

多智能体在能源材料研究中的应用

王骥^{1†}, 朱浩哲^{2†}, 李培义¹, 刘畅^{3*}, 刘洋^{4*}, 万佳雨^{1,5*}

1. 上海交通大学溥渊未来技术学院, 未来电池研究中心, 上海 200240

2. 上海交通大学环境科学与工程学院, 上海 200240

3. 内蒙古三峡蒙能能源有限公司, 鄂尔多斯 014300

4. 昆山杜克大学数据科学研究中心, 昆山 215316

5. 上海交通大学极端能源材料智能创制教育部重点实验室, 上海 200240

† 同等贡献

* 联系人, E-mail: Liu_chang5@ctg.com.cn; yang.liu2@dukekunshan.edu.cn; wanjy@sjtu.edu.cn

2025-11-17 收稿, 2026-01-09 修回, 2026-01-12 接受, 2026-01-13 网络版发表

上海市经济和信息化委员会科学智能“百团百项”专项(2025-GZL-RGZN-BTBX-01012)和国家自然科学基金(52272215)资助

摘要 随着能源材料研究中数据量激增与体系复杂度提升, 传统依赖人工经验与理论推导的研究范式面临效率瓶颈, 亟须向智能驱动的研究方法演进. 大语言模型(large language model, LLM)赋能的单智能体虽能为能源材料科研提供助力, 但在处理多任务、多源数据的情况时存在性能限制, 多智能体系统(multi-agent system, MAS)因此成为相关问题的重要解决方案. MAS通过纵向角色专业化分工与横向智能体并行协作, 构建“假设—实践—分析”的科研闭环, 相比单智能体在灵活性、容错性和可扩展性方面更具优势, 并可通过可追溯决策提升成果可信度. 基于科研闭环完整性与人类介入程度, 本文将MAS在能源材料领域的应用分为三个层级: 仍需要依赖人类指令与评估的工具级; 需人类在关键节点提供反馈指导, 从而构成“人在环路”协作模式的助手级; 自主完成科研闭环, 实现“人在环外”运行的系统级. 当前MAS仍然面临高质量实验数据稀缺、系统可靠性与可解释性不足、数据接口的统一标准缺失等挑战. 然而, 随着人工智能技术的发展使得以上问题得到有效解决, MAS有望通过全流程灵活迭代、多尺度信息贯通、跨学科认知融合, 推动科研从“人机协作”向“系统共创”转变, 为能源材料领域的范式创新提供新可能.

关键词 多智能体系统, 能源材料, 科研自动化, 人机协作

1 前言

在缓解气候变化、应对能源危机的全球背景下, 能源材料日益受到重视^[1]. 近几十年来, 能源材料领域实现跨越式发展, 研究方法持续丰富、技术手段不断革新, 在电池、光伏、热电、压电、超导体等细分方向取得诸多突破性进展^[2-6]. 然而, 随着数据量急剧增长与研究体系复杂度提升, 传统依赖人工经验与理论推导的研究范式逐渐显现出效率不足的问题. 在高通量实验、计算仿真与多模态数据快速积累的背景下,

研究者面临信息爆炸与知识碎片化的双重挑战, 亟需新的体系范式来实现跨维度信息整合, 从而加速能源材料领域的研发过程^[7]. 这一需求推动了能源材料研究从“人工主导”向“智能驱动”的持续演化.

1.1 研究范式的演进

过去十年中, 人工智能技术推动能源材料领域飞速发展. 传统机器学习依赖算法与数据的共同支撑, 需研究者手动选择特征、训练模型并分析结果. 该技术

引用格式: 王骥, 朱浩哲, 李培义, 等. 多智能体在能源材料研究中的应用. 科学通报, 2026, 71: 5564–5578

Wang J, Zhu H, Li P, et al. Application of multi-agent in energy materials research (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 5564–5578, doi: [10.1360/CSB-2025-5793](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5793)

可用于完成规律性强但机械繁复的工作,例如训练集的数据标注^[8];也可理解或预测实验现象,例如利用基于X射线衍射(X-ray diffraction, XRD)数据的无监督学习方法探索固态电解质的结构规律^[9]。深度模型以端到端的方式学习多尺度构效关系^[10],推动机器学习逐步摆脱对人工经验的依赖,演化为既能良好应对特定问题、又具备跨场景迁移潜力的通用研究方法。例如,循环神经网络(recurrent neural network, RNN)可用于捕捉微尺度异质材料的时变与路径依赖行为^[11],图神经网络(graph neural network, GNN)结合晶体图结构,可实现对原子级拓扑的高效编码与预测^[12]。基于注意力机制^[13]的深度神经网络使大语言模型(large language model, LLM)能够捕捉大规模语料中的复杂语义与逻辑关系,生成连贯自然的内容,在开放式问答、方案设计与学术写作中表现优异,显著提升了科研效率^[14]。通过检索增强生成(retrieval-augmented generation, RAG)和知识图谱等知识技术^[15-19]、谱图解析和图片理解等感知技术的融合应用,LLM在能源材料领域的专业能力进一步提升,已有诸多实例,如金属有机框架(metal organic framework, MOF)生成模型ChatMOF^[20]、金属有机催化设计模型Arplorer^[21]、国际首个LLM加速电池研究模型BatteryGPT^[14]。

LLM与工具调用的结合可以拓展其能力。受此启发,研究者探索让LLM自发地调用工具完成感知和行动的过程,推动了智能体(agent)概念的形成。在智能体的典型 workflows 中,核心LLM借助读取和搜索工具,获取本地数据库和网络中的信息;并发挥其语义理解和内容生成的能力,实现逻辑推理和方案规划。随后,智能体调用工具主动与外界交互,以实现目标、核查结果并优化方案^[22,23]。工具集是智能体从认知智能向行动智能跨越的关键,它们赋予LLM智能体文字以外的输出能力,使其可以与外界进行更复杂的交互。代表性的工作包括第一性原理计算智能体MatAgent^[24]、有机合成智能体Chemma^[25]和自动化实验智能体Coscientist^[26]等。与LLM的黑箱式生成不同,智能体可在每一步决策前显式输出想法和意图。以ReAct框架^[27]为例,模型的推理路径和对外指令均可以文字形式呈现,这种结构化的日志形成类似实验记录的数字化可审计轨迹,使研究者能够追踪决策依据、验证逻辑。在人工智能与能源材料研究的交叉领域,可解释性和可溯源性一直备受关注^[28],而智能体框架可显式呈现工作思路,显著提升了研究成果的可信度。图1展示了从生成式人

工智能、单智能体到多智能体系统(multi-agent system, MAS)的演进路径,以及MAS在能源材料各细分方向的应用实例。

单智能体虽在材料科研领域展现出较强的推理与执行能力,但其功能定位仍类似于全能型研究者,在处理多任务、多源数据和多步骤流程时容易出现性能瓶颈^[29]。这一限制的根源在于单智能体的功能集成度过高。单智能体通常需兼顾感知、推理、规划与执行,其性能依赖单一模型的上下文记忆与推理能力,而缺乏跨角色调度与长链规划执行机制^[27]。随着科研任务复杂度提升,当涉及并行实验、多模型调用或多维目标优化等情景时,单智能体往往难以同时维持推理深度与任务一致性,易引发输出幻觉与决策偏差^[30]。

1.2 多智能体的背景和优势

为破解单智能体的结构性瓶颈,相关研究逐渐转向MAS的构建^[31,32]。单智能体因兼顾多环节,导致注意力分散、幻觉累积及逻辑矛盾等问题^[33],而MAS的核心思想是通过多个具备独立功能的智能体协作,实现任务分解与角色分工。这种分布式智能结构使系统具备更高的灵活性、容错性与可扩展性。

在纵向维度上,MAS能够按任务需求扩展角色层级,将科学研究映射为多阶段知识生产流程^[32,34]。例如,“科学家”智能体提出假设构想、“规划者”智能体分解任务并制定执行计划、“实验员”智能体执行操作与计算、“仲裁者”智能体评估结果并进行反馈优化。角色专业化分工使各智能体专注自身领域,形成垂直科研流水线,提升系统的精度与鲁棒性。在横向维度上,MAS可通过同类角色并行协作形成“专家团队”,借助辩论、投票等机制,整合观点并达成共识^[35,36]。多个“科学家”智能体通过论证修正初始假设,多个“仲裁者”智能体交叉评估以抑制决策偏差,从而借助集体智能减少个体幻觉与推理漂移。各智能体通过共享工具调用和知识空间,形成兼具专精优势与整体性的科研网络。MAS同样可以提升输出结果的解释性与可信度:信息流经由多角色、多阶段的验证,各步骤的推理与决策均具备可追溯路径,最终可构成可验证、可复现的科学发现流程^[33]。

根据智能体之间的信息流动方式,MAS的协作结构可概括为层次化、中心化与去中心化三种类型^[37],如图2所示。层次化结构通过自上而下的任务分解与逐层执行,推理链路清晰,能减少同层间错误的相互强化;

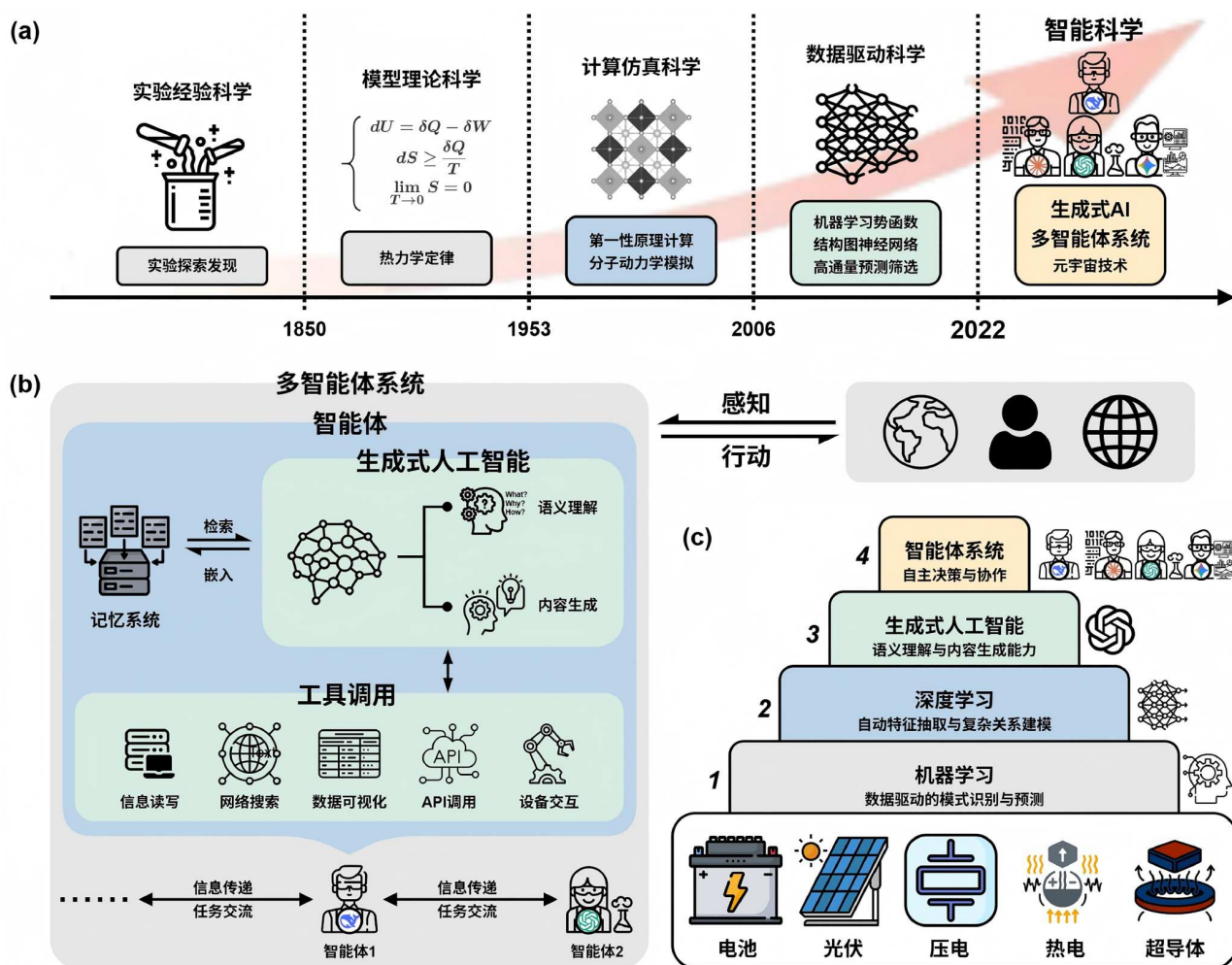


图1 (a) 材料科学研究范式发生转变, 智能科学时代已经来临; (b) 生成式人工智能、智能体与多智能体系统的结构关系示意图; (c) 多智能体系统在能源材料具体细分方向的应用举例

Figure 1 (a) The research paradigm of materials science has undergone a transformation, and the era of intelligent science has arrived. (b) Schematic diagram of the structural relationships among generative artificial intelligence (Generative AI), intelligent agents, and MAS. (c) Examples of applications of MAS in specific sub-fields of energy materials

但一旦上层判断出现偏差, 误导将沿链路放大^[38]。中心化结构由单一协调者整合各方信息并进行统一仲裁, 可在多源任务中有效过滤不一致性, 但其决策中心也可能成为系统性幻觉的源头^[39]。去中心化结构通过多智能体平行博弈与观点碰撞形成共识, 能有效暴露逻辑冲突、减轻个体偏差, 但在缺乏约束时也可能因意见分歧或误导性证据而无法收敛^[39]。这三种结构在不同任务情境下各具优势: 层次化结构适用于规则明确、步骤固定的流程, 可通过逐层审查限制局部幻觉积累; 中心化结构在信息冗余度高、需一致性裁决的多源任务中更为突出; 去中心化结构则最有助于揭示深层逻辑冲突、抑制系统性幻觉, 但需要更严格的原则约束

以规避多数错误共识。实际应用时, 需根据科研任务的结构化程度、模态复杂性与容错需求, 选择单一架构或混合采用不同架构, 以在效率、稳定性与幻觉控制之间达成最优平衡^[40-42]。

MAS的强大能力基于大量通信与迭代, 与传统机器学习相比具备更强的观点涌现与场景适应能力, 相较于单智能体则拥有更好的幻觉抑制与知识调用能力^[43]。但这并不意味着在所有任务中都应直接引入多智能体架构。对于流程清晰、标准化与结构化程度均很高的任务, 如常规第一性原理计算、批量数据标注与回归拟合等, 简单脚本或高度定制的自动化流程即可在单一工作流中稳定完成全部步骤; 此时引入多智

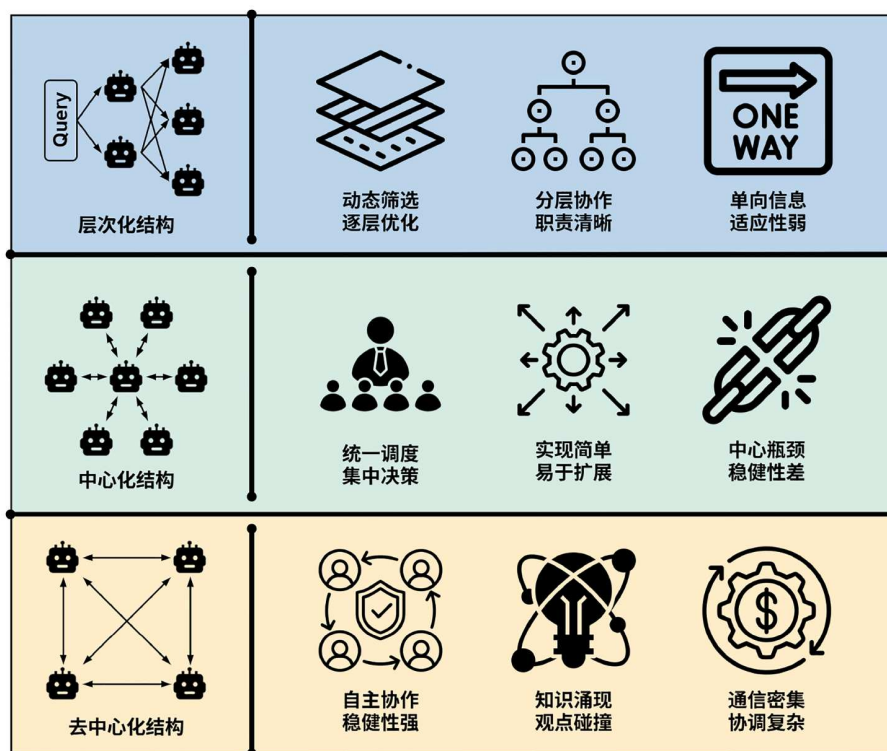


图2 基于信息流动方式的三类多智能体系统协作结构及其典型特征

Figure 2 Three collaboration structures of MAS based on information flow and their typical characteristics

能体只会产生额外的通信与调度开销,进而转化为算力与时间成本^[36]。当任务开始涉及跨文献知识抽取、跨模态信息整合,或在有限知识空间内开展观点涌现与方案探索时,引入具备工具调用、记忆管理和规划反思能力的单智能体往往更为合适,其可在统一上下文中完成从信息检索、知识融合到结论生成的整体流程,且无需承担多智能体之间的协调通信成本。只有当任务进一步升级为多环节强耦合、知识空间极为广阔且需要在多个子任务间反复迭代时,MAS的优势才会真正显现^[44]。例如在能源材料研究中,类似eN-RRCCrew^[45]的多智能体团队可自动解析数千篇文献的反应条件与催化剂特征,构建可直接用于机器学习的结构化数据库,并在统一框架下完成多模型预测、聚类分析、知识图谱关联和候选活性中心生成,将原本需人工多次协作往返的大规模数据处理与工具调用,收敛为单一的、可闭环优化的工作流。在这类高维、多环节、跨体系的场景中,多智能体的协作开销通常被其在信息整合效率、人力节约与研究迭代速度上的整体收益所覆盖。因此,依据任务整体需求来分层选择

脚本、单智能体或MAS,才是达成效率与成本最优平衡的关键^[46]。图3展示了大语言模型与多智能体系统在解决能源材料领域问题的对比。

2 在能源材料中的应用

科学研究的本质是一个循环迭代的过程:从假设提出、实验验证到结果分析,再基于分析结果修正假设或提出新假设,形成“假设—实践—分析”的知识生产闭环。在这一闭环中,“假设”包括提出科学问题、设计研究方案并确立目标;“实践”涵盖实验操作、计算模拟与数据采集;“分析”则涉及结果解读、规律总结与假设验证。评价MAS智能化、自主化程度的核心标准,在于其完成科研闭环的完整性与人类介入的程度:闭环越完整,系统解决问题的过程越严谨,结果的可解释性和可复现性越高;人类介入程度越低,MAS越接近能独立承担任务的自主科研系统。

基于上述两个评价维度,本文将MAS在能源材料领域的应用划分为三个层级(如图4所示):工具级MAS仅能完成科研闭环的单个或少数环节,完全依赖人类

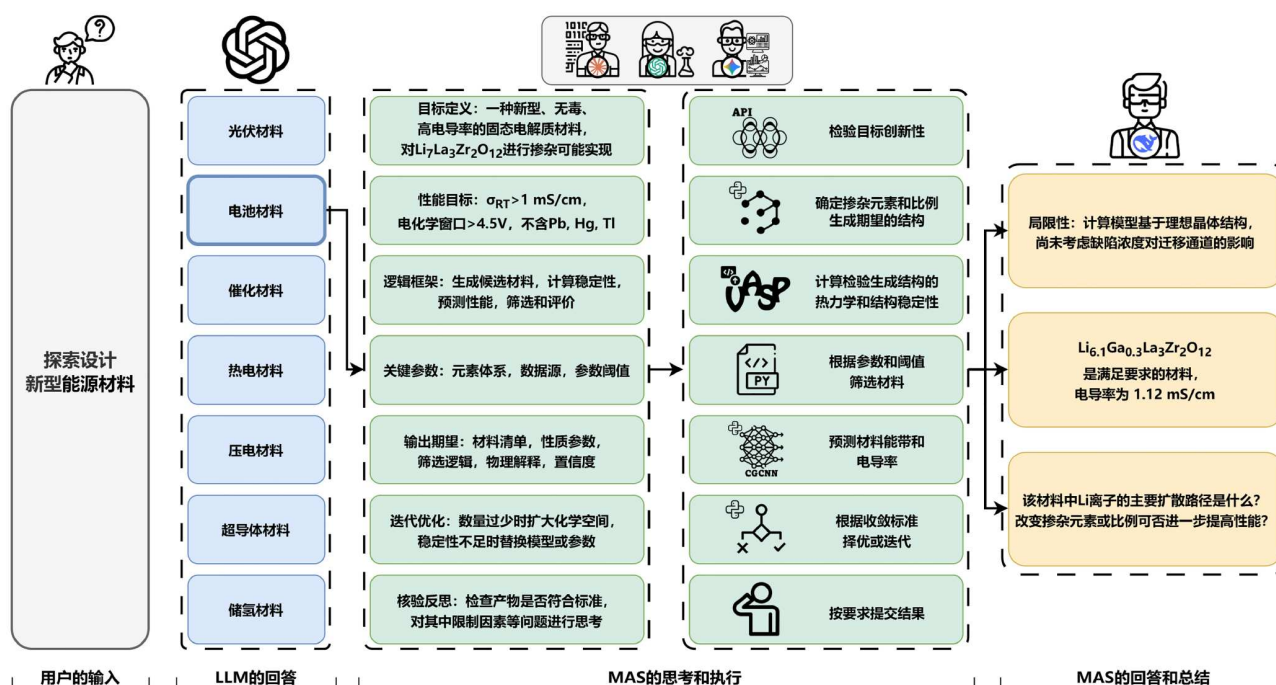


图3 大语言模型与多智能体系统在解决能源材料领域问题的对比

Figure 3 Comparison of LLM and MAS in addressing issues in the energy materials field

的指令输入与结果评估, 本质上是提升科研效率的辅助工具; 助手级MAS可串联多个科研环节, 但在关键决策节点(如标准制定、方案选择、结果可信度判断等)仍需人类反馈与指导, 形成“人在环路”的协作模式; 系统级MAS则可根据初始任务自主完成完整的科研闭环, 包括假设生成、实验执行、结果分析与迭代优化, 人类仅需在事后审查其逻辑与结论, 实现“人在环外”的运行模式。这一分类框架不仅反映了MAS技术能力的演进路径, 也揭示了人机协作模式从工具使用、协同研究到系统共创的范式转变。

2.1 工具级MAS的应用

在能源材料研究中, 科研人员常面临三大核心难题: 信息碎片化、任务复杂度高、数据更新滞后。模拟数据、实验结果与文献知识往往分散于不同平台、不同格式中, 人工整合既耗时又易出错; 而在从材料设计到性能验证的全流程中, 涉及多环节推理与计算, 单一模型难以同时兼顾理解、检索、分析、执行等多重需求。早期工具级MAS主要聚焦于信息整合, 随后逐步扩展至多模态融合和初步推理能力, 在科研流程中的覆盖范围与自主化水平都有所提升^[47,50,51]。

针对信息碎片化问题, 早期工具级MAS聚焦于知识检索与数据整合。HoneyComb^[51]通过引入“知识驱动+工具执行”双层协作机制, 将语言模型的语义推理能力与外部资源进行有机结合。系统先通过MatSciKB知识库提供标准化的材料科学语义信息, 实现对文献与数据库内容的精确检索及关联匹配; 再由Tool-Hub工具中心动态生成并调用计算、解析等API, 实现非结构化文本与结构化数据之间的转换与验证。这一设计使其在信息覆盖率与结果稳定性上显著优于单一模型。ChatSSB^[47](图4(a))则专注于固态电池领域的知识整合与结果呈现, 借助RAG架构与多智能体协同机制, 实现从文献提取到数据可视化的自动化流程。系统可精准提取离子电导率、温度、制备条件等关键实验参数, 并以问答或图表的形式输出, 助力研究者快速获取定量信息。相较于单智能体, ChatSSB的语义精度与任务可追溯性都有显著提升, 尤其在多轮交互中能保持上下文的一致性。这两个系统表明, 多智能体耦合架构在信息覆盖与逻辑一致性方面有效弥补了单智能体的局限性, 使MAS能够突破单一任务的边界, 扩展至贯穿整个任务链的协同执行, 成为信息探索和数据计算的实用工具。

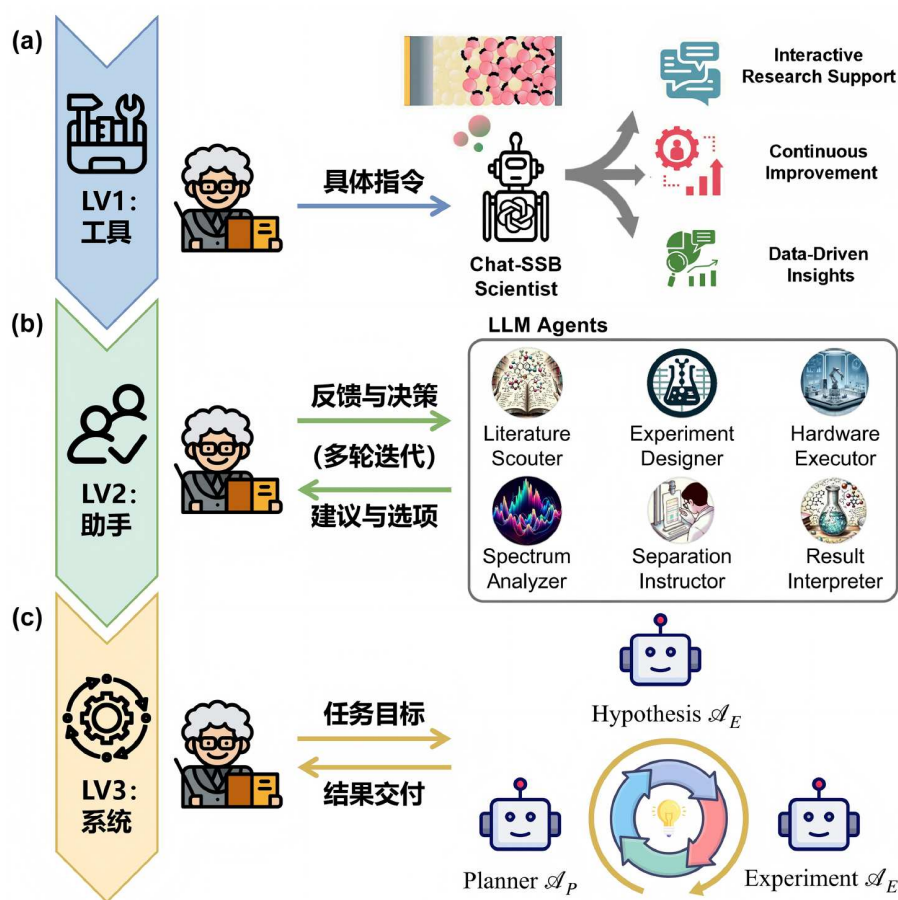


图4 不同智能等级的多智能体系统在能源材料领域应用情景。(a)“工具”等级示例: ChatSSB^[47]; (b)“助手”等级示例: LLM-RDF^[48]; (c)“系统”等级示例: PiFlow^[49]

Figure 4 Application scenarios of MAS with different intelligence levels in the energy materials field. (a) “Tool” level example: ChatSSB^[47]. (b) “Assistant” level example: LLM-RDF^[48]. (c) “System” level example: PiFlow^[49]

然而, 能源材料研究往往涉及文本、图像、视频等多种数据模态, 需要MAS具备跨模态理解与融合能力。为此, 研究者开始探索多模态MAS的构建。Bazgir等人的工作^[52]首次实现文本、图像、视频与结构化数据的统一语义处理及融合, 支持不同模态的信息交叉验证与情境推理。该MAS采用多智能体并行架构, 各智能体分工解析对应模态数据, 中央融合智能体通过共享嵌入空间与动态门控机制, 整合多源输出, 形成跨模态一致的分析报告。这一架构显著提升了信息整合效率和结果一致性, 使报告覆盖率较单模态基线提升35%, 检索准确率达到85%。

在多模态融合的基础上, 工具级MAS进一步向具备初步推理与自我校准能力的方向演进。Chem-Graph^[50]融合了语言模型、GNN和量化计算引擎, 构建了多层协同的科研框架: 语言模型负责任务规划与

逻辑控制, 高精度计算智能体执行结构预测和能量计算。该设计使MAS初步具备“自省”能力, 标志着其从静态工具向动态推理系统转型。

MatSciAgent^[50]进一步推动了这一演化进程, 该系统以模块化工作流贯穿数据检索、物性模拟、晶体生成、分子动力学计算与结果分析等环节, 构建可连续执行的科研流程。主智能体能自动解析自然语言指令并分派任务, 子智能体在独立环境中并行运行, 反馈结果并汇总, 显著降低人工干预与跨平台整合的成本。其开放式架构支持灵活接入新的数据库与计算工具, 为跨领域知识迁移与功能扩展奠定了基础。尽管目前仍处于半闭环阶段, 尚未实现实验验证与反馈迭代环节, 但该体系已展现出从“任务串联”向“推理循环”的过渡形态, 为未来构建完整的科研逻辑闭环提供了可行的路径与原型方案。

2.2 助手级MAS的应用

为了让MAS成为更可靠的研究助手,研究者需赋予其检验答案合理性与可用性的能力——大模型需能识别自身答案的不足,并通过循环迭代持续优化,直到收敛至最优解^[53-58],而具体的实现方式需结合任务需求进行差异化设计.在当前阶段,增设专门的智能体或专家团队,用于对各环节行为的合理性和科学性进行第三方评审,是最常用且高效的实现方式.

对于计算、预测等数据驱动类任务,最直接的方法是将参数本身作为循环收敛条件.以LLMatDesign^[59]为例,其评价智能体会根据人类科学家预设的能带、开路电势等性能指标,计算综合得分并作为收敛判据.若模型连续多轮优化后仍无法收敛,反思智能体会自动分析失败原因,排查结构约束、能带冲突等潜在问题,并调整分子拓扑的生成逻辑.对于侧重逻辑推理的任务,可通过将语句量化为数据的方法实现收敛,如使用知识图谱^[60]、词嵌入模型^[60,61]和基于机器学习的语义模型^[26,62,63],或依托MAS的多角色能力,使智能体之间形成辩论与修正的良性生态^[54,60,62-65].Kumbhar等人^[65]设计的MAS协作模式以群体辩论为核心,包含三类关键智能体:假设生成智能体提出初始假设,批评智能体基于人类专家共建的指标体系,对该假设进行评估与反驳,总结智能体随后综合多方意见生成优化后的新假设.每轮讨论均以“假设合理度”和“创新得分”作为量化反馈,使系统在多智能体博弈中逐步淘汰不可靠思路、保留高潜力方向,实现类似人类学术讨论的推理闭环.

然而,多数此类闭环的实现仍需人类科学家的参与,若完全依赖MAS从海量文献中自主建立评价体系,系统容易因概念模糊、领域差异等问题产生幻觉,导致评估指标无法满足任务需求,因此必须由人类提供硬性标准和参考数据集^[53,60,65];在工作逻辑层面也会出现相似的问题,MAS往往需要主动请求人类确认或修正逻辑^[63],这种情况在自动化实验的应用场景中更加普遍.

LLM-RDF^[48](图4(b))和MatPilot^[66]均通过MAS将科研设想自动转化为实验操作指令,让MAS依据人类定义的问题自主规划并执行实验.但在前者中,MAS需要依赖人类的评估反馈,决定实验是否执行和后续优化方案;后者则须在两个关键节点引入人类干预(如图5所示):一是在目标意图确认阶段,由科学家对自然

语言输入进行语义审查与约束,避免模型误读实验目的或误用实验设备;二是在结果解释与再设计阶段,当自动化实验结果与预期不符时,需由研究者判断差异是源于装置误差还是新现象的出现,并据此决定是否修改实验逻辑.Safe-SDL^[67]进一步将人类角色制度化融入科研自动化的安全治理体系中.作者强调,尽管系统具备风险识别与自审计功能,但实验安全、伦理边界及风险阈值等核心要素的定义仍需由人类科学家明确.MAS仅能在人类预设的约束与标准内运作,当系统检测到反应条件越界、设备异常等潜在危险操作,会自动暂停执行并请求人类确认,依人类决策调整方案.

MAS的演进持续拓展了科研智能化的边界,但人类“在环”也逐渐成为效率与智能提升的瓶颈:系统可在秒级完成规划、执行与分析,而人类的审查、确认与解释往往成为流程的限速环节;同时,人类介入可能会引入主观经验和隐性偏见,限制模型的探索潜能.因此,MAS在科研领域的核心发展方向在于:在坚守科学审慎原则与安全限制的前提下,将人类知识转化为机器可理解的元规则与可验证边界,使系统能在约束中自主完成假设生成、实验执行与结果分析的全过程.

2.3 系统级MAS的应用

助手级MAS需依赖人类科学家针对不同任务提供参数标准并全程给予指导反馈,人类参与的环节仍然是整个流程的效率瓶颈.理想情况下,系统级MAS应在接受人类研究者设定的总体目标后,无需依赖人工反馈与修正,通过自主推理、任务规划与多轮迭代,收敛至物理一致、逻辑自洽的结论^[68].这凸显了MAS从助手级迈向系统级的本质要求:基于知识整合的标准制定能力、基于检验机制的科学推理能力、基于迭代优化的方案实现能力,以及基于日志记录的证据追溯能力.这些能力的自主化是“人在环外”工作流的核心基础,可使人类科学家脱离与MAS的实时协同,聚焦于问题定义和结果审核.

在系统级MAS中,研究者给定总体目标后,系统无需针对各类情景逐一手工设定参数,能在庞大的跨文献知识空间中自主整合并生成可操作的约束标准.仅依赖知识检索与摘要的手段难以规避幻觉和概念漂移的问题,因此需在知识整合过程中显式嵌入物理化学原则.PriM^[69]构建了原则驱动的材料发现多智能体系统,核心为原则引导的假设生成模块,旨在缓解概念歧义和跨领域差异引发的幻觉风险.假设智能体采用链

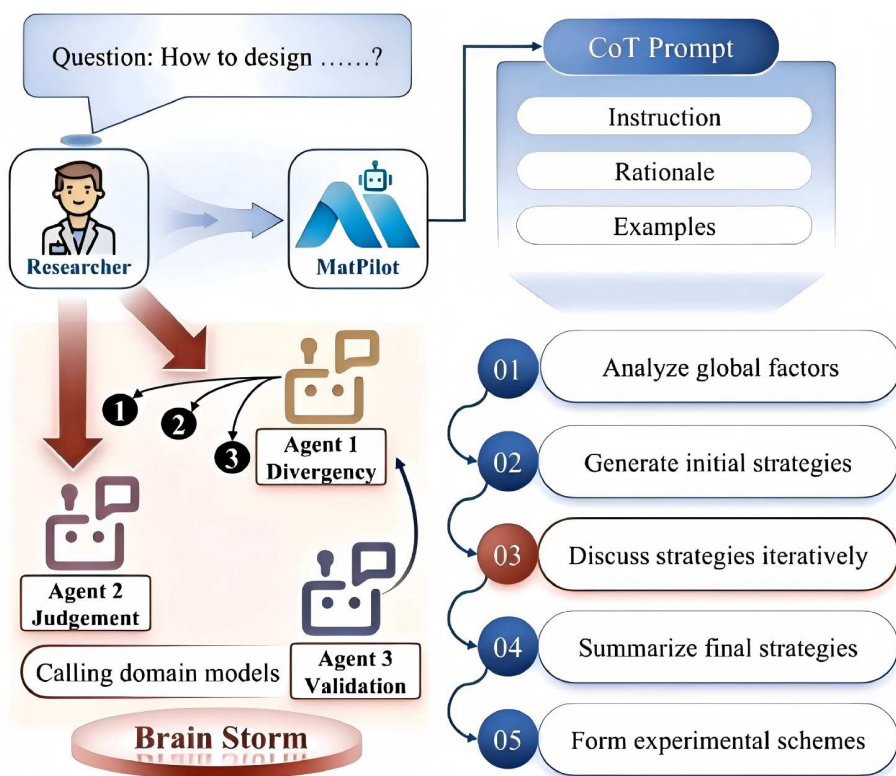


图5 MatPilot的结构与工作流程^[66]: 用于创新生成的多智能体与人机辩论协作框架

Figure 5 Structure and workflow of MatPilot^[66]: multi-agent and human-machine debate collaboration framework for innovation generation

式原则提示, 要求生成的假设显式锚定于对称性、热力学可行性与合成兼容性等经验证的物理化学原则, 而非自由发散式生成。这些原则由文献智能体在文献数据库中检索提炼, 通过限定检索范围、构建带约束的知识空间与原则集, 在系统内部自动收缩可行的概念与参数空间。相比之下, PiFlow^[49](图4(c))进一步将“标准制定”提升到原则空间层面: 系统不再局限于只依赖一组静态的先验原则, 而是将各类物理化学原则视为可优化的候选策略, 在多轮模拟或实验中持续评估各原则的解释力与信息增益, 并对原则进行加权、筛选与重组。通过这种对原则的动态选择与更新机制, PiFlow使MAS能够在既有知识边界内自适应地收缩或扩展任务参数空间, 将原本需人类逐条设定的实验标准, 内化为基于原则的自动化筛选与修正规则, 在保障可测试性与领域相关性的同时, 大幅降低对人工细粒度干预的依赖。

逻辑推理能力是MAS严谨可靠完成任务的核心基础。在助手级MAS中, 通常以人类专家的指导与反馈作为信息可靠性的锚点; 而对于系统级MAS, 如何在缺乏

人工兜底的前提下自主消除幻觉, 绝不是在现有流程上“形式化多做一步”就能解决的问题。在逻辑推理环节, 系统需以结构化、可审计的推理体系为内部标准: 推论过程需严格契合原理约束, 各项中间结论均具备明确的证据来源, 并通过可复核的链路全程记录。当系统识别到逻辑断点、推理矛盾或证据不充分时, 会启动自检与回溯流程, 通过交叉推理、替代求解或补充推演重新校准推理路径, 确保最终输出在一致性、解释性与可信度上满足可验证要求。以反应条件设计系统ChemMAS^[70]为例(如图6所示), 对于每一组候选条件, 系统需经过机理推理、约束检查、证据对齐等多重审核; 仅当满足所有硬约束、与证据的对齐度超过阈值且推理链条内部逻辑自洽时, 该条件才会被判定为有效结果输出。面向固态电池多尺度分析的BatteryAgent^[71]则将可靠性评估设计为跨领域专家级内部审查流程(如图7所示): 由团队调度智能体统筹调用不同领域的材料建模、全电池模拟与可视化智能体, 在统一的数据格式与交互协议下对结果进行交叉核验, 当多尺度结论出现不一致或不充分的问题时, 系统会自

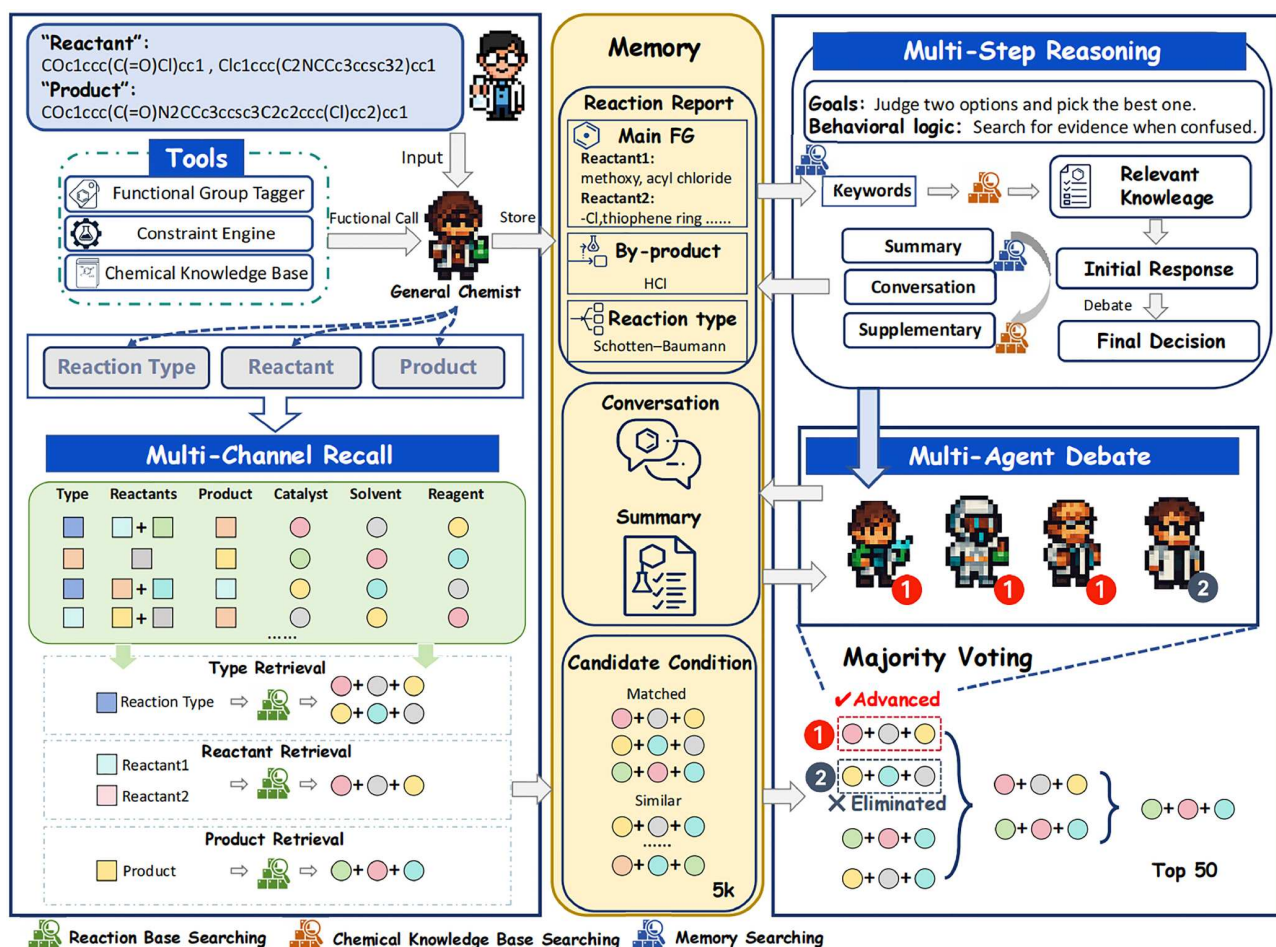


图6 ChemMAS的结构与工作流程^[70]: 通用化学家处理SMILES(simplified molecular input line entry system)并检索反应条件, 经多智能体推理辩论后选取前50个条件作为输出

Figure 6 Structure and workflow of ChemMAS^[70]: the general chemical agent processes SMILES (simplified molecular-input line-entry system) and retrieves reaction conditions, and after multi-agent reasoning and debating, the top 50 conditions are selected as output

动触发补充分析或参数修正。通过这种类似同行评议的多智能体验证回路, BatteryAgent在无人干预的前提下反复核验自身推理链条和数值结果, 将原本依赖人类专家完成的逻辑校验内化为MAS的自我约束机制。系统级MAS逐步以多维度、多指标的核验机制取代人工过程性反馈指导, 将可靠性评估内化于系统设计, 从而在无人工介入的情况下确保结论的高可信度。

在迭代优化能力方面, 助手级MAS已在计算筛选、预测设计等单一领域形成成熟框架, 系统级MAS在减少人类专家决策依赖方面的突破则主要体现在自动化实验室相关研究中。与前文提及的LLM-RDF和SafeSDL不同, ChemAgents^[72]通过分层的协议与代码审查机制, 自动校验实验流程。其中, 实验方案设计模块由“撰写智能体”和“审阅智能体”两级组成: 前者优先从

经验证的实验流程库中检索匹配模板, 查询获取各工作站的功能, 进而生成与设备能力适配的实验流程; 后者依据预设的专家规则和工作站运行约束, 对生成的流程逐环节校验优化, 剔除与仪器条件不兼容或参数设置异常的步骤, 最终保障实验方案逻辑一致、工程可执行。机器人操作模块则采用“撰写智能体—审阅智能体—校对智能体”的三级结构, 借助接口查询工具, 将调用范围限制于预定义的高层控制接口, 同时依据专家规则校验生成的控制代码是否符合接口标准和安全规范, 进一步规避因代码错误或指令越界引发的设备风险。通过这种从实验规划到执行代码的多层自动化审查机制, ChemAgents在明确实验室能力与安全边界的前提下, 以系统内生的规则与约束最大限度替代人类的逐轮评审, 在维持迭代优化效率的同时, 显著提

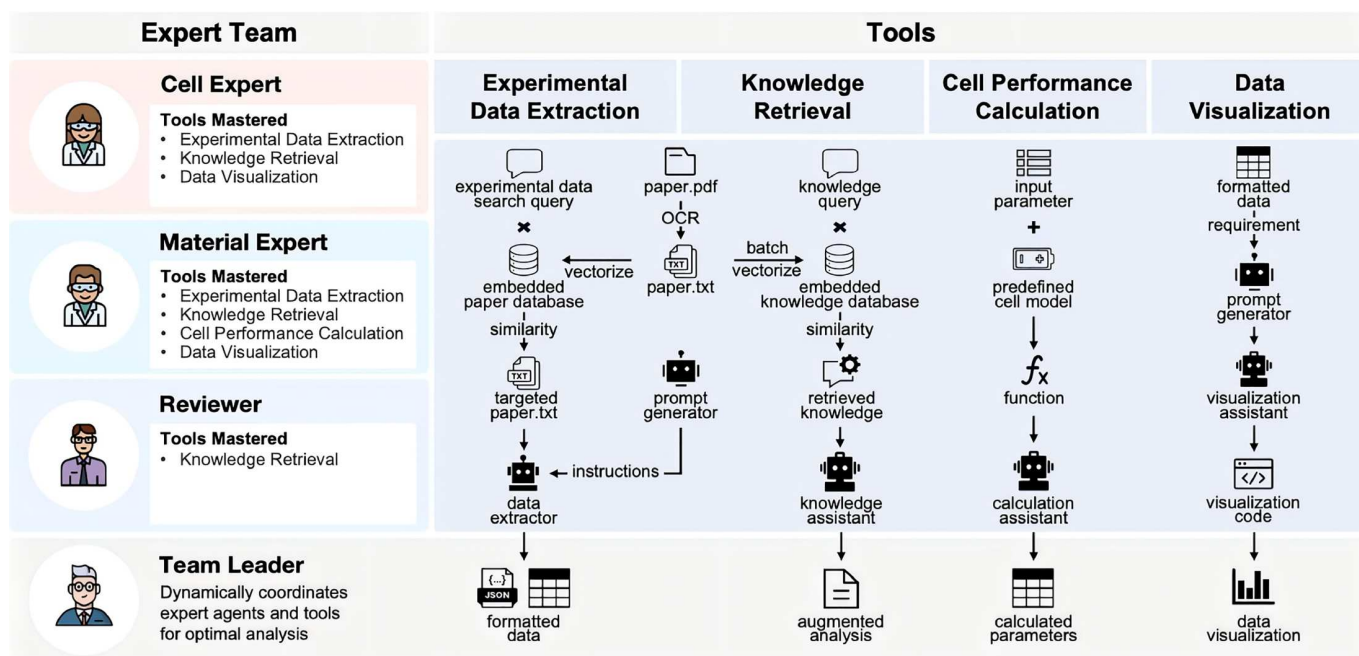


图 7 BatteryAgent的结构与工作流程^[71]: 整合专家协作与工具调用, 用于多维度、跨学科、端到端的自主科学研究

Figure 7 Structure and workflow of BatteryAgent^[71]: it integrates expert collaboration and tool invocation, and is applied to multi-dimensional, interdisciplinary, and end-to-end autonomous scientific research

升了实验方案的可靠性与可控性。

MAS的自我检验并不意味着系统内生数据和中间结果可以被无条件信任, 因此, 在系统设计中需引入可追溯、可复核的全流程数据链与任务日志, 供研究者事后验证系统决策的科学性与可靠性。以量子化学性质建模系统xChemAgents^[73]为例, 该系统将特征选择智能体和验证智能体之间的每一轮交互记录为结构化日志, 涵盖候选特征及其权重、生成依据、物理约束检验结果以及对应的预测误差。研究者可沿该记录链从输入分子追溯至最终建模, 进而判断某一结论是否建立在合理且可校验的物理假设基础上。

相较于助手级MAS, 人类科学家在系统级MAS中仅作为最终审稿人, 而非研究过程的直接参与者或指导者。需要强调的是, “人在环外”并非指将科研控制权完全让渡给智能体系统, 而是将人类监督从“过程层面”转移至“原则层面”: 研究者负责设定总体目标、约束边界条件和评估准则, 审查系统在该框架下的执行逻辑是否自洽, 以及是否存在系统性幻觉与偏差。从助手级迈向系统级的关键, 不仅在于功能的拓展, 更在于通过上述四种能力的协同设计, 实现每个结论的可解释、可审计、可追责属性, 进而在机器生成成果与人

类实际应用之间, 搭建起一座可持续加固的科学信任桥梁。

3 挑战与展望

3.1 当前挑战

尽管MAS在能源材料研究中展现出广阔的应用前景, 但其发展仍面临多重挑战, 如图8所示。

在数据层面, 模拟与实验间的鸿沟(sim-to-real gap)仍尤为突出, 高质量实验数据的稀缺制约了MAS的泛化迁移能力。能源材料领域的多尺度建模多基于理想化假设, 而真实体系的复杂环境、缺陷与动态因素难以完全纳入计算框架, 导致模拟结果难以精准映射至可重复的实验现象^[74-76]。受限于能源材料研究的实验通量与可控性, 该领域高质量、可复现的数据仍极为稀缺, 尤其缺乏失败案例或无效样本, 这进一步削弱了MAS在开放化学空间中的泛化能力^[75,77,78]。在材料科研社区中, 研究者倾向于仅报告性能最优的样品, 而忽视负面实验结果与数据的统计分布特征, 导致数据集存在明显的选择偏倚与性能高估问题^[79,80]。

在技术层面, MAS正在面对更高阶的可靠性和可

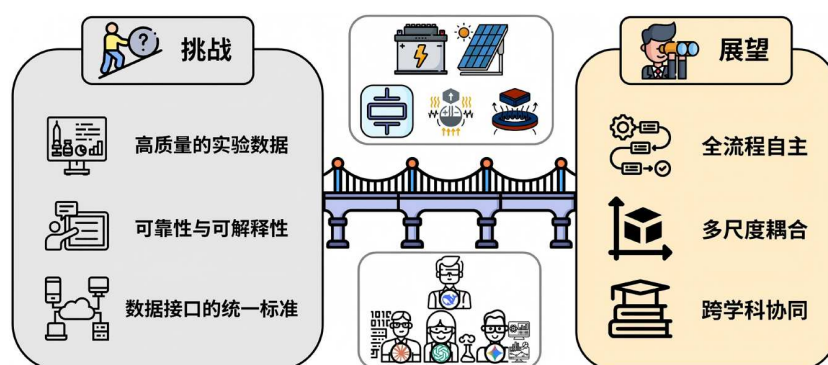


图8 多智能体系统在能源材料领域应用的挑战与展望

Figure 8 Challenges and prospects of the application of MAS in the energy materials field

解释性难题。MAS的反思修正行为,实际上是对自身输出再进行一次语言建模,缺乏独立的元认知系统来校验自身信念,本质上是用一种语言分布解释并修正另一种语言分布。智能体的自我反思和相互辩论,仅能提升训练语料中正确答案的出现概率,而非对逻辑真值的验证^[81]。因而幻觉问题在当前并不能被彻底解决,反而可能在交互中就某一错误观点达成共识,形成更隐晦、更危险的系统性幻觉^[82,83]。

在规范层面, MAS的扩展性受限于材料科学领域数据和接口的统一标准缺失。材料数据来源多样,格式不统一且缺乏通用数据框架,导致不同数据库、计算仿真软件和实验平台之间的信息难以互通共享^[84]。此外,数据库之间缺乏标准化的应用程序编程接口和互操作能力,进一步提升了跨平台数据交换的难度^[85]。更广泛的材料信息学研究也证实,元数据的缺失和数据格式不规范是限制自动化系统可靠性和扩展性的瓶颈^[86]。在MAS应用中,智能体需与材料数据引擎、计算仿真软件和实验平台交互,这些数据和工具之间的不兼容会引发 workflow 中断、数据错误传播,甚至损害结果的可靠性。

3.2 展望

面对上述挑战, MAS在能源材料领域的未来发展需从数据建设、技术突破和规范制定三方面协同推进。从长远来看, MAS的演进将呈现三个趋势。

首先, MAS将迈向全流程自主化闭环。未来MAS需要突破单环节优化的限制, 迈向覆盖科研全流程的自主化闭环体系。系统需融合假设提出、实验执行与结果分析等环节, 依托统一智能架构实现各环节的循环优化。在理想场景下, 系统提出的假设可随着实验结果

实时更新, 实验可在反馈驱动下自适应调节参数, 数据分析与知识提炼可通过上下文推理即时整合。这种模式可能重塑科研的时间尺度与组织形式, 使知识增长从离散的人工迭代转为持续的自动演化。实现这一愿景需要在算法层面突破长链推理与多目标优化的瓶颈, 在工程层面搭建模块化、可扩展的智能体协作框架。长远来看, 全流程的MAS若能成功落地, 不仅有望大幅提升科研效率, 更可能推动科学范式的新一轮变革: 研究主体可能从研究人员部分扩展到研究系统, 创新路径可能从个人启发式研究部分拓展到系统智能辅助。

其次, MAS将实现多尺度耦合与统一建模。在未来, MAS有望成为跨尺度衔接的桥梁, 推动从能源材料到能源系统的贯通。能源材料领域的一个难题在于跨尺度优化: 原子结构的变化如何影响器件性能, 进而决定系统级能量利用效率。微观尺度的机理阐释、中观尺度的组件设计、宏观尺度的规模集成, 这些任务或可通过共享变量约束、校验一致性等方式实现信息互通, 覆盖“结构—性能—功能”评估与优化的各个环节。这种多尺度耦合建模若能实现, 将使MAS具备自主提出跨尺度调控策略的能力, 从系统目标反向优化材料与器件。随着高保真模拟、实验自动化与数据模型的深度融合, MAS或能成为能源科学中桥接不同尺度的重要工具, 实现从材料原子到器件网络的设计、评估与优化。

最后, MAS将迈向跨学科认知型智能。长远来看, MAS有望突破单一学科限制, 发展成为跨学科科学系统。在未来, 能源材料的研究或将横跨物质科学、机械力学、计算机科学与人工智能等领域。通过嵌入多学科模型、知识与数据, MAS或可在不同理论体系间实现推理和迁移。例如, 在结构预测中尝试建立量子化学

与固体力学的映射,在器件优化中同步适配高温下的热力学稳定性与工程约束。随着人工智能技术的发展,MAS有望增强抽象思维与理论生成能力,成为科研的第二认知主体。这一演进路径可分为三个阶段,包括近期(~5年)实现跨学科知识图谱的自动构建,中期(5~10年)突破跨领域推理的逻辑一致性验证,远期(10年以上)形成具备理论创新能力的认知型智能。如果这些目标得以实现,跨学科的MAS可能促进科学研究模式的改变,人类科学家与智能体系统的关系或将从使用与被使用转变为协同共创,正式迈入“智能科学”新范式。

4 总结

本文系统梳理了多智能体系统(MAS)在能源材料研究中的应用进展,创新贡献如下:(1)首次提出了基于科研闭环完整性与人类介入程度的MAS三级分类框架;(2)系统梳理了从工具级、助手级到系统级MAS的演进路径;(3)揭示了MAS在能源材料领域的应用规律与技术瓶颈。这一分类框架为理解MAS在能源材料科研中的角色定位与发展趋势提供了新视角。

研究表明,MAS凭借分布式架构与角色专业化机制,在信息整合、逻辑推理、自我验证等关键能力维度上显著优于单智能体,为能源材料领域的电池、光伏等细分方向提供了从知识检索到实验执行的全流程技术支撑。通过对现有代表性工作的分析,本文提炼出MAS技术演进的三个关键特征:从单一任务向任务链协同的扩展、从人类指导向自主迭代的转变、从逻辑推理向物理实践的延伸。然而,当前MAS的发展仍面临高质量实验数据稀缺、系统可靠性与可解释性不足、数据接口的统一标准缺失等瓶颈。

从长远来看,MAS的终极形态将是一个能够贯通多尺度、融合多学科、支持人机共创的智能科研平台。这不仅将重塑能源材料研发的模式与效率,更可能推动科学研究范式从“人类主导的个体创新”向“人机协同的系统智能拓展”演化,开启能源材料领域智能科学研究的新时代。随着人工智能技术的持续演进与能源材料研发需求的日益迫切,MAS有望成为推动该领域科学发现与技术创新的关键力量,为全球碳中和目标与可持续发展愿景的实现提供坚实的技术支撑。

参考文献

- 1 Dincer I. Renewable energy and sustainable development: a crucial review. *Renew Sustain Energy Rev*, 2000, 4: 157–175
- 2 Chen C, Zuo Y, Ye W, et al. A critical review of machine learning of energy materials. *Adv Energy Mater*, 2020, 10: 1903242
- 3 Li J, Zhou M, Wu H, et al. Machine learning-assisted property prediction of solid-state electrolyte. *Adv Energy Mater*, 2024, 14: 2304480
- 4 Feng Y, Zhu Z, Yang L, et al. Rational design of high-entropy garnet electrolytes via computational screening for stable lithium interfaces in all-solid-state batteries. *Adv Mater*, 2025, 37: e09838
- 5 Hu X, Zuo D, Cheng S, et al. Ultrafast materials synthesis and manufacturing techniques for emerging energy and environmental applications. *Chem Soc Rev*, 2023, 52: 1103–1128
- 6 Yang L, Zhu Z, Feng Y, et al. Unveiling phase evolution of complex oxides toward precise solid-state synthesis. *Sci Adv*, 2025, 11: eadx3927
- 7 Nematov D, Hojamberdiev M. Machine learning-driven materials discovery: unlocking next-generation functional materials – A review. *Comput Condensed Matter*, 2025, 45: e01139
- 8 Guo N, Chen S, Tao J, et al. Semi-supervised learning for explainable few-shot battery lifetime prediction. *Joule*, 2024, 8: 1820–1836
- 9 Zhang Y, He X, Chen Z, et al. Unsupervised discovery of solid-state lithium ion conductors. *Nat Commun*, 2019, 10: 5260
- 10 Madika B, Saha A, Kang C, et al. Artificial intelligence for materials discovery, development, and optimization. *ACS Nano*, 2025, 19: 27116–27158
- 11 Maia M A, Rocha I B C M, Kovačević D, et al. Physically recurrent neural network for rate and path-dependent heterogeneous materials in a finite strain framework. *Mech Mater*, 2024, 198: 105145
- 12 Park C W, Wolverton C. Developing an improved crystal graph convolutional neural network framework for accelerated materials discovery. *Phys Rev Mater*, 2020, 4: 063801
- 13 Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need. 2023, arXiv: 1706.03762
- 14 Zhao S, Chen S, Zhou J, et al. Potential to transform words to watts with large language models in battery research. *Cell Rep Phys Sci*, 2024, 5: 101844
- 15 Cheng M, Luo Y, Ouyang J, et al. A survey on knowledge-oriented retrieval-augmented generation. 2025, arXiv: 2503.10677
- 16 Peng C, Xia F, Naseriparsa M, et al. Knowledge graphs: opportunities and challenges. *Artif Intell Rev*, 2023, 56: 13071–13102
- 17 Zhang Q, Chen S, Bei Y, et al. A survey of graph retrieval-augmented generation for customized large language models. 2025, arXiv: 2501.13958

- 18 Zhong Y, Leng Y, Chen S, et al. Accelerating battery research with retrieval-augmented large language models: present and future (in Chinese). *Energy Storage Sci Technol*, 2024, 13: 3214–3225 [钟逸, 冷彦, 陈思慧, 等. 基于大语言模型RAG架构的电池加速研究: 现状与展望. *储能科学与技术*, 2024, 13: 3214–3225]
- 19 Liu R, Zou Z, Chen S, et al. Harnessing AI for understanding scientific literature: innovations and applications of chat-agent system in battery recycling research. *Mater Today Energy*, 2025, 49: 101818
- 20 Kang Y, Kim J. ChatMOF: an artificial intelligence system for predicting and generating metal-organic frameworks using large language models. *Nat Commun*, 2024, 15: 4705
- 21 Chen R, Liu Y, Chen Z, et al. Large language model guided automated reaction pathway exploration. *Commun Chem*, 2025, 8: 255
- 22 Schick T, Dwivedi-Yu J, Dessi R, et al. Toolformer: language models can teach themselves to use tools. *Adv Neural Inf Process Syst*, 2023, 36: 68539–68551
- 23 Wang L, Ma C, Feng X, et al. A survey on large language model based autonomous agents. *Front Comput Sci*, 2024, 18: 186345
- 24 Lv S, Peng L, Wu W, et al. Bridging language models and computational materials science: a prompt-driven framework for material property prediction. *Mater Genome Eng Adv*, 2025, 3: e70013
- 25 Zhang Y, Han Y, Chen S, et al. Large language models to accelerate organic chemistry synthesis. *Nat Mach Intell*, 2025, 7: 1010–1022
- 26 Boiko D A, MacKnight R, Kline B, et al. Autonomous chemical research with large language models. *Nature*, 2023, 624: 570–578
- 27 Yao S, Zhao J, Yu D, et al. ReAct: synergizing reasoning and acting in language models. 2022, arXiv: [2210.03629](#)
- 28 Lin T, Chen S, Harris S J, et al. Investigating explainable transfer learning for battery lifetime prediction under state transitions. *eScience*, 2024, 4: 100280
- 29 Van M H, Verma P, Zhao C, et al. A survey of AI for materials science: foundation models, LLM agents, datasets, and tools. 2025, arXiv: [2506.20743](#)
- 30 Wei J, Yang Y, Zhang X, et al. From AI for science to agentic science: a survey on autonomous scientific discovery. 2025, arXiv: [2508.14111](#)
- 31 Guo T, Chen X, Wang Y, et al. Large language model based multi-agents: a survey of progress and challenges. 2024, arXiv: [2402.01680](#)
- 32 Li X, Wang S, Zeng S, et al. A survey on LLM-based multi-agent systems: workflow, infrastructure, and challenges. *Vicinagearth*, 2024, 1: 9
- 33 Zhang J, Chen X, Ye X, et al. Large language model in materials science: roles, challenges, and strategic outlook. *Adv Intell Discov*, 2025, 202500085
- 34 Jin W, Du H, Zhao B, et al. A comprehensive survey on multi-agent cooperative decision-making: scenarios, approaches, challenges and perspectives. 2025, arXiv: [2503.13415](#)
- 35 Du Y, Li S, Torralba A, et al. Improving factuality and reasoning in language models through multiagent debate. 2024, arXiv: [2305.14325](#)
- 36 Yang Y, Ma Y, Feng H, et al. Minimizing hallucinations and communication costs: adversarial debate and voting mechanisms in LLM-based multi-agents. *Appl Sci*, 2025, 15: 3676
- 37 Tran K T, Dao D, Nguyen M D, et al. Multi-agent collaboration mechanisms: a survey of LLMs. 2025, arXiv: [2501.06322](#)
- 38 Moore D J. A taxonomy of hierarchical multi-agent systems: design patterns, coordination mechanisms, and industrial applications. 2025, arXiv: [2508.12683](#)
- 39 Lyu X, Xiao Y, Daley B, et al. Contrasting centralized and decentralized critics in multi-agent reinforcement learning. 2021, arXiv: [2102.04402](#)
- 40 Yu H Q, McQuade F. RAG-KG-IL: a multi-agent hybrid framework for reducing hallucinations and enhancing LLM reasoning through RAG and incremental knowledge graph learning integration. 2025, arXiv: [2503.13514](#)
- 41 Darwish A M, Rashed E A, Khoriba G. Mitigating LLM hallucinations using a multi-agent framework. *Information*, 2025, 16: 517
- 42 Zhou H, Wan X, Sun R, et al. Multi-agent design: optimizing agents with better prompts and topologies. 2025, arXiv: [2502.02533](#)
- 43 Gao M, Li Y, Liu B, et al. Single-agent or multi-agent systems? Why not both? 2025, arXiv: [2505.18286](#)
- 44 Wang J, Guo M, Li Z. Multi-agent coordination under temporal logic tasks and team-wise intermittent communication. 2023, arXiv: [2308.14042](#)
- 45 Hu X, Chen S, Chen L, et al. Automating structure–activity analysis for electrochemical nitrogen reduction catalyst design through multi-agent collaborations. *Natl Sci Rev*, 2025, 12: nwaf372
- 46 Sun L, Yang Y, Duan Q, et al. Multi-agent coordination across diverse applications: a survey. 2025, arXiv: [2502.14743](#)
- 47 Leng Y, Zhong Y, Gu Z, et al. Intelligent, personalized scientific assistant via large language models for solid-state battery research. *ACS Mater Lett*, 2025, 7: 1807–1816
- 48 Ruan Y, Lu C, Xu N, et al. An automatic end-to-end chemical synthesis development platform powered by large language models. *Nat Commun*, 2024, 15: 10160
- 49 Pu Y, Lin T, Chen H. PiFlow: principle-aware scientific discovery with multi-agent collaboration. 2025, arXiv: [2505.15047](#)
- 50 Pham T D, Tanikanti A, Keçeli M. ChemGraph: an agentic framework for computational chemistry workflows. 2025, arXiv: [2506.06363](#)
- 51 Zhang H, Song Y, Hou Z, et al. HoneyComb: a flexible LLM-based agent system for materials science. 2024, arXiv: [2409.00135](#)
- 52 Bazgir A, Madugula R C P, Zhang Y. Multicrossmodal automated agent for integrating diverse materials science data. 2025, arXiv: [2505.15132](#)
- 53 Ghafarollahi A, Buehler M J. SciAgents: automating scientific discovery through bioinspired multi-agent intelligent graph reasoning. *Adv Mater*, 2025, 37: 2413523

- 54 Kim H, Jang Y, Ahn S. MT-Mol: multi agent system with tool-based reasoning for molecular optimization. 2025, arXiv: [2505.20820](#)
- 55 Krishnan N M A, Mandal I, Soni J, et al. Autonomous microscopy experiments through large language model agents. 2025, arXiv: [2501.10385](#)
- 56 Ni B, Buehler M J. MechAgents: large language model multi-agent collaborations can solve mechanics problems, generate new data, and integrate knowledge. *Extreme Mech Lett*, 2024, 67: 102131
- 57 Schmidgall S, Su Y, Wang Z, et al. Agent laboratory: using LLM agents as research assistants. 2025, arXiv: [2501.04227](#)
- 58 Wu T, Li J, Bao J, et al. ProcessCarbonAgent: a large language models-empowered autonomous agent for decision-making in manufacturing carbon emission management. *J Manufacturing Syst*, 2024, 76: 429–442
- 59 Jia S, Zhang C, Fung V. LLMatDesign: autonomous materials discovery with large language models. 2024, arXiv: [2406.13163](#)
- 60 Yang Z, Liu W, Gao B, et al. MOOSE-Chem: large language models for rediscovering unseen chemistry scientific hypotheses. 2025, arXiv: [2410.07076](#)
- 61 Zou Y, Cheng A H, Aldossary A, et al. El Agente: an autonomous agent for quantum chemistry. *Matter*, 2025, 8: 102263
- 62 Zhao G, Li S, Lu Z, et al. MolReasoner: toward effective and interpretable reasoning for molecular LLMs. 2025, arXiv: [2508.02066](#)
- 63 Zhou L, Ling H, Yan K, et al. Toward greater autonomy in materials discovery agents: unifying planning, physics, and scientists. 2025, arXiv: [2506.05616](#)
- 64 Chiang Y, Hsieh E, Chou C H, et al. LLaMP: large language model made powerful for high-fidelity materials knowledge retrieval and distillation. 2024, arXiv: [2401.17244](#)
- 65 Kumbhar S, Mishra V, Coutinho K, et al. Hypothesis generation for materials discovery and design using goal-driven and constraint-guided LLM agents. 2025, arXiv: [2501.13299](#)
- 66 Ni Z, Li Y, Hu K, et al. MatPilot: an LLM-enabled AI materials scientist under the framework of human-machine collaboration. 2024, arXiv: [2411.08063](#)
- 67 Leong S X, Griesbach C E, Zhang R, et al. Steering towards safe self-driving laboratories. *Nat Rev Chem*, 2025, 9: 707–722
- 68 Ghafarollahi A, Buehler M J. Automating alloy design and discovery with physics-aware multimodal multiagent AI. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2025, 122: e2414074122
- 69 Lai Z, Pu Y. PriM: principle-inspired material discovery through multi-agent collaboration. 2025, arXiv: [2504.08810](#)
- 70 Yang C, Lu J, Wan H, et al. From what to why: a multi-agent system for evidence-based chemical reaction condition reasoning. 2025, arXiv: [2509.23768](#)
- 71 Zhong Y, Leng Y, Gu Z, et al. Breaking interdisciplinary barriers in solid-state battery research: BatteryAgent for multifaceted analysis. *J Mater Chem A*, 2025, 13: 37031–37043
- 72 Song T, Luo M, Zhang X, et al. A multiagent-driven robotic AI chemist enabling autonomous chemical research on demand. *J Am Chem Soc*, 2025, 147: 12534–12545
- 73 Polat C, Tuncel M, Kurban M, et al. xChemAgents: agentic AI for explainable quantum chemistry. 2025, arXiv: [2505.20574](#)
- 74 Binder J, Winkeljann J, Steinegger K, et al. Closing the gap between experiment and simulation—A holistic study on the complexation of small interfering RNAs with polyethylenimine. *Mol Pharm*, 2024, 21: 2163–2175
- 75 Stach E, DeCost B, Kusne A G, et al. Autonomous experimentation systems for materials development: a community perspective. *Matter*, 2021, 4: 2702–2726
- 76 Lu T, Deng W, Liu G, et al. Battery lifetime prediction considering domain-variate error. *Integration*, 2025, 104: 102438
- 77 Chung V, Walsh A, J. Payne D. Solid-state synthesizability predictions using positive-unlabeled learning from human-curated literature data. *Digital Discov*, 2025, 4: 2439–2453
- 78 Zhai X, Liu G, Lu T, et al. Leveraging multi-view imputation strategy for robust battery lifetime prediction under missing-data scenarios. *Energy Storage Mater*, 2025, 79: 104352
- 79 Khenkin M V, Katz E A, Abate A, et al. Consensus statement for stability assessment and reporting for perovskite photovoltaics based on ISOS procedures. *Nat Energy*, 2020, 5: 35–49
- 80 Zhai X, Liu G, Lu T, et al. Transforming waste to value: enhancing battery lifetime prediction using incomplete data samples. *J Energy Chem*, 2025, 106: 642–649
- 81 Renze M, Guven E. Self-reflection in LLM agents: effects on problem-solving performance. 2024, arXiv: [2405.06682](#)
- 82 Shi J, Zhao J, Wu X, et al. Mitigating reasoning hallucination through Multi-agent Collaborative Filtering. *Expert Syst Appl*, 2025, 263: 125723
- 83 Tian F, Luo A, Du J, et al. An outlook on the opportunities and challenges of multi-agent AI systems. 2025, arXiv: [2505.18397](#)
- 84 Ghiringhelli L M, Baldauf C, Bereau T, et al. Shared metadata for data-centric materials science. *Sci Data*, 2023, 10: 626
- 85 Horejs C. Integrating materials databases. *Nat Rev Mater*, 2021, 6: 967
- 86 Zivic F, Malisic A K, Grujovic N, et al. Materials informatics: a review of AI and machine learning tools, platforms, data repositories, and applications to architected porous materials. *Mater Today Commun*, 2025, 48: 113525

Summary for “多智能体在能源材料研究中的应用”

Application of multi-agent in energy materials research

Ji Wang^{1†}, Haozhe Zhu^{2†}, Peiyi Li¹, Chang Liu^{3*}, Yang Liu^{4*} & Jiayu Wan^{1,5*}¹ Future Battery Research Center, Global Institute of Future Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China² School of Environmental Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China³ Inner Mongolia Three Gorges Mengneng Energy Co., Ltd., Ordos 014300, China⁴ Data Science Research Center, Duke Kunshan University, Kunshan 215316, China⁵ Key Laboratory of Intelligent Creation for Extreme Energy Materials, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

† Equally contributed to this work

* Corresponding authors, E-mail: Liu_chang5@ctg.com.cn; yang.liu2@dukekunshan.edu.cn; wanjy@sjtu.edu.cn

As energy materials research—a critical field covering batteries, photovoltaics, thermoelectrics, piezoelectrics, and superconductors—confronts an efficiency bottleneck from escalating data and complexity, the traditional research paradigm reliant on manual experience and theoretical deduction is proving insufficient. This necessitates a strategic evolution toward intelligence-driven methodologies. While single agents empowered by large language models (LLMs) offer preliminary support, they exhibit critical performance limitations. A single agent struggles to manage multi-task workflows, integrate disparate multi-source data, and maintain logical coherence through complex, long-chain reasoning, ultimately failing to meet the demands of rigorous scientific discovery. To overcome these structural limitations, multi-agent systems (MAS) have emerged as a pivotal solution. MAS leverages a distributed architecture that enables both vertical role specialization—assigning distinct agents to tasks such as planning, execution, and review—and horizontal parallel collaboration for tasks like debating and consensus-building. This structure directly addresses single-model bottlenecks by facilitating a “hypothesis-practice-analysis” research closed-loop. This approach offers superior flexibility, fault tolerance, and scalability. Crucially, it significantly enhances the credibility and reproducibility of outcomes by generating auditable, traceable decision-making pathways, a non-negotiable requirement for high-stakes scientific research. This review systematically analyzes the application landscape and introduces a novel three-level classification framework for MAS in energy materials, based on two key criteria: the integrity of the scientific research closed-loop and the degree of human intervention. Level 1 (tool-level) systems function as sophisticated auxiliary tools, handling discrete sub-tasks like data retrieval and analysis, and remain fully dependent on human instructions and evaluation. Level 2 (assistant-level) systems represent a collaborative partner, connecting multiple research stages autonomously but requiring human feedback at critical decision nodes, thus operating in a “human-in-the-loop” model where the human guides and validates. Level 3 (system-level) represents a significant leap, capable of autonomously executing the complete research loop from hypothesis generation to experimental execution and iterative self-optimization. In this “human-out-of-the-loop” paradigm, the human role evolves from a hands-on operator or collaborator to a high-level strategic auditor who reviews principles and outcomes. Despite this progress, the field faces significant and persistent challenges. A primary obstacle is the scarcity of high-quality, reproducible experimental data, particularly the negative samples and failure cases, which inhibit generalization and exacerbate the “sim-to-real” gap. Furthermore, systemic issues of reliability and interpretability remain. This creates the risk of systemic hallucinations, where multiple agents might reach a consensus on a factually incorrect conclusion. This is further compounded by the lack of unified standards for data formats, interfaces, and application programming interfaces (APIs) in materials science, which constrains MAS scalability when integrating diverse databases, simulation tools, and experimental platforms. Looking ahead, MAS is poised to drive a fundamental paradigm shift. Future systems will move toward flexible, end-to-end autonomous iteration, creating a continuous cycle of discovery and refinement. This will facilitate true multi-scale information integration, finally connecting atomic-level simulations with macro-scale device performance in a predictive, holistic model. Perhaps most profoundly, this evolution will enable interdisciplinary cognitive fusion, allowing the system to bridge concepts from disparate scientific domains. This evolution will transition the research model from “human-machine collaboration”, where the machine is a tool, toward “system co-creation”, where the autonomous system acts as a second cognitive entity. By building robust, verifiable, and safe autonomous research platforms, MAS can provide critical technological support to accelerate innovation and help achieve global sustainability and carbon-neutrality goals.

multi-agent systems, energy materials, autonomous scientific research, human-machine collaborationdoi: [10.1360/CSB-2025-5793](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5793)