



人工智能重塑材料设计及其演进路径的探讨

乔泽龙, 姜润, 曹达鹏*

北京化工大学, 有机无机复合材料全国重点实验室, 北京 100029

* 联系人, E-mail: caodp@mail.buct.edu.cn

我们正处在由人工智能(AI)掀起的科研模式革命的关键阶段(图1)。AI作为一个旨在模拟人类智能、融合多种技术路径的领域,正在从根本上重塑科学研究的范式。自1956年达特茅斯会议提出AI概念以来,以深度学习为代表的机器学习方法,通过模拟人类从经验中学习的过程,使计算机能够从数据中自主发现规律,已成为实现这一目标的重要技术路径^[1]。这一趋势的标志性起点是2012年AlexNet在ImageNet竞赛中的突破性成果^[2],不仅显著提升了计算机视觉任务的性能,也标志着深度学习技术走向成熟,开启了数据驱动的AI新阶段。此后,以DeepMind为代表的系列研究清晰地勾勒出技术演进轨迹。从2018年基于机器学习的电网负荷预测模型,到2020年实现蛋白质结构精准预测的AlphaFold^[3,4],再到2023年借助图神经网络发现220万种新型晶体结构的GNoME项目^[5],这些成就充分展示了AI在解决复杂科学问题上的强大潜力。

这些成果虽均属AI技术范畴,但其核心实现机制仍是直接基于数据库的模式识别与统计预测。这类系统本质上作为复杂的“参数化知识库”,其功能局限于对训练数据分布的插值与有限外推,主要通过发现数据中的统计关联性来解决特定任务,表现出功能上的局限性^[6]。但在2024–2025年间,AI的真正雏形可能正在出现:OpenAI o1和DeepSeek-R1^[7]等推理大模型相继问世,展现出超越传统机器学习范式的逻辑推理与因果推断能力(或者说是长程关联能力),标志着AI开始实现从“知其然”到“知其所以然”的关键跃迁。基于这一重大转变,本文提出以“是否具备可解释的逻辑推理能力”作为核心区分标准,将AI划分为两大层次:广义人工智能以直接数据匹配为特征,擅长通过数据统计实现高精度预测(“知其然”);而狭义人工智能则以实现间接逻辑推理为核心,能够通过可解释的推理过程展现其认知逻辑(“知其所以然”)。这一划分既明晰了基于数据统计的“预测工具”与具备推理能力的“机器人科学家”的本质差异,更有助于准确把握智能技术发展阶段,对厘清其在科学研究中的角色定位具有重要科学意义。



曹达鹏 英国皇家化学会会士(2016年),国家重点研发计划项目负责人(2019年),2002年获北京化工大学博士学位。先后在香港大学、新加坡纳米材料公司以及美国加州大学Riverside从事科研工作。2005年至今任北京化工大学教授、博士生导师。先后获教育部自然科学奖一等奖和北京市自然科学奖一等奖等省部级奖励5项。近年来连续入选爱思唯尔

“中国高被引学者”(2018年至今)和科睿唯安“全球高被引学者”(2021年至今)。主要从事氢能催化材料及器件(氢燃料电池和电解水制氢电解槽等)和多孔框架材料(包括共价有机框架(COF)材料和共价有机多孔聚合物(COP)材料)的理论及实验研究。

在催化材料设计领域,我们认为基于描述符构建具备领域专长的人工智能体(Agent)是当前最可行的技术路径。描述符作为衔接材料微观特性与宏观性能的关键桥梁^[8,9],不仅为研究者提供直观工具,也为Agent提供了可计算、可迭代的特征变量。此外,我们推测“智能体集合体+总控体”的集成架构有望成为通用人工智能的成熟形态之一,其中总控体通过动态权重调配机制协同多个专业智能体,使系统能够自主适应不同研究场景的需求,从而革新催化材料设计模式。

1 人工智能从数据驱动到推理能力的演进

人工智能旨在利用机器模拟人类智能行为,其技术体系呈现出清晰的层次化发展路径:从基础自动化脚本代码逐步演进至具备初级认知与推理能力的系统。在基础层面,自动化脚本与规则系统替代了部分规律性智力劳动。传统机器学习方法(如支持向量机)基于统计模型^[10],能够从数据中学习规律以完成分类、回归等任务。而更深层的进展则来自深度

引用格式: 乔泽龙, 姜润, 曹达鹏. 人工智能重塑材料设计及其演进路径的探讨. 科学通报, 2026, 71: 5465–5472

Qiao Z, Jiang R, Cao D. How artificial intelligence reshapes materials design and its evolutionary path (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 5465–5472, doi: 10.1360/CSB-2025-5797

人工智能标志性事件发展时间轴

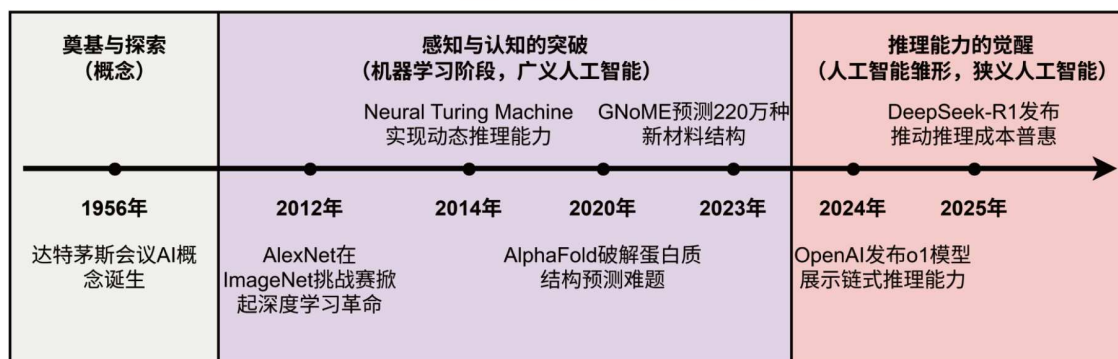


图1 (网络版彩色)人工智能标志性事件发展时间轴示意图

Figure 1 (Color online) Schematic diagram of AI landmark event development timeline

学习^[11,12],通过构建深层神经网络自动提取复杂数据特征,在蛋白质结构预测(AlphaFold^[4])、新材料发现(GNoME^[5])等领域取得了一系列里程碑式的成果。

基于对AI技术演进路径分析,之前的模型(如AlphaFold、GNoME等)虽在蛋白质结构预测和新材料发现方面取得了突破性进展,但其核心机制仍建立在数据统计规律的“直接数据匹配”之上,暴露出“知其然”而非“知其所以然”的固有局限:AlphaFold虽然在预测蛋白质静态结构方面取得了显著成就,但其预测结果在药物发现的关键环节(如分子对接)中假阳性率较高^[13],这主要是因为其预测机制仍以数据匹配和静态结构建模为核心,缺乏对蛋白质功能实现所依赖的动态相互作用和构象变化的深入理解。类似地,GNoME虽然预测了海量的稳定晶体结构,但其生成结果在“化学新颖性”与“实际应用价值”方面受到学界质疑,绝大多数生成的结构只是已知结构或者简单衍生,而且相当一部分的结构在化学家看来有些不切实际^[14]。当然,这些技术都是革命性的,但这些局限性表明其在底层物理化学逻辑的深入理解与泛化能力方面仍有欠缺,本质是复杂的“参数化知识库”,能力边界受限于训练数据的插值与有限外推,属于“知其然”的层面——能输出高精度结果,却缺乏对底层逻辑的深入理解。

基于以上分析,我们认为真正的AI技术跃迁体现在从“直接数据匹配”迈向“间接逻辑推理”,即“是否具备可解释的逻辑推理能力”应当作为划分人工智能层次(广义AI和狭义AI)的关键判据。广义AI涵盖所有模拟人类智能的技术系统(一段简单的代码也可以被视为广义AI),以直接数据匹配与模式识别为特征;狭义AI则指具备高级推理能力的系统,以间接逻辑推理与认知判断为核心。广义AI强大在于“知其然”,给出高精度预测结果,但它局限于数据统计结果。狭义AI的突破在于开始“知其所以然”——其核心体现在能够展示可验证的推理过程与因果链,并能主动发起内部对抗性思考,在多种可能解之间进行逻辑权衡与自我验证,标志着狭义AI向

真正的“理解”迈出了关键一步。为系统展示这两个层次的区别,表1从技术内核、核心能力等维度进行了对比分析。

以该标准划分AI层次的科学性是基于研究者们之前建立的量化的评估体系或者测试。以ARC-AGI(面向通用人工智能的抽象与推理语料库)为例,该基准通过设计独特的网格推理任务,彻底排除了对历史数据的简单记忆与匹配可能。要解决ARC中的任务,系统必须从极少的示例中主动归纳出抽象规则,再将其演绎应用至全新情境,这一“观察-归纳-推理”的过程,正是“间接逻辑推理”的典型体现,从而为“推理能力”提供了客观、可测量的标尺。其普适性则源于,这种从有限信息中发现并运用规则的能力,是数学证明、代码生成与科学假设等跨领域复杂思维活动的共同基础。

当前框架下,之前基于海量数据训练的主流大语言模型(如GPT系列等),其核心建立在Transformer架构以及自注意力机制^[15],用于解决基于下一个词预测的概率语言建模任务,因此其本质上是通过统计模式匹配来生成符合语言规律的结果,是一个概率语言建模。这类系统在需要深度归纳与推理的抽象测试(如ARC-AGI)中表现有限,甚至GPT-4.5, Gemini 2 Flash在ARC-AGI-2基准测试中表现极低(接近0分)(不过当时版本的推理模型如OpenAI的o3模型也表现较为不佳,不超过4分,两个月后,o3 (high)则能达到6.5分, Claude Opus 4 (Thinking 16k)为最高分,达到8.6分),其响应机制更接近于人类的“下意识”反应——迅速但缺乏深度思考和推理。因此,应将其定位为以统计关联为核心的广义AI,其核心优势在于“知其然”,即在训练数据分布范围内实现高精度预测。

而狭义AI(通用AI雏形),目前的技术是采取过程监督强化学习、思维链优化和架构针对性设计(如编码器-解码器框架)等构建出的推理模型(如OpenAI o1、DeepSeek-R1^[7]等)。此类模型的核心突破在于将训练目标从优化语言流畅性转向通过过程监督确保推理路径的逻辑正确性,从而实现了从被动的“直接数据匹配”到能动的“间接逻辑推理”的根本性跃

表 1 广义AI和狭义AI对比
Table 1 Comparison of broad AI and special AI

对比维度	广义AI	狭义AI
技术范畴	所有模拟人类智能的技术集合	具备推理能力、广义AI的子集
核心能力	高效执行特定任务(如预测、分类)	通用逻辑推理与适应、解决开放问题
数据使用	直接使用	“间接”使用
数据关系	严重依赖训练数据, 本质为插值/外推	一定程度上超越数据, 理解底层逻辑
代表	AlphaFold、GNoME、ChatGPT3.5等	OpenAI o1、DeepSeek-R1等推理模型
定位	强大的专业工具, 增强人类在特定领域的能力	科研协作伙伴, 能参与创造性探索

迁: 从静态知识的检索者, 转变为能够主动发起对抗性思考的推理者。它不再仅仅追求与训练数据模式的匹配, 而是在内部生成多种潜在的问题解决路径或答案假设, 并对其进行评估、辩论和筛选。其输出的可验证思维链, 正是这种内部对抗性思辨过程(如基于结果的探索策略)的显式记录, 而非对解题过程的简单语言模仿, 标志着系统开始获得对逻辑关系的深层认知能力。这种以推理为中介的“间接”知识运用方式, 使模型能够主动构建因果链并进行自我验证, 而不仅仅是检索或匹配已有答案。当面对分布外样本、逆向材料设计等需进行因果推断的复杂科学问题时, 这种在可能的结果之间进行主动权衡与优化的机制, 而非依赖单一答案的匹配, 赋予了推理模型更本质的泛化潜力与决策可靠性。

因此, 我们认为: 是否具备这种系统性的、包含内部对抗与平衡的“间接逻辑推理能力”, 应成为判断一个系统是否步入狭义AI层次的关键标志。这一从“知其然”到“知其所以然”的跃迁, 从根本上重塑了AI在科研中的角色——从执行特定任务的“专业工具”转变为能够参与逻辑推理的“机器人科学家”。展望未来, 构建并优化以推理模型为内核、数据驱动模型为辅助的协同架构, 将是实现具备领域特性、可持续发展的“机器人科学家”的重要路径, 最终推动科研范式的根本性变革。

2 基于描述符的智能体实现路径

目前, 催化材料设计的前沿领域已形成能量/结构描述符、机器学习与人工智能技术三者互补的技术格局(图2), 然而它们各自存在显著的局限性, 限制了它们在单独应用中的潜力。描述符(例如电负性、*OH吸附能、d带中心等)基于物理化学原理, 可解释性强且计算成本低, 但其构建过程严重依赖专家经验, 模型复杂度有限, 难以捕捉实际催化剂性能中存在的复杂非线性关系, 例如广义配位数(GCN)^[16]等几何描述符在纳入配体效应时存在不足。机器学习虽然能高效拟合复杂数据关系并显著提升预测精度, 但其生成的模型常被视为“黑箱”, 可解释性差, 且纯粹的深度学习模型可能仅能学习到数据表面的伪相关性。而符号回归等可解释方法在复杂体系中也可能会生成缺乏明确物理意义的数学表达式(如 ϕ_{xx} ^[17]), 难以指导机理解释, 导致其泛化能力存疑。此外, AI工

具(如Claude、GitHub Copilot等)在代码生成与流程自动化方面潜力巨大, 可降低机器学习使用门槛并融合相应的物理化学规律和领域知识, 但其在科研工作中的可靠性与成熟度仍面临挑战, 例如生成的代码可能忽略领域规范, 存在“模型幻觉”等风险, 需进一步验证其成熟度。

为系统克服上述这三者的局限性并整合其优势, 结合当前可行的技术, 我们提出构建一种融合了描述符、机器学习与人工智能技术(以推理模型为代表)的专业化材料设计智能体。该智能体通过“感知-决策-执行-学习”的反馈调节机制, 实现对任务的自主执行与持续优化。其中, 描述符将材料微观特性^[8,18](如催化活性中心的电子结构^[19]、几何配位环境^[8,9]等物理化学参数)转化为机器可识别的特征向量, 为智能体提供结构化输入。机器学习负责高效数据处理与模式识别, 而人工智能(推理模型等)则赋予系统推理规划与自动化执行能力。三者的有机融合使智能体能够突破单一技术的局限: 描述符保障物理可解释性, 机器学习确保预测精度, 人工智能提升系统易用性与自动化水平。

图3展示了我们实现该智能体的具体架构思路。系统由人工智能(推理模型)与机器学习技术协同构建, 形成完整的“感知-决策-执行-学习”智能研发流程, 描述符则作为数据库中的先验知识进行注入。具体而言, 工作流程始于感知模块, 该模块负责获取研发需求与相关数据, 为后续决策提供信息基础; 决策模块在制定研发计划时, 从描述符库调用物理化学特征参数作为先验知识, 避免盲目搜索; 执行模块驱动计算与实验操作; 学习模块对结果进行评估, 成功方案直接输出, 失败案例则启动策略更新, 形成反馈调节机制闭环工作流程。

该架构的核心在于通过技术集成解决三大关键挑战。首先, 描述符库依据模块化与可解释性原则构建, 涵盖基于物理化学原理的基础描述符(如d带中心)、由符号回归等方法生成的复合描述符, 以及面向特定任务的专用描述符, 并通过学习模块实现动态演化, 构成可迭代的知识引导基础。此外, 解决多源异构知识的融合问题, 本质上是设计一个系统性的信息处理流水线, 可通过分层处理将复杂问题模块化, 让图神经网络、语义计算、注意力机制等技术在最合适的层级上精准发力, 相互配合, 并动态评估各知识源的相关性

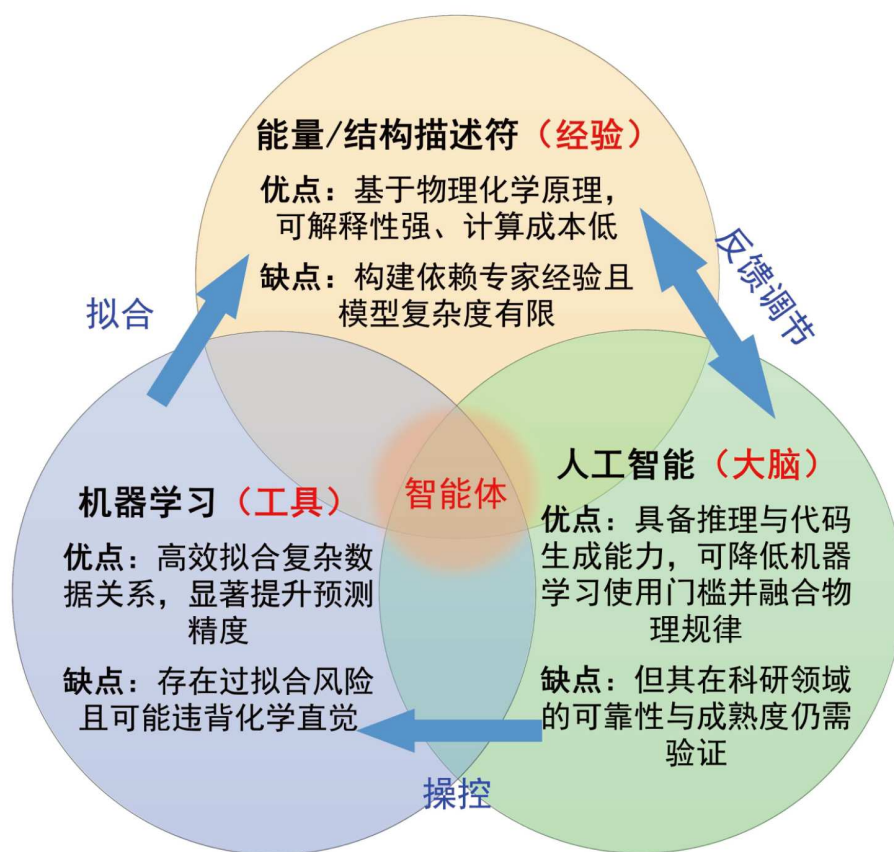


图2 (网络版彩色)催化材料设计中经验描述符、机器学习与人工智能的角色定位与协同关系示意图

Figure 2 (Color online) Schematic diagram of positioning and collaboration of descriptor, machine learning and artificial intelligence in catalytic material design

与置信度, 实现多源异构知识的调度与集成. 最后, 动态权重分配机制通过实时反馈循环得以实现, 各专业子智能体(如需求解析、理论计算)的权重既可基于专家知识预设, 也可根据性能指标(如计算收敛性、预测偏差)进行自适应调整, 从而形成“轮换主导”的协同决策模式. 当前系统虽仍需专家在关键环节(如物理意义确认)的参与^[20], 但上述技术路径已为实现从经验驱动到知识数据协同驱动的研发范式转型提供了具体可行的基础解决方案. 当然, 在该文撰写期间也陆续出现了一些专门构建智能体的平台, 如国内阿里推出的Agent-Scope平台和其对应的Qwen-Agent框架等, 可积极利用, 最终实现构建高性能智能体.

3 从智能体工具到机器人科学家

尽管专业智能体在催化材料设计的特定任务中表现出色, 但其“信息孤岛”的特性严重限制了其在跨尺度、多目标优化问题中的应用. 为突破这一局限, 我们认为“智能体集合体+总控体”的协同架构可以作为下一代通用人工智能(AGI)的基础构架, 如图4所示(左图). 该系统以总控智能体为协作

中枢, 通过动态权重分配与共享认知空间(中心知识库)机制、实时反馈与历史数据的动态权重分配与调整机制, 实现多智能体的有机整合与协同运作.

该架构的核心在于权重分配的动态调控机制, 使总控智能体能够根据具体的研究目标或研发任务的不同阶段, 动态调整各专业智能体(如需求解析、理论计算、实验规划等)的决策权重(图4右图). 其设计灵感源于密度泛函理论中的“杂化泛函”思想, 旨在使总控智能体能够根据具体的研究目标和任务阶段, 动态调配各专业智能体(如需求解析、理论计算、实验规划等)的决策影响力. 权重的确定并非单一或静态, 而是融合了多层依据: 初始阶段, 可借鉴层次分析法(AHP)等理论, 由领域专家根据任务优先级(如“优先筛选稳定性”或“追求极限活性”)预设权重, 例如在问题分析阶段, 需求解析智能体被赋予0.9(举例比例, 并非实际比例)的主导权重, 而在理论验证阶段, 理论计算智能体则转为主导(权重0.9), 其余智能体则处于辅助地位; 在系统运行中, 总控智能体持续监控各单元智能体的性能反馈(如预测结果与历史结果偏差), 并通过学习特定任务类型(如“优化氧还原反应催化剂”“锂离子

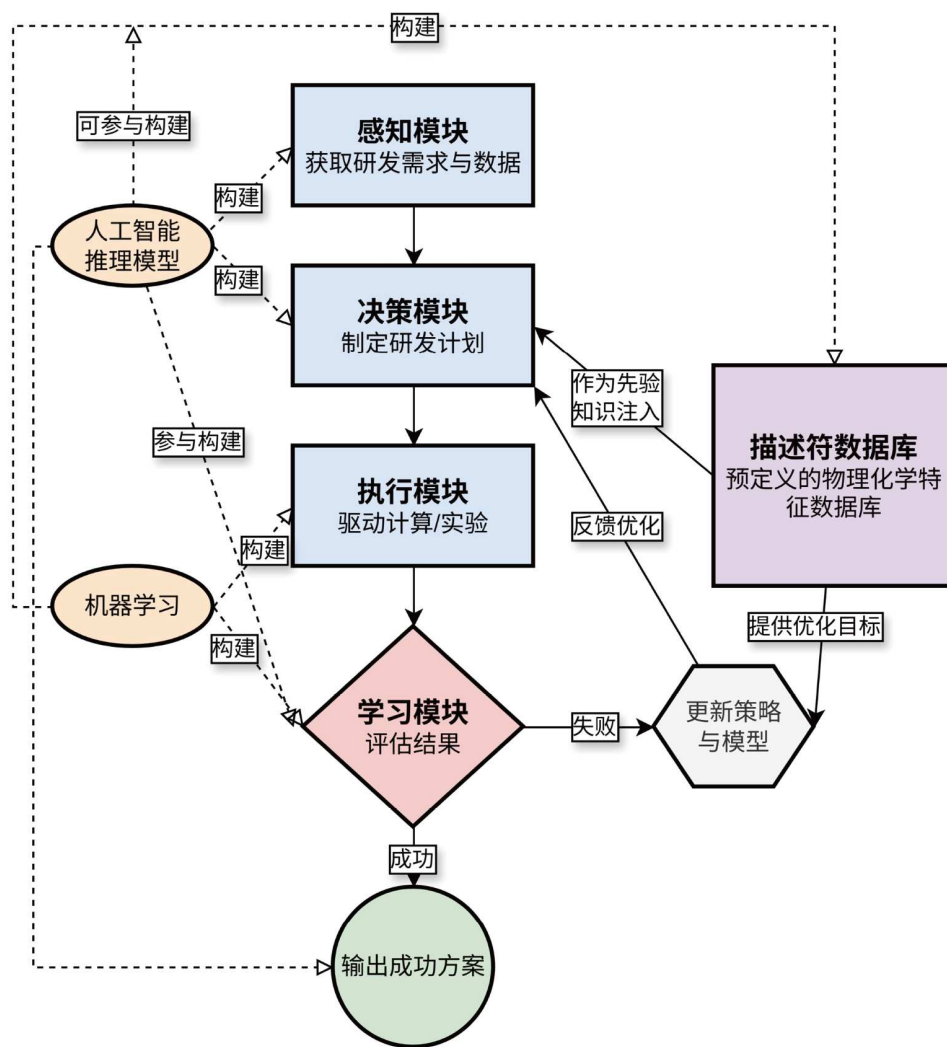


图3 (网络版彩色)基于描述符数据库的材料设计智能体的工作流程和核心架构示意图。智能体通过“感知-决策-执行-学习”四个核心模块+反馈调节机制的工作流程,其中描述符库贯穿整个流程

Figure 3 (Color online) Workflow and core architecture diagram of material design agent based on descriptor database. The agent forms a closed-loop workflow through the four core modules of “Perception, Decision, Execution, Learning” and the feedback adjustment mechanism, in which the descriptor database is the key knowledge infrastructure throughout the whole process

子电极材料体系筛选”)的历史任务数据,训练出一个权重推荐模型。权重的动态调整由明确的规则触发,主要包括研发阶段转换、智能体性能偏离及任务目标更新三类条件。一旦某智能体输出显著偏离预期,其权重将被动态调低,并相应提升其他相关单元的权重以作补偿。调整过程采用权重平滑过渡策略以避免决策震荡,从而保障系统的稳定性与决策连贯性。最终,通过这种可动态调配的权重“配方”,系统能够塑造适配不同研发需求的特定“性格”或领域特性,实现从通用工具到具备特定领域专长的“机器人科学家”的转变。

实现“智能体集合体+总控体”架构仍需克服多项关键技术挑战。首先,多源异构知识融合^[21]的深度与可靠性是关键瓶颈:工业研发现场存在大量异构系统与陈旧设备,数据高

度碎片化且标准不一,智能体作为“超级连接器”虽能聚合功能,但实现跨系统、跨协议的数据互通与语义理解仍需建立统一的通信框架并解决数据标准化问题^[22,23]。其次,如何确保“智能体集合体+总控体”架构中的动态权重调整机制^[24]在长达数月、数年的材料研发周期中不因“模型幻觉”或长期依赖的累积误差而做出偏离科学规律的决策,这也是一大关键挑战。此外,智能体对常规科研任务的逐步接管,也要求人类研究者的角色从具体执行者向问题定义者与异常裁决者转型;若人机权责边界未能同步厘清,由此衍生的科研主体弱化、智能体决策可靠性与可解释性不足,以及由此产生的安全隐患与责任归属、界定问题,将成为工业界使用智能体的核心顾虑,必须被慎重考量。最后,在具体实施层面,智能体

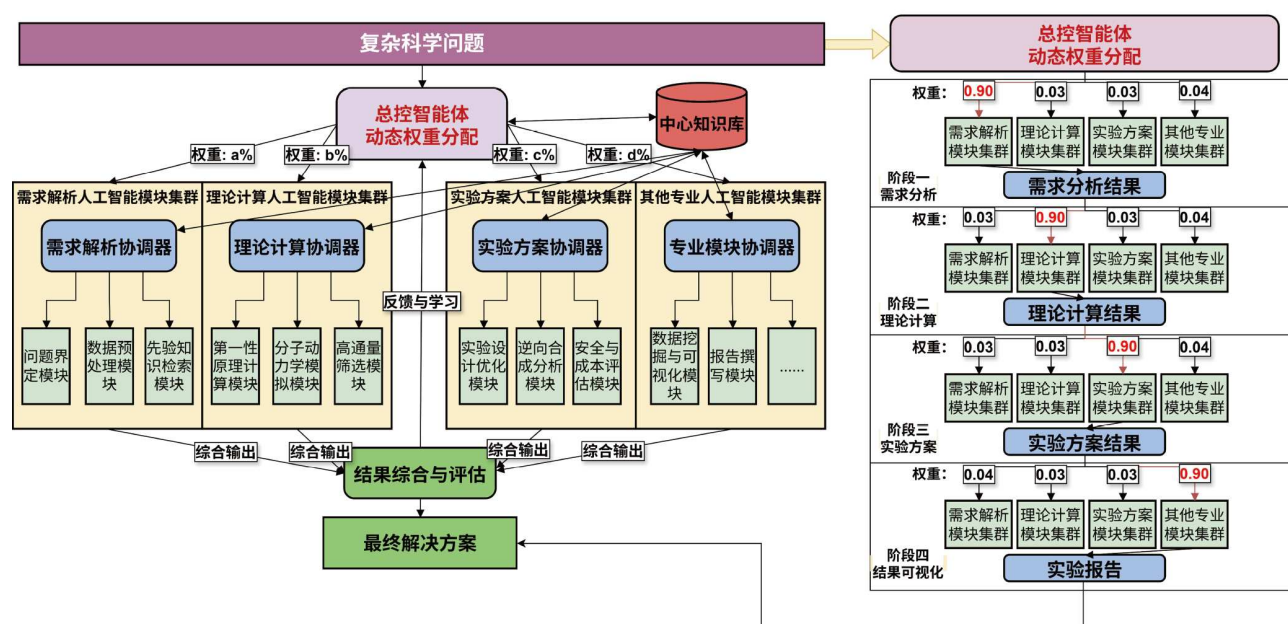


图4 (网络版彩色)面向催化材料设计等复杂研发场景的下一代通用人工智能系统架构(左)及工作流程(右)示意图

Figure 4 (Color online) Schematic diagram of next generation artificial general intelligence (AGI) system architecture (left) and workflow (right) for complex R&D scenarios such as catalytic material design

间的任务调度、通信开销与决策一致性保障,对系统的存储资源与算力资源提出了极高要求。值得指出的是,当AI从“知其然”迈向“知其所以然”时,推理过程带来的算力消耗呈数量级跃升,这意味着“机器人科学家”的科研能力边界将不仅取决于算法先进性,更受到高密度算力可持续供给的刚性制约。而这种级别的存储和算力要求只能依赖产业龙头或者政府进行大规模投资才能得以实现,高等院校和研究所很难基于横纵向经费满足这种规模的算力需求,未来可能过于依赖企业合作,导致算力资源集中化风险加剧,探索自由度和技术自由度也会相应受限,这也是一大关键问题。此外,多目标优化权衡以及评估体系构建^[25,26]等也是当前需要解决的难题。

为应对上述挑战,在解决多源知识融合瓶颈与建立统一通信框架问题方面,需在接口与协议层面取得关键进展。当前,行业普遍采用的与OpenAI API兼容的接口规范,为异构智能体与工具提供了标准化的请求/响应模式,可成为实现互操作的重要基础。类似地,对外部工具(如网络搜索、数据库查询)的集成,也可借鉴Tavily等工具框架所采用的标准化调用模式,从而实现智能体对多样化工具能力的统一调度与访问。进一步地,在协议层面,需要在此基础上制定高效、安全的智能体间交互规范^[27],如Agent2Agent (A2A)等开放标准,以支持复杂的任务规划与协同。这些基础工作提供高质量、一致性的数据流和协同环境支持,为跨系统、跨协议的数据互通与语义理解奠定基础,从而实现总控体可靠的动态权重调整,以及通过多智能体交叉验证来抵御“模型幻觉”与长期累积误差。此外,为应对决策可靠性、责任界定与安全隐忧

等核心挑战,需构建监管和审计追踪体系,明确人机权责边界。为缓解存储与算力压力,当前可暂时通过分层任务调度与轻量化通信设计解决,但长期仍需依赖政府或产业龙头主导的大规模算力投入。高校与科研机构可通过共建平台、开展企业合作等方式参与,在明确权责的前提下维持必要的技术探索自由度。

这些技术方向现在均已具备一定的研究基础和初步解决方案。相信在不久的将来,通过持续的技术迭代,有望逐步解决“智能体集合体+总控体”架构中知识融合、长期决策可靠、责任划分与算力资源等多重难题,最终推动人工智能从高效工具向具有科研能力的机器人科学家的角色转变,为催化材料设计提供新的智能化范式。

总之,本文系统探讨了人工智能在催化材料设计领域的发展路径,通过分析技术演进逻辑,提出以“推理能力”作为核心区分标准,将人工智能划分为两大层次:广义人工智能的系统架构建立在对数据库的“直接匹配”基础上,其通过数据匹配和模式识别实现功能;而狭义人工智能则体现为对数据库的“间接运用”,其通过实现对抗性逻辑推理与因果推断等高级认知能力,对知识进行深层演绎与整合。这种从“直接匹配”到“间接运用”的转变,标志着人工智能实现了从“知其然”到“知其所以然”的关键跃迁。基于当前已有的技术,我们提出基于描述符的材料设计人工智能体,其通过“感知-决策-执行-学习”这种具有反馈调节机制的闭环工作流程,将领域知识与数据驱动优化相结合,实现了研发流程的系统化升级。我们预测未来的通用人工智能形态可能为“智能体集合体

+总控体”协同架构。该架构通过引入动态权重分配机制,使系统能够根据研发任务自主调整各专业模块的主导权,形成

具有特定领域特性的解决方案。随着关键技术的成熟,人工智能最终将完成从辅助工具向机器人科学家的本质转变。

致谢 感谢国家博士后研究人员资助计划(GZB20250290)资助。

推荐阅读文献

- 1 LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning. *Nature*, 2015, 521: 436–444
- 2 Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Commun ACM*, 2017, 60: 84–90
- 3 Jumper J, Evans R, Pritzel A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 2021, 596: 583–589
- 4 Senior A W, Evans R, Jumper J, et al. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning. *Nature*, 2020, 577: 706–710
- 5 Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 2023, 624: 80–85
- 6 More than machines. *Nat Mach Intell*, 2019, 1: 1
- 7 Guo D, Yang D, Zhang H, et al. DeepSeek-R1 incentivizes reasoning in LLMs through reinforcement learning. *Nature*, 2025, 645: 633–638
- 8 Qiao Z, Jiang R, Xu H, et al. A general descriptor for single-atom catalysts with axial ligands. *Angew Chem Int Ed*, 2024, 63: e202407812
- 9 Jiang R, Qiao Z, Xu H, et al. Defect engineering of Fe-N-C single-atom catalysts for oxygen reduction reaction. *Chin J Catal*, 2023, 48: 224–234
- 10 McCarthy J, Minsky M L, Rochester N, et al. A proposal for the Dartmouth summer research project on artificial intelligence. *AI Mag*, 2006, 27: 12–14
- 11 Hinton G E. Learning multiple layers of representation. *Trends Cogn Sci*, 2007, 11: 428–434
- 12 Jordan M I, Mitchell T M. Machine learning: trends, perspectives, and prospects. *Science*, 2015, 349: 255–260
- 13 Wong F, Krishnan A, Zheng E J, et al. Benchmarking AlphaFold-enabled molecular docking predictions for antibiotic discovery. *Mol Syst Biol*, 2022, 18: e11081
- 14 Cheetham A K, Seshadri R. Artificial intelligence driving materials discovery? Perspective on the article: scaling deep learning for materials discovery. *Chem Mater*, 2024, 36: 3490–3495
- 15 Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need. 2017, arXiv: [1706.03762](https://arxiv.org/abs/1706.03762)
- 16 Calle-Vallejo F, Martínez J I, García-Lastra J M, et al. Fast prediction of adsorption properties for platinum nanocatalysts with generalized coordination numbers. *Angew Chem Int Ed*, 2014, 53: 8316–8319
- 17 Lin X, Du X, Wu S, et al. Machine learning-assisted dual-atom sites design with interpretable descriptors unifying electrocatalytic reactions. *Nat Commun*, 2024, 15: 8169
- 18 Xu H, Cheng D, Cao D, et al. Revisiting the universal principle for the rational design of single-atom electrocatalysts. *Nat Catal*, 2024, 7: 207–218
- 19 Qiao Z, Jiang R, Yun J, et al. Why the abnormal phenomena of D-band center theory exist? A new BASED theory for surface catalysis and chemistry. *Chin J Catal*, 2024, 64: 44–53
- 20 Zhang Y, Ling C. A strategy to apply machine learning to small datasets in materials science. *npj Comput Mater*, 2018, 4: 25
- 21 Zhao X, Jia Y, Li A, et al. Multi-source knowledge fusion: a survey. In: Proceedings of the 2019 IEEE Fourth International Conference on Data Science in Cyberspace (DSC), 2019
- 22 Papazoglou M P, van den Heuvel W J. Service oriented architectures: approaches, technologies and research issues. *VLDB J*, 2007, 16: 389–415
- 23 Ward L, Agrawal A, Choudhary A, et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *npj Comput Mater*, 2016, 2: 16028
- 24 Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Trans Evol Computat*, 2002, 6: 182–197
- 25 Bommasani R, Liang P, Lee T. Holistic evaluation of language models. *Ann New York Acad Sci*, 2023, 1525: 140–146
- 26 Goble C, Cohen-Boulakia S, Soiland-Reyes S, et al. FAIR computational workflows. *Data Intelligence*, 2020, 2: 108–121
- 27 Smith. The contract net protocol: high-level communication and control in a distributed problem solver. *IEEE Trans Comput*, 1980, C-29: 1104–1113

Summary for “人工智能重塑材料设计及其演进路径的探讨”

How artificial intelligence reshapes materials design and its evolutionary path

Zelong Qiao, Run Jiang & Dapeng Cao*

State Key Laboratory of Organic-Inorganic Composites, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China

* Corresponding author, E-mail: caodp@mail.buct.edu.cn

Artificial intelligence (AI) is revolutionizing materials design by transitioning from mere data-driven tools to systems capable of logical reasoning. This paper discusses the evolutionary path of AI, highlighting a research framework transition from “direct data matching” to “indirect logical deduction” as a key milestone. We propose that this core criterion for categorizing AI levels should be “whether it possesses explainable causal reasoning and logical deduction capabilities.” It can be divided into two levels: broad AI, which excels in pattern recognition and statistical prediction, and Special AI, which demonstrates foundational cognitive abilities through interpretable inference. This distinction helps clarify the role of AI in scientific research, beyond functional tools, toward collaborative partners.

Based on technological advancements, we define Broad AI as the systems that primarily rely on direct data matching, such as deep learning models (e.g., AlphaFold and GNoME). These models act as complex “parameterized knowledge databases,” achieving high accuracy in specific tasks but limited to interpolation and extrapolation within training data distributions. In contrast, Special AI (e.g., OpenAI o1 and DeepSeek-R1) embodies indirect logical deduction, enabling causal inference and adversarial thinking through process-supervised reinforcement learning. This means a fundamental transition from “know what” to “know why”, with Special AI capable of generating verifiable reasoning chains and adapting to open-ended problems.

In catalytic materials design, we propose an Agent framework built on descriptors, which can efficiently reveal the structure-property relationship and key variables linking micro-scale structure and macro-scale performance. Descriptors provide interpretable, computable features that integrate domain knowledge with data-driven optimization. The Agent operates via a “perception-decision-execution-learning” closed-loop workflow, enhancing research efficiency and interpretability. For instance, the perception module gathers R&D requirements, while decision-making leverages descriptor databases for prior knowledge injection, avoiding blind searches.

We further speculate that an “Agent clusters + Master controller” architecture could represent the mature form of general AI. Here, the Master controller employs a dynamic weight allocation (inspired by the concept of hybrid functionals in density functional theory) to coordinate specialized Agents (e.g., for demand parsing or theoretical computation). Weights are adjusted based on real-time feedback, task phases, and historical data, enabling adaptive decision-making. This system would drive AI from an auxiliary tool into a “robotic scientist”, although these challenges, like multi-source knowledge fusion and computational resources, still exist.

In short, this systematic exploration underscores the transformation of AI in materials design. By emphasizing the deduction capability as a criterion, Broad AI (direct data matching) and Special AI (indirect logic deduction) are distinguished. The descriptor-based Agent framework promises cross-disciplinary innovation. As key technologies mature, AI is poised to transition from an auxiliary tool into a “robotic scientist”, driving research paradigm innovation in catalytic materials design.

artificial intelligence, catalyst material design, descriptor, agent, master controller

doi: [10.1360/CSB-2025-5797](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5797)