

特色专题

材料基因工程与智能科学: AI+时代无尽前沿

王毅^{1,2}, 李高楠^{1,2}, 刘哲^{1,2}, 高兴誉³, 王洪强^{1,2}, 宋海峰³, 杨明理⁴, 宿彦京^{5*}, Margulan Ibraimov⁶, 李金山^{1,2*}

摘要 面向 2040 现代化强国发展战略需求,以新材料、新质生产力和新产业融合发展为驱动,全面梳理强国战略和相关国家政策与行动纲要对前沿性-颠覆性关键技术和关键材料发展的共性需求,阐述了材料基因工程核心关键技术的发展与革新为人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新奠定重要基础。人工智能将进一步促进高通量智能计算软件/工具的开发、从高通量实验到自主实验范式革新并加速材料智能体的发展、数据资源节点和平台与数据标准规范的建设、新质生产力和新材料产业发展以及教育范式变革和新一代生力军培养。材料基因工程与智能科学的融合,正在以“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体模式,重塑材料科学与技术以及教育的底层逻辑。它不仅是单一学科的升级,更是一场涉及科研范式、产业生态和人才培养模式的系统性变革,将为新材料、新兴产业和未来产业等重点领域培养复合型人才。

关键词 材料基因工程;人工智能;大模型;数字孪生;智能体

“新材料产业是战略性、基础性产业,也是高技术竞争的关键领域”^[1],“一代材料,一代技术,一代装备”,新材料领域科技创新将大力推动新材料产业健康发展,为科技强国建设提供坚实的物质保障^[1]。材料基因工程(materials genome engineering, MGE)是材料领域的颠覆性前沿技术,将对材料研发模式产生革

命性的变革,全面加速材料从设计到工程化应用的进程,大幅度提升新材料的研发效率,缩短研发周期,降低研发成本,促进工程化应用^[2]。材料基因工程“高通量计算-高效实验-大数据”关键技术的融合,“设计-研发-应用”协同的思想和理念在新材料研发端彰显了巨大的潜能和前景,有效地提升了新材料研发效率和降低研发成本^[2-7]。随着全球科技的飞速发展,面向未来的科技战略成为推动先进材料创新与应用的重要动力。世界各国相继出台了众多国家战略规划,旨在通过前沿性、颠覆性科技创新加速材料领域的进步^[3,8-16]。“强国战略”驱动材料基因工程融合创新加速关键材料工程化的政策与行动纲要与中国人工智能发展与应用的战略规划路线如图 1 所示,从 1945 年美国发布的《科学:无尽的前沿》报告到 2020 年发布的《无尽前沿法案》体现了这一历史进程。报告中明确指出,“依赖外部力量获取基础科学知识的

1. 西北工业大学中国-哈萨克斯坦材料基因工程与智能科学“一带一路”联合实验室,西安 710072
2. 西北工业大学凝固技术全国重点实验室,西安 710072
3. 北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094
4. 四川大学材料基因工程研究中心,成都 610065
5. 北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心,北京 100083
6. 哈萨克斯坦国立大学固体物理与非线性物理系,阿拉木图 050040

收稿日期: 2025-05-08; 修回日期: 2025-06-09
基金项目: 国家重点研发计划项目(2024YFE0213600); 中国工程院科技战略咨询项目(2025-XZ-33)
作者简介: 王毅,教授,研究方向为极端条件先进材料基因工程与集成计算,电子信箱: wywang@nwpu.edu.cn; 宿彦京(通信作者),研究方向为材料大数据与人工智能,电子信箱: yjsu@ustb.edu.cn; 李金山(共同通信作者),研究方向为先进金属结构材料及其精确热成形技术,电子信箱: ljsh@nwpu.edu.cn
引用格式: 王毅,李高楠,刘哲,等. 材料基因工程与智能科学: AI+时代无尽前沿[J]. 科技导报, 2025, 43(12): 93-109; doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2025.05.00039

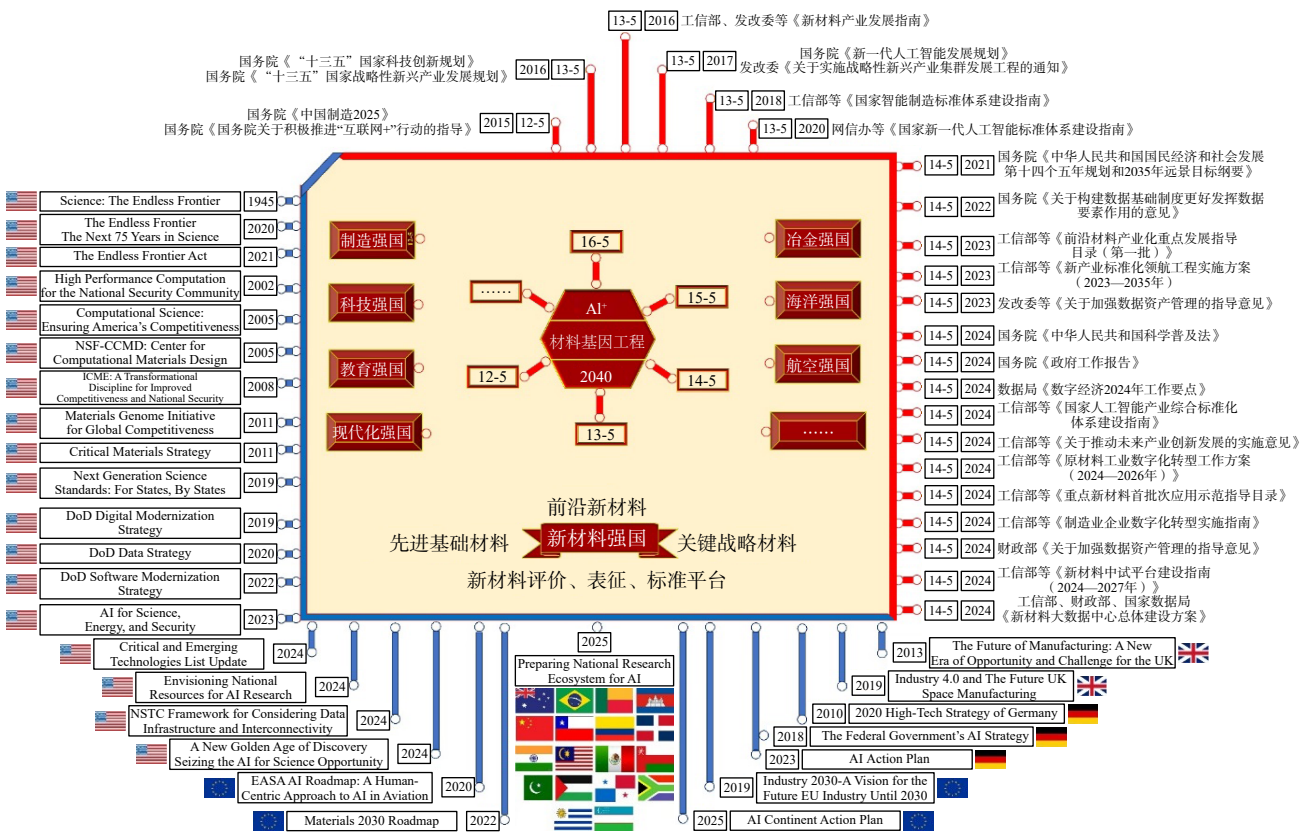


图1 “强国战略”驱动材料基因工程融合创新加速关键材料工程化的政策与行动纲要与中国人工智能发展与应用的战略规划路线

国家,其工业发展将受到制约,竞争力也将逐步削弱”,进一步展望未来75年科技发展趋势并以国际化竞争的态势制定了相应的科技战略竞争法案^[17-18]。同时,这一观点为全球科学技术和工业的革新奠定了理论基础,特别是《科学:无尽的前沿》报告中列出的原子弹、雷达和青霉素3个重要技术与产品的突破性进展,完美地诠释了科学研究和技术创新对工业(产业)发展、国家战略安全和人民健康领域的引领和重要支撑作用^[19]。从战略规划、应用实践、产业创新等方面全方位布局关键科学技术和产业创新和发展具有重要意义。欧盟《材料2030路线图》^[8]聚焦材料智能计算与设计技术、自主/智能化实验技术和装备、AI驱动的关键算法和技术、数字孪生、智能化研发平台与协同创新网络等关键技术,旨在通过智能化、协同化和可持续化的研发模式推进材料产业升级,建立一个强大的欧洲材料生态系统,推动绿色和数字转型,创建可持续的包容性欧洲社会。其中,在材料数字化方面,开发数字化和创新方法生成材料数据与知识,建立通用、标准化语言本体用于数据交换和知识管理,

提供可信任的数据获取和交换的分布式公共数据存储空间,开发语义和人工智能技术处理利用数据。在新材料加工和大规模生产方面,确立了涵盖工艺优化、脱碳、大规模定制、零缺陷生产、循环经济、多材料加工以及新材料加工等7个优先发展方向。相比之下,中国提出的《中国制造2025》战略旨在着力推动制造业从大到强的转变^[10]。然而,当前中国制造业仍面临着许多挑战,尤其是在材料研发和应用的深度融合上,工程应用研究和数据积累仍显不足,这不仅影响了材料的性能稳定性,也导致了技术标准的滞后与评估验证的不足。为应对这一挑战,中国出台了《新材料强国战略2035》等系列战略规划,提出了创新驱动、质量为先、绿色发展、结构优化与人才为中心的基本发展路径,重点推动数字化、网络化和智能化发展^[16]。

近年来,材料基因工程推动了大数据和人工智能与材料的深度融合,催生了材料智能技术,正在推动材料大数据和人工智能等基础设施的建设,预期实现关键材料及产业的数据链、工具链、创新链、产业链、

教育链、人才链融合的创新发展。

人工智能是一项前沿性、颠覆性和战略性技术,已成为全球科技发展和竞争的制高点。世界各国在人工智能赋能新材料发展领域已发布系列战略规划^[15, 20-21],如图1和图2^[22]所示。例如,2025年4月欧盟发布的《人工智能大陆行动计划》^[22]拟投资2000亿欧元围绕5大关键领域布局,旨在通过建设大规模AI计算基础设施、改善数据获取质量、加速AI在战略领域的应用、强化人才储备以及促进监管合规与简化,提升欧盟在AI领域的全球竞争力。通过该计划,将建设13家AI工厂和5家超级AI工厂,工厂内设超级计算机和数据中心。此外,欧盟将通过与伙伴国家的双边和多边合作,引领全球人工智能发展,支持创新并发展全球治理。该计划不仅为欧洲塑造人工智能未来提供了独特机会,也为成为领先的“人工智能大陆”奠定了基础。同时,美国提出的《2025年美中人工智能能力脱钩法案》将全面禁止AI技术和知识产权流动并杜绝中美之间的AI研发合作^[23]。相比之

下,中国在“历史性交汇期”,“把准了时代脉搏”,高度重视人工智能发展,“以人工智能引领科研范式变革,加速各领域科技创新突破”,“加强人工智能和产业发展融合,为高质量发展提供新动能”,“坚持自立自强,突出应用导向,推动人工智能健康有序发展”。例如,2016年人工智能写入了“十三五”规划纲要,2017年发布的《新一代人工智能发展规划》^[24]围绕产业化赋能与应用分别制定了2025年和2030年的中长期发展目标。同时,在“十四五”规划和2035年远景目标纲要中强调“培育壮大人工智能、大数据、区块链、云计算、网络安全等新兴数字产业”。2025年4月,习近平总书记深刻指出“中国人工智能在基础理论、关键核心技术等方面还存在短板弱项”;“必须在基础理论、方法、工具等方面取得突破”;“集中力量攻克高端芯片、基础软件等核心技术”;“构建自主可控、协同运行的人工智能基础软硬件系统”;“加快发展新一代人工智能是我们赢得全球科技竞争主动权的重要战略抓手”。

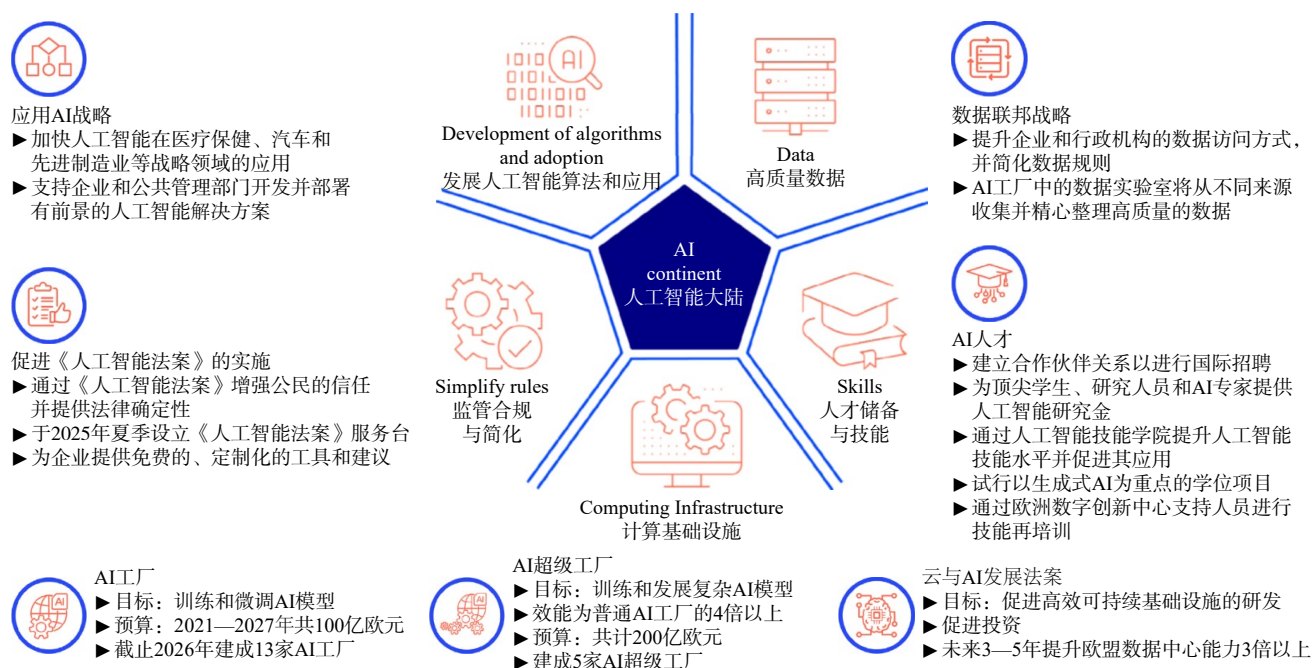


图2 欧盟《人工智能大陆行动计划》5大关键领域的规划及核心战略

本文分析了AI赋能时代MGE核心关键技术的发展与革新,面向2040现代化强国发展战略需求,以新材料、新质生产力和新产业融合发展为驱动,全面梳理制造强国、科技强国、材料强国、冶金强国、航空强国、海洋强国等强国战略,以及相关国家政策与行

动纲要对前沿性-颠覆性关键技术和关键材料发展的共性需求,阐述了材料基因工程核心关键技术的发展与革新为人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新奠定重要基础,人工智能将进一步促进高通量智能计算软

件/工具的开发、从高通量实验到自主实验范式革新并加速材料智能体的发展、数据资源节点和平台与数据标准规范的建设、新质生产力和新材料产业发展以及教育范式变革和新一代生力军培养。提出了强国战略牵引材料基因工程融合创新加速关键材料工程化的总体路线,倡导通过“产业数字化-数字产业化”融合发展新路径发展新质生产力进而贯通 AI 赋能 MGE 核心关键技术和产品的“产-学-研-用”全生命周期协同发展。

1 AI 时代 MGE 核心关键技术的发展与革新

材料基因工程变革传统研发流程和范式,激发人工智能赋能新材料全链条与全生命周期研发链核心

关键技术和产业的发展。图 3 中材料基因组计划 (materials genome initiative, MGI) 提出改变传统的单向、单流程、逐一递进研发模式,建立将新材料发现、性能优化、研发、系统设计与集成、产品认证、工业制造、工程化应用各环节融合的闭环迭代新架构,在新材料研发的每一个阶段与产品应用结合起来。在 2021 年发布的新版材料基因组计划中,进一步把产品应用作为核心,把上述各环节组成的纽带连接到一起^[6]。中国的材料基因工程在相对薄弱的基础上发展壮大,经历了从基础研究、共性技术、示范应用到工业推广多个阶段,从前期的聚焦研发链前端和中端,拓展到全流程应用,通过应用场景嵌入,加速新材料的工程化应用正在成为材料基因工程的重要目标。

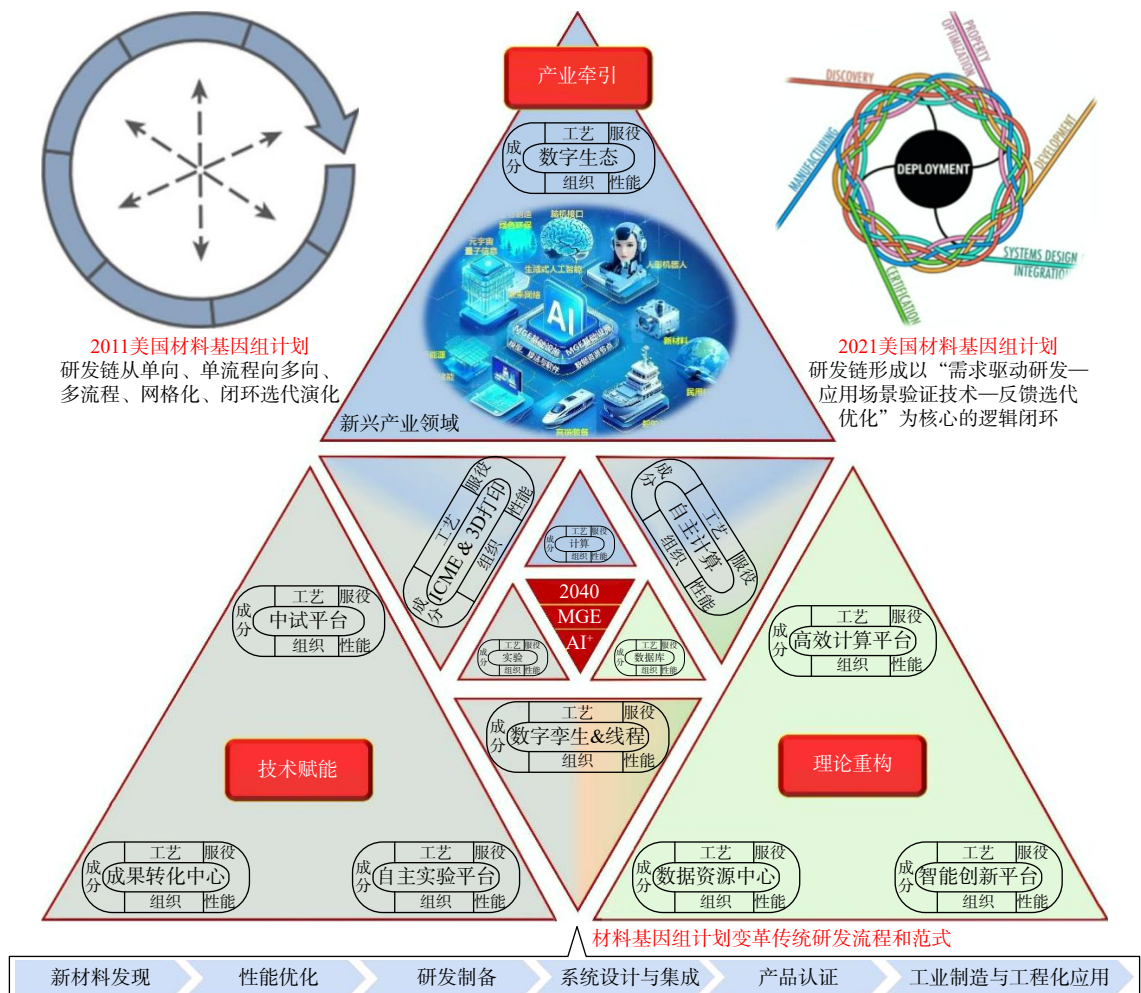


图 3 材料基因工程变革传统研发流程并形成“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体发展范式

材料基因工程对传统材料研发流程的重构,不仅是将各个环节简单地连接在一起,而是通过引入新的

技术和理念,实现研发效率的大幅提升,全面提升先进材料从发现到应用的速度^[25-26]。材料基因工程的闭

环迭代新架构以工程化应用为导向,从实际应用场景出发,反向推动材料的研发。在新材料研发方面,MGE高通量计算、高效实验、数据库等关键技术激发了“知识赋能-数据驱动”的智能研发范式革新,极大促进了AI技术在AI4Materials、AI4Science和AI4Research等交叉融合领域与工程应用领域的发展^[19, 21, 27-33]。同时,这些AI赋能范式聚焦于通过人工智能方法(如机器学习、深度学习、统计建模、数据分析、自动控制及相关技术)的开发与应用,从海量数据中构建预测模型,单独或与仿真模拟及可扩展计算相结合以推动科研突破,颠覆基于领域知识的逻辑推导关系进而形成跨尺度、宽时域、多参量间的映射关系和理论重构。在大数据技术体系的支撑下,以可视化分析为核心载体,整合高效计算/统计模型、智能算法与程序编码的协同方法学框架,为解决复杂工程科学命题提供了革命性研究范式,此类多模范式更易催生具有突破性价值的研究发现与重大技术创新^[34]。

现有研究表明,基于机器学习与深度学习技术并融合领域专家知识的材料发现方法,在钙钛矿型、染料敏化型及有机太阳能电池等新型光伏材料的研发中取得显著进展^[35]。高分子材料领域提出的PocketFlow模型创新性地采用数据-知识双驱动架构,其基于蛋白结合腔结构特征的分子生成框架显式嵌合化学知识图谱,实现了配体分子智能化设计^[36]。在核材料领域,领域知识赋能的解释性机器学习方法成功应用于铁素体-马氏体钢超临界水氧化行为研究,通过构建组分-测试环境-氧化行为的多元线性关联模型,从海量实验数据中挖掘出材料性能演化规律^[37]。在钢铁材料领域,北京科技大学建立的SteelBERT模型在420万份摘要和5.5万份全文的语料库预训练的基础上,采用解耦注意力机制实现了自然语言输入下钢铁知识的精准表征,并且通过64个奥氏体不锈钢实验样本对模型进行微调,成功预测出屈服强度960 MPa、抗拉强度1138 MPa、延伸率32.5%的新型15Cr奥氏体不锈钢,性能超越目前所有报道^[27]。生成式AI模型MaterGen基于60万条材料数据进行训练,能够处理材料的周期性和三维几何结构,以前所未有的精度创建具有特定化学、力学、电子或者磁性等性能的新化合物,速度提高了2倍,精度提升了17.5倍^[38]。首个理解材料原子结构的多模态大模型-MatterChat,将

预训练的机器学习原子间势与预训练的大语言模型(large language model, LLM)有效地对齐,从而降低培训成本并提高灵活性,显著提高了材料性能预测和人机交互的性能,超过了GPT-4等通用LLM^[39]。微软亚洲研究院基于GPT的生成式AI构建的NatureLM,通过生物、化学和材料科学等多领域数十亿条精心挑选的无标记数据进行预训练,扩展了现有大语言模型的能力,并保留了原始模型的语言能力,成为驱动科学发现和创新的跨领域AI大模型^[40]。工具增强型智能体-SciAgent结合了基础认知能力、工具使用技能、系统化思维和自适应学习,形成了一个远超各部分简单组合的整体智能系统^[41]。这一范式不仅提升了科学推理性能,也为AI系统设计提供了新的思路:不必追求全知全能的单一模型,而是构建能灵活运用外部资源的“智慧型智能体”^[41]。由此可见,材料基因工程变革传统研发流程,促进人工智能赋能新材料全链条与全生命周期研发链核心关键技术和产业发展,形成“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体发展范式。

1.1 高通量智能计算软件/工具

当前,新一轮科技革命与产业变革蓄势待发,全球新材料产业竞争格局正在发生重大调整。新材料与信息、能源、生物等高新技术加速融合,大数据、数字仿真等技术在材料研发设计中作用不断突出,“人工智能+”、材料基因组计划、智能制造等新技术新模式蓬勃兴起,新材料创新步伐持续加快,国际市场竞争将日趋激烈^[11]。例如,基于高通量计算关键技术的发展,在材料性能预测方面,MGE大力发展了利用量子力学、分子动力学等理论,通过高通量计算技术对大量材料的性能进行快速预测的模型、算法和软件,能够预测材料的热力学性质、动力学性质、导电性、导热性、强度、疲劳、蠕变等基本物性和服役性能(图4^[19]),揭示成分—工艺—结构—性能—服役全生命周期关键参量的关系,为新材料的筛选、设计和制备提供了理论依据和技术支撑,极大地减少了研发成本和时间,加速了新材料研发进程。例如,在原子尺度上,量子力学和密度泛函理论工具,如VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)、Quantum ESPRESSO和SIESTA(Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms),能计算材料的电子结构与量子性质,预测能带结构和化学键合等关键信息。

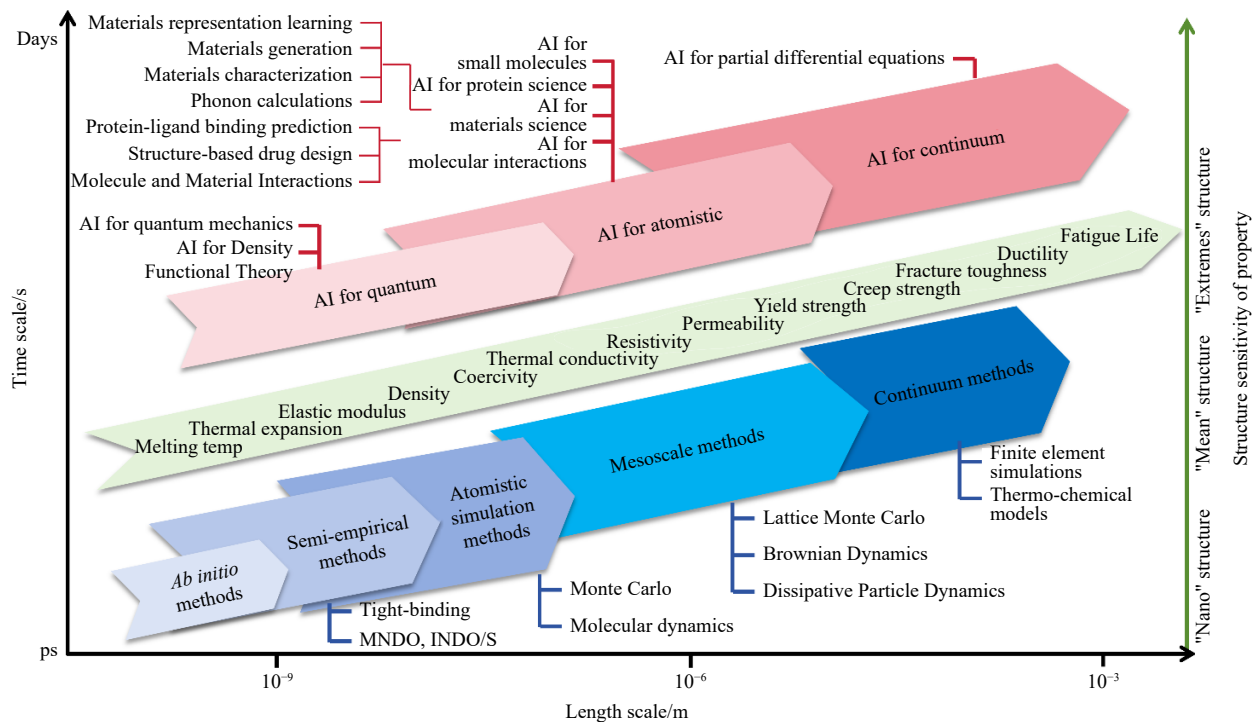


图4 人工智能赋能不同时间-空间尺度材料性质的计算方法

目前,中国自主开发的开源第一原理软件 ABACUS (Atomic-orbital Based Ab-initio Computation at USTC, 原子算筹)已用于大规模电子结构计算、原子结构优化及分子动力学模拟,主要性能指标达到或超越国际同类软件水平;通过结合通用计算显卡(GPGPU-General-Purpose Computing on Graphics Processing Units)加速技术,可进一步提高新材料研发效率(对含有 11164 个原子的 1.08 石墨烯摩尔纹原胞进行电子能带结构计算,由利用 2880~5760 个 CPU 核运算耗时约 30 d 降低为 GPGPU 运算 4.1 h)。分子动力学模拟工具如 LAMMPS、NAMD 和 GROMACS,模拟原子和分子随时间的动态行为,研究如相变和扩散等过程。当前,利用图形处理器加速的分子动力学模拟软件包 GPUMD(Graphics Processing Units Molecular Dynamics),在热输运、力学性质、结构相变、冲击模拟、离子输运、光谱计算、原子核量子效应、催化、腐蚀、辐照损伤及受限体系等多个研究领域表现出重要的应用价值。

在介观尺度上,动力学蒙特卡洛模拟弥补了原子尺度与连续介质尺度之间的空白,模拟材料中的化学反应与其他随机过程,帮助研究表面反应与催化等现象。相場方法则用于模拟材料微观结构演变,如晶粒

生长和裂纹扩展。在宏观尺度上,有限元分析和有限差分法工具,如 ANSYS、Abaqus 和 COMSOL,求解描述材料在加载条件下的行为,广泛应用于工程优化和材料响应预测。计算流体动力学工具如 OpenFOAM 和 ANSYS Fluent,研究流体在材料中的流动,促进热传导与流体力学等领域的发展。这些经典计算方法为研究人员提供了多尺度的强大工具,推动了新材料的开发,特别在能源、航空航天、电子和生物医学等领域取得了显著进展。

人工智能关键技术(特别是 LLM)的爆发式创新,极大地推进数字现代化与软件自动化和自主化进程,形成了数据模型化-模型算法化-算法软件化的“软件智能工程”自适应、自主化发展的新范式,提升了模型-算法-工具的开发效率,丰富了功能和创新性,极大优化用户体验。在工具和平台开发方面,基于 AI 的软件工具在材料科学与工程领域具有关键支撑作用,为研究人员和工程技术人员提供了多维方法论突破路径,显著推动其在材料发现、模拟仿真、结构设计与性能优化等核心环节实现重大创新突破^[19]。软件作为兼具强大效能与普适性的问题解决工具,其自动化实现标志着计算机科学领域长期探索的核心任务与特定领域知识的有机融合。依据麦肯锡数字化部门

发布的《2023 技术趋势展望报告》^[42],驱动下一代软件开发的基础技术体系包含 6 大核心要素:(1) 低代码/无代码平台—搭载图形处理器(GPU)赋能非专业开发者便捷构建应用程序;(2) 基础设施即代码(IaC)—采用机器可读代码实现数据中心等基础设施的快速重构与版本控制;(3) AI 代码生成—支持用户基于自然语言提示或已有代码上下文生成候选代码段;(4) 微服务与 API 接口—采用模块化架构设计,形成可独立部署且灵活组合的代码单元;(5) AI 测试框架—运用人工智能技术实现单元测试与性能测试的自动化执行,显著降低人工投入;(6) 代码自动审核—提供源代码质量校验与优化建议的智能化工具^[42]。

以生成式 AI 为代表的新兴技术正在深度重塑软件开发生命周期(涵盖规划、测试、部署与维护全流程)中的工程能力边界:一方面通过技术赋能显著提升开发效率,使复杂业务流程可简化为单一指令操作;另一方面大幅降低技术准入门槛,使非技术背景人员也能参与应用程序构建^[42]。例如,DeepMind 开发的 AlphaCode 智能工具,可自动读题、理解并编程,不但提高了编程效率和代码质量,而且展现了深度学习在 LLM 和代码生成领域的强大能力,在推动 AI 技术创造性发展和改变编程模式等方面具有重要作用^[43-44]。此外,软件解决方案已全面渗透机器学习工作流的各个环节,包括数据治理、模型开发、部署运行、在役模型运维等全生命周期管理,并形成与之配套的硬件工具链支撑体系^[42]。

1.2 从 ICME 与高通量实验到自主实验范式革新 激发材料智能体的蓬勃发展

集成计算材料工程(ICME)通过整合计算建模、实验验证和工程设计,采用多尺度建模技术将原子尺度到宏观尺度的物理过程统一起来,使研究人员能够在材料制备和产品制造前优化工艺参数并预测产品性能。ICME 涵盖产品开发的关键环节,包括材料性能数据库、微观结构模型、微观结构-性能关联模型以及成本分析模型等^[20]。其中,与高通量计算、数据库和科学装置相结合而发展的原位和实时高通量实验制备与表征技术将极大促进新原理、新方法和新技术的突破,并进一步提供跨尺度和宽时域的重要数据基础和技术支撑^[26, 45]。然而,随着材料设计复杂度的提升,传统 ICME 方法在处理高维度、多变量和非线

性行为时面临重大挑战。AI 技术的融合为 ICME 提供了新的解决方案^[19],在多尺度建模领域,AI 赋能的 ICME 系统能够整合跨尺度数据并自动优化模型参数,大幅提高了模型的预测精度和适用性^[22]。如图 5^[19, 27]所示,先进材料的智能设计与制造范式正从基于知识和数据驱动的 ICME 方法^[20]逐步演进至“AI+”时代,推动材料设计从“设计材料”到“用材料进行设计”的转变,并驱动 AI+范式从“嵌入式 AI”向“协作式 AI”及正在发展的“AI 智能体”阶段快速演化^[19]。材料基因组计划强调实验工具、计算工具和数据库的主导作用及其交互,而人-信息系统-物理系统(human-cyber-physics, HCPs)三元融合并注重 HCPs 系统间的交互与协同^[26],这些交叉领域共同指明了先进 AI 技术的未来应用方向。机器学习(machine learning, ML)算法通过识别关键数据关系,加速基础材料认知和科学研究,强化人-物和人-机交互,进而产生科学知识和模型^[27]。通过知识数字化,信息-物理系统(cyber-physical systems, CPS)可集成多种工具实现知识数字化,并协同开发新材料及可靠的制造工艺^[28]。由数据和 ML 驱动的工业 4.0 正通过信息物理系统连接物理与数字世界,这种模式已发展为材料 4.0^[28]。对比自上而下的工程路线与自下而上的计算设计方法,不同背景颜色的箭头直观呈现了实验链与理论链的数字孪生特性,同时揭示了智能设计与制造过程中成分-工艺-结构-性能-功能(composition-processing-structure-properties-performance, CPSP)之间的内在关联。

值得一提,数字孪生作为实现信息世界与物理世界实时交互的关键技术,已成为飞机、高铁和发动机等智能装配和制造的核心技术^[19, 29]。另一方面,基于 CPSP 关系,工艺-结构与结构-性能模型凸显了材料知识在从数据信息向制造转化过程中的关键作用,同时揭示了通往智能制造的技术链和价值链^[29-30]。

随着大语言模型和生成式 AI 技术的发展^[31-34],AI 在加速材料发现与制造中的贡献将从嵌入式 AI 模式的约 30% 提升至协作式 AI 模式的 50%,甚至可能达到 AI 智能体模式的 80%^[19]。值得一提的是,2025 年 2 月,美国国防部发布了《人工智能赋能系统研制试验与鉴定指南》,基于 2022 年美国国防部发布的《试验与鉴定组织体指南》提供一般试验和鉴定指导,

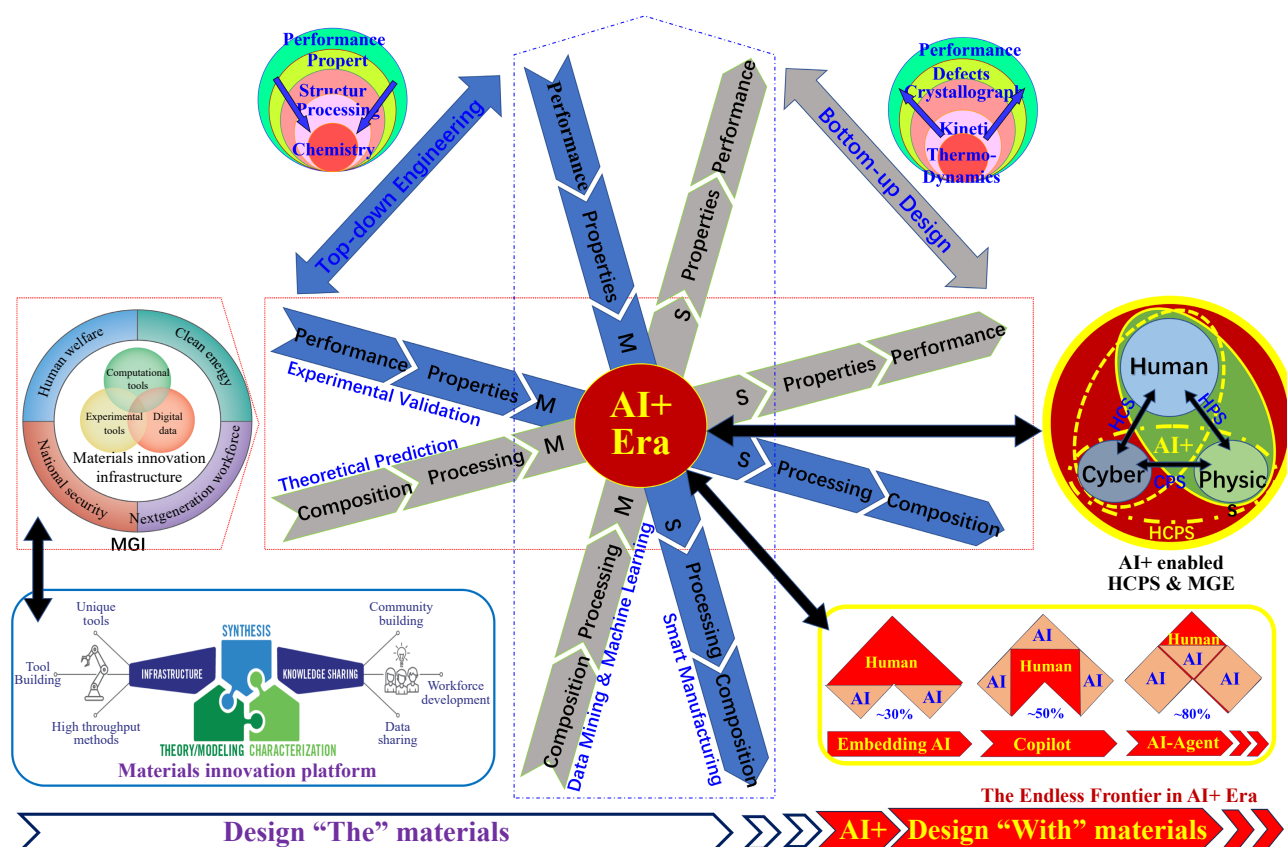


图5 人工智能赋能时代背景下先进材料智能设计与制造范式从“材料设计”向“用材料进行设计”的范式转变驱动 AI+范式从嵌入式 AI、协作式 AI 到当前发展的 AI 智能体的跨越式发展

重点聚焦人工智能模型对试验策略、规划、准备、执行、分析和报告的影响,最终目标是成为美国国防部人工智能工作的宝贵资源,提升美国国防部有效开展人工智能技术试验与鉴定的能力,并确保这些技术能够成功集成应用到国防领域。法国达索公司在 3DEXPERIENCE 平台上开发了 AI 智能体 AURA^[46]。AURA 面向工业产品设计、仿真优化、数字孪生建模和工程决策支持,服务对象为工业设计师、工程师、制造企业及技术专业人员。AURA 的开发旨在解决工程师在复杂项目中面临的时间压力问题。通过自动化装配过程中的重复性工作,AURA 不仅提高了生产效率,还减少了人为错误,使设计团队能够更快地迭代和优化产品设计。随着生成式人工智能的普及,设计人员和工程师正在寻找新方法以探索更多的设计可能性。其中,CATIA(计算机辅助三维交互式应用)提出了一种不同的生成式人工智能方法,通过在各种应用中使用机器和深度学习来解决产品开发时间和上市时间问题,该方法基于根据行业特定数据开

发的模型,这些模型是根据行业流程的知识和专业技术生成的,将上市时间提速高达 300%,将质保成本降低 10%,通过标准化和模块化将重用率提升至 80%^[46]。此外,通过达索 CATIA Visual Scripting,用户现在可以轻松地通过直观的无代码、算法方法创建复杂且智能的设计,同时使创作过程更快、更高效、更灵活。通过 CATIA 性能驱动的创成式设计解决方案,可以获得创成式人工智能的协助,具体包括:(1) 为创新、高性能的结构和组件创建拓扑优化的零部件和组件,广泛应用于各种工程学科和领域(航空航天、汽车、工业装备);(2) 为快速生成车身和底盘结构提供专用解决方案,以便在概念阶段早期就能探索成数千种备选方案,如新电动汽车平台(底盘-车身)架构;(3) 进行多材料概念研究,以优化结构组件的布局和拓扑,从而在满足设计约束条件(如复合材料飞机机翼)的同时,最大限度地提高刚度、强度和效率^[46]。中国华为盘古大模型基于 5+N+X 架构,建立了包括自然语言、视觉、多模态、预测和科学计算大模型共计 5 个

基础大模型,为 N 个行业大模型以及 X 个细化场景提供模型服务。其数据工程套件、模型开发套件和应用开发套件将加速大模型的行业落地应用。基于盘古大模型的自然语言理解能力,机器人可以识别自然语言,执行命令,并具备全域感知引导的自主智能,服务智能服务机器人、智能制造和智能驾驶行业领域。华为云将 CodeArts 研发工具与盘古大模型相结合,正式发布了面向开发者的智能编程助手 CodeArts Snap。该工具训练了 760 亿行精选代码、1300 万篇技术文档,具备智能生成、智能问答、智能协同 3 大核心功能,可以实现一句对话让代码生成、一次点击即可自动注释和生成测试用例,一条指令即可智能部署,让每个软件开发人员都有自己的编程助手。华为云通过盘古基础大模型赋能 MetaStudio 数字内容生产线,打造了盘古数字人大模型,提供模型生成和模型驱动两大服务,并已经使用了 20 万 h 音视频数据进行了预训练。

由此可见,在知识驱动的集成计算材料工程时代迈向人工智能赋能(AI+)时代的转型过程中,智能设计与制造的范式将迎来从“设计材料”到“用材料共创”的深刻变革,这必将推动整个产业向更高层次的智能化与创新迈进,促进中国制造业向“创造”、“质量”和“品牌”的发展迈进^[19, 35-36]。

1.3 数据资源节点和平台与数据标准规范

数据是未来知识型生产的原料和基石。材料数据资源是历代材料人的劳动成果,是新材料科技原始创新和产业智能化发展的重要条件基础,是经济社会、国防建设的重要基础性战略资源,是数字化和智能化时代的重要生产要素,关系着国家材料科技和产业未来的发展。通过集成材料计算、工艺仿真、孪生建模和数据决策等技术,面向关键环节进行反馈,设计开发新材料,优化工艺流程,解决材料、工艺、产品和装备短板,消除安全和质量隐患,提高关键材料、产品和装备的稳定批产能力和全生命周期管理能力,实现供应链、产业链、技术链和价值链自主可控,有助于发展高新技术产业和战略新兴产业。新质生产力以科技创新为关键核心,在最大程度释放人的创造性和保护生态环境的基础上,以战略性新兴产业和未来产业为支柱,构建现代化产业体系。新质生产力的发展与数字智能时代关联,能够在产业结构高端化、生

产流通智能化、核心技术自主化、数字实体融合化以及产业发展低碳化等方面推动现代化产业体系的构建。为解决基础研究-工程应用间“最后一公里”问题和成果转化中试环节“断链”问题,加快构建新材料中试平台,助力科技成果向现实生产力转化,畅通新材料研发与产业化链接通道^[47-48]。

美国主导形成的“数据-算法-工具链”闭环逐步成为了全球新材料研发的主流技术,并且建立技术-标准-政策体系,将美国置于全球新材料创新网络的根服务器位置。美国和欧洲主导的材料数据互操作性标准等方式将成为新一代材料智能化研发技术上的准入壁垒。随着材料基因工程发展,区域化材料创新联盟和平台型企业正在兴起。欧盟通过《欧洲材料创新战略》投入 130 亿欧元建设本土数据平台。日本成立“材料创新联盟”聚焦关键材料国产化,减少对中国供应链的依赖。中国成立了新材料大数据联盟,500 余家企业、科研院所和高等学校共同参与构建国家材料数据中心,构建材料大数据生态。这些区域化联盟的出现,旨在减少对外部供应链的依赖,增强本地区的材料创新能力。通过联盟内部的合作,各成员可以共享技术、数据和人才资源,提高材料研发的效率和质量。这种区域化联盟的兴起,进一步加剧了全球新材料产业链的分化。

面向新质生产力发展需求,可以发现中国材料数据资源整合和数据体系建设长期未被充分重视,缺乏统筹布局和长期规划,数据生产、管理及共享体制尚不健全,科研单位和企业积累数据和共享数据意识不足,缺乏相应的激励机制和知识产权保护法规及措施,生产、共享和应用数据的生态尚未形成;材料人工智能技术和应用软件发展滞后,材料数据碎片化严重,利用效率和应用水平低,材料数据的重要价值尚待进一步挖掘;材料全产业链条数字化研发与智能制造技术尚处于起步发展时期,材料数据联通融合和支撑能力不足,缺乏统筹引导和政策支持;材料数据积累和共享服务缺乏统一的标准规范、权益保障和激励机制,材料数据体系的发展缺乏良好的政策、文化和商业生态^[49]。上述原因导致中国材料数据有效资源匮乏,发展水平与西方国家差距巨大,是材料领域短板中的短板,严重掣肘了关键材料“卡脖子”问题的解决,制约着材料科技原始创新能力提升和材料产业升

级换代与智能化发展,成为影响材料智能化创新发展的最大瓶颈^[49]。

通过顶层设计、整体布局、统筹实施,建设新材料大数据中心,发展材料数据安全与协同网络,构筑独立自主的材料数据资源体系和共享机制,形成国家材料数据战略资源,发展材料大数据和人工智能颠覆性前沿技术,推动数据驱动的材料智能化创新发展,是实现引领国际材料前沿发展的技术基础,是提升材料科技和产业原始创新能力的源动力,也是提高材料新兴产业和智能制造发展水平的重要途径。材料数据体系建设对于补齐新材料产业发展的基础技术短板和持续创新能力短板,抢占新材料发展先机,显著加速新材料的研发和应用进程,推动新材料科技的变革和产业的跨越式发展具有重大的战略意义^[49]。

2 AI+MGE 助力新质生产力和新材料产业发展

人工智能成为经济发展的新引擎^[20]。人工智能作为新一轮产业变革的核心驱动力,将进一步释放历次

科技革命和产业变革积蓄的巨大能量,并创造新的强大引擎,重构生产、分配、交换、消费等经济活动各环节,形成从宏观到微观各领域的智能化新需求,催生新技术、新产品、新产业、新业态、新模式,引发经济结构重大变革,深刻改变人类生产生活方式和思维模式,实现社会生产力的整体跃升。中国经济发展进入新常态,深化供给侧结构性改革任务非常艰巨,必须加快人工智能深度应用,培育壮大人工智能产业,为中国经济发展注入新动能^[20]。如图6所示,材料基因工程数据库和大数据技术赋能新一代智能制造业务场景,极大降低了研发周期、成本、质量偏差、故障率等关键业绩指标,并提高设备运行效率、质量、设备综合效率等。通过集成材料计算、工艺仿真、孪生建模和数据决策等技术,面向关键环节进行反馈,设计开发新材料,优化工艺流程,解决材料、工艺、产品和装备短板,消除安全和质量隐患,提高关键材料、产品和装备的稳定批产能力和全寿命周期管理能力,实现供应链、产业链、技术链和价值链自主可控,有助于发展高新技术产业和战略新兴产业。

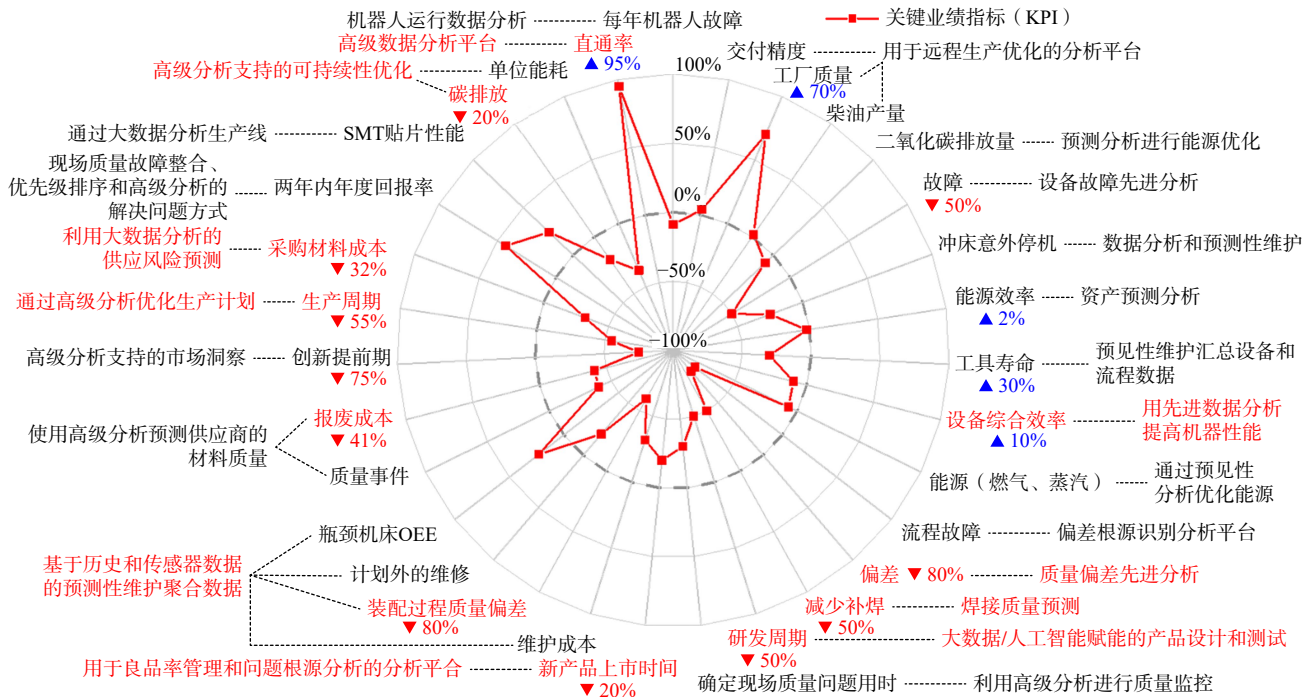


图6 数据库和大数据技术赋能新一代智能制造业务场景的关键业绩指标统计分析

同时,人工智能关键技术赋能发展新一代智能制造业务场景,极大地提高了劳动效率、研发技术转移的速度、机器效率、研发周期效率等关键业绩指标,

并降低了废品率、产损率和检测成本等,如图7所示。以应用场景需求为牵引,人工智能关键技术将深度融入智能制造业务场景,贯穿审计、生产、物流、销

售、服务等产品全生命周期,重点突破自感知、自决策、自执行、自适应、自学习等核心关键技术,旨在提高制造业质量、生产效率效益和提供柔性的先进生产方式,促进工业软件、工业装备、生产工艺和服务模式等方面的创新,加速工业大模型及其标准的落地应

用^[50]。例如,中国电信面向钢铁行业提出了节能控制大模型,通过引入时序预测大模型协同融合赋能工业应用,可将实施周期压缩 10% 左右;同时结合时序大模型的预测能力和翼云控的实时响应能力,解决控制响应滞后的问题,将节能率提升 3%~5%^[50]。

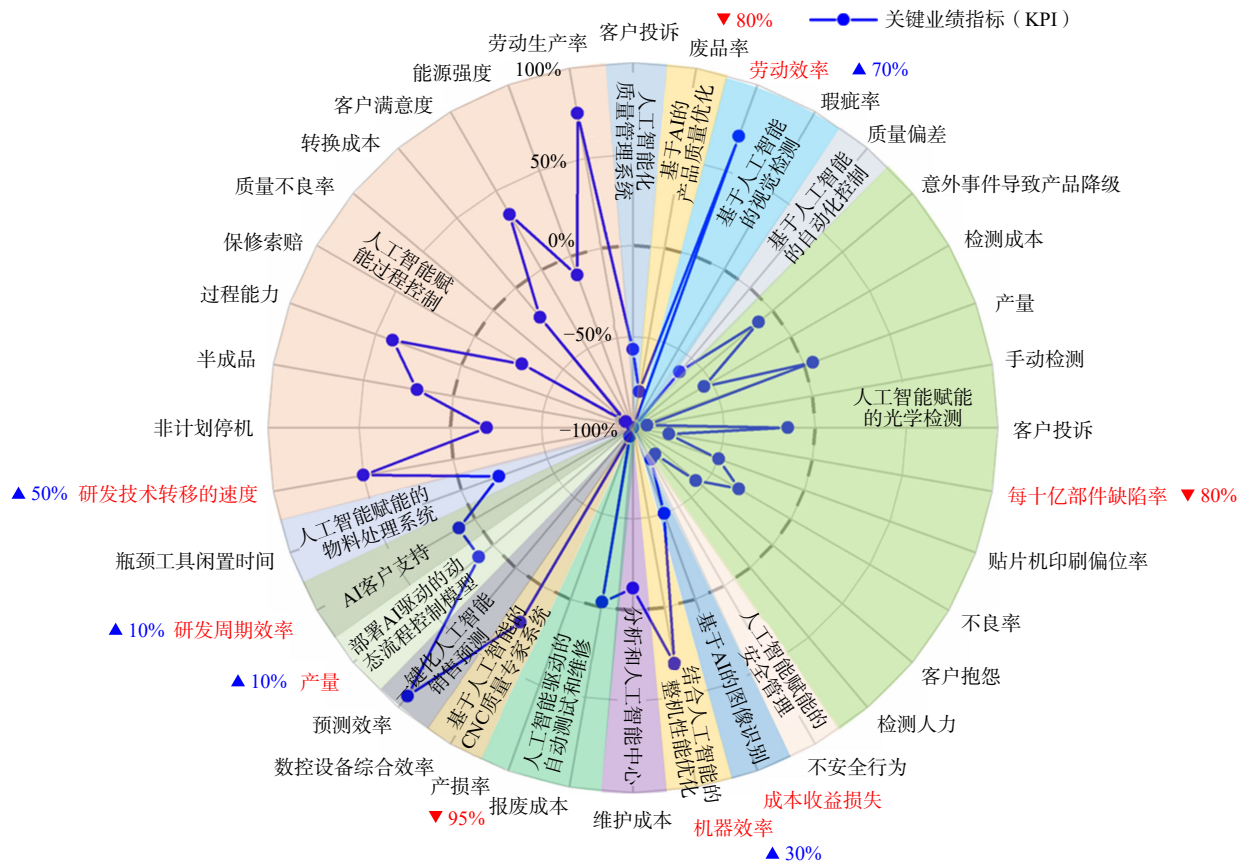


图7 人工智能关键技术赋能发展新一代智能制造业务场景的关键业绩指标统计分析

以数字孪生赋能工程应用和产业化发展为例^[51],首先,“政产学研”合力推动数字孪生上升为国家战略。自密歇根大学教授格里芬于 2002 年提出数字孪生概念后,美国航空航天局于 2010 年在太空技术路线图中将数字孪生列为重要技术,并首次进行了系统论述。此后,美国国防部、美国海军开始加大数字孪生资金投入,计划在未来 10 年投入 210 亿美金支持数字孪生发展。同时,龙头企业也将数字孪生作为重点布局方向,如洛克希德·马丁公司将其列为 2018 年顶尖技术之首;2020 年 5 月 ANSYS、微软、戴尔等组建数字孪生联盟开展合作和布局,该组织将推动数字孪生体系架构、安全和互操作性方面的一致性,以帮助从航空航天到自然资源等诸多行业中数字孪生技术

的使用。其次,依托航空航天基础优势,探索形成了成熟的应用路径。第一阶段,基于系统级的离线仿真分析进行资产运维决策。第二阶段,在仿真基础上,完善了系统仿真的工程规范和路径(即在仿真模型构建初,给定每一个模型标识及属性关系为后面研发、制造时模型集成融合奠定基础),形成了一套复杂基于模型系统工程(MBSE)。例如,洛克希德·马丁公司采用 MBSE 统一的企业管理系统需求架构模型,并向后延伸到机械、电子设备和软件的设计和分析,极大提升了复杂产品设计效率。第三阶段,推动数字孪生应用拓展到全生命周期。如 2024 年 5 月底,特斯拉 SpaceX 发射载人“龙”飞船升空,基于数字孪生实现飞船的研发、生产、运维报废全生命周期管理,首次

实现飞船报废回收,极大降低了下一代飞船生产成本。再次,进行供给侧企业加快技术创新,利用新一代信息技术优化数字孪生应用效果。如在“物联网(IOT)+仿真”方面,ANSYS和PTC合作构建泵数字孪生体,实现实时数据驱动的仿真诊断,相较于传统离线仿真,大大提升了诊断的及时性和准确性。在“AI+仿真”方面,MathWorks将数据分析工具Matlab和仿真产品Simulink打通,将Matlab人工智能训练数据集输入Simulink进行仿真及验证分析,极大优化了仿真结果。

中国发展人工智能具有良好基础,国家部署了智能制造等国家重点研发计划重点专项,印发实施了“互联网+”人工智能三年行动实施方案,从科技研发、应用推广和产业发展等方面提出了一系列措施。自“十三五”以来,国务院、科技部、国资委和工信部等部门发展举措,指明了强国战略驱动材料基因工程融合创新加速关键材料工程化的政策与行动纲要(图1)。可以看出,2010年《国务院关于加快培育和发展战略性新兴产业的决定》明确提出的重点发展的7大领域(如节能环保、新能源、新材料、高端装备等),为战略性新兴产业的发展指明了方向。自此,2016年《“十三五”国家战略性新兴产业发展规划》首次系统阐述了战略性新兴产业集群的概念,明确提出要形成一批国际领先和具有竞争力的产业集群。2017年,国家发展改革委发布《关于实施战略性新兴产业集群发展工程的通知》,正式启动了对战略性新兴产业集群的专项支持。2021年,《“十四五”国家战略性新兴产业发展规划》提出,到2025年培育若干具有全球竞争力的战略性新兴产业集群。目前,由国家发改委牵头,中国陆续认定了66个国家级战略性新兴产业集群。2024年发布的第五次全国经济普查结果表明,2023年末,全国从事战略性新兴产业生产的规模以上工业企业法人单位已达9.60万个,其中,新一代信息技术产业1.50万个,高端装备制造业1.45万个,新材料产业2.04万个,生物产业1.49万个,新能源汽车产业0.32万个,新能源产业1.17万个,绿色环保产业1.63万个,航空航天产业0.12万个,海洋装备产业0.02万个^[52]。数字经济核心产业企业法人单位高达291.6万个,全年实现营业收入484485亿元,其中数字产品制造业26.2万个,数字产品服务业27.4

万个,数字技术应用业143.0万个,数字要素驱动业95.0万个。由此可见,自“十二五”和“十三五”以来,中国新材料产业发展取得了长足进步,创新成果不断涌现,龙头企业和领军人才不断成长,整体实力大幅提升,有力支撑了国民经济发展和国防科技工业建设。

函需重点指出,中国新材料产业起步晚、底子薄、总体发展慢,仍处于培育发展阶段;材料先行战略没有得到落实,核心技术与专用装备水平相对落后,关键材料保障能力不足,产品性能稳定性亟待提高;创新能力薄弱,产学研用合作不紧密,人才团队缺乏,标准、检测、评价、计量和管理等支撑体系缺失;产业布局乱,低水平重复建设多,低端品种产能过剩,推广应用难等问题没有根本解决,仍然是制约制造强国建设的瓶颈。

基于结构材料基础,聚焦2040新兴产业8大领域和未来产业9大领域发展需求^[53],材料基因工程促进人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新(图8)。随着中国传统产业持续优化升级,新一代信息技术、新能源、装备制造、航空航天、轨道交通、海洋工程、健康医疗等战略性新兴产业加速发展,未来制造、未来信息、未来能源、未来空间和未来健康等未来产业加快落地,为新材料提供了繁荣的应用场景,牵引新材料技术不断迭代升级,创造释放出巨大的市场增量^[21]。材料科技成果落地要跨越“基础研究—工程化—产业化”各个阶段,中试已成为材料产业发展新质生产力的薄弱环节。材料基因工程高通量制备和表征技术的发展,极大促进了高效能的数字化/智能化装备研发,进一步加速了工艺智能优化技术的迭代速率和效能,并促进关键成果与技术的工程化和产业化落地应用,形成了新材料中试平台建设的助推力。同时,AI辅助设计与制造已被视为一种强大的数据驱动型技术,数据+人工智能已经成为材料基因工程的核心^[20,25,54]。AI通过解析微观结构与宏观性能的关联规律、学习海量实验与模拟数据,显著提升了材料性能预测的准确性^[21],尤其在缺乏明确物理模型的场景中展现出独特优势。因此,建设新材料中试平台将进一步提升新材料产业链与创新链融合发展,加速科学研究和技术开发成果产业化,促进产业发展模式从规模速度型向质量效益型和创新引领型转变,加快形成新

质生产力,增强发展新动能,对全面提升新材料产业核心竞争力,构筑国际竞争新优势产生重大深远影响。坚持以突破关键共性技术为出发点,以实现标志性材料产业化为落脚点,以提升中试基础条件和服务能力为着力点,聚焦短板材料突破和前沿材料创新,

加快打造一批基础条件好、技术实力强、转化效率高的高质量新材料中试平台^[55]。坚持“市场主导、政府引导”,“立足基础、服务产业”,“因地制宜、形式多样”,“协同联动、开放共享”原则,采取“三步走”方式,加快新材料中试平台建设^[56]。



图8 材料基因工程助力人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新

3 AI+MGE 激发教育范式变革和新一代生力军培养

在 AI 赋能的时代背景下, MGE 聚焦高通量计算与自主计算、高通量实验与自主实验室、数据库与数据挖掘、机器学习与人工智能等材料基因工程与智能科学的主要关键技术,进行先进材料智能设计和智造的示例阐述;以大语言模型为基座,进行“知识+数据+算法”的问答式教学,促进教师从“知识传播者”向“系统架构师”转变,启发学生进行知识图谱和智能体构建,培养“知识赋能-数据驱动”的系统思维和决策能力,发展教学新范式,催生适应未来科技创新与产业需求的“跨界型”人才。2025 年 4 月,习近平总书记强调“人工智能是年轻的事业,也是年轻人的事业”,“跑好历史的接力棒,在推进中国式现代化的宽广舞台上绽放绚丽的青春光彩”,“完善人工智能科研保障、职业支持和人才评价机制,为各类人才施展才华搭建平台、创造条件”,“推进人工智能全学段教育和全社会通识教育,源源不断培养高素质人才。”从制度保障到人才培育体系,既着眼当下需求,也为未

来积蓄力量。面向教育强国战略需求,年轻人既要有仰望星空的技术理想主义信念,又要有脚踏实地的务实主义精神。

材料基因工程教育体系的革新,正在为国家科技创新提供持久动力。材料基因工程涉及材料科学、计算机科学、信息科学、物理学、化学等多个学科领域,对高层次和复合型人才的知识结构要求很高。目前相关跨学科人才短缺,难以满足产业发展的需求。培养跨学科人才需要整合多个学科的教学资源、师资力量和高层次人才,建立跨学科的课程体系和培养模式。这不仅需要高校和科研机构的共同努力,还需要企业的参与和支持,但目前这种跨学科人才培养模式还不够成熟。材料基因工程技术发展迅速,新的理论、方法和技术不断涌现。知识的更新和传播相对滞后,导致许多企业和研究人员无法及时掌握最新的技术动态。目前尚缺乏针对材料基因工程技术的专业培训体系,企业和研究人员难以获得系统的培训和学习机会。这影响了技术的推广应用和产业的发展。材料基因工程与智能科学的融合,正在以“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体模式,重塑材料科学教育的

底层逻辑。它不仅是单一学科的升级,更是一场涉及人才培养模式、科研范式、产业生态的系统性变革。将先进技术和重要成果作为典型示例引入课堂和写入教材,变革教育和教学范式,培养新兴产业、未来产业和新材料所需的高层次和复合型人才。

4 结论

面向 2040 现代化强国发展战略需求,以新材料、新质生产力和新产业融合发展为驱动,全面梳理强国战略和相关国家政策与行动纲要对前沿性-颠覆性关键技术和关键材料发展的共性需求,阐述了材料基因工程核心关键技术的发展与革新,为人工智能数据基础设施、材料大模型基座、新材料研发及其产业应用等关键核心技术创新奠定重要基础。

人工智能将进一步促进高通量智能计算软件/工具的开发、从高通量实验到自主实验范式革新并加速材料智能体的发展、数据资源节点和平台与数据标准规范的建设、新质生产力和新材料产业发展,以及教育范式变革和新一代生力军培养。AI 赋能 MGE 核心关键技术的发展与革新,极大地推进数字现代化与软件自动化和自主化进程,形成了数据模型化-模型算法化-算法软件化的“软件智能工程”自适应、自主化发展的新范式,提升了模型-算法-工具的开发效率,丰富了功能和创新性,极大优化用户体验。通过 AI+MGE 将助力完成“在基础理论、方法、工具等方面取得突破”,“集中力量攻克基础软件等核心技术”,“构建自主可控、协同运行的人工智能基础软硬件系统”的时代使命。同时,重点强调通过顶层设计、整体布局、统筹实施,建设新材料大数据中心,发展材料数据安全与协同网络,构筑独立自主的材料数据资源体系和共享机制,形成国家材料数据战略资源,发展材料大数据和人工智能颠覆性前沿技术,推动数据驱动的材料智能化创新发展,是实现引领国际材料前沿发展的技术基础,是提升材料科技和产业原始创新能力的源动力,也是提高材料新兴产业和智能制造发展水平的重要途径。

材料科技成果落地要跨越“基础研究—工程化—产业化”各个阶段,中试已成为材料产业发展新质生产力的薄弱环节。建设新材料中试平台将进一步

提升新材料产业链与创新链融合发展,加速科学研究和技术开发成果产业化,促进产业发展模式从规模速度型向质量效益型和创新引领型转变,加快形成新质生产力,增强发展新动能,对全面提升新材料产业核心竞争力,构筑国际竞争新优势产生重大深远影响。材料基因工程与智能科学的融合,正在以“理论重构、技术赋能、产业牵引”三位一体模式,重塑材料科学与技术以及教育的底层逻辑。它不仅是单一学科的升级,更是一场涉及科研范式、产业生态和人才培养模式的系统性变革,将为新材料、新兴产业和未来产业等重点领域培养复合型人才。材料基因工程推动了大数据和人工智能与材料的深度融合,催生了材料智能技术,正在推动材料大数据和人工智能等基础设施的建设,预期实现关键材料及产业的数据链、工具链、创新链、产业链、教育链、人才链融合的创新发展。

参考文献(References)

- [1] 干勇. 加快科技创新, 开启新材料强国建设新篇章[J]. 前瞻科技, 2025, 4(1): 4-5.
- [2] 宿彦京, 付华栋, 白洋, 等. 中国材料基因工程研究进展[J]. 金属学报, 2020, 56(10): 1313-1323.
- [3] Ward C H. Materials genome initiative for global competitiveness[EB/OL]. [2025-06-09]. https://www.mgi.gov/sites/mgi/files/materials_genome_initiative-final.pdf.
- [4] Materials Genome Initiative. Initiative, materials genome initiative strategic plan[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://www.federalregister.gov/documents/2014/06/20/2014-14392/materials-genome-initiative-strategic-plan>.
- [5] Xie J X, Su Y J, Zhang D W, et al. A vision of materials genome engineering in China[J]. Engineering, 2022, 10: 10-12.
- [6] National Science and Technology Council. Materials genome initiative strategic plan[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://www.mgi.gov/sites/mgi/files/MGI-2021-Strategic-Plan.pdf>.
- [7] Zikui L. Perspective on materials genome[J]. 中国科学通报: 英文版, 2014, 59(15): 1619-1623.
- [8] European Union. Materials 2030 roadmap[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://www.ami2030.eu/roadmap/>.
- [9] United State Department of Defense. National Defense Science & Technology Strategy 2023[EB/OL]. [2025-06-09].

- <https://media.defense.gov/2023/May/09/2003218877/-1/-1/0/NDSTS-FINAL-WEB-VERSION.PDF>.
- [10] 中华人民共和国中央人民政府. 国务院关于印发《中国制造2025》的通知[EB/OL]. [2025-06-09]. https://www.gov.cn/zhengce/content/2015-05/19/content_9784.htm.
- [11] Panchanathan S. Envisioning the future of the AI research ecosystem[J]. PNAS Nexus, 2024, 3(2): 21.
- [12] US National Science Foundation. NSF invests \$162 million in research centers to accelerate materials science from lab to factor[EB/OL]. (2023-06-26) [2025-06-09]. <https://www.nsf.gov/news/nsf-invests-162-million-research-centers>.
- [13] European Commission. The EU framework programme for research and innovation[EB/OL]. [2025-06-09]. [https://www.europarl.europa.eu/thinktank/en/document/EPRS_IDA\(2017\)608697](https://www.europarl.europa.eu/thinktank/en/document/EPRS_IDA(2017)608697).
- [14] Panchanathan S, Prabhakar A. Strengthening and Democratizing the U. S. Artificial Intelligence Innovation Ecosystem—An implementation plan for a national artificial intelligence research resource[EB/OL]. [2025-06-09]. https://nsf-gov-resources.nsf.gov/2023-10/NAIRR-TF-Final-Report-2023.pdf?VersionId=2RqgASgtGLzEI6QKsMIL.MWITnjgrmh_.
- [15] National Science and Technology Council. Framework for considering data infrastructure and interconnectivity[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://bidenwhitehouse.archives.gov/wp-content/uploads/2024/12/NSTC-Framework-For-Considering-Data-Infrastructure-and-Interconnectivity.pdf>.
- [16] Xie M, Gan Y, Wang H. Research on new material power strategy by 2035[J]. Chinese Journal of Engineering Science, 2020, 22(5): 1.
- [17] National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine (NASEM). The Endless Frontier: The Next 75 Years in Science[M]. Washington: The National Academies Press, 2020.
- [18] Pielke R Jr. In retrospect: Science: The endless frontier[J]. Nature, 2010, 466(7309): 922–923.
- [19] Wang W Y, Zhang S Y, Li G N, et al. Artificial intelligence enabled smart design and manufacturing of advanced materials: The endless Frontier in AI+era[J]. Materials Genome Engineering Advances, 2024, 2(3): e56.
- [20] International Science Council. Preparing national research ecosystems for AI: strategies and progress[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://council.science/publications/ai-science-systems/>.
- [21] 温李阳, 姚明佳, 陈忻. 智能驱动的材料研发态势及对策建议[J]. 前瞻科技, 2025, 4(1): 16–27.
- [22] European Commission. AI Continent Action Plan[EB/OL]. [2025-06-09]. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:52025DC0165>.
- [23] Hawley J. Decoupling America's Artificial Intelligence Capabilities from China Act 2025[Z]. 2025.
- [24] 中华人民共和国中央人民政府. 国务院关于印发新一代人工智能发展规划的通知[EB/OL]. (2017-07-08)[2025-06-09]. https://www.gov.cn/zhengce/content/2017-07/20/content_5211996.htm.
- [25] 汪洪, 向勇, 项晓东, 等. 材料基因组: 材料研发新模式[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 13–19.
- [26] 项晓东, 汪洪, 向勇, 等. 组合材料芯片技术在新材料研发中的应用[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 64–78.
- [27] Jiang X, Xue D Z, Bai Y, et al. AI4Materials: Transforming the landscape of materials science and engineering[J]. Review of Materials Research, 2025, 1(1): 100010.
- [28] 宿彦京, 杨明理, 祝伟丽, 等. 新材料研发智能化技术发展研究[J]. 中国工程科学, 2023, 25(3): 161–169.
- [29] 谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用[J]. 金属学报, 2021, 57(11): 1343–1361.
- [30] Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. Nature, 2023, 624(7990): 80–85.
- [31] Zhang S Y, Wang W Y, Wang X Z, et al. Large language models enabled intelligent microstructure optimization and defects classification of welded titanium alloys[J]. Journal of Materials Informatics, 2024(4): 34.
- [32] 廖名情, 王毅, 王义, 等. 叠熵理论: 从材料基因到材料性能[J]. 金属学报, 2024, 60(10): 1379–1387.
- [33] Jones N. OpenAI's 'deep research' tool: Is it useful for scientists?[J/OL]. Nature, 2025. [2025-06-09]. <https://www.nature.com/articles/d41586-025-00377-9>.
- [34] Shneiderman B. The big picture for big data: Visualization[J]. Science, 2014, 343(6172): 730.
- [35] Lu T, Li M J, Lu W C, et al. Recent progress in the data-driven discovery of novel photovoltaic materials[J]. Journal of Materials Informatics, 2022, 2(2): 7.

- [36] Jiang Y Y, Zhang G, You J, et al. PocketFlow is a data-and-knowledge-driven structure-based molecular generative model[J]. *Nature Machine Intelligence*, 2024, 6(3): 326–337.
- [37] Cao B, Yang S, Sun A K, et al. Domain knowledge-guided interpretive machine learning: Formula discovery for the oxidation behavior of ferritic–martensitic steels in supercritical water[J]. *Journal of Materials Informatics*, 2022, 2(2): 4.
- [38] Zeni C, Pinsler R, Zügner D, et al. A generative model for inorganic materials design[J]. *Nature*, 2025, 639(8055): 624–632.
- [39] Tang Y, Xu W, Cao J, et al. MatterChat: A multi-modal llm for material science[J/OL]. [2025–06–09]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2502.13107>.
- [40] Xia Y, Jin P, Xie S, et al. Nature language model: Deciphering the language of nature for scientific discovery[J/OL]. [2025–06–09]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2502.07527>.
- [41] Ma Y B, Gou Z B, Hao J H, et al. SciAgent: Tool-augmented language models for scientific reasoning[C]// *Proceedings of the 2024 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*. Stroudsburg, 2024: 15701–15736.
- [42] McKinsey Digital. McKinsey technology trends outlook 2023[EB/OL]. [2025–06–09]. <https://www.mckinsey.com/capabilities/mckinsey-digital/our-insights/the-top-trends-in-tech-2023>.
- [43] Li Y J, Choi D, Chung J, et al. Competition-level code generation with AlphaCode[J]. *Science*, 2022, 378(6624): 1092–1097.
- [44] Kolter J Z. AlphaCode and "data-driven" programming[J]. *Science*, 2022, 378(6624): 1056.
- [45] 王海舟, 汪洪, 丁洪, 等. 材料的高通量制备与表征技术[J]. *科技导报*, 2015, 33(10): 31–49.
- [46] Dassault Systems. 由人工智能驱动的创成式体验——在基于知识的工程中成功应用人工智能(AI)[EB/OL]. [2025–06–09]. <https://www.3ds.com/zh-hans/products/catia/ai-driven-generative-experiences>.
- [47] 上海市经济和信息化委员会. 《新材料中试平台建设指南(2024—2027年)》地方解读系列文章之二: 加快构建中试服务平台 畅通新材料研发与产业化链接通道[EB/OL]. (2024–10–12) [2025–06–09]. https://wap.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_090e89cfda174410bd3491c4c8ae8a9e.html.
- [48] 唐广波. 《新材料中试平台建设指南(2024—2027年)》专家解读系列文章之四: 建设新材料中试平台 助力科技成果向现实生产力转化[EB/OL]. (2024–10–14)[2025–06–09]. https://www.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_def9711ee71a407ca690daff8338c398.html.
- [49] 谢建新. 《新材料大数据中心总体建设方案》专家解读系列文章之一: 构建材料数据资源体系 加快推进材料科技和产业数字化和智能化升级促进高质量发展[EB/OL]. (2024–10–30) [2025–06–09]. https://www.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_1ab343166c144cd4a0c03ca12f548ec4.html.
- [50] 中国电子技术标准化研究院. 面向智能制造的工业大模型标准化研究报告[Z]. 2025.
- [51] 工业互联网产业联盟. 工业数字孪生白皮书[Z]. 2021.
- [52] 国家统计局. 第五次全国经济普查公报(第六号)——部分新兴产业发展情况[EB/OL]. (2024–12–26)[2025–06–09]. https://www.stats.gov.cn/sj/zxfb/202412/t20241226_1957891.html.
- [53] 赵鸿滨, 周旗钢, 李志辉, 等. 面向新兴产业和未来产业的新材料发展战略研究[J]. *中国工程科学*, 2024, 26(1): 23–34.
- [54] 汪洪, 项晓东, 张澜庭. 数据+人工智能是材料基因工程的核心[J]. *科技导报*, 2018, 36(14): 15–21.
- [55] 干勇. 《新材料中试平台建设指南(2024—2027年)》专家解读系列文章之一: 统筹新材料中试平台建设 加快形成新质生产力[EB/OL]. (2024–10–11) [2025–06–09]. https://wap.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_699393ad1dd745c7831b5d72bb0fcb02.html.
- [56] 中华人民共和国工业和信息化部. 《新材料中试平台建设指南(2024—2027年)》解读[EB/OL]. (2024–10–11)[2025–06–09]. https://www.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_b08d1dbd18a64f57b20a7db3da4bbede.html.

Materials genome engineering and intelligent science: The endless frontier in AI+ era

William Yi Wang^{1,2}, LI Gaonan^{1,2}, LIU Zhe^{1,2}, GAO Xingyu³, WANG Hongqiang^{1,2}, SONG Haifeng³, YANG Mingli⁴, SU Yanjing^{5*}, Margulan Ibraimov⁶, LI Jinshan^{1,2*}

1. China–Kazakhstan Belt and Road Joint Laboratory on Materials Genome Engineering and Intelligent Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China
2. National Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China
3. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China
4. Research Center for Materials Genome Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China
5. Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China
6. Department of Solid State Physics and Nonlinear Physics, Al–Farabi Kazakh National University, Almaty 050040, Republic of Kazakhstan

Abstract Envisioning the strategic demands for building a modernized powerful nation in 2040 and motivated by the integrated development of new materials, new productive forces, and emerging industries, this manuscript comprehensively analyzes the common requirements of national strategies, relevant policies, and action outlines regarding frontier–disruptive core technologies and critical material development. Based on the advancement and innovation of Materials Genome Engineering's core technologies setting a crucial foundation for key innovations in AI data infrastructure, foundational material models, R&D of new materials, and industrial applications, AI will further accelerate the development of high–throughput intelligent computing software/tools, drive paradigm shifts from high–throughput experimentation to autonomous experimentation, propel the evolution of material AI agents, construct data resource nodes/platforms with standardized specifications, advance new productivity and novel material industries, as well as foster educational paradigm transformation and next–generation talent cultivation. The convergence of Materials Genome Engineering and intelligent science is fundamentally reshaping the underlying logic of material science, technology, and education through a trinity model consisted of “theoretical reconstruction, technological empowerment, and industrial traction”. This integration represents not merely disciplinary upgrading, but a systematic transformation encompassing scientific paradigms, industrial ecosystems, and talent development models. It will cultivate interdisciplinary professionals crucial for strategic fields such as advanced materials, emerging industries, and future–oriented sectors.

Keywords materials genome engineering; artificial intelligence; large language model; digital twin; AI agent ●



(责任编辑 魏来, 赵庆圆)