

新材料研发智能化技术发展研究

宿彦京^{1*}, 杨明理², 祝伟丽³, 周科朝⁴, 薛德祯⁵, 汪洪⁶, 谢建新¹

(1. 北京材料基因工程高精尖创新中心, 北京 100083; 2. 四川大学材料基因工程研究中心, 成都 610065; 3. 北新集团建材股份有限公司, 北京 102209; 4. 中南大学粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083; 5. 西安交通大学材料科学与工程学院, 西安 710049; 6. 上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240)

摘要: 新材料研发智能化技术发展迅速, 显著增强了材料研发效率及工程化应用水平, 获得国际性的高度关注。我国在此领域发展相对滞后, 基础设施条件面临缺口, 制约着新材料原始创新及产业发展质量。本文总结了新材料研发智能化涉及的关键技术, 从技术角度梳理了国内外发展现状, 分析了我国新材料研发智能化面临的挑战; 阐述了新材料研发智能化技术体系框架, 包括材料智能计算设计技术与核心软件、材料自主/智能实验技术与高端装置、材料人工智能基础算法及关键技术、材料数字孪生、材料智能化研发平台与协同创新网络等。提出了创新生态构建及保障、产业化发展环境、数据底座与标准体系、人才培养与国际合作方面的举措建议, 以期推动新材料研发智能化技术体系的发展与应用。

关键词: 新材料; 人工智能; 自主实验; 智能计算; 材料大数据

中图分类号: TB3 **文献标识码:** A

Development of Key Technologies for Intelligent Research and Development of New Materials

Su Yanjing^{1*}, Yang Mingli², Zhu Weili³, Zhou Kechao⁴, Xue Dezhen⁵,
Wang Hong⁶, Xie Jianxin¹

(1. Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, Beijing 100083, China; 2. Research Center for Materials Genome Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 3. Beijing New Building Materials Public Limited Company, Beijing 102209, China; 4. State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China; 5. School of Materials Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 6. School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The rapid development of key technologies for the intelligent research and development (R&D) of new materials has significantly promoted the R&D efficiency and industrialization of materials and attracted global attention. China's development in this field lags behind the advanced international level in terms of key technologies and infrastructures, which has restricted the original innovation and industrial development of the material sector. This study summarizes the key technologies involving the intelligent R&D of new materials, explores the developing status of these key technologies in China and abroad, and analyzes the challenges faced by China. Moreover, the intelligent R&D technology system is summarized including intelligent computing and design technologies and software, autonomous/intelligent experiment technologies and equipment, artificial-intelligence-driven basic algorithms and technologies, digital twins, intelligent R&D platforms and collaborative innovation networks. Furthermore,

收稿日期: 2023-03-05; 修回日期: 2023-05-15

通讯作者: *宿彦京, 北京材料基因工程高精尖创新中心教授, 研究方向为材料大数据技术; E-mail: yjsu@ustb.edu.cn

资助项目: 中国工程院咨询项目“新材料研发与制造应用智能化战略研究”(2021-JJZD-01)

本刊网址: www.engineering.org.cn/ch/journal/sscae

countermeasures are proposed from the aspects of innovative ecology construction, industrial environment improvement, standards system establishment, talent training, and international cooperation.

Keywords: new materials; artificial intelligence; autonomous experimentation; intelligent computing; big data of materials

一、前言

新材料是经济社会发展的物质基础，高新技术和高精尖产业发展的先导。发达国家高度重视新材料研发和产业化发展，提出了一系列旨在加速新材料发展的研究计划^[1-6]，推动了大数据、人工智能(AI)技术在材料领域的应用，逐步构建了新材料研发智能化技术体系，正在形成有利于智能化关键技术研发与应用的科技、社会、市场生态。未来5~10年，新材料研发智能化将成为材料领域主要的发展模式，相应关键技术发展程度、基础设施与支撑平台建设水平、多学科交叉的复合型人才培养质量，将决定新材料领域原始科技创新能力，对高新技术发展产生深远影响。

新材料研发智能化以材料大数据为基础、AI为核心，融合材料计算设计和实验技术以开展材料高维空间全局寻优^[7]；通过材料研发-生产-应用全链条的协同创新和一体化发展，显著提升新材料研发和应用效率。构建高效计算设计、先进实验、大数据、AI等融合的新材料研发智能化技术体系，是变革材料研发模式、提高新材料工程化应用水平、推动材料产业高质量发展的有效途径；建设材料数据资源体系、智能化研发基础设施支撑体系，将筑牢新材料研发智能化的发展基础，促进材料信息化、数字化、智能化发展。上述举措的实施，有助于破解高新技术、高端关键材料“卡脖子”困境，增强关键材料和高端构件自主保障能力。

近10年来，新材料智能化技术发展迅速，颠覆了新材料的研发理念和模式。例如，机器学习与材料计算融合，有望突破材料跨尺度计算难题，实现材料多尺度、全流程的智能化计算模拟和设计；AI与材料实验融合，推动实验技术朝着自动化、自主化、智能化方向发展，提升了新材料实验发现及验证的效率与水平；大数据和AI在新材料研发中的广泛应用，推动了材料研发技术、研发范式的变革，为实质性解决材料研发效率低下这一瓶颈提供了新途径。

本文针对新材料研发智能化技术体系构建问

题，梳理国内外发展现状，分析面临的发展挑战，提出技术体系构建途径以及支持发展的举措建议，以为新材料研发智能化的技术实践与管理研究提供基础参考。

二、新材料研发智能化技术国际研究进展

(一) 材料智能计算设计技术及软件

随着材料计算理论及相应算法的发展、计算机算力的提升，材料计算已经贯穿新材料研发的整个流程，成为新材料理性设计的重要手段和基础技术；支持材料物理和化学机制探索，建立材料成分-结构-性能之间的构效关系；支持材料成分筛选、结构设计、工艺优化，提高发现新材料的效率；支持材料性能优化、寿命预测，加速产品研发迭代并促进工程化应用。材料计算模拟与AI融合，提高了材料计算在新材料研发过程中的贡献度，相应研究范围持续拓宽，从解释实验、预测实验发展到替代实验，研究对象趋向多尺度、复杂和真实体系，应用范围从新材料研发链扩展到生产链、应用链。

AI技术快速融入材料计算，在多尺度计算、高通量计算、集成计算等方面进展明显。使用大数据和机器学习方法改进泛函，提高了密度泛函理论的计算精度和适用性^[8]。利用第一性原理计算的数据，通过机器学习构建原子间的作用势，已获得广泛应用^[9]。例如，基于第一性原理计算、深度神经网络、支持向量机等方法，构建碳的亚稳态物质相图并确定亚稳态材料的相对稳定性与合成域，为材料非平衡动/热力学计算、亚稳态材料设计提供了新手段^[10]。将数据驱动材料建模的思路应用到多尺度仿真框架，发展了多尺度有限元方法，提高了结构分析的计算效率，应用到纤维增强塑料等复合材料开发^[11]。机器学习在材料集成计算工程的多个方向获得应用，如材料微结构表征、多尺度建模、高保真数据生成及传递、基于数字孪生的智能制造等^[12]。

(二) 材料自主/智能实验技术及装置

AI与实验的深度融合，推动材料实验朝着自动

化、自主化、智能化方向发展,孕育着材料实验技术的新变革。世界首套材料自主研究系统(ARES)^[13]具有近100次/天的实验通量,与高效原位表征技术、逻辑回归算法降维参量网格相结合,从影响碳纳米管生长的10维参数网络中筛选出了决定碳纳米管壁层数的温度和烃压条件,按照不同的预设生长速率可控制备碳纳米管。基于ARES的增材制造自主实验系统^[14],与注射器挤压打印成型技术、云端机器学习优化算法相结合,通过自主调节打印参数实现单层打印特征的直接写入,在不到100次实验迭代后完成预定的打印目标。基于即插即用模块的连续流动化学合成系统^[15],将流动化学合成过程分解为可自由排列组合的模块,根据用户需求自由选择试剂、反应器、分离器、反应过程表征等模块,具有远程启动、监控进度、分析结果的能力,可依据测试结果进行自动优化。

被称为“移动化学家”的自主实验系统^[16],将激光扫描、触摸反馈组合,实现实验室空间内的精确定位(空间精度为 ± 0.12 mm,取向精度为 $\pm 0.005^\circ$);可同时响应10个维度的变量,在8天内自主完成688个实验,获得了一种新型的化学催化剂。针对多个材料性能目标进行协同优化的自主实验系统^[17],可消除人员先验知识对相互冲突材料性能指标的主观偏向,实现多性能参数的协同平衡优化,使材料具有良好的综合性能。自主实验系统的应用,能够高效完成多维参量空间内的研究工作,应对更为复杂、高维化的新材料研发需求,使新材料的发现效率表现为类“摩尔定律”^[18]。

(三) 数据驱动的材料研发与数字孪生

以材料大数据为基础、AI为核心的新材料研发智能化,孕育着材料科技和产业的变革,成为颠覆性前沿技术。多个国家从抢占未来科技制高点的角度,前瞻布局材料数据基础设施建设,积极研发材料AI核心软件。针对材料数据多源、多模态、多粒度、多维度的特点,研究材料数据存储技术、数据交换标准与协议、云资源管理技术等^[19]。应用非关系型数据库技术,提升材料数据存储系统的可扩展性,便于数据的个性化表达、高效存储及检索^[20]。基于自然语言处理算法^[21]实现机器的语义知识理解,直接从科技文献等文本语言中获取材料知识,支持新材料预测和发现。

以主动学习、贝叶斯优化为代表的自主决策技术,在对巨大材料探索空间进行有效采样的基础上,以较少的实验验证和迭代即可筛选出具有最优目标性能的材料,成为数据驱动新材料研发的通用技术策略。深度学习用于挖掘材料的复杂构效关系,提高新材料的发现效率。利用具有广泛适用性的主动学习框架^[22],从数百万种高熵合金成分中开发了2种高熵因瓦合金(300 K时热膨胀系数极低),展示了主动学习框架在小样本数据条件下、广域空间内优化多目标性能的潜力。基于神经网络的深度学习框架,能够预测数十种新的晶体结构及相应的分子材料特性^[23],逆向生成分子合成路线以显著提升搜索效率^[24]。

将数字孪生技术用于复杂材料/器件服役性能优化,可完善材料/工艺的理性设计,驱动上游材料设计、下游制造过程的革新。以计算-实验-数据技术融合为特征的材料基因工程是解决新材料研发和应用效率低下问题的有效方法,大数据、AI等技术的应用更显成效突出^[25]。

(四) 材料研发智能化平台和基础设施

建设网络化协同的材料研发智能化平台、基础设施等条件,是新材料研发智能化技术发展、规模化应用的直接需求。以美国材料基因组计划为例,实施初期(2011年)拟建15个创新平台,2015年扩大到45个,多个领域的科研机构、企业等参与创新平台建设;在自然科学基金会的支持下,建设界面材料分析发现、二维晶体材料、生物高分子材料、聚糖材料等智能化创新平台,革新材料制备/加工、表征/评价、理论/建模/仿真等研发模式及支撑条件^[26],形成工具、代码、样本、数据、技术共享的良好生态。美国国家标准与技术研究院牵头,集成近百家科研机构和企业的数据、代码、计算工具等资源与服务,开发“材料资源注册系统”“材料数据管理系统”以支撑材料协同创新网络,实现材料高通量实验数据采集、计算建模软件工具的高质量集成,引领国际材料数据基础设施的发展;AI和机器学习应用到企业的89个项目,获得了可观的投资回报^[27]。

材料加速平台^[28]应用于清洁能源材料研发,取得了重要进展。融合AI模型、实验机器人、自主决策软件、数据库以及人工经验,基于自主实验的

闭环反馈过程来调度各类算法，开展实时数据交互；机器人自动执行实验，自动调用数据训练机器学习预测模型，自主执行新的实验，形成反馈迭代和循环，以此快速发现新材料。建设材料加速平台的关键技术有^[29]：智能化的自驱动研发闭环系统、可组装多种制备表征手段的模块化材料机器人、跨时空尺度的材料计算模拟方法、适应材料研发特点的AI算法、支撑自主实验的逆向设计方法、先进的数据基础设施及交换平台等。材料智能化平台和基础设施建设将释放材料科学发现的“摩尔定律”效应，加速材料研发速度至少10倍^[29]。

三、我国新材料研发智能化技术发展与应用现状

在“十三五”国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”的支持下，以高通量计算设计、高通量实验、大数据为代表的材料基因工程技术取得突破^[30,31]。相关进展推动了新材料研发理念的深刻转变，促进了材料研发技术体系的革新发展，提高了大数据、AI技术在材料研发中的应用水平，为新材料智能化发展和关键技术研发奠定了基础。

（一）材料高通量 / 智能计算与平台

开发了ALKEMIE、MatCloud、MIP、CNMGE等高通量/集成计算软件，具备微观-介观-宏观多尺度、并发式、自动流程的计算能力，推动材料高通量计算设计技术进入国际先进行列。在天津、长沙、广州等国家超级计算中心建立了材料高通量计算平台，提供高通量计算、数据处理一体化技术，支持用户在互联网、云计算环境下开展大规模计算的远程信息交互，为材料智能计算技术的快速发展筑牢了基础。

利用AI技术构建了高精度的泛函，发展了深度势与高通量计算相结合的机器学习方法，据此预测出拓扑绝缘体、催化材料、二维材料等前沿材料。中国科学家参与的“深度势能”国际团队，结合分子建模、机器学习、高性能计算，将具有从头算精度的分子动力学模拟极限提升至 1×10^8 个原子规模（原本需要60年时间的计算任务压缩为1天），获得国际高性能计算应用领域最高奖（2020年）。

尽管目前我国智能计算仅集中在部分材料方向，但表现出的技术先进性和应用优势，为未来全面实现AI与材料计算融合积累了有益经验。

（二）材料高通量 / 自主实验与平台

研发了薄膜、粉体、块体、复合材料等的高通量制备技术和30余种关键装置，涵盖材料芯片、粉体阵列，凝固、锻造、热处理等工艺，提高了新材料的实验筛选及发现效率。研发了材料高通量表征、服役行为评价技术及装置，基于同步辐射的高通量白光阵列散/衍射技术可提高材料成分、结构表征速率约100倍。建立了网络化的材料高通量制备实验平台，技术及装备水平达到国际领先。

面向新材料自主研发与智能发现的需求，研发了固液异相的自动化、数字化反应平台，整合了基于操作栈的硬件环境、由化学方案描述的语言层、数字化控制系统，可控制无人值守数字化实验流程，为自主实验系统构建确立基础。集成移动机器人、化学工作站、智能操作系统、数据库以构建数据智能驱动、覆盖全流程的“机器化学家”平台，实现大数据、智能模型共同驱动的化学合成-表征-测试全流程的自主化，形成的智能研发能力可用于光催化与电催化材料、发光分子、光学薄膜材料等。

（三）材料大数据技术与平台

研发了基于无模式存储技术的材料数据库系统软件，建成了“数据采集-数据库-数据挖掘-材料设计”一体化的数据库示范平台，用于不同层次材料数据的累积和共享。基于云技术，实现材料数据库的统筹管理和集中开放共享，具有物理分散、逻辑统一、多节点融合的特征。相关数据库技术和软件在企业、科研院所的广泛应用，为规模化建设材料数据基础设施、材料数据网提供了技术和软件支撑。

数据驱动的新材料研发技术发展较快，率先在高性能金属材料^[32-34]、高熵合金^[35-37]、高温合金^[38,39]等的研发上取得应用突破，部分实现了工程转化和应用。整体来看，我国材料AI应用技术达到国际先进水平。

（四）应用成效

材料基因工程、智能化技术在前沿新材料探索

与发现方面获得重要进展。利用材料高通量计算和数据技术,在近 4×10^4 种材料中发现了8000余种拓扑材料,超出历史上发现拓扑材料数量的10倍^[40,41]。发现了新型无机塑性半导体 Ag_2S 、 InSe ^[42],研制出兼具良好塑性与优异热电性能的 Ag_2S 基无机半导体材料,开辟了无机塑性半导体和无机柔性热电器件的新方向。研发出国际上使用温度最高、强度最高、具有良好热塑性成形性能的高温块体金属玻璃 Ir-Ni-Ta-(B) ^[43]。

在高端关键材料研发和工程化应用方面也取得了一系列进展。基于高通量制备与表征、数据挖掘等技术,开发了用于强光照明光源器件的高热导率 Ce:YAG 荧光陶瓷,使可量产光源芯片的功率、光通量等指标超过国际先进水平。开发了高性能铈基稀土永磁材料,形成5000吨级产能,促进了高丰度稀土的平衡利用。自主研发了新型结构分子筛催化材料,其反应活性、选择性超过国外同类产品,在超大型乙苯生产装置上实现工业应用。应用包括高通量计算、高通量实验、组织性能预测、工业应用在内的全链条技术,研制了铝基复合材料及大尺寸构件,在重大空间装备上实现在轨应用。材料基因工程技术加速了钛基合金结构件的研制过程及工程化,部分构件率先实现工程应用。研制的耐热腐蚀镍基单晶高温合金叶片应用于国产重型燃气轮机,高强耐热镁合金、舱体铸件等通过工程试验考核。

四、我国新材料研发智能化技术发展面临的挑战

新材料研发智能化技术的兴起和发展,为我国材料科技和产业带来了机遇、创造了条件。虽然我国在此领域取得了可喜进展,部分技术甚至达到国际先进水平,但整体来看在思想理念、关键技术、基础设施、应用范围等方面仍存在若干不足;关键技术、核心软件受制于人的局面并未实质性化解,部分新兴领域和重要方向尚属空白。面向材料领域中长期的高质量发展要求,新材料研发智能化技术攻关面临严峻挑战。

(一) 材料研发模式变革滞后于智能化技术发展

在我国,传统的“经验+试错”研发理念及模式仍是材料科技和产业的主流。针对新材料研发的

战略布局不明晰、资源保障缺乏稳定性,以“智能化”为核心要素的高水平团队和领军人才不充足,都导致系统性变革新材料研发理念及模式的条件仍不具备,材料智能化技术的综合水平仍滞后于国际先进。世界主要工业强国积极推动材料智能化发展,加速变革材料研发及应用模式,建立了新的比较优势;在此背景下,我国材料行业参与国际市场竞争面临着增量阻碍,与这些工业强国材料研制能力差距加大的风险不容忽视。

(二) 材料研发智能化关键技术存在明显短板

我国材料计算设计关键软件长期依赖进口的局面并未打破,国产软件虽有提升但差距依然存在,自主保障的能力和水平不够。在材料数据库建设方面,碎片化、孤岛化现象突出,数据生产、管理、共享的机制与模式不健全;加之数据基础设施建设存在统筹规划和部署不深入的情况,使材料计算软件、数据资源规模等成为材料创新发展“短板中的短板”。具有实力、长期坚持软件开发及数据库建设等基础性工作的科研队伍不够稳定,资源投入的连续性不足,市场化和商业化发展生态有待形成,制约了材料计算核心软件自主研发、数据资源整合的推进步伐,成为新的国际竞争形势下材料领域发展的隐患与掣肘。

(三) 材料研发智能化关键装备存在受制于人的风险

我国材料科学研究、新材料研发所需的高端装备较多依赖进口。既需要高额的资金投入,也很难直接获得国际一流的高端装备,不利于材料科技原始创新和重大突破。AI技术与材料研发装备的融合趋势,蕴含着新一代高端装备的出现机遇以及对传统技术与装备的替代性。在此背景下,自主实验高端装备、智能软件的国际市场蓬勃发展,新的装备市场准入条件正在形成。相比之下,我国新一代高端装备和智能软件的市场化发展节奏较慢,若不及时加速,可能再次受制于人。

(四) 材料研发智能化基础设施缺口严重

工业强国推动材料研发智能化技术发展及工程化应用,重在围绕颠覆性前沿材料、智能化关键技术研发等目标,建设国家级材料数据网络、“计

算-实验-数据”技术融合且网络协同的创新中心，据此革新材料研发模式、加速新材料应用。相比之下，我国没有在新材料智能化研发创新平台、融合创新中心建设等方面开展系统布局，相关基础设施的历史投入和新增投入均不足，不利于跨学科、有组织的协同创新，制约了材料智能化技术攻关和规模化应用。

五、我国新材料研发智能化技术体系的构建途径

（一）材料智能计算设计技术与核心软件

1. 面向新材料研发的计算设计技术与核心软件
发展从微观、介观到宏观尺度的材料体系计算方法、算法和核心软件，建立涵盖原理、方法、算法、软件、应用的开发链和发展生态。研究适用于特定材料体系的计算新方法，凸显技术特色、建立技术优势。开发基于 AI 的跨尺度计算方法，拓展跨尺度计算的应用范围。

2. 面向材料制备加工、产品制造、服役评价的模拟仿真技术与应用软件

研究多物理场与材料交互作用原理，开发材料制备及加工工艺优化、产品制造流程模拟、多场耦合作用材料服役行为及失效过程的计算模拟技术与应用软件。面向材料研发链、生产链、应用链，按照集成计算材料工程的顶层设计和架构设计，建立支持材料全生命周期的计算模拟系统。

3. 材料智能计算核心算法与软件

研发材料高通量计算与 AI 相结合的基础算法及软件，构建功能完善的高通量智能计算系统。针对材料结构和性能，开发高效计算 workflow，适应新材料设计和筛选的多样性、专业化、高效率需求。面向新材料设计、制备、加工、服役等工程应用以及融合 AI 技术的需求，发展自主设计、筛选、迭代算法，建立集成计算材料工程核心软件和工业软件。

（二）材料自主/智能实验技术与高端装置

1. 材料自动/自主高通量实验技术与装置

发展形态、合成工艺各异的材料高效制备新原理、新方法、新技术、新装备，优化高通量实验装备的软硬件功能，从原型机发展为商用装备。发展

材料自主实验机器人以及相关的强化学习、材料实验自主决策算法与控制、复杂长流程制备及表征一体化的材料自主实验等技术，开发标准化、商业化的材料自主实验装置。

2. 材料自动化表征技术与装置

应用先进光源、电子显微技术，开发基于四维电子显微镜、原位透射及扫描电镜的高通量表征技术。研发系列材料高效表征技术和装备，具有高时间分辨表征、跨尺度动态表征、超快同步辐射高通量衍射与成像、同步辐射多场耦合高通量表征、中子衍射三维成像等能力。

3. 工程构件高效表征技术与装备

基于先进光谱、质谱、能谱、磁探测、应力/应变检测、电镜、先进光源等实验装置，开发空间尺度覆盖纳米至米级的材料及构件全域高通量表征技术。发展材料大尺寸全域成分-结构-工艺-性能-服役的原位统计映射模型，提升材料产品、工程构件的表征能力。

4. 极端复杂环境材料服役行为智能评价装备

发展极端复杂环境材料服役行为、失效过程的计算模拟与机器学习技术，基于数字孪生的材料服役与失效智能评价及预测技术，提升加速模拟实验的等效性。研发多环境因素耦合材料服役行为高效评价、损伤演化的多尺度关联实验技术，提高材料服役行为评价实验效率和寿命预测准确度，加速新材料的工程化应用。

5. 材料智能实验和操作系统

发展材料实验数据自动采集、处理分析、实时交互，设备互联与组网等技术，开发网络化协同、模块化调度的材料智能实验操作系统。通过自主实验的互联互通、网络协同，实现材料制备-表征-评价全链条的自主化；通过计算-实验-数据的交互与融合，实现材料研发全流程的智能化。

（三）材料 AI 基础算法及关键技术

1. 材料机器学习基础理论与核心算法

研究材料多体问题计算、跨尺度关联、多尺度耦合的机器学习理论，发展材料晶体结构深度图神经网络、可解释性图表示学习方法。研究材料多模态数据表示学习算法、材料知识推理及因果关系挖掘算法，形成数据驱动的机器学习、知识驱动的符号计算相融合的新材料发现与知识构建方法。

2. 数据驱动新材料研发通用算法与软件

发展适应材料小样本、高噪声数据的机器学习算法，研发高维搜索空间和广域探索空间内的多目标全域优化技术。针对材料组织结构图像，研发深度学习和图像生成/优化的通用算法及应用软件。针对材料多尺度、多过程耦合的高维数据，开发机器学习通用软件。

3. 面向 AI 应用的材料大数据技术

研发多渠道分散采集、多时序离散存储、多维度统合关联的材料大数据采集、处理、存储技术，多数据库节点融合且统一服务的混合云架构，材料大数据区块链与多中心化管理技术。攻关多源异构数据集成表示技术，建立适用于 AI 应用的材料数据库体系结构及数据库软件，促进材料数据资源的整合与应用。

4. 材料数字孪生技术

开发材料数字孪生技术，实现“智能计算-数据建模-自主/智能实验”数据的实时双向交互能力。攻关材料按需设计、逆向设计、全过程综合优化等新兴技术，以计算-实验-数据融合支撑材料多尺度和全过程的智能化一体设计、全流程多目标协同优化。

(四) 智能化研发平台与协同创新网络

1. 材料计算设计平台

依托国家超级计算中心体系的计算资源，建设材料高效计算国家、区域、专业、行业平台，自主发展材料多尺度计算、高通量计算、集成计算等材料软件，面向计算流程优化、计算数据分析等专门 AI 软件。发展材料全流程模拟和仿真技术，覆盖材料发现、设计、开发、生产、服役等环节；建立国家材料计算平台网格共享系统，支持计算资源的高效共享。

2. 基于大科学装置的材料高通量表征平台

依托先进光源、散裂中子源等大科学装置，针对材料成分及结构的超快表征、损伤演化动态原位表征等需求，开发高时空分辨技术和装置。研发海量实验数据高效处理、基于机器学习的材料三维精准成像等技术以及图像深度学习算法及软件，实现材料微观结构及损伤演变规律的跨时空、多维度、高效率的表征与评价。

3. 材料数据基础设施和国家材料数据网络

开发多源异构材料数据自动处理技术，发展数据采集、存储、挖掘、应用一体化的大数据云平台技术，建设面向 AI 应用的材料数据基础设施。应用区块链、AI 等技术，建立材料数据标识、引用、评价、交易技术及相应标准，形成材料数据生产、管理、共享机制。探索建立数据商业化发展模式，建设国家材料基础设施和数据网络。

4. 材料研发智能化创新中心与协同创新网络

突破数据共享、资源共享、知识共享、任务分担、价值分配、网络互连、信息安全等方面的技术和机制瓶颈，以网络化互联互通材料计算设计平台、数据基础设施、智能实验系统支撑实现材料研发智能化关联技术与人力资源的高效协同。建设材料研发智能化创新中心、材料智能化协同创新网络，支持团队化的技术协作，有组织地开展科研技术攻关。

六、支撑新材料研发智能化技术体系发展的措施建议

(一) 完善创新生态并给予稳定支持

发挥新型举国体制优势，采取“整体部署、分步实施、分层落实”策略，可在国家自然科学基金设立专项以支持基础理论研究，在国家各类科技计划中设立相应研发专项以促进关键技术攻关，在各类创新平台部署智能化研发内容以系统性强化新材料研发智能化技术应用。探索构建协同创新发展模式，形成多层次协作共享、多平台融汇贯通的生态环境。实施“国家材料基因工程计划”，加速材料智能研发理念变革，提供持续性的资源保障，为基础理论研究、共性关键技术研发、国家材料数据基础设施建设创造条件。适时发布促进新材料智能技术研发和应用的政策文件，支持地方参与新材料研发智能化专业技术和工程应用平台建设，鼓励金融机构和各类基金参与计算软件、数据库、高端装置发展，提高新材料研发智能化的商业化水平。

(二) 构建全面协同的产业化发展环境

全面布局国产材料核心软件的研发工作，加快材料智能化核心技术的研发进度，优选亟需的高端关键材料开展示范应用，提高智能化研发关键技术

的工程化应用水平。培育新材料研发智能化高端装置、核心软件商业化发展与应用的市场生态，推动国产装备和软件的标准化发展、规模化应用，确保关键技术、核心软件与装备的自主可控。发布激励性的税收优惠政策，支持材料企业数字化、智能化发展，促进科研与产业的深度融合；探索建立新材料智能化研发和应用的激励机制，注重基础研究层面激励的有效性，确保从事数据库建设、软件开发等基础性研发队伍的稳定性。可由行业龙头企业牵头成立新材料研发智能化专项基金，建立灵活的领投和跟投机制，发挥基金的引导和撬动效应；灵活实施股权投资、贷款贴息等投入方式，解决科研成果因关键保障不足而难以应用转化的问题。加强领域内外学术交流，探索技术融合、协同创新的新机制，创建科技成果高效转化模式，发挥新材料研发智能化技术的价值。

（三）加强数据底座和标准体系建设

明确顶层设计、实施整体布局，建立材料科技数据、产业数据的生产与采集网络，形成国家材料数据资源和技术体系，提高材料数据的资源整合、融通共享、赋能应用水平，扎实构建新材料研发智能化的数据底座。制定新材料研发智能化相关的国家标准，针对技术细分方向优化标准建设路径，支撑行业规范发展。开展新材料研发智能化产业的标准化试点，以优质示范提高标准化水平。制定符合新材料研发智能化发展特点的知识产权政策，加强知识产权保护力度，尤其是重大发明专利、商标等知识产权的申请/注册/保护，鼓励我国企业申请国际专利。

（四）优化人才培养并深化国际合作

推动革新材料科学与工程教育体系，加快形成材料科学理论、AI、数据科学等有机融合的学科新体系，据此革新材料人才培养模式。优化材料科学与工程本科教育，设立材料研发智能化系列课程，强化与AI、数据技术等课程的交叉融合；增设新材料研发智能化研究生专业方向。打通分散学科，批量培养复合型材料创新人才，壮大多学科交叉融合的协同创新队伍。开展面向科技管理人员的专题培训，让智能化研发理念深入科技管理层面，促成材料产业发展文化和理念的根本性转变。与此同时，

积极对接并高效利用国际新材料研发智能化创新资源，努力构建合作共赢关系。建立开放的国际合作机制，引进新材料研发智能化领军人才，吸引国际高端科研机构 and 知名科学家参与新材料智能化研发。建设国际合作基地和创新平台，广泛开展技术交流、知识分享，使国外先进技术、高端装备、基础设施“为我所用”，提升我国新材料研发智能化研究成果的质量和水平。

致谢

课题研究及本文写作得到以下同志的支持和帮助：陈立泉、王海舟、汪卫华、段文晖、梅金娜、金魁、韩恩厚、王鲁宁、黄晓旭、向勇、张劲松、李金山、冯强、姜雪、白洋、张雷、蔡味东、代梦艳、沈学静、柳延辉、张佩宇、付华栋、王毅、李佳、李乙、张林峰、王俊生、刘立斌、施思齐、杜云飞、陈超、王泽高、伍芳，谨致谢意。

利益冲突声明

本文作者在此声明彼此之间不存在任何利益冲突或财务冲突。

Received date: March 5, 2023; **Revised date:** May 15, 2023

Corresponding author: Su Yanjing is a professor from the Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering. His major research field is big data technology for materials. E-mail: yjsu@ustb.edu.cn

Funding project: Chinese Academy of Engineering project “Research on Intelligent Research & Development, Manufacturing and Application of New Materials” (2021-JJZD-01)

参考文献

- [1] Materials genome initiative for global competitiveness [EB/OL]. (2011-06-15)[2023-04-15]. https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/materials_genome_initiative-final.pdf#:~:text=This%20Materials%20Genome%20Initiative%20for%20Global%20Competitiveness%20aims,materials%20in%20a%20more%20expedientious%20and%20economical%20way.
- [2] Materials genome initiative strategic plan [EB/OL]. (2014-12-15) [2023-04-15]. https://www.nist.gov/system/files/documents/2018/06/26/mgi_strategic_plan_-_dec_2014.pdf#:~:text=The%20Subcommittee%20on%20the%20Materials%20Genome%20Initiative%20%28SMGI%29,the%20goals%20of%20the%20Materials%20Genome%20Initiative%20%28MGI%29.
- [3] Materials genome initiative strategic plan [EB/OL]. (2021-11-15) [2023-04-15]. <https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/MGI-2021-Strategic-Plan.pdf>.
- [4] Horizon 2020: Details of the EU funding programme which ended in 2020 and links to further information [EB/OL]. [2023-04-15]. https://research-and-innovation.ec.europa.eu/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-2020_en#Article.
- [5] Horizon Europe: Research and innovation funding programme un-

- til 2027 [EB/OL]. [2023-04-15]. https://research-and-innovation.ec.europa.eu/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-europe_en.
- [6] The future of manufacturing: A new era of opportunity and challenge for the UK [EB/OL]. [2023-04-15]. https://assets.publishing.service.gov.uk/government/uploads/system/uploads/attachment_data/file/255922/13-809-future-manufacturing-project-report.pdf.
- [7] 谢建新, 宿彦京, 薛德桢, 等. 机器学习在材料研发中的应用 [J]. 金属学报, 2021, 57(11): 1343–1361.
Xie J X, Su Y J, Xue D Z, et al. Machine learning for materials research and development [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2021, 57(11): 1343–1361.
- [8] Friederich P, Häse F, Proppe J, et al. Machine-learned potentials for next-generation matter simulations [J]. *Nature Materials*, 2021, 20(6): 750–761.
- [9] Srinivasan S, Batra R, Luo D, et al. Machine learning the metastable phase diagram of covalently bonded carbon [J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 3251.
- [10] Fish J, Wagner G J, Keten S. Mesoscopic and multiscale modeling in materials [J]. *Nature Materials*, 2021, 20(6): 774–786.
- [11] Yuan X Z, Zhou Y W, Peng Q, et al. Active learning to overcome exponential-wall problem for effective structure prediction of chemical-disordered materials [J]. *NPJ Computational Materials*, 2023, 9(1): 12.
- [12] Park J H, Min K M, Kim H K, et al. Integrated computational materials engineering for advanced automotive technology: With focus on life cycle of automotive body structure [J]. *Advanced Materials Technologies*, 2022, 10: 2201057.
- [13] Nikolaev P, Hooper D, Perea-Lopez N, et al. Discovery of wall-selective carbon nanotube growth conditions via automated experimentation [J]. *ACS Nano*, 2014, 8(10): 10214–10222.
- [14] Deneault J R, Chang J, Myung J, et al. Toward autonomous additive manufacturing: Bayesian optimization on a 3D printer [J]. *MRS Bulletin*, 2021, 46: 566–575.
- [15] Azoulay P, Graff-Zivin J, Uzzi B, et al. Toward a more scientific science [J]. *Science*, 2018, 361(6408): 1194–1197.
- [16] Burger B, Maffettone P M, Gusev V V, et al. A mobile robotic chemist [J]. *Nature*, 2020, 583(7815): 237–241.
- [17] Han G Q, Li G D, Huang J, et al. Two-photon-absorbing ruthenium complexes enable near infrared light-driven photocatalysis [J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 2288.
- [18] Tabor D P, Roch L M, Saikin S K, et al. Accelerating the discovery of materials for clean energy in the era of smart automation [J]. *Nature Reviews Materials*, 2018, 3(5): 5–20.
- [19] Kaufman J, Begley E. MatML: A data interchange markup language [J]. *Advanced Materials and Processes*, 2003, 161(11): 35–37.
- [20] 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(1): 011002.
- [21] Tshitoyan V, Dagdelen J, Weston L, et al. Unsupervised word embeddings capture latent knowledge from materials science literature [J]. *Nature*, 2019, 571(7763): 95–98.
- [22] Rao Z Y, Tung P Y, Xie R W, et al. Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery [J]. *Science*, 2022, 378(6615): 78–85.
- [23] 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.
- [24] Segler M H, Preuss M, Waller M P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI [J]. *Nature*, 2018, 555(7698): 604–610.
- [25] Lori A W, Gopal R R. Frontiers of materials research: A decadal survey [J]. *MRS Bulletin*, 2017, 42(7): 537.
- [26] Rapp K. Artificial intelligence in manufacturing: Real world success stories and lessons learned [EB/OL]. (2022-01-07)[2023-04-15]. <https://www.nist.gov/blogs/manufacturing-innovation-blog/artificial-intelligence-manufacturing-real-world-success-stories>.
- [27] Flores-Leonar M M, Mejia-Mendoza L M, Aguilar-Granda A, et al. Materials acceleration platforms: On the way to autonomous experimentation [J]. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 2020, 25: 100370.
- [28] Peterson E, Lavin A. Physical computing for materials acceleration platforms [J]. *Matter*, 2022, 5(11): 3586–3596.
- [29] Aspuru-Guzik A, Persson K. Materials acceleration platform: Accelerating advanced energy materials discovery by integrating high-throughput methods and artificial intelligence [EB/OL]. (2018-01-15)[2023-04-15]. <https://dash.harvard.edu/handle/1/35164974?show=full>.
- [30] 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.
Su Y J, Fu H D, Bai Y, et al. Progress in materials genome engineering in China [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2020, 56(10): 1313–1323.
- [31] Xie J X, Su Y J, Zhang D W, et al. A vision of materials genome engineering in China [J]. *Engineering*, 2022, 10(3): 10–12.
- [32] Zhang H T, Fu H D, He X D, et al. Dramatically enhanced combination of ultimate tensile strength and electric conductivity of alloys via machine learning screening [J]. *Acta Materialia*, 2020, 200: 803–810.
- [33] Zhang H T, Fu H D, Zhu S C, et al. Machine learning assisted composition effective design for precipitation strengthened copper alloys [J]. *Acta Materialia*, 2021, 215: 117118.
- [34] Wang C S, Fu H D, Jiang L, et al. A property-oriented design strategy for high performance copper alloys via machine learning [J]. *NPJ Computational Materials*, 2019, 5(1): 87.
- [35] Wen C, Zhang Y, Wang C X, et al. Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property [J]. *Acta Materialia*, 2019, 170: 109–117.
- [36] Zhang Y, Wen C, Wang C X, et al. Phase prediction in high entropy alloys with a rational selection of materials descriptors and machine learning models [J]. *Acta Materialia*, 2020, 185: 528–539.
- [37] Wen C, Wang C, Zhang Y, et al. Modeling solid solution strengthening in high entropy alloys using machine learning [J]. *Acta Materialia*, 2021, 212: 116917.
- [38] Liu P, Huang H, Jiang X, et al. Evolution analysis of γ' precipitate coarsening in Co-based superalloys using kinetic theory and machine learning [J]. *Acta Materialia*, 2022, 235: 118101.
- [39] Wang W, Jiang X, Tian S, et al. Automated pipeline for superalloy data by text mining [J]. *NPJ Computational Materials*, 2022, 8(1): 9.
- [40] Zhang T, Jiang Y, Song Z, et al. Catalogue of topological electronic materials [J]. *Nature*, 2019, 566(7745): 475–479.
- [41] Tang F, Po H C, Vishwanath A, et al. Comprehensive search for topological materials using symmetry indicators [J]. *Nature*, 2019, 566(7745): 486–489.
- [42] Yang Q, Yang S, Qiu P, et al. Flexible thermoelectrics based on ductile semiconductors [J]. *Science*, 2022, 377(6608): 854–858.
- [43] Li M X, Zhao S F, Lu Z, et al. High-temperature bulk metallic glasses developed by combinatorial methods [J]. *Nature*, 2019, 569(7754): 99–103.