引用格式：赵紫威, 周凤翔, 周杨理理, 等. 人工智能赋能材料创新的层次与体系布局. 中国科学院院刊, 2026, 41(6): 1115-1126, doi: 10.3724/j.issn.1000-3045.20260423004.
Zhao Z W, Zhou F X, Zhou Y L L, et al. Artificial intelligence-enabled materials innovation: Implementation levels and strategic layout. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2026, 41(6): 1115-1126, doi: 10.3724/j.issn.1000-3045.20260423004. (in Chinese)

人工智能赋能材料创新的层次与体系布局

赵紫威[1,2] 周凤翔[1,2*] 周杨理理[1,2] 王 灿[1] 张 佩[1] 汪卫华[1*]

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

摘要 材料创新长期面临设计空间大、工艺路径复杂、验证周期长和工程转化难等问题。传统材料创制和使役性能优化依赖经验积累、理论推演与实验试错的研发模式已难以适应关键材料快速突破需求。近年来，人工智能技术加快进入材料设计、制备、表征、评估、使役性能优化和应用反馈等环节，推动材料创新由经验驱动向数据驱动、由离散试错向闭环优化转变。文章在梳理材料科学研究范式演进和技术创新范式演进的基础上，提出人工智能赋能材料创新的“能力奠基—应用拓展—产业深化”3层实现框架。通过分析国内外发展布局态势、重点问题及体系布局方向，认为人工智能赋能材料创新正处于由概念验证向系统化应用过渡阶段，材料性质预测、候选筛选和文献知识抽取等前端环节发展较快，而复杂材料合成、实验验证、服役预测和中试放大等环节仍是制约人工智能赋能材料创新走向系统应用的关键短板。因此，建议未来应以关键材料任务为牵引，推动单点技术突破至创新链条贯通，形成覆盖设计、制备、验证、放大、服役和应用反馈的系统能力。

关键词 人工智能，材料创新，体系布局

DOI 10.3724/j.issn.1000-3045.20260423004
CSTR 32128.14.CASbulletin.20260423004

先进材料是现代工业体系、国家安全、能源转型和生命健康等领域的重要物质基础，关键材料的突破往往深刻影响重大技术路线选择和产业竞争格局，其创新能力直接关系国家科技竞争力和产业竞争力。与

*通信作者
资助项目：中国科学院学部人工智能重大咨询项目
修改稿收到日期：2026年6月2日

此同时，材料创新长期受制于高维设计空间、复杂工艺路径、多尺度组织演化和长周期验证等因素，普遍面临研发周期长、成本高，使役性能预测和优化难，以及工程转化效率偏低等问题。主要依靠经验积累、理论推演与实验试错的传统研究模式已难以充分满足关键材料加快突破和重大应用快速迭代的现实需求[1-4]。近年来，人工智能快速发展并持续向科研活动和工程实践渗透，为材料创新提供了新的方法基础、工具、组织方式和新范式。特别是在材料性质预测、候选筛选、逆向设计、合成路线规划和自主实验方面，相关研究进展显著，显示出人工智能在提升材料创新效率和拓展材料发现空间方面的潜力[5-13]。

围绕人工智能与材料科学深度融合，国内外学界已在材料研究范式演进、知识生产逻辑重构、关键赋能路径、能力边界与未来愿景等方面形成了较为丰富的讨论[1-4,14-18]。当前值得进一步关注的是：在关键技术不断突破的背景下，人工智能赋能材料创新究竟处于何种发展状态，重点突破口和方向应放在何处，如何构建更加有效的布局体系。准确把握以上问题，有助于提高资源配置效率、优化技术部署路径，推动人工智能赋能材料创新健康、高效发展。

本文认为，人工智能赋能材料创新当前正处于由概念验证向系统化应用过渡的阶段。性能预测、逆向设计、知识图谱和自主实验等领域进展较快，但复杂材料合成、服役预测、中试放大和产业流程嵌入仍是主要短板。未来发展的关键，不仅是提高模型精度以及生成更多候选材料，更需要围绕关键材料任务，打通设计、制备、表征、验证、放大和应用反馈链条，形成可持续迭代的系统能力。基于此，本文提出“能力奠基—应用拓展—产业深化”3层实现框架，分析其发展态势、重点问题和布局方向，为推动人工智能服务关键材料突破，以及服务材料新质生产力培育提供参考。

1 人工智能赋能材料创新的概念内涵与分析框架

1.1 人工智能赋能材料创新的概念界定

人工智能赋能材料创新，是指综合运用人工智能技术，对材料设计、制备、表征、评价、优化、中试放大与应用验证等全生命周期活动进行系统赋能，以提升材料发现效率、增强材料创新能力、缩短工程化转化周期，并支撑材料由实验室验证走向产业可制造、工程可使用的技术过程与组织形态变革。

这一概念的关键，不仅在于人工智能是否提高了材料预测精度或筛选效率，更在于其是否在更大范围内重构材料创新过程中的信息流、决策流与执行流。一方面，人工智能通过对大规模材料数据、实验记录、文献知识和过程信息的提取、关联与整合，增强了对材料组成、结构、工艺、性能和服役行为之间复杂关系的映射能力，从而提高材料设计、性质预测、工艺优化和失效分析的效率与精度[2-4,14]。另一方面，随着自动化实验平台、计算模拟工具与知识引擎，以及专业模型的深度耦合，人工智能正在由辅助分析工具逐步发展为材料创新流程中的重要参与者，推动材料创新由分段式、经验主导的活动形态，向数据驱动、闭环优化和人机协同的方向演进[9-11,19]。

从内涵上看，人工智能赋能材料创新至少包含3个方面。① 提升材料设计、筛选和性能预测等基础能力，帮助研究者在更大设计空间中更有效地识别潜在候选材料，并加快“结构—性能”关系的刻画与理解。② 通过自驱动实验、计算模拟和反馈优化增强材料创新过程的自主性和迭代效率，使“数据—模型—实验”闭环逐步成为可实施的研究组织方式。③ 向工艺开发、中试验证、质量一致性控制、服役评估和应用反馈等环节延伸，推动材料创新由实验室条件下的可行性验证进一步走向工程适配与规模化应用。在这一意义上，人工智能赋能材料创新并不仅是若干技术

工具的叠加，而是涉及材料知识生成方式、创新活动组织方式，以及“研发—验证—制造”衔接方式的深层次变革。

1.2 从材料科学范式演进到技术创新范式演进

从材料科学的发展历程看，其研究范式是一个不断叠加、融合和扩展的演进过程。早期材料研究主要依赖经验试错和工匠式积累，随后逐步建立起以可重复实验、仪器表征和结构—性能关系分析为核心的实验科学范式。随着量子力学、统计力学、热力学和计算方法的发展，材料研究进一步进入理论计算阶段，具备了基于物理规律开展材料预测和机理解释的能力。进入数据密集型研究阶段后，数据库、高通量实验、高通量计算和机器学习等方法强化了材料高维关联关系挖掘与大规模筛选能力。当前，人工智能正进一步融合知识图谱、多智能体等关键技术，并与自动化实验平台和机器人技术深度结合，推动材料研究向智能自主模式拓展[1-4,9-11,15-19]。总体而言，材料研究正由经验主导的低效探索，转向数据、模型、实验和自动化高度协同的集成化研究范式。

从技术创新组织方式看，创新范式也经历了重要转变。以布什模型为代表的线性范式强调基础研究、应用研究和产业化之间的顺序传导[22]，链环模型突出创新过程中的多重反馈回路[23]，国家创新系统理论强调制度、组织与知识流动之间的系统互动[24]，平台创新强调模块化、接口化和多主体协同对创新效率的支撑作用，使命导向创新则进一步凸显围绕重大目标组织科技、产业与政策资源的必要性[25]。这些理论共同揭示了知识生产、技术开发、市场需求与制度安排之间的复杂反馈关系。对材料领域而言，关键材料突破本就具有问题复杂、路径不确定、验证周期长、科学问题与工程问题耦合紧密等特点，难以通过单纯的线性创新逻辑加以解释和支撑。人工智能的引入，使材料创新进一步呈现出数据驱动、任务牵引、人机协同、平台支撑和研发制造贯通等特征，推动材料科学研究范式与技术创新组织范式加速交汇，并为形成新的材料创新范式创造了条件。

1.3 人工智能赋能材料创新的分析框架

基于材料科学研究范式与技术创新组织范式的演进逻辑，人工智能赋能材料创新可被视为两类范式交汇下形成的新型创新过程（图1）。其核心不只是提升预测和筛选效率，而在于以数据、模型、实验和制备为支撑，在应用约束下贯通成分、结构、工艺、组织、性能与服役行为之间的迭代优化关系，推动材料创新由分段式试错走向多环节协同优化。例如，高频高效软磁材料研发不仅涉及合金成分设计，还需要协同优化玻璃形成能力、纳米晶组织、带材厚度、退火策略、高频损耗、热稳定性和器件适配性。人工智能的价值，正体现在通过数据建模、物理约束和实验反馈，将这些多变量、多约束问题纳入统一的迭代优化过程，从而提升设计、制备、评价和应用验证之间的协同效率。

据此，本文将人工智能赋能材料创新划分为3个实现层次。① 能力奠基，即形成支撑材料设计、制备、表征和优化的关键技术与原型系统；② 应用拓展，即围绕关键材料任务形成可验证、可复制的解决方案，并向多场景延伸；③ 产业深化，即进一步嵌入企业研发、工艺优化、质量控制和服役管理等流程，形成持续产业价值。

2 人工智能赋能材料创新的实现层次及其发展态势

从相关研究分布和代表性实践看，人工智能赋能材料创新呈现前端环节活跃、后端环节不足的阶段性特征。当前，研究主要集中于性质预测、逆向设计、知识抽取、工艺优化和自主实验等方向，而面向复杂材料合成、服役行为预测、中试放大、工程验证和产业流程嵌入的研究与应用仍相对薄弱（图2）。这表明，人工智能在材料设计筛选和研发效率提升方面已

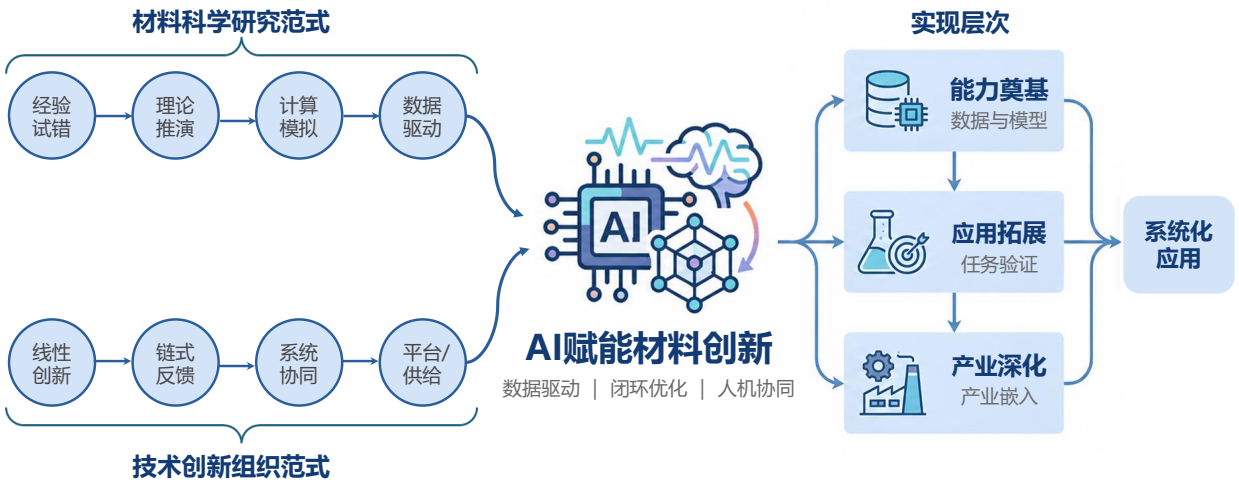


图 1　人工智能赋能材料创新的范式演进逻辑与实现层次

Figure 1　Paradigm evolution logic and implementation levels of AI-enabled materials innovation

形成一定能力基础，但尚未形成贯通设计、制备、验证、放大和应用反馈的系统能力。以下将按照“能力奠基—应用拓展—产业深化”的框架，对其发展态势进行分析。

2.1 能力奠基层次的发展重点

能力奠基层次的核心在于围绕材料设计、制备、表征和优化等关键环节，形成一批具有代表性的算法、模型、平台和原型系统。衡量这一层次的重要标志，在于关键能力是否已经形成，是否能够支撑概念验证和示范性应用。

材料设计与性质预测能力是当前研究最成熟、文献占比最高的方向之一，也是人工智能较早切入材料科学的领域。支持向量机和随机森林等经典机器学习方法显著提高了材料“结构—性能”关系的建模效率。图神经网络、晶体图卷积网络，以及基于原子表示学习的模型，已广泛用于预测形成能、带隙、弹性模量、热导率、催化活性和稳定性等任务，推动材料筛选由经验驱动向数据驱动转变[6-8]。相较传统计算方法，预训练模型在部分任务中能够以较低的时间成本完成近似预测，为大规模候选空间搜索提供了可能[8,18]。

逆向设计能力代表着人工智能赋能材料创新从“找规律”向“按目标设计”的进一步演进。近年来，变分自编码器、生成对抗网络和扩散模型等方法逐步进入材料设计领域，使围绕目标性能生成候选材料成为可能[16,17]。相关研究已在聚合物、无机材料及多孔材料的成分设计与结构生成中展示出重要潜力，但同时也暴露出物理先验缺失、可合成性不足和热力学稳定性有限等问题[5,16,17]。因此，生成式设计能力的价值，仍需通过与性质预测、物理约束和实验验证的耦合来进一步巩固。

大语言模型、知识图谱等技术的发展，正在增强人工智能对材料知识组织和研发任务协同的支撑能力。材料创新不仅依赖结构化数据，也高度依赖文献知识、实验经验和隐性规则。近年来，相关技术在文献知识挖掘、实体关系抽取、实验条件解析、研究路线推荐和任务分解等方面发展较快[12,13]，并开始向文献理解、代码生成、实验规划和结果分析等更复杂任务延伸。这表明，人工智能在材料创新中的作用正由单一的信息处理和局部预测，逐步向知识组织和流程协同拓展。

自主实验能力的提升是材料智能研发系统的重要发展方向。如果说材料设计和知识组织主要解决方案生成与任务规划问题，那么自主实验则面向快速验证

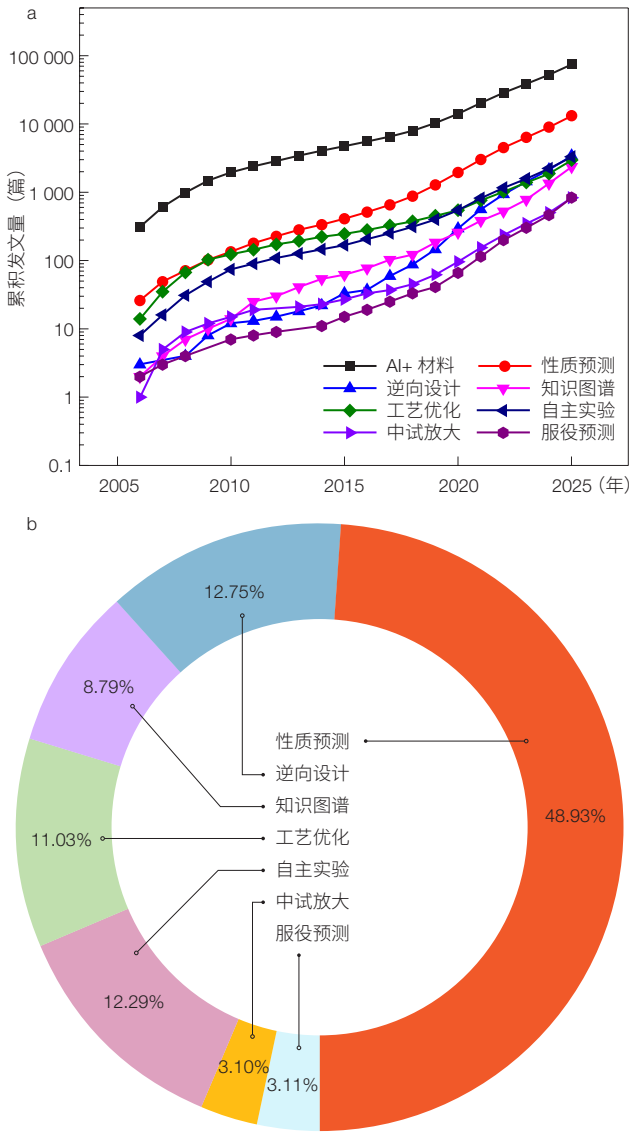


图2　人工智能赋能材料创新相关研究方向的发文趋势（a）与占比（b）

Figure 2　Publication trends (a) and proportions (b) of research directions related to AI-enabled materials innovation

基于 Web of Science 文献检索结果整理，时间范围为 2006—2025 年；研究方向依据论文主题进行归类统计，统计结果主要用于反映研究关注重点的相对分布

Based on publications retrieved from the Web of Science database (2006 – 2025), research areas were categorized according to publication themes. The statistics are intended to illustrate the relative distribution of major research interests

和持续迭代。近年来，自主实验室和闭环研发平台已成为国际人工智能赋能科学研究（AI for Science）的重要热点。相关平台通过将机器学习模型、实验规划算法与自动化实验设备相结合，逐步实现实验条件推荐、结果反馈分析和迭代优化等功能，从而提升连续实验决策能力和验证效率[9-11,19]。例如，美国劳伦斯伯克利国家实验室等机构建设的自主实验平台已尝试将材料合成、结构表征和机器学习决策连接起来，实现无机材料合成路径的自动规划与实验反馈，这说明该方向已从概念引入走向多点探索。

总体来看，能力奠基层次决定了人工智能能否在材料创新中形成稳定、可复用的基础支撑，是后续应用拓展和产业深化的前提。

2.2 应用拓展层次的主要方向

应用拓展层次是人工智能赋能材料创新由能力证明走向关键问题验证的核心层面。其重点在于，人工智能开始围绕关键材料问题形成具有针对性的解决方案，并逐步向更广泛任务和场景扩展。衡量这一层次的关键在于其能否进入关键材料问题求解过程，并在效率、性能、成本或验证速度等方面体现出实际价值。

当前，较具代表性的应用方向包括新能源电池材料、半导体材料、催化材料、高温合金、先进结构材料、生物医用材料和高频高效软磁材料等。这些领域通常具有材料体系复杂、应用约束严格、服役环境苛刻、验证周期较长等特点，对寿命、稳定性、安全性、一致性和可制造性提出更高要求，因此也是检验人工智能赋能材料创新真实价值的重要方向。以新能源材料为例，人工智能的价值已不只是提高候选材料筛选效率，更在于围绕循环寿命、热稳定性、界面演化和失效机制等关键问题，提高设计、制备与评价之间的协同效率[20,21]。

应用拓展层次应覆盖材料在真实服役条件下的行为预测和中试放大阶段的技术验证。对于电池材料、催化材料、半导体材料和高频软磁材料等领域而言，模型预测并筛选出的候选材料，并不意味着其具有明

确的合成路径和可实现的热力学稳定性，实验室最优性能也不能直接等同于工程可用性。温度、应力、腐蚀、辐照、循环载荷、界面反应和制造波动等因素，会显著影响材料寿命、稳定性、一致性和安全边界。人工智能若要进入关键材料创新，仍需加强在使役预测、中试放大和工程验证等方面的能力建设。近年来，数字孪生在先进制造、工艺优化和设备状态监测中发展较快，并开始为材料加工过程表征、服役状态映射和寿命演化分析提供新的技术支撑[26]。结合人工智能技术，这类方法有助于增强对复杂工况下材料行为的动态预测和迭代优化能力，也标志着人工智能赋能材料创新正在从“发现新材料”逐步延伸到“验证材料能否稳定制备、能否工程应用和能否长期服役”。然而，相比设计与筛选，材料服役预测和中试验证存在周期更长、数据获取更难、变量更复杂、验证成本更高等特点，导致相关研究和平台建设明显滞后。许多成果仍停留在小样本、短周期、单工况条件下的演示阶段，尚难以支撑工程决策。

总体上看，应用拓展层次处于从“实验室可行”迈向“关键任务可用”的重要阶段。从范式展开的角度看，这一层次是人工智能赋能材料创新能否获得现实支撑的关键环节。因而，应用拓展层次的关键不在于局部任务精度的进一步提升，而在于人工智能能否在关键材料任务中形成可验证、可复制和可推广的实际价值。

2.3 产业深化层次的实践探索

产业深化层次是人工智能赋能材料创新向企业研发和制造体系延伸的更高实现层面。其核心在于，人工智能逐步成为企业材料研发、工艺优化、质量控制和服役管理的重要能力模块，并开始面向产业共性问题形成新的解决路径。衡量这一层次的重要标志，是人工智能能否进入真实产业流程，能否与工艺验证、质量评价和服役反馈稳定耦合，并在研发与制造协同中形成持续价值。

从典型方向看，人工智能在产业深化层次的潜在应用包括企业材料研发中的配方设计和实验流程规划、工艺生产中的参数寻优与过程建模、质量环节中的缺陷识别和一致性分析，以及基于数字孪生的“研发—制造—服役”协同优化。这些方向共同指向一个更深层的变化，即人工智能不再只改善材料创新某一个局部环节，而是开始推动材料产业链中信息流、控制流和知识流的重构。从代表性实践看，Berlinguette团队[9]开发的Ada自主实验平台将机器学习决策与机器人实验结合，用于薄膜光伏材料配方和工艺条件优化，展示了闭环自主实验在加速材料研发中的潜力。在质量控制方面，半导体制造中的虚拟量测利用机器学习模型预测薄膜厚度等关键指标，为工艺过程控制提供了数据驱动手段[27]。与此同时，数字孪生与人工智能结合的电池设计和管理框架，正在尝试将材料筛选、制备过程、质量评价和服役管理纳入统一的全生命周期协同优化体系[28,29]。

总体上看，产业深化层次目前仍处于局部探索和前瞻布局阶段，尚未形成大范围系统渗透。这既与材料产业本身复杂性高、可靠性要求高和场景异质性强有关，也与企业数据封闭和流程分割等现实约束有关。只有当人工智能能够稳定进入企业研发、工艺验证、质量评价和服役反馈环节，并与数据、软件、装备、标准和组织流程形成耦合，人工智能赋能材料创新才能真正从科研方法成长为产业能力。

2.4 主要国家和地区发展布局的趋势特征

从国际政策布局视角来看，主要国家和地区正围绕人工智能赋能材料创新加速部署，总体呈现出从基础能力建设向任务导向应用，再向平台化和产业化支撑拓展的态势。

美国的布局起步较早，体系相对完备，引领着“大模型+自动化实验室”的前沿突破，展现出能力奠基、任务牵引与平台协同并重的特点。美国自2011年启动材料基因组计划（MGI）[30]，由白宫科技政策办

公室统筹各联邦机构，奠定了全球材料数字化研发的基础。依托美国能源部下属国家实验室，构建了目前全球应用最为广泛的Materials Project、AFLOW等开放数据库，以及Pymatgen等基础软件工具。近年来，美国进一步迈向“生成式模型+自主实验”阶段。例如，美国Google DeepMind公司发布的GNoME模型预测了超过220万种新晶体结构[8]；美国劳伦斯伯克利国家实验室的A-Lab自动实验室实现了无机化合物合成的机器人全流程自动化[10]，标志着从“计算筛选”到“计算-合成闭环”的重大突破。依托国家实验室与企业的联动，美国初创独角兽Citrine Informatics、计算化学软件企业Schrödinger等企业正推动机器学习和分子模拟向轻质合金和特种高分子的实际研发制造流程融入。

欧洲的布局更注重开放科学、数据治理、跨机构协作，以及可持续标准建设。欧盟依托“地平线计划”（Horizon Europe）等框架，重点资助了欧洲材料建模委员会及欧洲开放科学云平台。欧洲尤其强调FAIR原则①在材料数据治理中的落实，致力于构建覆盖全生命周期的材料数据空间[31]。围绕绿色低碳转型需求，其“电池2030+”计划的标志性项目BIG-MAP明确提出构建网络化的“自驱动实验室”[19]。此外，德国弗劳恩霍夫协会主导的工业数据空间及Catena-X（汽车供应链数据生态）倡议，通过建立制造业数据交换的信任框架，为人工智能向材料制造和回收环节延伸提供了制度保障。

日本和韩国秉持产业实用主义理念，重点围绕半导体、电子材料、电池材料和高端制造等优势领域进行布局，呈现出极强的产业场景牵引特征。在能力奠基层面，日本较早依托国立材料科学研究所建设了涵盖超过3 500万条数据的MatNavi数据库；韩国近年来也通过“K-材料战略”大力推进国家级材料数据平台建设。在应用拓展与产业深化层面，日韩两国更倾向于将重心向过程信息学与工艺优化倾斜。例如，日本丰田、松下等企业在全固态电池与功率半导体研发中广泛运用人工智能优化合成配方；韩国三星SDI与LG化学等企业利用机器学习模型进行正极材料配方优化，显著缩短了实验迭代周期。此外，日本发那科等企业在制造装备中预先设置人工智能质检模块，韩国POSCO公司通过实时采集和分析生产数据支撑智能决策，利用人工智能提炼专家经验，并结合数字孪生开展虚拟验证。其布局特点是面向明确产业场景推进速度较快，但在通用平台供给和开放共享方面相对受限。

中国近年来在“人工智能+”、新材料和新型工业化等政策框架下持续强化布局，整体呈现出基础能力建设与任务导向应用并行、产业深化加速起步的特征。国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项持续推进国家材料数据管理中心、高通量计算与实验平台的建设。“先进结构与复合材料”“战略性电子材料”等专项均将人工智能驱动的设计与优化列为关键任务。在产业层面，宁德时代公司的21C创新实验室也在开展人工智能辅助电池材料的多尺度计算。此外，工业和信息化部等部门发布的《原材料工业数字化转型工作方案（2024—2026年）》正进一步推动该技术向各行业渗透②。总体而言，我国布局力度较大、应用牵引性较强，但在高质量数据积累、底层算法软件，以及跨机构标准体系等方面仍需不断完善。

综合来看，主要国家和地区的布局虽各有重点（表1），但呈现出3个共性趋势。① 普遍将数据基础设施、算法模型、自主实验和软件平台作为能力构建

① 该原则强调：可发现、可访问、可互操作、可重用。

② 工业和信息化部等九部门关于印发《原材料工业数字化转型工作方案（2024—2026年）》的通知. (2024-01-16)[2026-06-01]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/202401/content_6928370.htm.

表1　主要国家和地区人工智能赋能材料创新的布局重点与主要特征

Table 1　Key focus areas and main characteristics of AI-enabled materials innovation in major countries and regions

国家/地区	布局重点	主要特征	典型平台/项目/代表应用
美国	材料基因组、高通量计算大模型、自主实验、先进制造	强调国家实验室体系支撑、底层创新突破与任务导向攻关	MGI计划、Materials Project、GNoME大模型、A-Lab自主实验室
欧洲	开放科学、数据基础设施、绿色能源材料、标准化	强调跨国跨机构协作、规则建设、开放共享和可持续导向	Horizon Europe、材料数据空间(FAIR原则)、Battery2030+、Catena-X
日本和韩国	半导体材料、电子材料、电池材料、流程信息学	强调企业主导、工艺制造协同和产业场景嵌入	MatNavi数据库、全固态电池人工智能研发、POSCO智能工厂与预测性维护
中国	材料数据体系、智能设计、工业软件、原材料数字化转型	强调基础能力建设与任务导向应用并进，产业规模化延伸快	材料基因工程专项、新能源/钢铁智能产线、《原材料工业数字化转型工作方案》

的关键支撑；② 围绕能源转型、先进制造和半导体技术等重大战略任务推动应用拓展；③ 开始探索人工智能向企业工艺优化、制造协同和质量控制等环节渗透。这意味着，人工智能赋能材料创新的全球竞争，正从早期的“单点技术突破”，全面转向“高价值数据获取、软硬一体化闭环迭代系统、通用平台供给与产业工程化衔接”的系统性生态竞争。

3　人工智能赋能材料创新面临的重点问题

人工智能赋能材料创新虽已在若干关键环节取得一定进展，但从整体而言，其发展仍面临着从技术可行性向系统有效性跨越的诸多问题。

3.1　能力奠基层次仍存在技术可靠性短板

尽管人工智能赋能材料创新的关键技术进展迅速，但其能力基础仍不稳固，特别是在数据质量、模型可信性和系统复用性方面存在明显短板。① 高质量、标准化、可共享的材料数据仍较匮乏。材料领域的数据来源复杂、粒度差异大、实验条件敏感，且大量数据分散于论文、专利、实验记录和企业数据库中，难以形成统一可用的高质量训练集[3,4,20,21]。尤其是失败实验数据、过程数据和跨尺度数据长期积累不足，使得模型训练往往基于不完整样本空间展开，影响模型稳健性和泛化能力。② 模型可信性仍有待提高。当前多数模型在训练域内可取得较好预测效果，但在跨体系迁移、跨场景泛化、域外样本识别和不确定性评估等方面仍存在不足[5,15]。仅有高精度而缺乏可信性和物理一致性的模型，难以支撑更复杂的材料决策任务。③ 自主实验平台和科学智能体普遍处于原型验证阶段。现有系统在稳定性、兼容性、模块复用性和跨平台迁移能力方面仍有明显不足，距离形成可广泛部署的通用支撑平台仍有差距。特别值得关注的是，材料领域诸多关键问题呈现出典型的小样本、强机理约束、跨尺度耦合和高实验噪声特性，诸如一些服役失效、复杂界面演化和极端工况行为等问题，在短期内难以凭借单一的数据驱动模型达成稳定的表征。因此，人工智能于材料创新中的有效途径，通常并非脱离理论与实验而独立替代传统方法，而是与物理模型、计算模拟和实验反馈构建混合增强体系。

3.2　应用拓展层次面临验证与推广瓶颈

应用拓展层次的主要瓶颈集中体现在验证深度不足、转化链条不畅和扩展成本较高等方面。① 围绕关键材料问题的深度验证仍显不足。当前不少研究已经展示了人工智能在材料筛选、实验规划和工艺优化中的潜力，但真正面向长期稳定性、服役可靠性、制造一致性和工程安全边界等关键问题的系统验证仍较少。② 材料服役预测和中试验证能力明显薄弱。大量

研究聚焦实验室条件下的短周期性能最优，而对高温、腐蚀、疲劳、循环载荷、复杂界面和制造波动条件下的寿命演化、失效模式和工艺鲁棒性关注不足。与此同时，从原型系统走向中试放大和工程应用，还需面对器件适配、参数放大、过程稳定性、一致性控制和质量评估等复杂问题，现有支撑平台和验证机制明显不足。③ 低成本工具化供给和标准化接口不足。许多系统和平台仍具有较强定制化特征，部署成本高、使用门槛高、复用难度大，制约了其由点到面的推广。

3.3 产业深化层次面临生态与机制约束

产业深化层面所面临的问题，既源于技术本身，也归因于产业生态、组织机制以及制度供给的不足。① 企业端普遍存在数据封闭与流程分割现象。材料研发、工艺优化、质量控制和服役管理通常由不同部门负责，数据口径、存储方式和管理规范缺乏统一性，致使关键数据难以实现贯通。企业对人工智能系统的采纳意愿，受到数据安全、知识产权保护、产品机密泄漏风险，以及质量责任归属不明等因素的影响。特别是在高可靠性材料和关键制造场景中，若人工智能辅助决策引发质量波动或工程风险，其责任边界的划分，以及如何融入现有质量管理体系，仍缺乏成熟的机制。这使得诸多企业即便认可相关技术的潜力，在实际部署时仍保持谨慎态度。② 平台化供给、工业软件和标准规范仍相对薄弱。相关平台和软件大多处于起步阶段，行业通用标准、测试规范和可信评估体系尚不完善，这限制了人工智能在企业中的规模化部署。③ 复合型人才与协同机制匮乏。人工智能赋能材料创新需要既通晓材料科学问题，又熟悉算法、自动化、软件和工程流程的复合型人才。当前，此类人才依旧短缺，围绕数据安全、知识产权、责任边界和治理机制等问题，也需要构建更为清晰的制度安排。受资金投入、数字基础和专业人才储备的限制，中小企业在相关平台、软件和智能化工具部署方面仍面临较高的门槛，这制约了人工智能赋能材料创新从示范应用向行业普及的推进。

4 相关启示

人工智能赋能材料创新不是单项技术的简单叠加，而是能力奠基、应用拓展和产业深化协同演进的系统过程。当前，其发展正处于由概念验证迈向系统化应用的关键过渡期，主要矛盾从前端能力不足逐步转向后端验证、放大、服役和产业嵌入环节薄弱。未来应以关键材料任务为牵引，推动布局重点从单点技术突破转向创新链条贯通，形成覆盖设计、制备、验证、放大、服役和应用反馈的系统能力。

4.1 以关键任务牵引发展

推动人工智能赋能材料创新持续发展，应以关键任务为牵引。材料领域具有问题复杂、验证周期长和应用约束强等特点，仅依靠技术自发扩散难以形成有效突破。应围绕战略性材料和重大应用需求组织有针对性的攻关，推动能力奠基、应用拓展和产业深化形成联动，使人工智能从工具能力、任务能力到体系能力逐步贯通。从任务选择上看，宜优先围绕数据基础较好、评价指标较明确、实验验证链条相对完整、产业需求迫切的方向率先突破，如新能源材料、半导体材料、催化材料、高温合金和高频软磁合金等，在此基础上逐步向验证周期更长、服役环境更复杂的材料方向延伸。

4.2 以服役预测和中试放大贯通创新链条

当前人工智能赋能材料创新整体仍处于由概念验证向系统化应用过渡的阶段，因此需要把服役预测和中试放大支撑体系建设作为重点部署方向。应加强服役环境模拟、寿命评估、失效分析、中试验证和工程评价之间的协同布局，形成从“模型与原型可行”到“中试放大可迁移”再到“真实工况可评估”的连续支撑链条。

4.3 以平台化和标准化支撑低成本扩展

降低进入门槛、提高可复用性，是人工智能赋能材料创新形成规模效应的重要前提。应加强高质量数据基础设施、共享平台、模块化工具链和标准接口建设，推动数据组织、模型调用、实验接口和评价方法的标准化，提高技术在不同团队、不同场景和不同产业环节中的适用性和可获得性。

4.4 以前瞻布局推动产业深化与生态建设

展望未来，需围绕企业研发、工艺优化、质量控制和服役管理等方向进行前瞻性布局，统筹推进平台、软件、标准、人才，以及治理机制的建设。在推进路径方面，可依据企业规模、数字化基础，以及行业特征实施分类布局，优先扶持龙头企业和高价值场景构建示范应用，随后借助标准接口、模块化工具和服务平台向中小企业推广。与此同时，应加速构建人工智能在材料研发与制造环节的可信评估、责任界定，以及合规治理机制，增强企业部署预期的稳定性。尤其是在工业软件、可信评估和数据治理等领域加大前瞻性投入，有助于为人工智能深度融入材料产业体系创造条件，提升材料领域创新链与产业链的协同水平。

参考文献

1 Schmidt J, Marques M R G, Botti S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. NPJ Computational Materials, 2019, 5: 83.

2 Butler K T, Davies D W, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science. Nature, 2018, 559: 547-555.

3 Wang A Y-T, Murdock R J, Kauwe S K, et al. Machine learning for materials scientists: An introductory guide toward best practices. Chemistry of Materials, 2020, 32(12): 4954-4965.

4 Himanen L, Geurts A, Foster A S, et al. Data-driven materials science: Status, challenges, and perspectives. Advanced Science, 2019, 6(21): 1900808.

5 Zunger A. Beware of plausible predictions of fantasy materials. Nature, 2019, 566: 447-449.

6 Xie T, Grossman J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Physical Review Letters, 2018, 120(14): 145301.

7 Chen C, Ye W, Zuo Y, et al. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals. Chemistry of Materials, 2019, 31(9): 3564-3572.

8 Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery. Nature, 2023, 624: 80-85.

9 MacLeod B P, Parlane F G L, Morrissey T D, et al. Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. Science Advances, 2020, 6(20): eaaz8867.

10 Szymanski N J, Rendy B, Fei Y, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials. Nature, 2023, 624: 86-91.

11 Burger B, Maffettone P M, Gusev V V, et al. A mobile robotic chemist. Nature, 2020, 583: 237-241.

12 Tshitoyan V, Dagdelen J, Weston L, et al. Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature. Nature, 2019, 571: 95-98.

13 Kononova O, Huo H, He T, et al. Text-mined dataset of inorganic materials synthesis recipes. Scientific Data, 2019, 6: 203.

14 Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, et al. Physics-informed machine learning. Nature Reviews Physics, 2021, 3: 422-440.

15 Agrawal A, Choudhary A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. APL Materials, 2016, 4(5): 053208.

16 Sanchez-Lengeling B, Aspuru-Guzik A. Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering. Science, 2018, 361: 360-365.

17 Noh J, Kim J, Stein H S, et al. Inverse design of solid-state materials via a continuous representation. Matter, 2019, 1(5): 1370-1384.

18 Deng B, Zhong P, Jun K, et al. CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. Nature Machine Intelligence, 2023, 5:

1031-1041.

19 Häse F, Roch L M, Aspuru-Guzik A. Next-generation experimentation with self-driving laboratories. Trends in Chemistry, 2019, 1(3): 282-291.

20 Attia P M, Grover A, Jin N, et al. Closed-loop optimization of fast-charging protocols for batteries with machine learning. Nature, 2020, 578: 397-402.

21 Severson K A, Attia P M, Jin N, et al. Data-driven prediction of battery cycle life before capacity degradation. Nature Energy, 2019, 4: 383-391.

22 Bush V. Science, the Endless Frontier. Washington DC: United States Government Printing Office, 1945.

23 Kline S J, Rosenberg N. An overview of innovation// Landau R, Rosenberg N, eds. The Positive Sum Strategy: Harnessing Technology for Economic Growth. Washington DC: National Academy Press, 1986: 275-305.

24 Lundvall B-Å. National Systems of Innovation: Towards a Theory of Innovation and Interactive Learning. London: Pinter Publishers, 1992.

25 Mazzucato M. Mission Economy: A Moonshot Guide to Changing Capitalism. London: Allen Lane, 2021.

26 Tao F, Zhang H, Liu A, et al. Digital twin in industry: State-of-the-art. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2019, 15(4): 2405-2415.

27 Khan A A, Moyne J R, Tilbury D M. Virtual metrology and feedback control for semiconductor manufacturing processes using recursive partial least squares. Journal of Process Control, 2008, 18(10): 961-974.

28 Lombardo T, Duquesnoy M, El-Bouysidy H, et al. Artificial intelligence applied to battery research: Hype or reality?. Chemical Reviews, 2022, 122(12): 10899-10969.

29 Wu B, Widanage W D, Yang S, et al. Battery digital twins: Perspectives on the fusion of models, data and artificial intelligence for smart battery management systems. Energy and AI, 2020, 1: 100016.

30 National Science and Technology Council. Materials Genome Initiative for Global Competitiveness. Washington DC: Executive Office of the President, 2011.

31 Commission European. Advanced Materials for Industrial Leadership. Brussels: European Commission, 2024.

Artificial intelligence-enabled materials innovation: Implementation levels and strategic layout

ZHAO Ziwei[1,2] ZHOU Fengxiang[1,2*] ZHOU Yanglili[1,2] WANG Can[1] ZHANG Pei[1] WANG Weihua[1*]

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

2 Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523830, China）

Abstract Materials innovation has long been constrained by vast design spaces, complex processing routes, lengthy validation cycles, and difficulties in engineering translation. Traditional research and development models, which mainly rely on accumulated experience, theoretical deduction, and experimental trial and error, have become increasingly insufficient to meet the demand for rapid breakthroughs in critical materials. In recent years, artificial intelligence has been increasingly integrated into materials design, synthesis, and processing, characterization, evaluation, optimization, and application feedback, promoting the transformation of materials innovation from experience-driven exploration to data-driven development and from discrete trial and error to closed-loop

*Corresponding author

optimization. Based on an analysis of the evolution of materials science research paradigms and technological innovation paradigms, this study proposes a three-level implementation framework for artificial intelligence-enabled materials innovation, namely, “capability foundation—application expansion—industrial deepening”. It further examines the development trends, major challenges, and system-level layout directions in this field. Overall, artificial intelligence-enabled materials innovation is currently in a transitional stage from proof of concept to systematic application. Front-end links such as materials property prediction, candidate screening, inverse design, and literature-based knowledge extraction have developed rapidly, whereas complex materials synthesis, experimental validation, service performance prediction, pilot-scale scale-up, and industrial process embedding remain major bottlenecks. In the future, it is necessary to promote coordinated development across the three implementation levels under the guidance of critical materials tasks, strengthen the innovation chain through synthesis validation, service performance prediction, and pilot-scale scale-up, and support large-scale expansion through platform-based and standardized systems.

Keywords artificial intelligence, materials innovation, systematic layout

赵紫威　中国科学院东莞材料科学与技术研究所高级工程师。主要研究领域：产业集群治理、科技创新政策、空间统计。
E-mail: zhaoziwei@dimst.ac.cn

ZHAO Ziwei Senior engineer of Dongguan Institute of Materials Science and Technology, Chinese Academy of Sciences. Her research focuses on industrial cluster governance, science and technology innovation policy, and spatial statistics.
E-mail: zhaoziwei@dimst.ac.cn

周凤翔　中国科学院东莞材料科学与技术研究所工程师。主要研究领域：材料计算。E-mail: zhoufengxiang@dimst.ac.cn

ZHOU Fengxiang Engineer of Dongguan Institute of Materials Science and Technology, Chinese Academy of Sciences. Her research focuses on computational materials science. E-mail: zhoufengxiang@dimst.ac.cn

汪卫华　中国科学院院士。中国科学院东莞材料科学与技术研究所所长、研究员。主要研究领域：非晶合金材料、非晶态物理等。E-mail: whw@dimst.ac.cn

WANG Weihua Academician of Chinese Academy of Sciences (CAS). Director and professor of Institutes of Dongguan Institute of Materials Science and Technology, CAS. Dr. Wang’s research focuses on amorphous matter, amorphous state physics, etc.
E-mail: whw@dimst.ac.cn

■责任编辑：文彦杰