

特色专题

人工智能赋能材料科学: 历史、挑战与未来愿景

周凤翔^{1,2}, 周杨理理^{1,2}, 赵紫威^{1,2*}, 汪卫华¹

摘要 面对材料研发周期长、依赖经验的现实困境,系统论述了人工智能驱动材料科学从传统试错范式向“智能自主创制”范式变革的演进逻辑,解析了认知能力与决策主权由人类向智能系统迁移的跃迁机制。从材料设计、合成规划及自主实验系统等方面系统阐述了人工智能赋能材料创新的实现路径。针对数据孤岛、物理可解释性缺失及算力前置等局限,提出将物理机理嵌入统计模型是跨越能力边界的关键。展望未来,多模态大模型与数字孪生技术的深度集成,将构建覆盖材料全生命周期的智能管理体系,推动材料研究和应用迈入算法驱动与人机协同的自进化时代。

关键词 材料科学;人工智能;范式变革

从航空航天、清洁能源、生命健康到国家安全,先进材料始终是支撑现代科技与社会发展的关键物质基础。然而,与材料战略地位形成鲜明对比的,是其漫长且高度依赖经验的传统试错研发模式。通常,一种新材料从概念萌芽、实验室样品到规模化应用,须跨越发现、筛选、机理认知、工艺优化及工程放大等多个环节,周期动辄耗时数10年^[1]。例如,锂离子电池自20世纪60年代初进入系统化研究,直至90年代才实现商业化落地^[2]。硅基太阳能电池自1954年初次应用以来,历经半个多世纪的更迭,光伏界仍未发现能在成本与性能上全面超越硅基体系的新型材料^[3-4]。这些现实案例共同揭示了一个根本性困境:面对近乎无限的材料设计空间与制造路径,传统以人为主导的探索模式已难以匹配当代社会对材料创新速度与规模的迫切需求。

人工智能(artificial intelligence, AI)的飞速发展

加速材料创制提供了前所未有的机遇,而这一机遇的形成得益于3大重要进展:大数据时代积累的高质量材料数据、持续增强的计算能力以及日益成熟的先进算法体系。尤其是机器学习算法,通过挖掘跨体系的复杂统计关联,正深度驱动着材料筛选与设计范式的重构。其中,以生成式模型为代表的先进算法,更是开启了材料按需设计的新路径。在此背景下,学科知识、机器人技术、自动化实验硬件与智能算法的深度耦合,催生了具备自主决策与执行能力的实验系统,这类系统正逐步成为材料智能创制的核心技术载体。其核心目标是将原本依托人类智慧完成的认知、决策与操作任务嵌入机器系统,实现材料研发活动的算法化与系统化。通过整合机器学习、自主实验、智能计算与制造,这些集成化框架正在打破材料设计、合成加工与性能评估之间的信息孤岛,显著提升新材料从实验室发现到工业化应用的转化效率。目前,全球科研战略正加速向人工智能与材料科学的深度融合转型,预示着材料研究即将迈入由人工智能驱动的新发展阶段。

1. 中国科学院东莞材料科学与技术研究所, 东莞 523830

2. 松山湖材料实验室, 东莞 523830

收稿日期: 2026-02-10; 修回日期: 2026-04-07

基金项目: 国家自然科学基金项目(52542317); 教育部哲学社会科学研究重大委托项目(24JZDW008)

作者简介: 周凤翔, 工程师, 研究方向为材料模拟, 电子信箱: zhoufengxiang@dimst.ac.cn; 赵紫威(通信作者), 高级工程师, 研究方向为空间统计和科技政策, 电子信箱: zhaoziwei@dimst.ac.cn

引用格式: 周凤翔, 周杨理理, 赵紫威, 等. 人工智能赋能材料科学: 历史、挑战与未来愿景[J]. 科技导报, 2026, 44(14): 69-79; doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2026.02.00035

人工智能赋能材料科学在展现颠覆性潜力的同时,也暴露出了一系列深层次的结构性问题。本文将系统回顾材料科学研究范式的演进历程,重点探讨人工智能对该学科的多维赋能路径。针对驱动路径与能力边界交汇处涌现的复杂问题,如数据孤岛、模型可解释性缺失、算力前置以及置信区间不确定性等,进行了系统的梳理与反思,力求在技术热潮中引入冷静思考,审视范式转型背后的逻辑局限。最后,尝试勾勒人工智能时代下材料研发的未来愿景,以期构建新一代材料智能创制系统提供前瞻性指引。

1 材料研究的范式演进

从早期经验积累到实验科学的建立,再到理论计算的兴起,材料科学的研究范式历经了数次深刻跃迁,每一次跃迁都极大地加速了新材料的发现和应用^[5-6]。从认知科学视角审视,这一进化历程,本质上是人类将认知能力逐步外包给机器的过程:从外包计算能力以实现数值模拟,再到外包数据关联能力以驱动机器学习。如今,随着人工智能技术的深度介入,人类正尝试将决策能力和创造能力赋予机器,以构建自主实验系统,实现材料的智能创制。本节基于 Web of Science 文献数据库,结合范式相关主题词开展系统检索。在此基础上,通过对主题文献数量的时间演化进行系统统计与归纳,梳理材料科学研究范式演进的历史脉络(图 1),并总结其关键发展阶段与核心特征。

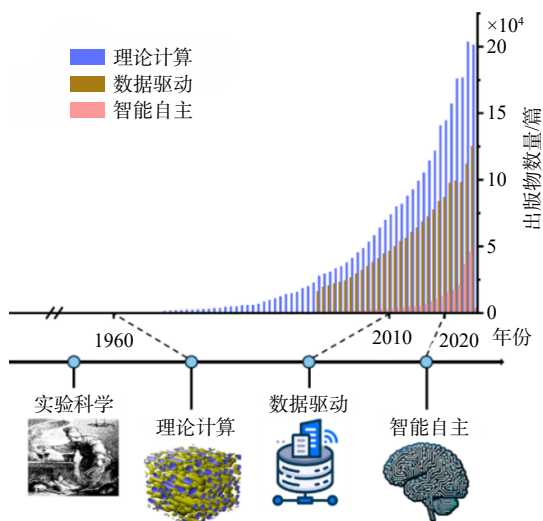


图 1 材料科学的范式跃迁

1.1 实验科学阶段(experiment-driven, 19 世纪末至 20 世纪中期)

19 世纪中叶以前,材料研究长期依赖经验试错。工匠凭借代际传承的隐性知识,通过直觉和反复试验获得冶金、陶瓷等材料的工艺窗口,其试验周期通常以数月至数年计,且成功率与重复性难以量化控制。由于缺乏对微观结构的系统认识,材料更多被视为工艺产物而非科学对象,研究过程呈现黑箱化、随机性特征。

进入 19 世纪末至 20 世纪中期,实验科学的兴起推动材料研究经历了第一次范式转变。显微镜^[7]、X 射线衍射^[8]、热分析和电学测试等精密仪器的出现,使研究者能够以可重复、可量化的方式观察材料的组织演变与理化性质。例如,光学显微镜与电子显微镜将空间分辨率由微米尺度逐步推进至纳米尺度(10^{-6} ~ 10^{-9} m),X 射线衍射可实现晶格常数优于 10^{-3} 精度的测量。材料的微观结构得以被系统表征,实验成为揭示结构和性能关系的核心手段。晶体结构与缺陷理论为刻画微观结构提供了统一语言,相图的建立推动研究者以热力学视角理解多相平衡与相态转变。典型的铁-碳相图^[9]通过系统实验揭示了在不同温度(约室温至 1500℃)和碳含量(质量分数 0~6.67)条件下的稳定相区及其对应的力学行为。材料研究从单纯的配方工艺逐步转向以相、结构和性能为基础的科学体系。

更为重要的是,这一阶段奠定了实验在材料科学中的基础性地位。此后材料科学的每一次范式跃迁,都以实验为物理锚点,依赖实验提供实证数据、模型验证与机制约束。实验作为不可替代的物理实证手段,贯穿于材料研究的各个阶段。

1.2 理论计算阶段(computation-driven, 1950—2010 年)

进入 20 世纪中叶,随着计算能力的提升以及密度泛函理论^[10-11]、统计物理和固体物理的成熟,材料研究从经验描述进入以物理规律和数值模拟为基础的理论计算阶段。在这一时期,材料研究开始在更大范围内摆脱对纯实验的依赖,理论计算逐渐成为指导实验的重要前置环节。

这一时期,能带理论、缺陷理论和相变模型等核心框架相继建立。研究者开始利用第一性原理计算

材料的电子结构、能带特征与热力学稳定性。经典密度泛函理论计算可在约 $10^2\sim 10^3$ 原子尺度体系上实现电子结构求解,其能量计算精度通常可达 $10^{-3}\sim 10^{-2}$ eV/atom。与此同时,分子动力学模拟可处理 $10^3\sim 10^7$ 原子尺度体系,时间尺度覆盖皮秒至纳秒($10^{-12}\sim 10^{-9}$ s),用于模拟原子扩散、缺陷演化和相变动力学。相場模拟与有限元分析则进一步扩展至微米到米尺度。依托这些手段,材料研究得以在原子、介观和宏观等多个尺度上开展,研究模式由经验主导的探索逐渐转向以机理推导为基础的理论计算。

尽管理论计算显著强化了材料研究的机理深度,但其预测能力仍然受到计算成本与模型假设的限制。例如,单个晶体材料结构优化与性质计算通常需要 $10^2\sim 10^4$ CPU·h,难以支持大规模材料筛选。多尺度之间的有效耦合问题亦随体系复杂度呈指数增长。然而,随着理论计算的不断拓展,“在计算机中设计材料”的理念开始萌芽,高通量计算框架逐步实现每年 $10^3\sim 10^5$ 甚至更高量级的材料体系筛选,虚拟材料库的雏形逐渐出现。

1.3 数据驱动阶段(data-driven, 2010—2020 年)

2010 年前后,材料科学进入以“大数据与机器学习”为特征的数据驱动新阶段,这是从“计算材料学”迈向“人工智能材料学”的关键转折点。推动这一转变的核心并非单一算法突破,而是材料数据库、高通量技术与机器学习方法三者在同一时期深度交汇。

首先,材料数据库迎来爆炸式增长。以 Materials Project^[12]和 OQMD^[13]为代表的大型材料数据库,已积累 $10^5\sim 10^6$ 量级的材料结构与性质数据,涵盖形成能、带隙和力学性能等多维信息,为机器学习提供了丰沛的高质量训练样本。与此同时,高通量计算与高通量实验逐步成熟,材料性质的获取方式由低效率的逐点计算与逐项实验,转变为批量化、自动化的数据生产模式。材料科学开始具备支撑机器学习的“大样本”数据基础。

在此背景下,机器学习开始系统性重塑材料研究。研究者不再仅依赖单体系的精细模拟,而是引入回归与分类模型,将材料数据库和高通量技术批量生成的结构与性能数据作为特征源或监督标签,构建材料性质预测模型,实现从化学成分到宏观性能的快速映射。例如,机器学习模型对材料形成能的预测误差

通常可控制在 $0.02\sim 0.10$ eV/atom 范围内,显著优于传统经验模型。同时,预训练模型对单点性质的预测速度可达毫秒级,相较标准密度泛函理论(density functional theory, DFT)计算实现约 $10^3\sim 10^5$ 倍加速。在这一阶段,机器学习被广泛用于预测带隙、形成能、热力学稳定性、玻璃形成能力、催化活性与力学模量等关键性质,并逐步整合进集成计算材料工程框架中,极大地增强了跨尺度关联效率。2011 年启动的材料基因组计划^[14-15]推动了材料大数据与机器学习的深度耦合。材料研发模式由“人设计—计算模拟—实验验证”演化为“数据训练—模型预测—候选筛选—实验验证”的数据驱动流程。

需要指出的是,这一时期的人工智能在材料研发中仍扮演辅助角色。尽管机器学习能够在机理认知尚不完备的情况下,实现对材料性质的高精度预测,但其本质仍属于相关性驱动的统计学习范式,材料研发的核心决策权依然掌握在研究者手中。

1.4 智能自主阶段(AI for materials, 2020—至今)

相较于传统机器学习侧重结构与性能关系的拟合,这一时期的人工智能不再仅作为分析辅助工具,而是深度嵌入目标材料设计、实验方案决策、合成执行与结果反馈的完整流程,标志着人工智能材料学的真正形成。

在结构发现方面,DeepMind 开发的 GNoME 框架^[16]利用图神经网络通过主动学习生成数百万候选结构,从中筛选出 220 万个潜在稳定材料,其中 38.1 万个为凸包上的真正热力学稳定结构,这是人工智能在材料发现领域的一个重要里程碑。基于变分自编码器、生成对抗网络和扩散模型等生成式模型,人工智能开始具备在目标性能约束下构建新材料结构分布的能力,推动材料设计由正向筛选迈向逆向生成。以自然语言处理为核心的知识引擎,通过学习海量的科学论文、专利与实验报告,将合成路径、失效机制与隐性工艺等非结构化知识转化为系统可解析的实验方案与决策依据。以贝叶斯优化为代表的主动学习策略,能够在高维参数空间中实现对最优合成配方与工艺条件的高效搜索,通过平衡探索与利用,达成面向多目标属性的机器寻优与闭环迭代。

与此同时,人工智能与机器人技术的深度融合,推动了自主实验室的发展。伯克利大学开发的 A-Lab

综合利用 Materials Project 与 DeepMind 的数据资源^[17],并结合基于历史文献训练的自然语言模型预测合理的合成路线。在主动学习与实验反馈回路集成下,实验条件可在数小时内完成一次优化循环,并行运行 8 个反应体系。机器人系统则接管了复杂而重复的实验操作,在极少人工干预的情况下完成高精度的材料合成与表征。卡内基梅隆大学开发的自动合成平台 Coscientist 通过整合大语言模型与自动化硬件,可以自主设计、编码并执行多种化学反应^[18]。中国科学技术大学研发的“全流程机器化学家”实现了从理论计算、实验设计到自动化合成与表征的全闭环^[19]。在这一模式下,材料研发首次跨入以人工智能为决策核心的无人值守自进化循环,研究者由实验操作者转变为目标制定者与系统调控者。

总体而言,智能自主阶段的本质不在于单纯的研发效率提升,而在于材料科学研究主体的重构。人工智能逐步由辅助工具演化为材料发现的核心决策与执行单元,材料研发由人主导的低效试错模式,转变为算法驱动的自进化模式,标志着材料科学迈入以人工智能为主导的第四范式。

2 人工智能赋能材料科学的驱动路径

人工智能对材料科学的赋能并非单一维度的技术替代,而是覆盖了从材料设计到创制、再到高效宏观工程应用的链式变革。通过整合多源异构数据与

先进算法,人工智能正沿着 3 条核心路径深度重塑材料研发全生命周期:首先,依托正向筛选与逆向设计实现候选材料空间的精准探索与按需创制;其次,凭借合成规划引擎确保高性能材料能够被合成并加工成最终形态;最后,以自主实验系统为终端载体,实现认知、决策与规模化生产制造的系统化集成。这种从设计范式到生产模式的深度融合,正显著提高新材料从发现到工业化应用的迭代效率。

2.1 目标材料的发现与设计

机器学习算法通过模式识别、逻辑推理及多目标优化,精准建模材料组成、结构与性能之间的复杂非线性映射,深度重构了候选材料的发现与设计范式。依托性能正向预测与按需逆向生成的双向驱动,人工智能正致力于打破高性能材料发现偶然且缓慢的困局。图 2^[20-21]展示了材料正向筛选、逆向生成的流程及典型设计示例。

2.1.1 正向筛选

正向筛选的核心逻辑在于构建稳健的性能预测模型,其数学本质可表述为 $P=f(S, C, R)$, 其中 P 指代性能指标(如带隙、硬度等), S 、 C 和 R 则分别代表材料的结构、成分与组分比例。通过系统整合实验观测数据与高通量计算结果,研究者能够建立微观特征与宏观物性间的深层映射。在此基础上,利用性能阈值作为判据,快速筛除冗余体系实现搜索空间的有效压缩。同时,通过系统评估设计变量对目标性能的影响规律,为后续材料组成与结构的精细优化提供关键指

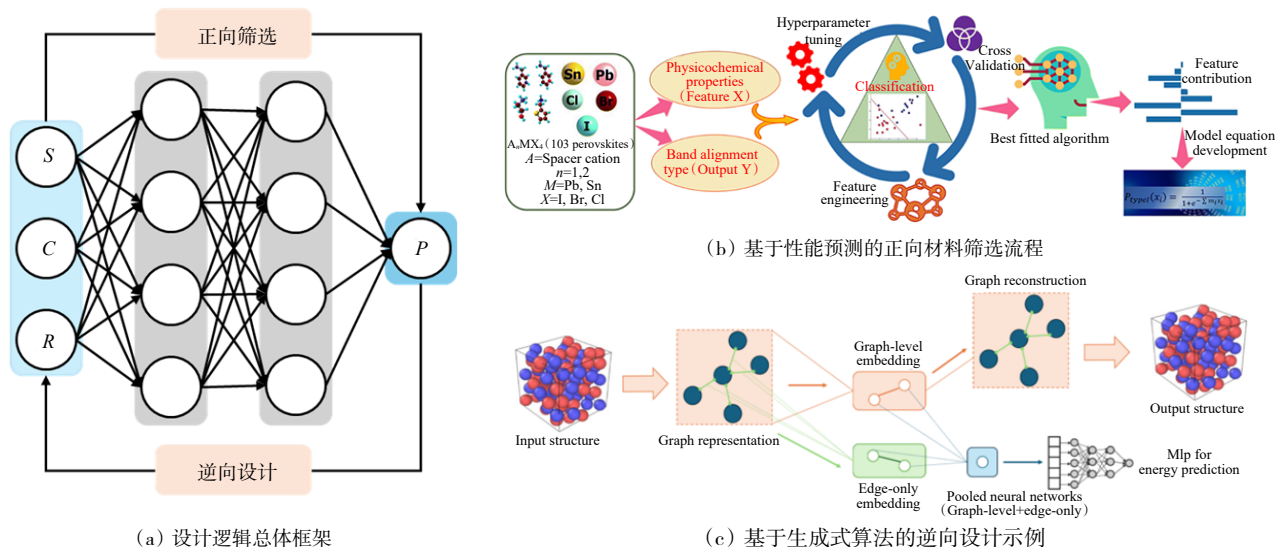


图2 人工智能驱动的目标材料设计范式

导。如图 2(a) 中正向筛选路径所示, 正向设计通常遵循“特征构建—模型训练—性能预测—候选筛选”的基本流程。

从任务类型来看, 材料性能预测通常可分为分类、回归和无监督学习 3 类。对于以离散变量为目标的分类问题, Mahal 等^[20]构建了用于预测二维杂化钙钛矿能带排列类型的机器学习工作流程, 如图 2(b) 所示。该研究聚焦于二维杂化钙钛矿材料, 这类材料因具有较好的环境稳定性和独特的类量子阱结构而受到广泛关注。研究者利用基于分子和元素描述符训练的机器学习分类器, 将候选钙钛矿材料划分为 I_a 、 I_b 、 II_a 和 II_b 4 类能带排列类型, 并进一步分析了最终选定的 9 个关键特征对输出结果 P 的贡献。对于以连续变量为目标的回归问题, Wang 等^[22]基于 Super Con 数据库, 结合随机森林算法构建了超导材料临界转变温度预测模型, 实现了对高温层状超导体临界转变温度的有效预测。该研究通过挖掘材料组成、结构描述符与超导性能之间的关联关系, 为高温超导材料的快速筛选和高效性能预测提供了重要支撑。对于无标签数据, 无监督学习可用于识别样本的类别特征与离群行为。如 Li 等^[23]基于高通量原位红外光谱数据, 利用聚类算法对 AgAuCuPdPt 高熵合金催化剂进行自动分群, 并通过比较不同光谱簇在吸附行为和催化性能上的差异, 发现了对 C_{2x} 产物生成具有较高选择性的潜在高性能催化剂。

2.1.2 逆向设计

逆向设计从预期性能出发, 反向检索理想材料的化学组成与结构特征。在此模式下, 性能需求被定义为机器学习模型的输入, 材料的化学组成与空间结构则作为输出。如图 2(a) 中逆向设计路径所示, 该过程体现了由目标性能反推候选材料结构与组成的基本思路。材料逆向设计算法的演进, 整体上遵循着由“学习已有规律”向“主动探索未知空间”逐步深化的发展逻辑, 其核心技术体系可概括为 4 类关键算法模块: 生成模型、启发式优化、强化学习与主动学习。生成式模型(如变分自编码器、生成对抗网络及扩散模型)作为底层基座, 将复杂的原子排布映射为可计算的潜在特征, 并绘制出一张耦合结构特征与功能属性的概率景观地图。以此为基础, 启发式优化(如遗传算法或贝叶斯优化)与强化学习(如蒙特卡洛树搜

索)构成高效的搜索与决策机制: 前者在生成模型刻画的潜在空间中执行多目标全局优化, 以捕获复杂性约束下的最优解; 后者则将材料设计过程建模为序列决策问题, 通过与环境的交互反馈实现设计策略的动态进化。两者协同作用, 在潜在特征空间内执行逆向推断与优化搜索, 生成具备期望功能的候选材料。主动学习机制通过不确定性驱动的自适应采样, 从候选结构池中筛选少量关键样本进行物理验证(如第一性原理计算), 并将获得的性能真值实时反馈至生成模型与强化学习器, 用于持续更新模型参数与搜索策略, 从而形成闭环优化设计。

近年来, 逆向设计的适用对象已由有序晶体和分子体系逐步拓展至结构高度无序的非晶材料。Matter-Gen 基于扩散模型, 直接在三维晶体结构空间中对原子类型、空间坐标与周期性晶格参数进行联合建模, 能够在给定物性约束条件下生成满足稳定性要求的新材料结构^[24]。Kim 等^[25]则采用 Wasserstein 生成对抗网络生成新的 Mg—Mn—O 三元化合物, 并据此筛选在水溶液环境中具有合理稳定性的潜在半导体材料。进一步地, Chen 等^[21]提出了面向无序无机玻璃体系的生成模型 GLASSVAE, 其逆向设计过程如图 2(c) 所示, 该方法采用层次化图变分自编码框架, 将原子构型表示为具备平移不变性与置换不变性的图嵌入, 并在潜在空间中同时引入几何结构与能量信息约束, 从而实现金属玻璃原子结构的生成与能量预测。相较于现有逆向设计方法主要聚焦于晶体材料或分子体系, GLASSVAE 面向无序无机体系构建了端到端生成框架, 这表明逆向设计正在由针对规则有序结构的组合优化, 逐步延伸至对复杂无序体系局域结构与能量分布联合建模的生成式探索, 其应用前景也由晶体材料发现逐步延伸至非晶态与强无序材料设计。

2.2 材料合成规划

合成规划是材料实验制备的关键环节, 其核心方法——逆合成分析, 如图 3^[26]所示, 通过递归执行逆反应, 将复杂的目标分子 A 逐步拆解为更简单、市售的起始原料。图 3 展示了 3 条典型的拆解路径, 分别通向分子 M、N, 分子 I、J, 或分子 D、E。该过程通常由 2 个核心组件协同驱动: 一是单步逆合成模型, 负责将分子拆解为前驱体片段; 二是全局导航策略, 用于在

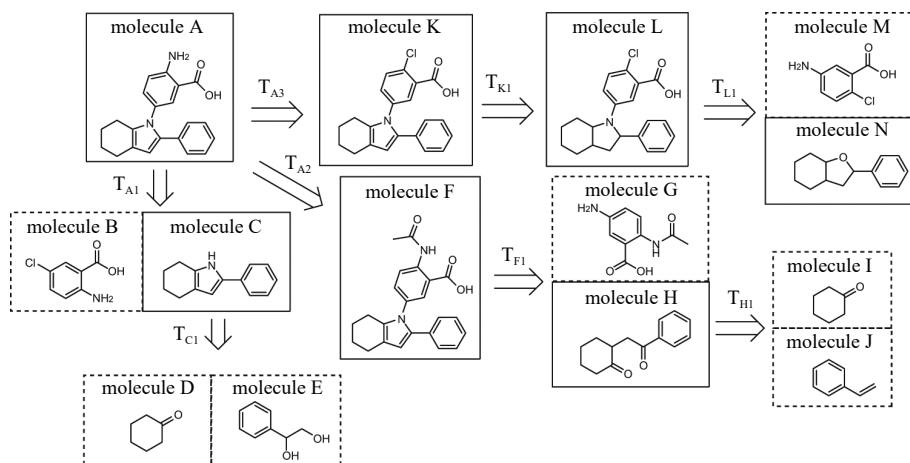


图3 目标分子A的逆合成规划过程

单步模型构建的广阔空间中探索最优合成路径。随着算法能力与数据科学的演进,逐渐演化出两种逻辑截然不同但又高度互补的导航策略。

2.2.1 规则搜索规划

基于规则搜索的硬逻辑规划,其核心在于将化学反应符号化与规则化,并以此作为约束机制,引导搜索算法(如进化算法或遗传算法)在由单步反应节点动态构建的复杂反应网络中进行组合搜索,寻觅通往市售原料的最优合成路径。例如,Segler等^[27]将蒙特卡洛树搜索与三层神经网络相结合:其中扩展策略网络负责预测候选单步反应并收窄搜索空间,内部过滤器网络用于单步反应的可行性验证,而快速推演网络则通过一系列快速的单步来估算当前路径的潜在价值。该模型基于数百万条已发表的有机化学反应数据进行训练,使其能够在海量已知反应构成的复杂解空间中,为目标分子规划出高效的逆合成路径,其中成功解析的分子数量几乎翻了一番,且运算速度提升了30倍。为进一步验证,该方法在双盲实验中由45名有机合成研究人员对9个复杂分子的文献报道路线与3N-MCTS设计路线进行评价,结果显示57%的人员选择了3N-MCTS路线,43%选择文献路线,两者之间无显著统计差异。尽管如此,此类算法仍难以完全整合化学家在实战中采用的策略性考虑,例如成环顺序选择、保护基引入策略或官能团不相容性规避。

2.2.2 语义理解规划

与侧重规则搜索的第一路径不同,基于自然语言处理的语义规划方法,其核心优势在于对海量非结构

化文献语料的深度挖掘与知识重构。通过自动化提取关键数据,并将其与相关化学实体、工艺变量及物理表征细节深度关联,研究者得以在离散的文献信息间构建逻辑纽带,从而建立庞大的结构化反应数据库,从根本上缓解材料合成领域高质量数据匮乏的困境。例如,Kim等^[28]利用自然语言处理技术,配合以随机条件场和随机森林为核心的机器学习架构,对逾64万篇学术文章进行了全文本挖掘,构建了涵盖30种不同氧化物体系的合成参数数据集。通过对高维合成空间进行聚类分析,揭示了材料结构与合成路径间的内在关联,从而为新材料合成规划路线。Pei等^[29]则对640万篇期刊论文摘要进行了文本挖掘,识别出经典的Cantor型与Senkov型高熵合金,并进一步筛选六元及七元轻质高熵合金。在260万种候选合金中成功发现近500种具备显著应用潜力的合金,实现了对复杂高熵乃至超高熵固溶体形成倾向的精准预测与工艺策略指导。

2.2.3 混合规划

近年来,大语言模型(large language model, LLM)作为战略推理引擎的引入,进一步推动了规则搜索与语义理解路径的深度融合。Bran等^[30]提出了一种将LLM与传统搜索算法结合的新型架构Syntheyy:该系统利用LLM的语义理解与逻辑推理能力,从化学机理角度评估候选步骤的合理性,并引导搜索算法筛选具化学意义的拆解方案,从而实现策略感知的逆合成规划。在测试中,Syntheyy能够处理包含高达50步反应的复杂分子合成路线,并在严格的策略约束下识别出最优路径。Li等^[31]开发了名为Carbon Copilot

(CARCO)的 AI 驱动平台,将 LLM 与数据驱动机器学习模型及自动化化学气相沉积系统相结合,用于水平排列碳纳米管(HACNT)阵列的合成规划。在 43 d 的实验周期内,CARCO 通过高通量筛选识别出新型 TiPt 双金属催化剂,其性能优于传统 Fe 催化剂,并通过虚拟实验实现 HACNT 阵列在预定密度下 56.25% 的精确控制,显著提升了合成的可重复性和密度精度。平台通过数字孪生方法对百万级参数组合进行虚拟实验,并结合分类模型筛选不可生长参数,实现 HACNT 密度的高精度可控合成。定量结果显示,单靠回归模型的精度为 39.74%,人类科学家筛选的精度为 49.15%,而 LLM 辅助的数字孪生方法达到最高精度 56.25%,充分体现了 LLM 在复杂实验参数优化和策略性路径设计中的定量优势。总体而言,LLM 不仅依靠搜索算法确保合成走得通,利用文献知识确保路径走得妙,更通过自身的战略推理能力,确保了路径在复杂实验环境下走得成。

2.3 自主实验室

在人工智能赋能材料科学的整体框架中,自主实验室(autonomous research laboratories, ARLs)向上承接机器学习算法生成的科学假设,向下驱动机器人系统进行高通量实验验证,并在闭环迭代中实现从“人工试错”向“智能自主”的范式跃迁。ARLs 的核心效能源于硬件自主性与软件自主性的深度耦合:前者提供机器人操作、仪器联控与无人值守实验执行能力,构成系统的物理基础;后者负责实验方案设计、策略优化、数据分析与模型更新,构成系统的认知核心。二者协同作用,形成贯穿实验设计、执行、反馈与决策的认知闭环。

为刻画人工智能在材料实验中的介入深度,可将自主实验室划分为 0~5 级。0 级完全由科研人员操作;1 级引入单任务自动化设备,但决策权仍由科研人员主导;2 级能够执行多步骤实验流程,并借助静态预测模型或规则系统辅助实验设计;3 级具备条件自主能力,可无人值守地完成多轮实验循环并动态调整方案,是当前主流形态;4 级系统能够自主生成假设、设计并执行实验,科研人员仅提供高层目标;5 级则代表完全自治的未来形态,系统相当于人工智能科学家,可自主规划研究路线并持续输出新知识。

这一分级体系揭示了自主实验室能力演进的核

心规律:从 0~5 级,实验室的执行轴(硬件能力)、认知轴(软件能力)以及科学主控权(角色定位)逐级迁移,体现了实验控制权从人类向机器的逐步转移。具体而言,低级系统主要是自动化工具,中级系统实现有限自主,高级系统则演化为自治的科学探索平台。因此,自主实验室的本质不仅在于实验自动化水平,更在于系统在科研决策与知识生成过程中的自主性。总体而言,自主实验室构成了人工智能赋能材料科学的关键执行层基础设施,是实现材料智能创制的核心平台。

3 人工智能材料的能力边界与挑战

当前,人工智能正在深刻改变材料科学的研究范式,其最可靠的贡献主要体现在加速计算、扩大搜索空间、辅助知识抽取、发现复杂材料体系中隐藏的物理规律等方面。然而,这种能力并非无边界扩张,而是受到数据质量、模型架构、物理机制、实验条件以及可计算资源等多重因素的严苛约束。因此,系统界定人工智能赋能材料的能力边界,并讨论其可克服性,对于推动该领域健康、可持续发展具有重要意义。

3.1 数据孤岛

人工智能首先受制于数据底层的缺陷。一方面是标准化的高质量实验数据集稀缺且噪声显著,尤其是失败数据的系统性缺失^[32-33],使训练样本在输入空间中呈现典型的单侧分布。这种失衡的数据结构导致模型的决策边界难以被有效约束,削弱其泛化能力。另一方面是输入表征的维度缺失。现有的描述符(如成分向量、晶体结构图等)多局限于对静态、平衡态显性特征的编码,而材料的真实性能往往高度依赖于缺陷演化、非平衡相变、跨尺度热历史累积及复杂工艺路径等隐性因素^[34]。这些难以参数化的关键信息在表征体系中往往被简化甚至丢失。研究表明,数据质量评估需通过值域检查、数据类型验证、重复性检测、参照完整性比对、合理性检验等多维度指标进行系统性量化评价^[35],但当前多数材料数据集在这些指标上的表现尚未达到可信赖水平。如图 4^[36]所示,人工智能模型往往仅能触及材料属性的冰山一角,从根本上限制了知识的可迁移性与可解释性。人工智能模型因受限于数据孤岛严重制约其可迁移性。

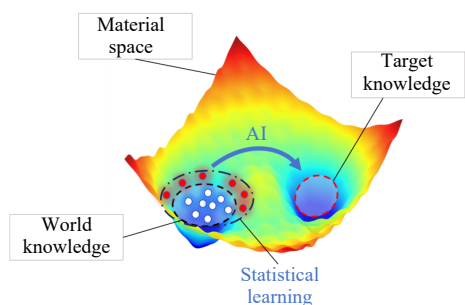


图4 材料科学领域的“数据孤岛”现象

3.2 模型可解释性缺失

人工智能模型本质上依赖统计学习框架,擅长捕捉特征与结果之间的相关性,而非揭示底层物理的因果机制。多数模型难以建立工艺路径、微观结构与宏观性能间的完整因果链条,因此难以回答工艺路径改变对性能影响的逻辑根源。这种因果约束的缺失使得模型在机理解释、跨尺度统一描述以及基于物理冶金原理的新材料设计中存在根本局限,其结果往往是可预测但不可解释^[37]。相比于人类依托抽象能力实现的“认知跃迁”(如高熵效应或拓扑不变量的提出),人工智能目前更接近于经验性插值工具。即便是在高度自动化的自治实验室中,模型也难以自主完成从数据表象到物理规律的抽象提炼,导致自主实验并不等同于自主科学。

模型可解释性对于建立信任、识别数据局限性以及提取新的科学洞见(而非仅依赖数据关联)至关重要。科学家需要明确模型预测是基于物理规律,还是仅源于偶然的数据模式——尤其是在设计用于安全关键型应用(如航空航天或医疗设备)的材料时。例如, Thawon 等^[38]深入探讨了可解释人工智能技术在分析 3D 打印材料弹性行为中的应用。通过识别对材料弹性性能具有关键影响的设计特征,该研究不仅揭示了模型决策背后的物理因素,也显著提升了科学家对模型预测的信任。此外,材料科学的数据集往往规模有限且结构复杂,相比复杂且不透明的算法(如深度神经网络或梯度提升机),可解释模型通常具有更高的鲁棒性,并更不易发生过拟合,这不仅有助于科学家理解模型预测逻辑,也增强了其在科学发现和工程优化中的可靠性。

3.3 算力前置的现实悖论

算力前置的现实悖论构成了人工智能赋能材料科学的基础性限制。尽管人工智能被寄予加速研发

与降低成本的厚望,但其性能增益高度依赖于大规模、高保真的训练数据,这些数据通常源自昂贵的密度泛函理论、从头算分子动力学或精密物理实验。以密度泛函理论为例,其计算复杂度通常随体系原子数呈 $O(N^3)$ 标度关系,结构优化和频率计算需迭代求解,单次计算即需消耗大量 CPU 机时与内存资源。在构建大规模材料数据库时,高昂计算成本形成了明显的前置算力需求。更为严峻的是,随着材料化学空间维度的扩张,这一前置成本呈超线性甚至指数级增长:二元体系组合空间约为 $10^2 \sim 10^3$,而五元高熵合金组合可达 $10^{10} \sim 10^{12}$ 。由此形成了一种现实悖论:旨在节省算力的智能模型,反而须以庞大的前期计算资源投入为前提。这种算力前置特征从根本上制约了该研发模式的经济性与可持续性^[39]。

3.4 置信区间不确定性

不确定性约束的缺失是工程应用中的重大安全隐患。由于缺乏物理规律的内生约束,模型在面对域外数据时表现出显著的不稳定性,尤其当研究目标指向突破性或极端性能材料时,预测的不确定性骤增,且模型自身缺乏可靠的失效判据与风险提示。例如, Li 等^[40-41]指出,在面对材料数据库 Materials Project (201)训练的模型用于预测 Materials Project (2021)中的新材料时,其性能严重下降。更为关键的是,材料研发真正面临的风险,并非模型存在一定误差,而是模型无法判断自身预测是否仍处于可信范围之内。当前多数模型生成的置信区间往往源于对训练数据的经验拟合,在跨越数据域时难以反映真实的不确定性水平。如果科研人员盲目采信这种缺乏物理约束的“高可信推荐”并直接用于昂贵的工程决策,极有可能造成严重的资源浪费,甚至带来潜在的安全风险。

4 材料智能创制的未来愿景

当前材料的智能创制正处于边缘探索向主流应用迈进的进程中,未来材料智能创制系统的迭代升级将呈现纵向深化与横向集成并行演进的特点,总体框架如图5所示。该图从整体上勾勒了支撑未来智能创制体系的两大技术支柱群:左侧是侧重于数据、算法与机理融合的纵向能力提升,右侧是侧重于硬件、

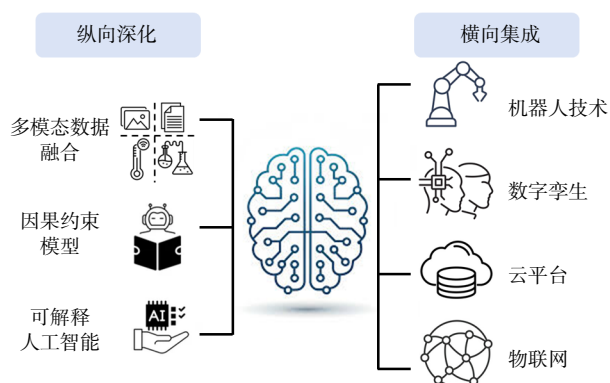


图5 材料智能创制未来技术演进的总体框架

平台与虚拟映射互联的横向设施集成。这两条演进路径相互耦合、协同推进,并最终汇聚成一个强大的中央智能体,共同推动材料研发布局的重构。

4.1 纵向深化

纵向上,未来通过整合不同模态的材料数据,例如光谱数据、显微镜图像数据、传感器信号以及文献文本等多源信息,人工智能模型有望更深入、更全面地洞察材料的结构与性能关系,从而提升对复杂材料体系的整体理解与设计稳健性。在此基础上,将因果关系融入人工智能模型,例如大语言模型中嵌入去偏词和反事实数据增强等技术,有助于降低其对统计相关性和虚假模式的依赖。基于此构建的因果机制模型能够识别工艺参数变化对材料性能的真实影响,从而在开展物理实验之前实现更为可靠的假设验证。与此同时,融合物理约束的混合模型将兼具科学严谨性和数据驱动创新性。通过将热力学定律、守恒关系或偏微分方程等物理知识嵌入生成过程,从而确保对材料行为进行高保真度的模拟。相关模型能够在数据有限条件下保持预测结果的科学可信度和可解释性。随着多模态学习、因果学习和跨尺度知识整合方面的持续演化,未来基座大模型将具备可靠的领域知识外推能力,实现对超出既有数据库边界的未知化学空间探索,提升其在突破性材料逆向设计中的表现,例如预测室温超导体、极限强度金属玻璃或全新结构单元的功能聚合物。另一方面,材料科学的发展、复杂材料研究如玻璃物理可能为大模型设计和训练提供理论原则,帮助模拟大脑神经网络的机制,打开深度学习的黑匣子,为机器学习算法(特别是神经网络、优化算法)提供理论支撑,新型材料的发现也将为解决AI能源瓶颈问题提供新途径。

4.2 横向集成

横向上,与物联网、机器人、云平台与数字孪生技术的深度集成,将实现材料从构想到制备的实时联动和自动化。实验设备、传感器与物联网的全面连接使实验室能够持续在线采集温度、压力、形貌、成分和光谱等多源异构数据,并将数据实时传输至云端进行处理、存储和计算交互。高灵敏度的运动感知、多目标识别和智能决策机制使实验机器人能够在复杂环境中执行精细操作,包括高通量实验规划、合成路径选择、自适应工艺调整和数字孪生。针对不同实验场景的模块化实验设计将为不同任务提供可重构的操作单元,使实验系统具备灵活部署和持续扩展能力。数字孪生技术通过构建与物理实验系统高度一致的虚拟模型,实验动态将以虚拟现实和增强现实的形式呈现,使研究者能够沉浸其中并实时交互,实现人机协同。智能云平台将成为未来材料研究设施的神经中枢,统一管理实验流程、数据流和决策流。该平台能够自动调度机器人、分析算法与实验资源,并将来自不同物理实验室的数据进行整合,从而支撑跨地域协作与分布式材料研发模式。在这一综合框架下,人工智能将有望实现材料构想、设计与规模化制造的深度融合,构建以材料全生命周期为中心的智能管理体系。从目标材料构想与设计、合成配方选择,到工艺参数优化、实时过程监控,再到服役性能评估与可回收性分析,人工智能能够对材料价值链的各环节进行协同建模与自适应调控,显著提升材料创新成果从实验室走向工程应用的可靠性与可扩展性。

总体而言,材料智能创制的未来并非对传统流程的简单自动化升级,而是一个将分散的技术深度整合为统一智能体的持续历程。未来,AI材料学家将逐步成长为具备问题重构、假设生成与机理推断的“同行科学家”,推动材料科学进入由智能主体推动创新的新时代。

参考文献(References)

- [1] Alberi K, Nardelli M B, Zakutayev A, et al. The 2019 materials by design roadmap[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2019, 52(1): 013001.
- [2] Whittingham M S. Lithium batteries and cathode materials[J]. *Chemical Reviews*, 2004, 104(10): 4271-4302.

- [3] Chapin D M, Fuller C S, Pearson G L. A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power[J]. *Journal of Applied Physics*, 1954, 25(5): 676–677.
- [4] Green M A. Advances in the performance and adoption of solar photovoltaics[J]. *Nature Energy*, 2026, 11(1): 7–8.
- [5] 周杨理理, 汪卫华, 赵紫薇. 人工智能驱动的材料科学: 演进、框架、困境与破局[J]. *中国科学院院刊*, 2026, 41(2): 393–405.
- [6] 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.
- [7] Sorby H C. On the microscopical structure of iron and steel[J]. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 1887, 30(1): 255–288.
- [8] Tutton A E H. X-rays and crystal structure[J]. *Nature*, 1915, 95(2373): 198–199.
- [9] Bakhuis Boozeboom H W. Eisen und stahl vom standpunkte der phasenlehre[J]. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 1900, 34U(1): 437–487.
- [10] Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas[J]. *Physical Review*, 1964, 136(3B): B864–B871.
- [11] Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects[J]. *Physical Review*, 1965, 140(4A): A1133–A1138.
- [12] Jain A, Ong S P, Hautier G, et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation[J]. *APL Materials*, 2013, 1: 011002.
- [13] Kirklin S, Saal J E, Meredig B, et al. The open quantum materials database (OQMD): Assessing the accuracy of DFT formation energies[J]. *npj Computational Materials*, 2015, 1: 15010.
- [14] De Pablo J J, Jackson N E, Webb M A, et al. New frontiers for the materials genome initiative[J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5: 41.
- [15] 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.
- [16] Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 80–85.
- [17] 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.
- [18] Boiko D A, MacKnight R, Kline B, et al. Autonomous chemical research with large language models[J]. *Nature*, 2023, 624(7992): 570–578.
- [19] Zhu Q, Huang Y, Zhou D L, et al. Automated synthesis of oxygen-producing catalysts from Martian Meteorites by a robotic AI chemist[J]. *Nature Synthesis*, 2024, 3(3): 319–328.
- [20] Mahal E, Roy D, Manna S S, et al. Machine learning-driven prediction of band-alignment types in 2D hybrid perovskites[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2023, 11(43): 23547–23555.
- [21] Chen Q Y, Annamareddy A, Li Y F, et al. Physical-regularized hierarchical generative model for metallic glass structural generation and energy prediction[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2026, 40(1): 83–91.
- [22] Wang Q X, Yang X F, Shi R G, et al. Discovery of novel High- T_c superconductors via machine learning-based random forest model[J]. *Applied Physics A*, 2025, 131(8): 622.
- [23] Li H R, Zhou D L, Smith P E S, et al. Spectra-based clustering of high-entropy alloy catalysts: Improved insight over use of atomic structure[J]. *Chemical Science*, 2025, 16(11): 4646–4653.
- [24] Zeni C, Pinsler R, Zügner D, et al. A generative model for inorganic materials design[J]. *Nature*, 2025, 639(8055): 624–632.
- [25] Kim S, Noh J, Gu G H, et al. Generative adversarial networks for crystal structure prediction[J]. *ACS Central Science*, 2020, 6(8): 1412–1420.
- [26] Hong S Q, Zhuo H H, Jin K B, et al. Retrosynthetic planning with experience-guided Monte Carlo tree search[J]. *Communications Chemistry*, 2023, 6: 120.
- [27] Segler M H S, Preuss M, Waller M P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI[J]. *Nature*, 2018, 555(7698): 604–610.
- [28] Kim E, Huang K, Tomala A, et al. Machine-learned and codified synthesis parameters of oxide materials[J]. *Scientific Data*, 2017, 4: 170127.
- [29] Pei Z R, Yin J Q, Liaw P K, et al. Toward the design of ultrahigh-entropy alloys via mining six million texts[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 54.
- [30] Bran A M, Neukomm T A, Armstrong D P, et al. Chemical reasoning in LLMs unlocks strategy-aware synthesis planning and reaction mechanism elucidation[J]. *arXiv*, 2025: 2503.08537.
- [31] Li Y, Wang S R, Lv Z, et al. Transforming the synthesis of carbon nanotubes with machine learning models and automation[J]. *Matter*, 2025, 8(1): 101913.
- [32] Raccuglia P, Elbert K C, Adler P D F, et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments[J]. *Nature*, 2016, 533(7601): 73–76.

- [33] David N, Sun W H, Coley C W. The promise and pitfalls of AI for molecular and materials synthesis[J]. *Nature Computational Science*, 2023, 3(5): 362–364.
- [34] 柯海波, 周靖, 童星, 等. 非晶物质的前沿发展现状与未来展望[J]. *科技导报*, 2025, 43(15): 20–38.
- [35] Wuest T, Tinscher R, Porzel R, et al. Experimental research data quality in materials science[J]. *arXiv*, 2015: 1501.01149.
- [36] Zhang S Y, Yao Y B, Long H Q, et al. Research paradigm of materials science tetrahedra with artificial intelligence[J]. *arXiv*, 2026: 2603.13744.
- [37] 王冠杰, 刘盛威, 周健, 等. 材料研究中的可解释机器学习[J]. *金属学报*, 2024, 60(10): 1345–1361.
- [38] Thawon I, Suttakul P, Wanison R, et al. Integrating explainable artificial intelligence in machine learning models to enhance the interpretation of elastic behaviors in three-dimensional-printed triangular lattice plates[J]. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2025, 144: 110148.
- [39] Winstanley J. The hidden costs of AI: A review of energy, E-waste, and inequality in model development[J]. *arXiv*, 2025: 2507.09611.
- [40] Li K M, DeCost B, Choudhary K, et al. A critical examination of robustness and generalizability of machine learning prediction of materials properties[J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9: 55.
- [41] Li K M, Rubungo A N, Lei X Y, et al. Probing out-of-distribution generalization in machine learning for materials[J]. *Communications Materials*, 2025, 6: 9.

Artificial intelligence-driven materials science: History, challenges, and future

ZHOU Fengxiang^{1,2}, ZHOU Yanglili^{1,2}, ZHAO Ziwei^{1,2*}, WANG Weihua¹

1. Dongguan Institute of Materials Science and Technology, Chinese Academy of Sciences, Dongguan 523830, China

2. Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523830, China

Abstract In response to the long development cycles and heavy reliance on empirical expertise in materials research, this study elucidates the evolutionary logic underlying the transformation of materials science toward a fourth paradigm of "intelligent autonomous creation" enabled by artificial intelligence (AI). It further analyzes the mechanisms by which cognitive capabilities and decision-making authority are transferred from human researchers to intelligent systems. The paper also outlines the multidimensional pathways through which AI enables materials innovation across three major dimensions: materials design, synthesis planning, and autonomous experimental systems. To address limitations such as data silos, limited physical interpretability, and heavy dependence on upfront computational resources, this work argues that embedding physical mechanisms into statistical models is essential to overcome current capability boundaries. Looking ahead, the deep integration of multimodal foundation models with digital twin technologies is expected to establish an intelligent management framework that covers the entire materials lifecycle. This integration is likely to usher materials research into a self-evolving era characterized by algorithm-driven processes and close human-machine collaboration.

Keywords materials science; artificial intelligence; paradigm shift ●



(责任编辑 赵庆圆)