

认知与执行双轮驱动：MatPilot 重塑材料研发新范式

■ 文 / 叶益聪
国防科技大学

摘要：材料是装备升级的核心基石，军用材料因多品种、小批量、高可靠性的特殊要求，长期面临研发周期长、实验成本高、理性设计难的行业困境。基础理论的跨学科混杂、从微观到宏观的复杂结构层次、多样的材料属性与反应机制，以及缺乏统一标准的测试表征体系，共同导致传统“试错法”研发模式效率低下，难以满足国防装备快速迭代的需求。在此背景下，国防科技大学叶益聪教授团队深耕人工智能与材料科学的交叉领域，提出“人机融合、大模型赋能、大小模型协同、自主实验”的一体化研究新范式，研发出 AI 材料学家 MatPilot 系统，通过“认知决策 + 实验执行”的双轮驱动，构建起全流程智能化的材料研发体系，相关成果在《Journal of the American Ceramic Society》《Scripta Materialia》等国际顶刊发表，为军用材料研发开辟了高效、精准的全新路径。

一、新范式的核心逻辑：四位一体的协同创新架构

叶益聪教授团队提出的材料研究新范式，并非单一技术的突破，而是通过四大核心要素的深度耦合，形成“认知—挖掘—预测—验证”的完整闭环，彻底改变传统研发的碎片化格局。这一架构以人机融合为核心导向，以大小模型协同为技术支撑，以自主实验为落地保障，层层递进、相互赋能，构建起兼具创新性与实用性的研发生态。

1.1 人机融合：显性知识与隐性智慧的双向赋能

在材料研发领域，人类专家的隐性经验与直觉思维始终具有不可替代性。门捷列夫梦中构思元素周期表、凯库勒受梦境启发提出苯环结构，这类源于直觉的科学突破，正是人工智能当前难以企及的核心优势。此外，领域专家积累的未公开工艺细节、课题组传承的“独门秘籍”等隐性

知识，无法通过结构化数据直接传递给 AI 系统。

MatPilot 系统的核心创新在于构建了“人类—智能体”双向交互机制，通过自然语言交互接口，实现显性知识与隐性智慧的深度融合。人类专家可将经验、灵感甚至直觉转化为 AI 可理解的指令，为智能体提供方向指引；AI 则通过高维数据挖掘，将隐藏在海量信息中的材料规律反馈给人类，拓展专家的认知边界。这种“人类启发 AI，AI 增强人类”的协同模式，打破了传统机器学习“数据驱动”的单一逻辑，赋予智能体“认知推理”能力，实现 1+1>2 的创新效应。

1.2 大模型赋能：知识挖掘与假设生成的效率革命

大模型具备卓越的通用逻辑推理能力和跨领域知识整合能力，其知识广度与关联速度远超人类，为材料研发的知识挖掘环节带来革命性突破。MatPilot 依托大模型构

建高效知识引擎，通过定制化提示词工程，实现从非结构化文献到结构化数据的精准转化，快速筛选有效信息、抽取核心参数、构建动态知识图谱。

针对“筛选高耐压储能陶瓷配方”“对比不同工艺的性能差异”等复杂科研需求，大模型可在 5 分钟内完成多数数据库检索、交叉验证与可视化分析，输出包含配方、工艺、性能的完整对比报告。更重要的是，大模型能够基于现有知识进行跨领域关联，提出具有创新性的科学假设，为材料设计提供方向指引，彻底改变传统文献调研“逐篇阅读、人工整理”的低效模式。

1.3 大小模型协同：泛化推理与精准预测的优势互补

材料研发既需要宏观层面的跨领域知识关联，也需要微观层面的高维数据拟合，单一模型难以同时满足两类需求。叶益聪教授团队提出“大模型掌全局，小模型精细节”的协同机制，实现泛化推理与精准预测的有机统一。大模型负责科学假设生成、知识关联与逻辑推理，为研发提供方向指引；以机器学习、计算材料学为代表的小模型，则专注于高维数据处理、材料性能预测与关键特征挖掘，为假设验证提供技术支撑。

在钙钛矿结构介质陶瓷的介电常数预测中，机器学习小模型的预测趋势与实验结果高度吻合，通过 SHAP 特征重要性分析，首次明确 B 位掺杂元素的电负性是影响介电常数的核心因素，为配方优化提供了精准依据；针对软磁合金的饱和磁化强度优化，小模型结合主动学习策略，通过三轮迭代即发现性能优于现有文献报道的新合金配方，充分验证了协同模式的有效性。这种“宏观指引 + 微观精准”的协同架构，既保证了模型的泛化能力，又实现了对特定材料体系的精准刻画。

1.4 自主实验：数据可靠性与研发效率的双重保障

人工实验存在耐力有限、操作误差、重复性差等固有缺陷，而数据的可靠性直接决定模型预测的准确性。MatPilot 构建的自主实验系统，通过“AI 设计—自动化执行—数据反馈”的闭环流程，从根本上解决了这一问题。团队以陶瓷材料研发为切入点，搭建了从配料、球磨、压片、烧结到性能测试的全流程自动化平台，核心技术亮点显著。

在配料环节，设计大小粉桶配合方案，大粉桶保障加料效率，小粉桶将控制精度提升至 $\pm 1\text{mg}$ ，彻底解决人工配料的误差问题；压片环节研发自动化模具清洗、分

拣机构，实现单日 100 片以上的高通量制备；针对自动化设备柔性不足的痛点，引入人形机器人技术，模拟人类双手完成物料转移、研磨拆分等复杂操作，相关成果已被机器人领域顶会 IROS 接收。自主实验系统不仅将实验效率提升 10 倍以上，更重要的是保证了数据的一致性与可靠性，为模型训练提供了高质量的“黄金数据集”，形成“数据—模型—实验”的良性循环。

二、关键技术突破：从知识挖掘到实验验证的全链条创新

MatPilot 系统的成功落地，源于一系列关键技术的系统性突破。叶益聪教授团队围绕“数据—模型—实验”三大核心环节，构建起多维度、深层次的技术体系，确保新范式的有效落地。

2.1 知识引擎：动态图谱与智能问答的深度融合

MatPilot 的知识引擎基于代理式问答系统（Agentic RAG）构建，突破了传统静态数据库的局限，实现知识的动态更新与深度关联。其核心流程包括：通过多数据库检索目标材料相关文献，利用大模型 + 提示词工程筛选有效信息，剔除冗余与低质量内容；精准抽取实验配方、工艺参数、性能数据等关键信息，进行标准化处理与交叉验证；将结构化数据转化为包含“配方—工艺—性能—机理”的四维知识图谱，挖掘数据背后的隐藏规律。

该引擎具备强大的复杂问题响应能力，例如针对储能陶瓷研究，可快速筛选出耐压大于 400kV/cm 的高储能密度配方，并生成储能密度与效率的可视化对比图谱；针对钛合金等军用关键材料，通过融合文本描述的组织结构信息与量化物理特征，在未知组织结构的前提下即可实现塑性预测，预测精度 R^2 达到 0.849，为材料设计提供了精准指导。

2.2 数据处理：叠熵技术破解多源异构数据难题

材料研究中，不同实验条件、测试标准产生的多源异构数据，是制约模型性能的核心瓶颈。叶益聪教授团队创新性地引入叠熵（Zentropy）技术，构建“数据质量量化—自动加权—鲁棒性增强”的三级解决方案，从根本上解决数据适配问题。通过计算数据的本征熵表征样本“混乱度”，本征熵越高代表数据噪声越大、质量越低，实现数据质量的量化评估；基于温度参数的自动加权机制，让模型自适应不同质量数据的权重，避免低质量数据“带偏”模型；通过热力学机制增强模型鲁棒性，打破“垃圾进，垃圾出”的传统限制，使模型在未完美清洗的复杂数

据集中仍能保持高泛化能力。

针对超高温陶瓷等文献数据不可用的场景，团队通过自主实验获取 90 组高保真数据，结合生成对抗网络 (GAN) 进行数据增强，训练出的代理模型成功预测出近零烧蚀的三元陶瓷配方 ($\text{HfB}_2\text{—}3.52\text{SiC—}5.23\text{TaSi}$)，相关成果发表于《Advanced Powder Materials》；通过添加高斯噪声的样本增强方法，有效解决小样本数据不足的问题，大幅提升模型的泛化能力。

2.3 多智能体框架：科学假设的自动化生成与验证闭环

MatPilot 构建的多智能体协同框架，模拟人类“发散思考—收敛验证”的创新过程，实现了科学假设从生成到验证的全流程自动化。框架由三大智能体分工协作：智能体 A 负责任务编排，根据科研需求制定研究计划与流程；智能体 B 负责科学假设生成，基于知识引擎提供的信息与大模型的推理能力，提出多样化的材料配方与实验方案；智能体 C 负责假设验证，通过调用小模型预测与自主实验系统，筛选出符合科学规律与性能要求的方案，各智能体通过模型上下文协议 (MCP) 实现高效交互。

在无铅储能陶瓷研发中，系统基于 BNT—BT 基体材料的研究基础，提出掺杂 BiFeO_3 、 CaZrO_3 等组分的优化思路，生成具体配方后通过自主实验获取性能数据，大模型进一步分析高性能配方的特征规律，提出新一轮优化策略，形成闭环迭代。实证数据显示，传统试错法研发微波介质陶瓷需要数百组实验、耗时数年，而 MatPilot 仅通

过 20 组实验、耗时 3 个月，就实现了介电常数调控精度 ± 2 、品质因数提升 30% 的显著成果，充分彰显了该框架的高效性。

三、自主实验室建设：从 0 到 1 的工程化实践路径

MatPilot 新范式的落地，离不开自主实验室的坚实支撑。叶益聪教授团队遵循“概念验证—稳定提升—持续迭代”的三步走策略，以实用化、闭环化、可迭代为核心原则，完成了从技术构想到工程实践的转化，为科研平台建设提供了宝贵经验。

概念验证阶段以“跑通最小闭环”为目标，团队聚焦配料、压片等核心环节，半年内完成首个 demo 系统搭建，验证了高精度加料、自动化模具清洗等关键技术的可行性，同时通过小范围实践澄清需求、锻炼团队，为后续优化奠定基础。稳定提升阶段聚焦自动化领域的“二八定律”，投入 80% 的精力攻克设备兼容性、异常处理、数据校验等边界问题，解决了物料粘连、模具磨损等实际挑战，将实验室从“可用”升级为“可靠”的生产力工具。持续迭代阶段则致力于“用好平台”，引入具身智能技术，推动实验全流程串联，优化人机交互接口，让科研人员能够通过自然语言直接下达实验指令。目前，MatPilot 自主实验室已实现月均完成 60 组实验、产生 15000 个数据点的高效研发能力，成为新范式落地的核心保障。

四、未来展望：AI 赋能材料科学的发展方向

挑战与展望



MatPilot 系统的成功实践，为材料研发范式变革提供了生动范例，但叶益聪教授团队清醒地认识到，材料智能研发仍面临诸多需要突破的方向。如何实现 AI 与人类专家隐性经验的精准对齐，让智能体更好地理解 and 运用人类直觉；如何构建更高效的人机融合认知决策框架，提升协同创新的实时性与准确性；如何通过联邦学习、区块链技术实现数据“可用不可见”的共享模式，破解数据壁垒；如何推动具身智能机器人突破柔性操作瓶颈，实现复杂实验场景的全流程自动化，这些都是团队未来的重点研究方向。

从行业发展趋势来看，2024 年诺贝尔物理学奖、化

学奖对 AI 相关研究的认可，2025 年中美两国将“AI+ 材料”纳入国家战略的举措，都标志着人工智能驱动的科研范式变革已成为必然趋势。正如 2025 年诺贝尔经济学奖提出的“创造性毁灭”概念，AI 并非要取代人类，而是倒逼人类重新定义自身的价值。在叶益聪教授的带领下，MatPilot 团队正朝着材料理性设计、高效设计、低成本设计的目标持续迈进，未来有望在超高温陶瓷、轻质高强合金等军用关键材料领域实现更大突破，为我国国防科技事业发展提供核心支撑，其构建的“认知—挖掘—预测—验证”全流程闭环范式，也将为全球材料科学的发展提供重要借鉴。

作者简介：

叶益聪，现国防科技大学空天科学学院 / 材料系主任、教授，军队青年科技英才。2001-2011 年清华大学本科和博士毕业，材料基因工程青年科学家奖一等奖，军队科技进步一等奖 2 项，国家级线上一流课程负责人，湖南省高校材料类专业教指委副主任。