上海交通大學 化学化工学院
SCCE School of Chemistry and Chemical Engineering,SJTU

OpenClaw赋能的高分子材料智能化研究新范式——以聚酰亚胺（PI）为例

OpenClaw-Empowered Intelligent Research Paradigm for Polymer Materials: A Case Study of Polyimide

DeepImide

化学化工学院 博士二年级 魏韫豪

2026年4月29日

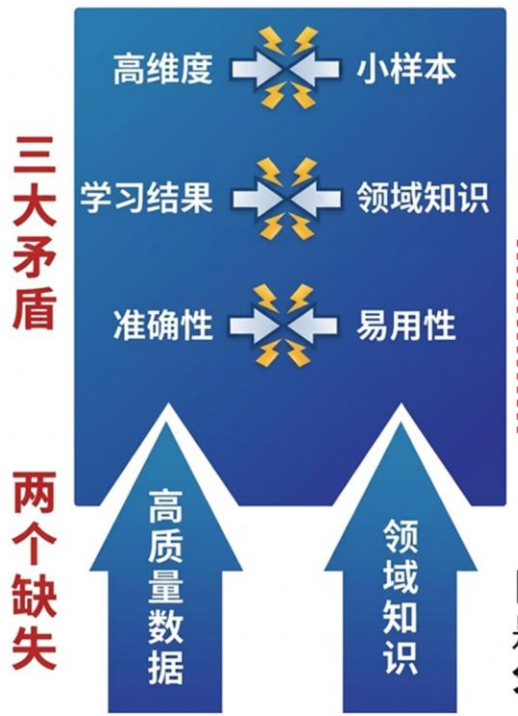
背景：AI时代下的高分子材料研究

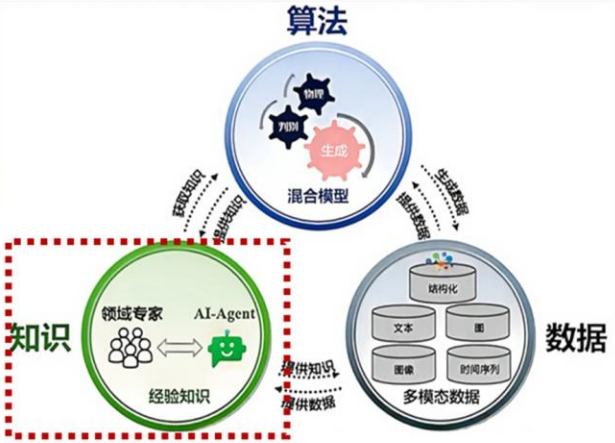
将人工智能应用于高分子材料研发已成为重要趋势，也是“AI for Materials”的重要一环

数据利用问题：能直接调用的数据库里的数据只是所有数据的**“冰山一角”**



知识驱动问题：高分子结构的特殊性使纯黑箱学习陷入不可靠





知识与数据、算法同等重要

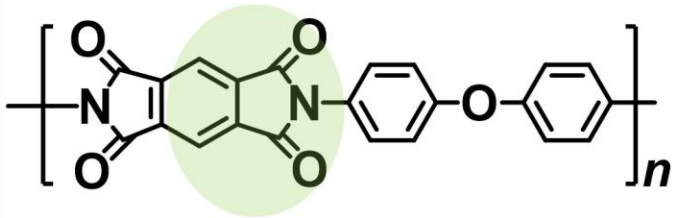
目前大多数高分子AI研究，本质上还是**把知识用在输入端，或用于可解释分析，而非融入模型学习过程**

亟需构建一个“知识-数据协同驱动”的高分子材料智能化研究新范式

Yuan, W.; Chen, G.; Wang, Z.; You, F. *Adv. Mater.* **2025**, 37: 2502771.
Gao, L.; Song, S.; Lin, J.; Xu, Y.; Wang, L.; Du, L. *Adv. Mater.* **2026**, 38(7): e16857.

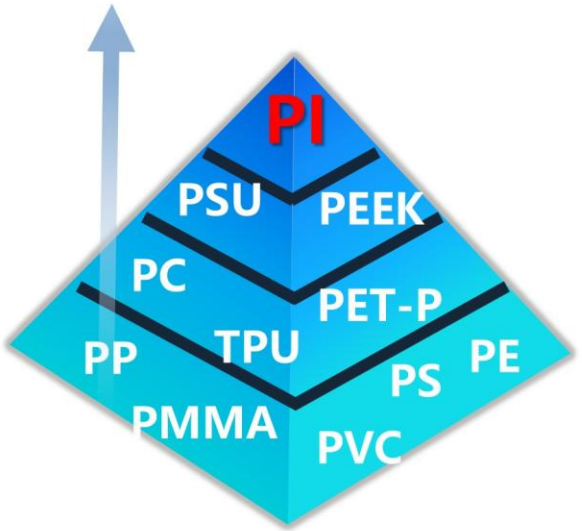
背景：高分子金字塔顶——聚酰亚胺（PI）材料

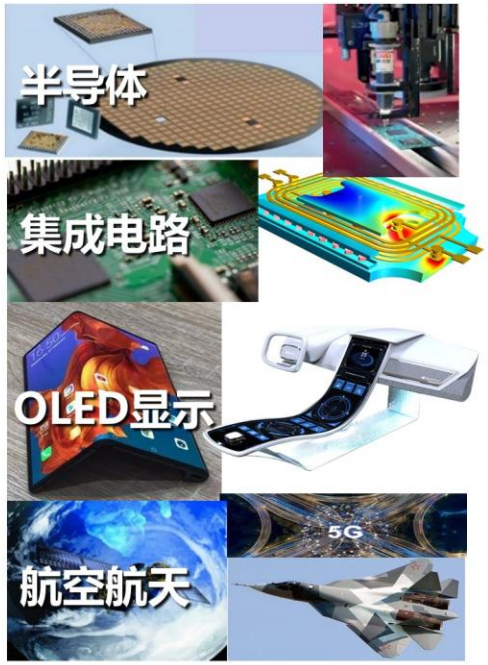
聚酰亚胺(Polyimide)



- ✓ 耐高温、耐化性
- ✓ 机械性能优异
- ✓ 电绝缘性良好
- ✓ …

位于高分子材料的金字塔顶

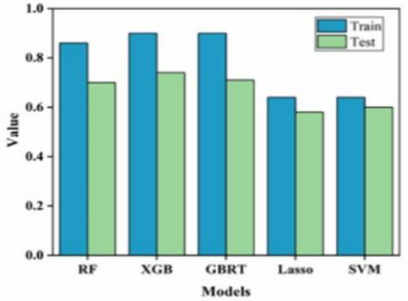




性能优异，高端应用广泛

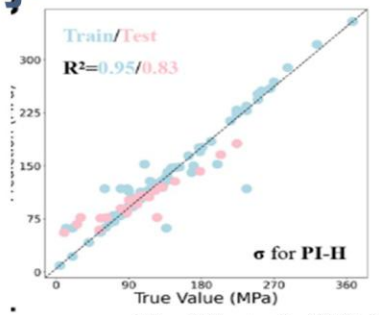
AI for Polyimide的研究掀起热潮

热学



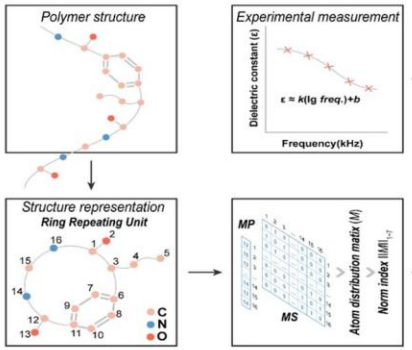
Zhang, S. et al. (2023)

力学



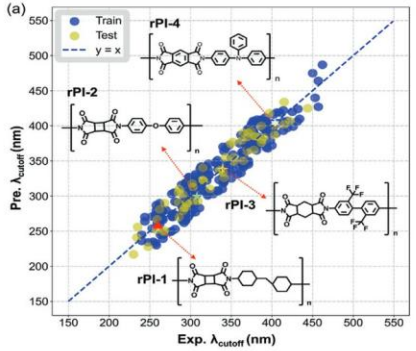
Hu, W. et al. (2024)

电学



Yu, M. et al.(2024)

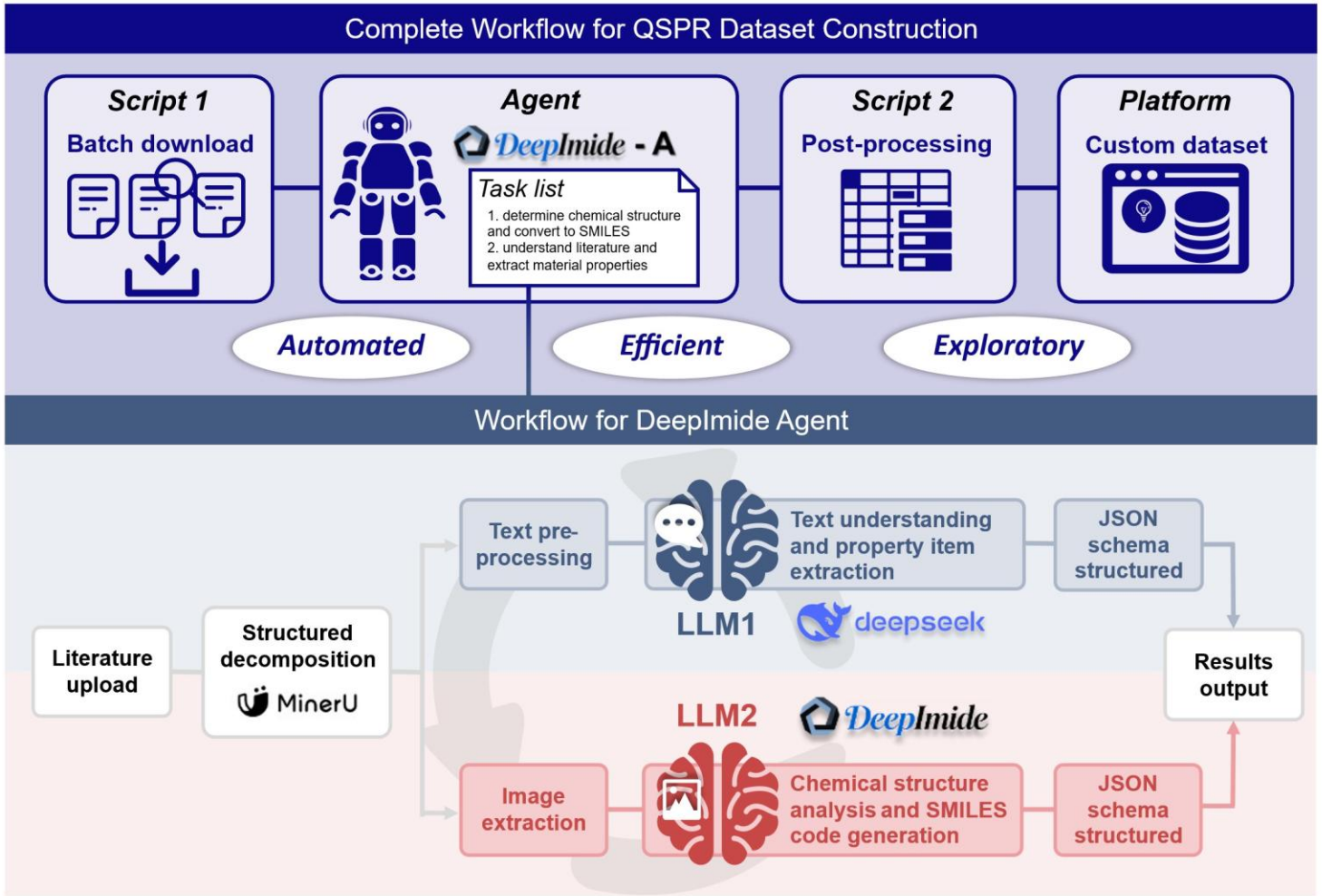
光学



Zhang, S. et al.(2024)

构建高质量结构-性能（QSPR）数据集是重点

前期工作：DeepImide-A——构建聚酰亚胺数据集的智能助理



研究内容

- 以通用视觉大模型为基础，利用自构建的大规模PI结构图像-SMILES数据集训练，开发了**专业大模型 DeepImide。**
- 基于Dify，设计并实现了一个模块化的**智能体DeepImide-A**。能够批量解析PI相关文献并从中提取化学结构和各项物性。

主要结论

- **DeepImide-A**智能体与**脚本、后处理程序**串联，能形成**完整的QSPR数据集智能化构建**工作流。相较于人工构建，效率显著提升。

1. OpenClaw 辅助智能体优化 QSPR 数据集构建工作流

传统流程（耗时）



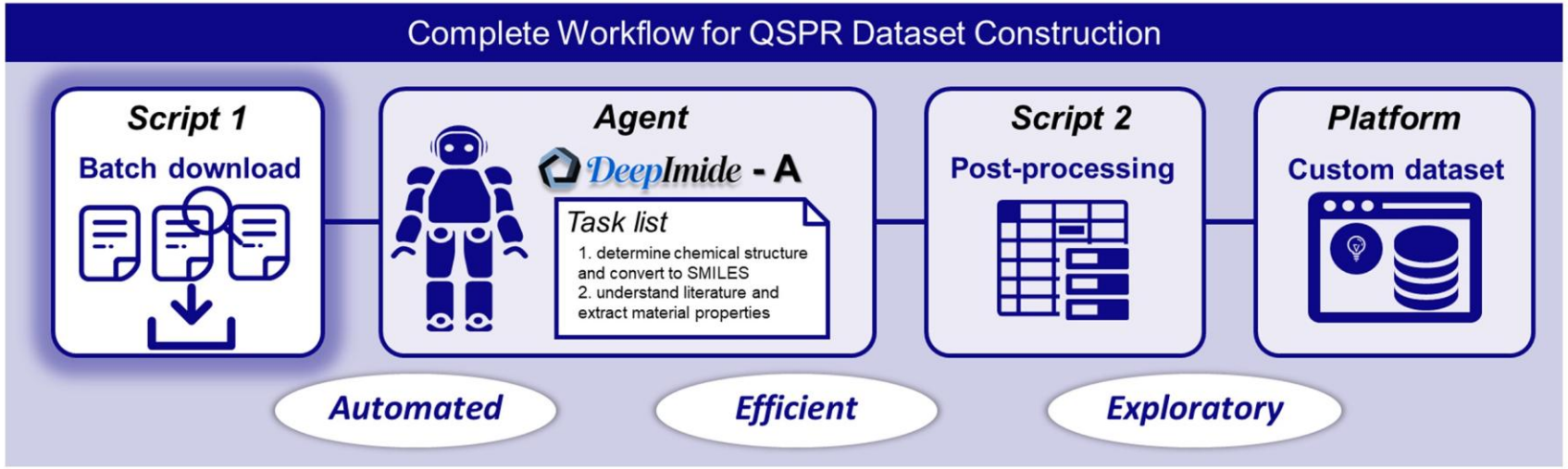
现有智能体（多任务模块化，通过流程引擎进行**自动编排**与结果传递，实现自动化QSPR数据集构建）



在现有工作流的基础上，采用OpenClaw 辅助 DeepImide-A 智能体，复刻并优化 QSPR 数据集构建工作流

1.1 利用OpenClaw完成科学文献的搜索与下载

现有流程



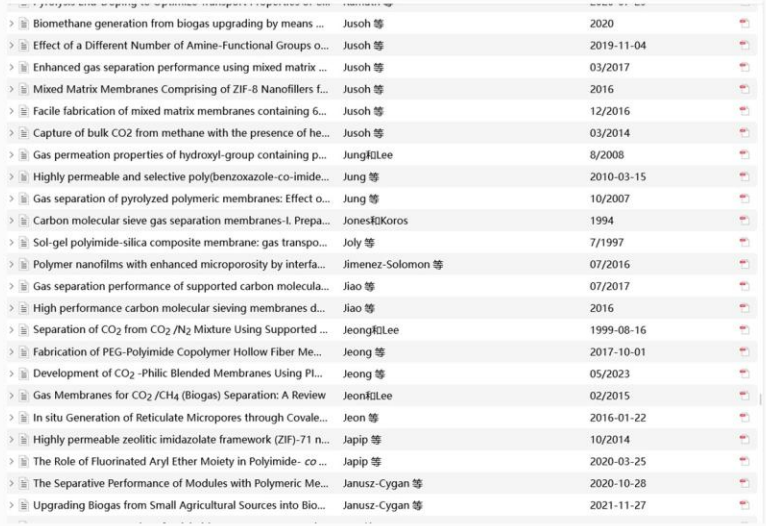


通过脚本搜索相关
关键词并批量下载文献

第一步
Web of Science批量导出文献DOI

第二步
将DOI批量导入至Zotero

第三步
在zotero中配置脚本下载



Biomethane generation from biogas upgrading by means ...	Jusoh 等	2020
Effect of a Different Number of Amine-Functional Groups o...	Jusoh 等	2019-11-04
Enhanced gas separation performance using mixed matrix ...	Jusoh 等	03/2017
Mixed Matrix Membranes Comprising of ZIF-8 Nanofillers f...	Jusoh 等	2016
Facile fabrication of mixed matrix membranes containing 6...	Jusoh 等	12/2016
Capture of bulk CO2 from methane with the presence of he...	Jusoh 等	03/2014
Gas permeation properties of hydroxyl-group containing p...	Jung和Lee	8/2008
Highly permeable and selective poly(benzoxazole-co-imide...	Jung 等	2010-03-15
Gas separation of pyrolyzed polymeric membranes: Effect o...	Jung 等	10/2007
Carbon molecular sieve gas separation membranes-I. Prepa...	Jones和Koros	1994
Sol-gel polyimide-silica composite membrane: gas transpo...	Joly 等	7/1997
Polymer nanofilms with enhanced microporosity by interfa...	Jimenez-Solomon 等	07/2016
Gas separation performance of supported carbon molecula...	Jiao 等	07/2017
High performance carbon molecular sieving membranes d...	Jiao 等	2016
Separation of CO_2 from CO_2 /N_2 Mixture Using Supported ...	Jeong和Lee	1999-08-16
Fabrication of PEG-Polyimide Copolymer Hollow Fiber Me...	Jeong 等	2017-10-01
Development of CO_2 -Philic Blended Membranes Using PI...	Jeong 等	05/2023
Gas Membranes for CO_2 /CH_4 (Biogas) Separation: A Review	Jeon和Lee	02/2015
In situ Generation of Reticulate Micropores through Covale...	Jeon 等	2016-01-22
Highly permeable zeolitic imidazolate framework (ZIF)-71 n...	Japip 等	10/2014
The Role of Fluorinated Aryl Ether Moiety in Polyimide- *co* ...	Japip 等	2020-03-25
The Separative Performance of Modules with Polymeric Me...	Janusz-Cygan 等	2020-10-28
Upgrading Biogas from Small Agricultural Sources into Bio...	Janusz-Cygan 等	2021-11-27

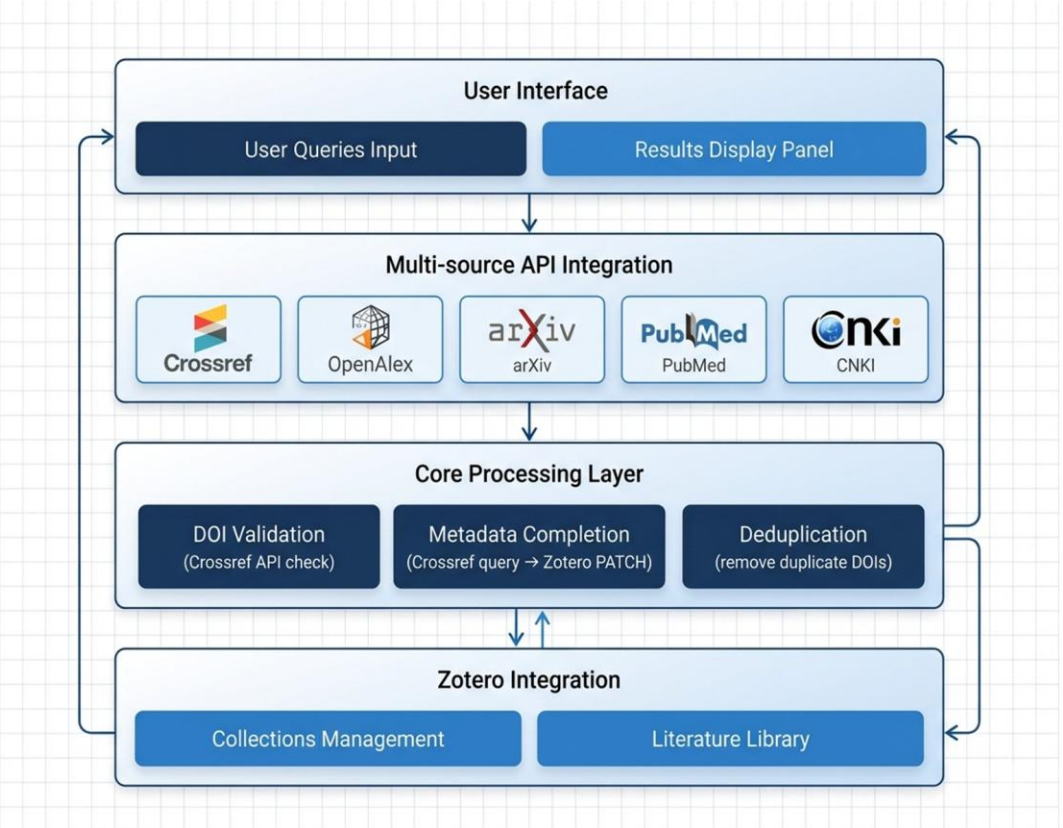
1.1 利用OpenClaw完成科学文献的搜索与下载

1. 建立与多个文献库的连接

使用技能

academic-literature-search：核心文献搜索技能，封装了多个数据库的查询接口
cnki-scholar：专门用于中文知网论文检索
google-scholar-search：Google学术搜索集成

- Crossref: 1.4亿+ 期刊文章 (140 million+)
- OpenAlex: 2亿+ 论文 (200 million+)
- arXiv: 220万+ 预印本 (2.2 million)
- PubMed: 3500万+ 文献 (35 million)
- CNKI (知网): 海量中文学术论文



1.1 利用OpenClaw完成科学文献的搜索与下载

搜索关键词自动化撰写和优化

请你先学习各种数据库的搜索语法怎么写，并输出成技能

自然语言

我为你提供一个需要搜索的目标描述，你为我自动生成每一个数据库特定的搜索关键词语法，例如，我想搜索**聚酰亚胺（PI）**的文献，想聚焦于**新的单体（二胺，二酐）**结构，也就是文章中一定要合成新的单体，然后表征这种新的**聚合物（最好是薄膜，光刻胶）**的性能，不需要那种工程材料类的文献，不需要机械领域的文献，不需要全是理论模拟和公式推导的文献。

搜索语法

数据库	搜索语法
Crossref	"polyimide" AND (synthesis OR "new monomer" OR diamine OR dianhydride) AND (film OR photoresist OR characterization) NOT (mechanical OR engineering OR simulation OR "finite element")
OpenAlex	polyimide synthesis diamine dianhydride film photoresist + filter 过滤
arXiv	all:"polyimide" AND (all:synthesis OR all:diamine OR all:dianhydride) AND (all:film OR all:photoresist) NOT (all:mechanical OR all:simulation)
PubMed	"polyimide"[Title/Abstract] AND (synthesis[Title/Abstract] OR monomer[Title/Abstract] OR diamine[Title/Abstract]) AND (film[Title/Abstract] OR photoresist[Title/Abstract]) NOT (mechanical[Title/Abstract] OR simulation[Title/Abstract])

各数据库搜索语法

1. Crossref (API)

Crossref 使用 Elasticsearch 全文搜索，语法比较灵活：

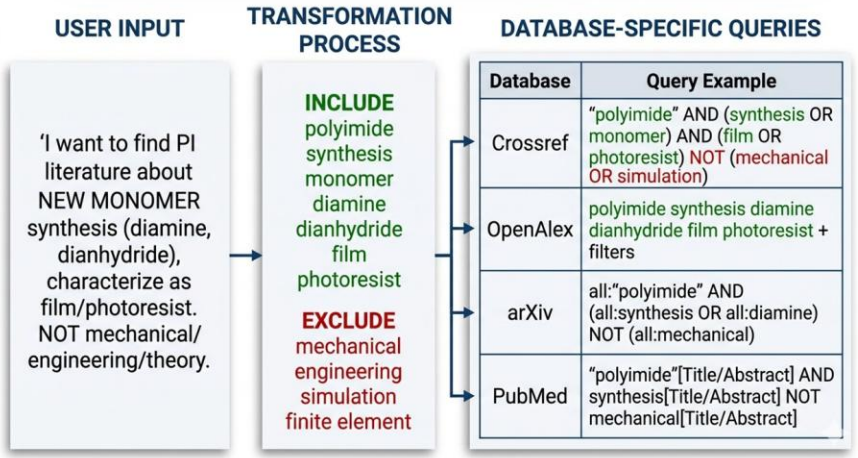
```
# 核心搜索
"polyimide" AND ("new monomer" OR synthesis OR diamine OR dianhy

# 包含表征关键词
AND (characterization OR "property" OR "performance" OR "optical

# 排除不需要的领域
NOT ("mechanical" OR "machinery" OR "engineering" OR "finite ele

# 完整示例
"polyimide" AND (synthesis OR "new monomer" OR diamine OR dianhy
```

将以上工作总结为skill



1.1 利用OpenClaw完成科学文献的搜索与下载

2. 建立与本地zotero的连接

部署zotero技能

Zotero 文献管理技能

1. 准备工作

确保你的电脑上：

- ✅ Zotero 已打开
- ✅ Zotero MCP 插件已启用
- ✅ MCP 服务器在运行（端口 23120）

2. 核心功能

你想做的事	用的工具
搜索文献	`search_library`
查看收藏夹列表	`get_collections`
获取某篇文献详情	`get_item_details`
读取 PDF 全文	`get_content`
搜索文献中的高亮/笔记	`search_annotations`

3. 怎么调用

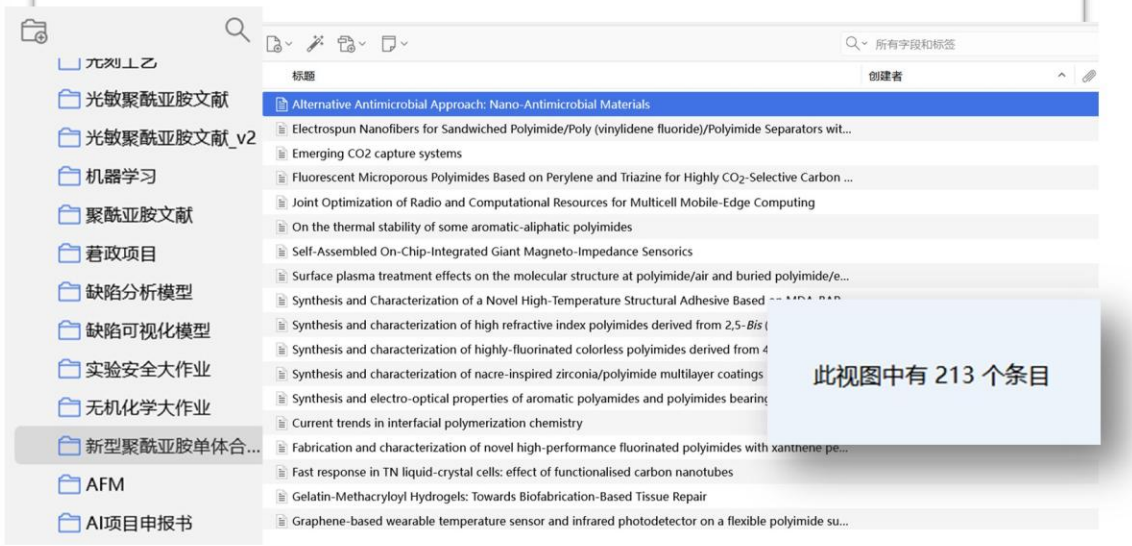
我来帮你调用，不需要你手动敲 curl。你只需要告诉我**你想做什么**。

通过脚本配置Zotero MCP，实现云服务器上的claw与本地电脑Zotero的互联互通

批量导入 DOI

```
POST /users/{user_id}/items

Body: [{"DOI": "10.xxxx/xxxx"}]  # Zotero 会自动根据 DOI 获取元数据，但实际测试中发现有时不会自动获取
```

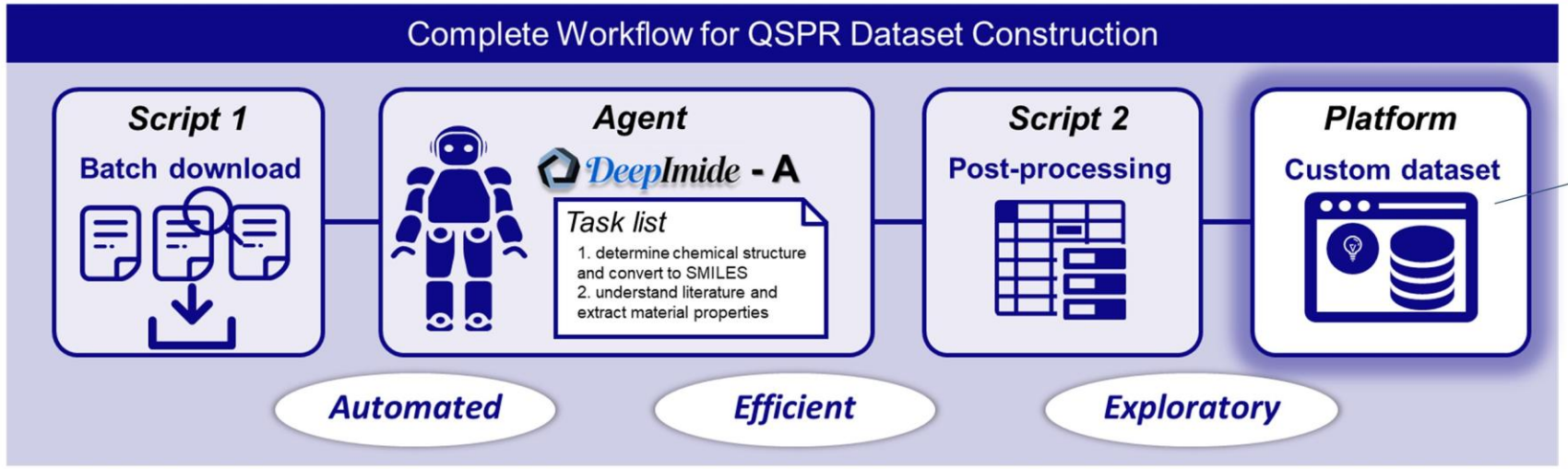


成功导入光敏聚酰亚胺文献 50 篇、新型聚酰亚胺单体合成文献 213 篇

（MCP允许外部程序通过HTTP请求大模型操作Zotero文献库，实现文献的创建、读取、更新、删除操作）

1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

现有流程



自定义QSPR数据集输出平台



利用tkinter和ttkbootstrap库构建GUI界面，实现QSPR数据库的自定义构建

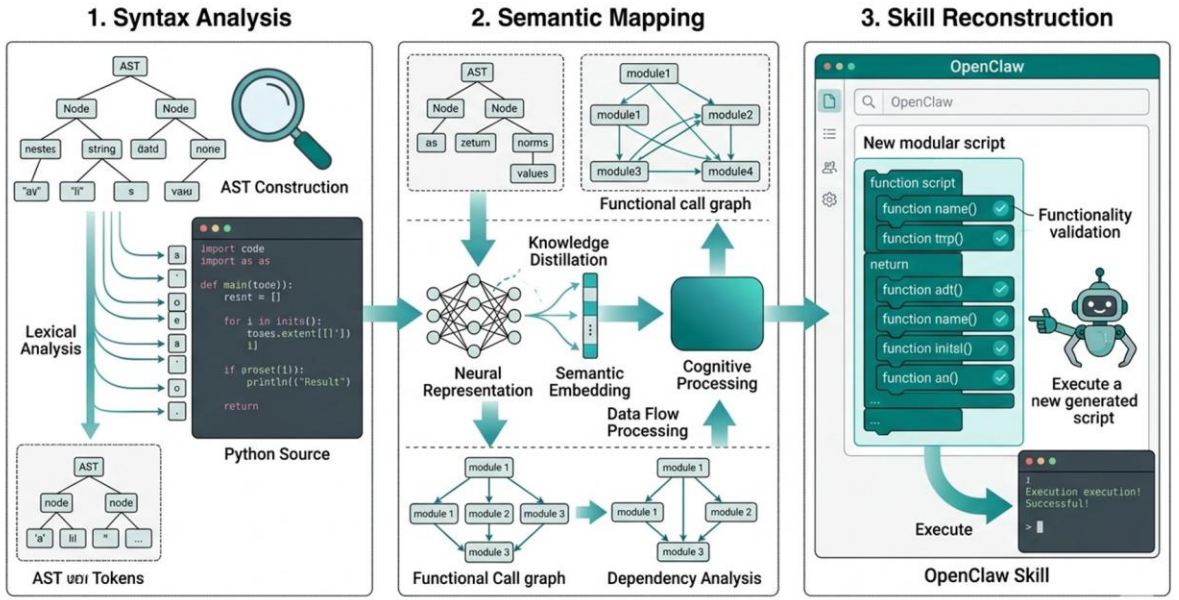
底层pthon代码

```
# 从所有csv文件中收集性能标签
all_properties = set()
for csv_file in csv_files:
    file_path = os.path.join(self.folder_path, csv_file)
    try:
        with open(file_path, 'r', encoding='utf-8') as f:
            reader = csv.reader(f)
            header = next(reader)  # 读取第一行
            all_properties.update(header[1:])
    except Exception as e:
        print(f"读取文件 {csv_file} 时出错: {e}")
```

1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

前置条件1：文件读取、整理、批量处理能力
前置条件2：代码读取、理解、撰写能力





语法分析 → 语义映射 → 技能重构

龙虾的“大脑”通过理解代码，控制龙虾的“手”创造新的其可执行的python脚本

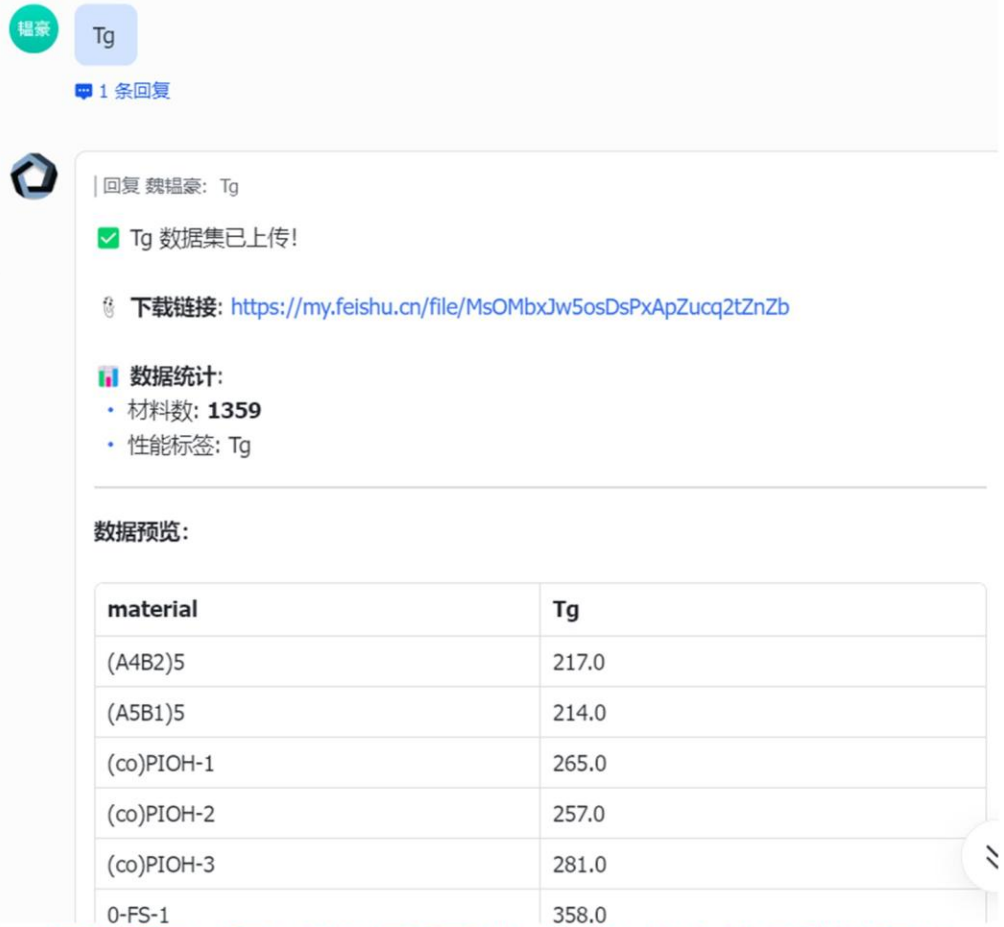
build_datasets.py

1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

尝试复刻QSPR数据库自定义构建的全部功能

单性能提取：以T_g为例





通过和“飞书”聊天的方式成功构建数据集

1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

尝试复刻QSPR数据库自定义构建的全部功能

多性能提取：以力学性能为例



多性能提取：交集并集模式转化



1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

将以上功能总结为自定义skill

辐豪

很好，那现在你能否把你刚刚根据我提供的代码复刻其功能，完成批量处理excel表格文件，和数据集生成任务的能力，自己领悟，整理，总结成一个自定义的skill，名称为build-datasets

1 条回复

回复 魏辐豪：很好，那现在你能否把你刚刚根据我提供的代码复刻其功能，完成批量处理excel表格文件，...

用户想让我把这个数据处理能力整理成一个自定义的 skill，名称为 build-datasets。

我需要：
1. 创建一个新的 skill 目录
2. 编写 SKILL.md 文件
3. 编写主要的处理脚本

这个 skill 的功能是：
- 从一个文件夹中批量读取 CSV 文件（每个 CSV 包含材料性能数据）
- 根据用户指定的性能标签提取数据
- 支持交集/并集模式
- 输出整合后的 CSV 数据集
- 支持上传到飞书云盘

让我先创建 skill 目录和必要的文件。

好的！我来把这个数据处理能力整理成自定义 skill。

Now I need to create the SKILL.md and the main script. Let me write the SKILL.md first.

build-datasets skill 创建完成!

Skill 结构

```
/root/.openclaw/workspace/skills/build-datasets/
├── SKILL.md            # 技能说明文档
└── build_datasets.py   # 主程序脚本
```

使用方法

```
python3 build_datasets.py <文件夹路径> <性能标签> [选项]
```

/workspace/skills/build-datasets

名称	大小	类型
..		
build_datasets.py	11KB	JetBrains ...
SKILL.md	4KB	Markdow...

自己撰写交互式引导界面

```
build-datasets 交互式引导

请告诉我以下信息：

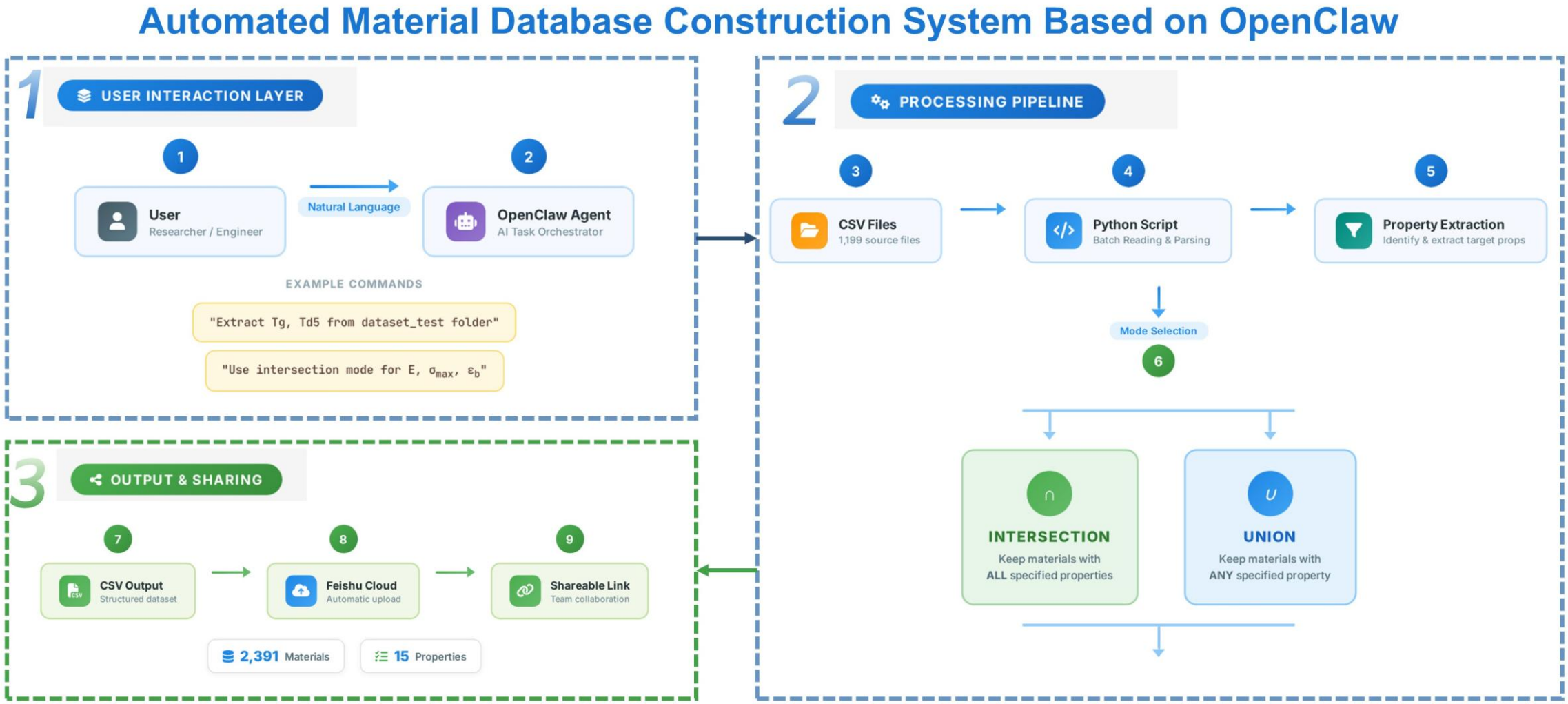
1 CSV 文件在哪个文件夹?

2 要提取哪些性能标签?
  • 热性能: Tg, Td5, Td10, CTE, Tc, λcut-off
  • 力学性能: E, σmax, εb
  • 光学性能: YI, T400-T550

3 要使用哪种模式?
  • 交集（默认）
  • 并集
```

1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

主要流程



1.2 利用OpenClaw完成QSPR数据集的自定义构建

效果展示：

名称	修改日期	类型	大小
1-s2.0-S0014305723008236-main.csv	2025/12/26 10:44	Microsoft Excel ...	1 KB
Ali 等 - 2020 - Development and Char...	2025/12/26 10:46	Microsoft Excel ...	1 KB
Al-Sayaghi 等 - 2018 - Physicochemic...	2025/12/26 10:45	Microsoft Excel ...	1 KB
Balasubramanian 等 - 2016 - Mechani...	2025/12/26 10:47	Microsoft Excel ...	1 KB
Bao 等 - 2020 - Fabrication and prop...	2025/12/26 10:48	Microsoft Excel ...	1 KB
Bao 等 - 2023 - Near-Zero Thermal Ex...	2025/12/26 10:49	Microsoft Excel ...	1 KB
Bennour 等 - 2018 - Synthesis and ch...	2025/12/26 10:50	Microsoft Excel ...	1 KB
Bisoi 等 - 2017 - Gas separation prop...	2025/12/26 10:50	Microsoft Excel ...	1 KB
Bong 等 - 2016 - Synthesis and chara...	2025/12/26 10:51	Microsoft Excel ...	1 KB
Bong 等 - 2018 - Highly soluble polyi...	2025/12/26 10:52	Microsoft Excel ...	1 KB
Busireddy 等 - 2025 - Achieving Low ...	2025/12/26 10:53	Microsoft Excel ...	1 KB
Butnaru和Damaceanu - 2023 - The Sy...	2025/12/26 10:54	Microsoft Excel ...	1 KB
Chang - 2020 - Equibiaxially stretcha...	2025/12/26 10:54	Microsoft Excel ...	1 KB
Chao - 2018 - Synthesis and Characte...	2025/12/26 10:55	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2016 - High thermal stable ...	2025/12/26 10:56	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2020 - Improvement in Me...	2025/12/26 10:57	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2020 - Novel soluble and th...	2025/12/26 10:57	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2020 - The synthesis and ch...	2025/12/26 10:58	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2021 - Homopolyimides co...	2025/12/26 14:48	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2021 - Novel semi-N-meth...	2025/12/26 14:48	Microsoft Excel ...	1 KB
Chen 等 - 2025 - Innovative Fluorinat...	2025/12/26 14:49	Microsoft Excel ...	1 KB

配合DeepImide-A智能体，成功批量理解并处理661篇文献，均成功输出物性数据表

包含了多种PI的热学、光学性能

Colorless transparent and thermally stable terphenyl polyimides with various small side groups for substrate application

Yunzhi Fang [a], Xiaojie He [b], Jun-Chen Kang [a], Le Wang [a], Tong-Mei Ding [a], Xuemin Lu [a], Shu-Yu Zhang [a,c,*], Qinghua Lu [a,*]

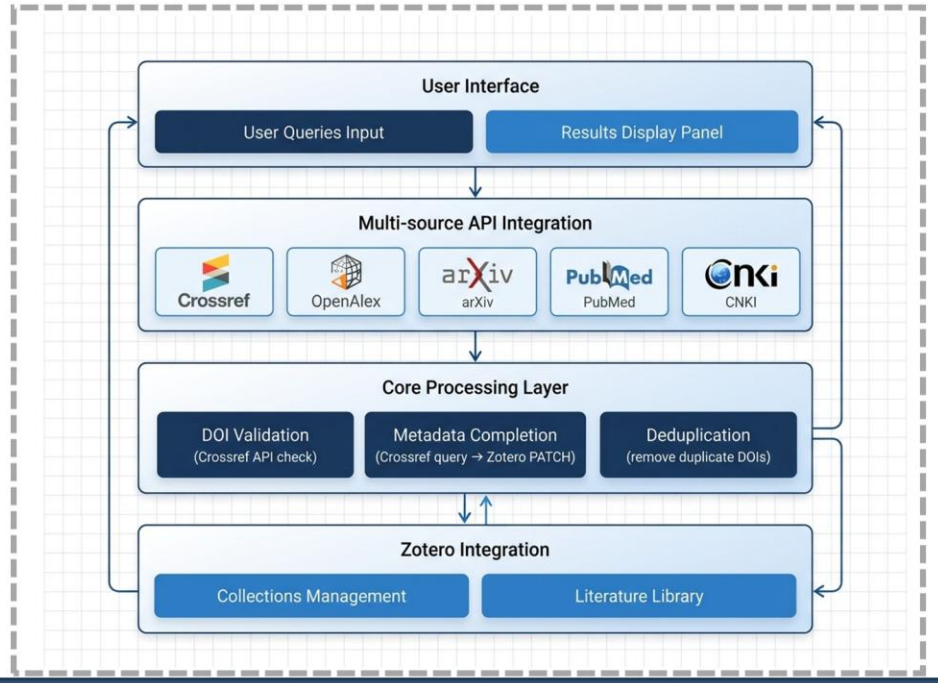
material	Td5	Td10	Tg	CTE	λcut-off	T400	T450	T500	T550	YI	σmax	E	εb
PI-2	528		345	51	320	84			90	1.45	95	3	4.1
PI-3	490		361	49	309	84			90	1.72	113	3.1	4
PI-4	511		339	44	356	68			88	3.64	102	2.5	6.6
PI-5	504		391	40	349	30			87	5.22	108	2.2	14.2
PI-6	498		396	35	318	73			87	2.6	125	2.8	5.5
PI-7	500		407	42	305	81			88	1.48	96	2.8	3.8
PI-8	502		413	34	305	81			88	1.66	158	3.4	5.4
PI-9	579		388	40	349	80			89	1.97	141	2.8	6.3
PI-10	570		396	40	342	84			89	1.5	145	3.4	4.9
PI-11	508		420	38	340	84			89	1.53	148	3.2	4.9
PI-12	531		452	35	391	1			86	29.79	164	3.1	8.3
PI-13	527		458	31	340	3			87	27.89	173	4.9	5
PI-14	533		435	37	345	42			88	6.96	155	3	7
PI-15	545		436	35	341	48			89	5.95	164	2.4	6

全部提取成功

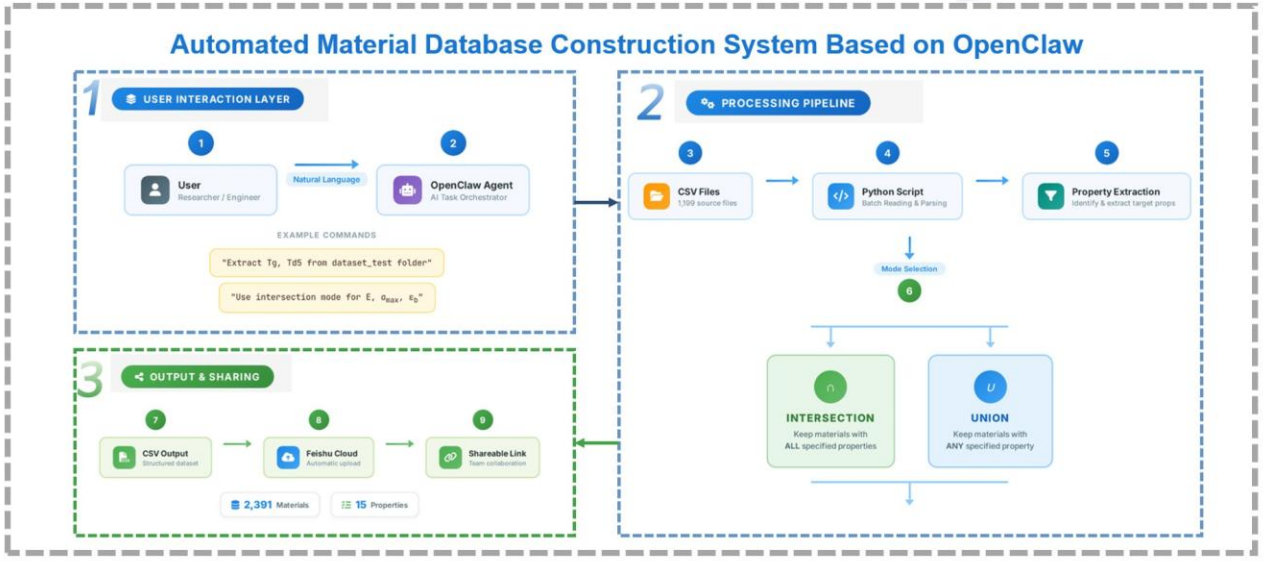
1.3 总结

批量下载文献 → 提交智能体处理 → 理解化学结构图像并转化为SMILES / 理解文字部分并提取物性数据 → 自动整理在一个.csv文件中

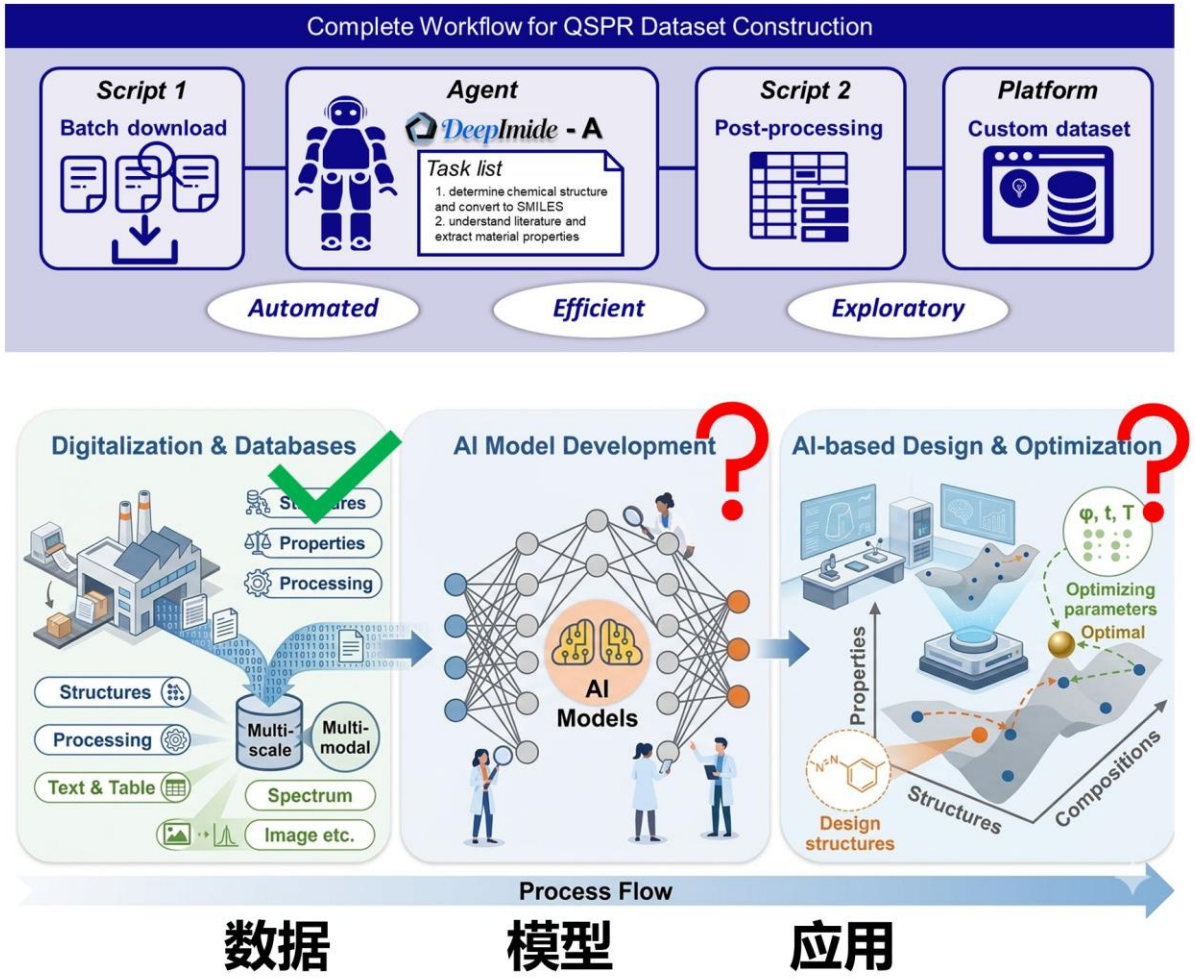
1 在openclaw上完成自动化文献搜集与下载



2 在openclaw上完成数据集的自定义构建



2. PIClaw——计算智能体的搭建与训练



在前期相关工作中，我们利用DeepImide-A完成了一些QSPR数据库的半自动化构建，得到了一些机器学习的前期数据。

DeepImide → PIClaw

在此基础上，进一步探索**“从数据到模型预测到应用”**的完整机器学习流程，目标是通过训练PIClaw实现**自动化的ML建模与预测**。让计算智能体自己做“机器学习”。
想做到这一点，需要先让**PIClaw**学习相应知识。

2.1.1 自动化ML建模与预测： Rdkit+Sklearn库训练

专业知识训练

scikit learn

RDKit

学习权威知识，自己总结重要知识，放入分区记忆（memory的子文件夹）

rdkit	文件夹
ml_workflow	文件夹
sklearn	文件夹
gaussian	文件夹

)enclaw/workspace/memory/sklearn

名称	大小	类型
..		
README.md	3KB	Markdow...
10_advanced_topic...	23KB	Markdow...
09_feature_selectio...	5KB	Markdow...
08_other_models.md	4KB	Markdow...
05_model_evaluatio...	5KB	Markdow...
07_preprocessing.md	3KB	Markdow...
06_tuning_skills.md	5KB	Markdow...
04_ensemble.md	2KB	Markdow...
03_tree.md	1003 Bytes	Markdow...
02_svm.md	1KB	Markdow...
01_linear_models.md	3KB	Markdow...

学习过程

可以，但在此之前，请你先学习一下sklearn的相关课程，在这个网址里面： 1. Supervised learning — scikit-learn 1.8.0 documentation - scikit-learn 机器学习库。我希望你从里面汲取很多专业且深入的知识，同样的，边学你要边整理记录总结，不断完善补充你记忆里的这个分区，获取一些系统性的有用的信息和关键知识，你可以多学一会，试着让自己专注，不要随便终止任务，这次试试专注30分钟，慢慢学。

scikit-learn.cn

1. Supervised learning — scikit-learn 1.8.0 documentation - scikit-learn 机器学习库
跳过至主要内容 Ctrl + K 安装 用户指南 API 示例 社区 入门 发布历史 术语表 开发 常见问题 支持 相关项目 路线图 治...

我的学习成果：

知识分区	文件	内容	行数
线性模型	01_linear_models.md	LinearRegression, Ridge, Lasso, ElasticNet, LogisticRegression	131
支持向量机	02_svm.md	SVC, SVR, LinearSVC, 核函数(rbf, linear, poly)	58
决策树	03_tree.md	DecisionTreeClassifier/Regressor, 剪枝, 可视化	46
集成方法	04_ensemble.md	RandomForest, GradientBoosting, HistGradientBoosting, Voting, Stacking	88
模型评估	05_model_evaluation.md	cross_val_score, GridSearchCV, 评估指标, Pipeline	117

共 453 行笔记，已保存到 `memory/sklearn/` 分区

我现在希望你下载rdkit库并学习，你能看到The RDKit Book — The RDKit 2025.09.6 documentation RDKit Cookbook — The RDKit 2025.09.6 documentation这两个链接吗，这些是教程，请你重点学习SMILES-特征描述符转化，同样建立一个rdkit的记忆分区，为我实时你的学习过程。

1 条回复

RDKit 学习完成！
已创建记忆分区 `memory/rdkit/`，包含：

文件	内容
`01_basics.md`	基础操作：分子读写、SMILES→mol
`02_fingerprints.md`	分子指纹：Morgan(ECFP)、MACCS、Atom Pairs
`03_descriptors.md`	分子描述符：210种描述符计算
`04_workflow.md`	完整工作流：SMILES→特征→ML
`README.md`	索引和快速参考

核心技能

1. 分子指纹（用于ML特征）

```
# Morgan (ECFP4) - 最常用
fp = AllChem.GetMorganFingerprintAsBitVect(mol, radius=2, nBits=
```

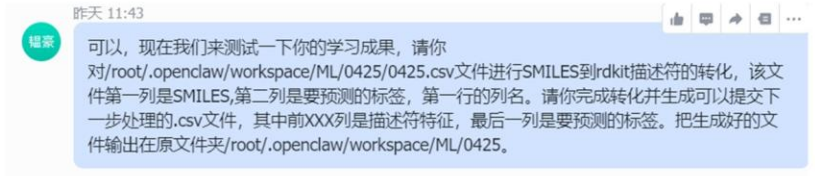
2. 分子描述符

```
# 基础描述符
Descriptors.MolWt(mol)       # 分子量
```

2.1.2 自动化ML建模与预测：描述符生成、特征工程

A	B
[H]c1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	260
[H]c1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	255
[H]c1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	230
[H]c1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	254
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	240
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	235
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	245
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	235
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	226
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	225
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(c1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	221
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)C	265
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)C	236
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)C	247
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)(C)C)(C)C	253
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)(C)C)(C)C	246
[H]c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)C(c1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)ccc(c2)Oc1ccc2c(c1)cc(cc2)Oc1ccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H])(C)(C)C)(C)C	246
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	229
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	228
[H]c1ccc(cc1)Oc1cccc(c1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	208
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	227
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1ccc2c(c1)ccc(c2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	230
[H]c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)c1ccc(cc1)Oc1ccc(cc1)N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1ccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	231
[H]N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)c1c(C)cc(cc1C)Cc1cc(C)c(c(c1)C)[H]	281
[H]N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)c1c(C)cc(cc1C)Cc1cc(C)c(c(c1)C)[H]	265
[H]N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)cc(cc2)Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)c1c(C)cc(cc1C)Cc1cc(C)c(c(c1)C)[H]	272
[H]N1C(=O)c2c(C1=O)cc(cc2)Oc1cc2ccccc2cc1Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)c1c(C)cc(cc1C)Cc1cc(C)c(c(c1)C)[H]	308
[H]c1cc(cc(c1)C(F)(F)F)N1C(=O)c2c(C1=O)ccc(c2)Oc1cccc2c1cccc2Oc1cccc2c(c1)C(=O)N(C2=O)[H]	250

基于DeepImide-A从文献中半自动化收集了**600个聚酰亚胺的实验Tg数据**



通过**自然语言下达指令。**进行SMILES至描述符的转化

1. 数据集转换 (SMILES → 描述符)

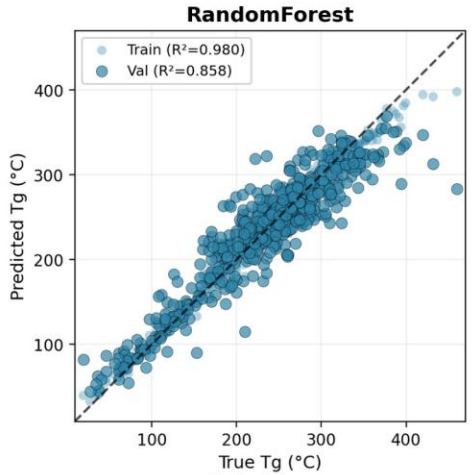
```
1 t Chem
2 import Descriptors
3 scriptors import MoleculeDescriptors
4
5  = [x[0] for x in Descriptors._descList]  # 210个
6 eculeDescriptors.MolecularDescriptorCalculator(descriptor_names)
7 alculator.CalcDescriptors(mol) for mol in mols]
```

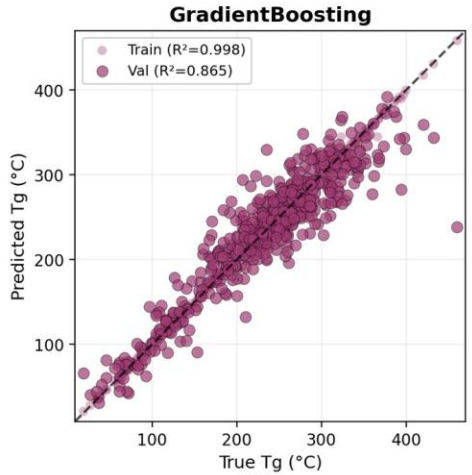
采用 **RDKit** 分子描述符计算工具，将 SMILES 分子结构转换为 210 维的RDKit分子描述符

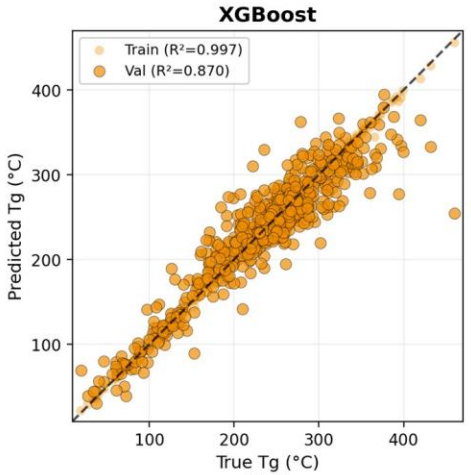
MaxAbsEs	MaxEStat	MinAbsES	MinEState	qed	SPS	MolWt	HeavyAto	ExactMolV	NumValer	NumRadi	MaxPartia	MinPartia	MaxAbsP
13.14118	13.14118	0.265951	-0.4579	0.277448	13.85	526.504	508.36	526.1165	192	0	0.265782	-0.4567	0.456699
13.20605	13.20605	0.231972	-0.48395	0.277448	13.85	526.504	508.36	526.1165	192	0	0.265782	-0.4534	0.453398
13.03891	13.03891	0.287477	-0.44042	0.277448	13.85	526.504	508.36	526.1165	192	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.06787	13.06787	0.278141	-0.44801	0.277448	13.85	526.504	508.36	526.1165	192	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.48588	13.48588	0.236573	-0.46477	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265782	-0.45738	0.457382
13.55075	13.55075	0.203399	-0.49232	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265782	-0.45738	0.457382
13.41257	13.41257	0.24844	-0.45429	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265782	-0.45738	0.457382
13.56998	13.56998	0.2271	-0.467	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265784	-0.4573	0.457303
13.63485	13.63485	0.193926	-0.49326	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265784	-0.4573	0.457303
13.46771	13.46771	0.248021	-0.45004	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265784	-0.45733	0.457334
13.49667	13.49667	0.238967	-0.45739	0.181114	13.40426	618.601	596.425	618.1427	226	0	0.265784	-0.45733	0.457334
13.64449	13.64449	0.26006	-0.46066	0.175127	13.79592	644.683	616.459	644.1947	238	0	0.265782	-0.4567	0.456699
13.54223	13.54223	0.250589	-0.44278	0.175127	13.79592	644.683	616.459	644.1947	238	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.57118	13.57118	0.254447	-0.45056	0.175127	13.79592	644.683	616.459	644.1947	238	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.85987	13.85987	0.140523	-0.46256	0.146959	13.75862	762.862	724.558	762.273	284	0	0.265782	-0.4567	0.456699
13.75761	13.75761	0.135687	-0.44445	0.146959	13.75862	762.862	724.558	762.273	284	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.78656	13.78656	0.137725	-0.45234	0.146959	13.75862	762.862	724.558	762.273	284	0	0.265782	-0.45733	0.457334
13.7018	13.7018	0.188146	-0.49761	0.147126	13.07407	710.698	684.49	710.1689	260	0	0.265782	-0.45738	0.45738
13.56361	13.56361	0.233186	-0.46127	0.147126	13.07407	710.698	684.49	710.1689	260	0	0.265782	-0.45738	0.45738
13.72437	13.72437	0.185756	-0.49923	0.147126	13.07407	710.698	684.49	710.1689	260	0	0.265782	-0.45724	0.45724

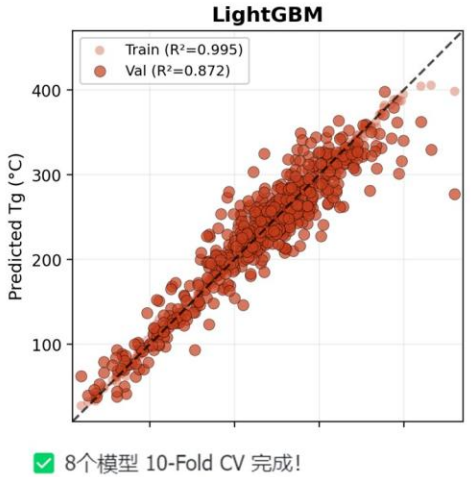
转化成功

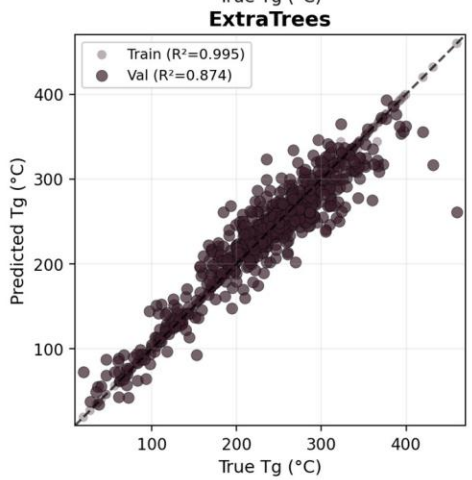
2.1.3 自动化ML建模与预测：模型性能对比

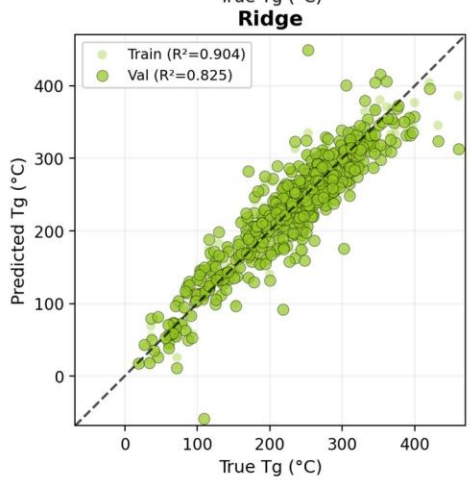


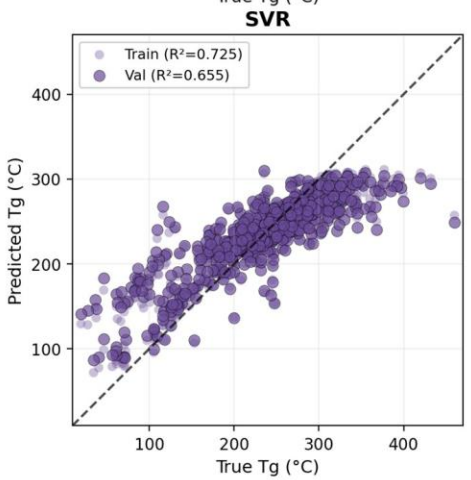












图像由Piclaw调用matplotlib seaborn库绘制

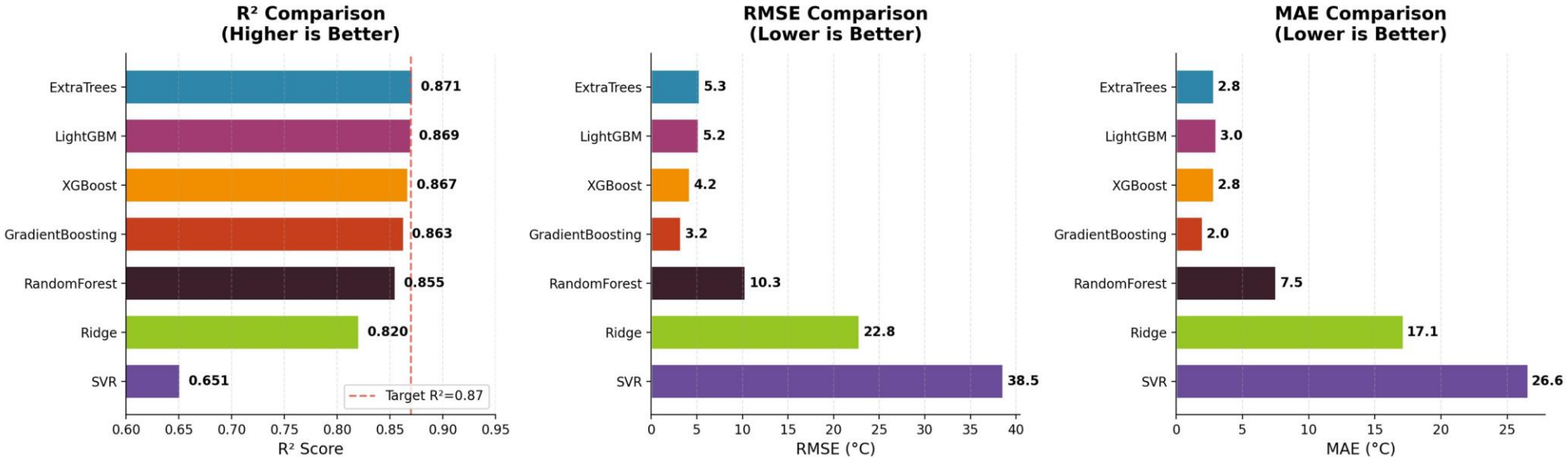
✅ 8个模型 10-Fold CV 完成!

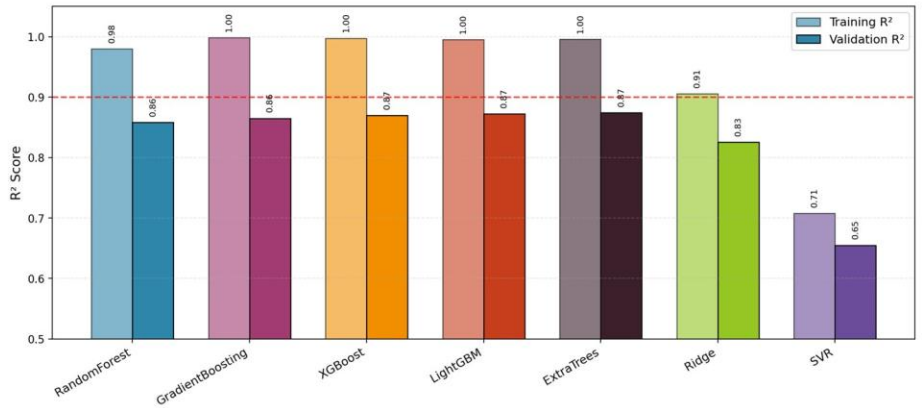
📊 结果排名

排名	模型	CV R²	RMSE (°C)	MAE (°C)
🥇	**ExtraTrees**	**0.8711**	5.25	2.83
🥈	LightGBM	0.8694	5.17	2.98
🥉	XGBoost	0.8671	4.17	2.82
4	GradientBoosting	0.8628	3.20	1.98
5	RandomForest	0.8550	10.28	7.52
6	Ridge	0.8205	22.77	17.14
7	SVR	0.6508	38.54	26.55

2.1.3 自动化ML建模与预测：模型性能对比

不同模型的R^2、RMSE、MAE对比（红线为R^2最优的Extra Trees模型，R^2=0.871）



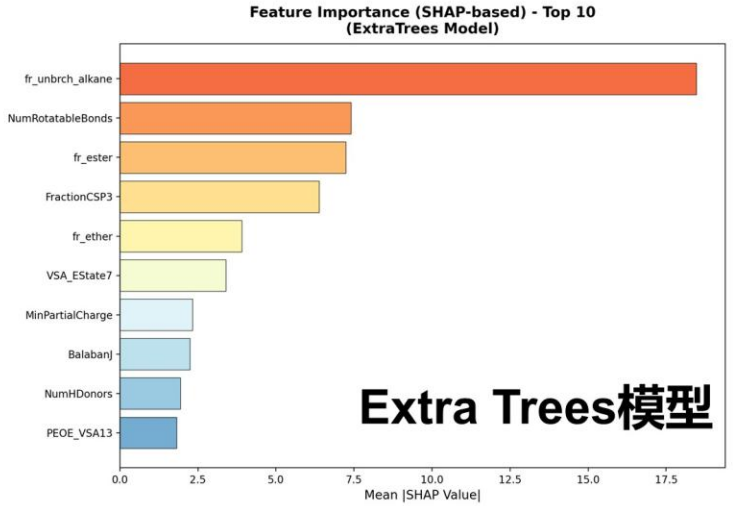


不同模型的训练集、测试集R^2对比（红线为R^2=0.9）

结论：（由PIClaw总结）

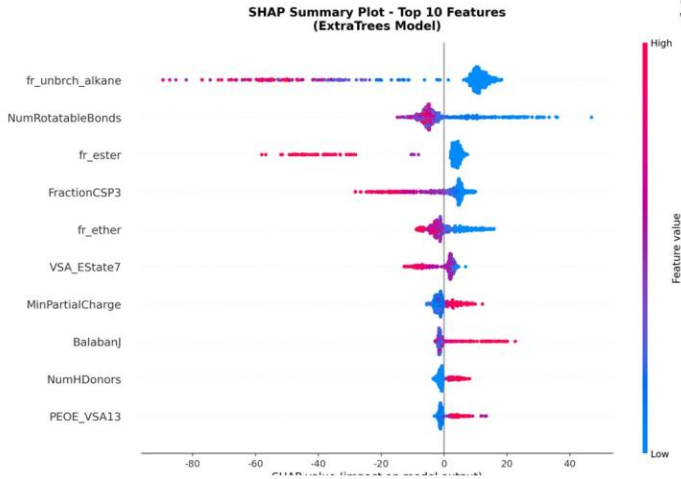
1. ExtraTrees模型的R^2最高，为0.871，但其实前四名的R^2都比较接近，预测精度都较高。Top-4均为树集成方法，$R^2 \geq 0.863$。
2. 从误差的角度看，GradientBoosting的RMSE（3.20°C）和MAE（1.98°C）均为最低，预测精度最高；XGBoost次之。
3. SVR的R^2仅为0.651（最低），预测不够精确。
4. Top-4模型平均可进一步提升泛化能力。

2.1.4 自动化ML建模与预测：可解释性分析



重要性得分最高的描述符

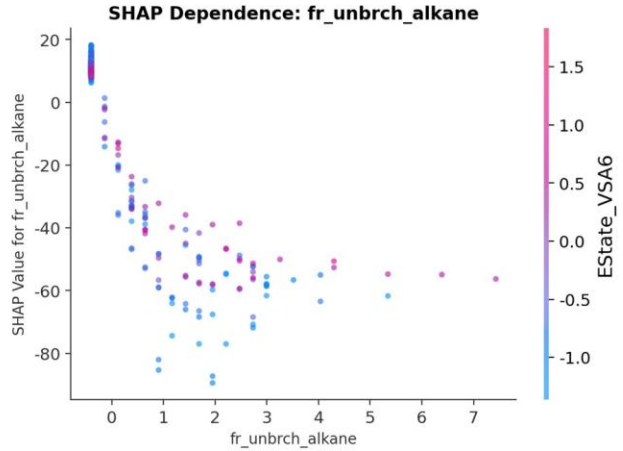
- fr_unbrch_alkane：**非支链烷烃占比**
- NumRotatableBonds：**可旋转键数量**
- fr_ester：**酯基数量**
- FractionCSP3：**sp^3杂化碳原子的比例**



SHAP分析

fr_unbrch_alkane、NumRotatableBonds、fr_ester、 FractionCSP3均与T_g呈**负相关**

MinPartialCharge (电荷分布不均匀性)、 BalabanJ (高度支链化或环状结构)、NumHDonors (氢键供体原子数量)等均与T_g呈**正相关**



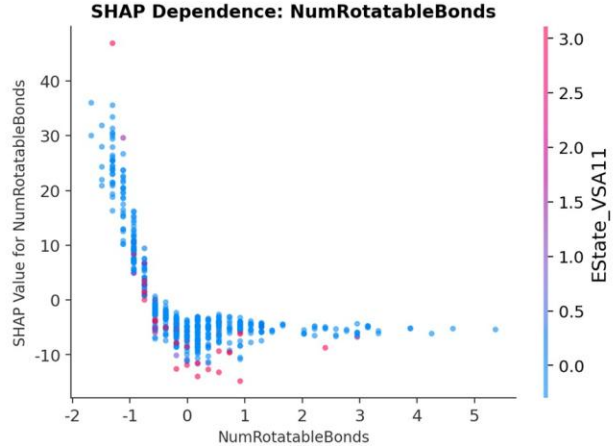
非支链烷烃占比提升

↓

柔性提升

↓

T_g下降



可旋转键增多

↓

链段运动容易

↓

T_g下降

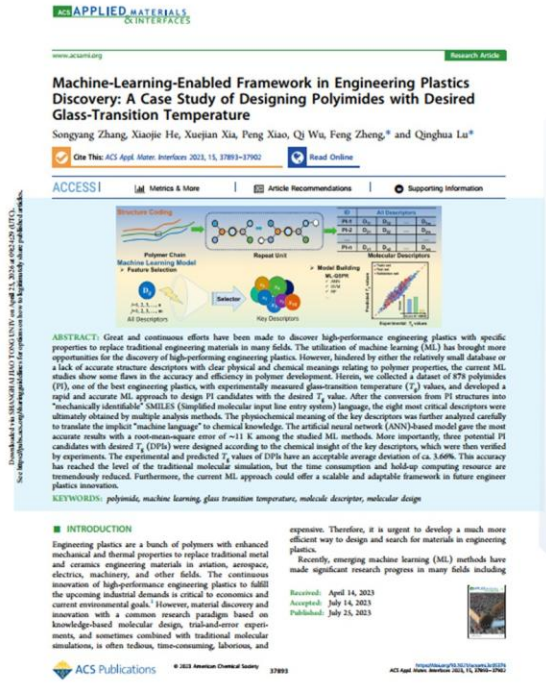
2.1.4 自动化ML建模与预测：可解释性分析

辉豪

很好，现在你用之前学到的阅读分析SCI论文的pdf文件的能力，仔细阅读理解并分析/root/.openclaw/workspace/ML/0425/machine-learning-enabled-framework-in-engineering-plastics-discovery-a-case-study-of-designing-polyimides-with-desired.pdf文献，重点看其中的可解释性分析部分，并跟你自己做的结果做比对，看看其中的异同点。你有二十分钟的时间来慢慢分析，系统性研读，把过程为我实时展示出来。

1 条回复

与文献已有结果做比较：使用之前培养过的能力使其深入理解文献，比较其异同，**形成新的知识**



ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES

Research Article

Machine-Learning-Enabled Framework in Engineering Plastics Discovery: A Case Study of Designing Polyimides with Desired Glass-Transition Temperature

Songyang Zhang, Xiaojie He, Xuejian Xia, Peng Xiao, Qi Wu, Feng Zheng,* and Qinghua Lu*

Cite This: ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, 15, 37893−37902 | Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recommendations | Supporting Information

ABSTRACT: Great and continuous efforts have been made to discover high-performance engineering plastics with specific properties to replace traditional engineering materials in many fields. The utilization of machine learning (ML) has brought more opportunities for the discovery of high-performing engineering plastics. However, hindered by either the relatively small database or a lack of accurate structure descriptors with clear physical and chemical meanings relating to polymer properties, the current ML studies show some flaws in the accuracy and efficiency in polymer development. Herein, we collected a dataset of 878 polyimides (PI), one of the best engineering plastics, with experimentally measured glass-transition temperature (T_g) values, and developed a rapid and accurate ML approach to design PI candidates with the desired T_g value. After the conversion from PI structures into "mechanically identifiable" SMILES (Simplified molecular input line entry system) language, the eight most critical descriptors were ultimately obtained by multiple analysis methods. The physicochemical meaning of the key descriptors was further analyzed carefully to translate the implicit "machine language" to chemical knowledge. The artificial neural network (ANN)-based model gave the most accurate results with a root-mean-square error of ∼11 K among the studied ML methods. More importantly, three potential PI candidates with desired T_g (DPIs) were designed according to the chemical insight of the key descriptors, which were then verified by experiments. The experimental and predicted T_g values of DPIs have an acceptable average deviation of ca. 3.60%. This accuracy has reached the level of the traditional molecular simulation, but the time consumption and hold-up computing resource are tremendously reduced. Furthermore, the current ML approach could offer a scalable and adaptable framework in future engineer plastics innovation.

KEYWORDS: polyimide, machine learning, glass transition temperature, molecule descriptor, molecular design

INTRODUCTION

Engineering plastics are a bunch of polymers with enhanced mechanical and thermal properties to replace traditional metal and ceramics engineering materials in aviation, aerospace, electrics, machinery, and other fields. The continuous innovation of high-performance engineering plastics to fulfill the upcoming industrial demands is critical to economics and current environmental goals.[1] However, material discovery and innovation with a common research paradigm based on knowledge-based molecular design, trial-and-error experiments, and sometimes combined with traditional molecular simulations, is often tedious, time-consuming, laborious, and expensive. Therefore, it is urgent to develop a much more efficient way to design and search for materials in engineering plastics.

Recently, emerging machine learning (ML) methods have made significant research progress in many fields including

Received: April 14, 2023
Accepted: July 14, 2023
Published: July 25, 2023

ACS Publications

© 2023 American Chemical Society

深度思考

1. 8个关键描述符（按重要性排序）：
1. **PEOE_VSA1** - MOE Charge VSA Descriptor (x1)
2. **RingCount** - 芳香环数量 (x2)
3. **VSA_EState2** - VSA EState Descriptor (x3)
4. **BCUT2D_MWHI** - BCUT descriptor (x4)
5. **PEOE_VSA4** - (被删除，与x1相关性高)
6. **NumRotatableBonds** - 可旋转键数量 (x6) *
7. **Kappa3** - (被删除，与x6相关性高)
8. **MaxEStateIndex** - 最大EState索引 (x8)
9. **NumHAcceptors** - 氢键受体数量 (x9)
10. **SlogP_VSA1** - 亲脂性 (x10) *

注：* 表示对Tg有负面影响

2. 按分子间相互作用分类（表2）：

氢键形成能力（提升Tg）：
- PEOE_VSA1 (x1) - 最大贡献
- MaxEStateIndex (x8)
- NumHAcceptors (x9)

链柔性（降低Tg）：
- NumRotatableBonds (x6) - 最大负面影响 31.9%
- SlogP_VSA1 (x10) - 负面影响

其他：
- VSA_EState2 (x3) - 5.6%
- BCUT2D_MWHI (x4) - 4.9%

3. 模型性能：
- 最佳模型：ANN
- RMSE: ~11 K
- R²: 0.974 (测试集)

三者对比分析 - 核心结论

关键发现

1. 三者共识（高度一致）

特征	论文	我们的ExtraTr...	我们的XGBoost
NumRotatable Bonds	第2	第2	第2
FractionCSP3	第3	第4	第10

核心结论: 分子柔性（可旋转键数量）是决定 Tg 的最关键因素，这一结论在三个模一致。

2. 差异点

模型	最看重的特征	特点
论文	TPSA (极性表面积)	关注氢键作用
我们的ExtraTrees	**fr_unbrch_alkane** (非支链烷烃)	关注链柔性
我们的XGBoost	**fr_unbrch_alkane** (非支链烷烃)	关注链柔性

差异原因:
- 论文特征集侧重极性/氢键描述符
- 我们的特征集侧重分子柔性描述符

聚酰亚胺 Tg 预测模型 - 深度可解释性分析报告

分析日期: 2026-04-26 | 模型: ExtraTrees vs XGBoost | 数据: 600样本, 129特征

一、模型性能对比

模型	10-fold CV R²	RMSE (°C)	MAE (°C)	最优参数
ExtraTrees	**0.8711**	5.25	2.83	n_estimat 0, max_d
LightGBM	0.8694	5.17	2.98	n_estimat 0, lr=0.05
XGBoost	0.8671	4.17	2.82	n_estimat 0, max_d
GradientBoosting	0.8628	3.20	1.98	n_estimat 0, max_d
RandomForest	0.8550	10.28	7.52	n_estimat 0

二、特征重要性深度分析

2.1 ExtraTrees 模型 (SHAP Top 15)

	特征	SHAP值	与Tg相关性	物理意义
	fr_unbrch_alka			非支链烷烃比例,

对比分析智能体训练出的模型和文献已有结果的相关性和差异，生成可解释性分析报告。

2.1.5 自动化ML建模与预测：高通量预测

所有模型、归一化器、筛选后的特征都被完整保留下来

..	
ExtraTrees_model.j...	17.29MB
imputer.joblib	5KB
LightGBM_model.jo...	640KB
Ridge_model.joblib	2KB
feature_names.joblib	3KB
GradientBoosting_...	686KB
XGBoost_model.job...	660KB
RandomForest_mo...	14.66MB
scaler.joblib	5KB
SVR_model.joblib	991KB

待筛选的800个新 PI 结构的SMILES码

HTS.csv

采用ExtraTrees和XGBoost对800个结构进行高通量预测

完成！ ✅ 高通量预测成功

预测结果

统计项	ExtraTrees	XGBoost
均值	250.3 °C	259.4 °C
标准差	30.2 °C	33.1 °C
范围	166.2 ~ 374.6 °C	187.4 ~ 368.7 °C

输出文件 (`/root/.openclaw/workspace/ML/0426/`)

文件	内容
`HTS_ExtraTrees_prediction.csv`	SMILES + Tg_ExtraTrees
`HTS_XGBoost_prediction.csv`	SMILES + Tg_XGBoost
`HTS_prediction_both_models.csv`	SMILES + Tg_ExtraTrees + Tg_XGBoost + Tg_avg

🔝 Top 10 高 Tg 结构 (ExtraTrees)

排名	预测 Tg
1	374.6 °C
2	349.2 °C
3	344.2 °C

对预测结果分析：

特征	高 Tg (Top 10)	低 Tg (Bottom 10)	差异
可旋转键 (NumRotatableBonds)	2.9	11.5	**-8.6**
sp3碳比例 (FractionCSP3)	0.13	0.27	-0.14
环数 (RingCount)	5.5	7.6	-2.1
芳香环数	4.1	4.8	-0.7
TPSA (极性表面积)	79.8	127.4	**-47.6**
醚键 (fr_ether)	0.4	2.4	**-2.0**

🎯 关键发现

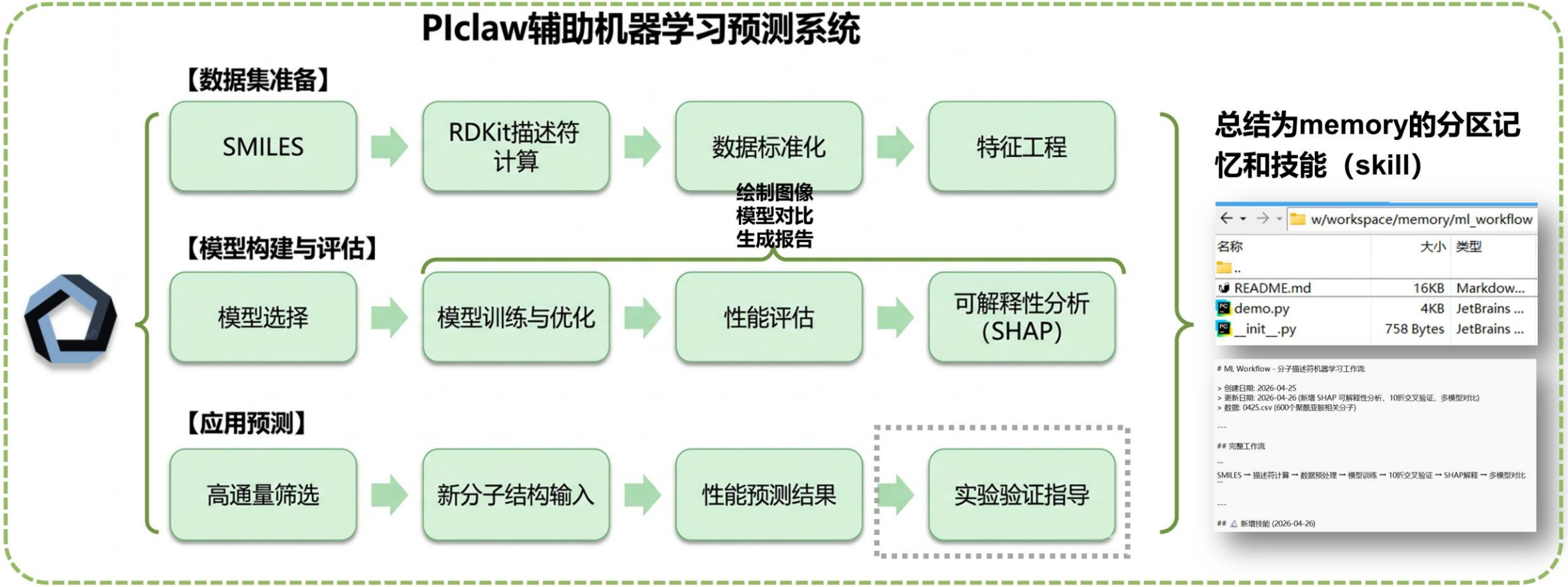
高 Tg 结构特征

1. **可旋转键少 (2.9个)**：分子刚性高，链段运动受限 → Tg 高
2. **极性表面积低 (TPSA ~80)**：含氟基团多，刚性芳香结构为主
3. **几乎无醚键**：减少柔性链段
4. **以联苯/萘环等大芳香体系为主**

低 Tg 结构特征

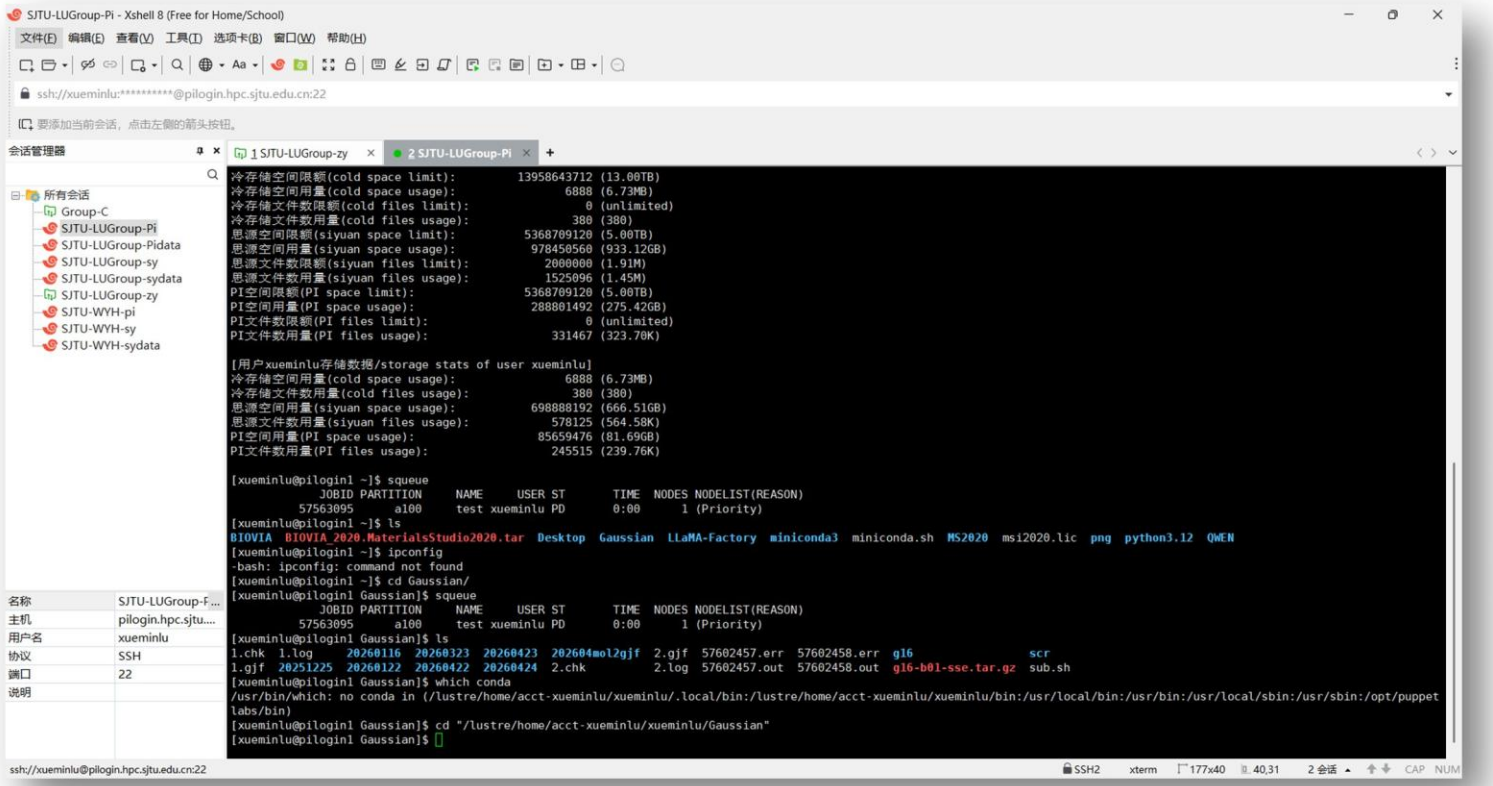
1. **可旋转键多 (11.5个)**：分子柔性好，链段易运动 → Tg 低
2. **极性表面积高 (TPSA ~127)**：含更多极性基团（醚、酯）
3. **含醚键 (fr_ether ~2.4)**：引入柔性链段
4. **含脂肪族链段**：如 -OCC-、-OCH_2CH_2- 等

2.1.6 总结



从数据集的转化到模型训练再到高通量筛选，**整体流程仅需2小时**，**全程用自然语言进行沟通**，提升了效率，降低了使用门槛

2.2 HPC集群智能化管理



新手使用 HPC 的主要困难：

- Linux 命令门槛高，需掌握命令行操作、文件权限、路径管理等
- 登录、计算、传输节点概念混淆
- 超算资源管理复杂，队列选择，核心数、内存的配置等
- 编写作业提交sbatch脚本流程繁琐
- 文件管理困难

传统方式对新手不友好，上述复杂性极大地限制了 HPC 资源的应用

2.2 HPC集群智能化管理



| 回复 魏锰豪: Host 'sylogin.hpc.sjtu.edu.cn' resolved to 111.186.43.11 . Connecting to 111.186.43.11:22 ..

看到了！这是交大 HPC 服务器：

- **地址:**
- **用户名**
- **密码:**

让我从服务器测试连接：

连接成功！

让我把这个记录下来：

已记录到 `TOOLS.md`！

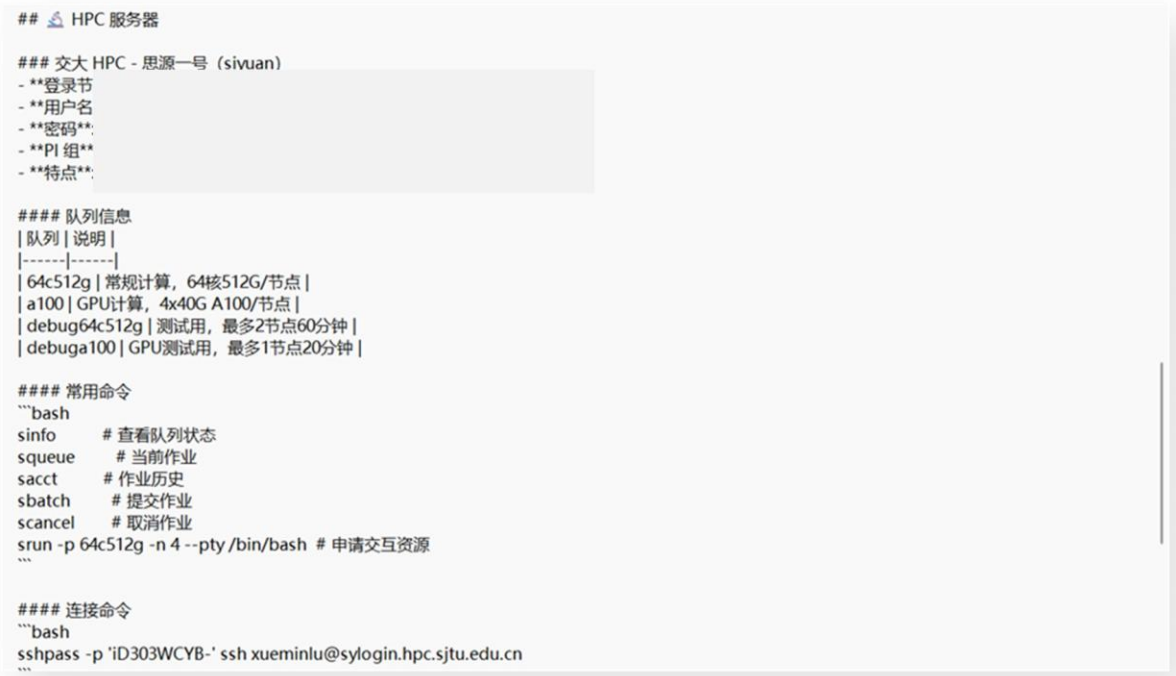
现在我可以从服务器连接到交大 HPC 了。可以帮你：

1. **查看队列状态** - `sinfo`
2. **查看当前作业** - `squeue`
3. **查看存储使用** - 已在上面显示
4. **提交作业** - `sbatch`
5. **传输文件**

现在包含两个 HPC 节点：

交大 HPC 节点汇总

节点	登录地址	用途	队列
思源一号	sylogin.hpc.sjtu.edu.cn	GPU 计算 (A100)	64c512g, a100
PI 节点	pilogin.hpc.sjtu.edu.cn	CPU 计算 (DFT/MD)	cpu, huge, dgx2



```
## HPC 服务器

### 交大 HPC - 思源一号（sivuan）
- **登录节
- **用户名
- **密码**:
- **PI 组**
- **特点**:

#### 队列信息
| 队列 | 说明 |
|------|------|
| 64c512g | 常规计算，64核512G/节点 |
| a100 | GPU计算，4x40G A100/节点 |
| debug64c512g | 测试用，最多2节点60分钟 |
| debuga100 | GPU测试用，最多1节点20分钟 |

#### 常用命令
```bash
sinfo       # 查看队列状态
squeue      # 当前作业
sacct       # 作业历史
sbatch      # 提交作业
scancel     # 取消作业
srun -p 64c512g -n 4 --pty /bin/bash  # 申请交互资源
```

连接命令
```bash
sshpass -p 'iD303WCYB-' ssh xueminlu@sylogin.hpc.sjtu.edu.cn
```
```

将致远一号 HPC 集群与思源一号节点与 PI 节点两大计算平台进行连接，并记录在PIClaw的工具文件（Tools.md）中

2.2 HPC集群智能化管理

查看排队的作业



提交作业

提交成功！🎉

任务信息：

- Job ID: **57563095**
- 队列: a100
- 节点: 1 GPU
- 用途: LLaMA-Factory WebUI

需要我帮你监控一下排队状态吗？🦀

管理文件和文件夹

✅ **整理完成！**

20260422 文件夹结构

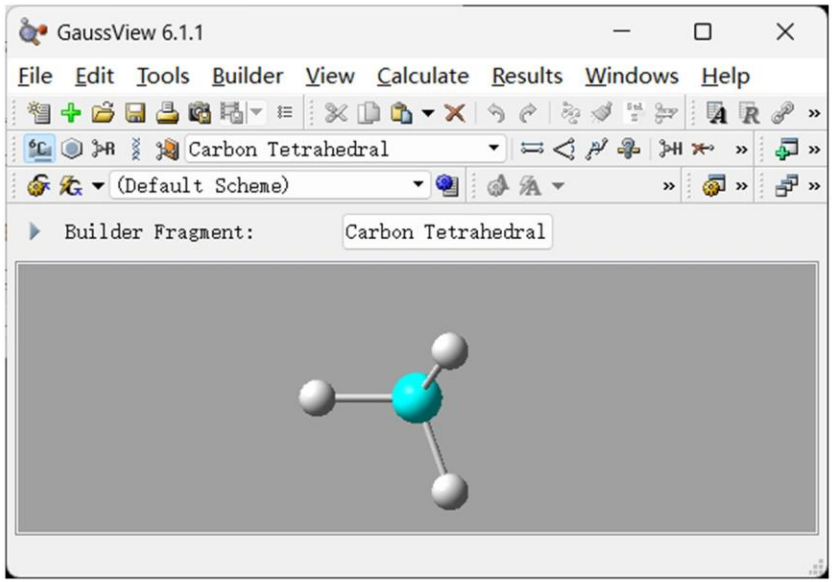
```
~/Gaussian/20260422/
├── Benzene_test_v2/          ✅ 正常结束
│   ├── Benzene_test_v2.gjf
│   ├── Benzene_test_v2.chk
│   ├── Benzene_test_v2.log
│   ├── Benzene_test_v2.fchk
│   └── run_benzene.sh
│
├── Benzene_v2/               ✅ 正常结束
│   ├── Benzene_v2.gjf
│   ├── Benzene_v2.chk
│   └── Benzene_v2.log
│
├── Benzene_fixed_v2/         ✅ 正常结束
│   ├── Benzene_fixed_v2.gjf
│   ├── Benzene_fixed_v2.chk
│   └── Benzene_fixed_v2.log
│
└── Ethylene/                 ✅ 正常结束（首次独立编写）
    ├── Ethylene.gjf
    ├── Ethylene.chk
    ├── Ethylene.log
    ├── Ethylene.fchk
    └── run_ethylene.sh
```

指令不当导致的“错误”



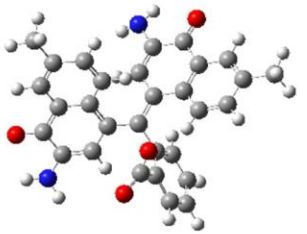


2.3 自动化DFT计算与分析（Gaussian）

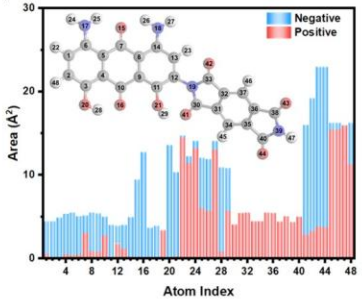


.gjf计算脚本

```
%mem=8GB
%nprocshared=32
%chk=Anthraquinone.chk
# opt freq b3lyp/6-311g(d)
scrf=(smd,solvent=dichloromethane)
em=gd3bj geom=connectivity
%mem=8GB
%nprocshared=32
%chk= Anthraquinone.chk
# TD(nstates=30) b3lyp/6-311g(d)
scrf=(smd,solvent=dichloromethane)
geom=connectivity
```



计算优化



分析结果

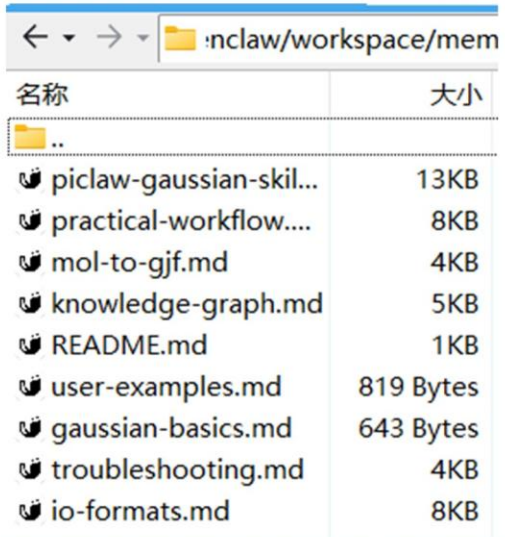
使用Gaussian 软件进行DFT计算，一个繁琐的步骤是**计算脚本文件的编写**，需要研究人员系统掌握计算化学方法论、输入文件语法、基组选择原则以及结果解读技巧，制约了材料研究中高通量计算的效率。

希望**构建基于PICIaw智能体的辅助 DFT 计算系统**，旨在将量子化学计算的完整工作流进行智能化封装，配合HPC资源，实现全自动化的DFT计算（和分析）。

2.3.1 自动化DFT计算与分析：专业知识训练

Gaussian 16 Users Reference

通过对 Gaussian 16 官方手册的自主学习，系统掌握了从分子力学到 DFT 的方法精度体系、常用泛函、基组选择原则。自己总结重要知识，放入分区记忆（memory的子文件夹）



学习与深度学习过程



Gaussian 16 输入文件 (.gjf) 结构详解

我找到了服务器上的官方文档 `~/Gaussian/g16/doc/formchk.txt` Gaussian 的结构。

完整的输入文件结构：

```
┌──────────────────────────────────────┐
│ 1. Link 0 命令区 (% 开头)            │
│    %mem=8GB          内存            │
│    %nprocshared=32   并行核数        │
│    %chk=1-0323.chk   检查点文件      │
├──────────────────────────────────────┤
│ 2. 路由区 (# 开头)                   │
│    # opt freq b3lyp/6-311g(d,p) ...  │
│    - opt = 结构优化                  │
│    - freq = 频率计算                 │
│    - B3LYP = DFT 泛函                │
│    - 6-311g(d,p) = 基组              │
├──────────────────────────────────────┤
│ 3. 标题行 (可选)                     │
│    moloptest                         │
├──────────────────────────────────────┤
│ 4. 电荷/自旋多重度                   │
│    0 1    (电荷=0, 自旋=1 单线态)    │
├──────────────────────────────────────┤
│ 5. 分子坐标 (Z-matrix 或 Cartesian)  │
│    C   x   y   z                     │
│    H   x   y   z                     │
```

创建记忆分区

好的！我现在开始创建 Gaussian 记忆分区文件，实时展示工作过程：

步骤 1: 创建 Gaussian 知识目录

目录创建成功。现在创建主知识文件 gaussian-basics.md

✅ 目录已创建：`memory/gaussian/`

步骤 2: 创建 Gaussian 基础知识文件

基础知识文件已创建。现在创建案例文件。

✅ 已创建：`memory/gaussian/gaussian-basics.md`

步骤 3: 创建用户的计算案例文件

用户案例已创建。现在创建输入输出文件格式的详细说明。

✅ 已创建：`memory/gaussian/user-examples.md`

步骤 4: 创建输入输出格式详解

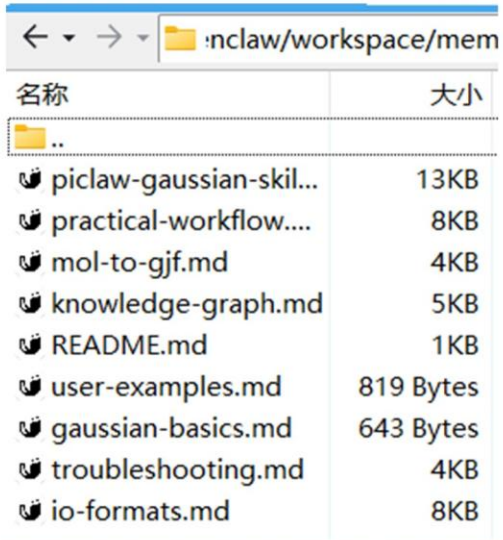
现在创建索引文件，然后更新 MEMORY.md。

✅ 已创建：`memory/gaussian/io-formats.md`

2.3.1 自动化DFT计算与分析：专业知识训练

Gaussian 16 Users Reference

通过对 Gaussian 16 官方手册的自主学习，系统掌握了从分子力学到 DFT 的方法精度体系、常用泛函、基组选择原则。自己总结重要知识，放入分区记忆（memory的子文件夹）



学习与深度学习过程

辐豪

现在我将进一步考验你pdf文件解析，自己领悟知识，学习量子计算知识，绘制知识图谱等能力。我这里有两本Gaussian软件学习手册，在/root/.openclaw/workspace/Gaussian文件夹，都是很权威很经典的守则，为了你在未来能够更加得心应手的应对DFT计算，你必须认真学习他们，仔细领悟。你可以花半小时-一小时（甚至更多）来学习，同时在学习过程中，你不要停止当前这个任务，而是一直随时实时向我汇报你的学习进度和你新学到的知识，然后记得边学习边记忆，有重要的知识一定要牢记，以方便使用，如果可以生成知识图谱，那就更好了。现在开始吧，你的时间很充裕，可以慢慢完成这个任务。

README.md　piclaw-gaussian-skills.md

troubleshooting.md　practical-workflow.md

更深层次的知识

新学到的关键知识

1. DFT 泛函家族

泛函	特点
B3LYP	最常用，3参数混合
PBE0	也叫 PBE hybrid，精度高
CAM-B3LYP	长程校正，适合电荷转移
M06-2X	meta-GGA，适合非共价作用
ωB97X-D	长程+色散校正

2. 激发态计算

- **TD-DFT**: `TD(NStates=6) B3LYP/6-31+G(d,p)`
- **CIS**: 单激发 CI
- **EOM-CCSD**: 耦合簇激发态

3. 高精度方法

- **CBS**: CBS-4M, CBS-QB3, CBS-APNO
- **G1/G2**: Gaussian-n 方法

4. 多步计算

```
# 第一步：优化
#T B3LYP/6-31G(d) Opt

--Link1--
# 第二步：频率
#T B3LYP/6-31G(d) Freq Geom=Check
```

绘制知识图谱

Gaussian 量子化学知识图谱（可视化版）

1. 层级架构图



2.3.1 自动化DFT计算与分析：专业知识训练

实例1：苯分子

猫豪 挺好，那现在你会写一些基础的.gjf文件吗，比如我想计算一个苯分子的红外光谱，你能写一个Benzene.gjf吗

1 条回复

已创建：Benzene.gjf

```
%mem=8GB                          # 内存 8GB
%nprocshared=16                   # 16 核并行
%chk=Benzene.chk                  # 检查点文件

# 路由区
# opt freq b3lyp/6-311g(d,p) geom=connectivity em=gd3bj
#  ↑结构优化   ↑频率计算  ↑DFT泛函   ↑基组          ↑色散校正

Benzene IR spectrum calculation   # 标题行（可选）
0 1                               # 电荷=0，自旋多重度=1（单线态）

# 分子坐标（Cartesian，单位：Angstrom）
# 6个C原子（苯环）
C      0.000000    1.396800    0.000000
C     -1.209000    0.698400    0.000000
C     -1.209000   -0.698400    0.000000
C      0.000000   -1.396800    0.000000
C      1.209000   -0.698400    0.000000
C      1.209000    0.698400    0.000000
# 6个H原子
H      0.000000    2.479000    0.000000
H     -2.148000    1.239500    0.000000
H     -2.148000   -1.239500    0.000000
H      0.000000   -2.479000    0.000000
H      2.148000   -1.239500    0.000000
```

两个输入文件都有问题：

1. **Benzene.gjf** - 缺少空行
   - 错误：`Wanted an integer as input. Found a string`
   - 原因：标题行 `Benzene IR spectrum calculation` 下面直接跟 `0 1`，中间要有空行
2. **Benzene_test.gjf** - Gaussian 崩溃
   - 错误：`segmentation violation`
   - 可能是节点或 Gaussian 配置问题

正确的格式应该是：

```
%mem=8GB
%nprocshared=32
%chk=Benzene_test.chk
# opt freq b3lyp/6-311g(d,p) geom=connectivity em=gd3bj

Benzene optimization and frequency

0 1
C     0.000000   1.396800   0.000000
...
```

注意：**Route 行 → 标题行 → 空行 → 电荷多重度 → 空行 → 坐标**

起初遇到较多问题，如**缺少空行、片段错误、键级错误**等，通过**参考标准.gjf 来修复输入文件。**

后续指导PIClaw通过输出文件中的 **“Normal termination”** 判断成功

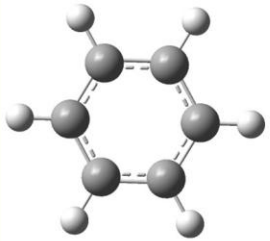
成功了！有 Normal termination！

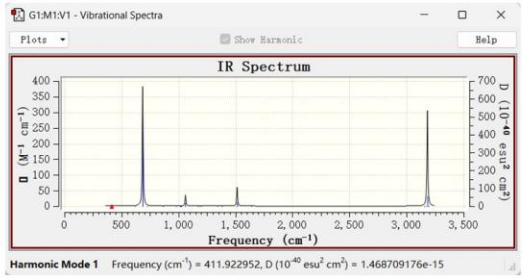
算完了！

计算成功

```
1 Normal termination of Gaussian 16 at Wed Apr 22 10:55:54 2026.
```

计算结果





实例2：乙烯分子

先总结错误经验

1. HPC 提交方式
   - ❌ 之前：交互节点后台运行 → SSH 断开后被杀死
   - ✅ 现在：**sbatch 调度系统** → 稳定运行到结束
2. 输入文件
   - 完全复制 Benzene_test.gjf（已验证可成功运行）
   - 使用 `geom=connectivity` + 正确键级 1.5
3. 已记录到记忆

`memory/gaussian/troubleshooting.md` 新增：

- 苯环 C-C 键级必须用 1.5
- HPC 作业必须用 sbatch 提交

成功了！

```
1 Normal termination of Gaussian 16 at Wed Apr 22 12
```

一次性计算成功

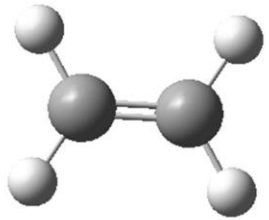
项目	值
运行时间	6 秒
文件大小	102K
状态	✅ 正常结束

让我提取结果：

完美！让我给用户一个总结。

🎉 成功了！自己写的乙烯分子输入文件

项目	值
SCF 能量	-78.6179 Hartree
零点能	133415 J/mol
频率	835 ~ 3221 cm⁻¹



2.3.2 自动化DFT计算与分析：工作流搭建

DFT建模和编写.gjf脚本的人工流程

Chemdraw绘制结构 → Materials Studio建模 → .mol文件转化为.gjf文件 → 编写计算条件，得到完整脚本上传至超算服务器 → 提交脚本运算

- **步骤繁琐**
- **需要用到的软件手段较多**
- **批量处理难度大**



现在我看懂了转化规律！让我总结一下：

从 .mol 到 .gjf 的转化规律：

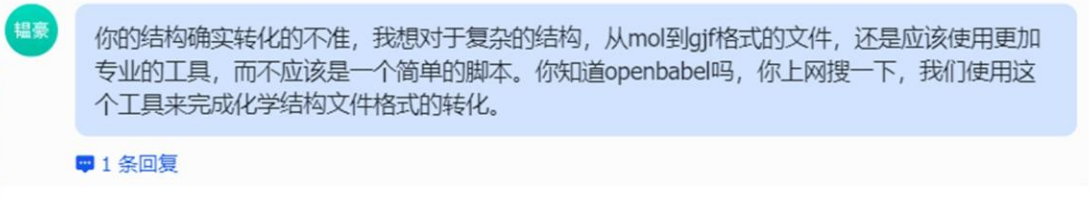
1. **文件头部 (.mol → .gjf)：**
   - .mol 有 header (3D Atomistic, MatStudio 等)
   - .gjf 有 Gaussian 头部: %mem, %nprocshared, %chk, # 行, 空行, 标题
2. **坐标提取 (.mol → .gjf)：**
   - .mol 的原子块格式: `x y z Element 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0`
   - .gjf 格式: `Element x y z` (原子序, x, y, z)
   - 按顺序：元素符号 + x坐标 + y坐标 + z坐标
3. **电荷和自旋多重度：**
   - .gjf 需要 `0 1` (电荷=0, 自旋多重度=1 singlet)
4. **键连接信息 (.mol → .gjf)：**
   - .mol 中有键信息: `3 2 4 0 0 0` (原子3-原子2, 键类型4)
   - .gjf 有 connectivity 块: `1 2 1.5 6 1.5 27 1.0` (原子1连接原子2(键级1.5), 原子6(1.5), 原子27(1.0))

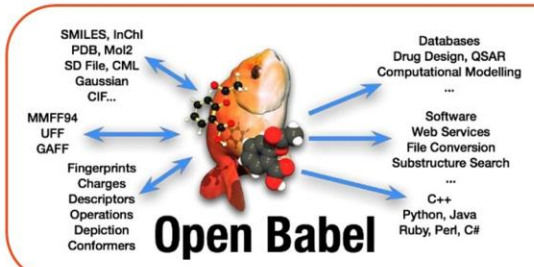
让我看看其他文件确认规律：

- 尝试让PIClaw自己理解mol文件和gjf文件的差异，通过写脚本完成格式转换

失败，脚本泛用性太差

调用Open Babel进行批量格式转化





OpenBabel 化学格式转换工具，可完成 mol、smi、pdb 等多格式到 Gaussian 输入文件的高精度转换。

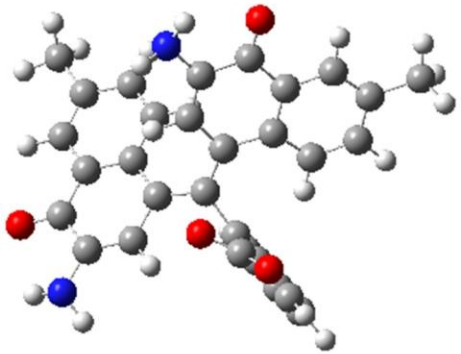
1.格式转换：支持 mol、smi、pdb、xyz、sdf、cif 等分子结构格式与 Gaussian 输入文件（.gjf）的相互转换

2.批量处理：支持通配符批量转换多个文件

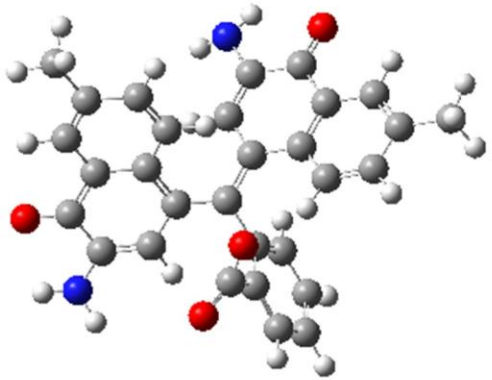
3.元数据保留：能够正确保留分子连接表（connectivity）信息，避免结构信息丢失

2.3.2 自动化DFT计算与分析：工作流搭建

实例3：



2026.04采用PIClaw自动化提交结构优化



2025.12手动提交结构优化

2026.04采用PIClaw自动化提交计算

G1:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary

Overview | Thermo | Opt

4MeNFTb		
C:/Users/lenovo/Downloads/4MeNFTb-v2.fchk		
File Type	.fch	
Calculation Type	FREQ	
Calculation Method	RB3LYP	
Formula	$C_{30}H_{22}N_2O_4$	
Basis Set	6-311G(D,P)	
Charge	-2	
Spin	Singlet	
Solvation	None	
Electronic Energy	-1567.462310	Hartree
RMS Gradient Norm	0.000014	Hartree/Bohr
Imaginary Freq	0	
Dipole Moment	9.671089	Debye
Polarizability (α)	472.246043	a.u.
Point Group		
Molecular Mass	474.157957	amu

Ok | File | Help

2025.12手动提交计算

G2:M1:V1 - Gaussian Calculation Summary

Overview | Thermo | Opt

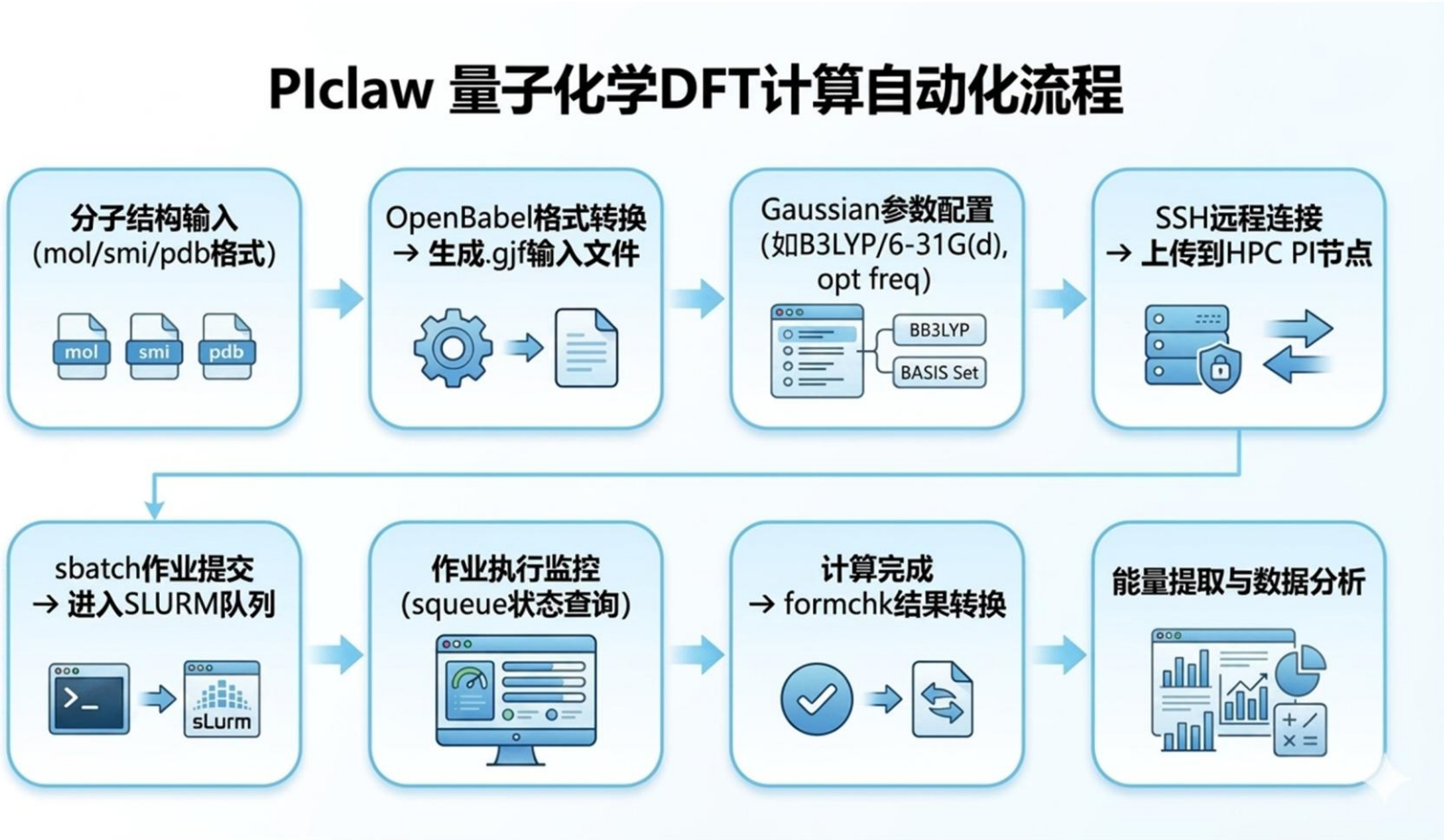
Title Card Required	
D:/GaussFiles/sp/20251229FTMOL/fchk/4MeNFTb.fch	
File Type	.fch
Calculation Type	SP
Calculation Method	RB3LYP
Formula	$C_{30}H_{22}N_2O_4$
Basis Set	TD-FC
Charge	-2
Spin	Singlet
Solvation	scrf=(smd,solvent=n,n-dimethylformamide)
Electronic Energy	-1567.478054
RMS Gradient Norm	0.000000
Imaginary Freq	
Dipole Moment	
Point Group	
Molecular Mass	474.157957

Ok | File | Help

采用PIClaw计算智能体自动化的工作流能取得和手动编写gjf文件一样的计算效果

在成功编写并提交多项计算任务后，积累了从输入文件编写、作业提交、结果审查到后处理（formchk）的完整实战经验

2.3.3 总结



计算智能体自主的
“学习-实践-验证”过程

- 学习Gaussian软件知识和量子化学知识
- 通过将知识和不同的Tools、Skills组合完成计算脚本的自动化格式转化和编写
- 通过与HPC节点配合，利用前面提到的HPC管理系统实现作业的提交、监控和提取

结果：以**自然语言指令**驱动完整的 DFT 计算流程，降低了量子化学计算的入门门槛

3.1 DeepImide-A v2.0 多智能体协同 研究框架

研究方案



前期，我们构建了基于多模态大模型的聚酰亚胺QSPR数据集构建**智能体（DeepImide）**，用于从文献中自动提取分子结构与性能数据。也尝试用**OpenClaw（PIClaw）**的一些功能来辅助DeepImide智能体，使得工作流中的环节更加智能化。

然而，随着研究的深入，我们逐渐意识到单一智能体存在的局限性。**一方面**，文献调研、数据抽取、计算等多个环节任务繁重，单一智能体难以同时胜任；**另一方面**，不同类型的任务混在一起容易导致逻辑混乱、效率低下，难以形成清晰的研究闭环。

多智能体协同 研究框架

基于此，提出 DeepImide 多智能体协同研究框架，计划训练**三个各司其职的专业化智能体**：定位分别是**计算智能体、研究智能体和写作智能体**。考虑到计算工作需要大量超算资源，因此计算智能体应部署在服务器上。剩余两个智能体计划部署在本地。

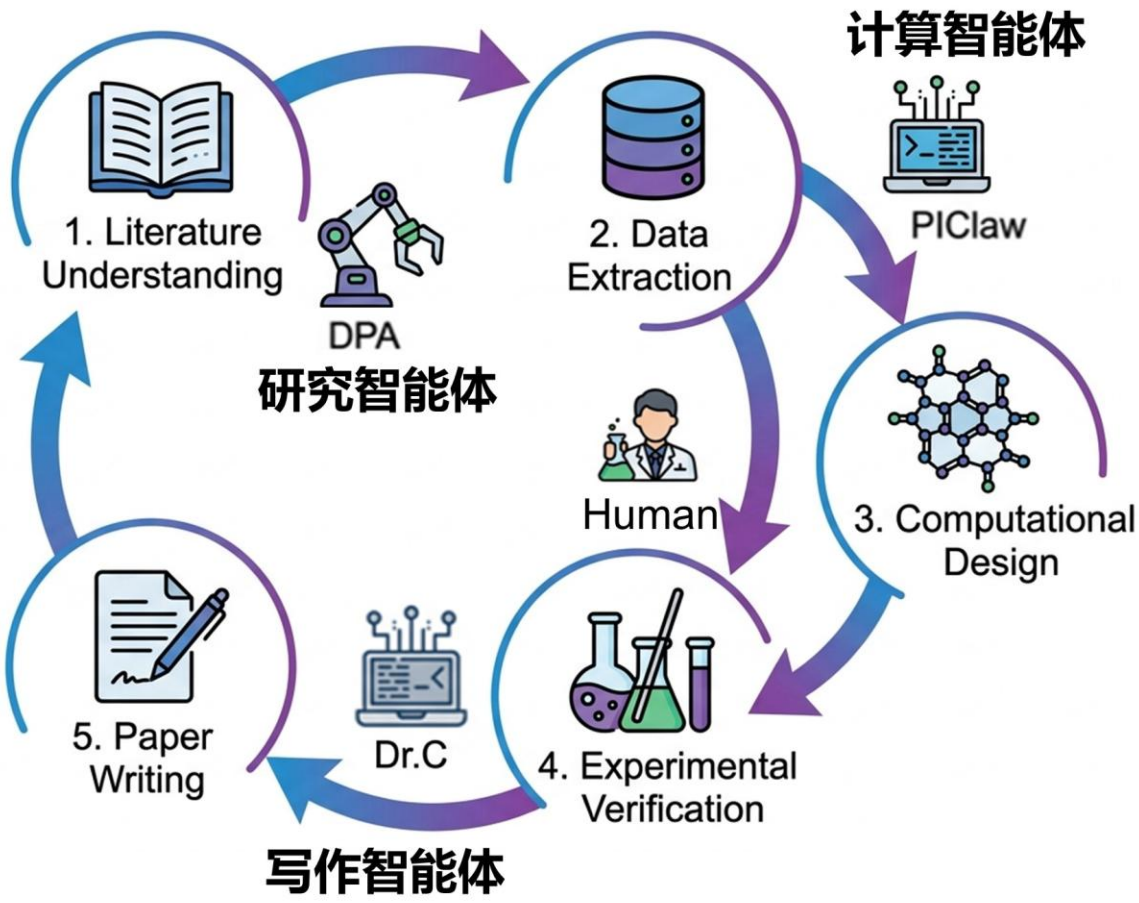
三个智能体形成**“三角”**研究框架，覆盖**“知识理解→数据抽取→计算设计→结果输出→论文撰写”**的完整研发闭环。

3.1 DeepImide-A v2.0 多智能体协同 研究框架

PIClaw计算智能体：部署于高性能计算服务器，承担数据存储、量子化学计算、机器学习模型训练、分子动力学模拟、大模型推理等计算密集型任务。

DPA研究智能体：作为本地终端的数据中枢与协调枢纽，负责原始文献的采集存储、实验数据的本地处理与分析、知识驱动的Agent构建，同时承担三个智能体之间的任务调度与信息传递功能。

Dr.C写作智能体：部署于课题组本地计算工作站，负责各类科研学术材料的撰写工作，包括 SCI 论文、专利文本、研究报告、提示词工程等。



面向PI/PSPI全流程智能化研究的最终目标

3.2 研究智能体和写作智能体的初步搭建与构思

写作智能体

Writing_Agent 机器人

组合技能方案：学术论文 Word 写作流水线

一、技能分析

技能	核心能力	论文写作中的作用
patent-disclosure-writer	信息收集流程、技术方案撰写、对话策略	结构化收集论文核心信息
nsfc-grant-writer	立项依据逻辑、摘要速成法、科学问题提炼	论文逻辑框架设计
latex	公式排版、图表引用、参考文献处理	学术内容专业化呈现
word-cn-format	标题/正文格式、图片表格规范	最终格式标准化输出

学习写作相关技能

学习学术写作语言风格、写作格式、latex公式、参考文献编排等

建立学术写作工作流

论文写作完整流程

【阶段1：信息收集】 patent-disclosure-writer

论文主题	→ 研究方向、关键词
目标期刊	→ 格式要求、篇幅限制
核心贡献	→ 创新点、技术方案
作者信息	→ 作者顺序、单位

↓

【阶段2：逻辑框架】 nsfc-grant-writer

摘要（6句法）	→ 背景、问题、方法、内容、预期、价值
立项依据	→ 为什么做、做什么
科学问题	→ 1-3个关键科学问题
技术路线	→ 怎么做、可视化流程图

↓

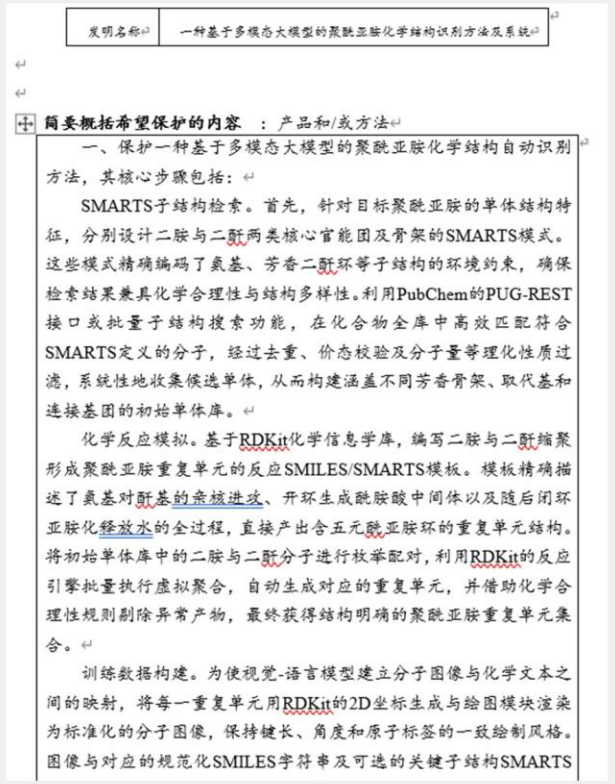
【阶段3：内容撰写】 latex（辅助公式/图表）

数学公式	→ $...$ 或 equation 环境
图表引用	→ \ref{fig:xxx} 交叉引用
参考文献	→ bibtex 或手动格式化

↓

【阶段4：格式输出】 word-cn-format

标题格式	→ 2号/3号/4号，微软雅黑
正文格式	→ 5号，1.5倍行距，首行缩进2字符
图片表格	→ 居中、编号、说明
整体检查	→ 格式一致性



发明名称 | 一种基于多模态大模型的聚酰亚胺化学结构识别方法及系统

简要概括希望保护的内容 ：产品和/或方法

一、保护一种基于多模态大模型的聚酰亚胺化学结构自动识别方法，其核心步骤包括：

SMARTS子结构检索。首先，针对目标聚酰亚胺的单体结构特征，分别设计二胺与二酐两类核心官能团及骨架的SMARTS模式。这些模式精确编码了氨基、芳香二酐环等子结构的环境约束，确保检索结果兼具化学合理性与结构多样性。利用PubChem的PUG-REST接口或批量子结构搜索功能，在化合物全库中高效匹配符合SMARTS定义的分子，经过去重、价态校验及分子量等理化性质过滤，系统性地收集候选单体，从而构建涵盖不同芳香骨架、取代基和连接基团的初始单体库。

化学反应模拟。基于RDKit化学信息学库，编写二胺与二酐缩聚形成聚酰亚胺重复单元的反应SMILES/SMARTS模板。模板精确描述了氨基对酐基的亲核进攻、开环生成酰胺酸中间体以及随后闭环亚胺化释放水的全过程，直接产出含五元酰亚胺环的重复单元结构。将初始单体库中的二胺与二酐分子进行枚举配对，利用RDKit的反应引擎批量执行虚拟聚合，自动生成对应的重复单元，并借助化学合理性规则剔除异常产物，最终获得结构明确的聚酰亚胺重复单元集合。

训练数据构建。为使视觉-语言模型建立分子图像与化学文本之间的映射，将每一重复单元用RDKit的2D坐标生成与绘图模块渲染为标准化的分子图像，保持键长、角度和原子标签的一致绘制风格。图像与对应的规范化SMILES字符串及可选的关键子结构SMARTS

人机交互撰写专利初稿

4.1 其他应用1：利用OpenClaw探索专业知识库的构建



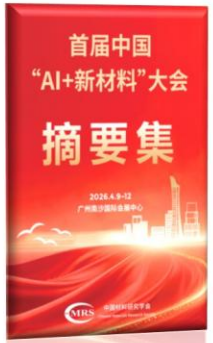
一直在探索专业知识库的构建

较优解决方案



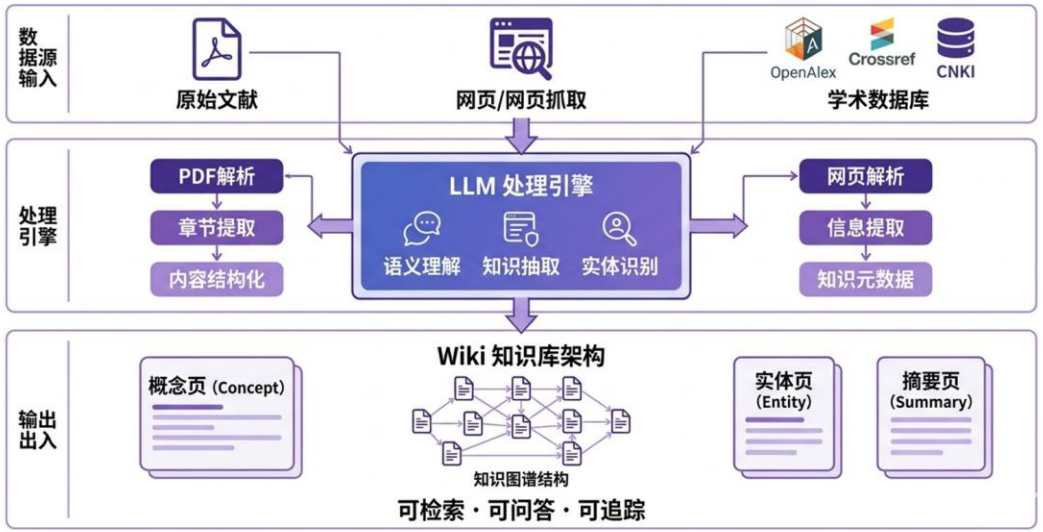
| **可执行** | 真实调用 API，不只是"说"要做什么
| **可验证** | 每个操作返回原始结果，可追溯
| **可扩展** | skill 机制让工具接入零门槛
| **可维护** | 完整记忆系统，知识库即数据源，改数据≠改模型
| **可信赖** | 权限控制到文件级别，操作可审计

4.1 其他应用1：利用OpenClaw探索专业知识库的构建



首届中国"AI+新材料"大会的**摘要集PDF文件（384页），包含6000余篇学术报告摘要，涵盖18个主题论坛。**这是一个宝贵的一手学术资料，但以PDF形式存储难以检索和利用。任务目标是将这份PDF文档转化为结构化、可检索的知识库系统。

利用llm-wiki技能



✅ **Wiki 知识库创建完成！**

已提取 **6006 篇** 报告摘要，覆盖全部 18 个论坛。

```
PI_lit/wiki/
├── index.md                    # 🗂️ 知识库首页（目录）
├── concepts/                   # 概念页
│   ├── DeepImide.md
│   └── 聚酰亚胺.md
├── entities/                   # 人物页
│
└── summaries/                  # 18个论坛摘要
    ├── 论坛一 AI 智能材料设计.md（950篇）
    ├── 论坛二 人工智能赋能材料科学与工程.md（792篇）
    ├── ...
    ├── 论坛十七 AI+ 高分子材料.md（457篇）← 你的研究方向！
    └── 论坛十八 AI+ 复合材料.md（574篇）
```

统计：

构建了一个“AI+新材料”知识库

论坛	报告数
论坛一 AI 智能材料设计	950
论坛二 人工智能赋能材料科学与工程	792
论坛十七 AI+ 高分子材料	457
论坛十八 AI+ 复合材料	574
总计	**6006**

4.2 其他应用2：利用OpenClaw整理会议报告、安排听会行程







希望从成百上千个报告中快速找到和自己方向相关的报告

4.2 其他应用2：利用OpenClaw整理会议报告、安排听会行程

分会场名称	日期	时间	报告题目
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	10:40-11:05	高性能硬质合金材料及产品的智能设计开发
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	11:05-11:30	基于大语言模型的高强韧耐蚀镁合金设计
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	11:30-11:45	多维策略驱动的材料智能化设计与研发
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	11:45-12:00	可解释可控生成模型及其在材料科学的应用
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	12:00-13:30	午休
论坛一：AI 智能材料设计（会场一）	2026-04-10	13:30-13:55	数据与计算驱动的电化学储能材料设计

Excel表格

关联度	关键词
●●● 极高	聚酰亚胺、智能数据集、DeepImide、多模态大模型、智能代理、PolyImide
●● 高	数据挖掘智能体、机器学习势函数、聚合物语言模型、生成式设计、分子设计AI、大数据驱动AI-MOF
● 中	AI+分子/高分子/聚合物、材料数据平台、机器学习预测、数据驱动
● 低	AI+能源/生物/光电/显示（非高分子特定）
○ 无	开幕式、院士致辞、期刊宣讲、茶歇

论坛十七：AI+高分子材料 ●●● （高度相关）

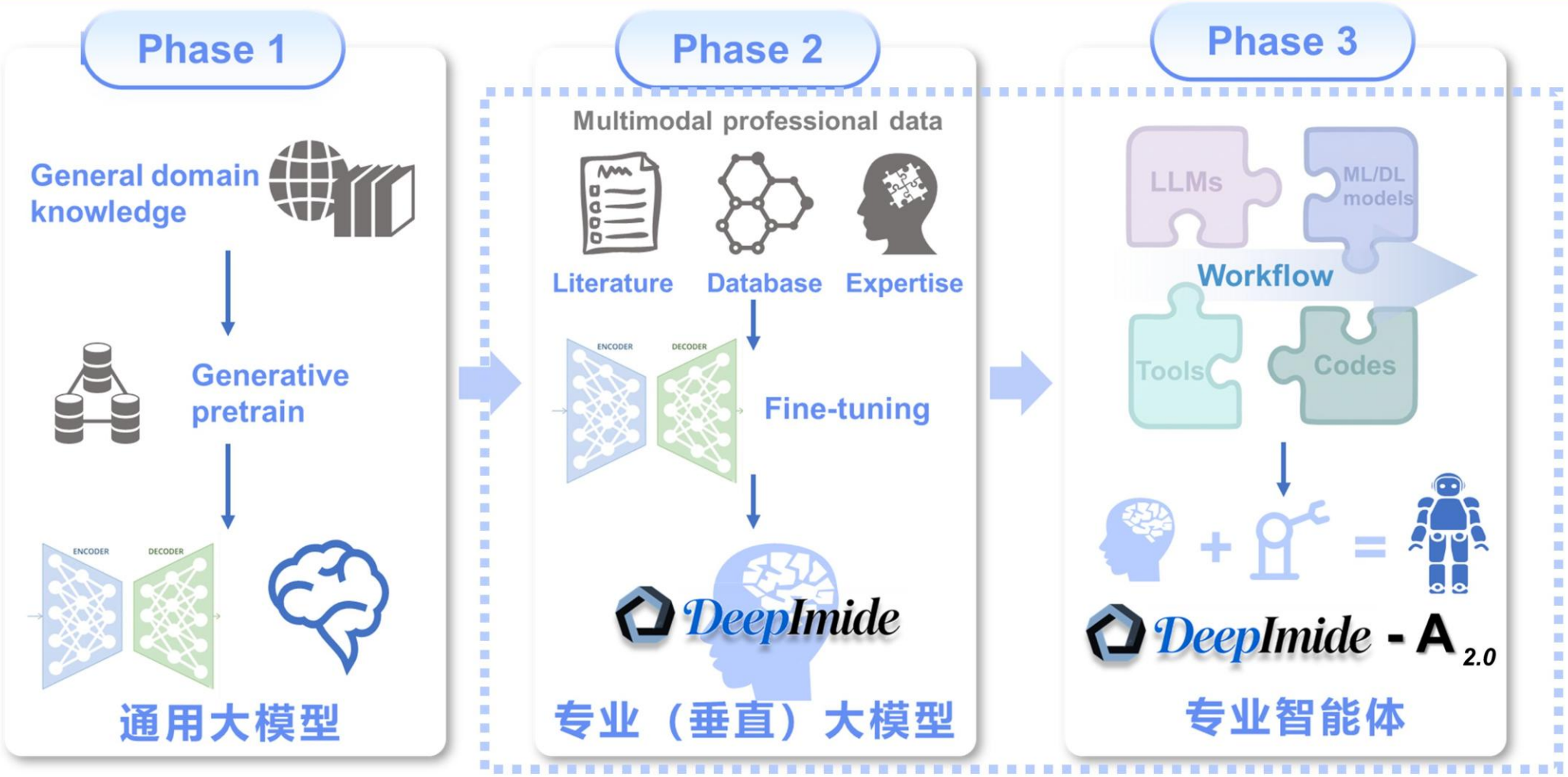
时间：04月11日 08:00-18:10 | **地点**：4层香云纱厅

时间	报告标题	报告人	单位	关联度
11:35-11:55	功能高分子复合材料的模型构建	谢兰	贵州民族大学	●
12:05-13:00	TMR&RMR期刊宣讲	学会期刊部	·	○
13:00-13:20	高分子弹性体材料人工智能研究	刘军	北京化工大学	●
13:20-13:40	AI与大数据平台在能源材料设计	汪莹	复旦大学	●
13:40-14:00	AI for Polymer Science的未来及其他	李剑锋	复旦大学	●
14:00-14:20	有机高分子材料基础数据资源建设	付腾	四川大学	●
14:20-14:40	高分子动力学的人工智能优化	王大鹏	长春应化所	●

4.2 其他应用2：利用OpenClaw整理会议报告、安排听会行程

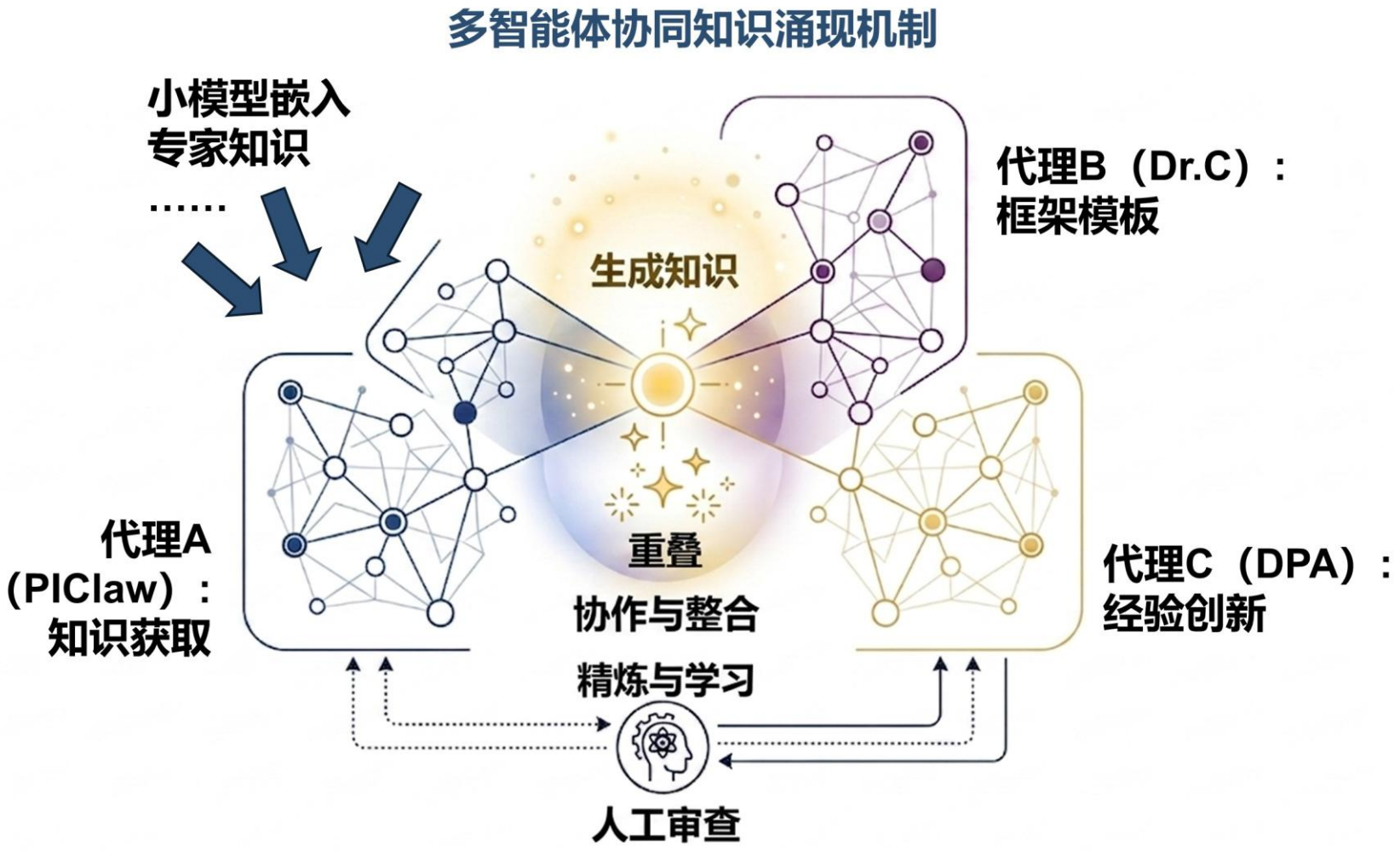
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-11**	**13:40-14:00**	**AI for Polymer Science 的未来及其他**	**李剑锋(复旦大学)**
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-11**	**14:00-14:20**	**有机高分子材料基础数据资源建设及其加速高分子研发**	**付腾(四川大学)**
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	14:20-14:40	高分子动力学的人工智能优化	王大鹏(中国科学院长春应用化学研究所)
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-11**	**14:40-15:00**	**仿生黏附水凝胶的设计 —— 从经验到数据驱动**	**范海龙(深圳大学)**
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	15:00-15:20	基于同步辐射的高分子注塑加工高通量表征装置搭建与结构演变研究	徐家壮(四川大学)
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	15:20-15:30	茶歇	待定
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-11**	**15:30-15:50**	**数据驱动加速有机光伏技术的研发与应用**	**李宁(华南理工大学)**
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	15:50-16:10	AI 赋能的有机电致发光材料设计	陈先凯(苏州大学)
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	16:10-16:30	深度学习辅助有机光伏给受体分子结构正向筛选与反向设计	高梁(华东理工大学)
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-11**	**16:30-16:50**	**人工智能辅助的水溶性耐温抗盐聚合物研究**	**殷鸿尧(四川大学)**
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	16:50-17:10	电解质体系智能设计及应用	段晓征(中国科学院长春应用化学研究所)
论坛十七：AI+高分子材料	2026-04-11	17:10-18:10	Panel discussion	林嘉平
论坛十七：AI+高分子材料	**2026-04-12**	**08:30-08:45**	**PolyExtract：大模型智能体驱动的聚合物文献数据提取系统**	**吴正浩(西交利物浦大学)**

总结



与当今大模型技术的发展阶段相对应

未来研究目标



PIClaw 将计算推导的**结构-性能关联规律**转译为可解释的语义知识传递给 DPA 与 Dr.C，DPA 将**经验和创新的知识**反馈至 PIClaw用于优化计算模型的参数空间，Dr.C则将学术写作过程中提炼的**研究范式与逻辑框架**反哺至知识库供全体智能体检索调用。

核心在于：当三个各司其职的专业化智能体形成紧密的闭环时，系统更有可能涌现出超越单一智能体能力边界的新知识，可能自动生成具有创新性的研究提案。

Thanks for your attention!