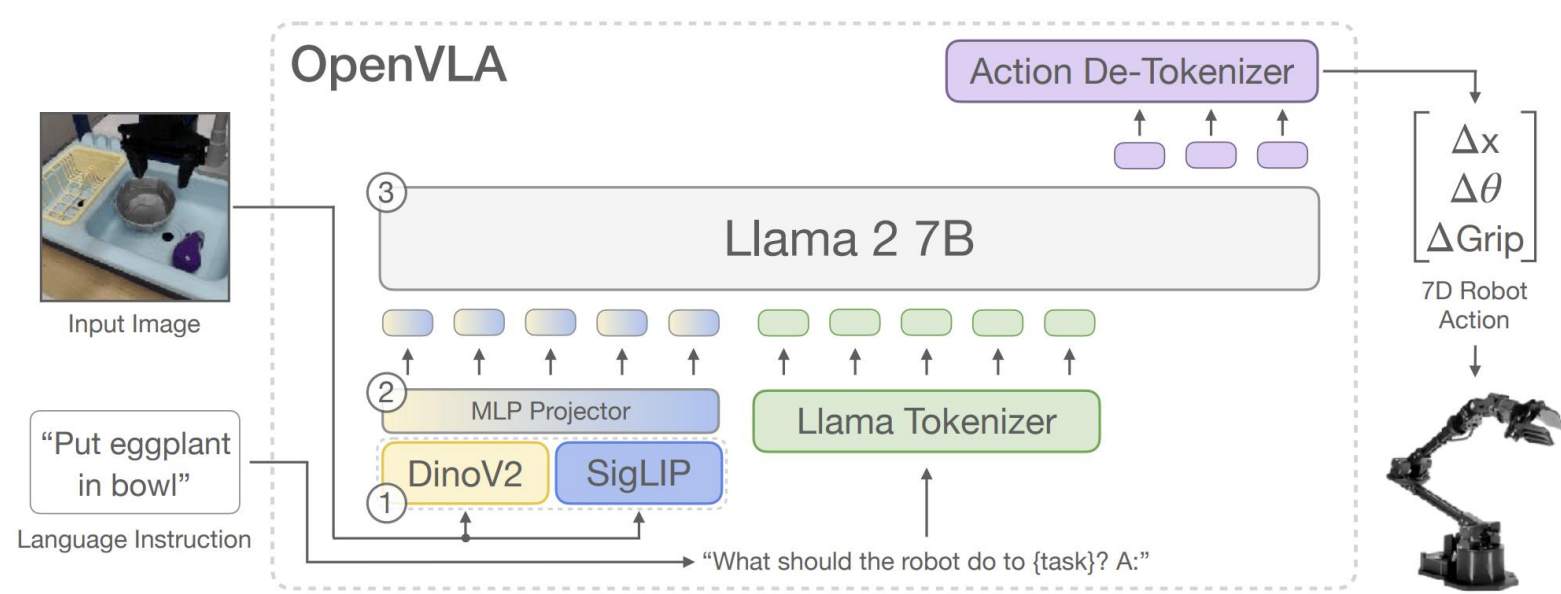
官方二维码 Official WeChat

项目介绍

传统智能分拣系统已广泛应用于物流等行业，但传统系统无法处理人类语言、运行流程死板；面对复杂多变的实际应用场景时泛化性差，经常需要人工介入，降低了自动化水平。本项目旨在设计出一套智能分拣程序系统，使得小车可以在本地实时进行移动规划决策。



项目核心原理

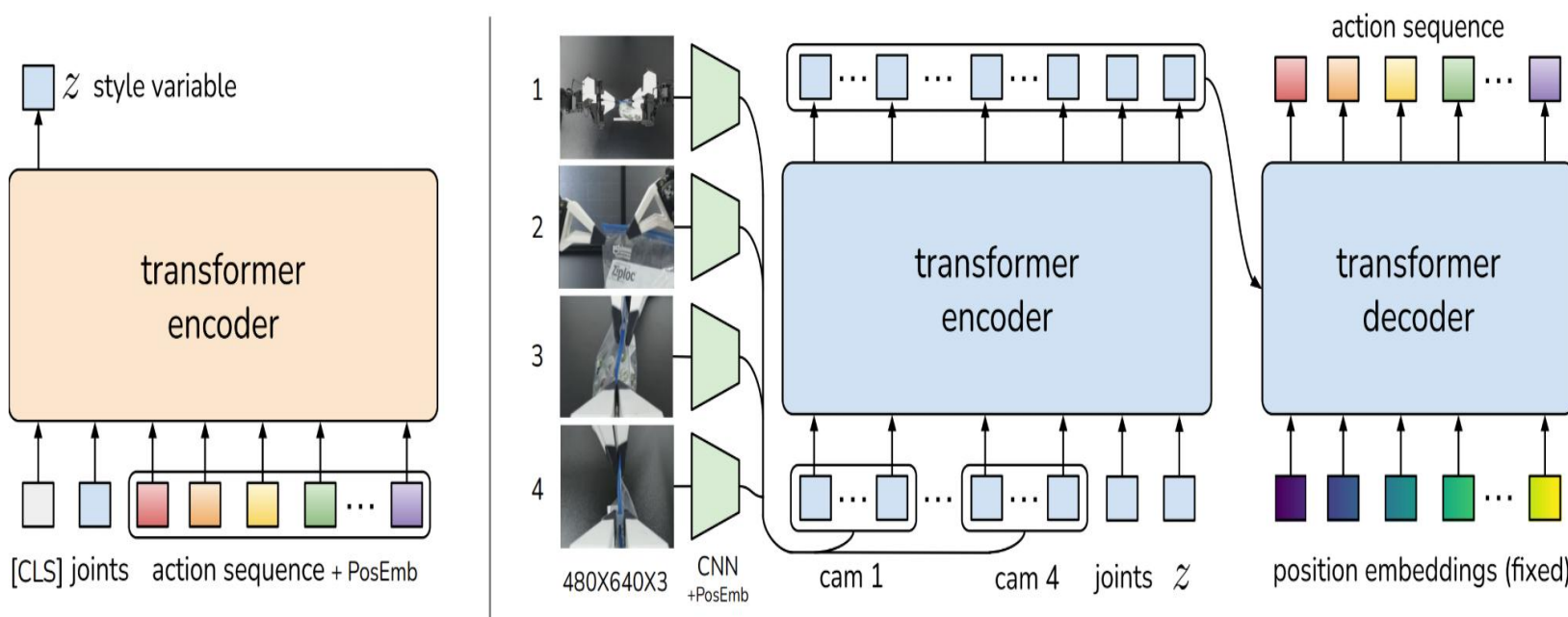


OpenVLA-大型视觉语言动作模型

其架构由三部分组成：视觉编码器、将视觉特征映射到语言嵌入空间的MLP投影仪以及Llama 2语言模型骨干，用于根据图像观察和语言指令预测7维机器人控制动作

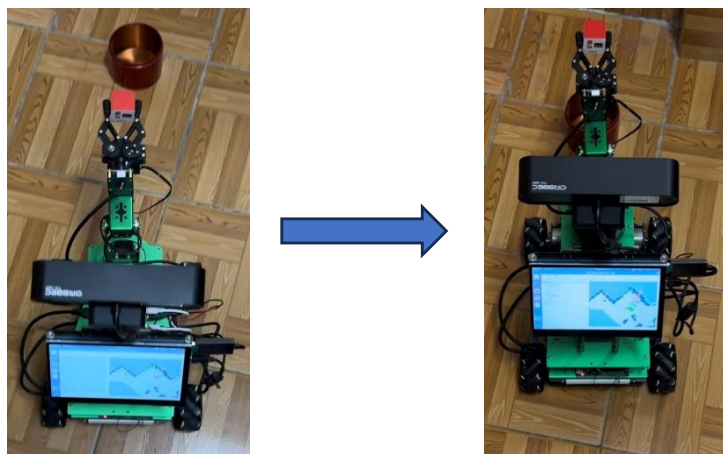
ACT-动作分块算法

将动作分块，通过模拟 $\pi_{\theta}(a_{t:t+k} | s_t)$ 预测未来动作序列，采用时间集成处理预测结果，还将策略训练为条件变分自编码器(CVAE)，利用 CVAE 编码器和解码器生成动作序列，以最大化演示动作块的对数似然进行训练



项目进展与成果

- ①利用ACT-动作分块算法训练，使得移动机器人能够完成指定动作、完成分拣任务



- ②利用ROS实现语音控制色块识别搬运、语音控制机械臂垃圾识别分拣、自动驾驶清障等demo



项目未来计划与设想

- ①优化ACT算法，使得小车在靠近目标移动时，机械臂就能执行预测的动作
- ②LoRA微调大模型使大模型适配机械臂
- ③分析比较两种方法的优劣
- ④在诸如垃圾捡拾分类或快递分拣等任务上验证程序的效果并设计场景测试其泛化能力
- ⑤根据测试结果进一步优化调整，提高实车性能和鲁棒性



探究 $\text{Li}_2\text{CoPO}_4\text{F}$ 在固态电池体系中的超高压放电表现

导师：溥渊未来技术学院 薄首行

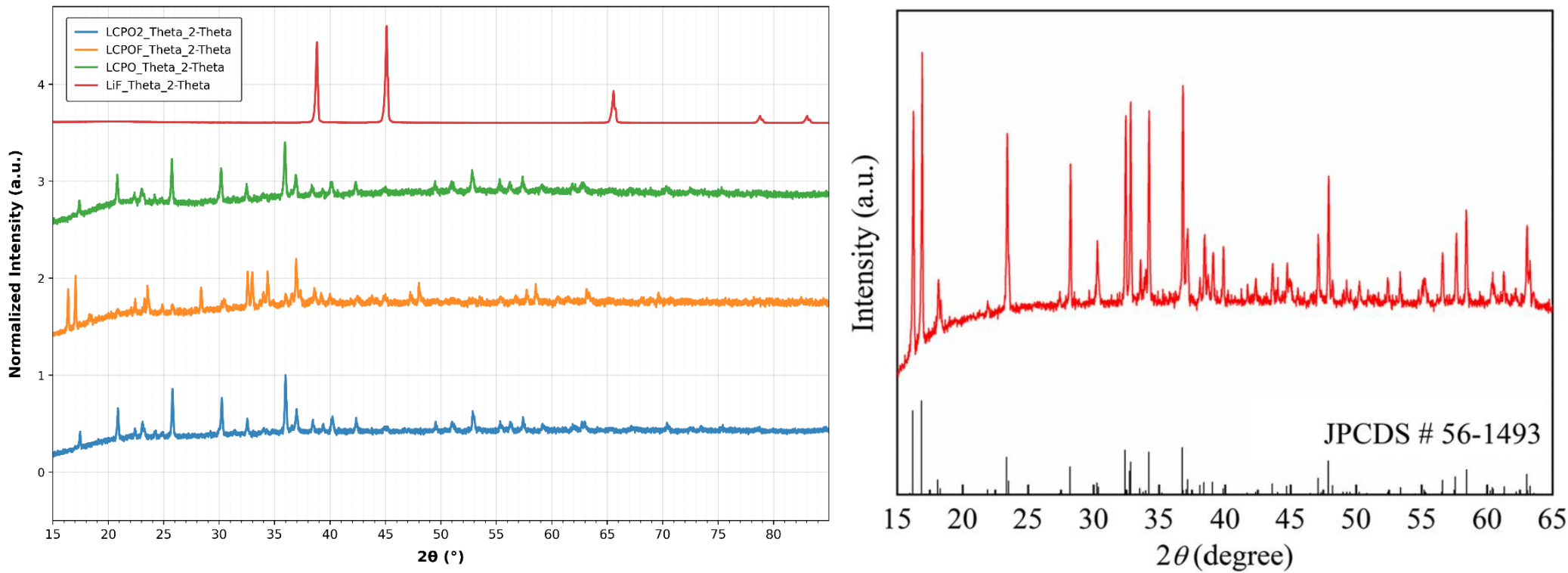
学生：溥渊未来技术学院 王烁涵



官方二维码 Official WeChat

选用 $\text{Li}_2\text{CoPO}_4\text{F}$

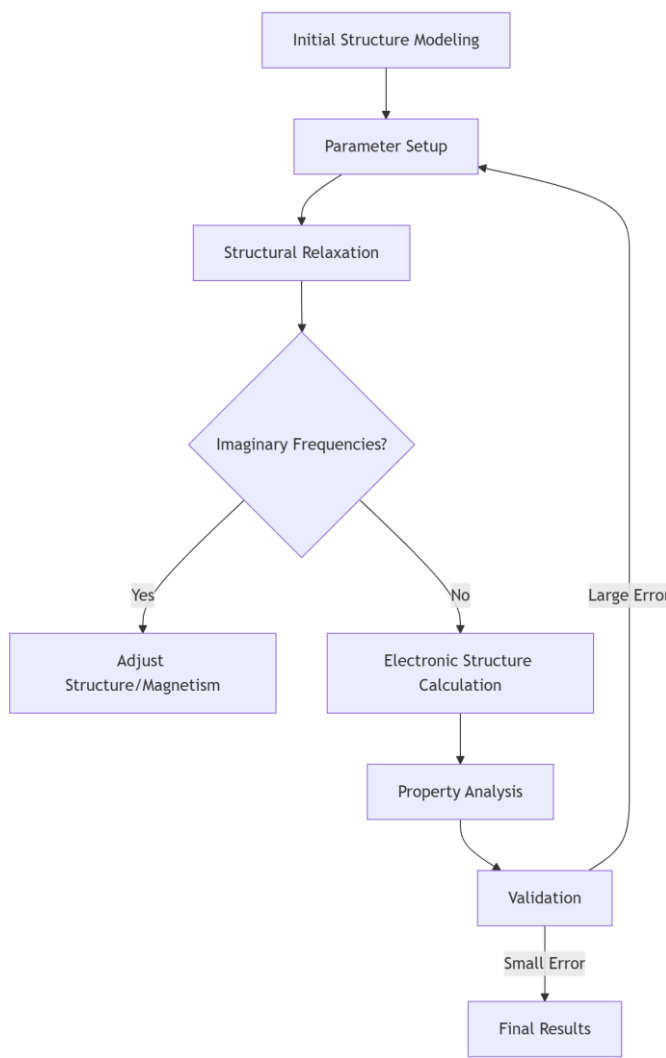
良好的结构稳定性和电化学性;286.98 mAh/g的理论比容量;平均5 V (vs. Li/Li^+) 的工作电压



(a)前驱体氟化后，产物的峰值与之前明显不同，只有少数峰保留下来。

(b)绝大多数峰可以和理论值逐一匹配，只有极少数峰值偏移，少数峰值消失。

$\text{Li}_2\text{CoPO}_4\text{F}$ 的DFT初步计算



Targets: Lattice parameters (a, b, c) + atomic positions.

Kohn-Sham Equation:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\psi_i(\mathbf{r})$$

o $V_{\text{eff}} = V_{\text{ext}} + V_{\text{Hartree}} + V_{\text{XC}}$.

Hartree potential: $V_{\text{Hartree}} = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$.

Exchange-correlation: GGA-PBE.

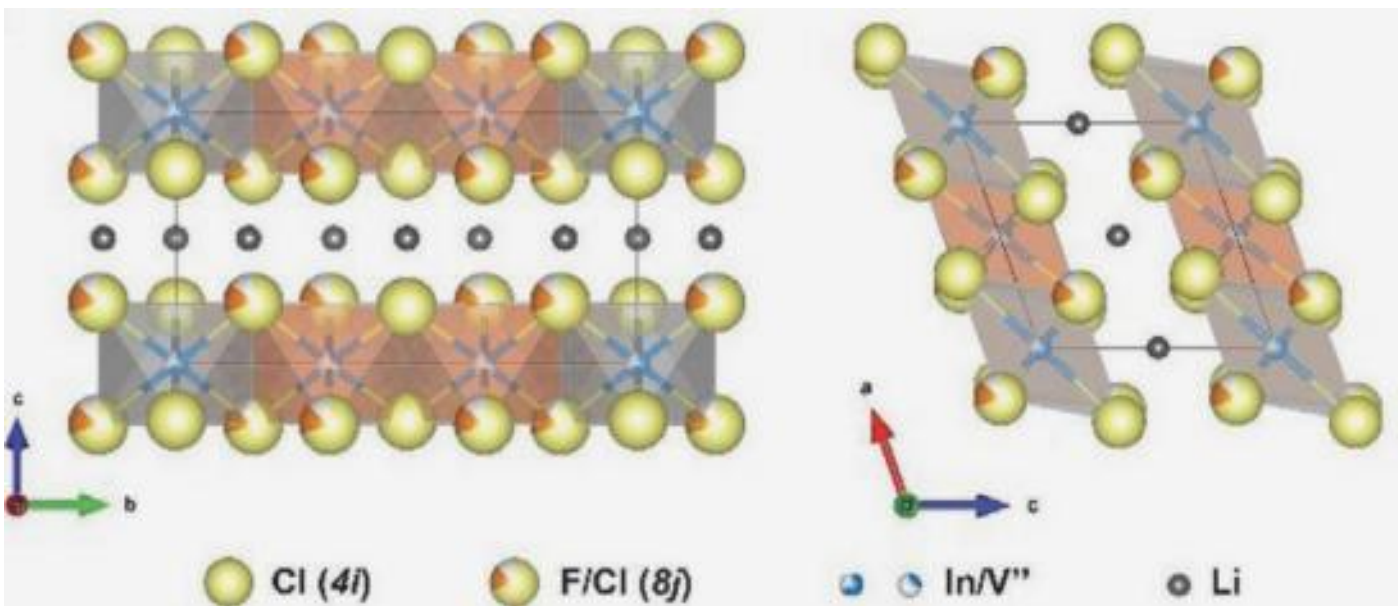
Diagonalize the Hamiltonian matrix to obtain eigenvalues ϵ_i and orbitals ψ_i .

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad \Delta\rho < 1 \times 10^{-6} e/\text{\AA}^3$$

基于 $\text{Li}_2\text{FePO}_4\text{F}$ 结构，用Co代替Fe构建 $\text{Li}_2\text{CoPO}_4\text{F}$ 的初始模型。初始晶格参数继承了 $\text{Li}_2\text{FePO}_4\text{F}$ 的实验值。

使用共轭梯度法优化晶格参数 (a, b, c) 和所有原子位置。

固态电解质的选择



Crystal structure of $\text{Li}_3\text{InCl}_{6-x}\text{F}_x$ from the view that is parallel to a-axis and b-axis

经实验后，目前有两种备选

LTOC及其掺杂：优点为电导率较高，合成技术更成熟；缺点为电压较低

LIC及其掺杂：优点为电化学窗口与正极材料符合；缺点为电导率较低（ $10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ ）

钙钛矿太阳能电池界面设计及稳定性探究

导师：溥渊未来技术学院 马珂

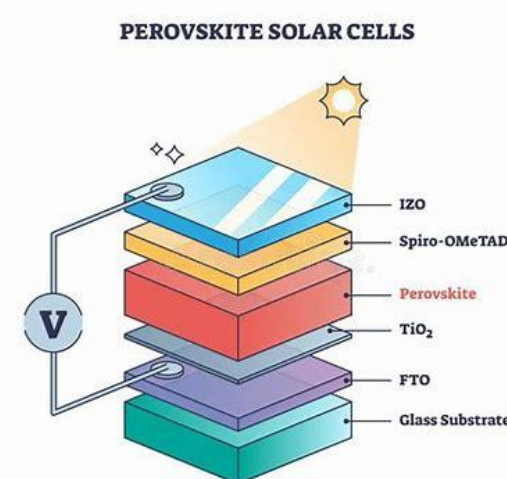
学生：溥渊未来技术学院 谢炯生



官方二维码 Official WeChat

研究背景

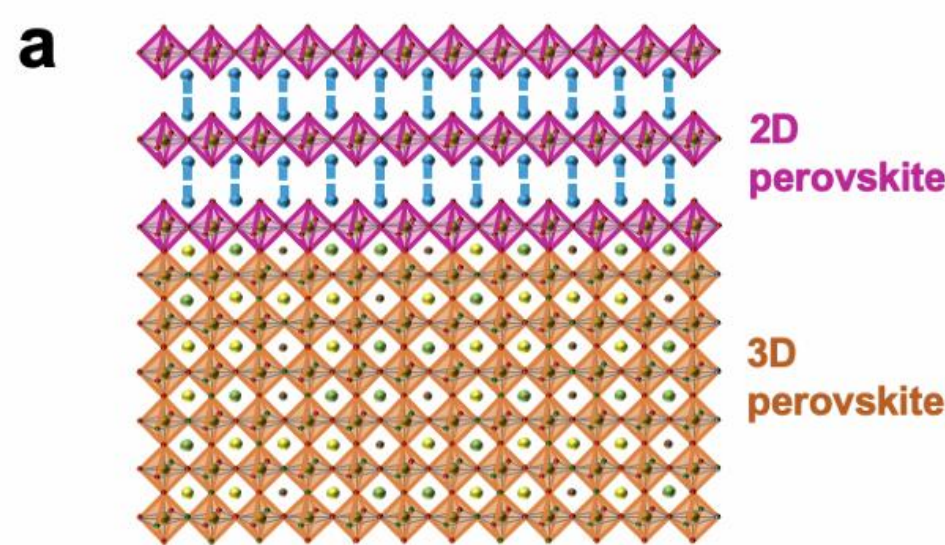
钙钛矿太阳能电池具有高效率、低成本、吸光率高、可调节范围大等众多优势，是目前最有潜力的下一代光伏技术。然而钙钛矿材料以及界面的稳定性是目前其市场化的主要障碍之一。本项目拟在三维钙钛矿薄膜表面构筑二维/三维异质结结构，通过稳定的二维钙钛矿来对三维钙钛矿的表面进行保护。



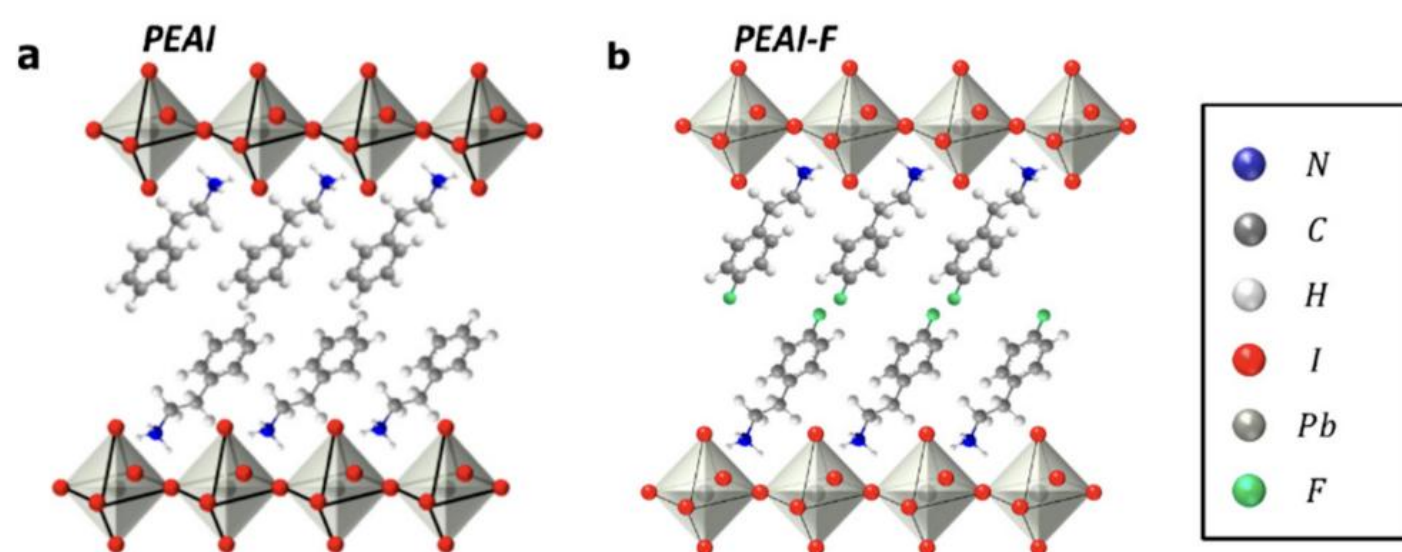
图一 钙钛矿太阳能电池示意图

研究目标

二维钙钛矿的晶体结构可通过其组成成分中的有机阳离子进行调控。本项目将通过混合阳离子的方式，探究二维钙钛矿中单一阳离子与混合阳离子组分对于二维/三维钙钛矿异质结热稳定性的影响，理解钙钛矿薄膜界面晶体结构的有序性在其稳定性中所起的作用。



图二 二维/三维钙钛矿异质结示意图

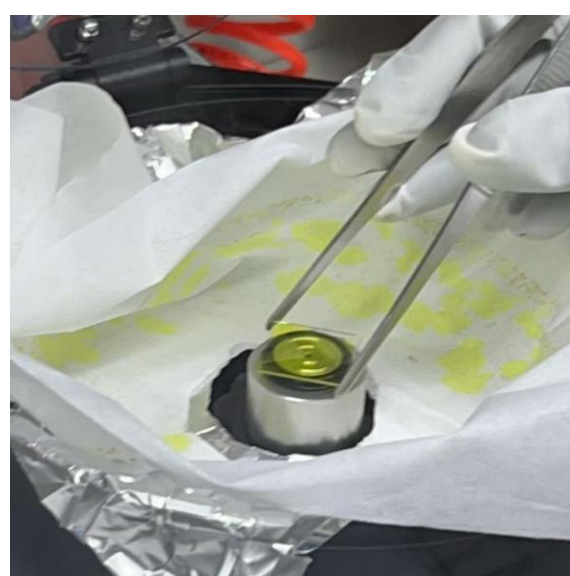


图三 常规二维钙钛矿有机阳离子示意图

进展与代表性成果

由于实验室建成时间较晚，现阶段还在三维钙钛矿器件制备中

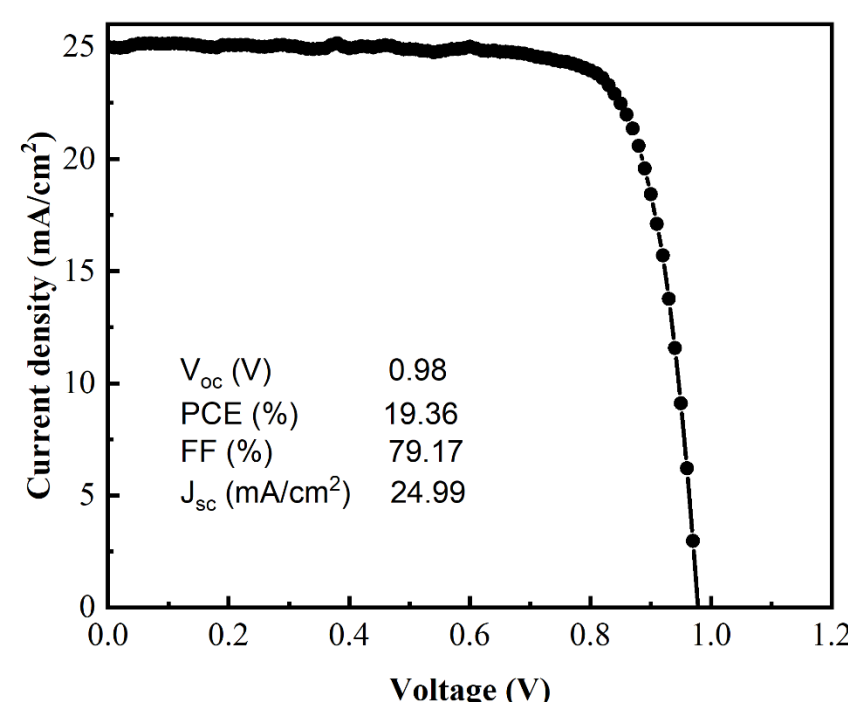
项目已经能够实现多种配方有机杂化三维钙钛矿器件制备，最高效率能够达到19.36%。在引入了不同的钝化方式后有望获得更高的效率和稳定性。



图四 旋涂过程截图



图五 制备完成未封装的器件示意图



图六 钙钛矿太阳能电池器件的J-V曲线

Reference

1. Coriolano, A.; Polimeno, L.; De Giorgi, M.; Todisco, F.; Mastria, R.; Ardizzone, V.; Dominici, L.; Ballarini, D.; Rizzo, A.; Gigli, G.; et al. Improved Photostability in Fluorinated 2D Perovskite Single Crystals. *Nanomaterials* **2021**, *11*, 465.
2. Albertus Adrian Sutanto, Pietro Caprioglio, Nikita Drigo et al. 2D/3D Perovskite Engineering Eliminates Interfacial Recombination Losses in Hybrid Perovskite Solar Cells, 12 August 2020, PREPRINT (Version 1) available at Research Square.

基于结构的AI系列药物筛选

导师：溥渊未来技术学院 郑双佳

学生：溥渊未来技术学院 许嘉昊



官方二维码 Official WeChat

研究背景和研究目标

在当今的药物研发领域，因针对靶点的药物发现与设计缺乏成熟的理性方法，其验证周期长，实验成本高，回报率低的问题日益凸显。据FDA统计，传统的药物研发过程漫长且复杂，从药物靶点的发现到药物的上市，往往需要十几年的时间和数十亿的资金投入。即便进行海量投入，其临床阶段的不确定性也制约了药物的稳定研发。这让大量药企和研究所渴求缩短药物发现耗时的方法。

随着人工智能技术的发展，尤其是**基于生物大分子结构的深度学习模型**的能力提升。AI已具备高效地预测蛋白质乃至其与药物分子结合的三维结构的能力，进入应用增长的临界点。此外，从结构模态出发的筛选方案，也因其从过去方案较少覆盖的解空间出发，体现出筛选新颖性。

本课题基于课题组前期开发的基于结构的预测工具**TankBind**，考虑**结构柔性的DynamicBind**以及最新开发的**AuraBind**工具，对**抗生素，孤儿受体(GPCR蛋白)**以及**人体内源性代谢物**展开了探索。

研究内容以及进展

1. 抗生素筛选

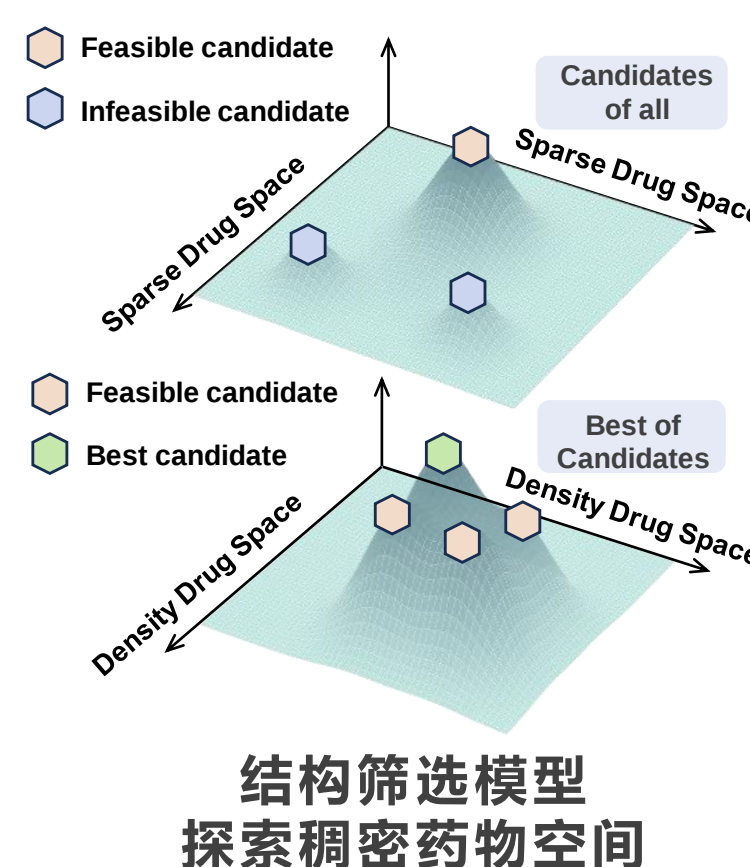
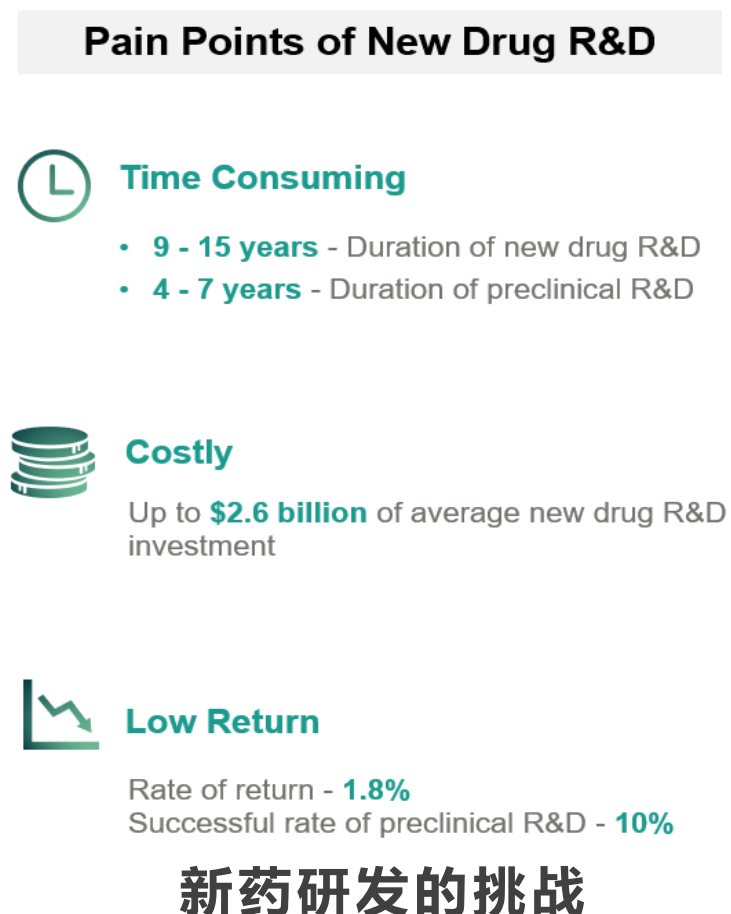
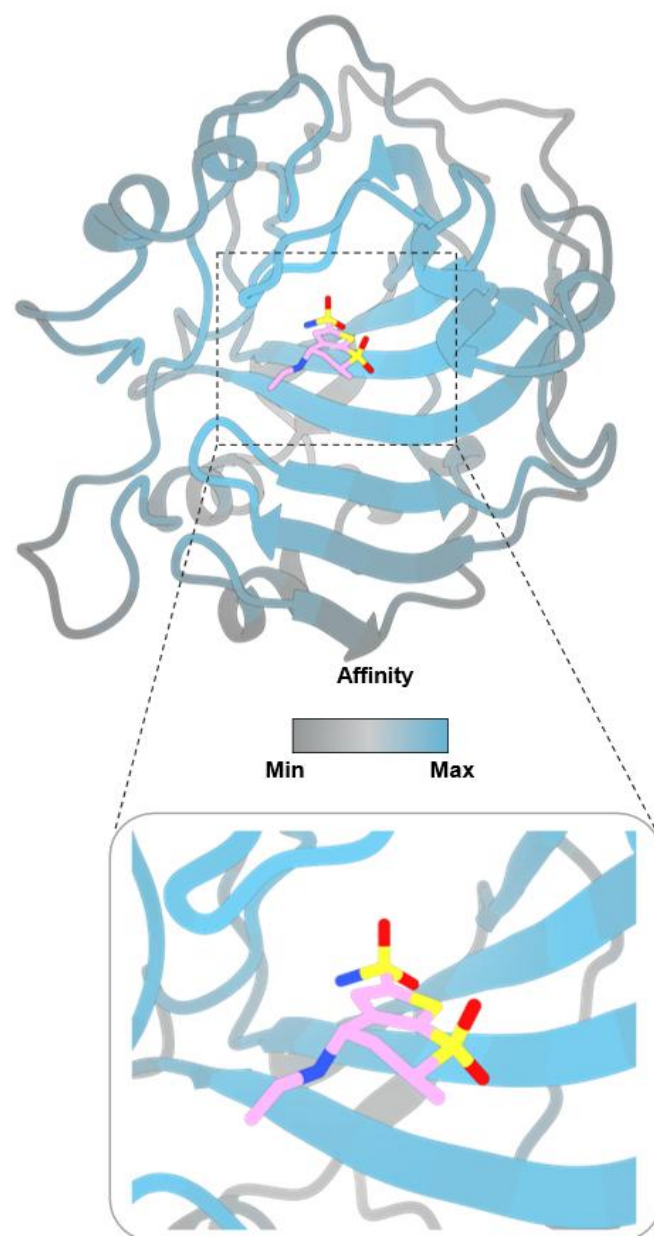
基于 TankBind 和 DynamicBind **基于结构的亲和力预测模型**工具，该课题构建了一套可靠的蛋白质-配体对接筛选流程，应用于新型安全可靠的抗生素的筛选发现，应对诸如 MRSA 之类的超级细菌。筛选结果已进入湿实验送测验证阶段

2. 孤儿受体脱孤研究

为进一步探究模型的泛化能力，在先前流程的基础上开展了孤儿受体脱孤研究。孤儿受体在结构上与其他已确认受体相似，但其内源配体尚未明确，且多属于G蛋白偶联受体（GPCR）家族。此类受体在人体生理功能的多个领域，如神经系统、免疫系统、内分泌系统及代谢调节等，具有显著的药用开发前景。该课题运用构建的筛选方法对 GPCR 家族开展筛选，并选取其中头部分子进行湿实验的激动剂和抑制剂测量。实验结果表明该筛选方法有效，合作课题组进入对复合物的晶体结构解析阶段。

3. 全体人类内源性代谢物探索

因前期的课题已证明了模型的性能，为了进一步挖掘模型的科学价值，经前期调研，计划借助课题组新开发亲和力预测工具AuroBind的高通量筛选能力和高精度建模能力，针对全体人类代谢物以及参与人体代谢的蛋白进行全面筛选，旨在挖掘此前未收录于数据库中的代谢物与代谢蛋白之间的作用关系。





基于极限环理论的人形机器人步态控制

导师：溥渊未来技术学院 王景川

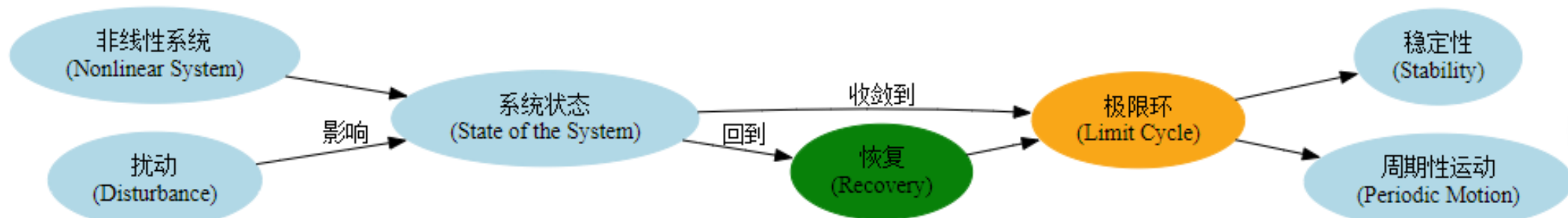
学生：自动化与感知学院 原子豪



官方二维码 Official WeChat

1. 项目背景和目标

人形机器人步态控制是一个复杂且具有挑战性的问题，其非线性的动力学模型也让传统控制方法难以利用。而极限环理论在稳定性、鲁棒性设计方面有着显著的优势，也特别适用于周期性的运动建模。

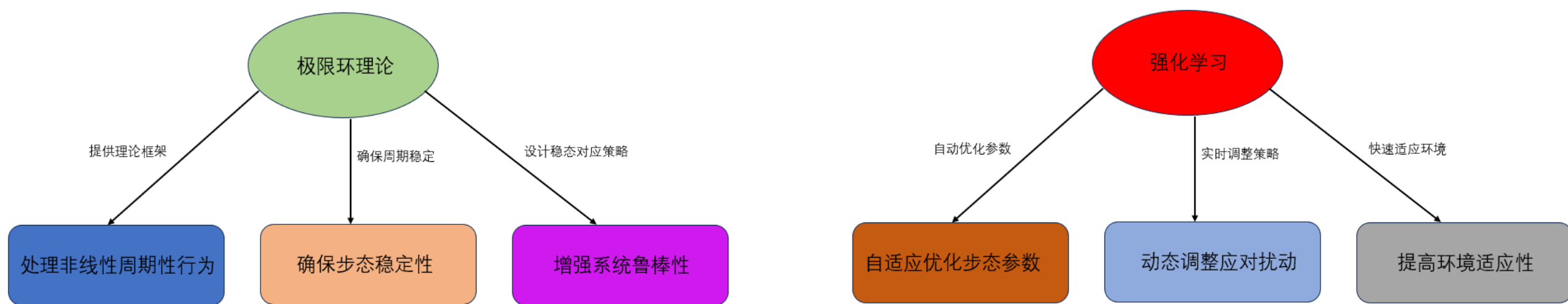


图一：极限环理论基本原理

项目目标是要基于极限环理论得到一个人形机器人的全身控制器，以帮助人形机器人实现更好的高动态性能。

2. 实现方法

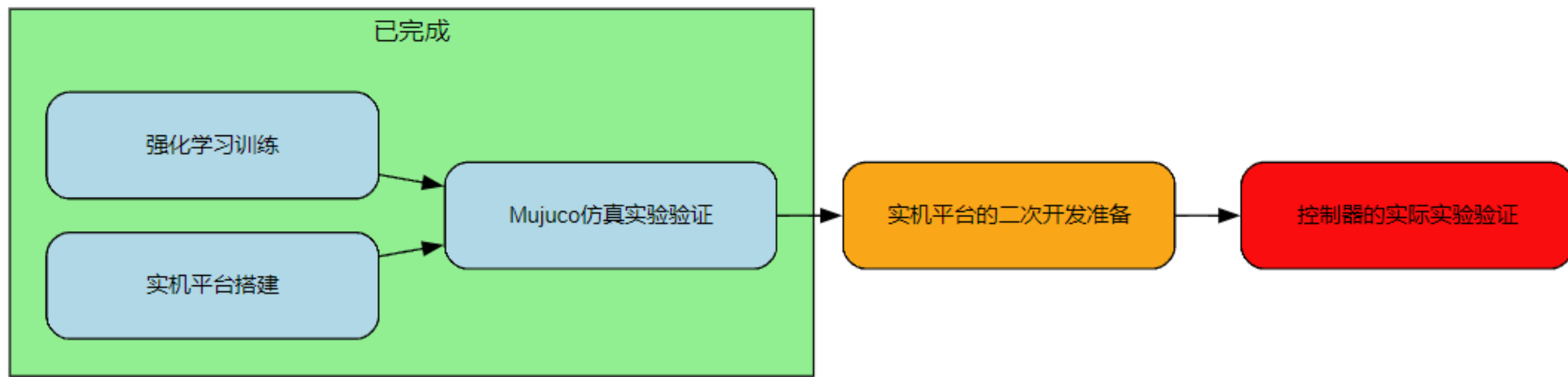
通过将极限环理论与强化学习相结合，可以为入形机器人步态控制中的多项关键挑战提供综合性的解决方案。极限环理论为非线性动力学系统提供了坚实的理论基础，确保步态在复杂环境中的稳定性，增强了系统的鲁棒性。同时，强化学习通过试错和奖励机制进一步提升系统的环境适应性，确保机器人在各种场景下都能高效、稳定地运行。



图二：极限环理论和强化学习的方法优势

3. 阶段性成果

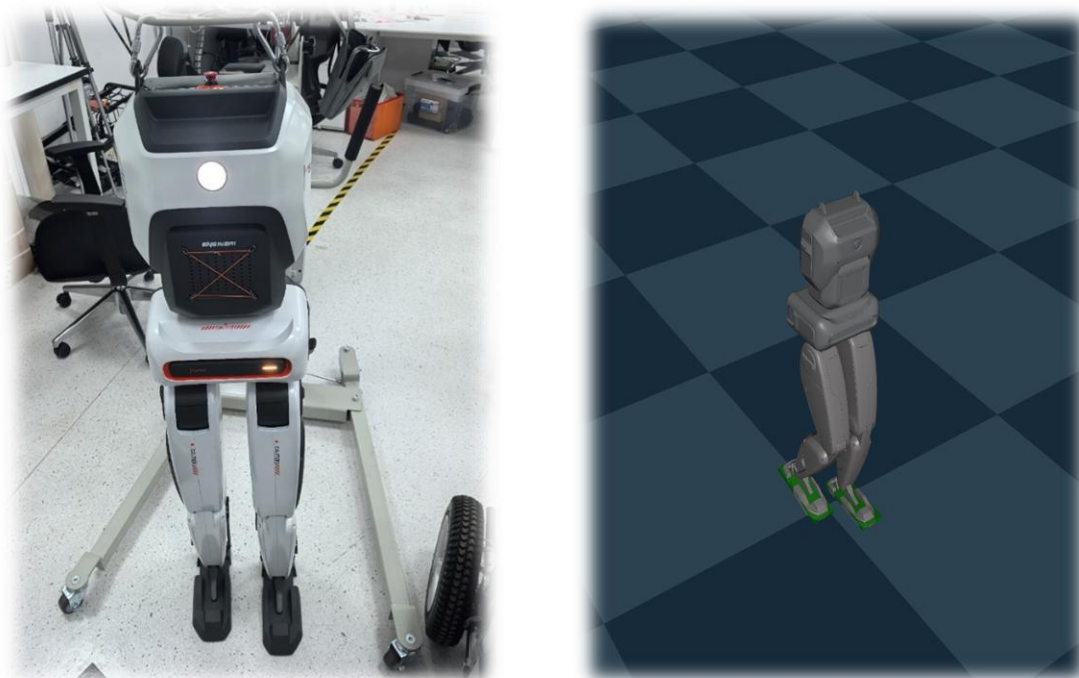
目前已经利用人体运动数据训练得到了可部署于实验室机器人的控制策略，且已经在仿真实验环境中进行了初步验证。同时，也完成了实机平台的部署和调试，运行了官方示例代码，验证了平台的基础功能。



图三：项目进展流程图

4. 结论和未来工作

仿真实验的结果表明强化学习得到的控制器具有较强的控制能力，可以很好的满足人形机器人步态控制的基本要求。下一阶段的工作主要聚焦于实机实验的进行和对实际验证平台进行二次开发的相关工作，以期尽快在实机平台上进行落实。



图四：实机平台与仿真环境

The Role of Myelination and Neural Transmission in Depression

导师：溥渊未来技术学院 兰兆辉
学生：生命科学技术学院 张映轩

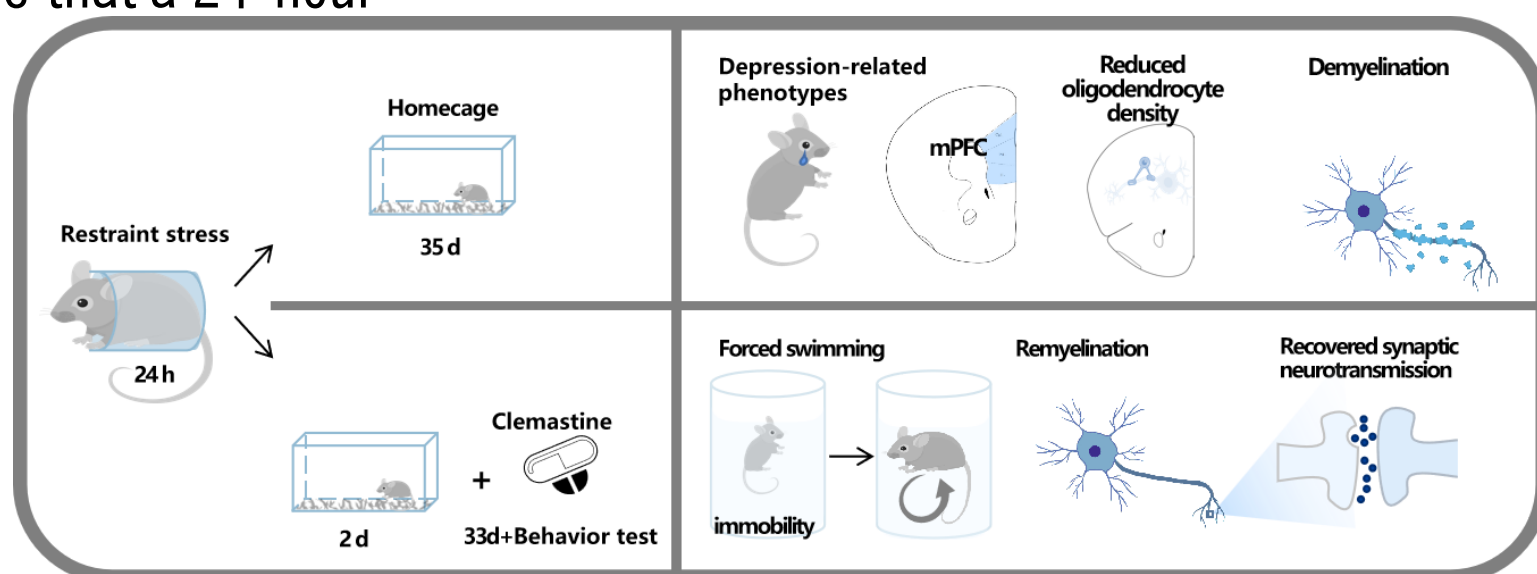


官方二维码 Official WeChat

Background

Depression is a major global health issue, increasingly linked to dysregulated myelination in brain regions like the medial prefrontal cortex (mPFC). While stress is a known trigger, it remains unclear whether acute stress alone can cause lasting demyelination and depressive behavior. This study shows that a 24-hour

restraint stress induces persistent behavioral and structural changes, and that Clemastine, a remyelinating agent, can restore myelin integrity and alleviate depressive-like symptoms.



Key Findings

1) A 24-hour restraint stress induces persistent depressive-like behavior in mice, accompanied by impairments in synaptic transmission in mPFC.

2) Acute stress leads to pronounced demyelination in the mPFC, characterized by reduced myelin sheath thickness and decreased expression of key myelin proteins MBP and PLP.

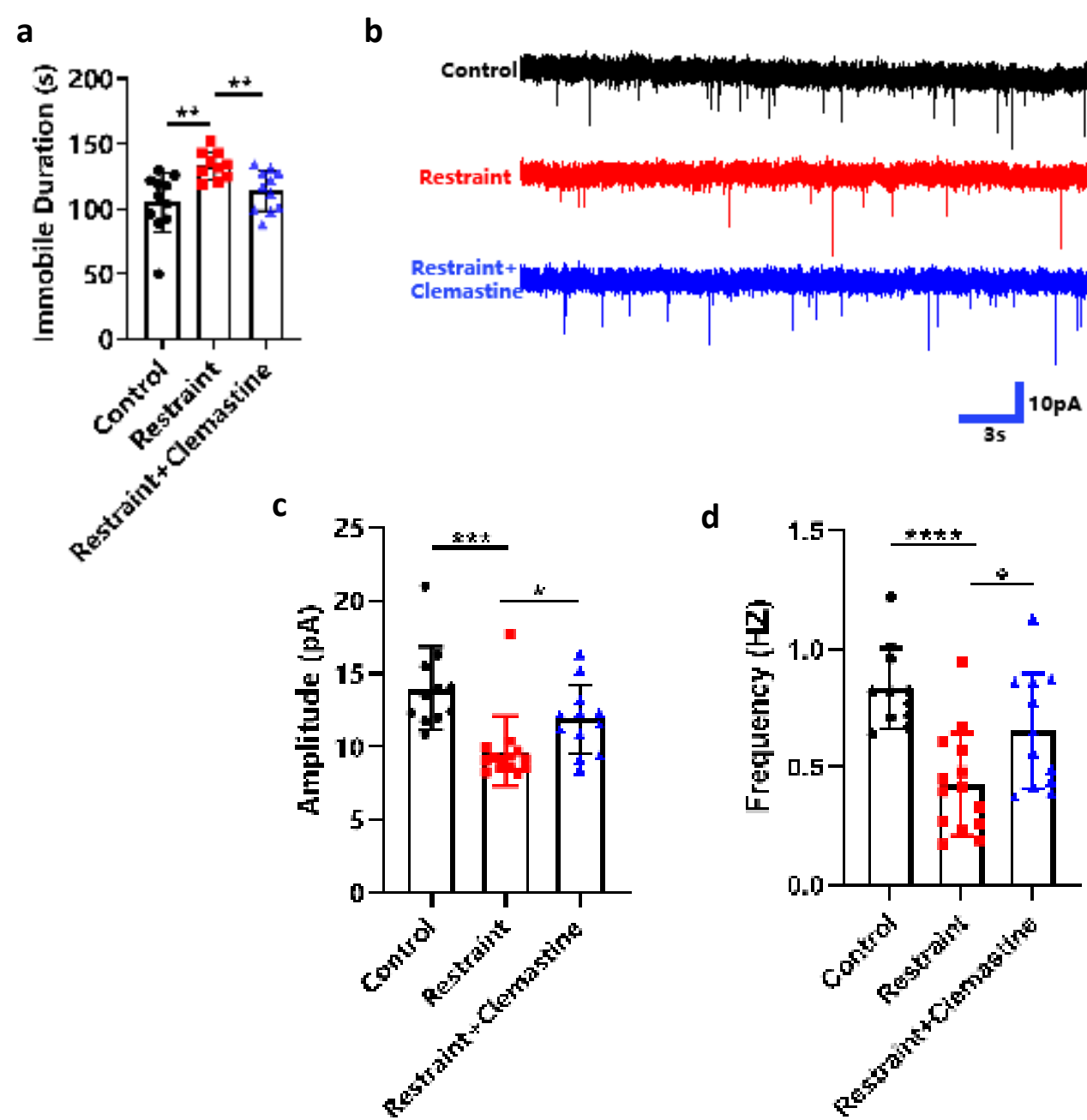


Fig. 1 a. Statistical plot of immobilization time in the forced swim test. b-d. mEPSC amplitude and frequency in mPFC pyramidal neurons

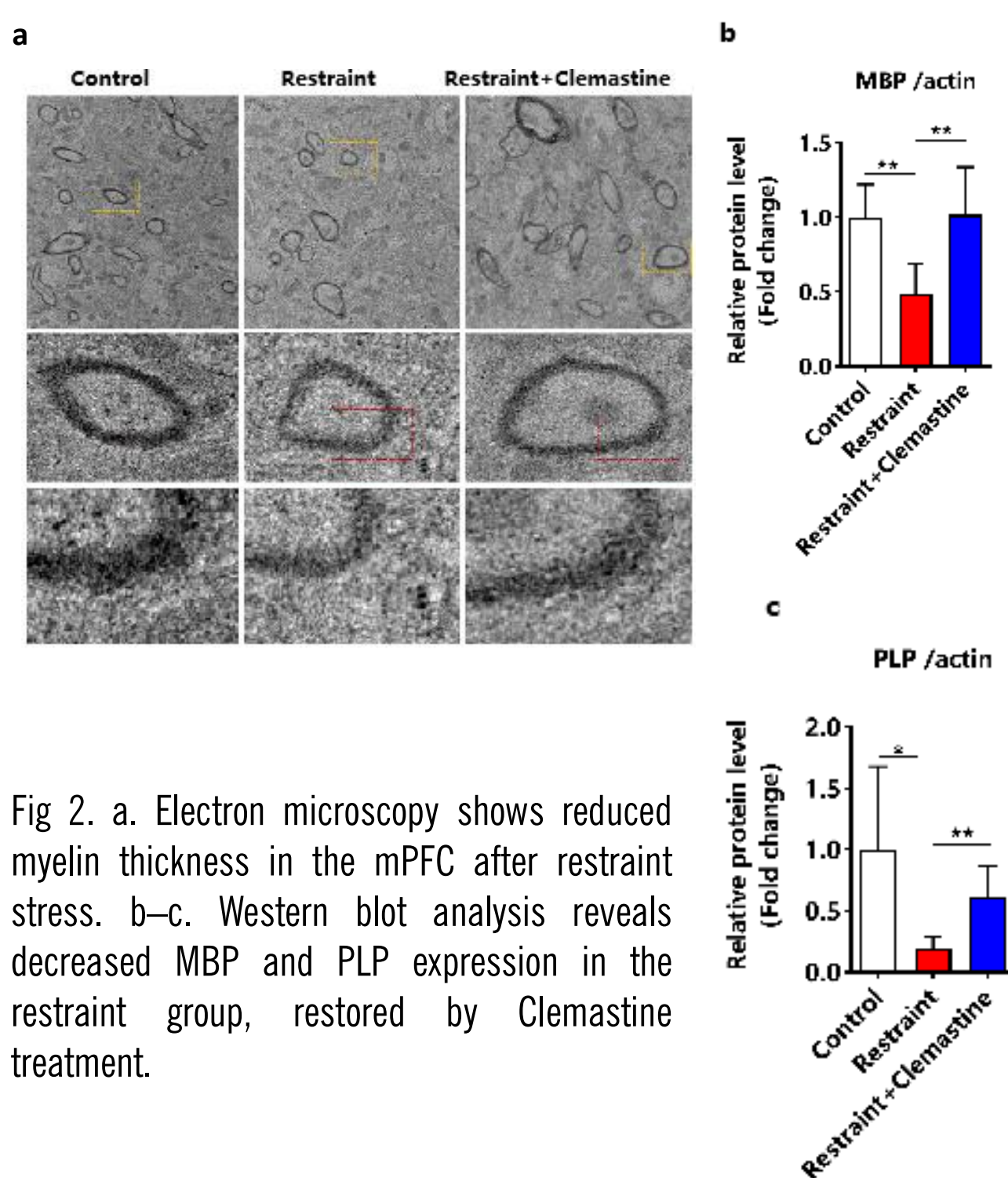


Fig 2. a. Electron microscopy shows reduced myelin thickness in the mPFC after restraint stress. b–c. Western blot analysis reveals decreased MBP and PLP expression in the restraint group, restored by Clemastine treatment.

3) Chronic administration of Clemastine effectively restores myelin structure and function, improving neural transmission and reversing depressive-like behavioral deficits induced by restraint stress.

Discussion

Stress-induced demyelination in the mPFC may underlie the long-lasting depressive behaviors observed after acute restraint. This aligns with emerging evidence linking myelin integrity to mood regulation. Traditional antidepressants often fail to address structural brain changes, while Clemastine's ability to restore both myelin and synaptic function suggests that targeting myelination could represent a novel and more effective therapeutic approach for stress-related depression.

Neuro-Inspired Temporal Shift Modeling for Structured Data

Advisor: GIFT Mian Li

Student: GIFT Maite Zhang



官方二维码 Official WeChat

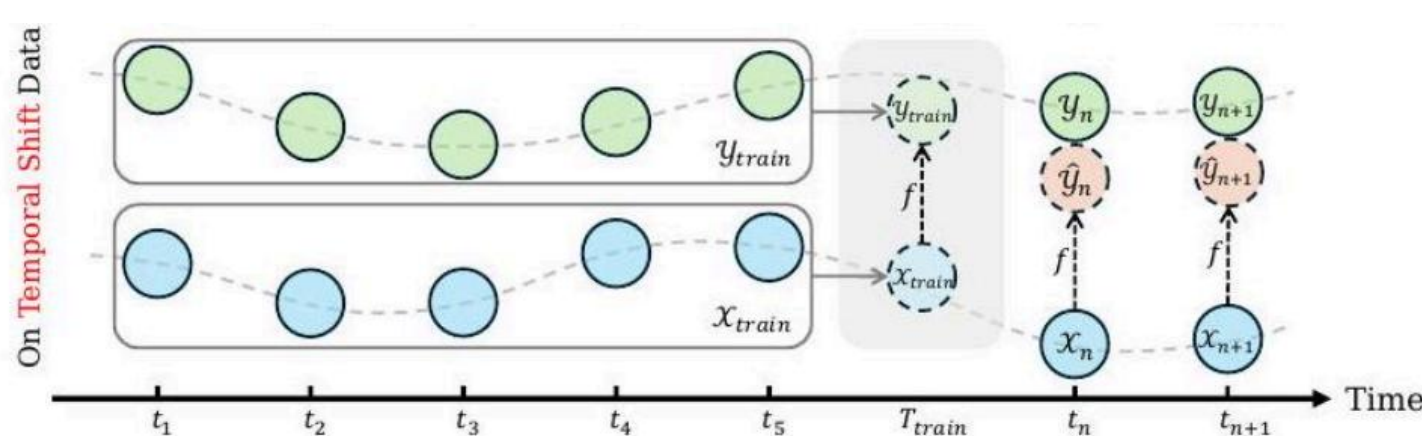
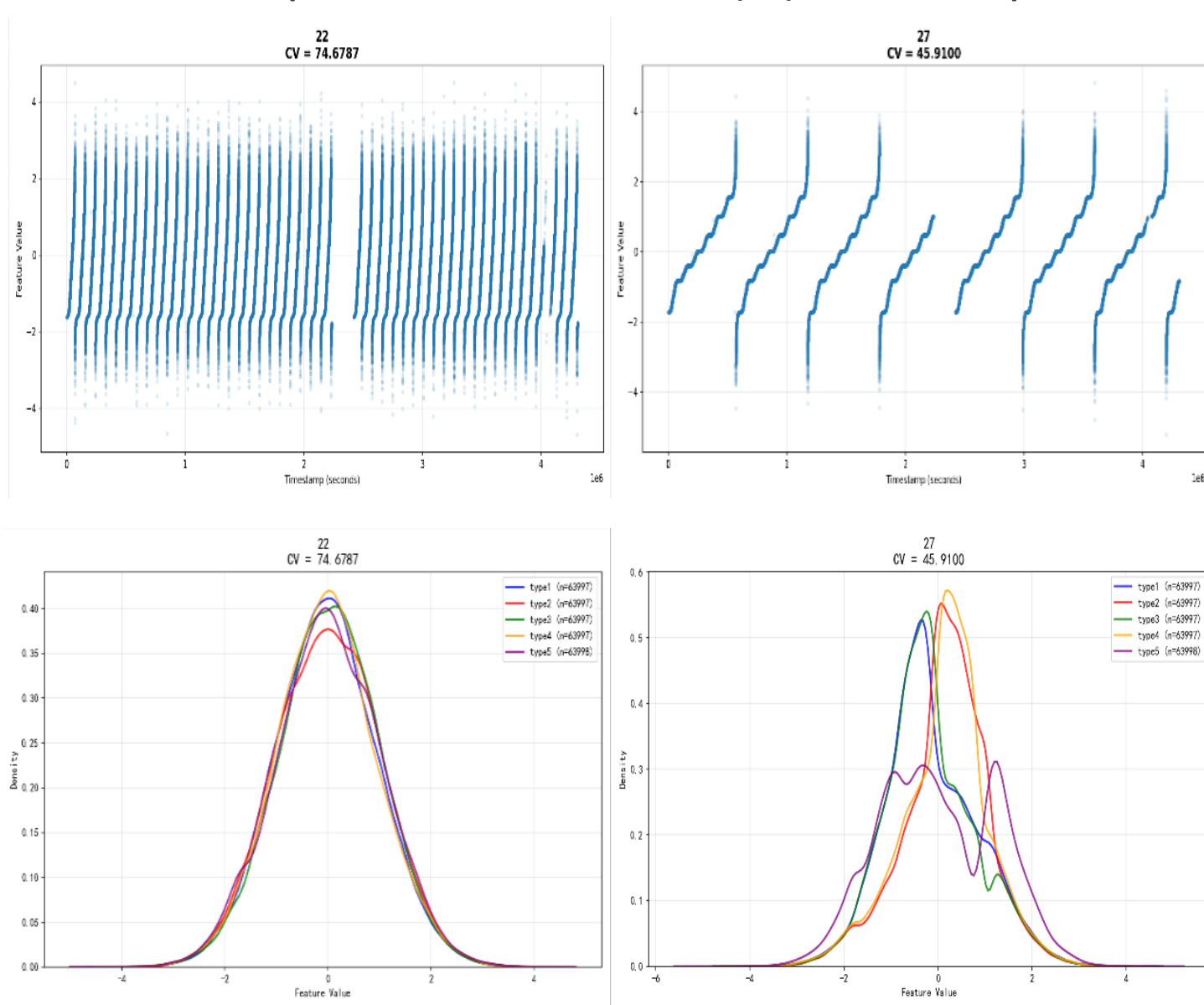
Research Background

Industrial Challenges:

- High-precision quality modeling required in **lithium battery** manufacturing.
- Frequent **distribution shifts**: raw material variation, equipment aging, process switching...

Modeling Gap:

- Mainstream models assume **static data** and lack temporal modeling.
- Timestamps $\rightarrow$ **Weak features**($\times$), fail to capture trend/periodicity/structure.



Neuro-Inspired Design

Explicit:

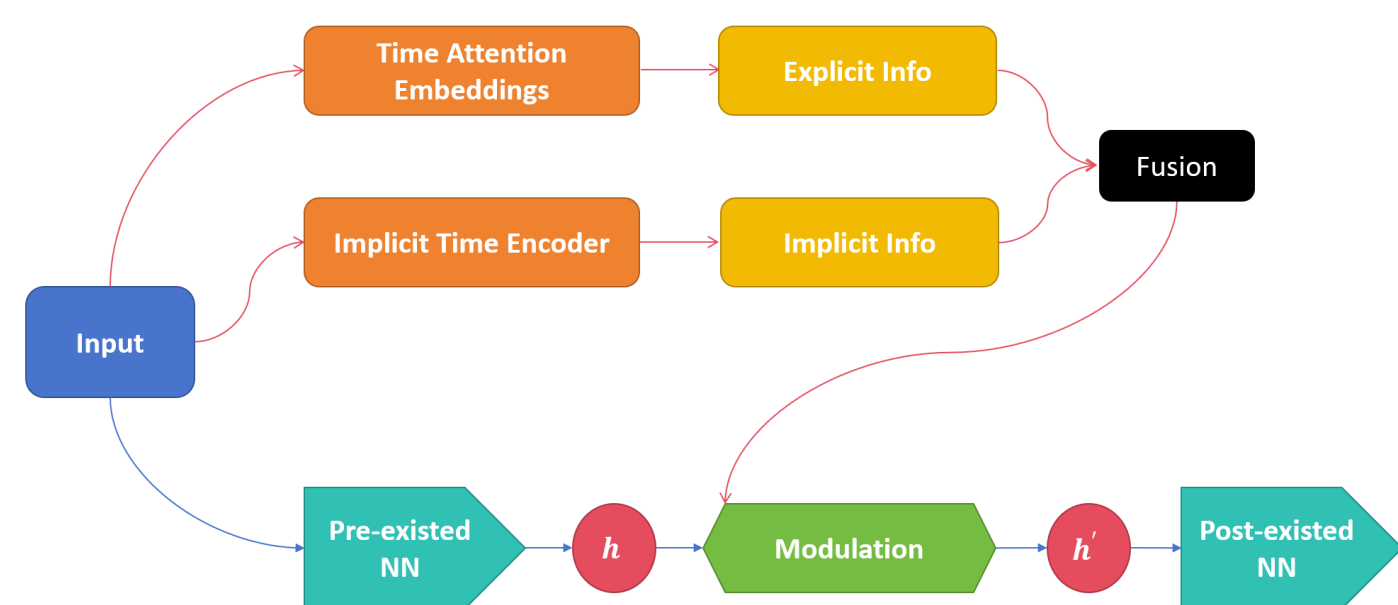
Inspired by **prefrontal cortex**: encodes environmental rhythms & trends

$\rightarrow$ Enhance awareness of **periodicity** & **trend** structure

Implicit:

Inspired by **Hippocampus+Neocortex**: mimics CLS

$\rightarrow$ **Fast/slow** pathways for **short-term noise** & **long-term trend**



Technical Approach

Time Attention Embeddings:

- Periodic** Encoding: simulate year/month/day cycles (Fourier-based)
- Trend** Encoding: capture linear time progression
- Positional** Encoding: add relative time index (inspired by Transformer)

Implicit Time Encoder:

- Fast Learner: adapt to **short-term** input fluctuations
- Slow Learner: preserve **long-term** distributional trends
- Temporal Shift Indicators: Standardized Features, KL-divergence Proxies, Mean Z-scores

Fusion & Plug-in Deployment:

- Fusion: combine **explicit** & **implicit** signals into time-aware vector
- Modulation: apply to hidden state $h \rightarrow$ time-enhanced output h'
- Plug-in Design: **modular** & **backbone-agnostic**; supports integration into existing networks

Related Publications

- Second Author** – Under review at *Advanced Engineering Informatics* (CAS Zone 1 / SCI Q1)
- Co-First Author** – To be submitted to *AAAI 2026* (CCF-A)

Preliminary Results

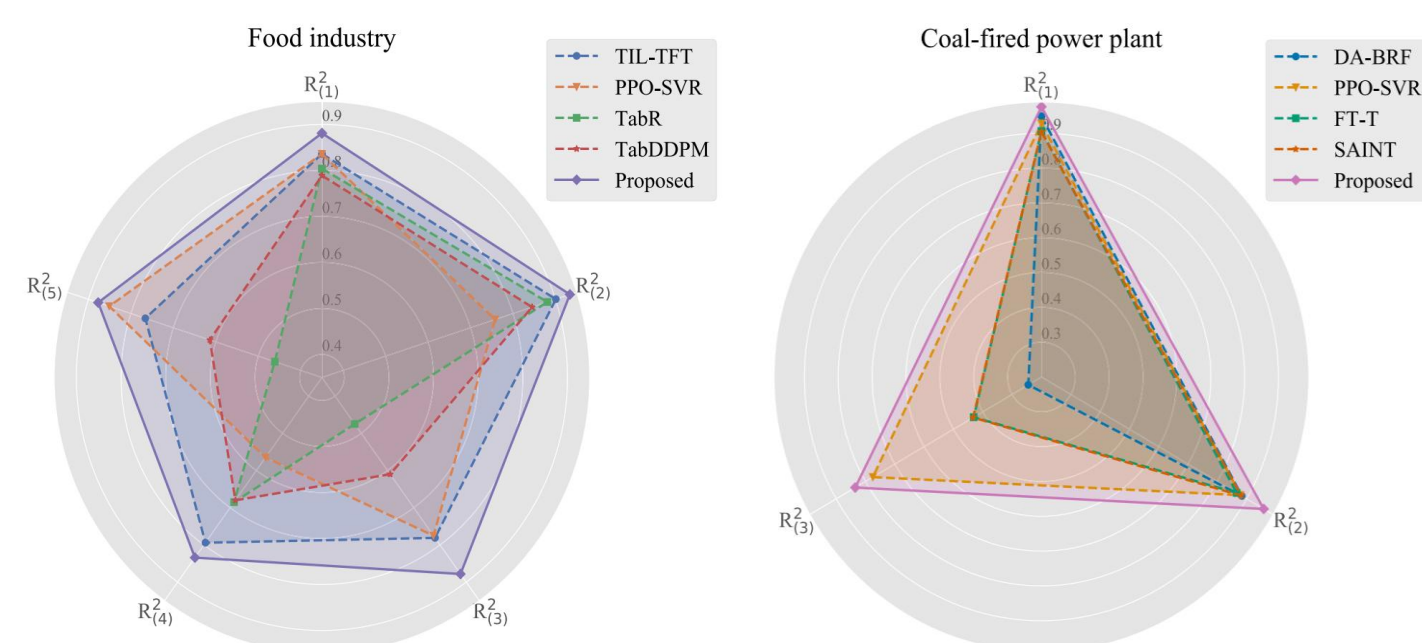
Industrial datasets:

- Food industry & Coal-fired power plant

Our method outperforms baselines in R^2 metrics:

- Stronger temporal shift robustness
- Multi-objective accuracy

-Optimization in progress for better performance...





上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



溥渊未来技术学院
GLOBAL INSTITUTE OF FUTURE TECHNOLOGY



WUXI锡山
XISHAN

基于大模型的钙钛矿太阳能电池研发加速

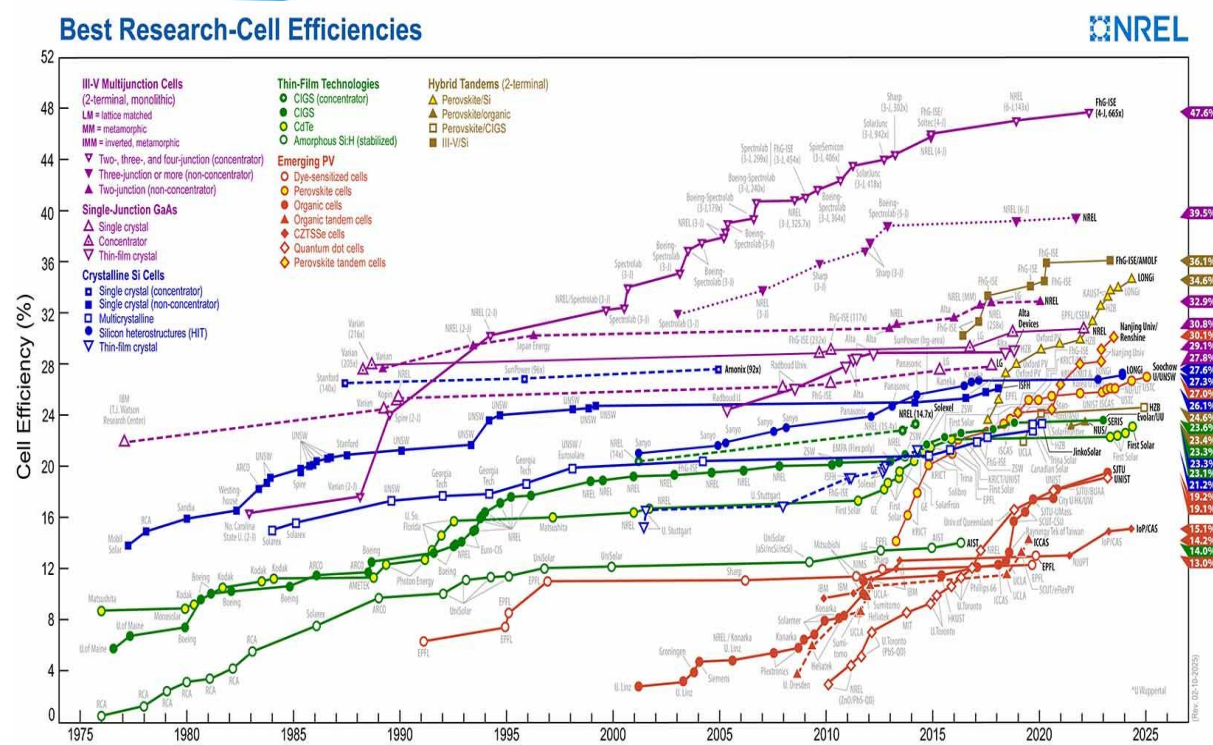
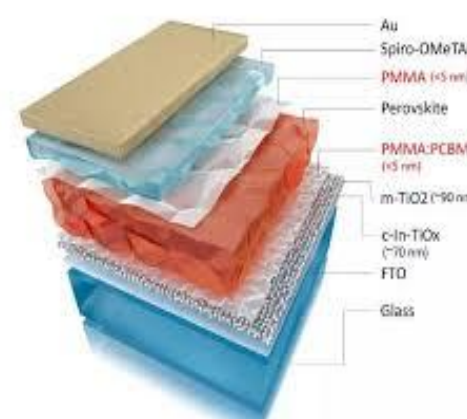
导师：溥渊未来技术学院 王衍明
学生：机械与动力工程学院 张启想



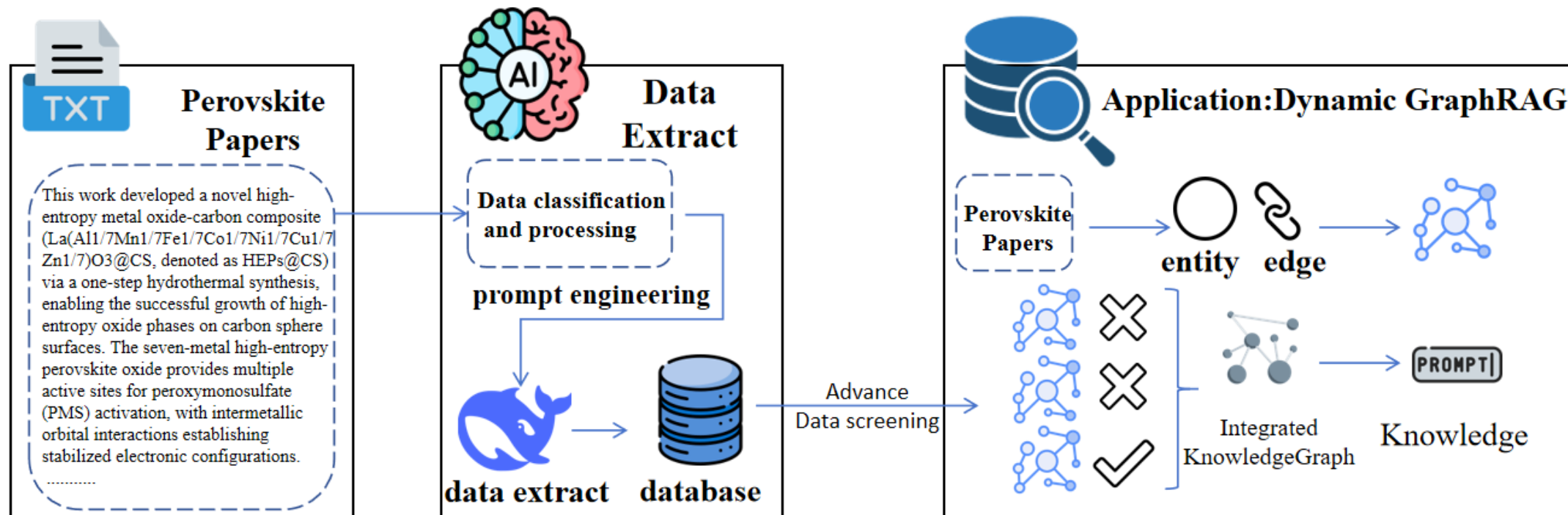
官方二维码 Official WeChat

项目背景

- 1.革命性光电材料：钙钛矿电池近年来不断突破，成为新兴的太阳能电池领域的优秀材料。
- 2.文献数据利用低效性：预计从 8200 多篇期刊文章中提取数据需 **5000 - 10000** 人工小时，而且还存在更新不及时和人为错误的问题。且数据库更新缓慢，从 2023 年 3 月到 2024 年 5 月，可下载的数据记录仅从 **43231** 条增加到 **43252** 条。
- 3.领域模型适配性缺失：通用大模型在钙钛矿领域可能存在知识性缺失，无法实时获取科研实时**前沿**知识

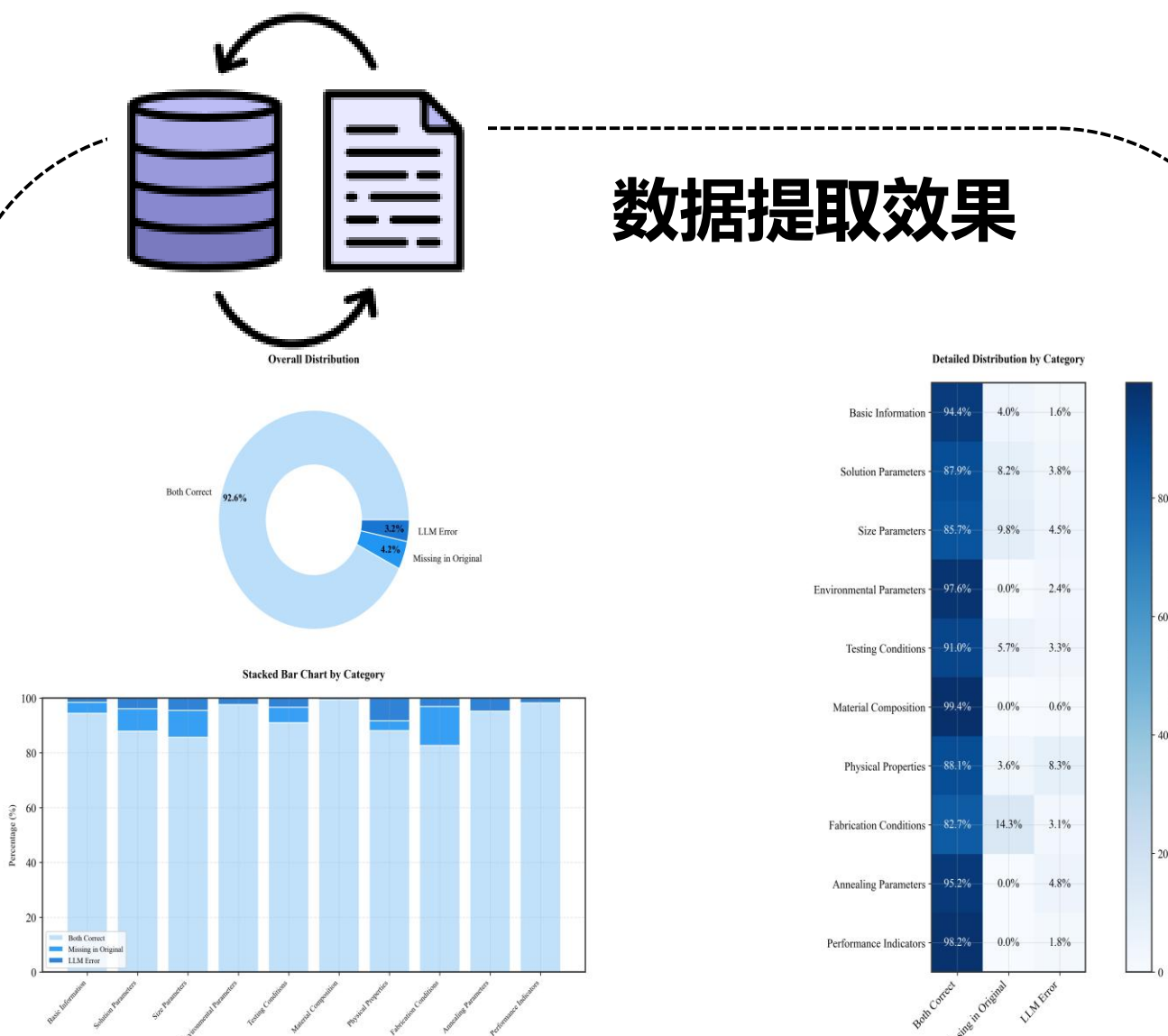


成果展示



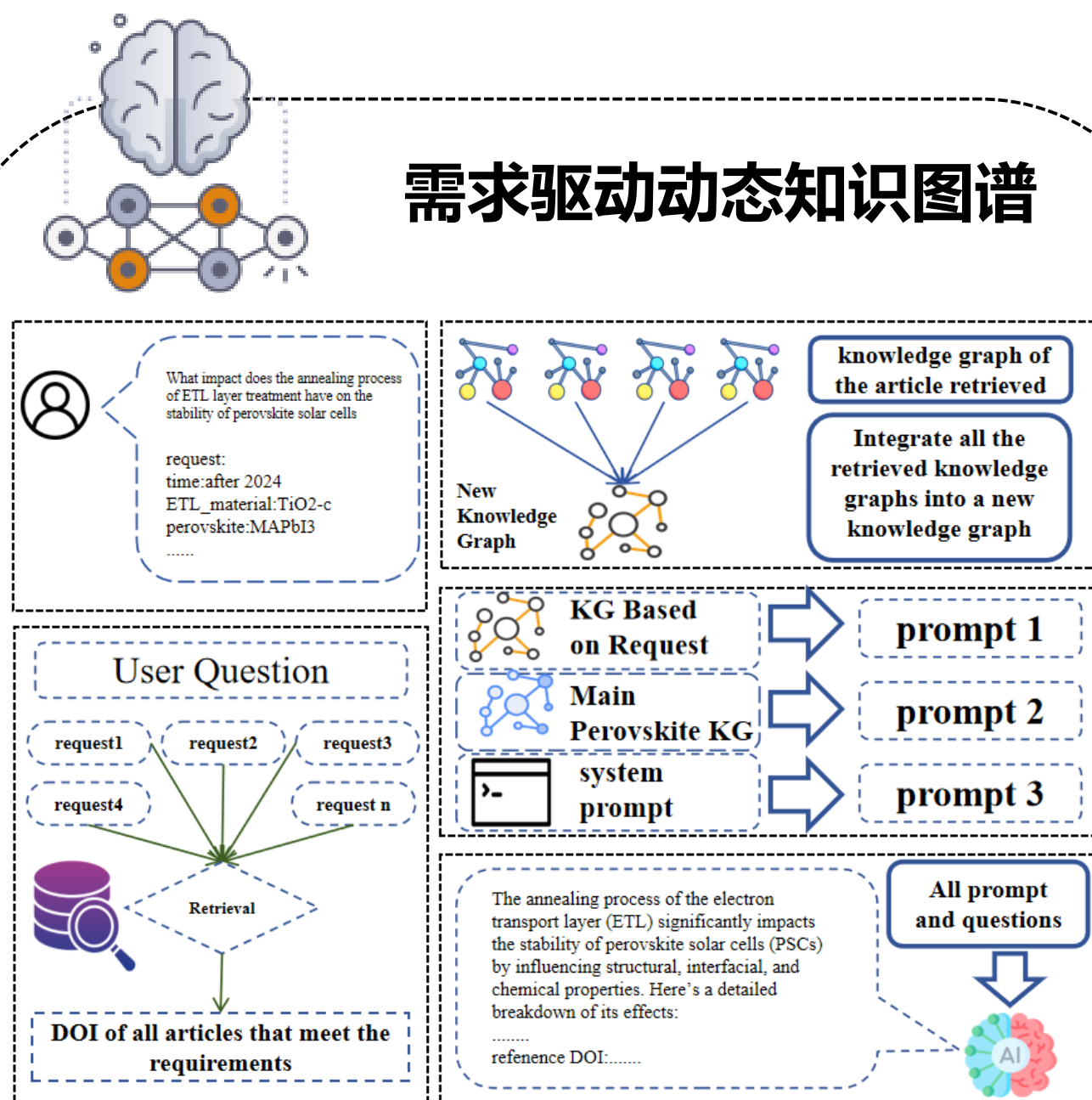
完整自然语言提取架构构建，PDF->json
全自动化数据流水线，自然语言->结构化数据库自动提取，动态知识图谱融合，精确筛选知识来源

数据提取效果



本研究对提取的**208维数据**进行了系统分类与统计分析。总体数据提取准确率达到**96.8%**。分析结果表明，提取出的数据中有**4.2%**有效填补了原始钙钛矿数据库 the Perovskite Database中存在的缺失项。特别地，对于材料组成和性能表征等原文有明确阐述的信息，提取模型表现出**优异性能**，确保了关键信息的有效获取。

需求驱动动态知识图谱



为提升 GraphRAG 系统的需求**适配性与灵活性**，本研究构建了需求驱动的动态知识图谱系统：基于用户查询筛选**目标知识子图**，通过实体对齐与关系融合**动态整合**为新图谱，并以此为精准检索依据提供核心知识；最终将新图谱检索结果作为背景知识输入大模型，保障答案源自**稳定可控**的知识来源。

未来展望

- 1.多尺度模型构建，希望通过结合第一性原理计算或分子动力学模拟，进一步从微观尺度增强模型对于钙钛矿领域的理解。
- 2.希望通过大模型为媒介，实现文本->计算任务->结果分析一体化，实现完整的自动化流程。

gift.sjtu.edu.cn

基于双脑脑电同步成像的早产儿袋鼠式护理中母婴交互机制研究

导师：生物医学工程学院 童善保

学生：生物医学工程学院 赵易凡



官方二维码 Official WeChat

项目背景

袋鼠式护理：早产儿或低出生体重儿裸露皮肤，俯卧于妈妈或爸爸裸露的胸腹部，使皮肤尽早、尽可能充分接触，结合**声音、触摸、凝视、气味**等多种因素的一种母婴情感交互的多模态环境照护方式。



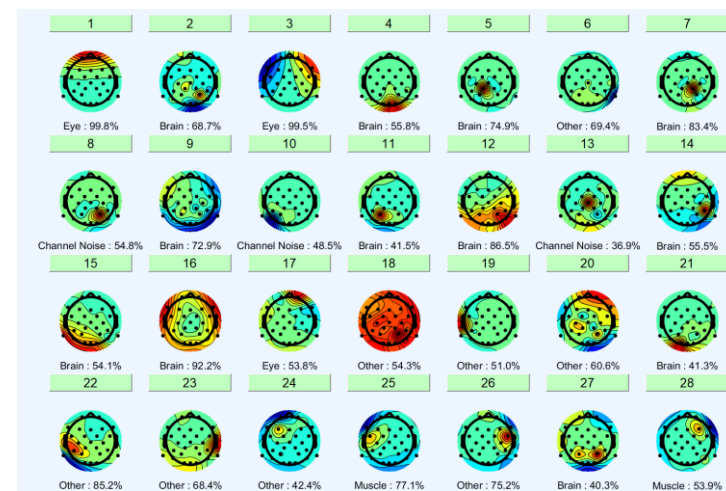
项目目标

- 构建袋鼠式护理的**亲子双脑同步理论**，研究其是否可以**实时**促进亲子双脑同步。
- 探究抚触、声音、凝视等关键互动要素对袋鼠式护理过程中亲子双脑同步的**调制作用**。
- 研究袋鼠式护理时亲子双脑同步对婴儿单脑网络和脑功能发育的作用，探索**单-双脑协同机制**。

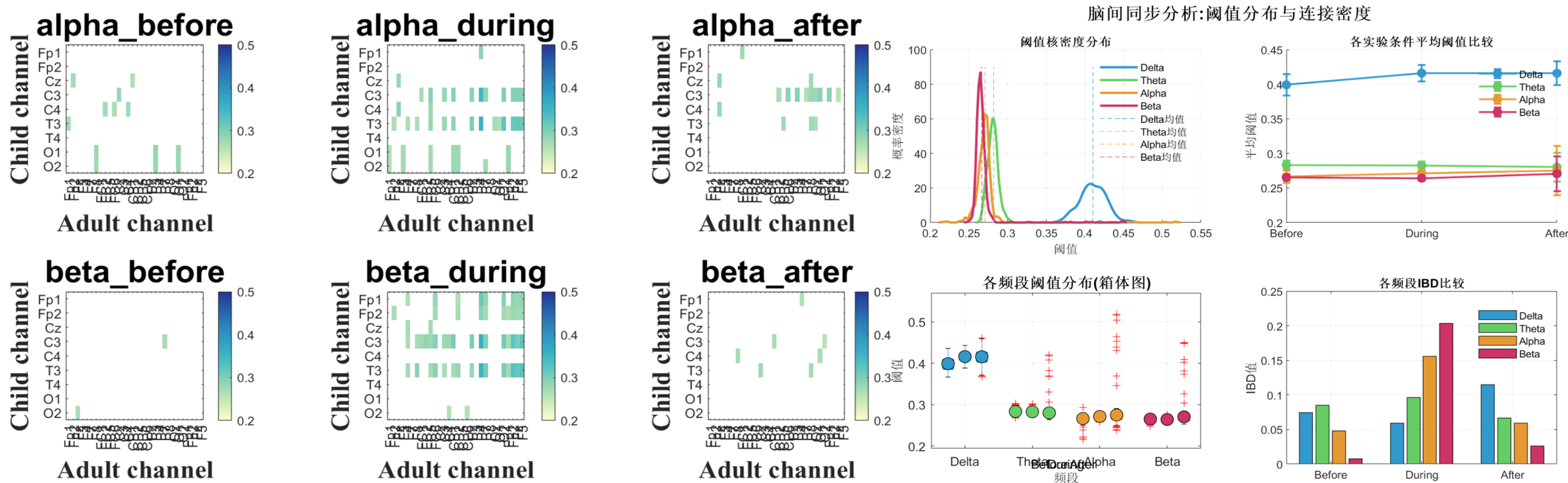
项目进展

- 数据预处理：电极定位；滤波；去除伪迹；坏导坏段；ICA。
- 数据分析：窄带滤波分段；计算plv原始矩阵：

$$PLV_{x,y} = \frac{1}{N} \left| \sum_{t=1}^N e^{i(\phi_x(t) - \phi_y(t))} \right|$$



- 为排除环境等因素造成的虚假同步，打乱数据，生成阈值矩阵，将显著大于阈值的作为真实连接。
- 对于护理前中后编码，护理中同步性高于护理前后；对于护理中抚触与非抚触的编码，抚触时同步性高于非抚触。颜色表示PLV值的大小，颜色越深表示两个通道之间的相位锁定值越高，即同步性越强。



预期计划

- 继续实验收集更多数据进行分析。
- 编码护理中除抚触以外的其他行为，如声音等。
- 计算**局部**平均连接强度和密度等指标。
- 由于动作幅度大小也有可能影响脑电数据，因此我们计划对于妈妈在护理中的**动作幅度**进行编码。
- 继续跟踪完成过初次实验的早产儿情况，在出院时进行**临床评分**。

基于视觉特征融合的多车协同目标感知

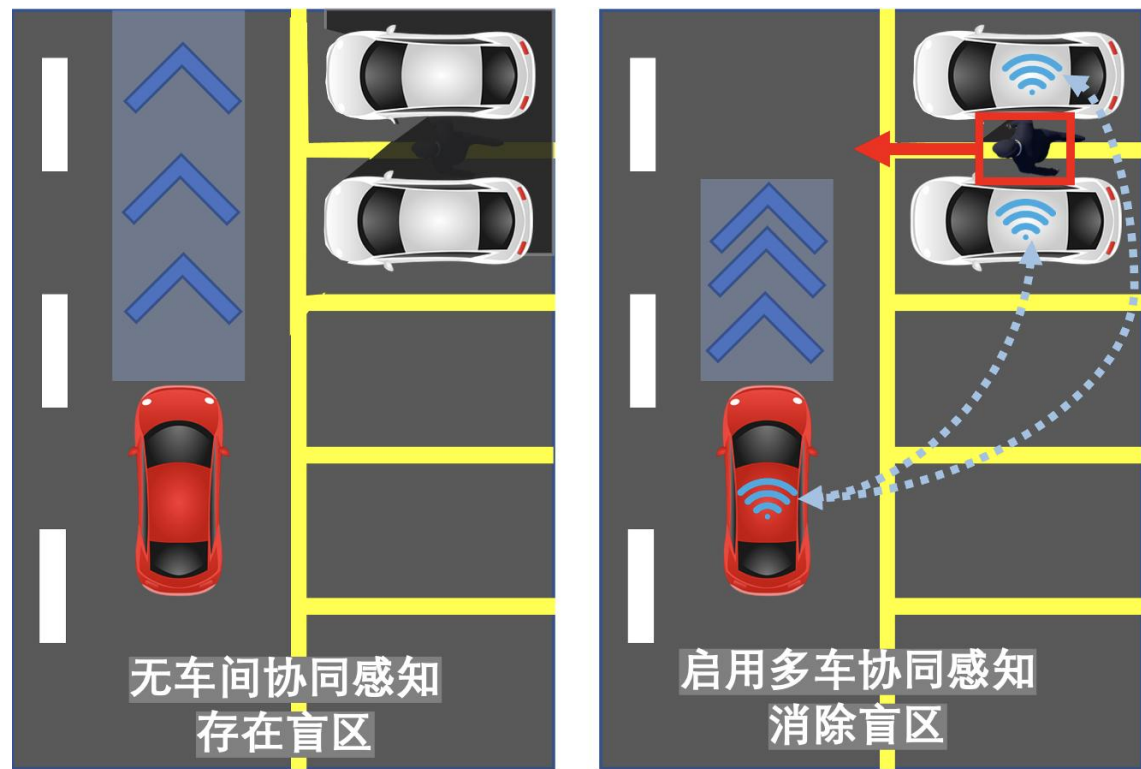
导师：密西根学院 杨明
学生：密西根学院 赵云琦



官方二维码 Official WeChat

引言

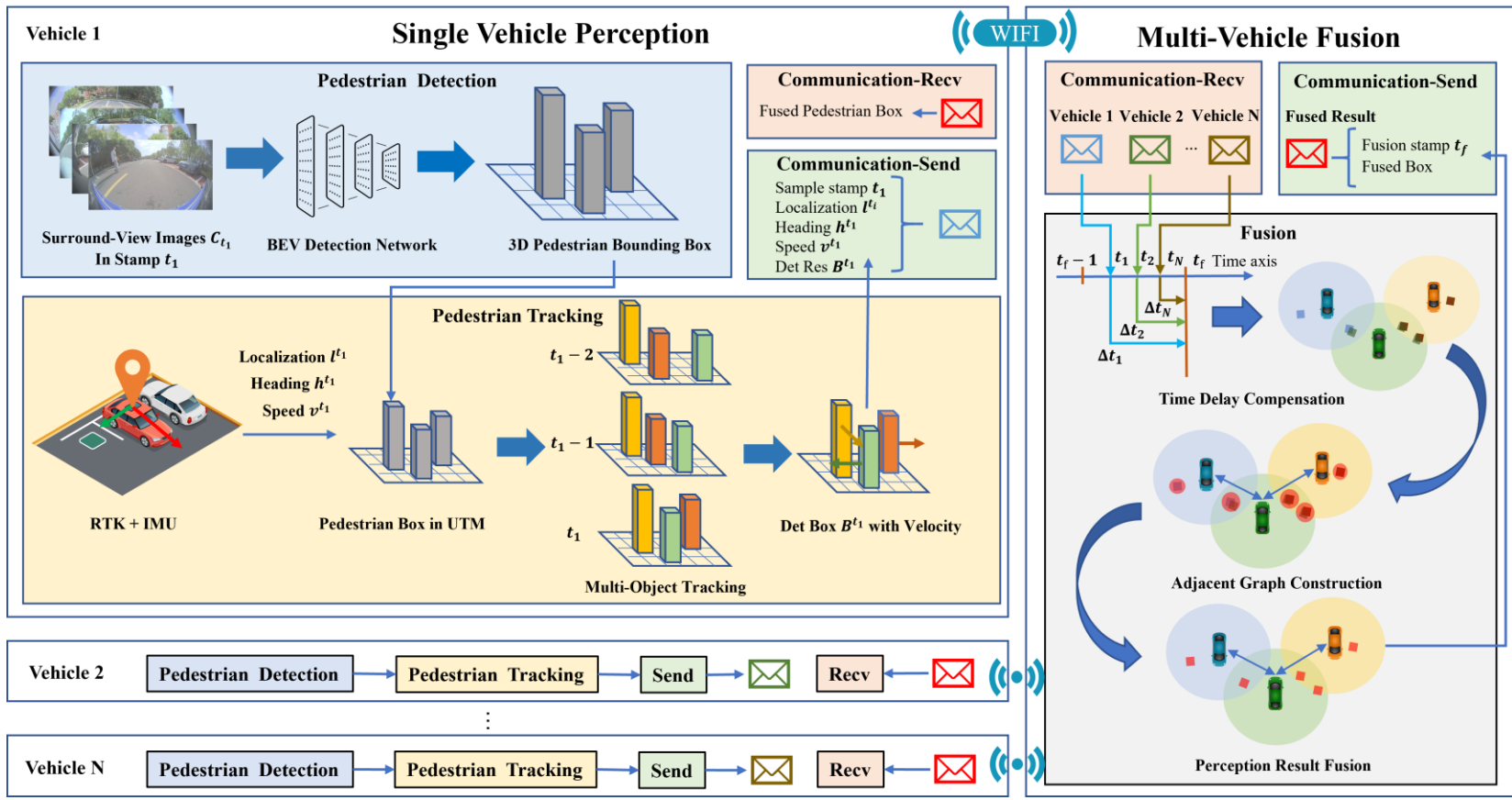
多车协同感知在消除盲区、提升驾驶安全方面具有重要作用，可有效解决行人鬼探头的问题。前期工作突破了仿真环境研究的局限，提出了一种基于环视鱼眼相机的多车协同感知框架，由单车感知模块和多车融合模块组成，解决现实场景中的通信延迟、传感器同步误差等问题，提高了自动驾驶系统的环境感知能力。后续工作将引入视觉语言大模型，利用其强大的泛化能力和场景推理能力，实现更高层次的行人意图分析，以进一步提升系统的感知性能。



方法

单车感知模块

- 利用环视鱼眼捕捉单车视野内行人的3D动态信息，通过网络通讯发给多车融合模块进行感知融合。



多车融合模块

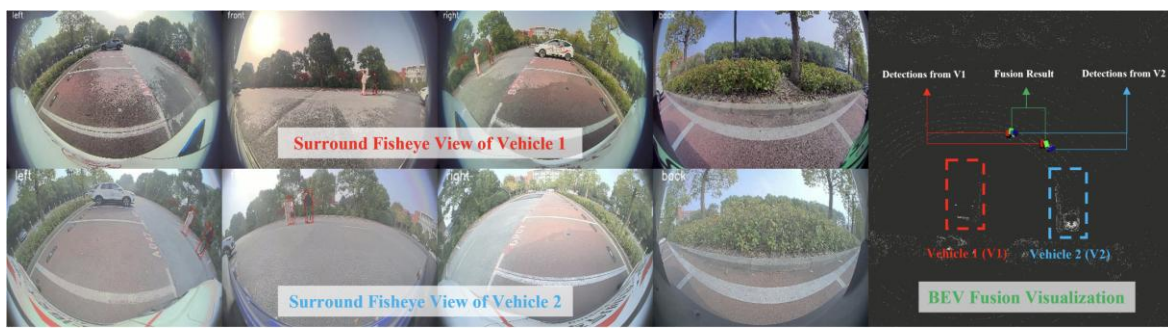
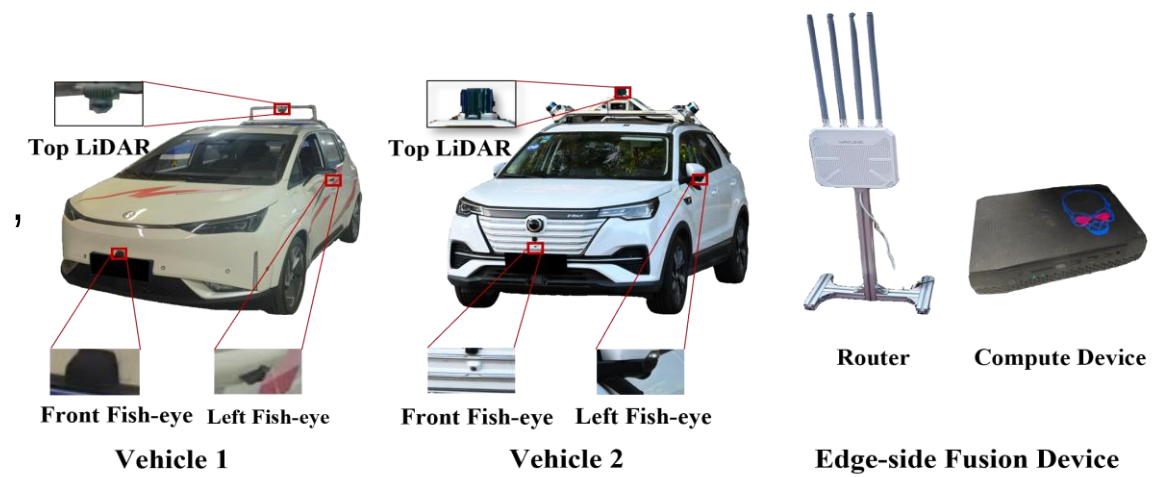
- 接收单车感知结果，匹配不同车辆的检测目标，并融合时空信息生成全局多车感知结果。

实验验证

数据采集：基于交大停车场场景部署车端和路端ROS系统，采集多车协同感知数据，供目标检测模型训练与验证。

数据处理与模型训练：基于激光雷达搭建了数据真值自动标注流程，快速生成高质量行人3D真值，并通过Kalman滤波对齐图像与真值结果，提供优质模型训练数据。

自动紧急制动试验：在停车场景，VRU从盲区闯入车道，系统通过协同感知预警行驶车辆完成紧急制动，从而测试系统可靠性和安全性。



成果

- 协助部署实车ROS系统采集实验数据，构建多车感知数据集，完成数据预处理，用于训练目标检测模型。
- 学习并应用目标跟踪、聚类算法，并结合时延补偿算法确保多车感知同步，提升检测稳定性与感知精度。
- 协助完成AEB测试，验证多车协同感知的有效性。
- 参与 IEEE Transactions on ITS 期刊论文投稿。



Capturing Natural Evolution in Function-guided RNA Design via Genomic Foundation Model

导师：溥渊未来技术学院 郑双佳

学生：溥渊未来技术学院 黄癸杰

Submitted to Science Advances

Abstract

Challenge:

Designing RNA for efficient in vivo functional execution.

Motivation :

Foundation models for scientific computing are emerging as a new paradigm to accelerate interdisciplinary discoveries.

Innovation:

Design a novel, **zero-shot** RNA design strategy Integrating nucleotide **large language models (LLMs)** with **inverse folding models (IFMs)** to generate RNA that mirror natural evolutionary patterns while preserving the structural integrity of critical functional regions.

Key Words:

RNA Design, Zero-shot, Foundation model, Evolution, In vivo

Author info



Student
Yanjie Huang

Official Web

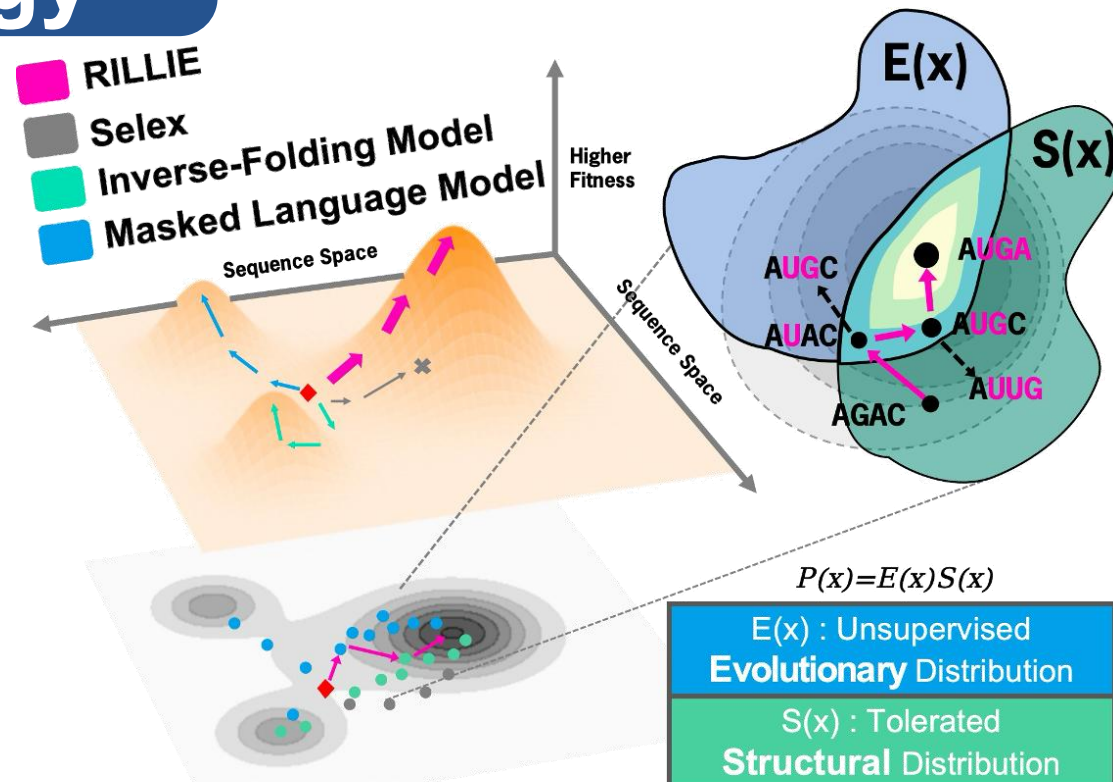
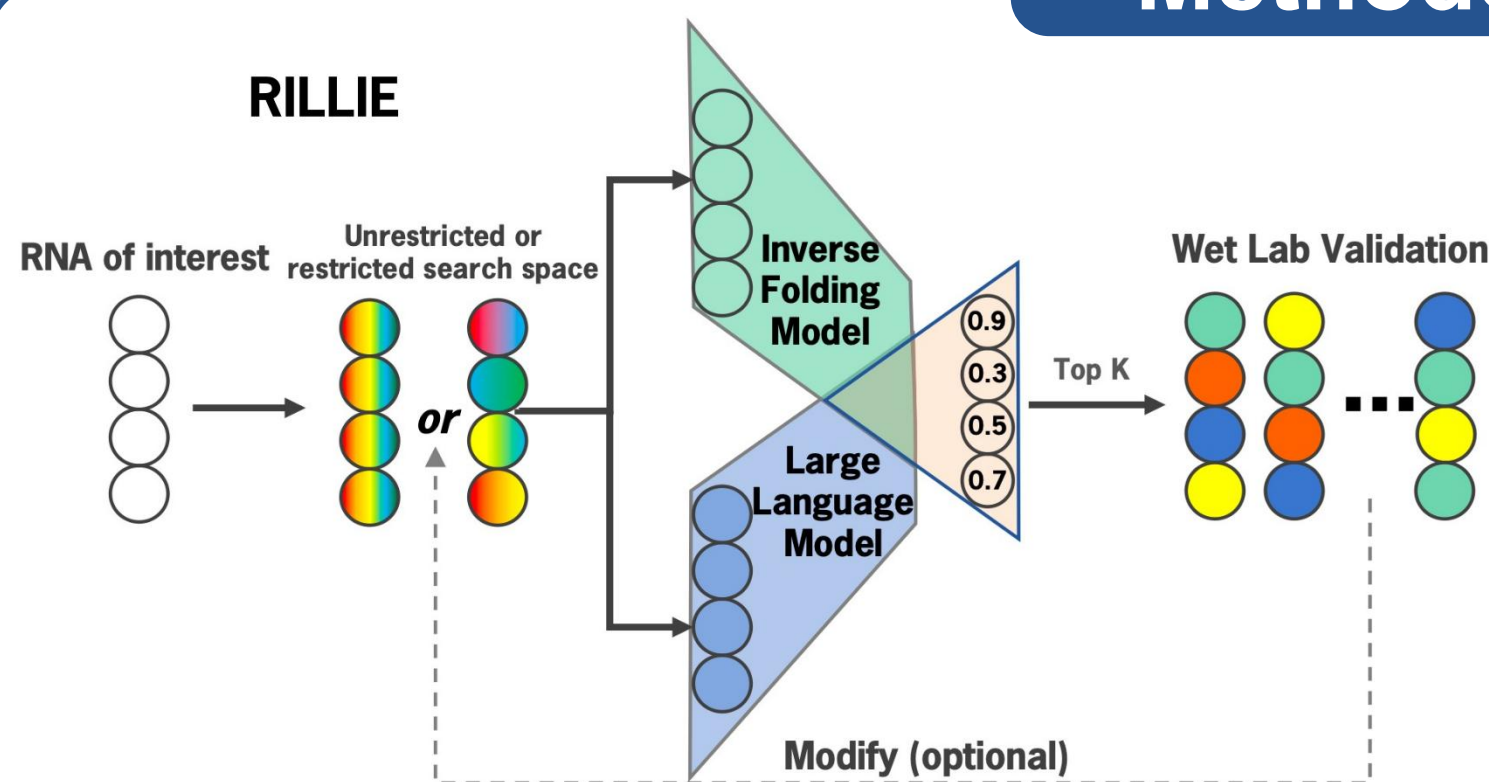


Professor
Shuangjia Zheng

Contact Us



Methodology



IFM (Inverse-folding Model)

Input: 1. RNA structure 2. RNA sequence

Output: Score of **structural compatibility**

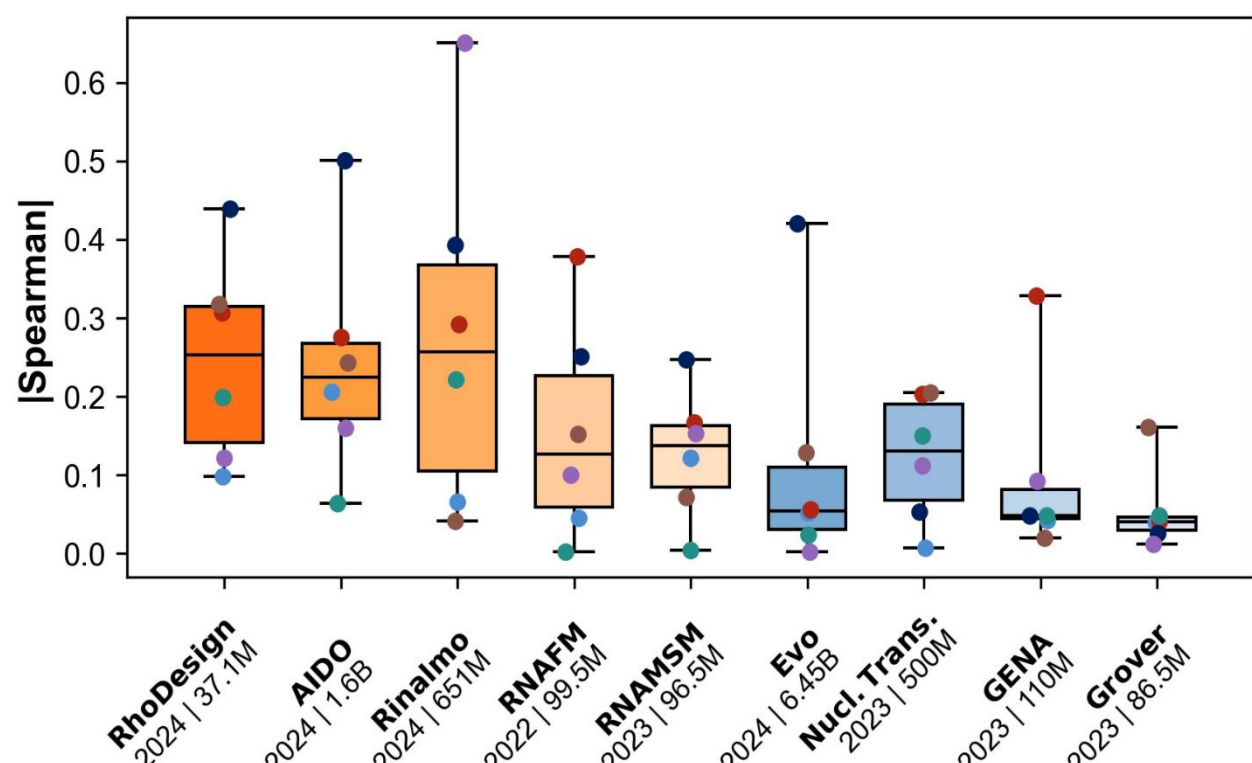
LLM (Large Language Model)

Input: 1. RNA sequence

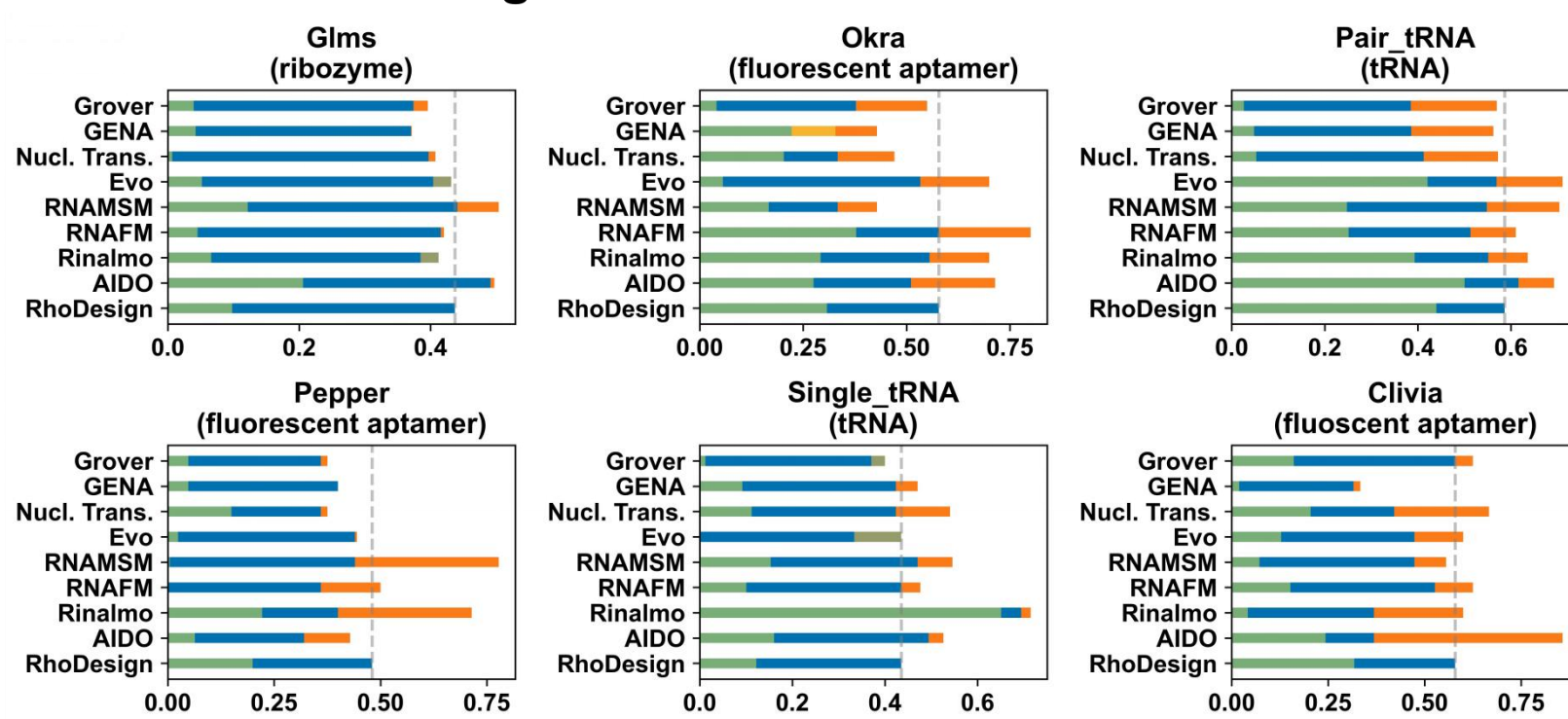
Output: Score of **evolutionary plausibility**

Benchmark

Zero Shot ncRNA Fitness Prediction



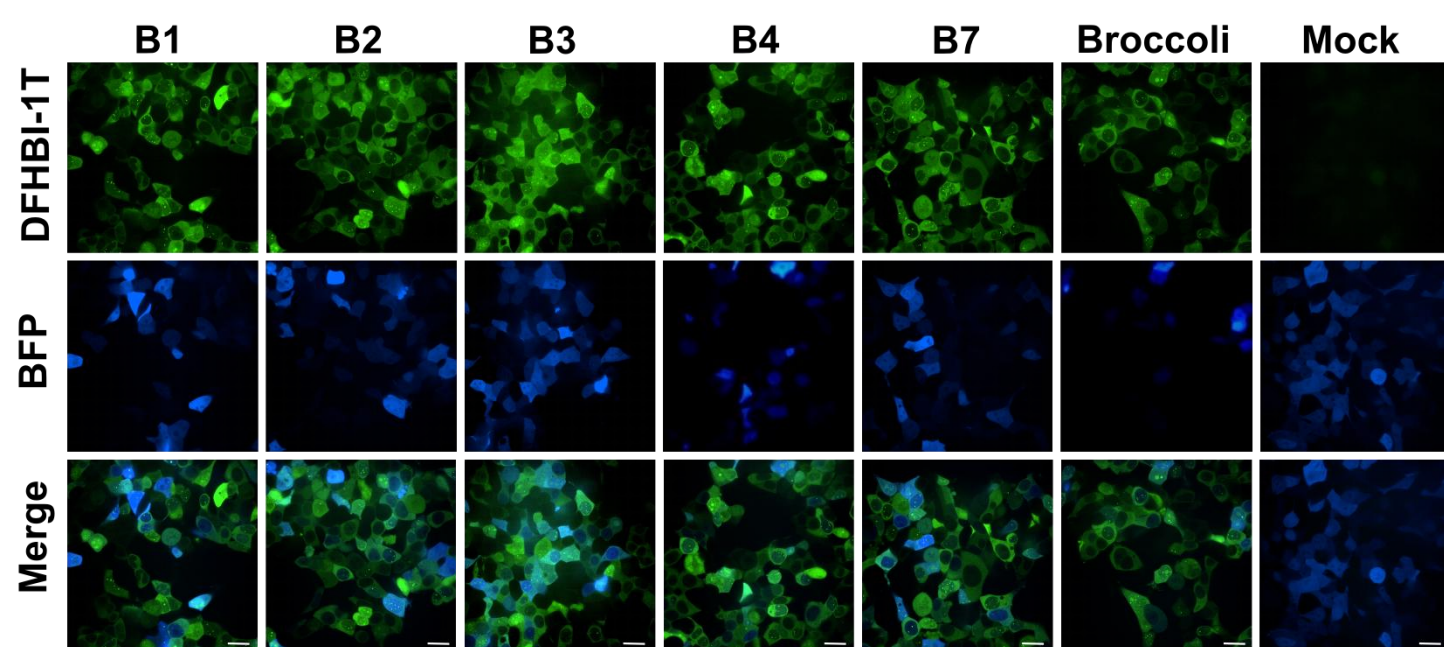
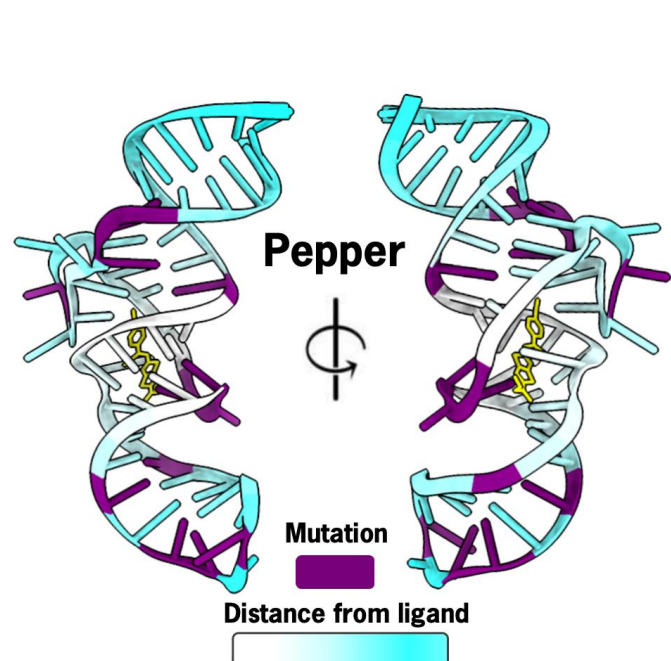
High Fitness Prediction Precision



1. Foundation models are **good at picking out high fitness variants**
2. **Multimodal inputs** improves language model performance

Result

14 Points Mutations



Two RNA systems

Pepper and **Broccoli**

Two strategies

Multi-round evolution was used to escape local optima

Comprehensive tests

In vitro:

Fluorescence and Affinity test

In vivo:

FACS, Live Cell Image



基于场端随动激光雷达的车辆跟踪系统

导师：自动化与感知学院 杨明
学生：自动化与感知学院 戚治齐

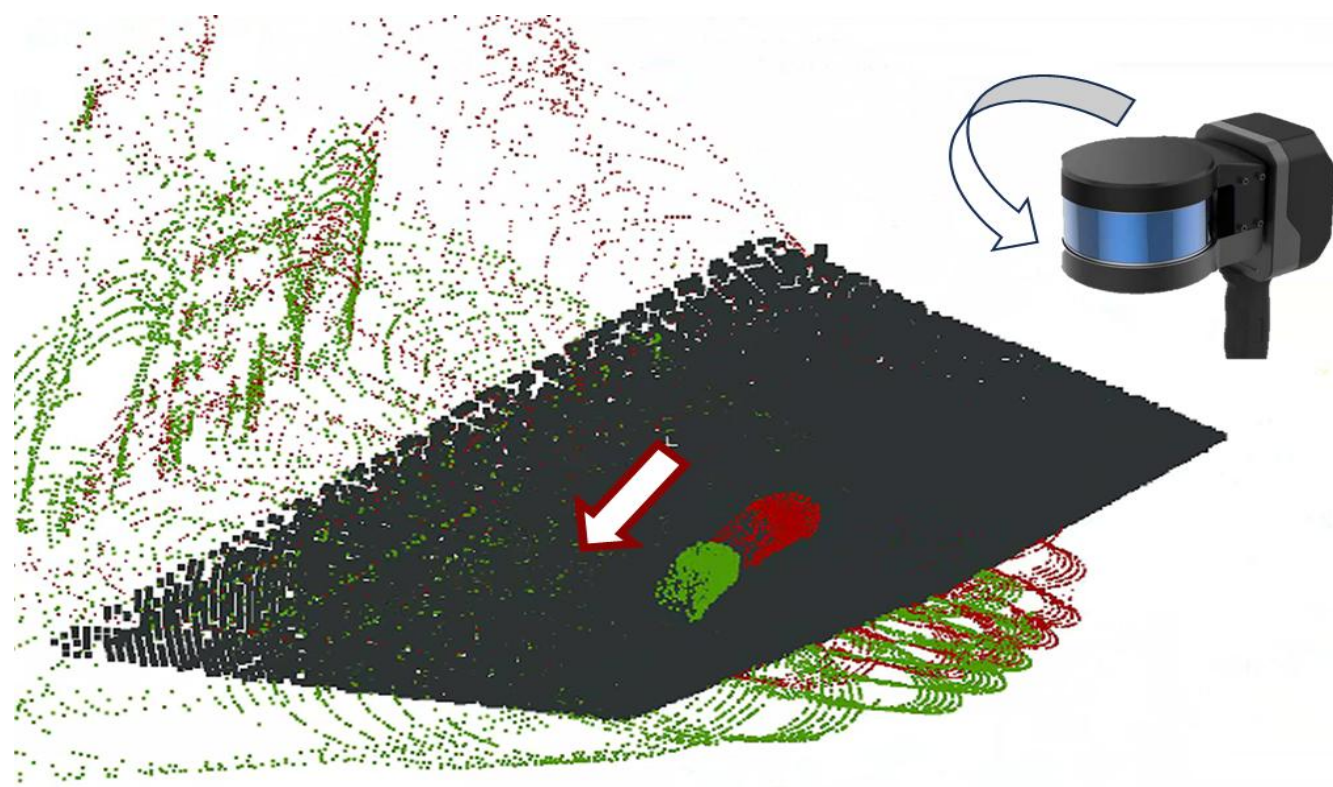


研究目标

- 提出一个基于**场端**随动激光雷达的车辆跟踪系统，
- 实现对于场地内指定车辆的**在线建模和跟踪**，并根据跟踪定位结果，实现对车辆的**远程引导与控制**。

随动系统开发

- 提出了**雷达随动算法**，实现雷达随动跟踪车辆。
- 参与编写3个发明专利——《**场端感知引导式自主换电站系统及自主换电方法**》、《基于手机相机众包数据的NeRF实景建模方法及系统》、《基于车载相机获取实时街景图像构建NeRF实景的方法》



完整道路系统开发

- 在CARLA中建立仿真模型，实现了该系统，实现了基于场端随动激光雷达的AVP系统。
- 项目拓展研究内容——**不同场端激光雷达车辆定位效果对比**，预计将于6月投稿。

未来设想——基于场端感知的智慧交通系统

- 在学校封闭区域部署激光雷达，实现一定范围内**完全依靠场端激光雷达的车辆定位**。
- 增强控制/感知算法鲁棒性，实现**封闭区域内车辆运动控制**。





高离子导电镁电池电解质设计

导师：溥渊未来技术学院 薄首行

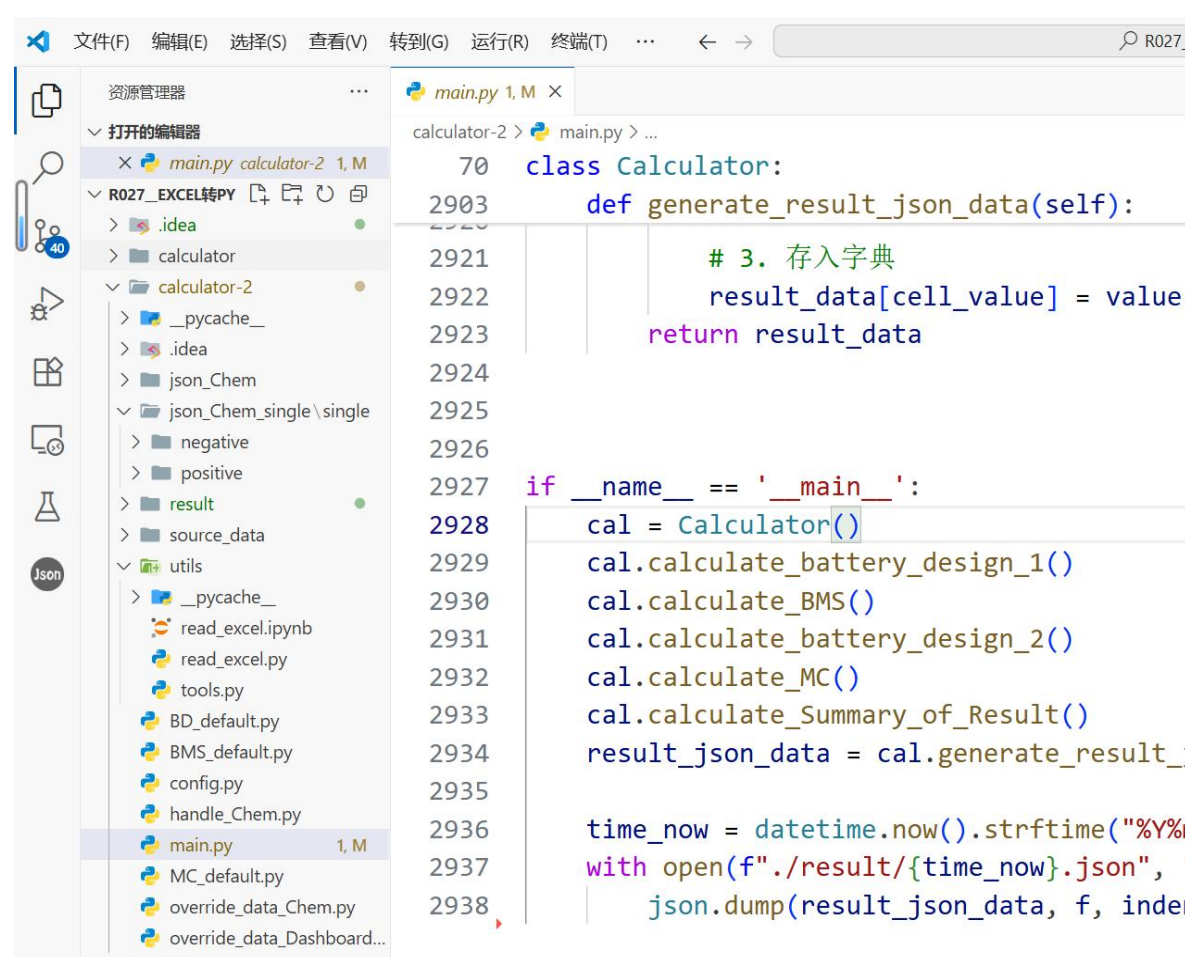
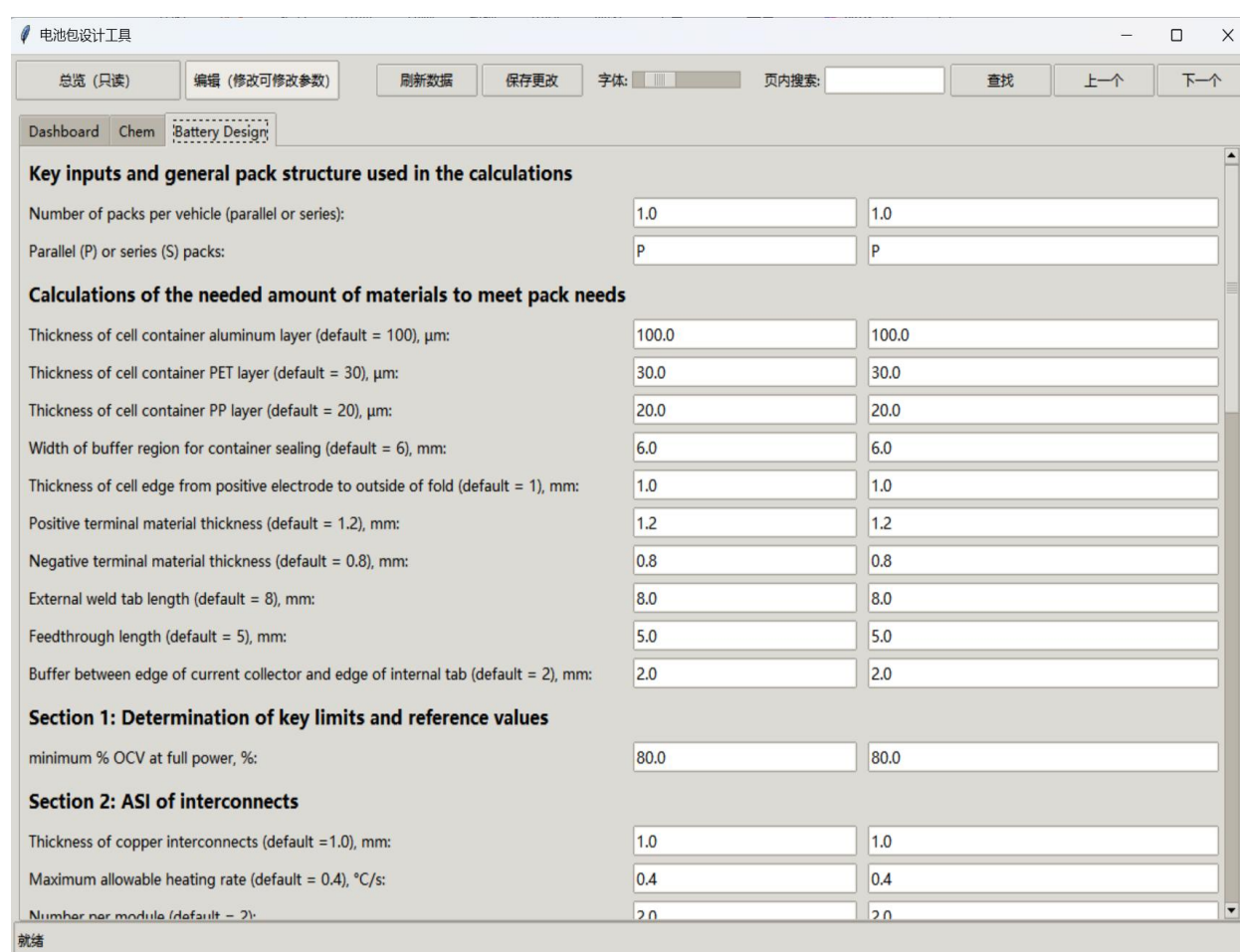
学生：溥渊未来技术学院 田渝翔



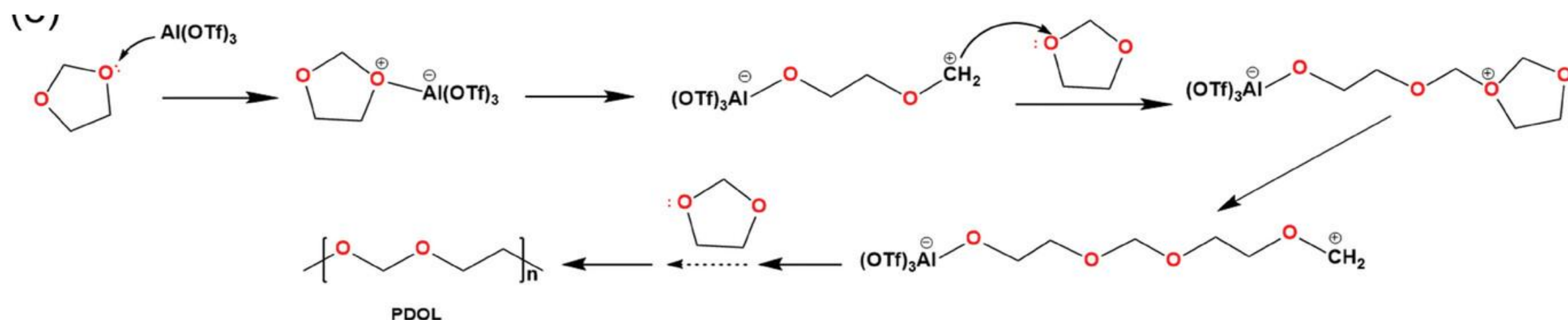
官方二维码 Official WeChat

理论设计软件

为加速电池的研发进程与实验探索，推出了基于Python的“Battery Design tool”。该工具以“自下而上”的建模思想为核心，整合了电化学工程原理与详细的制造成本分析。通过其直观的图形用户界面（GUI），用户可以便捷地输入正负极材料、集流体厚度等设计参数，从而对电池性能进行建模预测，并完成精确的经济成本核算。这款易于分发和使用的工具，有效缩短电池开发的周期，提高了实验效率。



实验探索

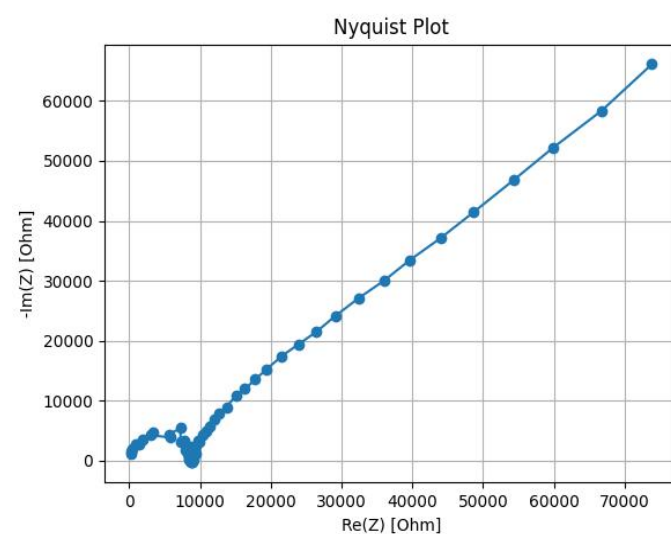


选取聚合物基质：DOL 引发剂： $\text{Al}(\text{OTf})_3$ 无机填料： MgO 镁盐：TMPL

按照以上合成路线进行实验，优化其配方使样品离子电导率最大



(a)



(b)



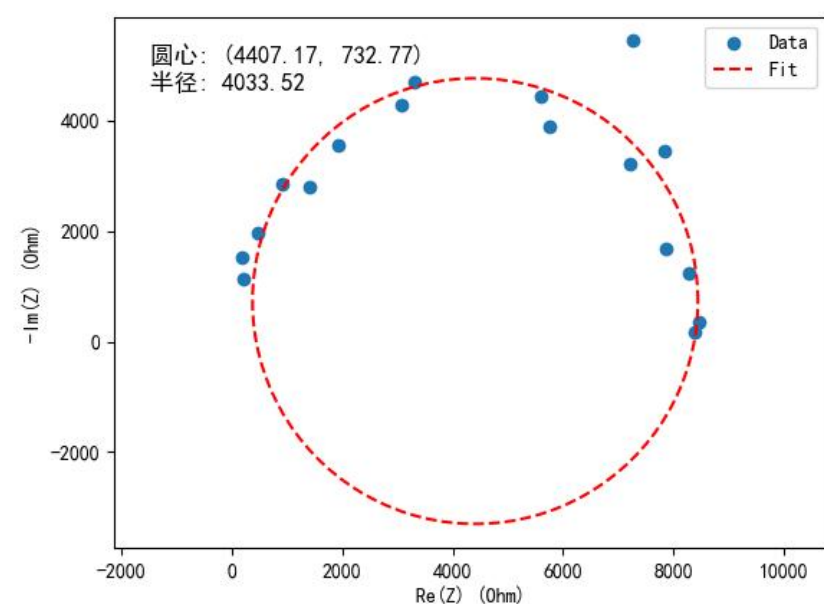
(c)

(a) DOL:TMPL=1:2形成凝胶电解质 (b) EIS测试电导率 $1.32 \times 10^{-5} \text{ S/cm}$ (16°C) (c) 添加纳米 MgO

目前初步实现

- 电解质合成
- 电解质电导率测量
- 尝试添加 MgO 作为无机填料

(d) 阻抗谱数据拟合



基于尺寸工程的高精度箱体工艺优化

导师：溥渊未来技术学院 金隼 邹璟

学生：密西根学院 许天烨



官方二维码 Official WeChat

项目背景及目标

随着电动汽车产业的快速发展，动力电池包箱体的装配质量至关重要。箱体作为核心承载部件，其装配精度直接影响电池性能和使用寿命。然而，由于冲压、辊压和型材成型工艺复杂，焊接过程易导致箱体变形，引发关键尺寸超差。本项目针对三类成型工艺的电池包蓝本，分析箱体结构、焊接工艺及定位系统等影响因素，制定改善箱体底部平面度、轮廓度、挂载孔位置及密封面平面度等超差的方案。

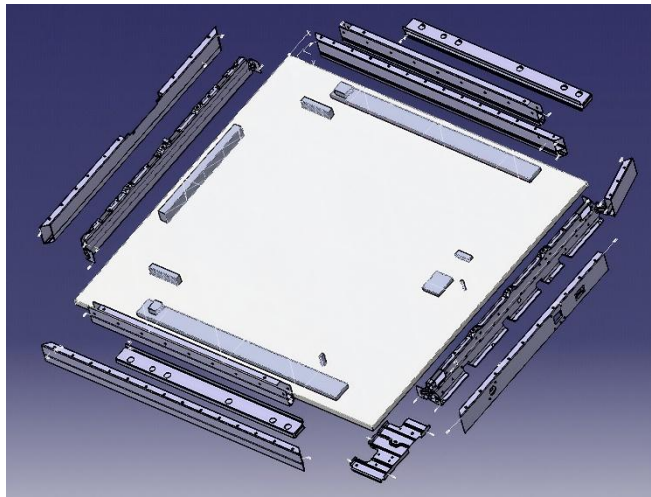


图1. L743箱体

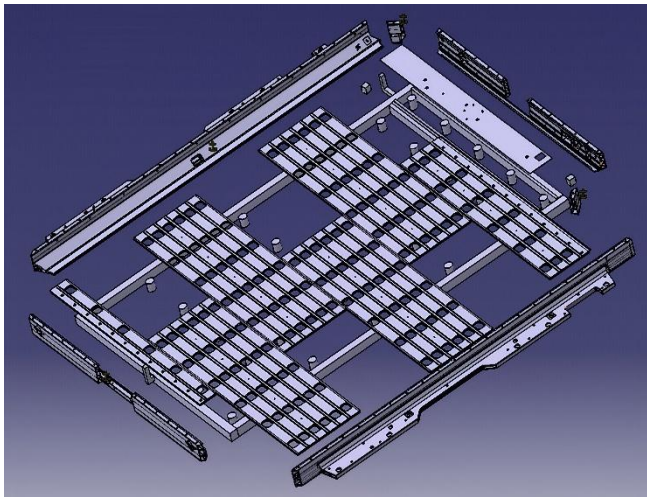


图2. BX6箱体

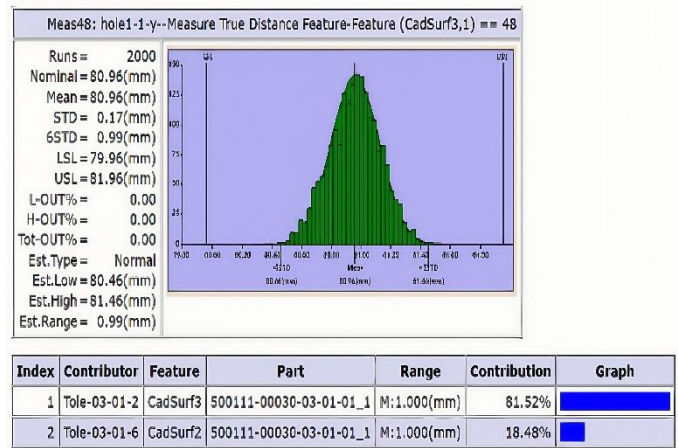


图3. L743分析结果

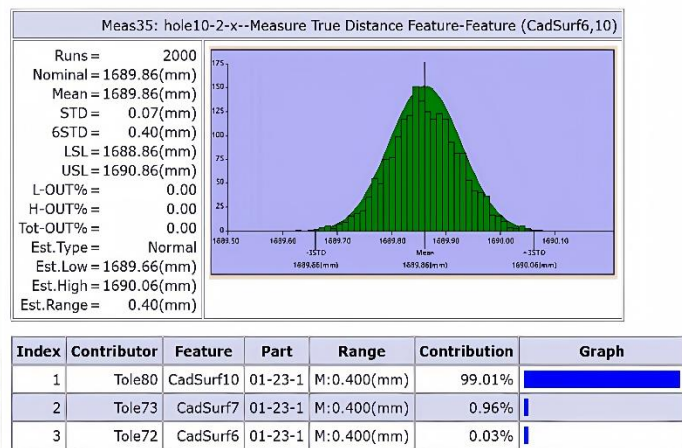


图4. BX6分析结果

3DCS箱体装配尺寸公差仿真与分析

第一阶段采用3DCS工具对L743和BX6两种箱体进行了装配偏差分析，旨在确定最优装配顺序。在完成各面公差定义后，对L743箱体的三种装配顺序进行了分析，结果表明顺序2的装配精度最优，其最大误差控制在1mm以内。误差分析显示，零件03-01-01的外侧面为主要误差源（贡献率 > 80%），这与其多工装接触特性及较低的误差累积效应有关。对于BX6箱体，两种装配顺序的整体误差水平相近，但顺序2在装配孔精度方面更具优势（6STD=0.40mm），其中零件01-23-1的10号面为主要优化对象（贡献率 > 90%）。分析结果表明，分散化的工装布局对装配精度具有显著影响。

箱体焊接工艺仿真分析和代理模型建立

第二阶段研究旨在基于焊接有限元代理模型求解最优焊接顺序，并采用单焊缝耦合分析方法预测焊接变形。首先采用有限元法计算单焊缝在不同焊接顺序和方向下的变形矩阵 S_{jk} ，量化板材变形量。然后通过多焊缝组合仿真获取实际变形数据 R_i 作为基准。基于线性叠加原理，建立总变形预测模型 $R'_i = \sum k_j S_{jk}$ ，将单焊缝效应与偏差因子 k_j 结合。最后运用粒子群算法PSO优化 k_j ，使预测值逼近实际。

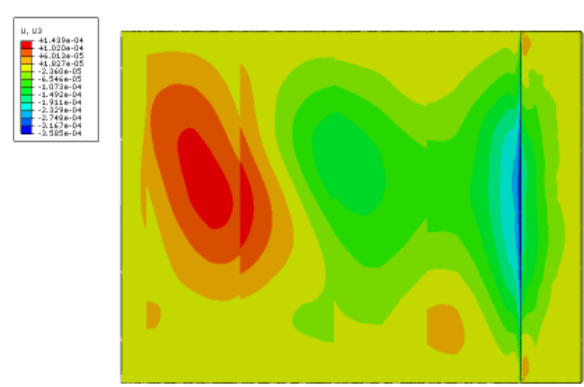


图5. 单焊缝有限元结果

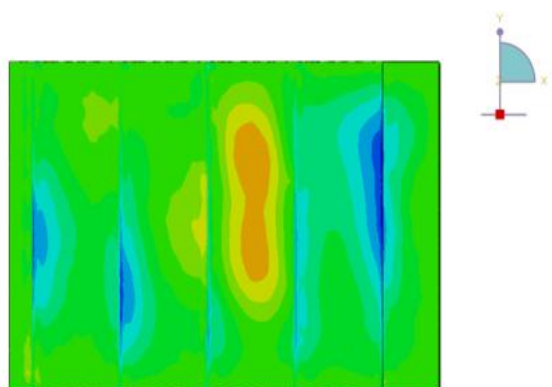


图6. 多焊缝有限元结果

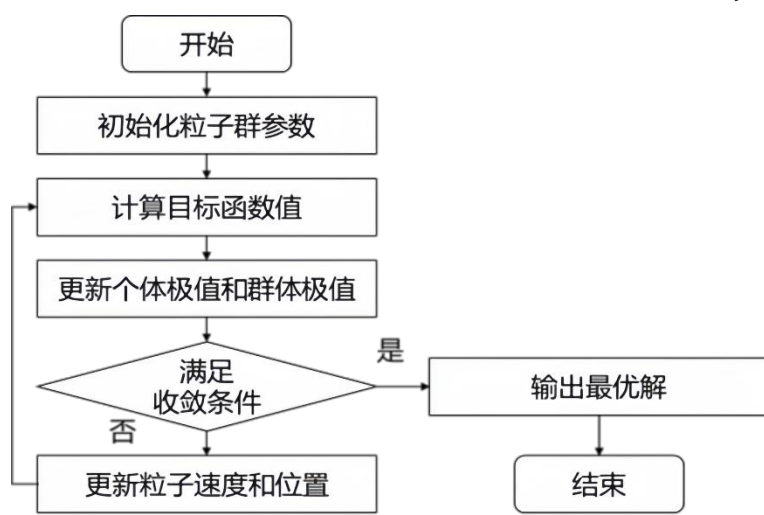


图7. PSO算法逻辑

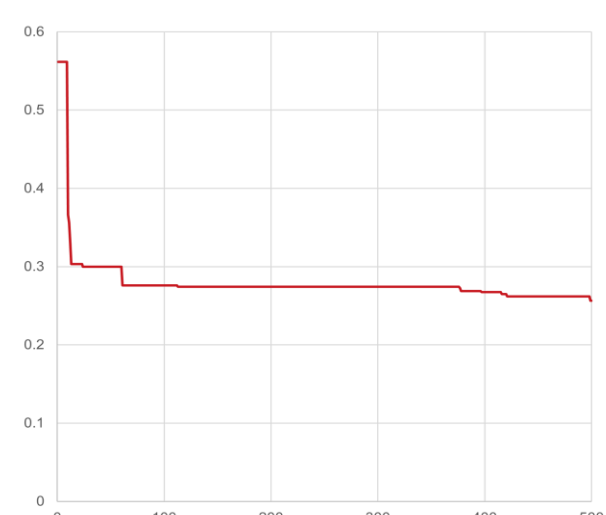


图8. PSO算法优化 k_j

其他工艺影响因素修正

在获得单焊缝耦合形变预测代理模型后，考虑下压系数、进给速度等因素影响的修正，得到了：

$$T' = t_j \left[|\max(R'_i) - \min(R'_i)| + t_b^m \Delta D + \left(b_1 + 2b_2 \frac{\Delta \omega}{\omega_0} \right) \frac{\Delta \omega}{\omega_0} + b_2 \left(\frac{\Delta \omega}{\omega_0} \right)^2 \right]$$

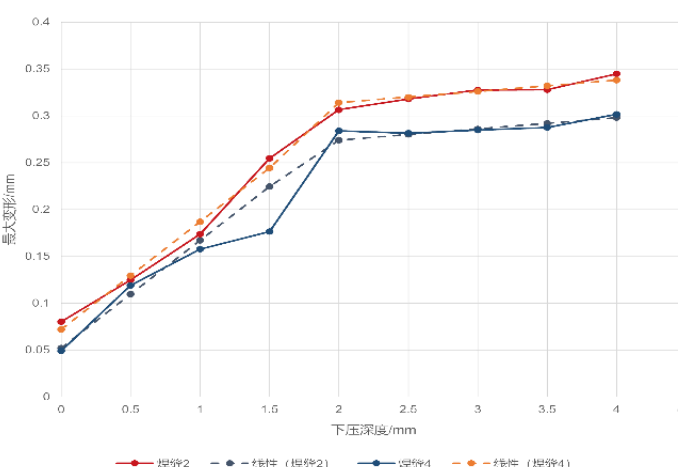


图9. 下压系数修正

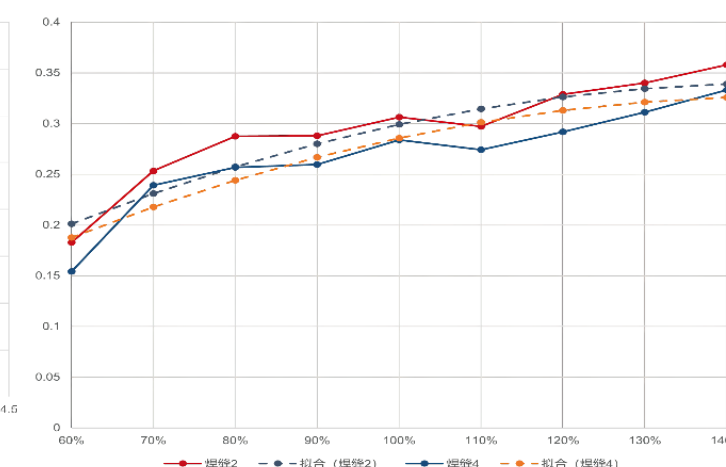


图10. 旋转速度修正

代理模型预测效果

以BX6的5条焊缝为例，共存在**3840种焊接组合**，若使用有限元仿真，每种都需要**48小时**进行计算，而使用代理模型的预测共需**2.402420秒**。同时，代理模型的预测精度都达到了**80%**。

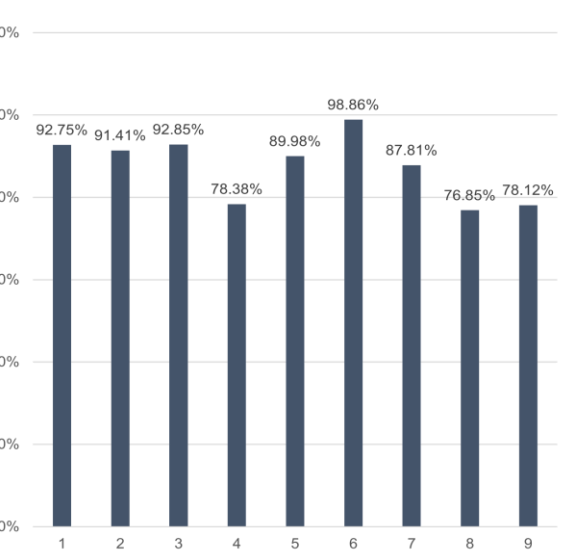


图11. 代理模型效果