

人工智能赋能功能陶瓷研发范式的破局逻辑与重塑路径

刘润林¹, 景一洋¹, 俞 果¹, 高小天¹, 王 建¹, 沈忠慧¹, 沈 洋²

(1. 材料复合新技术全国重点实验室, 武汉理工大学材料与微电子学院, 武汉 430070;

2. 新型陶瓷材料全国重点实验室, 清华大学材料学院, 北京 100084)

摘 要: 功能陶瓷具备优异的多功能耦合响应特性, 是支撑高端智能技术发展的关键无机材料。然而, 其性能设计与优化同时受多目标性能权衡、多尺度结构关联以及多物理场耦合效应的“三多”困境共同制约, 使功能陶瓷材料设计空间呈现出高维、强约束与高度非线性特征, 导致传统依赖经验试错与正向迭代的研发模式效率不高、可迁移性不足。近年来, 人工智能(AI)通过整合数据驱动方法与物理约束建模, 推动材料研发由正向预测逐步向逆向设计与闭环优化转变, 为破解功能陶瓷长期存在的“三多”困境提供了新的技术路径。基于此, 本综述从数据、模型与场景应用 3 个核心层面, 系统梳理了 AI 赋能功能陶瓷研发的研究进展与共性挑战, 并进一步围绕逆向反演决策模型、跨尺度智能计算方法以及大语言模型驱动的协同研发平台 3 条主线, 总结了 AI 赋能功能陶瓷研发的破局逻辑与内在方法框架。最后, 面向功能陶瓷材料-工艺-器件一体化的智能研发需求, 总结了当前的发展趋势与未来应用前景。

关键词: 功能陶瓷; 逆向设计; 生成模型; 智能计算; 大模型

中图分类号: TB34 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)07-2352-11

网络出版时间: 2026-04-27



功能陶瓷作为电-磁-力-热-光等多场耦合与响应的关键无机材料, 已成为能量转换、信息存储、智能传感等高端智能技术的基础支撑材料^[1-3]。随着全球高端装备和前沿科学技术的飞速发展, 功能陶瓷的综合性能需求被同步推高, 这使得材料设计在组分、结构与工艺等方面不断向更极端条件拓展。因此, 实现兼具高性能与高稳定性的多功能耦合新型陶瓷材料, 是无机非金属材料领域长期关注的核心目标。然而, 功能陶瓷研发面临着相互交织的“三多”困境(图 1), 即多目标、多尺度与多物理场效应并存与耦合。在多目标优化方面(图 1a), 性能参数、工艺可行性与服役可靠性等关键指标之间通常存在内在制约关系, 不同目标之间往往呈现竞争或耦合关系。材料体系的可达状态受到物理边界与工艺窗口的共同约束, 从而形成一个受限的可行域(feasible space)。因此, 材料设计问题本质上是在该受限空间内进行多目标权衡与协同优化, 而非对单一性能指标的无限提升^[4-5]。在多尺度方面

(图 1b), 宏观功能响应由电子结构、晶格、物相组成及显微组织等不同层级的跨尺度因素共同决定, 不同尺度之间的相互反馈与协同演化显著放大了微小尺度扰动对宏观性能的影响^[6-8]。同时, 组分、结构与工艺参数在多尺度上的组合变化, 使材料性能响应空间呈现高度扩展与非线性特征, 传统依赖经验和假设演绎的设计方法难以实现高效覆盖^[2]。在多物理场方面(图 1c), 高电场、高温及机械加载等复杂服役条件的叠加作用, 显著削弱了功能陶瓷的响应稳定性, 并可能在超过一定工况阈值后诱发非线性的不可逆演变, 从而将材料推入极端服役区间。这种多物理场强耦合下的性能突变, 是功能陶瓷性能评估与可靠性设计的关键挑战^[1, 9]。

近年来, 人工智能赋能材料(AI for materials)的科学研发范式正逐渐被引入材料研究中, 通过机器学习与自动化技术的协同, 研究者能够高效地实现材料性能预测、构效关系解析、逆向设计等问题, 并成功应用于金属材料^[10-12]、高分子材料^[13-14]、复

收稿日期: 2026-02-02。 修订日期: 2026-03-02。

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金项目(B类)(52422206)。

第一作者: 刘润林(2001—), 男, 博士研究生。

通信作者: 沈忠慧(1991—), 男, 博士, 教授;

沈 洋(1980—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-02-02. Revised date: 2026-03-02.

First author: LIU Runlin (2001—), male, Doctoral candidate.

E-mail: 294515@whut.edu.cn

Correspondent author: SHEN Zhonghui (1991—), male, Ph.D., Professor;

SHEN Yang (1980—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: zhshen@whut.edu.cn; shyang_mse@mail.tsinghua.edu.cn

合材料^[15]等多种材料体系中。AI 作为一种能够处理高维数据与多因素耦合关系的数据驱动工具,为功能陶瓷解决“三多”困境提供了新的研究手段。然而,功能陶瓷普遍具有强场耦合、结构缺陷与工艺条件高度敏感等特点,表现出显著的非线性放大效应,使其成为人工智能赋能材料研究中最具挑战性、同时也极具发展潜力的应用对象之一。因此,本综述聚焦功能陶瓷的关键“三多”困境,从数据、模型、应用层面分别对人工智能驱动功能材料研发的应用进展进行回顾,指出了功能陶瓷材料智能研发的基本研究路线与挑战。然后,围绕人工智能赋能功能陶瓷研发的重塑路径,分别从逆向设计方

法、智能计算手段、材料大模型平台的三大视角,对陶瓷材料研发一体化的应用进行了总结与展望。

1 AI 赋能功能陶瓷研究的破局逻辑

机器学习在材料科学中通常遵循数据、模型到应用的逻辑流程(图 2)。在功能陶瓷领域,这一流程被用于解析复杂的成分-工艺-结构-性能全要素映射关系 $y=p(y|x,c)$, 并逐渐演化成为一种新的研发范式。本节从数据、模型与应用 3 个层面系统阐述功能陶瓷的关键特征。在数据层面,体现为成分、工艺过程及显微结构信息的多源异构与高度复杂性;在模型层面,强调构建能够刻画非线性构效耦合关

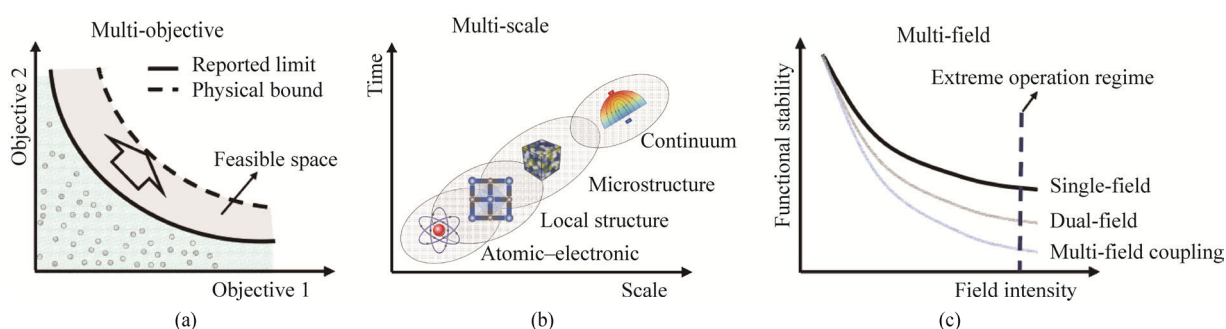


图 1 功能陶瓷材料的“三多”研究困境

Fig. 1 Three key challenges in the research of functional ceramic materials

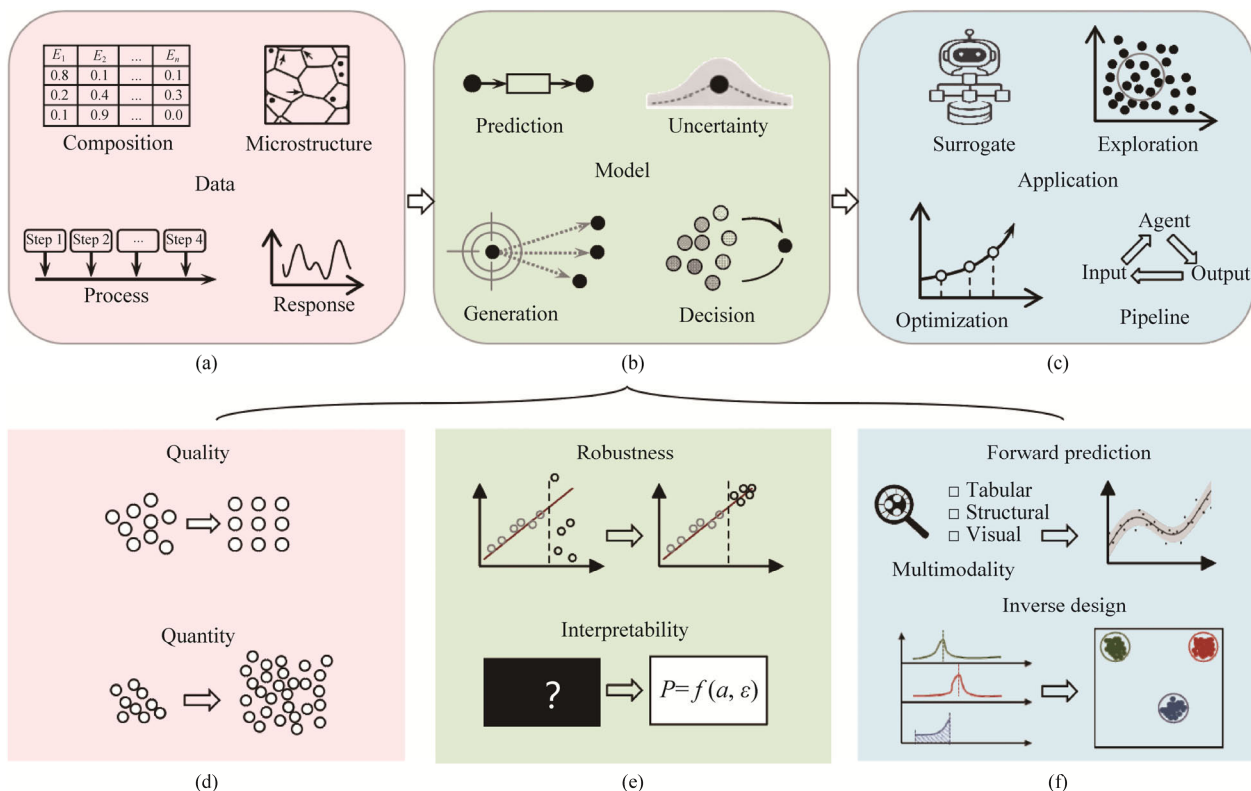


图 2 AI 赋能功能陶瓷研究的现状与挑战

Fig. 2 Current status and outstanding challenges in AI for functional ceramics

系的智能模型；在应用层面，则侧重于将人工智能方法嵌入材料的研发流程，在性能预测及逆向设计等关键环节实现功能陶瓷材料的针对性的建模与任务适配。

1.1 数据层

在功能陶瓷研究中，材料性能往往同时受到成分、显微结构以及制备工艺等多方面因素的共同影响，这使得相关数据在整理和使用过程中具有较强的复杂性和多样性。为支撑后续建模与设计决策，通常需要将不同来源的数据信息进行系统化组织，并明确其与性能响应之间的对应关系(图 2a)。材料成分由于表征方式相对明确，常被作为最直接的设计变量引入到机器学习模型，一般通过化学计量比、掺杂元素类型及其含量等方式进行描述。围绕成分特征构建的机器学习模型，已被广泛用于功能陶瓷高维成分空间的快速筛选。例如，Wang 等^[16]基于材料成分数据建立模型，成功筛选并通过实验验证了一类高熵无铅弛豫铁电材料，实现了储能性能的显著提升。然而，仅依赖成分信息往往难以充分反映功能陶瓷的真实性能表现。相比之下，显微结构对功能陶瓷性能的影响更加复杂，其影响具有显著的跨尺度特征，从晶格畸变、畴结构，到晶粒尺寸、孔隙形貌以及晶界和织构等多个层级，均会对宏观性能产生影响。同时，微结构的形成又与材料成分和制备工艺密切相关，通常需要借助显微图像或场分布数据进行表征。例如，Zhang 等^[17]通过将显微结构表征与成分信息及文献进行多模态融合，有效改善了材料性能预测的准确性，并提高了在复杂设计空间中的搜索效率。在进一步考虑制备过程时，工艺数据所体现的路径依赖性往往成为影响性能稳定性的重要因素。即使材料成分保持一致，不同的前驱体体系、合成路线或热处理条件，也可能导致显微组织的显著差异，进而引起性能波动。工艺信息不仅以离散参数形式记录，还会以具有顺序关系的过程数据进行表示，例如升温曲线、保温阶段、气氛切换及冷却路径等。这类过程数据能够更真实地反映材料形成机制，是刻画工艺路径依赖性的关键输入。因此，完整记录并充分利用工艺参数与过程信息是开展可重复研究并建立多要素关联的关键基础。近年来，一些工作已开始将工艺路径和合成决策变量纳入数据建模框架，并结合主动学习策略对实验过程进行引导，以提高有限实验条件下的探索效率，捕捉不同工艺路径对最终微结构与性能的影响差异^[18]。此外，性能指标数据反

映了材料在特定测试或服役条件下的性能表现，其形式既包括介电、热电或压电等标量性能，也可能表现为谱图、曲线等结构化曲线。这类响应通常对多物理场以及样品质量高度敏感，是功能陶瓷区别于结构材料的重要特征，但同时也增加了数据表示与建模的难度。

在数据基础建设方面，机器学习模型的性能上限由数据数量与数据质量共同决定。数据数量的提升关键在于获得足够的有效样本，并尽可能覆盖材料设计空间，从而在一定程度上减少样本分布不均所带来的偏倚问题，并提升模型在未知区域中的泛化能力。数据质量则更依赖于实验过程的规范性，包括不同实验批次、测试设备及测试条件下数据记录的一致性与完整性，以保证不同来源数据之间具有可比性，并能够被重复利用。围绕上述目标，当前功能陶瓷领域的的数据扩展与完善可简单归纳为三类路径。其一，借助高通量实验与计算手段，提高数据生成效率，并将实验设计、样品制备与性能筛选过程整合为相对闭环的流程，以在可控的实验成本下加快对可行工艺窗口和潜在性能提升的探索。例如将计算筛选、文献与历史数据、机器学习和主动学习策略融入实验闭环，通过实验与模型的迭代反馈，持续积累可用于模型训练与更新的功能陶瓷数据集^[19]。其二，面向海量文献、专利与实验记录开展知识抽取与结构化整理，快速扩容可用样本。例如，Polak 等^[20]开发了 ChatExtract，通过对话式追问与一致性校验来提高抽取可靠性。对功能陶瓷而言，这种方法适用于补充分散在论文中的测试条件、回线/谱图特征等工艺与性能信息，有望更完整地刻画材料数据的可行空间。其三，以计算与模拟结构作为多保真数据的补充，支撑预训练与迁移学习，从而在实验数据稀缺的条件下仍可开展面向目标性能的设计探索，例如，Chen 等^[21]构建了融合低保真 PBE 计算数据与高保真实验数据的多保真图网络框架，结果表明引入大规模低保真数据有助于改善对高保真性质的预测表现。

1.2 模型层

在完成材料数据信息的收集与处理之后，核心问题逐渐转向如何利用这些信息建立可用于分析和设计的模型。现有的人工智能赋能功能陶瓷研究逐步形成了由预测(prediction)、不确定性(uncertainty)、生成(generation)与决策(decision)模型相互融合的建模范式，用以支撑从性能评估到材料设计再到实验执行的完整闭环。例如，设 x 表示陶

瓷材料的结构与成分描述符(如缺陷态、氧空位、价态分布、晶界特征及孔隙结构等关键状态变量), c 是制备工艺与测试条件(如热历史、气氛演变、助烧剂、烧结剂及电场过程等序列信息), y 对应为材料的功能响应, 其不仅表现为单一性能指标, 还常以回线、谱图及随时间演化的性能退化曲线等形式出现。预测模型以回归建模为核心, 在给定输入材料变量下学习条件映射 $y=f_{\theta}(x,c)$, 用于快速评估功能响应的关键特征。这类模型是功能陶瓷设计的常见基础工具, 其有效性通常依赖于训练数据的覆盖范围与算法类型。同时, 在功能陶瓷设计中, 不可避免地需要面对外推预测和极端工况评估等情形, 不确定性模型成为支撑可信判断的重要参考信息。此类模型以概率预测为核心, 目标是对概率分布 $p_{\theta}(y|x,c)$ 进行可靠性刻画与校准, 以区分模型本身的不确定性与实验噪声带来的波动, 为超出已有数据范围的性能评估及候选材料的稳健筛选提供支持。在按需设计方面, 生成模型在目标与约束下进行逆向搜索, 学习 $x \sim q_{\phi}(x|y^*,c)$, 从而在化学与结构空间提出满足目标性质 y^* 的候选, 有望在引入约束后提高可行候选比例。生成模型能够在高维设计空间中导向地探索潜在可行的区域, 为多性能协同设计提供高效的候选生成能力。在实验资源有限且工艺条件高噪敏感的情况下, 模型预测需在有限验证条件下不断校正与更新, 因此决策模型在连接计算评估与实验验证中起到关键桥梁作用。其以闭环优化为目标, 在候选空间实现效用最大化问题 $x = \arg \max \hat{y}$, 在候选空间中综合预测性能、不确定性与实验成本, 指导下一步实验选择, 实现从模型到实验的迭代加速。上述模型共同构成从前向预测、可信评估到逆向生成与实验决策的统一方法体系, 可用于支撑功能陶瓷在成分与工艺空间中的智能化设计与加速迭代。

在功能陶瓷智能化设计中, 模型层面的改进往往体现在鲁棒性 (robustness) 与可解释性 (interpretability) 2 个方面。由于材料数据的多源异质性与外推需求, 训练数据通常覆盖有限的成分与工艺窗口, 而新材料设计需要在更广阔且未充分观测的决策空间中进行推断与筛选。模型的鲁棒性体现在对分布外数据的稳定预测能力以及对预测不确定性和物理可行域的刻画, 从而避免模型在高维稀疏空间中产生表观最优但违反热力学或动力学规律的候选。因此, 提升模型在跨成分体系、跨工艺路径与跨测试条件下的鲁棒性是至关重要的。陶

瓷材料的数据表示建模在其中起着重要作用, 例如 Schmidt 等^[22]提出以图距离嵌入替代精确键长的晶体图注意力网络, 使得在未知弛豫结构条件下仍可对四方钙钛矿原型进行学习, 并在 1500 万候选中筛选出数千个潜在的稳定材料。此外, 针对具体设计任务引入更吻合设计目标的模型评价准则, 能够进一步提高材料的筛选效率, 例如 Tan 等^[23]将模型训练目标改为排序一致性, 用 RankCosine 等排序损失来重新定义优化任务, 从而获得更优的候选设计。此外, 具有可解释性的机器学习模型是认识和挖掘材料构效关联的重要手段。通过引入具有明确物理含义的描述符或将模型输出与结构-性能机理相联系, 识别主导功能响应的关键因素, 可填补及完善功能陶瓷材料的理论机理体系, 并可有理有据地指导定向设计与实验验证。例如 Shen 等^[24]提出热导率的通用描述符, 并与高通量筛选、机器学习势函数及实验验证耦合, 最终在候选体系中实验确认了极低晶格热导率材料。

1.3 应用层

前期数据和模型的准备工作, 最终落地地都是为了支持真实材料实验设计应用中的任务。概括而言, 目前相关的应用主要体现在代理模型 (surrogate)、按需探索 (exploration)、性能优化 (optimization) 以及闭环工作流 (pipeline)。在高维成分与工艺空间中, 全面依赖实验或高精度计算进行逐一验证往往不可行。在已有研究中, 代理模型通常被用作性能评估的起点, 通过学习成分、结构和工艺条件与功能响应之间的近似关系, 对大量候选方案进行快速比较, 在有限成本下提供可用于筛选和权衡的参考。在代理模型基础上, 按需探索强调以预期的功能需求出发, 结合模型预测结果, 逐步缩小可能的成分与结构范围, 从而实现对设计空间的有针对性搜索。这种自上而下的探索方式, 有助于减少盲目试错, 提高在复杂设计空间中发现高性能功能陶瓷体系的效率。功能陶瓷的多性能指标往往相互制约, 人工智能在多目标条件下的性能优化具有显著优势。面向明确目标函数与领域知识的约束条件, 在成分与工艺空间中开展多目标与约束优化, 是突破倒置耦合性能矛盾的有效手段。目前, 一些研究开始将上述能力进一步整合到连续的研发流程中, 通过整合自动合成、高通量表征与实时数据回填, 机器学习使探索与优化从离线建模过渡到在线实时迭代, 为跨尺度、跨体系的协同研发提供了可持续的支撑平台。

针对新型功能陶瓷材料的研发任务,机器学习正沿着正向预测与逆向设计两条主线,向多模态协同与按需逆向优化发展。正向预测旨在建立从高维描述符空间到功能响应的精准映射。在实验样本受限的典型场景下,为了提高材料数据信息增益,研究重心逐步转向通过构建多模态融合(如显微组织图像、原位谱线及文本先验)的机器学习模型,并借助自动特征提取与表征学习的方法来缓解人工标注瓶颈。例如 Archit 等^[25]提出 μ SAM 将通用分割能力迁移到显微场景以提升微结构数据的可用性。进而,在贝叶斯不确定性度量的框架下,将确定性预测转化为可量化的采样风险,为主动学习提供决策判据^[26]。逆向设计则将目标性能视为约束或优化目标,在宏大的候选空间中提出满足可制造性与物理约束的最优方案,例如 Li 等^[27]针对高熵介电薄膜的超高维成分空间,结合相场模拟与有限实验数据构建生成式学习与排序筛选流程,在极少定向实验次数下实现储能性能的有效提升。

2 AI 赋能功能陶瓷研发的重塑路径

2.1 智能反演决策模型

功能陶瓷通常同时涉及多性能目标、多尺度结构特征以及多物理场耦合作用,实现按需逆向设计理想的陶瓷材料具有重要应用意义但却极具挑战。在这一过程中,研究关注的重点也随之发生转移,即如何在样本数量有限且受可行性等多重约束的条件下,获得具有高效、可行的候选方案。基于上述考虑,本小节从建模与决策相结合的角度出发,对现有逆向反演方法在功能陶瓷研发中的实现思路进行梳理与分析,并重点讨论

如何借助模型预测与闭环决策机制优化现有决策方法。

从已有研究实践来看,材料逆向设计在具体应用中通常并不是一步完成的,而是由若干相互关联的环节逐步推进(图 3):表征与数据对齐;前向可预测模型;逆向候选生成与决策;闭环验证与动态更新。首先,需要对已有的实验、计算和表征数据进行整理和统一表示。功能陶瓷研究中的数据往往来源多样,不同批次样品、不同设备以及不同测试条件之间容易引入偏差。如果不加区分地直接使用这些数据,模型很难学到稳定规律。因此,通常需要将成分、工艺参数、显微结构和性能信息转化为统一的标准形式,并尽可能在不同数据模态之间建立对应关系,从而改善样本数量有限和数据不一致带来的影响。在此基础上,构建前向预测模型,用于估计在给定成分和工艺条件下可能获得的性能响应。除给出具体的性能预测值外,此类模型通过不确定性量化刻画模型在分布外区域的预测可靠性。例如,在模型训练过程中引入集成学习以估计预测方差,并在输出阶段以概率分布替代单点预测。其次,在模型构建与筛选过程中引入显式物理约束,包括结构与组成约束、价态约束以及热力学稳定性与动力学可达性等限制条件,将搜索空间限定在物理可行域内,从源头减少不合理候选的产生。进入逆向决策阶段后,由于实验验证样本量通常有限,故关注重点不在于某一种算法是否表现最优,而在于如何精准命中所需的材料体系。在设计空间相对受限的情况下,可以优先考虑预测不确定性较高、但潜在信息增益较大的候选方案开展实验,以更快厘清关键成分或工艺参数对性能的影响。

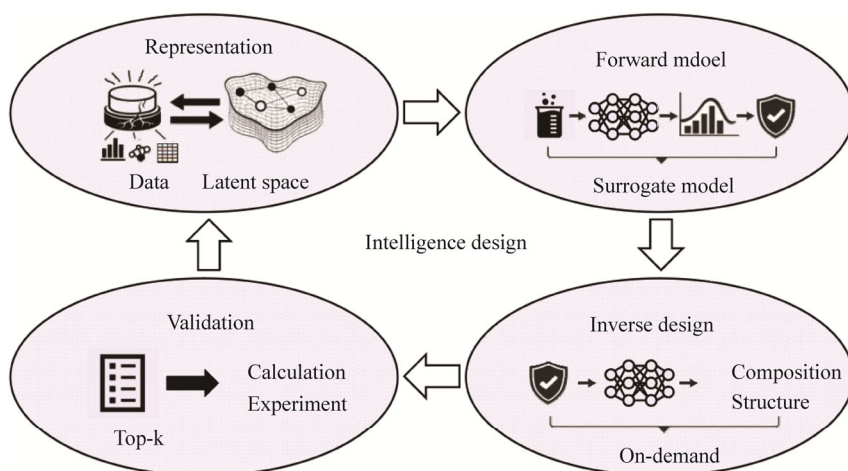


图3 功能陶瓷的智能设计流程

Fig. 3 Intelligent design process for functional ceramics

响;在涉及更大范围的成分或工艺变化时,仅围绕单一最优解展开探索往往风险较高,通常需要同时提出一组满足基本物理规律和工艺可行性约束的候选方案,从而避免过早收敛至局部最优解。这两类策略对应不同阶段的探索过程,在实际应用中一般需要结合使用,以在探索效率和覆盖范围之间取得相对平衡^[28]。最后,对于 AI 筛选得到的高性能候选,还需结合高保真计算或实验手段进行验证,用于证伪不满足热力学或动力学规律的预测结果,并将验证数据反馈至模型中,对模型偏差和不确定性进行修正,并持续更新对可行设计区域的近似描述。

因此,如何让逆向反演模型对陶瓷材料设计更加有效?第一,需要跨模态与跨尺度的统一表示,构建能够融合多源异构数据的表示学习框架,将工艺路径、结构状态及性能响应作为统一的状态变量进行编码,使模型能够学习全局关联及其跨尺度映射关系,把成分与缺陷化学、工艺时序、显微结构图像,以及服役曲线在同一潜空间对齐,让模型学到全局相关,实现跨批次迁移;第二,可以结合分布建模与风险决策,将服役性能、寿命与效率衰减等统计指标作为分布对象进行建模,提高材料真实场景下的可靠性,实现对非线性演化过程的风险感知与鲁棒决策,从而更真实地反映陶瓷材料在复杂工况下的行为;第三,需要形成通用的陶瓷表征体系,将晶界相、孔隙连通性与场增强等结构变量纳入描述符,引入能够表征空间异质性与局域缺陷效

应的结构编码方式(如基于图像的表征方法),并将结构演化与工艺条件进行耦合建模,从而显式捕捉缺陷结构对性能的调控机制;最后,需要以闭环验证能力而非离线预测精度作为方法有效性的核心评价标准,借鉴自主发现范式,将“提出—验证—更新”的持续闭环作为衡量逆向设计方法能否稳定输出可制造、可复现且可验证方案的关键标准。

2.2 跨尺度智能计算方法

功能陶瓷的构效关系物理机制横跨电子、原子、介观与连续体多个尺度,且表现出强非线性与显著工艺依赖性,单一尺度的实验或模拟手段难以独立支撑面向材料智能设计的系统分析。传统多尺度模拟通常需要在精度、尺度和成本之间做出取舍。例如,第一性原理计算能够提供可靠的原子层信息,但在处理复杂或大尺寸体系时受到明显限制;分子动力学能够反映结构随时间演化的过程,不过其结果对势函数的选取较为敏感;在进一步扩展到介观乃至宏观尺度时,相场模型和有限元方法则更具优势,但通常需要对微观物理机制进行一定程度的简化与假设。这种尺度之间的割裂,使得不同模型很难在统一框架下直接用于解决材料设计的跨尺度问题。在这一背景下,机器学习为跨尺度计算提供了一种新的连接方式。通过将各自尺度的物理模型转化为可被调用、可被组合的近似模型,机器学习可以在保留关键物理约束的同时,大幅降低计算成本,从而使原本分散在不同尺度的计算手段能够被局部组合使用(图 4)。

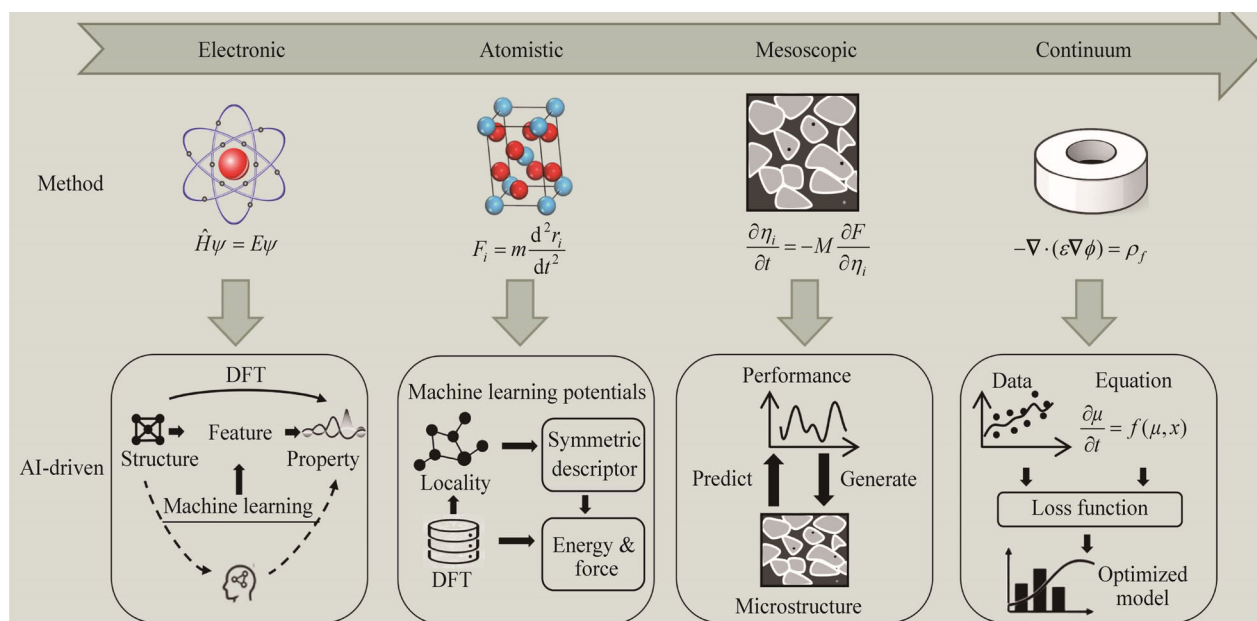


图 4 功能陶瓷材料的多尺度智能计算模型

Fig. 4 Multi-scale intelligent computing model for functional ceramic materials

在电子结构和晶体尺度上,机器学习往往作为高通量第一性原理计算的辅助工具被引入,其核心作用在于学习晶体结构与体系能量等物理量之间的关系。通过这种方式,可以在保持基本物理约束的前提下,大幅提高对候选晶体结构的筛选效率。相关研究表明,这类模型能够较为快速地识别出在热力学上稳定且同时满足功能需求的晶体构型,已被应用于新型铁电材料和功能氧化物体系的搜索,并通过实验或进一步计算对筛选结果进行了验证^[29–30]。当研究关注点转向原子尺度的动力学行为时,机器学习势函数逐渐成为连接第一性原理计算与分子动力学模拟的常用手段。通过对第一性原理数据进行训练,机器学习势函数能够在接近DFT精度的条件下预测体系的能量与力场,将模拟扩展到更大的体系尺寸和更长的时间尺度。一些此前难以直接处理的动力学过程,如相变行为、畴壁运动以及缺陷演化等问题,逐渐进入可实现的研究范围^[31]。以铁电钙钛矿材料为例,基于深度学习的势函数可用于描述相变行为和相关热力学性质,从而为分析结构演化与功能响应之间的关系提供了参考模型^[32–33]。在介观尺度,相场模型能够描述畴结构演化及其与外场耦合的集体行为,但其数值求解成本高且对参数敏感。通过机器学习代理模型对相场演化过程进行加速或近似求解,可在保持边界条件与物理约束显式表达的同时,大幅提升三维介观模拟的可迭代性,使畴结构等介观尺度状态变量能够被纳入优化回路中^[34]。在连续体以及器件尺度的研究中,有限元模型被广泛用于描述热–电–力耦合响应与制造过程,但非线性本构关系与相关参数确定制约了其在实际服役过程模拟中的应用。近年来,通过将物理控制方程嵌入神经网络模型作为连续体建模的代理模型,可在复杂工况下实现对温度场、应力场与形变行为的快速预测^[35–36]。

即便不同尺度的建模方法各自取得了一定进展,但将这些结果直接用于功能陶瓷的整体设计决策仍然存在不小的困难。一个突出的问题在于,不同尺度之间缺乏统一且可传递的描述方式。电子结构、原子排列、介观组织以及连续体层面的响应通常由不同类型的模型进行描述,这些模型在变量定义和物理假设上的差异较大。仅对各尺度模型分别进行优化,缺乏有效的连接机制,难以在整体设计流程中形成协同作用。因此,在跨尺度建模中,有必要引入能够在不同尺度之间共享的状态描述,并明确不确定性如何随尺度传递,使低尺度计算中的

不确定性能够合理映射到高尺度预测结果中。此外,功能陶瓷的研究和应用场景通常伴随着工况变化和样本数量受限等现实条件,这对理论模型在不同实际条件下的稳定表现提出了更高要求。如果模型在输入发生扰动或超出训练范围时缺乏可靠的置信判断,其在设计决策中的参考价值会受到明显限制。此外,需要将跨尺度计算进一步延伸至实验合成和制造过程本身。在功能陶瓷研发中,制备工艺的选择、参数的变化和微结构的演化对最终性能具有决定性影响。通过构建面向实验和制造过程的数字孪生框架,将全面的材料信息纳入统一的计算流程,有助于使跨尺度模型真正参与到实验设计之中。

2.3 大语言模型驱动研发平台

随着高通量实验和计算模拟的广泛应用,功能陶瓷研究中逐渐积累了大量与结构、性能和工艺相关的数据。然而,在实际研究中,这些信息并不总是以统一、可直接利用的形式存在。许多关键信息仍然分散在不同论文、专利和实验记录中,并且受到实验条件和表征手段差异的影响,难以被系统整理和重复使用。近年来,大语言模型的发展为功能陶瓷研发提供了一种吸纳大量数据信息的技术支撑。其具备丰富的通用知识和领域知识基础,能够处理多种形式的信息,并以自然语言作为交互入口,将分散在论文、专利以及实验记录中的信息进行整合。借助这一能力,研究者可以实现编写复杂代码、构建材料数据集或查找相关知识,从而降低新材料探索阶段的成本。

随着大语言模型的快速发展,其在材料研发流程中已逐渐形成了层级化的应用。表1所示展示了现有不同层级的大模型及相关案例。在较为基础的层面上,材料领域语言模型(materials LLMs)主要以通用语言模型为基础模型,承担着知识理解与推理功能,通常被用于文献和专利中的信息抽取、已有研究结论的整理归纳,以及围绕具体材料问题开展自然语言交互,其输出结果以文本结论或结构化信息为主,更多承担的是认知和辅助分析功能。随着应用需求的提升,智能体系统(agent LLM systems)逐渐出现,其通过构建不同任务的调用工具,在赋能科研过程中协调计算程序、数据库或模拟模块,为决策提供支持并完成科研闭环流程中的组织。进一步向材料研发的下游延伸时,大语言模型开始与自动化实验平台相结合,形成以自驱动实验室(self-driving laboratories)为代表的研究模式。在这种

“智能体闭环”的范式下，实验设计、操作执行和结果记录不再完全依赖人工干预，而是通过自动化设备与模型推理的配合，逐步形成循环更新的研究流程，以被直接用于指导实验选择，并通过实验结果的持续反馈不断修正后续决策。

因此，大语言模型在功能陶瓷研发中承担的角色，正在从知识整理为主的辅助工具，逐步向到材料科学研究的闭环流程延伸，在部分高度自动化的场景中，甚至开始与实验设备形成初步的闭环连接。该层面的应用效果上，可能并不仅仅需要单纯地提高大模型的垂域能力，而更依赖于不同功能之间能否在真实研究环境中协同运行。功能陶瓷领域仍然迫切需要高质量、可追溯的工艺与实验语料作为基础支撑。相比于只保留性能良好的成功案例，那些未达到预期结果的实验同样具有重要参考价值。例如，烧结条件的偏离、杂相的出现以及性能波动的实验结果，往往能够更直接地反映材料和工艺的边界。对于功能陶瓷而言，大语言模型可以从非结构化文本中提取完整的工艺路径、测试条件及

失败实验信息，补全传统数据集中缺失的过程信息与边界样本。这对于界定材料的可行工艺窗口及理解性能波动来源具有重要意义。随着大语言模型逐步参与到实验规划和流程协调中，其输出结果的可验证性也变得尤为重要。在实际应用中，这通常需要通过多种约束机制加以限制，如限定工艺参数范围、核查外部工具调用结果等，以避免模型判断脱离可执行条件。通过这些方式，可以将模型给出的建议限定在当前条件下可执行且具备重复验证可能的范围内，从而避免模型带来的偶然误差。在面向自驱动实验室的发展过程中，评价重点也需要进行相应的针对性调整。相比单次性能提升，更值得关注的是方法在不同陶瓷材料体系和工艺路径下的稳定表现，如高性能样品的命中率、工艺窗口的可重复性等。总体而言，随着材料领域语言模型、智能体系统以及自动化实验平台的逐步融合，大语言模型有望在新型功能陶瓷研发的闭环设计中建立起更紧密的连接。

表 1 当前大模型技术总结

Table 1 Summary of current large language model platforms

Type	Name	Description	Reference
Materials LLMs	MatChat	Materials-tuned LLMs for synthesis knowledge and reasoning	[37]
	DARWIN	Open materials-focused large language model for broad materials tasks	[38]
	Inorganic Synthesis LLMs	Fine-tuned LLMs for inorganic synthesizability and precursor selection	[39]
	MatterChat	Structure-aware multi-modal materials LLM aligning atomic structure representations with text	[40]
Self-driving laboratories	A-Lab	Closed-loop robotic solid-state synthesis of inorganic powders	[19]
	Self-driving PVD system	Autonomous physical vapor deposition loop for thin-film exploration	[41]
	Autonomous PLD thin-film synthesis	Autonomous pulsed-laser deposition platform for thin-film growth	[42–43]
	ChemCrow	Modular orchestration architecture for self-driving laboratories	[44]
Agentic LLM systems	MAPPS	Multi-agent planning framework targeting higher autonomy in materials discovery	[45]
	MatPilot	LLM-enabled multi-agent system for materials research planning and execution	[46]
	MatAgent	LLM-based agent for inorganic materials generation and tool-assisted evaluation	[47]
	ChemOS	Modular orchestration architecture for self-driving laboratories	[48]

3 总结与展望

面向更加高端的器件装备以及更为苛刻的服役环境，功能陶瓷材料的性能需求日益提升。传统以经验试错为主的研发模式在高维、强约束的设计空间中面临效率与可迁移性瓶颈，其根源在于多目标权衡、多尺度耦合与多物理场响应的“三多”困境的长期并存。本文系统回顾了人工智能介入材料研发所引发的范式变化与代表性进展，从数据、模型与应用 3 个层面梳理了功能陶瓷智能化研究的整体脉络，并进一步从逆向反演决策模型、跨尺度智

能计算方法以及大语言模型驱动的协同研发平台 3 个方面，总结了面向功能陶瓷的破局逻辑与重塑路径。随着数据基础、模型能力与闭环应用技术的持续完善，人工智能有望从辅助分析工具演进为连接知识、计算、决策与实验执行的系统性研发框架，推动功能陶瓷研究向更高效和可扩展的新范式发展。

参考文献：

- [1] MARTIN L W, RAPPE A M. Thin-film ferroelectric materials and their applications[J]. Nat Rev Mater, 2017, 2: 16087.
- [2] OSES C, TOHER C, CURTAROLO S. High-entropy ceramics[J]. Nat

- Rev Mater, 2020, 5(4): 295–309.
- [3] ZHAO Q, STALIN S, ZHAO C Z, et al. Designing solid-state electrolytes for safe, energy-dense batteries[J]. Nat Rev Mater, 2020, 5(3): 229–252.
- [4] WANG G, LU Z L, LI Y, et al. Electroceramics for high-energy density capacitors: Current status and future perspectives[J]. Chem Rev, 2021, 121(10): 6124–6172.
- [5] YANG L T, KONG X, LI F, et al. Perovskite lead-free dielectrics for energy storage applications[J]. Prog Mater Sci, 2019, 102: 72–108.
- [6] SHI X L, ZOU J, CHEN Z G. Advanced thermoelectric design: From materials and structures to devices[J]. Chem Rev, 2020, 120(15): 7399–7515.
- [7] PASTOR E, SACHS M, SELIM S, et al. Electronic defects in metal oxide photocatalysts[J]. Nat Rev Mater, 2022, 7(7): 503–521.
- [8] 杜宇峰, 黄晔, 郑化安, 等. 固体氧化物燃料电池阳极微观结构优化的研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(7): 2040–2052.
- DU Yufeng, HUANG Ye, ZHENG Huaan, et al. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(7): 2040–2052.
- [9] WYATT B C, NEMANI S K, HILMAS G E, et al. Ultra-high temperature ceramics for extreme environments[J]. Nat Rev Mater, 2024, 9(11): 773–789.
- [10] SOHAIL Y, ZHANG C L, XUE D Z, et al. Machine-learning design of ductile FeNiCoAlTa alloys with high strength[J]. Nature, 2025, 643(8070): 119–124.
- [11] RAO Z Y, TUNG P Y, XIE R W, et al. Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery[J]. Science, 2022, 378(6615): 78–85.
- [12] 吕皓, 许国婧, 刘培鑫, 等. 数据驱动的Sm-Co基稀土永磁合金研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2026, 54(1): 49–69.
- LU Hao, XU Guojing, LIU Peixin, et al. J Chin Ceram Soc, 2026, 54(1): 49–69.
- [13] GURNANI R, KAMAL D, TRAN H, et al. polyG2G: A novel machine learning algorithm applied to the generative design of polymer dielectrics[J]. Chem Mater, 2021, 33(17): 7008–7016.
- [14] TRAN H, GURNANI R, KIM C, et al. Design of functional and sustainable polymers assisted by artificial intelligence[J]. Nat Rev Mater, 2024, 9(12): 866–886.
- [15] YANG M Z, WAN C F, ZHOU L, et al. High-temperature polymer composite capacitors with high energy density designed *via* machine learning[J]. Nat Energy, 2025, 10(11): 1323–1333.
- [16] WANG X C, ZHANG J, MA X S, et al. Machine learning assisted composition design of high-entropy Pb-free relaxors with giant energy-storage[J]. Nat Commun, 2025, 16: 1254.
- [17] ZHANG Z, REN Z C, HSU C W, et al. A multimodal robotic platform for multi-element electrocatalyst discovery[J]. Nature, 2025, 647(8089): 390–396.
- [18] SZYMANSKI N J, NEVATIA P, BARTEL C J, et al. Autonomous and dynamic precursor selection for solid-state materials synthesis[J]. Nat Commun, 2023, 14: 6956.
- [19] SZYMANSKI N J, RENDY B, FEI Y X, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials[J]. Nature, 2023, 624(7990): 86–91.
- [20] POLAK M P, MORGAN D. Extracting accurate materials data from research papers with conversational language models and prompt engineering[J]. Nat Commun, 2024, 15: 1569.
- [21] CHEN C, ZUO Y X, YE W K, et al. Learning properties of ordered and disordered materials from multi-fidelity data[J]. Nat Comput Sci, 2021, 1(1): 46–53.
- [22] SCHMIDT J, PETTERSSON L, VERDOZZI C, et al. Crystal graph attention networks for the prediction of stable materials[J]. Sci Adv, 2021, 7(49): eabi7948.
- [23] TAN R X, XUE K, LYU S H, et al. Offline model-based optimization by learning to rank[PP/OL]. V3. (2025–05–02)[2026–03–27]. <https://arxiv.org/abs/2410.11502>.
- [24] SHEN X C, ZHENG J Z, KOZA M M, et al. Accelerated discovery of crystalline materials with record ultralow lattice thermal conductivity *via* a universal descriptor[J]. Nat Commun, 2026, 17: 689.
- [25] ARCHIT A, FRECKMANN L, NAIR S, et al. Segment anything for microscopy[J]. Nat Methods, 2025, 22(3): 579–591.
- [26] LIU Y T, VASUDEVAN R K, KELLEY K P, et al. Learning the right channel in multimodal imaging: Automated experiment in piezoresponse force microscopy[J]. npj Comput Mater, 2023, 9: 34.
- [27] LI W, SHEN Z H, LIU R L, et al. Generative learning facilitated discovery of high-entropy ceramic dielectrics for capacitive energy storage[J]. Nat Commun, 2024, 15: 4940.
- [28] 魏巍, 严壮, 唐智勇. 晶体结构生成式模型研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2026, 54(1): 106–121.
- WEI Wei, YAN Zhuang, TANG Zhiyong. J Chin Ceram Soc, 2026, 54(1): 106–121.
- [29] GONG X X, LI H, ZOU N L, et al. General framework for E(3)-equivariant neural network representation of density functional theory Hamiltonian[J]. Nat Commun, 2023, 14: 2848.
- [30] GONG X X, LOUIE S G, DUAN W H, et al. Generalizing deep learning electronic structure calculation to the plane-wave basis[J]. Nat Comput Sci, 2024, 4(10): 752–760.
- [31] 符晓, 肖睿娟, 李泓. 基于机器学习势函数的沸石框架钠离子导体筛选[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(7): 1779–1785.
- FU Xiao, XIAO Ruijuan, LI Hong. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(7): 1779–1785.
- [32] ZHANG L F, HAN J Q, WANG H, et al. Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics[J]. Phys Rev Lett, 2018, 120(14): 143001.
- [33] BIAN R J, HE R, PAN E, et al. Developing fatigue-resistant ferroelectrics using interlayer sliding switching[J]. Science, 2024, 385(6704): 57–62.
- [34] MONTES DE OCA ZAPIAIN D, STEWART J A, DINGREVILLE R. Accelerating phase-field-based microstructure evolution predictions *via* surrogate models trained by machine learning methods[J]. npj Comput Mater, 2021, 7: 3.
- [35] KIRCHDOERFER T, ORTIZ M. Data-driven computational mechanics[J]. Comput Meth Appl Mech Eng, 2016, 304: 81–101.
- [36] WU Z T, ZHANG H B, YE H F, et al. PINN enhanced extended multiscale finite element method for fast mechanical analysis of heterogeneous materials[J]. Acta Mech, 2024, 235(7): 4895–4913.
- [37] CHEN Z Y, XIE F K, WAN M, et al. MatChat: A large language model and application service platform for materials science[J]. Chin Phys B, 2023, 32(11): 118104.
- [38] XIE T, WAN Y, LIU Y, et al. Darwin 1.5: Large language models as materials science adapted learners[PP/OL]. V3. (2025–05–21)[2026–03–27]. <https://arxiv.org/abs/2412.11970>.
- [39] KIM S, JUNG Y, SCHRIER J. Large language models for inorganic synthesis predictions[J]. J Am Chem Soc, 2024, 146(29): 19654–19659.
- [40] TANG Y, XU W, CAO J, et al. MatterChat: A multi-modal LLM for material science[PP/OL]. V3. (2025–07–29)[2026–03–27]. <https://arxiv.org/abs/2502.13107>.

- [41] ZHENG Y B, BLAKE C, MRAVAC L, et al. A self-driving physical vapor deposition system making sample-specific decisions on the fly[J]. *npj Comput Mater*, 2025, 11: 327.
- [42] HARRIS S B, BISWAS A, YUN S J, et al. Autonomous synthesis of thin film materials with pulsed laser deposition enabled by *in situ* spectroscopy and automation[J]. *Small Meth*, 2024, 8(9): 2301763.
- [43] HAQUE A, YIMAM D T, CHOWDHURY J, et al. Human-AI collaborative autonomous synthesis with pulsed laser deposition for remote epitaxy[PP/OL]. V1. (2025-11-14)[2026-03-27]. <https://arxiv.org/abs/2511.11558>.
- [44] BRAN A M, COX S, SCHILTER O, et al. Augmenting large language models with chemistry tools[J]. *Nat Mach Intell*, 2024, 6(5): 525-535.
- [45] ZHOU L, LING H, YAN K, et al. Toward Greater Autonomy in Materials Discovery Agents: Unifying Planning, Physics, and Scientists[PP/OL]. V2. (2025-06-09)[2026-03-27]. <https://arxiv.org/abs/2506.05616>.
- [46] NI Z, LI Y, HU K, et al. MatPilot: an LLM-enabled AI materials scientist under the framework of human-machine collaboration[PP/OL]. (2024-11-10)[2026-03-27]. <https://arxiv.org/abs/2411.08063>.
- [47] TAKAHARA I, MIZOGUCHI T, LIU B. Accelerated inorganic materials design with generative AI agents[J]. *Cell Rep Phys Sci*, 2025, 6(12): 103019.
- [48] SIM M, VAKILI M G, STRIETH-KALTHOFF F, et al. ChemOS 2.0: An orchestration architecture for chemical self-driving laboratories[J]. *Matter*, 2024, 7(9): 2959-2977.

作者贡献声明:

刘润林: 论文构思、文献梳理、初稿撰写、图表绘制

景一洋: 图表绘制、内容整理

俞果、高小天、王建: 论文初稿审阅与修改

沈忠慧、沈洋: 提出研究思路, 设计论文整体框架, 审定最终稿

Breakthrough Logic and Reshaping Pathways for AI-Enabled Functional Ceramics Research Paradigms

LIU Runlin¹, JING Yiyang¹, YU Guo¹, GAO Xiaotian¹, WANG Jian¹, SHEN Zhonghui¹, SHEN Yang²

(1. State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing, School of Materials and Microelectronics, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China; 2. State Key Lab of New Ceramics and Fine Processing, School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Extended Abstract

Functional ceramics are a class of key inorganic, non-metallic materials that can couple with and respond to electric, magnetic, mechanical, thermal and optical fields. They underpin a wide range of advanced technologies, including energy conversion, information storage and intelligent sensing. As high-end equipment and frontier science develop rapidly worldwide, the demands placed on the performance of functional ceramics are increasing, pushing materials design towards increasingly extreme compositional, structural and processing conditions. However, progress in this field has long been constrained by the intertwined challenges of multiple objectives, scales and fields. Firstly, the performance of materials and the feasibility of processing are often in strong competition with each other. This means that the design is inherently a problem of multi-objective trade-offs and optimization within a restricted feasible space. Secondly, macroscopic functional responses are regulated by factors spanning multiple length scales, including electronic structure, lattice characteristics, and microstructure. Feedback across these scales can greatly amplify the effect of local perturbations on properties. Thirdly, functional ceramics may undergo nonlinear and irreversible evolution under the combined action of high electric fields, elevated temperatures and mechanical loading, further complicating performance evaluation and controllable design. In recent years, AI for materials has emerged as an important paradigm for addressing complex design problems. Through the integration of machine learning and automation, substantial advances have been achieved in metals, polymers and composites, including property prediction, structure-property correlation analysis and inverse design. For functional ceramics, field coupling, defect sensitivity and process dependence make them a particularly challenging yet highly promising target for AI-enabled research. Against this backdrop, a systematic review of recent progress in AI-driven functional ceramics research, outlining how AI is reshaping the broader material design, is important for accelerating the intelligent design of functional ceramics.

AI-enabled research in functional ceramics can be understood through three connected layers: data, model and application. At the data level, the properties of functional ceramics are jointly governed by composition, microstructure and processing history, rendering the associated datasets intrinsically heterogeneous and complex. Composition is typically represented by stoichiometry and dopant species; microstructural information spans multiple hierarchical levels, from lattice distortion and domain structures to grain size and pore morphology; process data are strongly path dependent and require continuous descriptions of heating, cooling and atmosphere switching; and response data are expressed not only as scalar quantities, such as dielectric, piezoelectric and thermoelectric metrics, but also as spectra, loops and other unstructured responses. Accordingly, the foundation of AI for functional ceramics lies in the construction of high-quality, multimodal and traceable datasets, supported by high-throughput techniques, knowledge extraction and multi-fidelity data fusion to improve both data quantity and quality. At the model level, current studies are converging on an integrated framework comprising prediction, uncertainty, generation and decision models. Prediction models establish forward mappings among composition, processing, structure and properties; uncertainty models support out-of-distribution prediction and reliability assessment;

generation models enable inverse searches conditioned on target properties; and decision models combine experimental cost and information gain to guide closed-loop optimization. Within this framework, robustness and interpretability have emerged as central requirements: models could generalize across different systems, processing routes and testing conditions, while physically informed descriptors and mechanistic correlations are needed to reveal the factors that govern functional responses. At the application level, AI has increasingly permeated the full design workflow, giving rise to surrogate modelling, demand-driven exploration, multi-objective optimization and closed-loop pipeline, and thereby creating a more targeted, iterative and efficient design paradigm.

AI is reshaping the design workflow of functional ceramics through three major directions: intelligent inverse design, cross-scale intelligent computation and large-language-model-driven research platforms. First, intelligent inverse design targets on-demand materials design by integrating multiple representations of composition, processing, microstructure and property with uncertainty quantification, physical feasibility constraints and active learning, thereby establishing a closed loop spanning data alignment, forward prediction, inverse design and experimental validation. This strategy can improve the hit rate, manufacturability and reproducibility of proposed candidates. Second, cross-scale intelligent computation leverages machine learning to bridge models at different scales, including electronic structure, atomic dynamics, mesoscale microstructural evolution and continuum responses. By retaining key physical constraints while reducing computational cost, such approaches enable density functional theory, machine-learning interatomic potentials, phase-field models and finite-element analysis to operate within a unified framework for materials design. Third, large-language-model-driven research platforms are evolving from tools for knowledge extraction and literature analysis into collaborative hubs that connect knowledge, computation, decision and experimental execution. By integrating information from papers, patents, laboratory records and process documentation, large language models can assist in building high quality datasets, extracting process pathways and failed experiment information, and coupling with agentic systems and automated experimental platforms, thus paving the way for self-driving closed-loop laboratories in functional ceramics research.

Summary and Prospects As functional ceramics are increasingly required for more advanced device platforms and harsher service environments, the demand for even higher levels of performance continues to grow. At the core of this challenge lies the persistent coexistence of multi-objective trade-offs and multi-scale problems. Therefore, we systematically summarize the paradigm shifts and representative advances brought about by the introduction of AI into materials research. We outline the broader landscape of AI-enabled functional ceramics research from the perspectives of data, model and application, and further summarize the key strategies and transformative pathways for this field through three major directions: intelligent inverse design, cross-scale intelligent computation and large-language-model-driven research platforms. As data infrastructure, model capability and closed-loop deployment technologies continue to mature, artificial intelligence is poised to evolve from an auxiliary analytical tool into a systematic design framework that connects knowledge, computation, decision and experimental execution, thereby advancing functional ceramics research towards a more efficient and scalable paradigm.

Keywords functional ceramics; inverse design; generative model; intelligent computing; large model