

特色专题

人工智能赋能材料科学与多学科交叉融合： 从材料基因组到 AI4M² 的基石与路径

吕涛¹, 熊杰^{1,2}, 陈帅^{1,2}, 孙升¹, 张统一^{1*}

摘要 材料基因组工程的高通量计算、高通量实验和数据库建设,为人工智能(artificial intelligence, AI)赋能材料科学提供了数据与平台基础。从材料科学与力学、计算科学、自动化和工程科学交叉融合的视角,界定材料/力学信息学(AI for materials and mechanics, AI4M²)的内涵,梳理材料设计、微观组织表征、工艺优化、力学建模、自驱动实验和科研智能体等方面的进展。AI4M²的“硬基石”是人工智能实验机器人、高通量平台、智能表征装备和自驱动实验室,“软基石”是人工智能算法、多尺度计算、科学大模型、数字孪生与科学软件;数据基础设施贯通2类基石,科研智能体连接模型、工具、实验和工程场景。针对高质量数据不足、模型物理可解释性和跨尺度泛化能力有限、实验闭环与自主软件装备薄弱以及复合型人才短缺等问题,比较国内外代表性实践,并提出统一数据标准与接口、建设共享中试级智能实验平台、发展可验证的自主软件工具链、以重大工程场景组织示范和完善本硕博贯通培养等可实施路径。

关键词 人工智能;材料信息学;力学信息学;材料基因组;科研智能体;多学科交叉

材料基因组工程以高通量计算、高通量实验和数据库为核心,已显著拓展材料发现与设计的规模,中国也在方法、平台和工程应用方面形成了较系统的基础^[1-6]。在此基础上,材料信息学把数据科学和机器学习引入成分、结构与性能关联研究;Materials Project、高通量材料发现自动框架(automatic FLOW for materials discovery, AFLOW)、晶体图卷积神经网络以及材料探索图网络(graph networks for materials exploration, GNoME)等工作,推动材料研究由经验筛选走向大规模计算与智能预测^[7-13]。

与此并行,力学信息学将实验数据、数值模拟、工程监测与力学理论相结合,用于解决本构关系、损伤演化、疲劳寿命和结构运维等问题^[14-19]。现有研究仍多聚焦单项算法或单一材料任务,对“成分—工艺—组织—性能—服役”全链条的贯通不足;实验与计算数据标准不一,模型的物理可解释性和跨尺度泛化能力有限,智能实验平台与自主科学软件也尚未形成稳定互操作的体系。

本研究以材料/力学信息学(AI for materials and mechanics, AI4M²)为分析框架,突出材料科学与力学、计算科学、自动化和工程科学的交叉,提出“硬基石—数据贯通—软基石—科研智能体”的体系架构;结合国内外代表性案例比较进展与差距,并给出面向数据标准、共享平台、软件工具链、工程示范和人才

1. 上海大学材料基因组工程研究院,上海 200444

2. 上海大学核电关键材料全国重点实验室,上海 200444

收稿日期: 2026-07-07; 修回日期: 2026-07-20

基金项目: 中国科学院学部咨询评议项目(3-ZXB2025010)

作者简介: 吕涛,实验师,研究方向为材料信息学,电子信箱: lvtao@shu.edu.cn; 张统一(通信作者),教授,中国科学院院士,研究方向为材料/力学信息学、断裂力学等,电子信箱: zhangty@shu.edu.cn

引用格式: 吕涛,熊杰,陈帅,等. 人工智能赋能材料科学与多学科交叉融合: 从材料基因组到 AI4M² 的基石与路径[J]. 科技导报, 2026, 44(14): 80-90;

doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2026.07.00034

培养的可实施路径。

图1概括了研究范式从实验、理论和模拟,经材料基因组的数据—计算—实验协同,发展到AI4M²全链条闭环的演进。材料信息学与力学信息学的概念

探索早于或并行于材料基因组工程,但后者的高通量方法和数据基础设施为其系统化发展提供了重要支撑;当前AI4M²进一步连接智能设计、智能实验、智能制造与装备,以及智能评价与运维。



图1 材料与力学科学研究范式的演进

本文将材料信息学与“人工智能+材料”、力学信息学与“人工智能+力学”分别作为同义表述,并用AI4M²统称二者。这里的“力学”不是对研究范围的收窄,而是把材料设计延伸到结构响应、装备服役和工程安全;AI4M²因而是面向材料—结构—装备—工程全链条的多学科交叉框架。

1 材料/力学信息学的多学科内涵

1.1 从材料基因组到材料信息学

材料研发涉及成分、工艺、组织、性能和服役行为的连续传递,数据类型多、实验代价高。材料数据科学通过统一描述符、数据治理、特征工程和可复用工具,把分散的实验与计算结果转化为可检索、可比较和可建模的知识^[20-22]。

材料基因组把高通量计算、高通量实验和开放数据库纳入同一研发流程,其贡献不仅是扩大候选规模,也在于形成可持续积累的数据基础。人工智能在此基础上承担性质预测、候选排序、逆向设计和实验

选择,使研发流程由线性试错逐步转向“预测—验证—反馈—更新”的闭环。

这一转变并不意味着以算法替代材料机理。模型只有在明确适用范围、保留实验条件和不确定性信息,并接受独立实验验证时,才可能成为可靠的研究工具。

1.2 从经验力学到力学信息学

力学信息学研究如何融合力学理论、实验测量、数值模拟和工程监测数据,建立可预测、可解释、可验证的本构、损伤和寿命模型^[14-17]。它既面向材料尺度的强度、塑性、韧性和疲劳,也面向结构尺度的损伤识别、剩余寿命和可靠性评价。

复杂材料和重大装备往往同时受到微观组织、缺陷、残余应力、制造历史及温度、腐蚀、辐照和循环载荷影响。若只在单一数据集上拟合,应力—应变或寿命模型很容易把条件相关性误当成普遍规律。

因此,力学信息学需要把守恒定律、平衡方程、边界条件和失效准则嵌入模型,并用传感数据持续校核。数据驱动计算力学和物理信息机器学习提供了

可行途径,但工程应用仍应报告误差范围和外推边界。

数字孪生把物理结构与可实时更新的虚拟模型连接起来,可综合传感数据、力学计算和维护记录,用于状态评估、寿命预测与运维决策,是力学信息学由离线分析走向在线评价的重要载体^[19]。

1.3 多学科交叉的统一框架

AI4M²以材料科学提出对象和机理问题,以力学连接性能与服役安全,以计算科学提供跨尺度求解,以自动化实现稳定的数据生成,再由工程科学给出约束和验收标准。各学科并非简单叠加,而是通过统一数据描述、模型接口和验证流程协同工作。

其研究范围贯穿材料全生命周期:前端包括数据整理、候选筛选、结构生成和工艺设计,中端包括制备、表征和性能测试,后端包括结构评价、服役监测、失效分析和寿命管理。只有把上下游信息反馈起来,局部最优才有可能转化为工程可用。

1.4 AI4M²的范式特征

AI4M²具有4个主要特征:机理约束与数据学习

并重;从单指标预测转向性能、成本、可制造性和可靠性的多目标权衡;从离线分析转向计算与实验闭环;从单点材料扩展到结构、装备和工程系统。评价这类研究,既要看模型精度,也要看数据可追溯性、实验可复现性和工程可验证性。

2 AI4M²发展的2类基石与数据贯通

AI4M²的基础可概括为图2所示的“硬基石”和“软基石”。硬基石以材料人工智能实验室为核心,包括实验机器人、高通量制备与测试、智能表征、在线监测和自驱动实验室;软基石包括人工智能算法、多尺度计算、科学大模型、数字孪生和自主科学软件。数据基础设施位于两者之间,承担采集、标准化、质量控制、存储和知识组织;科研智能体则连接模型、工具、装备和工程场景,组织问题提出、模型预测、实验验证、数据反馈与模型更新。

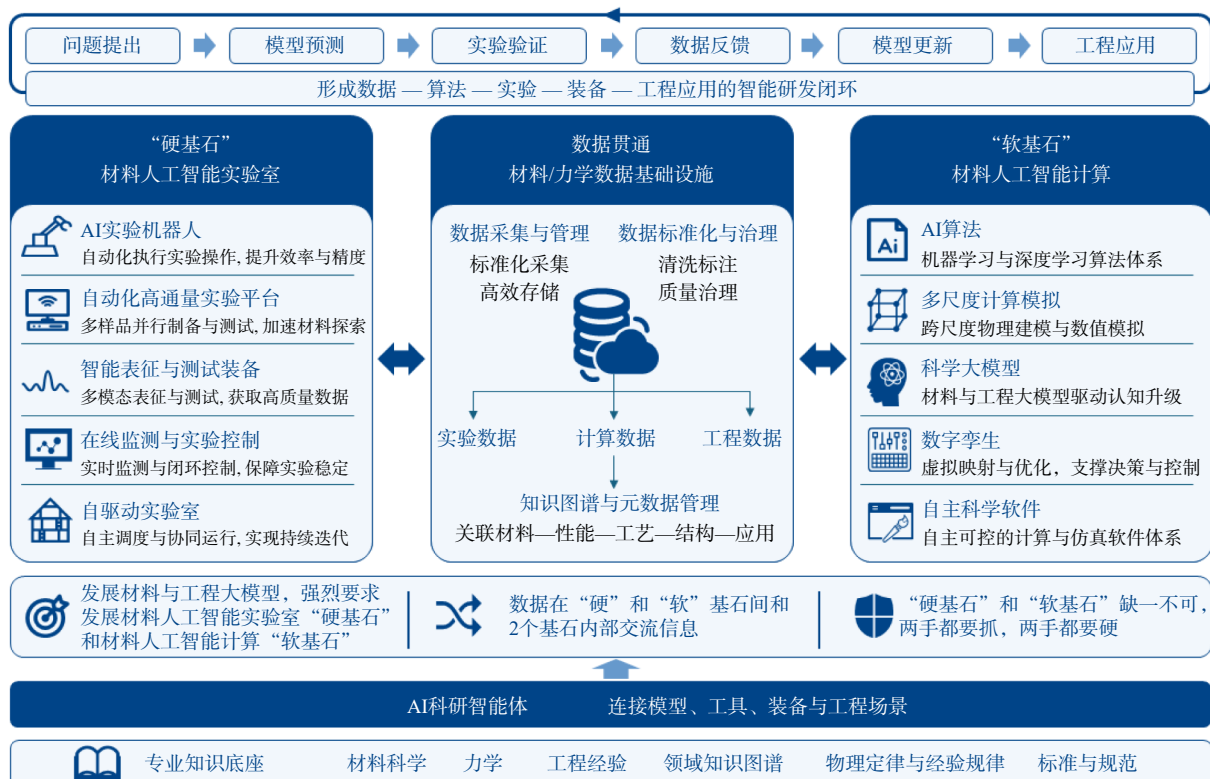


图2 AI4M²发展的“硬基石”“软基石”与数据贯通

2.1 “硬基石”:实验机器人与智能实验室

材料与力学研究依赖样品制备、组织表征、性能测试和环境加载。自动化平台能够稳定执行重复操

作并完整记录时间、设备、参数和样品流转信息;高通量平台则在受控条件下系统改变成分、工艺和环境,为主动学习提供连续数据。

“硬基石”的价值不只体现在“做得快”，还在于形成机器可读、可追溯的数据链。若仪器接口、样品标识和质量控制仍彼此割裂，增加机器人数量并不会自然形成闭环。平台建设应从实验流程、数据规范和安全边界同步设计。

国际上，机器人科学家、移动化学机器人、自驱动薄膜实验室和自主实验室(Autonomous Laboratory, A-Lab)已展示从方案生成到实验反馈的不同层级^[23-28]；国内的“AI-Chemist”(人工智能化学家)等平台也形成了面向催化和材料实验的自主化探索^[29]。国外平台较重视开放接口、流程复现和跨机构验证，国内团队在仪器工程化、场景适配和系统集成方面推进较快，下一步差距主要在长期稳定运行、标准互操作和共享机制。

2.2 “软基石”：算法、多尺度计算与科学大模型

“软基石”承担规律提取、性质预测、结构生成、跨尺度求解和决策优化。材料与力学问题受热力学、动力学、晶体学、守恒定律和边界条件制约，通用算法必须与领域知识共同构成模型，不能只追求在既有数据集上的分数。

多尺度计算为数据稀缺场景提供了可控的数据来源。深度势注意力模型(deep potential with attention, DPA)和晶体哈密顿图神经网络(crystal Hamiltonian graph neural network, CHGNet)等机器学习原子间势，把第一性原理精度与较大时空尺度连接起来^[30-31]。这类模型适合加速筛选和动力学模拟，但仍须对新元素组合、缺陷和极端状态进行基准校核。

材料领域模型已从单一性质预测扩展到数据、特征、模型和应用的一体化平台。AlphaMat、MatChat和无须编程的材料机器学习设计平台 MLMD 分别探索了资源集成、知识交互和材料设计工作流^[32-34]；生成模型 MatterGen 可按性质约束提出结构，并在概念验证中从 4 个候选中合成出 TaCr₂O₆，估算体积模量最高为 169 GPa，与 200 GPa 设计目标仍有差距^[35]。这说明生成模型能缩小搜索空间，但不能替代合成、表征和误差分析。

叠熵理论从多尺度构型及其统计权重出发计算自由能、体积和热膨胀，为相变和涌现行为提供可解释的热力学约束^[36-38]。这类理论与机器学习结合，有助于避免模型仅依赖相关性；其推广仍取决于构型采

样、能量精度和独立实验验证。

2.3 数据贯通：硬软基石之间的信息血脉

实验数据、计算数据和工程数据应在统一样品标识、元数据和版本记录下流动。“硬基石”提供真实但昂贵的数据，“软基石”提供可扩展的模拟和预测，二者通过误差校准与实验反馈相互修正。数据质量、来源和适用条件若不可追溯，闭环越快，错误也可能传播得越快。

科研智能体可在授权范围内调用数据库、求解器和仪器，承担任务分解、参数检查、流程调度和结果汇总。它的作用是把已有能力编排成可复用流程；关键决策、异常处置和工程放行仍应保留人工审核。

3 主要进展

图 3 把当前进展归纳为 3 类：一是材料设计、组织表征和工艺优化；二是多尺度力学建模、损伤演化 and 服役安全评价；三是自驱动实验、科研智能体和数字材料生态。3 类工作的共性是利用异构数据、物理知识和高性能计算提高预测、协同和验证能力，并逐步把单点工具连接成研发闭环。

3.1 “硬基石”进展：自驱动实验与闭环研发

自驱动实验通常由 4 个环节组成：模型根据已有数据选择下一组实验，自动化平台执行制备与测试，分析模块判断结果及不确定性，新数据再用于更新模型。主动学习和贝叶斯优化可减少无信息量的实验，但前提是目标函数、约束条件和停止规则定义清楚。

A-Lab 在 17 d 闭环运行中完成 353 次实验，实现 57 个目标中的 36 个无机晶体，成功率为 63%；失败结果还暴露出前驱体选择、反应动力学和计算数据误差等问题^[28]。这一案例的意义在于计算、历史知识、机器人和主动学习的联动，而不只是实验数量。国内 AI-Chemist 则展示了移动机器人、化学工作站和决策算法在真实实验室中的集成^[29]。与国际先进平台相比，国内后续应加强原始数据开放、跨平台复现实验和长期运行评价。

3.2 “软基石”进展：设计、表征、工艺与力学建模

“软基石”的进展主要体现在候选空间扩大、模型由预测走向生成、表征由人工判读走向定量分析，以及工艺和服役问题开始纳入统一优化。

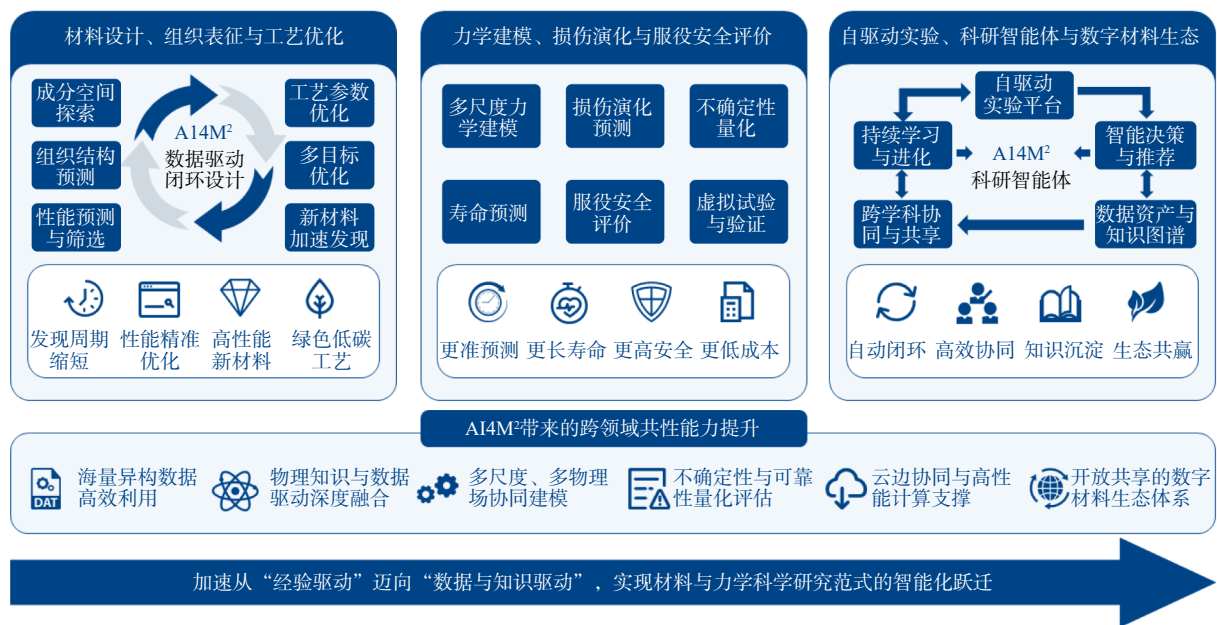


图3 AI4M²的主要进展与跨领域共性能力

GNoME 扩展出约 220 万种相对既有数据稳定的结构,其中约 38.1 万种位于更新后的凸包,显著扩大了计算候选空间^[12]。MLMD 为材料性能预测和成分设计提供了可复用 workflow^[34]; MatterGen 进一步尝试按目标性质生成结构^[35]。这些结果说明人工智能擅长压缩搜索空间,真正的“发现”仍要经过可合成性判断、实验制备和性能复测。

从筛选到逆向设计后,模型评估也应随之改变。除稳定性和预测误差外,还应报告候选新颖性、与训练数据的距离、合成失败样本和实验条件,避免把计算候选数量直接等同于新材料数量。

在组织表征方面,计算机视觉可用于晶粒、相区、孔洞、夹杂物和裂纹的识别与统计,从而把显微图像转化为可比较的组织特征^[39]。跨设备和跨材料应用时,成像条件、标注规则和尺度校准必须同时保存,否则模型容易把仪器差异当成材料差异。

性能预测已覆盖强度、韧性、疲劳、腐蚀、热电和催化等指标。可解释机器学习可识别关键特征和局部结构,但解释结果仍须与物理机制、对照实验和敏感性分析相互印证^[40]。对训练分布之外的成分、工艺和服役环境,应明确给出不确定性而非单一数值。

在制造环节,人工智能可联合熔炼、热处理、焊接和增材制造中的工艺参数、在线信号、组织与性能数据,开展缺陷预警和参数优化。工程部署的难点在

于工况漂移、设备差异和质量责任,因此,模型应与过程控制规则和抽检制度配合使用。

在力学建模和服役评价中,数据驱动方法可从实验曲线、微观组织和模拟数据学习本构关系,并辅助损伤识别、裂纹扩展和剩余寿命预测^[15-17]。引入力学方程和边界条件能够减少小样本下的不合理安排,但不能消除材料批次、载荷谱和环境变化带来的不确定性。

物理信息神经网络(physics-informed neural network, PINN)已用于疲劳与断裂问题。基于断裂力学约束的 PINN 可利用循环载荷和缺陷信息预测多缺陷材料疲劳寿命,说明物理损失函数能够减少对纯经验拟合的依赖^[41]。其工程使用仍需与标准试验和独立数据集交叉验证。

4 科研智能体:连接模型、工具、实验与工程的系统形态

科研智能体是在大模型、记忆、工具调用和自动化执行基础上形成的任务系统。中国《智能体规范应用与创新实施意见》提出,智能体应具备自主感知、记忆、决策、交互和执行能力,并在科学研究场景中推进规范应用^[42]。在材料与力学领域,其价值在于把文献、数据库、计算软件、实验平台和工程需求纳

入同一 workflow。

一个面向 AI4M² 的智能体通常包括任务规划、知识检索、模型或求解器调用、实验调度、数据质检和结果审查等模块。每一步都应记录输入、工具版本、参数、输出和责任人,使过程可回放、结果可追溯。

当前科研智能体较适合边界清楚、工具成熟、结果可自动校验的任务,例如,资料整理、批量计算、参数扫描和数据格式检查。对于新机理判断、复杂实验异常和重大工程安全结论,仍需要领域专家作最终决定。

MechAgents 以多个智能体协作解决力学问题、生成并校核新数据,表明智能体可以把领域知识、数值求解器和验证程序组织成可复用的计算流程^[43]。这类概念验证的重点不在于替代研究者,而在于减少重复操作,并把校核环节嵌入数据生成过程。

现有材料与力学智能体有 3 个较稳定的做法:按规划、执行、验证等角色分工;优先调用成熟数据库和科学软件;在关键节点设置“人在环路”。引导式自主更符合当前模型能力,也便于划分权限与责任。

智能体一旦能够提交计算任务、改变实验参数或

上传数据,错误就可能从文本层面扩展到仪器、样品和工程决策。需要重点防范越权调用、异常任务连续执行、数据泄露、模型幻觉和知识产权风险。

建议按任务风险设置分级授权:低风险数据处理可自动执行,中风险计算和实验需事前审批,高风险或不可逆操作必须由责任人确认;同时保留操作日志、异常阻断、结果复核和定期审计机制^[42]。

5 关键要素与挑战

对 AI4M² 的判断应保持适度克制。人工智能在候选筛选、标准化实验、图像分析和批量计算中已经显示效率优势,但从“辅助研究”到“自主发现”仍取决于数据、物理一致性、实验闭环和工程验证。

图 4 将问题归纳为 3 组:数据基础、模型构建与物理可解释性不足;实验闭环、软件装备与平台能力薄弱;智能体治理、人才培养与学科组织滞后。相应路径是建设数据—实验—计算协同基础设施,推动材料基因组、科研智能体与重大工程示范融合,并形成贯通培养和开放协同机制。

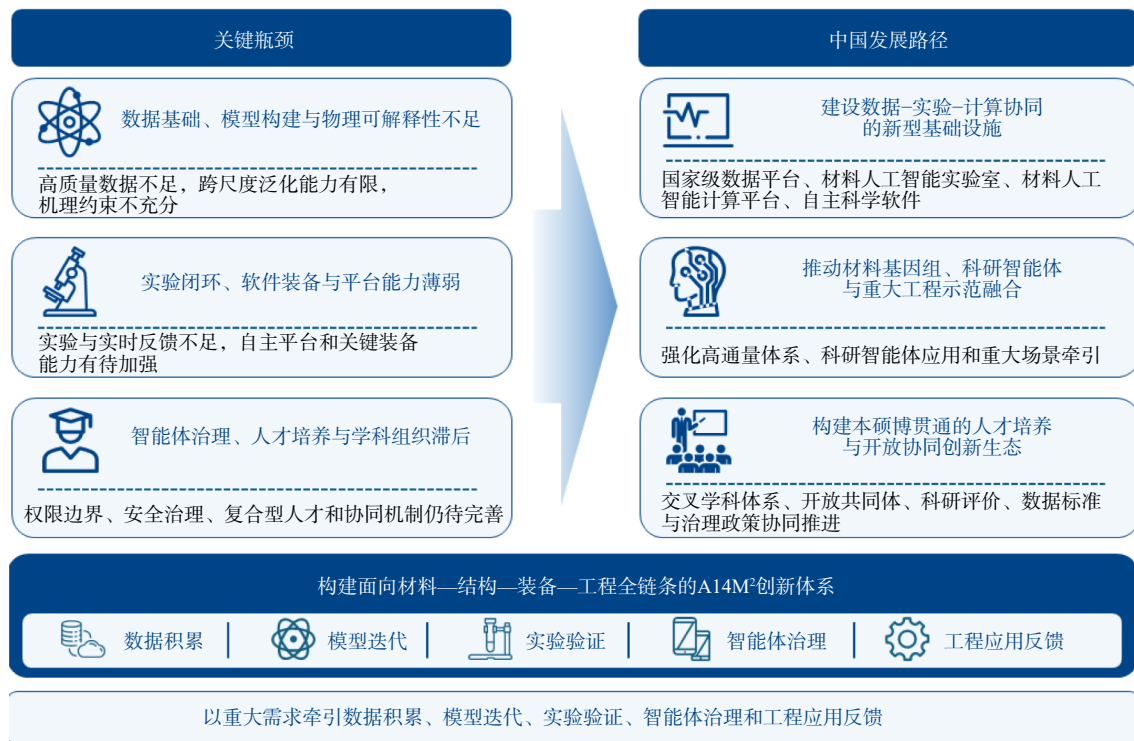


图 4 AI4M² 发展的关键瓶颈与中国发展路径

5.1 高质量材料/力学数据仍然不足

材料和力学数据获取成本高、条件依赖强。同一

材料在不同制备批次、设备、标准 and 环境下可能得到不同结果;若元数据缺失,模型无法区分材料差异与

测试差异。数据分散、负结果缺失和共享激励不足,是比样本数量更基础的问题。

国际上, Materials Project 以开放计算数据支撑材料筛选^[6], 新材料发现数据平台 (Novel Materials Discovery, NOMAD) 进一步保存多种计算软件的原始输入输出, 并以统一元数据支持复用^[44-47]。中国已启动“1+N”新材料大数据中心建设^[44], 优势是产业场景和实验资源丰富, 短板则是跨机构标准、长期运营和数据确权机制尚需落实。

公开数据往往偏向成功样本, 失败合成、异常曲线和超出量程的数据较少。负结果能够标示不可行区域和工艺边界, 应在保护商业秘密和知识产权的前提下, 以分级访问方式纳入数据平台。

数据建设可先从晶体结构、相图、力学性能和工艺记录等高频类型切入, 制定最小必需元数据、单位和不确定性规则; 同步建立样品唯一标识、版本记录、质量分级和数据引用机制。平台是否有效, 应看数据被复用和复现实验的情况, 而非只看存储规模。

5.2 模型的可解释性与物理一致性不足

材料与力学研究不仅需要预测“是多少”, 还要解释“为什么”和“在什么条件下成立”。在训练集上精度很高的模型, 进入新成分、新工艺或极端服役环境后仍可能失效; 黑箱输出不能直接作为工程放行依据。

改进方向包括把热力学、动力学、守恒定律、边界条件和稳定性准则写入模型结构或损失函数; 用多保真数据和不确定性量化识别外推风险; 以独立实验、跨平台计算和极端工况测试模型边界。

可解释机器学习能够给出特征贡献、关键原子环境或局部结构, 但“模型关注了什么”不等于“机理已经得到证明”^[40]。解释结果应与消融试验、理论推导和新的可证伪实验结合, 形成从统计关联到物理认识的证据链。

5.3 实验闭环能力仍然薄弱

许多工作仍停留在离线数据建模, 模型预测、样品制备、表征测试和数据回传之间需要人工转接。闭环薄弱的原因包括仪器接口不统一、样品流转难追踪、实时质检不足以及算法无法处理实验异常。

计算闭环可先行验证流程。MechAgents 把任务分解、求解、校核和数据整理串联起来, 为自动生成

可验证计算数据提供了示例^[43]。向实验延伸时, 应把成功和失败样本同等回传, 并设置人工接管和安全停止条件。

5.4 科学软件、装备和数据库自主能力有待加强

AI4M² 依赖第一性原理、分子动力学、相场、有限元、热力学和可靠性分析等软件, 也依赖高端制备、表征和实验控制装备。若模型、数据格式和仪器控制被封闭接口锁定, 系统难以互操作和持续迭代。

国外科学软件通常经历较长时间的社区验证, 工具链、文档和基准体系较成熟; 国内软件与装备在若干环节已取得进展, 但跨软件接口、测试数据集、长期维护和用户生态仍较薄弱。自主能力的衡量标准应包括结果可复现、版本可追溯和故障可定位, 而不只是功能数量。

原子轨道基元的第一性原理计算软件 (Atomic-orbital Based Ab-initio Computation at USTC, ABACUS) 已形成面向人工智能时代的开源电子结构计算平台, 并可连接机器学习势函数和高性能计算^[48]。以此类自主软件为核心建设公开基准、接口规范和持续集成测试, 是形成可信工具链的可行切口。

对于航空航天、能源装备、先进钢铁和氢能材料等领域, 数据库、核心算法、软件和实验控制系统还涉及数据安全与供应链韧性。自主建设应坚持开放验证, 避免形成新的封闭孤岛。

5.5 交叉人才培养与学科组织滞后

复合型人才既要理解材料和力学机理, 又要掌握数据、软件、自动化与工程验证。当前课程和评价往往仍按单一学科组织, 学生容易出现“懂算法但不懂实验条件”或“懂材料但不会构建可复用工具”的断层。人才培养应增加真实项目、代码与数据规范、实验自动化、模型审查和安全治理训练。

6 中国 AI4M² 的发展建议

6.1 建设可用的材料/力学数据基础设施

依托新材料大数据中心, 先选择晶体结构、相图、力学性能、显微组织和工艺记录等 3~5 类数据, 发布统一字段、单位、误差、来源和授权规则; 国家主平台负责标准、目录和质量评价, 专业节点负责数据生产与维护^[44-47]。

2年内可形成一批开放应用程序接口、样例数据和年度基准任务,要求新建高通量平台自动回传原始数据、处理脚本和失败记录。验收指标包括完整元数据比例、跨节点互操作率、外部复用次数和复现实验通过率。

6.2 建设共享的中试级智能实验平台

围绕粉末合成、热处理、增材制造和力学测试等典型流程,建设可由科研智能体调度的模块化平台。优先统一样品标识、设备接口、数据回传和安全连锁;选择2~3个材料体系连续运行,按实验成功率、无人运行时长、数据完整度和跨机构复现率验收^[26-29,42]。

6.3 发展可验证的自主科学软件工具链

以ABACUS等开源软件为基础,连接前后处理、材料数据库、机器学习势、工作流调度和结果校核模块^[48]。设立公开测试集和版本化基准,要求关键算法给出输入、参数、误差和复现脚本;对长期维护、文档和社区贡献给予稳定支持。

6.4 推动材料基因组与AI4M²协同发展

现有材料基因组平台不必另起炉灶,可在高通量计算、实验和数据库上补充智能体编排、在线学习和工程反馈能力。新增项目应明确与既有平台的数据接口和成果回流要求,减少重复建设。

6.5 以重大工程场景组织示范

可在航空发动机材料、氢能装备、先进钢铁、储能材料和增材制造构件中选择少量需求明确的场景,由材料、装备和用户单位共同定义目标。示范项目应贯通数据、模型、实验和中试,不以单项算法精度替代工程验证。

建议把研发周期缩短比例、关键性能达标率、重复实验一致性、服役可靠性、成本变化和数据回流完整度列为验收指标;达到规定边界后再扩大场景,避免“展示性闭环”。

6.6 完善贯通培养和开放共同体

课程应以真实材料问题为主线,把数据清洗、模型训练、机理分析、实验验证、代码复现和工程判断放在同一项目中。支持材料、力学、计算机和自动化教师联合指导,并把高质量数据集、软件和实验流程纳入成果评价。

上海大学的“材料设计科学与工程”本科专业由钱伟长学院负责招生和教学管理、材料基因组工程研

究院制定培养方案并实施专业教学,课程覆盖计算、实验和数据库^[49];研究生阶段设置材料信息学硕士、博士培养方向,聚焦材料大数据、智能计算和自驱自主实验^[50]。这一实践可进一步通过企业和重大工程联合课题补强真实场景训练。

上述6项任务需要同一套接口和评价逻辑:数据进入平台,模型与软件留下可复现记录,实验和工程结果再回流数据端。只有长期运行并允许外部验证,单点优势才会沉淀为体系能力。

7 结论

AI4M²把材料基因组的高通量计算、高通量实验和数据库基础,扩展到材料科学、力学、计算科学、自动化和工程科学协同的智能研发体系。其基本架构是硬基石负责数据生成与实验验证,软基石负责计算、建模与决策,数据基础设施贯通两者,科研智能体组织模型、工具、实验和工程场景。

目前,高质量数据不足、模型物理一致性和外推能力有限、实验闭环与自主工具链薄弱、智能体治理和交叉人才培养滞后,仍是主要瓶颈。人工智能能够提高筛选和迭代效率,但不能替代独立实验、机理判断和工程责任。

本文所说的“结构性差距”,不是某个模型精度或单台设备性能的差距,而是先发平台在数据规模与标准、算法和软件生态、实验自动化、工具链互操作、工程验证、人才与治理机制之间形成自增强网络后,国内机构在要素联通和持续迭代能力上的体系差距。单项技术可以通过项目追赶,缺失的接口、标准和长期运行机制则难以由单个成果补齐。

中国拥有完整材料产业链、丰富工程场景和已有材料基因组基础,仍有形成特色路径的条件。近期应把资源集中到统一数据标准、共享中试平台、可验证自主软件、重大工程示范和贯通培养上,用可复现的数据和工程结果检验进展,使AI4M²真正成为材料与装备创新的长期基础设施。

参考文献(References)

[1] 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.
- [2] 孙志梅, 王冠杰, 张烜广, 等. 材料基因工程加速新材料设计与研发[J]. 北京航空航天大学学报, 2022, 48(9): 1575–1588.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] Materials genome initiative for global competitiveness[R]. Washington, D.C.: National Science and Technology Council, 2011.
- [6] 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.
- [7] Agrawal A, Choudhary A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science[J]. *APL Materials*, 2016, 4(5): 053208.
- [8] Butler K T, Davies D W, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science[J]. *Nature*, 2018, 559(7715): 547–555.
- [9] Ramprasad R, Batra R, Piliya G, et al. Machine learning in materials informatics: Recent applications and prospects[J]. *npj Computational Materials*, 2017, 3: 54.
- [10] Xie T, Grossman J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(14): 145301.
- [11] Chen C, Ye W K, Zuo Y X, et al. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals[J]. *Chemistry of Materials*, 2019, 31(9): 3564–3572.
- [12] Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 80–85.
- [13] Curtarolo S, Setyawan W, Hart G L W, et al. AFLOW: An automatic framework for high-throughput materials discovery[J]. *Computational Materials Science*, 2012, 58: 218–226.
- [14] 王鹏, 孙升, 张庆, 等. 力学信息学简介[J]. 自然杂志, 2018, 40(5): 313–322.
- [15] Kirchdoerfer T, Ortiz M. Data-driven computational mechanics[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 304: 81–101.
- [16] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378: 686–707.
- [17] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning[J]. *Nature Reviews Physics*, 2021, 3(6): 422–440.
- [18] 李丰范, 匡健隆, 季佳浩, 等. 机器学习在金属材料服役性能预测中的应用[J]. 工程科学学报, 2024(1): 120–136.
- [19] Tao F, Qi Q L, Wang L H, et al. Digital twins and cyber-physical systems toward smart manufacturing and industry 4.0: Correlation and comparison[J]. *Engineering*, 2019, 5(4): 653–661.
- [20] Kalidindi S R, De Graef M. Materials data science: Current status and future outlook[J]. *Annual Review of Materials Research*, 2015, 45: 171–193.
- [21] Lookman T, Alexander F J, Rajan K. Information science for materials discovery and design[M]. Cham: Springer International Publishing, 2016.
- [22] Ward L, Dunn A, Faghaninia A, et al. Matminer: An open source toolkit for materials data mining[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 152: 60–69.
- [23] King R D, Whelan K E, Jones F M, et al. Functional genomic hypothesis generation and experimentation by a robot scientist[J]. *Nature*, 2004, 427(6971): 247–252.
- [24] Burger B, Maffettone P M, Gusev V V, et al. A mobile robotic chemist[J]. *Nature*, 2020, 583(7815): 237–241.
- [25] MacLeod B P, Parlane F G L, Morrissey T D, et al. Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials[J]. *Science Advances*, 2020, 6(20): eaaz8867.
- [26] Hse F, Roch L M, Aspuru-Guzik A. Next-generation experimentation with self-driving laboratories[J]. *Trends in Chemistry*, 2019, 1(3): 282–291.
- [27] Tom G, Schmid S P, Baird S G, et al. Self-driving laboratories for chemistry and materials science[J]. *Chemical Reviews*, 2024, 124(16): 9633–9732.
- [28] 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.
- [29] Zhu Q, Zhang F, Huang Y, et al. An all-round AI-chemist with a scientific mind[J]. *National Science Review*, 2022, 9(10): nwac190.
- [30] Zhang D, Bi H R, Dai F Z, et al. Pretraining of attention-based deep learning potential model for molecular simulation[J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 94.
- [31] Chen C, Ong S P. A universal graph deep learning inter-

- atomic potential for the periodic table[J]. *Nature Computational Science*, 2022, 2(11): 718–728.
- [32] Wang Z L, Chen A, Tao K H, et al. AlphaMat: A material informatics hub connecting data, features, models and applications[J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9: 130.
- [33] Chen Z Y, Xie F K, Wan M, et al. MatChat: A large language model and application service platform for materials science[J]. *Chinese Physics B*, 2023, 32(11): 118104.
- [34] Ma J X, Cao B, Dong S Y, et al. MLMD: A programming-free AI platform to predict and design materials[J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 59.
- [35] Zeni C, Pinsler R, Zügner D, et al. A generative model for inorganic materials design[J]. *Nature*, 2025, 639(8055): 624–632.
- [36] Liu Z K, Li B, Lin H. Multiscale entropy and its implications to critical phenomena, emergent behaviors, and information[J]. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2019, 40(4): 508–521.
- [37] Liu Z K, Wang Y, Shang S L. Zentropy theory for positive and negative thermal expansion[J]. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2022, 43(6): 598–605.
- [38] Liu Z K, Hew N L E, Shang S L. Zentropy theory for accurate prediction of free energy, volume, and thermal expansion without fitting parameters[J]. *Microstructures*, 2024, 4(1): 2024009.
- [39] DeCost B L, Holm E A. A computer vision approach for automated analysis and classification of microstructural image data[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 110: 126–133.
- [40] 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.
- [41] Dong Y X, Yang X F, Chang D D, et al. Predicting fatigue life of multi-defect materials using the fracture mechanics-based physics-informed neural network framework[J]. *International Journal of Fatigue*, 2025, 190: 108626.
- [42] 智能体规范应用与创新发展实施意见[EB/OL]. (2026-05-08)[2026-05-13]. https://www.cac.gov.cn/2026-05/08/c_1779979789523320.htm.
- [43] Ni B, Buehler M J. MechAgents: Large language model multi-agent collaborations can solve mechanics problems, generate new data, and integrate knowledge[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2024, 67: 102131.
- [44] 新材料大数据中心总体建设方案[R]. 北京: 工业和信息化部, 财政部, 国家数据局, 2024.
- [45] Draxl C, Scheffler M. NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science[J]. *MRS Bulletin*, 2018, 43(9): 676–682.
- [46] Scheffler M, Aeschlimann M, Albrecht M, et al. FAIR data enabling new horizons for materials research[J]. *Nature*, 2022, 604(7907): 635–642.
- [47] Ghiringhelli L M, Baldauf C, Bereau T, et al. Shared meta-data for data-centric materials science[J]. *Scientific Data*, 2023, 10: 626.
- [48] Zhou W Q, Zheng D Y, Liu Q R, et al. ABACUS: An electronic structure analysis package for the AI era[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2025, 163(19). doi:10.1063/5.0297563.
- [49] 材料设计科学与工程[EB/OL]. [2026-07-20]. <https://zybl.shu.edu.cn/yxshezhi/bjrcpy/qwzxy/zyshez/clsjkygc.htm>.
- [50] 上海大学材料基因组工程研究院. 欢迎报考上海大学材料基因组工程研究院·材料信息学硕士/博士研究生[EB/OL]. (2026-04-04) [2026-07-20]. <https://mgi.shu.edu.cn/info/1062/7135.htm>.

AI-Empowered materials science and multidisciplinary integration: Cornerstones and pathways from the materials genome to AI4M²

LÜ Tao¹, XIONG Jie^{1,2}, CHEN Shuai^{1,2}, SUN Sheng¹, ZHANG Tongyi^{1*}

1. Materials Genome Institute, Shanghai University, Shanghai 200444, China

2. State Key Laboratory of Advanced Nuclear Materials for Key Equipment, Shanghai University, Shanghai 200444, China

Abstract High-throughput computation, high-throughput experimentation, and database development under the Materials Genome initiative have provided the data and platform foundations for artificial intelligence (AI) in materials science. From the interdisciplinary perspective of materials science, mechanics, computational science, automation, and engineering, this article defines materials/mechanics informatics (AI for Materials and Mechanics, AI4M²) and reviews progress in materials design, microstructure characterization, process optimization, mechanics modeling, self-driving experimentation, and scientific agents. The hard cornerstones of AI4M² are AI-enabled experimental robots, high-throughput platforms, intelligent characterization equipment, and self-driving laboratories; its soft cornerstones are AI algorithms, multiscale computation, scientific foundation models, digital twins, and scientific software. Data infrastructure connects the two, while scientific agents link models, tools, experiments, and engineering scenarios. In view of insufficient high-quality data, limited physical interpretability and cross-scale generalization, weak experimental closed loops and indigenous software and equipment, and a shortage of interdisciplinary talent, representative practices in China and abroad are compared. Actionable pathways are proposed, including common data standards and interfaces, shared pilot-scale intelligent laboratories, verifiable indigenous software toolchains, engineering-led demonstration projects, and integrated undergraduate-to-doctoral training.

Keywords artificial intelligence; materials informatics; mechanics informatics; materials genome; scientific agents; multidisciplinary integration ●



(责任编辑 王微)