

特色专题

人工智能在先进材料研发中的应用

董樊丽^{1,2}, 肖志鹏^{1,2}, 李艳辉²

摘要 综述了人工智能(artificial intelligence, AI)在材料成分与结构设计、性能预测、合成优化及工业实践中推动材料研发从经验试错向智能设计范式转型的前沿进展。通过融合数据驱动方法、物理嵌入建模与自主实验系统, AI实现了跨尺度性能高精度预测、极端性能材料的逆向设计、合成工艺智能优化及缺陷无损检测等, 显著缩短了研发周期并突破了传统试错研发周期长、实验成本高且难以系统逼近材料性能极限等瓶颈。归纳了 AI 在稳定晶体高效筛选、辐射制冷材料定向开发等典型案例中的利用晶体图神经网络高效筛选大量稳定化合物, 以及通过深度生成模型实现性能创纪录的辐射制冷材料逆向设计等突破, 阐述了少样本学习、迁移学习及物理机理融合等技术对数据稀缺和多尺度建模等挑战的应对方案。未来, AI 将推进材料研发向数据驱动、自主决策和智能迭代的高阶范式加速跃迁。

关键词 人工智能; 材料设计; 性能预测; 数据驱动; 技术融合

在全球科技创新浪潮推动下, 材料科学正从经验试错模式向智能设计模式转型, 人工智能(AI)凭借强大的数据处理与跨尺度建模能力, 成为这场变革的核心驱动力。通过深度融合机器学习与物理建模, AI在材料成分设计、性能预测、合成优化及缺陷控制等关键环节取得突破, 实现跨尺度材料性能高精度预测、超材料逆向设计、新型晶体结构自主发现等创新成果, 构建起数据与实验的智能闭环, 显著缩短研发周期并突破性能极限。

技术突破加速向市场转化, 释放显著商业价值。MarketsandMarkets 报告显示, 全球 AI 驱动新材料研发市场规模将从 2023 年的 2.1 亿美元增至 2028 年的 15.3 亿美元, 年复合增长率 48.7%, 核心驱动力包括 AI 高通量实验、量子计算模拟与基因工程设计。

麦肯锡公司指出, 2030 年 AI 优化材料生产可降低制造业 15%~20% 的能耗与废料成本。Grand View Research 预测^[1], 2025 年全球智能材料制造市场达 1020 亿美元, 年复合增长率 13.2%。波士顿咨询集团预计, 2035 年量子 AI 材料模拟市场规模突破 260 亿美元, 应用涵盖超导材料、固态电池电解质等。细分领域中, Lux Research 预测^[2] AI 设计电池材料 2030 年市场规模将达 84 亿美元, 年复合增长率 52.3%; IDTechEx 报告指出智能响应材料市场将达 33 亿美元, 年复合增长率 38.1%; SNS Insider 报告^[3] 预计纳米材料 AI 优化市场将达 19 亿美元, 年复合增长率 45.6%。

各国将“AI+材料”列为战略重点, 中国“十四五”规划为 AI 与新材料领域部署了逾千亿资金; 欧盟 Horizon Europe 计划投入 50 亿欧元推动可持续材料发展。中国市场表现亮眼, 2020—2025 年 AI 材料科学市场复合增长率达 36.76%, 远超传统材料领域; 工业和信息化部数据显示, 2025 年新材料产业规模达

1. 上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240

2. 上海交通大学内蒙古研究院, 呼和浩特 010010

收稿日期: 2025-06-23; 修回日期: 2025-10-25

基金项目: 国家社会科学基金项目(25BJL012)

作者简介: 董樊丽, 副研究员, 研究方向为新材料战略, 电子邮箱: dongfanli@sjtu.edu.cn

引用格式: 董樊丽, 肖志鹏, 李艳辉. 人工智能在先进材料研发中的应用[J]. 科技导报, 2025, 43(24): 35-43; doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2025.06.00111

到 10 万亿元,复合增长率 13.5%。AI 将材料研发周期从 10~20 年缩短至 1~3 年,如新型光伏材料开发仅耗时 11 个月。但行业面临双重挑战:中投顾问报告显示,70% 企业受限于高质量数据集短缺,跨学科人才不足制约技术落地。

学术研究同样呈现爆发式增长,本文基于 Web of Science 核心合集、Scopus、中国知网(CNKI)、万方数据知识服务平台及 Materials Project 等材料专用数据库开展多源检索,以 DOI 为核心主键,关联标题、作者和期刊等元数据,经 EndNote 初筛与人工核验去重后,近 5 年“AI+材料”主题文献量达 29830 篇,其中 2025 年数据统计截至 2025 年 6 月。如图 1 所示,2021—2024 年关键技术、核心应用、突破进展、范式革新 4 类文献数量持续增长,领域研究热度逐年攀升;

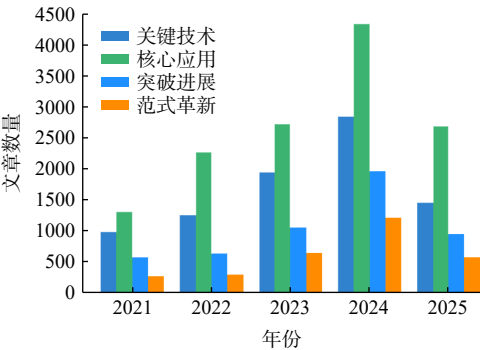


图 1 近 5 年“AI+材料”主题文献分类及数量变化趋势

2025 年虽仅统计半年,核心应用与关键技术文献量已较为可观,表明 AI 驱动材料研发的探索持续深入,各研究维度均受关注,展现出发展活力。主题分类占比情况如图 2 所示,研究涵盖数据驱动(12.5%)、物理建模(8.6%)等共 12 类,其中性能预测占比 18.7% 相对突出,反映出研究聚焦材料性能等核心环节,同时也提示需关注数据标准化等未来挑战,以推动领域发展。

本文系统综述了 AI 驱动先进材料研发的进展,从关键技术、核心应用、突破进展及范式革新 4 个维度构建分析框架,为突破技术瓶颈、推动产业化应用提供参考,本文的总体框架如图 3 所示。

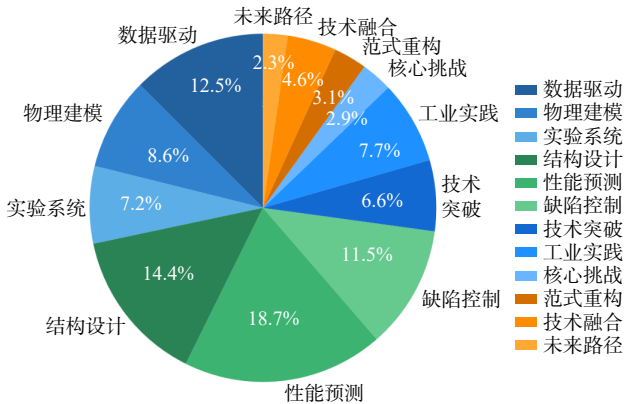


图 2 近 5 年“AI+材料”主题文献分类占比统计

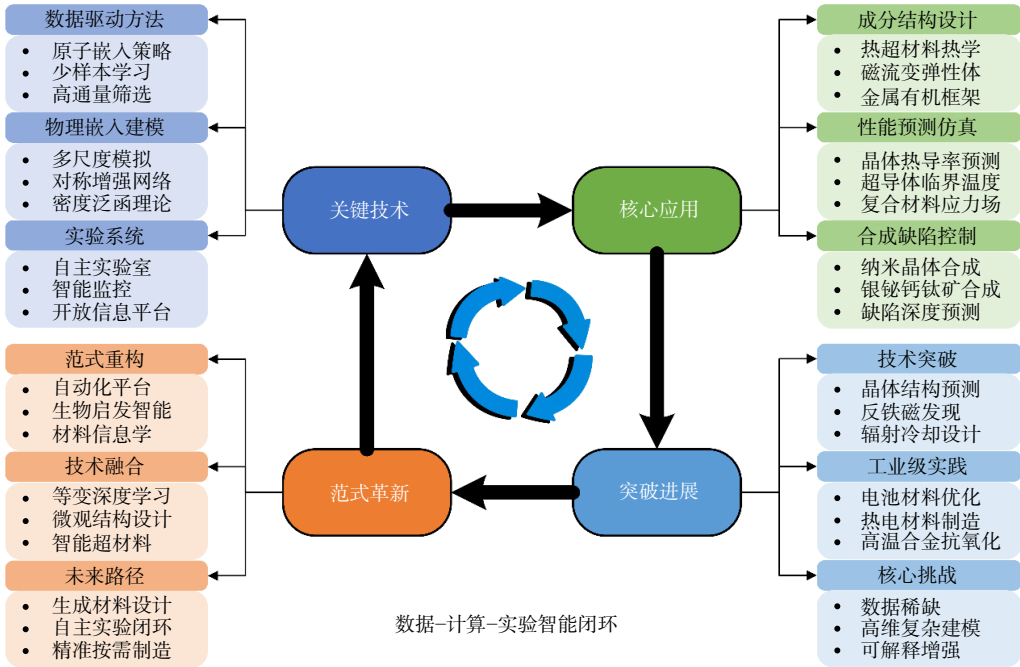


图 3 研究的总体框架

1 人工智能在先进材料研发中的核心应用

人工智能正全面革新先进材料研发体系:在设计环节,通过机器学习与深度学习高效预测材料关键性能,驱动创新成分、结构生成及逆向设计,显著提升设计效率与定制化能力;性能预测与仿真领域,实现材料物理化学、力学特性的跨尺度高精度预测,为能源材料、复合材料等研究提供支撑;合成优化与缺陷控制方面,借助数据驱动方法大幅减少实验试错,精准指导合成工艺并实现无损缺陷控制,推动材料研发向智能化、精准化转型。

1.1 AI驱动的材料成分与结构设计

AI驱动的材料成分与结构设计借助机器学习、深度学习等技术,实现材料性能预测、微结构与机械行为关联优化、金属有机框架生成及超材料性能定制,完成新型合金、电极材料等成分筛选与晶体微观结构设计,突破传统试错效率瓶颈,推动材料设计向

自动化、定制化发展并加速高性能材料研发进程。分别从“成分优化”与“结构定制”2个核心方向展开,形成覆盖材料设计全维度的智能路径。

针对成分优化方向,核心是实现目标性能导向的精准筛选与调控。深度学习框架通过集成生成器与预测器,实现磁流变弹性体成分的逆向设计,精准调控其磁致储能模量,磁流变弹性体的深度学习正向预测与逆向设计框架见图4^[4],正向基于比例特性并结合物理信息预测性能,逆向则依据目标性能指导材料配比;目标驱动的机器学习结合高通量计算,加速深紫外非线性光学材料的发现;强化学习从亿级候选空间中筛选出高相变熔的钛基多组分合金^[5],包含单轮内循环中Ti基合金的设计流程;此外,机器学习还挖掘钛合金成分和性能的复杂映射机制^[6],并通过生成含硫抗菌肽实现水凝胶的高效抗菌设计,显著提升成分设计的精准度。

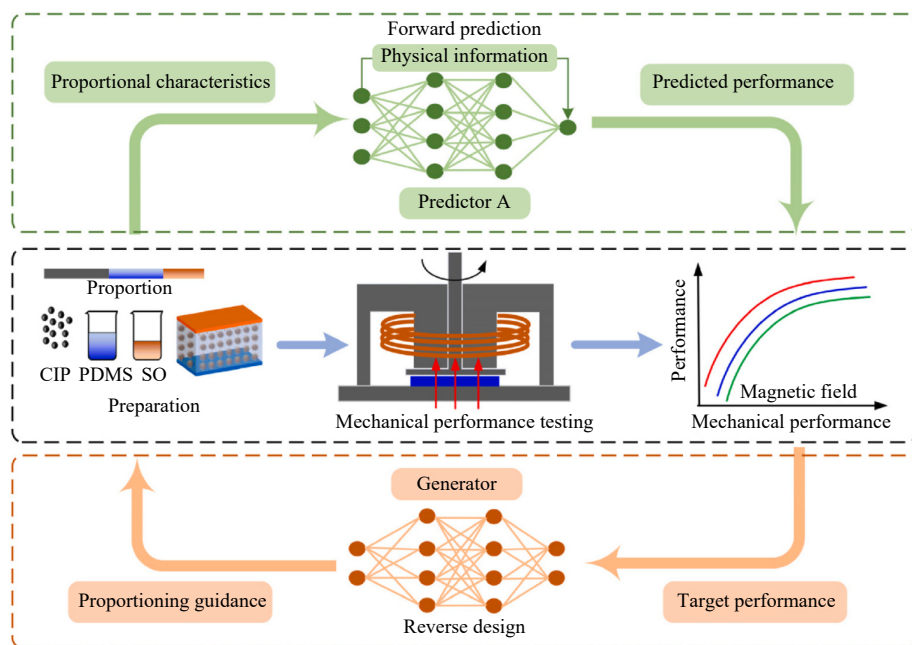


图4 磁流变弹性体深度学习正向预测与逆向设计框架

在结构定制层面,重点是构建功能需求与微观结构的智能匹配体系。AI通过数据物理融合实现多维度调控,深度学习借助条件生成对抗网络实现弹性超材料带隙的逆向定制^[7],并基于物理约束实现热超材料任意几何结构的实时生成;机械超材料领域,基于图的深度学习统一桁架结构的设计空间^[8],涉及生成建模的编码解码及逆向设计的梯度优化流程;光学超

材料^[9]和太赫兹超材料的逆向设计,结合复合材料变刚度优化^[10]、基于电子密度态的材料发现,推动结构设计向自动化演进;从机械超材料微结构设计到非晶材料多尺度建模、4D打印活性板材设计及生物启发材料跨尺度优化,AI正构建多尺度协同的结构设计新范式。

1.2 AI驱动的材料性能预测与仿真

AI驱动的材料性能预测与仿真借助深度学习框

架结合迁移学习、层次神经网络等多样化机器学习方法,融合物理机理与数据驱动模型,实现对晶格热导率、超导体临界温度等材料关键特性的跨尺度精准预测及多维度非线性关系建模,广泛应用于能源、复合材料等领域,显著提升预测仿真效率与精度并支撑多尺度性能优化。具体包含基础属性预测与复合材料预测两类,分别对应不同复杂度的性能解析需求。

一方面,基础属性预测聚焦材料核心物理化学特性的高精度计算。机器学习整合材料基础理化属性实现晶格热导率的高精度预测,分层神经网络大幅提升超导临界温度预测的决定系数;多模态机器学习还可利用成分和结构双模态网络进行性能预测,为材料性能关联分析提供常规化工具^[11]。另一方面,复合材料预测则针对多组分、跨尺度的复合材料体系,解决复杂结构下的性能分布与调控难题。三维深度学习框架实现纤维增强复合材料多组分应力场的快速预测^[12],包含建模分析、数据采集、基于框架的深度学习与迁移学习及结果分析流程;周期性、代表性体积单元与神经网络结合使短纤维复合材料弹性性能预测达到极高拟合优度^[13];多种算法还可实现异构金属材料强韧性预测^[14];AI驱动的性能预测通过数据和物理融合拓展应用边界,基于数据库开发的复合材料数据平台结合神经网络,实现力学性能的高精度预测^[15]。在热电材料领域,数据模型与密度泛函理论计算结合优化材料的掺杂策略;物理增强机器学习融合晶界滑移机制,实现金属在不同工况下的屈服强度预测;其应用还延伸至双钙钛矿铁电材料极化特性预测、增材制造轻合金的疲劳寿命预测以及多孔陶瓷性能预测等方向,形成“数据建模-物理验证-应用拓展”的闭环研发范式,推动从性能预测到逆向设计的智能化趋势发展。

1.3 AI驱动的材料合成与缺陷控制

AI驱动的材料合成与缺陷控制依托机器学习、深度学习、高通量实验与数据分析、深度生成模型、可解释AI结合有限元分析,以及自动化合成平台、机器人技术和深度学习缺陷检测等手段,实现材料合成工艺优化、制备加速、成分探索及晶体结构计算提效,同时完成缺陷高精度预测评估与微观调控,显著提升研发效率质量并优化制备工艺。围绕目标,可细化为合成优化与缺陷调控2个方向。

合成优化方向的核心是通过数据驱动减少实验

试错次数,提升合成效率与产物均一性。机器学习算法与贝叶斯优化相结合,能够以少量数据实现钙钛矿纳米晶的高效合成,制备新型厚层纳米片并提升材料均一性^[16],涵盖合成数据分析、构建数据集,经神经网络与贝叶斯优化到循环流程;机器学习还可挖掘高分子合成中反应条件、结构与性能间的关联,革新聚合物研发模式^[17];模拟自然强化机制的AI设计则赋予超材料损伤可编程特性,大幅增强其抗断裂能力^[18]。

缺陷调控方向则聚焦材料制备过程中的缺陷识别与控制,保障材料服役性能与稳定性。可解释AI结合有限元数据构建高精度模型,实现对复合材料缺陷特征的精准预测,为材料健康监测提供关键技术支撑^[19],涵盖正向有限元模拟、特征预处理及可解释AI预测等环节。这些技术进展推动材料智能合成向自动化、精准化方向加速迈进。

2 人工智能驱动材料研发的关键技术与方法

人工智能通过3大创新方法体系深度重构材料研发路径:数据驱动方法革新材料数据处理与表征,克服数据稀缺瓶颈,支撑智能化设计与高通量筛选,推动研究范式向数据驱动转型;物理嵌入建模融合物理原理与AI技术,增强多尺度模拟能力并提升性能预测精度,结合理论计算实现高保真度与物理可解释性的材料模拟;AI驱动实验系统构建自主合成平台与智能监控工具,联动开放信息平台实现合成-表征-优化全链条智能化升级,形成研发智能闭环,驱动材料研发向高通量自驱动范式演进。

2.1 AI驱动的材料数据驱动方法

AI驱动的材料数据驱动方法以突破数据瓶颈为核心,运用机器学习算法处理高通量材料数据,构建数据与性能的关联模型,推动材料数据库与智能筛选技术发展,显著提升材料研发效率。按数据处理的全流程,可梳理为数据扩充、数据利用与优化环节。

数据扩充环节重点解决材料数据样本稀缺、多源异构的难题。少样本学习通过整合数据库资源、开展高通量实验扩充数据集,材料科学少样本数据集扩展及机器学习方法如图5所示^[20],包含数据集扩展与迁移学习、少样本学习等方法应用;借助迁移学习等策略挖掘小样本价值,推动数据从“小数据”向“大数据”跨越^[21]。

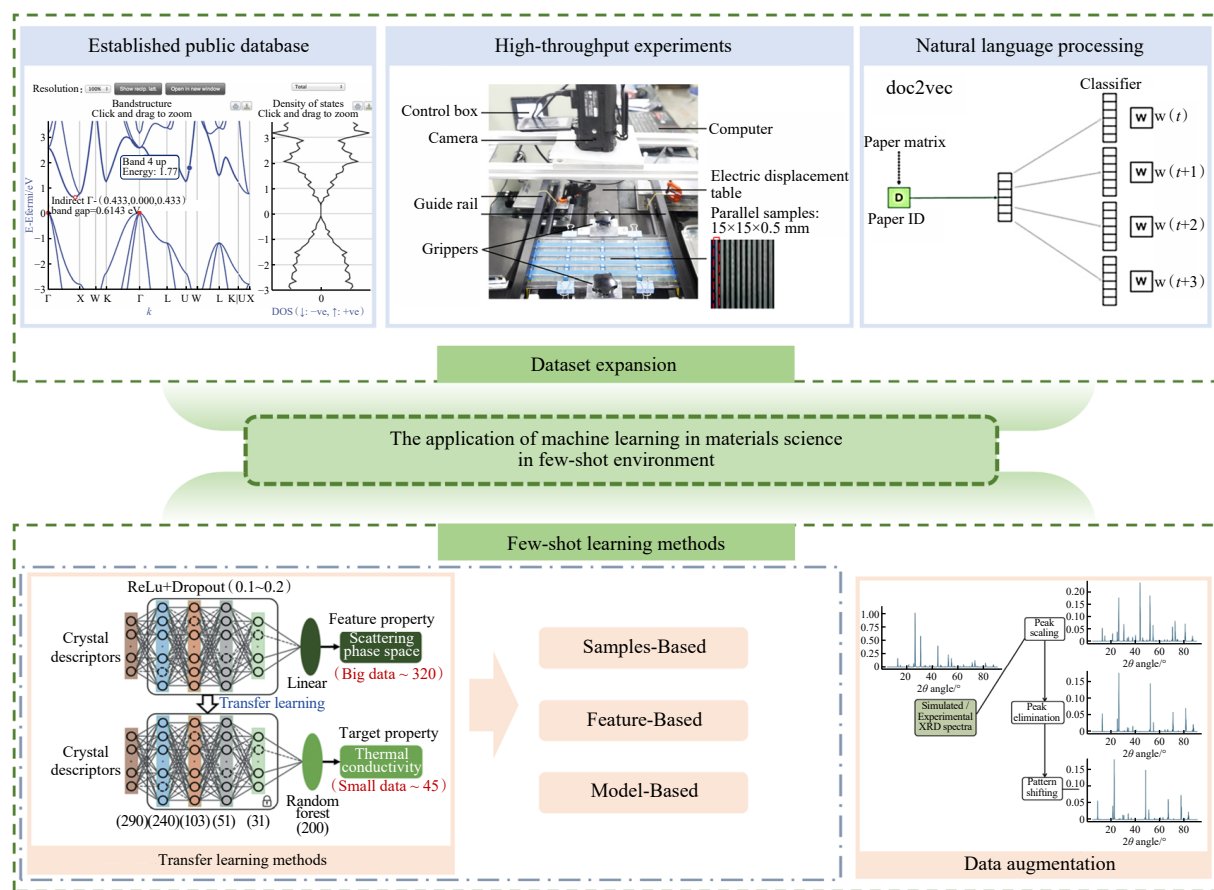


图5 材料科学少样本数据集扩展机器学习方法

数据利用与优化环节聚焦数据的高效转化并关注数据可靠性对技术应用的影响。深度迁移学习能够快速预测复合材料等效性能;同时,神经网络算子可提取微结构与力学响应关系,支撑超材料逆向设计。此外,数据驱动平台集成计算资源、数据库与算法,在储能材料筛选、钙钛矿合成等领域发挥重要作用。尽管面临数据噪声等挑战^[22],该方法已成为加速材料研发的关键工具,其技术协同发展推动材料研发向智能化、精准化迈进,为超材料等领域的技术创新提供了新思路^[23]。

2.2 AI驱动的材料物理嵌入建模

AI驱动的材料物理嵌入建模将密度泛函理论、晶体对称性等物理机制融入机器学习模型,构建起高效的跨尺度研发范式,显著提升对复杂材料体系的预测与设计能力。从技术逻辑出发,可分为物理机制注入与跨尺度建模融合2个维度。

物理机制注入维度的核心是将材料科学的基础物理规律融入AI模型,提升模型的理论支撑与解释能力。基于晶体胶囊表征的对称增强网络模型,通

过编码结构化学模式,实现材料对称性识别与性能预测^[24],涵盖特征提取、对称性感知及基于晶体结构的性能预测流程,密度泛函理论为AI模型提供数据与架构支撑,有效提升计算效率与准确性。

在跨尺度建模融合维度,针对复杂材料体系的多尺度特性,解决性能关联与调控的难题。物理模型与AI从数值、图像及机制3个方面进行整合,成功解决跨尺度建模中准确性与可解释性的矛盾^[25]。通过将物理机制与AI技术深度融合,为材料科学研究开辟了新路径,助力突破传统建模的局限。

2.3 AI驱动的材料实验系统

AI驱动的材料实验系统通过整合自主实验室、机器人平台与主动学习算法,构建“计算-实验-验证”闭环,以自动化、智能化与数据整合模式加速材料研发进程。结合实验系统的核心功能,从自主实验设备构建与过程仿真优化两方面展开。

自主实验设备构建的重点是通过硬件自动化与算法集成,减少人工干预并提升实验效率。基于AI与机器人技术构建的自主实验室,能够高效合成新型

无机化合物, AI 驱动加速新材料自动合成自主实验室框架见图 6^[26], 涉及计算、文本挖掘指导机器人合成及物相识别等流程, 采用贝叶斯优化算法的自动化材料实验室, 可自主探索电子聚合物薄膜制备工艺, 实现性能优化。

过程仿真优化方面, 则通过软件层面的仿真与数

据关联, 为实验过程的优化与调控提供支撑。AI 融合传统仿真挖掘工艺与性能关联, 为制造过程的数字孪生提供技术支撑^[27]。此外, 机器学习贯穿能源材料多尺度设计, 推动自主实验室与量子计算的集成应用, 这些技术协同构建起从实验设计、过程优化到性能预测的闭环体系, 显著缩短材料研发周期。

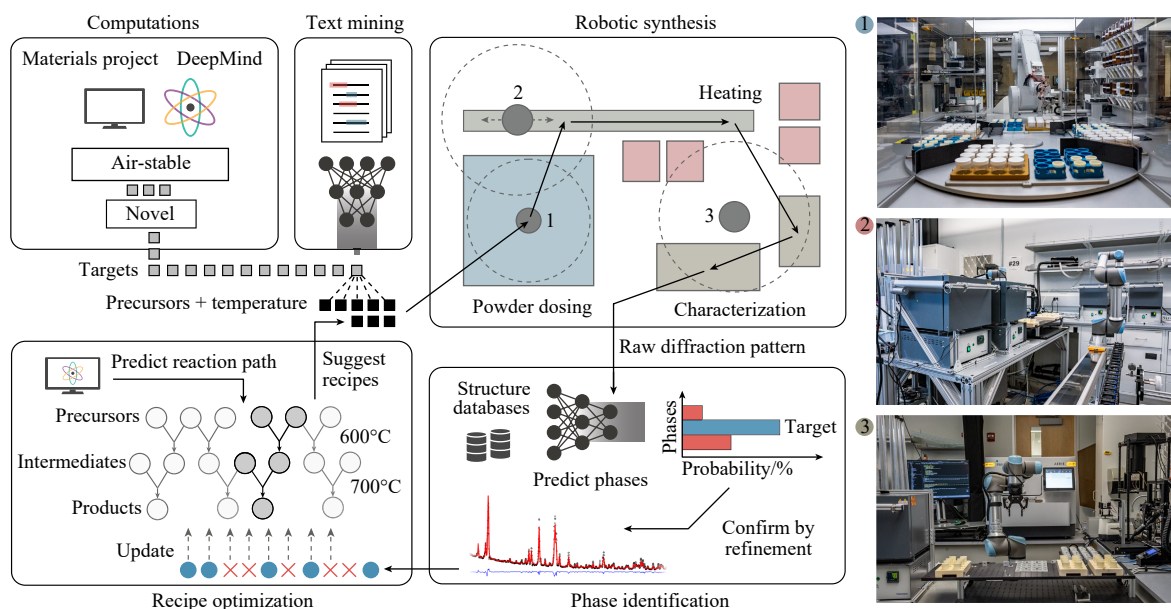


图 6 AI 驱动加速新材料自动合成自主实验室框架

3 人工智能驱动材料研发的技术突破和工业级实践及挑战

人工智能以规模化与高精度优势推动材料科学突破: 实现大规模材料预测与发现, 加速稳定晶体筛选及极端性能新材料挖掘; 在智能设计领域, 赋能特定功能材料的定向开发与验证; 深度赋能工业级实践, 优化能源材料与制造工艺, 突破极端环境材料性能, 加速产业化转化。针对数据稀缺、高维复杂性等核心挑战, 创新 AI 方法通过融合物理机制、嵌入领域知识及多模态框架等策略提供解决方案, 展现应对关键难题的强大潜力。

3.1 AI 驱动的材料研发技术突破

AI 驱动的材料研发技术借助晶体图神经网络、多模态学习等创新手段, 在相图扩展、逆向设计等领域实现关键突破, 助力发现大量稳定化合物与创纪录的功能材料, 重塑传统研发模式。具体可从材料发现效率提升与性能极限突破 2 个角度呈现。

从发现效率提升来看, AI 技术显著扩大稳定化合物的筛选范围并提升验证效率, 解决传统试错法“发现周期长、成功率低”的痛点。晶体图神经网络结合高质量数据集, 大幅增加零温相图中稳定化合物的发现数量, 较传统筛选方法显著提升研发效率, 为功能材料开发提供丰富候选; 大规模图网络训练显著提升材料发现效率, 部分预测的稳定结构已通过实验验证^[28]。

从性能极限突破来看, AI 技术通过逆向设计打破传统材料的性能极限, 实现高性能材料的定向开发。深度生成模型逆向设计出创纪录的日间辐射冷却材料, 其降温幅度远超传统材料, 打破常规冷却材料的性能上限^[29], 涵盖数据生成、基于深度生成模型的逆向设计及结果分析流程。这些技术成果彰显 AI 在材料研发中的强大驱动力, 加速新材料从理论预测到实际应用的转化进程。

3.2 AI 驱动的材料工业级实践

AI 驱动的材料工业级实践通过将机器学习辅助 3D 打印、自适应热超材料等技术与制造技术深度融

合,实现热电材料、储能材料的工程化应用,攻克钙钛矿量产等工艺难题,推动高性能材料取得工程化突破。按应用场景的差异,可分为能源材料产业化落地与通用技术框架构建。

能源材料产业化落地方面,核心是解决实验室成果向工业量产转化的工艺适配难题。AI辅助3D打印优化热电材料配方与工艺,为废热发电应用提供可行的工程化方案,推动热电材料从实验室研发走向量产应用^[30],包含贝叶斯优化驱动的制备流程、墨水调控及室温ZT性能对比;数据挖掘指导合成富氧高多孔碳电极,加速水性超级电容器的实用化进程,解决其产业化过程中的关键工艺适配问题^[31]。

通用技术框架构建方面,聚焦为多场景材料应用提供标准化技术支撑,减少不同领域的重复研发成本。深度学习设计的自适应热超材料能依据环境温度自动调节热传导性能,为智能热管理设备开发构建通用框架。这些实践充分证明AI正有力推动先进材料从实验室研究向产业化应用快速迈进。

3.3 AI驱动的材料研发核心挑战

AI驱动的材料研发面临数据稀疏性、模型可解释性及跨尺度物理机制融合等多维度挑战。数据方面存在数据稀疏与复杂特征关联难题,尽管领域知识增强模型提升了卤化物双钙钛矿性能预测精度,但数据质量与可用性仍是制约发展的关键瓶颈^[32],涵盖数据和知识整合学习及材料性能预测流程。从模型方面,多模态深度学习处理高维材料数据时参数优化复杂,未定义结构材料的模型可解释性与准确性难以平衡。从实际应用方面,集成电路互连材料设计需克服尺寸效应影响,AI预测需同时考量理论与工艺可行性^[33];固态储氢材料研发则受限于机器学习对成分、结构与性能关系的表征能力,难以匹配工业级材料的稳定性需求^[34]。这些挑战亟需在数据治理、模型创新及领域知识融合等方向实现突破,以推动AI在材料研发领域的持续发展。

4 人工智能驱动材料研发的范式重构与未来路径

人工智能推动材料科学向多维度智能化转型:依托自主实验室、大语言模型构建“数据-智能-实验”

闭环,借助自动化合成平台加速材料发现、以数据驱动优化设计。AI与材料技术融合重塑前沿,经多学科交叉形成“AI-物理-生物”协同框架,通过神经网络提升模拟效率、结合生成相场建模实现微观结构逆向设计。未来需整合跨尺度计算模拟、推广生成式AI、构建闭环自主智能实验室、推动材料数据标准化,突破瓶颈实现全链条智能化新范式。

4.1 AI驱动的材料科学范式革新

AI驱动的材料科学借助自主实验室、大语言模型等技术,实现研究流程自动化与知识发现,加速传统试错模式向“数据-智能-实验”闭环的智能化、自动化范式转型。自动化平台集成机器学习筛选与机器人合成功能,大幅缩短了钙钛矿固溶体的研发周期^[35],涵盖机器学习预测、自动化制备及合成可行性验证的循环流程,多智能体系统通过知识图谱和大语言模型,自动挖掘跨学科关联,革新仿生材料的研究模式。与大数据融合构建的AI驱动自我运行实验室,可实现材料研发全流程自动化^[36],如MatGPT等模型通过整合数据与实验机器人,探索数字化研发路径^[37]。这些技术推动材料科学从经验向数据智能驱动的全新范式跨越,重塑材料研究与开发的核心模式。

4.2 AI驱动的材料技术融合

AI驱动的材料技术融合通过多学科交叉催生“AI-物理-生物”协同框架,以等变神经网络、生物超材料设计等为代表,推动跨尺度材料创新与研究范式革新。深度学习与密度泛函理论结合的等变神经网络框架,在保持量子计算精度的同时大幅提升大规模电子结构计算效率,为复杂材料体系研究提供有力支撑;生成相场建模与深度变分自编码器的融合,建立起微观结构与性能的逆向设计关联,揭示双相合金性能影响机制^[38],涵盖高通量相场建模、设计空间不确定性量化,以及深度关联“工艺-结构-性能”与逆向设计的流程。合成生物学、超材料与人工智能的三向交叉衍生出生物超材料等新兴领域,构建跨尺度设计新范式^[39]。这些技术融合打破学科边界,推动材料科学向多技术协同驱动方向深度发展。

4.3 AI驱动的材料研发未来路径

未来AI驱动的材料研发将沿着几条关键路径发展。核心在于深度整合多尺度计算模拟与人工智能技术,实现跨尺度材料性能的精准预测。广泛应用生

成式 AI 模型, 主动探索并设计新型分子结构及先进材料配方。大力构建闭环自主运行的智能实验室, 融合机器人技术与高通量实验系统, 实现设计预测验证全流程的自主迭代。推动全球材料数据的标准化与开放共享, 建立高质量可互操作的数据库。这些变革将彻底取代传统试错模式, 形成高度预测性、主动创造性与全流程自动化的研发新范式。最终目标是达成按需精准设计和制造先进材料, 大幅压缩研发周期与成本, 为新能源、生物医药、电子等关键领域提供革命性解决方案。

5 结论

人工智能正在深刻重构先进材料研发的全链条范式, 通过机器学习、物理嵌入建模与自主实验系统的深度融合, 实现了从材料设计、性能预测到合成优化的智能化突破。AI 技术不仅显著加速了新型功能材料的发现与验证, 克服了传统研发中的数据稀缺与多尺度复杂性等挑战, 还通过逆向设计、高通量筛选与工业级优化推动了材料性能逼近理论极限。尽管在数据质量、模型可解释性、跨尺度融合等方面仍存在挑战, AI 驱动的数据、计算、实验智能闭环已展现出颠覆性潜力, 为材料科学向自主化、智能化与可持续发展转型提供了核心引擎。未来需进一步强化物理机制嵌入、多模态数据融合及跨学科协同, 以实现材料研发范式的全面革新。

参考文献 (References)

- [1] Grand View Research. Smart materials market size, share & trends analysis report by product (piezoelectric, shape memory, electrochromic), by application (actuators & motors, transducers, sensors), by region, and segment forecasts, 2024–2030[EB/OL]. [2025–03–18]. <https://www.grandview-research.com/industry-analysis/smart-materials-market>.
- [2] Lux Research. The \$84 billion blueprint: How AI is revolutionizing battery material innovation[EB/OL]. [2025–03–18]. <https://www.luxresearchinc.com/press-releases/the-84-billion-blueprint-how-ai-revolutionizing-battery-material>.
- [3] SNS Insider. AI in nanotechnology market by component, by technology, by application, by region-global industry analysis, share, growth, trends, and forecast 2023 to 2030[EB/OL]. [2025–03–18]. <https://www.snsinsider.com/reports/ai-in-nanotechnology-market-4009>.
- [4] Ren H, Zhao D, Dong L Q, et al. Deep learning accelerates reverse design of Magnetorheological elastomer[J]. *Composites Science and Technology*, 2025, 265: 111148.
- [5] Xian Y H, Dang P F, Tian Y, et al. Compositional design of multicomponent alloys using reinforcement learning[J]. *Acta Materialia*, 2024, 274: 120017.
- [6] 张闰, 薛德祯, 辛社伟, 等. 机器学习辅助钛合金设计应用进展[J]. *中国材料进展*, 2025, 44(4): 319–329.
- [7] 岳朋, 张建刚, 邱克鹏, 等. 基于深度学习弹性超材料带隙逆向设计研究[J]. *力学学报*, 2025, 57(1): 103–115.
- [8] Zheng L, Karapiperis K, Kumar S, et al. Unifying the design space and optimizing linear and nonlinear truss metamaterials by generative modeling[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 7563.
- [9] 孙竞博, 文永正, 王陈, 等. 2020年光学超材料热点回眸[J]. *科技导报*, 2021, 39(1): 192–200.
- [10] 段尊义, 刘亿, 张皓翔, 等. 基于机器学习的变刚度纤维增强复合材料最小化结构柔顺性优化设计[J]. *力学学报*, 2024, 56(7): 1849–1860.
- [11] Wang S, Gong S, Böger T, et al. Multimodal machine learning for materials science: Discovery of novel Li-ion solid electrolytes[J]. *Chemistry of Materials*, 2024, 36(23): 11541–11550.
- [12] Peng X, Yao Q Z, Yi B, et al. Deep learning approach for predicting multi-component stress fields in fiber-reinforced composites under different load paths[J]. *Composites Science and Technology*, 2025, 267: 111198.
- [13] 王吉玲, 金浩, 郭瑞文, 等. 基于机器学习的短纤维增强复合材料弹性力学性能预测[J]. *复合材料学报*, 2024, 41(11): 6261–6272.
- [14] 王晓坤, 汪永纪, 贾云飞, 等. 基于机器学习的异构金属材料性能预测及结构设计[J]. *机械工程材料*, 2023, 47(5): 72–83.
- [15] 曹文轩, 史振宇, 邹斌, 等. C/SiC复合材料数据库及机器学习性能预测平台的设计与开发[J]. *机械工程材料*, 2024, 48(5): 51–61.
- [16] Lampe C, Kouroudis I, Harth M, et al. Rapid data-efficient optimization of perovskite nanocrystal syntheses through machine learning algorithm fusion[J]. *Advanced Materials*, 2023, 35(16): 2208772.
- [17] 张泽熙, 蔡展翔, 张文彬, 等. 机器学习辅助高分子合成研究进展[J]. *科学通报*, 2025, 70(S1): 471–480.
- [18] Gao Z Y, Zhang X L, Wu Y, et al. Damage-programmable design of metamaterials achieving crack-resisting mechanisms seen in nature[J]. *Nature Communications*, 2024, 15(1): 7373.
- [19] Daghigh V, Bakhtiari R S, Daghigh H, et al. Explainable artificial intelligence prediction of defect characterization in composite materials[J]. *Composites Science and Technology*, 2024, 256: 110759.
- [20] Chen Y X, Long P, Liu B, et al. Development and application of Few-shot learning methods in materials science under data scarcity[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12(44): 30249–30268.
- [21] 陈新宇, 宋志龙, 陆帅华, 等. AI驱动的材料设计: 从小数据到大数据的范式转变[J]. *中国科学: 化学*, 2025, 55(6): 111148.

- 1648–1659.
- [22] 王宗国, 万萌, 陈子逸, 等. 数据驱动的材料智能设计平台研究与应用[J]. 数据与计算发展前沿, 2023, 5(2): 86–96.
- [23] 周济, 于相龙. 2023年超材料热点回眸[J]. 科技导报, 2024, 42(1): 63–71.
- [24] Liang C, Rouzhahong Y, Ye C Y, et al. Material symmetry recognition and property prediction accomplished by crystal capsule representation[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 5198.
- [25] 王晨充, 徐伟. 综述: 合金设计中物理模型与人工智能的集成与发展[J]. 金属学报, 2025, 61(4): 541–560.
- [26] Szymanski N J, Rendy B, Fei Y X, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 86–91.
- [27] 周钰博, 李敏, 王绍凯, 等. 面向AI时代的纤维增强树脂基复合材料工艺仿真[J]. 航空材料学报, 2024, 44(5): 17–36.
- [28] Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 80–85.
- [29] Le Q T, Chang S W, Chen B Y, et al. AI-enabled design of extraordinary daytime radiative cooling materials[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2024, 278: 113177.
- [30] Song K D, Xu G Y, Tanvir A N M, et al. Machine learning-assisted 3D printing of thermoelectric materials of ultrahigh performances at room temperature[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12(32): 21243–21251.
- [31] Wang T, Pan R T, Martins M L, et al. Machine-learning-assisted material discovery of oxygen-rich highly porous carbon active materials for aqueous supercapacitors[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 4607.
- [32] Wei X, Zhang Y N, Liu X, et al. A domain knowledge enhanced machine learning method to predict the properties of halide double perovskite $A_2B+B^{3+}X_6$ [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2023, 11(37): 20193–20205.
- [33] 崔国祥, 李瑞, 袁昌驰, 等. 人工智能驱动集成电路下一代互连材料设计: 进展与挑战[J]. 中国材料进展, 2025, 44(5): 436–450.
- [34] Zhou P P, Zhou Q W, Xiao X Z, et al. Machine learning in solid-state hydrogen storage materials: Challenges and perspectives[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(6): 2413430.
- [35] Omidvar M, Zhang H F, Ihalage A A, et al. Accelerated discovery of perovskite solid solutions through automated materials synthesis and characterization[J]. *Nature Communications*, 2024, 15(1): 6554.
- [36] 杨帅, 刘建军, 金帆, 等. 人工智能与大数据在材料科学中的融合: 新范式与科学发现[J]. 科学通报, 2024, 69(32): 4730–4747.
- [37] Wang Z L, Chen A, Tao K H, et al. MatGPT: A vane of materials informatics from past, present, to future[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(6): 2306733.
- [38] Attari V, Khatamsaz D, Allaire D, et al. Towards inverse microstructure-centered materials design using generative phase-field modeling and deep variational autoencoders[J]. *Acta Materialia*, 2023, 259: 119204.
- [39] 司黎明, 吕昕. 合成生物学、超材料和人工智能的融合[J]. 科技导报, 2020, 38(9): 97–101.

The application of artificial intelligence in the research and development of advanced materials

DONG Fanli^{1,2}, XIAO Zhipeng^{1,2}, LI Yanhui²

1. School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

2. Inner Mongolia Research Institute, Shanghai Jiao Tong University, Hohhot 010010, China

Abstract Artificial intelligence (AI) is profoundly transforming the paradigms and methodologies of advanced materials research and development. This review systematically examines cutting-edge advances in AI applications across materials composition/structure design, property prediction, synthesis optimization, and industrial implementation. By integrating data-driven approaches, physics-informed modeling, and autonomous experimental systems, AI has enabled high-accuracy cross-scale performance prediction, inverse design of materials with extreme properties, intelligent optimization of synthesis processes, and non-destructive defect detection, significantly accelerating development cycles while overcoming performance bottlenecks. The work highlights breakthroughs in representative case studies including high-throughput screening of stable crystals, targeted development of radiative cooling materials, and optimization of electrolytes for high-voltage batteries, while elucidating how techniques such as few-shot learning, transfer learning, and physics-constrained algorithms address challenges in data scarcity and multiscale modeling. Looking forward, the synergistic convergence of AI with quantum computing and generative design will propel materials innovation toward an accelerated transition to advanced paradigms characterized by data-driven workflows, autonomous decision-making, and intelligent iteration.

Keywords artificial intelligence; materials design; property prediction; data-driven; technology integration ●



(责任编辑 赵庆圆)