

DOI: 10.20176/j.cnki.nxdz.20260205

人工智能在材料发现中的应用

申 奥¹, 马 梅¹, 高 乐², 马 宁², 马 薇³, 刘 昊^{2*}, 夏明许³

(1. 宁夏大学 物理学院, 宁夏 银川 750021; 2. 宁夏大学 信息工程学院, 宁夏 银川 750021;

3. 宁夏大学 材料与新能源学院, 宁夏 银川 750021)

摘要:综述了人工智能(AI)在材料发现领域的应用现状,重点探讨其在材料表征、材料生成及属性预测三大核心方向的最新研究进展。首先,系统阐述材料表征中的描述符设计原理,聚焦如何将材料的微观结构、化学组成等复杂信息转化为机器可处理的量化特征。其次,深入分析生成模型在材料逆向设计中的技术路径,详细探讨生成对抗网络(GAN)、图神经网络(GNN)、变分自编码器(VAE)、扩散模型及大语言模型(LLMs)的具体应用场景与技术优势。再次,综述基于GNN与Transformer架构的材料属性预测技术,从预测精度、计算效率及模型可解释性3个维度总结各类方法的性能表现。最后,剖析AI驱动材料发现面临的核心挑战与发展潜力,并对未来研究方向进行展望。

关键词:人工智能;材料发现;材料表征;材料生成;属性预测;逆向设计;生成模型

分类号:(中图)TP181; TB30

文献标志码:A

随着信息技术的迅猛发展,人工智能(artificial intelligence, AI)已成为当今全球最具颠覆性与影响力的核心技术之一。自20世纪50年代诞生以来,AI经历了从符号主义到连接主义的范式转变,并在机器学习与深度学习技术的推动下取得了突破性进展。其中,机器学习通过构建自适应算法,使计算机能够从数据中自动学习规律,而深度学习则借助多层神经网络模拟人类大脑的信息处理机制,极大提升了AI在复杂任务中的表现。近年来,大规模预训练模型的兴起更是为AI的发展注入了新活力,其强大的语言生成与语义理解能力,为智慧医疗、自动驾驶等诸多领域带来了前所未有的发展机遇。

AI的发展催生了智能交通、智慧医疗、智能工厂、智能家居、元宇宙等全新应用场景,更为全球科学研究开辟了新范式。2024年诺贝尔物理学奖和化学奖分别表彰了机器学习在统计物理与分子设计中的开创性贡献,进一步凸显了AI在现代科学研究中的核心地位。近年来,AI与材料科学的深度融

合尤为引人注目,展现出巨大潜力。

材料是现代科技发展的基石,材料的高效发现与性能优化一直是科学研究的核心任务。传统材料研发依赖于“试错法”,不仅耗时费力,且效率受限。AI技术的跨界融合为材料科学带来了革命性机遇,通过机器学习与深度学习算法,研究人员能够在海量潜在的化学空间中高效探索,加速了新材料的发现与优化。例如,基于生成对抗网络(generative adversarial networks, GAN)和变分自编码器(variational auto-encoder, VAE)的生成模型,研究者们已成功设计出具有特定性能的新型材料;基于图神经网络(graph neural networks, GNN)的预测模型,研究人员则能准确评估候选材料的物理化学性质,从而有效筛选目标材料。这些方法为材料逆向设计提供了强大工具,显著提升了材料发现的效率与成功率。

材料的逆向设计是通过输入预设的材料功能需求,利用算法生成预测方案,其主要任务包括材料表征、材料生成和属性预测,各模块的协同关系

收稿日期:2025-04-06

基金项目:国家自然科学基金资助项目(6247074282)

作者简介:申奥(1998—),男,博士研究生,主要从事AI for Science研究,(电子信箱)shenlaol@stu.nxu.edu.cn。

* **通信联系人:**刘昊(1988—),男,教授,博士,博士研究生导师,主要从事计算机视觉与模式识别、AI for Science研究,(电子信箱)liuhao@nxu.edu.cn。

引用格式:申奥,马梅,高乐,等.人工智能在材料发现中的应用[J].宁夏大学学报(自然科学版中英文),2026,47(2): 116-157.

如图 1 所示。材料表征通过将材料的微观结构和宏观组成等信息转化为机器可读的特征,为 AI 模型提供数据支持。材料生成则是从大量数据中学习材料的结构与性能之间的映射关系,进而预测并优化目标材料的组成和结构。上述属性预测则通过映射关系,快速准确地预测所生成材料的属性。这些任务相互协作,极大地提高了材料研发的效率。

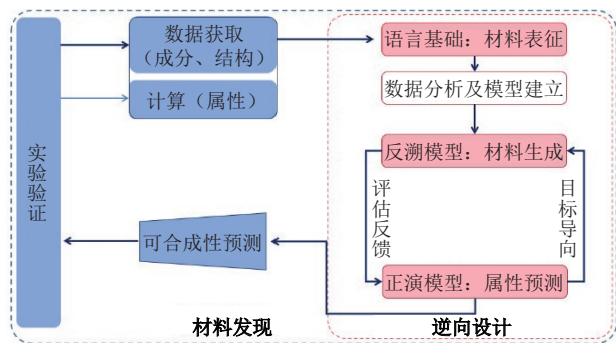


图 1 材料发现与逆向设计

Fig. 1 Material discovery and inverse design

论文旨在系统综述 AI 在材料发现中的应用,重点关注材料表征、材料生成和属性预测的最新研究进展。首先,介绍材料表征的描述符设计,探讨如何将材料信息转化为机器可读的数字化特征。其次,详细讨论生成模型的设计方法,分析 GAN、GNN 和 VAE 在材料生成中的应用。再次,探讨了基于 GNN 和 Transformer 架构的材料属性预测方法,总结这些方法在预测精度、计算效率和模型可解释性方面的表现。最后,分析 AI 在材料科学领域的应用潜力与现实挑战,展望未来发展方向。期望为材料发现领域的科研工作者提供一个 AI 技术应用概览,帮助其更好地理解 AI 如何助力材料研究,为后续新型材料的发现创新提供思路 and 方向。

1 材料表征

在 AI 辅助的新材料发现过程中,材料表征发挥着至关重要的作用。它不仅为 AI 模型提供高质量的数据,还可被用于验证 AI 预测的准确性,优化模型的训练与参数调整,加速新材料的发现与优化进程。通过将 AI 技术与材料表征手段相结合,研究人员能够更高效地探索材料空间,推动新材料的研发与应用。然而,结构编码的复杂性仍然是一个突出的挑战。下文简要概述几种用于材料生成的典型表征方法。

1.1 基于原子信息的文本表征

材料的结构表征是将材料的部分或全部微观

结构特征以特定形式表达出来的方法,其对应的特征表达形式也被称为描述符。自元素周期表问世以来,每种物质都被赋予了专属的化学名称与化学式。化学式是一种用元素符号表示物质组成的式子,是化学领域最基础的符号语言,能够以简洁直观的方式传达物质的组成、结构及反应特性等关键信息。借助化学式,科研人员能够快速把握物质的基本特征,并据此开展进一步的研究与应用。

原子袋^[1]表示法是编码无机晶体结构的一种尝试,它专注于单一结构,主要为优化成分而设计。如图 2 所示,每行代表一种元素,“1”所在的位置代表分子中每种元素的个数。这种表示方法将物质的化学式转化为二进制形式,便于计算机读取和处理。然而,化学式存在局限性:它无法提供详细的立体结构信息,也无法区分同分异构体或提供分子内分子间信息。对于 AI 模型而言,每种物质都需要一种独特的表达方式,而化学式无法区分同分异构体正是其难以准确预测新材料的主要原因之一。

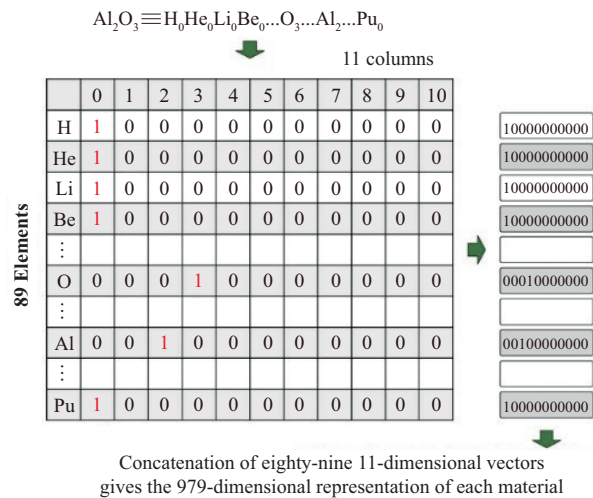


图 2 Al_2O_3 的原子袋表示^[1]

Fig. 2 Atomic bag representation of Al_2O_3 ^[1]

为了更详细地表达材料的结构信息,以便区分同分异构体和同素异形体,简化分子线性输入规范(simplified molecular input line entry system, SMILES)^[2]应运而生。SMILES 是一种基于序列的文本表征形式。如图 3 所示,其算法首先为化学结构建立一棵生成树,随后按深度优先(纵向优先)顺序遍历该树;在遍历过程中隐式删除氢原子,并对环键执行“断开”操作,断键两端的原子以相同数字标记,从而将二维分子图无损地编码为可读的 ASCII 字符串。其优势在于一种化学分子对应唯一的 SMILES 字符串。这种表

示方式不仅是一种语言结构,更是一种高效的计算机数据结构。例如,Gómez-Bombarelli等^[3]开发的VAE模型利用SMILES字符串建立了多维连续的分子表征。由于其独特的可逆映射特性和明确的语义信息,SMILES在分子逆向设计中被广泛应用^[4-10]。

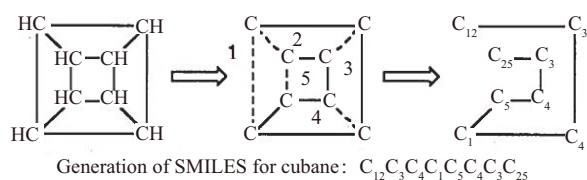


图3 立方烷的SMILES字符串^[2]
Fig. 3 SMILES string of cubane^[2]

之后,Daylight公司对SMILES进行了进一步扩展,开发出一种可描述分子模式与性质的语言:SMARTS(SMILES arbitrary target specification)。所有SMILES表达式均可在SMARTS中被直接使用。同时,SMARTS体系引入了逻辑运算符与更丰富的分子描述符,使其在子结构搜索、反应模板构建等方面具备强大的应用优势。2020年,Ehrt等^[11]发布了SMARTS.plus在线工具箱,该工具可用于化学图案设计,方便科研人员理解、设计和修改化学结构。

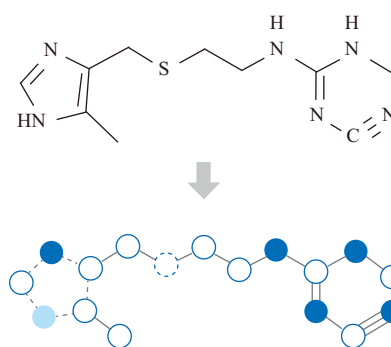
针对分子表征任务中大量SMILES字符串无效的问题,Krenn等^[12]提出了SELFIES(self-referencing embedded strings),将分子图编码为递归上下文无关文法,在字符串基础层面即嵌入价态、氢数与环闭合规则,从而在理论上保证100%的SELFIES序列对应有效分子,且任意分子均可被唯一的SELFIES字符串表示。后续研究工作^[13]进一步精简产生式规则,引入可扩展语义约束(手性、同位素、片段库等),使其在编码长度、编解码速度与功能覆盖度上显著优于早期版本,为生成式模型提供了无过滤、端到端的稳定分子表征。

然而,字符串表示形式可能导致材料的关键结构信息被省略,这在一定程度上是由可用数据集规模的显著扩大所导致的。尽管字符串描述符的设计日趋完善,但对于大分子体系而言仍显繁琐复杂,不仅难以有效表征分子间的相互作用信息,也无法适配非分子类材料的描述需求。

1.2 基于拓扑结构的图表征

随着AI技术的不断发展,模型输入也不再局限于字符形式。为了更直观地表征分子信息,不少研究者将分子结构以图的形式输入模型,这种表征方式与GNN的适配性也更高。

1.2.1 分子图 分子图也称为化学图、结构图,其表征规则基于球棍模型命名法,并经过标准化处理。在分子图表征中(如图4所示),原子被表示为节点,化学键被表示为边;节点和边会根据原子与化学键的类型分配相应的标签,以此区分图中节点和边的不同类型。若不考虑边的方向,则称该图为无向图;反之,则称之为有向图。



(a) 分子式与分子图

	Atomic symbol	Number of explicit hydrogens	Number of formal charges
○	C	0	0
●	N	1	0
●	N	0	0
○	S	0	0

(b) 原子(节点)类型

	Bond type
—	SINGLE
==	DOUBLE
≡	TRIPLE
⋯	AROMATIC

(c) 键(边)类型

图4 西咪替丁的分子图表示^[14]

Fig. 4 Molecular graph of cimetidine^[14]

在分子图中,节点度和键径距离等信息均可作为结构特征,这类特征既可被单独使用,也可与邻接矩阵结合使用(如图5所示)。二者与邻接矩阵结合时,可分别生成加性邻接矩阵和距离矩阵。类似地,在图表示中还可引入电荷、原子类型、化学键类型等额外特征。分子图所包含的多种特征,为调控特征空间的维度与复杂性提供了一种通用策略。

分子图具备简单、灵活、可解释性强等优点,特别适用于描述分子系统^[16-19]。其最基本的属性为顶

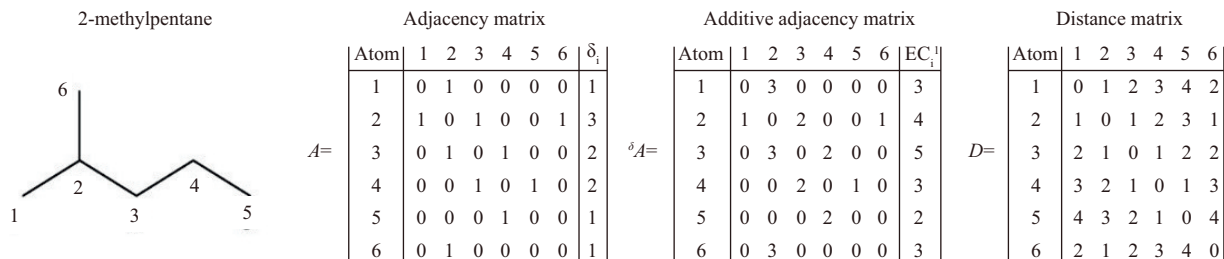


图 5 2-甲基戊烷的结构图及其相应的邻接矩阵、加性邻接矩阵和距离矩阵^[15]

Fig. 5 Structural diagram of 2-methylpentane and its corresponding adjacency matrix, additive adjacency matrix and distance matrix^[15]

点数量及存储在边集中的成对关系。但分子图仅包含拓扑信息,忽略了结构对称性、键长、键角等关键信息。分子图与字符串表征方法主要应用于小分子体系,这类方法虽能表达原子和化学键的类型及连接关系,却在表征分子空间结构方面存在明显不足。生成模型之所以能在有机分子研究中得到广泛应用,核心得益于其可逆性与对称不变性:可逆性指数字空间与真实分子间存在双射映射关系,对称不变性则保证分子经旋转、平移、原子排列等操作后,其特征表示仍能被准确识别为同一分子。

1.2.2 原子信息矩阵 分子表征的可逆性与对称不变性,源于对化学键的精准识别:化学键决定了原子的连接数目与轨道重叠方向。对无机晶体而言,其化学键特征更为复杂,仅依靠原子间的连接关系,难以完整表征晶体的结构特征。尽管基于图论的晶体结构表示方法已有相关研究进展,但从晶体图中重建晶体结构仍面临诸多挑战,这也限制了其在生成模型中的实际应用。已有研究借助晶体学信息文件(crystallographic information file, CIF)^[20]中的晶胞基矢与原子位置矩阵实现了材料结构的表征。如图6所示,晶胞基矢包含晶胞相邻3条边的边长及其夹角,原子位置则通过三维坐标进行表征;为体现晶体结构的周期性,并避免模型对数据产生过拟合,上述三维坐标也可采用分数坐标表示。

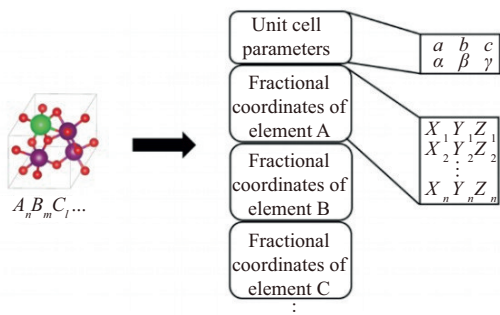


图 6 晶胞基矢和原子位置矩阵^[20]

Fig. 6 Unit cell basis vectors and atomic position matrix^[20]

但上述信息对于多数材料而言难以获取,尤其是多晶体,晶粒间的晶界对材料性能有着显著影响。即便对于单晶体,由于晶格参数或坐标系的选取不同,同一种材料也可能对应多个不同的结构描述符。此外,原子位置矩阵仅包含原子间的相对位置关系,在近邻原子个数发生突变的临界状态下,其表征存在局限性,而这种局限性反映到原子键的连接关系上,会使键连接的表征变得更为复杂。

为规避近邻原子相关问题,研究者基于原子间的库仑力对晶体结构进行编码,得到库仑矩阵。库仑矩阵的原始计算公式由 Lilienfeld 等^[21]于 2012 年提出,最初用于有机分子原子化能的预测。如图 7 所示,库仑矩阵的非对角元素对应原子间的库仑排斥作用,对角元素则对应通过拟合核电荷得到的原子能量。该矩阵具有平移与旋转不变性,同时具备互异性,即不存在两个分子拥有完全相同的矩阵表示,除非这两个分子本身完全相同或互为镜像。

然而,这种对应关系并非双射关系,同一分子可通过原子重排生成多个不同的库仑矩阵。为解决这一问题,Hansen 等^[22]提出了 3 种衍生表征方法:特征谱表征、排序库仑矩阵与随机排序库仑矩阵。特征谱表征由库仑矩阵的特征值排序构成,会造成维度的大幅降低与结构信息的损失;相比之下,排序库仑矩阵仅依据行和列的范数进行重新排序,能保留更多的结构信息。但该重排方式对原子坐标的细微变化极为敏感,可能导致结构相似的体系产生大量不同的表征结果。这一问题可通过构建一组经排序的库仑矩阵来解决^[23],具体而言,在排序过程中为库仑矩阵的范数添加随机噪声以生成多个矩阵,从而为同一分子的不同原子索引提供多样化的表征形式。尽管随机排序库仑矩阵的表征形式因高维特性增加了计算成本,但其在预测精度上显著优于另外两种表征方法^[22]。

键袋(bag of bonds, BoB)^[24]是库仑矩阵的一种

变体形式。在 BoB 模型中,每种特定类型的化学键均由一个排列不变向量表征;相较于随机排序的库仑矩阵,BoB 向量不仅具备排列不变性,还有更高的稳定性与计算效率。

然而,将库仑矩阵这类表征方法推广至周期性晶体体系并非易事。一种常用方法是仅利用晶胞内的原子构建库仑矩阵,然而晶胞选取的差异,可能导致同一晶体对应不同的库仑矩阵,进而降低模型的建模效率。针对这一问题,Faber 等^[25]提出了 3 种解决方案:其一,将 Ewald 求和应用于库仑矩阵,将非收敛的无限和分解为实空间与倒空间中两个快速收敛的求和项;其二,引入超晶胞思想并添加快速衰减项,以保证矩阵元素的收敛性,类似地,Barker 等^[26]也设计出具有衰减相互作用的局部库仑矩阵;其三,利用正弦函数满足周期性要求,该方法所构建的矩阵被称为正弦矩阵^[27]。如图 7 所示,Ewald 求和矩阵的每个元素均由 3 部分构成,即短程能量、长程能量与自能修正;而正弦矩阵的对角元素与库仑矩阵保持一致,非对角元素则表示由原子周期性重复所产生的库仑作用总贡献。

基于库仑矩阵与 BoB 模型,Huo 和 Rupp^[28]提出了多体张量表示法,相关研究表明,该表示法适用于晶体固体体系的表征。该方法并未对矩阵或向量进行排序,而是通过每对化学元素的逆距离分布,结合原子计数、键角及二面角的分布特征构

建张量表示,以此满足排列不变性要求。针对周期性问题的处理,该方法仅对原胞中的原子进行枚举,并引入指数衰减权重项,实现周期性适配。

与传统的距离基描述符相比,基于库仑矩阵的表征方法适用的材料范围更为广泛。但在处理大数据集时,该方法的表征有效性会有所下降。随着现代密度泛函理论(density functional theory, DFT)数据库的数据集规模快速增长,库仑矩阵方法能否持续保持高精度预测性能,仍是亟待验证的关键问题。库仑矩阵的核心假设为核电荷相同的原子具有相似性,而这一假设在诸多物理、化学性质的表征中并不贴合实际,这在一定程度上限制了该编码策略在不同结构、不同组成的材料数据集上的应用。

1.2.3 周期晶体的局部特征图 晶体的周期性是其表示方法面临的另一个关键问题。晶体的性质不仅取决于结构单元中的原子排列,还取决于结构单元在空间中的周期性重复特性。这导致了一个棘手的问题:不同的表示选择,可能导致对相似或相同结构的晶体编码产生较大误差。

周期晶体图形特征的构建工作最初由 Isayev 等^[29]在 2017 年完成。他们采用一种基于图形的特征 PLMF (property-labeled material fragments),建立了化学计量比无机晶体材料的通用性质预测模型。如图 8 所示,在 PLMF 中,原子的连通性通过沃

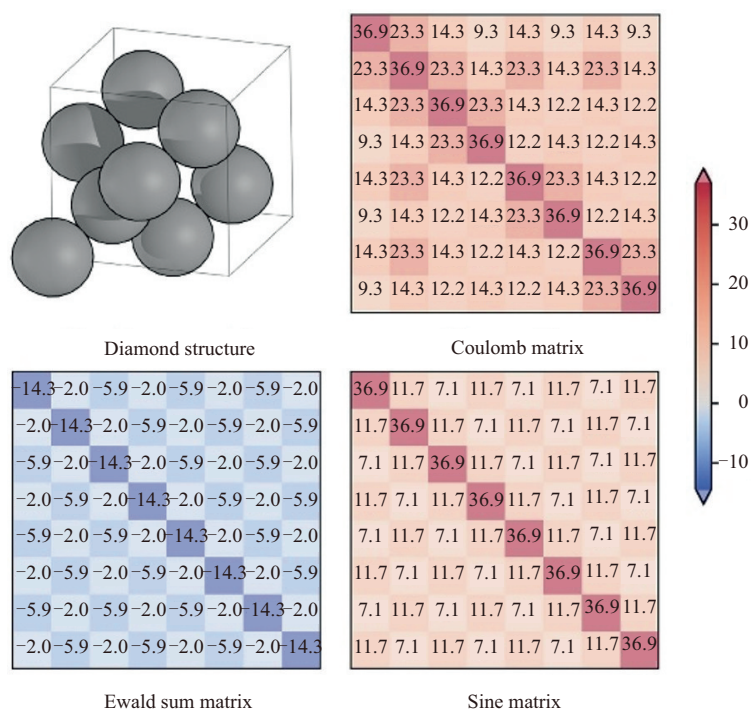


图 7 金刚石结构及其库仑、Ewald 求和、正弦矩阵^[27]

Fig. 7 Diamond structure and its coulomb matrix, Ewald sum matrix, and sine matrix^[27]

罗塔伊(Voronoi)镶嵌技术,结合基于两个原子的共价半径之和确定的截止距离来确定。Voronoi面可明确空间上相邻的原子,从而降低对精确几何信息的依赖。构建的晶体无向图被划分为更小的子图,其中键路径距离为3的路径片段和配位多面体对应的环状片段,共同构成描述符的核心基础。片段的顶点标记多种元素性质^[30],如价电子数、原子质量和电负性。此外,晶胞的全局信息(如形状、大小和对称性)也被纳入,作为额外的描述符。

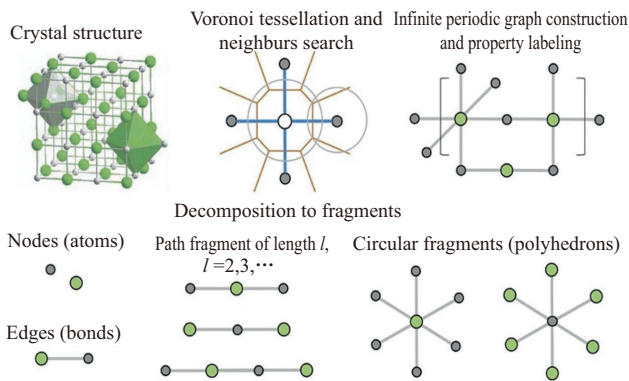


图 8 PLMF 的构造示意图^[29]

Fig. 8 Construction schematic diagram of PLMF^[29]

将完整结构图划分为子图的另一种策略,是构建包含足量原子的大型环状片段^[31],图9为层状钠镍氧化物(NaNiO₂)的O3相和P3相晶体结构,两种构型中中心钠离子分别处于八面体和三棱柱配位环境中,仅考虑距离为1时两者是同构的,在距离为2时方可区分二者。该方法通过逐一列举所有非等效原子的子图,实现对整个晶体结构的完整描述。此类编码方案最初用于材料数据库的自动去重与分类,其片段的全局特性为将全局特征与局部环境整合至单一描述符提供了新思路。

此外,原子间距离的微小变化可能导致邻近原子数量发生突变,因此结构图更适用于以共价键为主的材料,而对于兼具共价、离子和金属特性的晶体材料,则需要特别注意阈值边界的界定。

1.2.4 拓扑条形码 传统的拓扑描述符通常被称为基于路径的指纹,它们根据原子类型及其间路径的组合来编码化学结构^[32-34]。与这类几何模型不同,基于代数拓扑的描述符借助抽象代数的概念,通过空间中的实体、环和高维拓扑面来编码化合物的结构。如图10所示,图中定义了点、环、球和环面对应的贝蒂数(Betti数)。将原子半径设置从0开始逐步增大,可得到不同的拓扑图特征,并以此作为描述符,详见图11。

在固体材料中,原子在空间中的分布可被描述

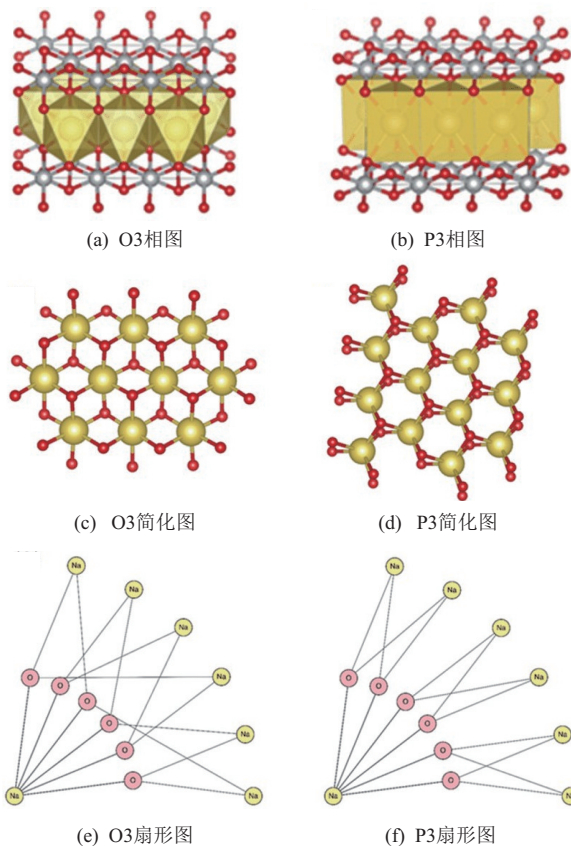


图 9 NaNiO₂同分异构体的结构图和扇形图^[31]

Fig. 9 Structural diagrams and sector diagrams of NaNiO₂ isomers^[31]

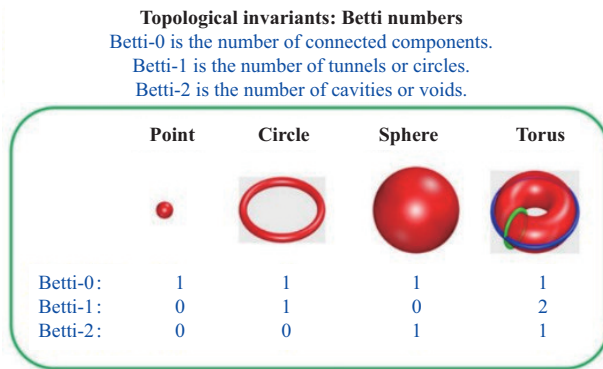


图 10 拓扑不变量的说明^[32]

Fig. 10 Illustration of topological invariants^[32]

为三维点云,此时可借助持久同源性构建结构特征。持久同源性通过构造嵌套的子复形序列,利用过滤参数的演变刻画研究对象的拓扑结构。这种方法能够生成多尺度的拓扑指纹,将复杂结构的高维数据编码为代数拓扑表示,不仅可有效捕捉材料的全局结构特征,还能通过多尺度拓扑指纹为模型提供丰富的输入信息,从而提高模型对材料性能的预测能力。凭借其在解析生物分子复杂性方面的优势,持久同源性已被广泛应用于有机分子和蛋白质的研究。

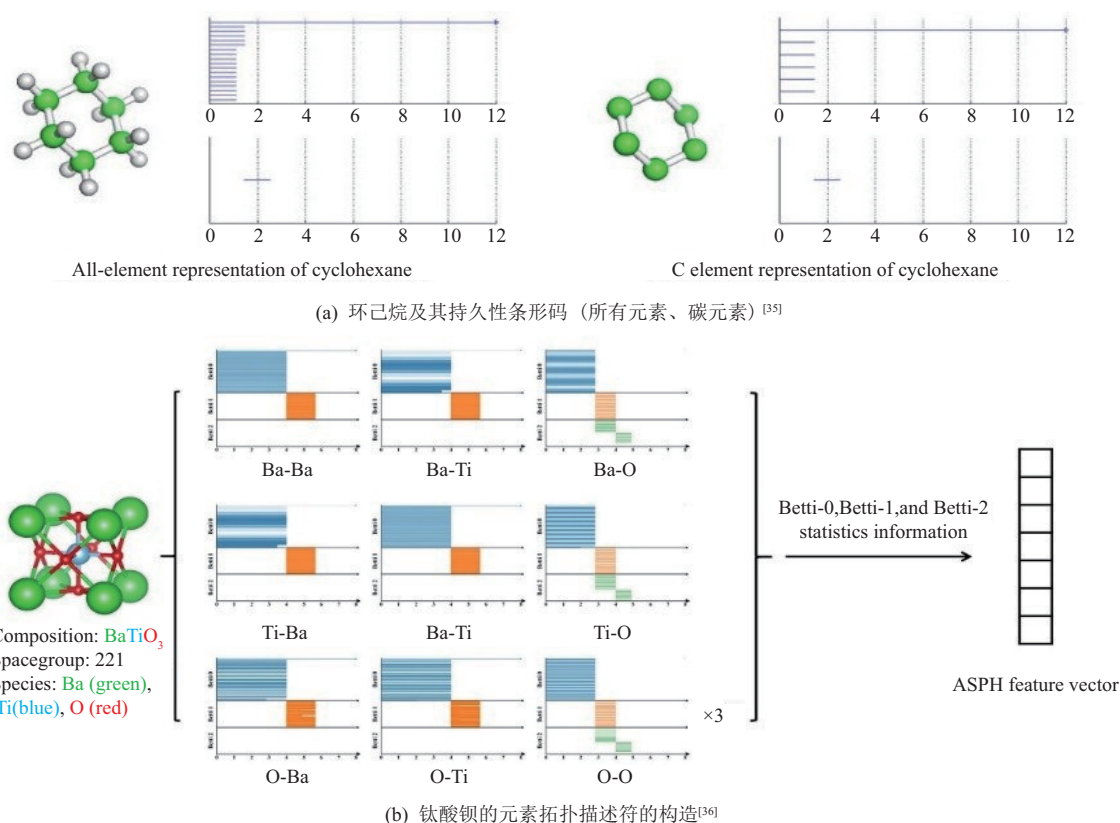


图 11 持久性条形码和元素拓扑描述符的构造过程

Fig. 11 Construction of persistence barcode and elemental topological descriptor

Pan 等^[37]提出了一种基于持久同源性的机器学习模型,用于加速团簇全局稳定结构的搜索。他们引入了持久成对独立性的概念,通过在过滤过程中计算独立原子对的数量来描述原子间距离的变化。最终,将持久条形码与持久成对独立性合并,并转换为一维向量,该向量对平移和旋转具有不变性,可作为机器学习任务的结构特征。

Lee 等^[38]在纳米多孔材料的研究中应用了持久同源性,通过量化孔隙结构的相似性并利用持久性条形码进行分类,成功实现了对孔隙结构的有效表征。他们将孔隙结构表示为一组位于孔隙表面的点,以此编码孔隙的几何信息。然而,该方法仅生成了材料中孔隙的描述符,而非完整的原子结构。尽管如此,利用持久同源性提取化合物空间信息的思路,为材料的研究和设计提供了新的方向。

尽管持久同源性能够同时捕获局部与全局结构信息,但将元素信息整合到所构建的结构特征中并非常规操作。一种解决方案是先为化合物中不同原子构建持久性条形码,再整合元素信息,最后将所有特定元素的条形码组合在一起^[35]。例如,图 11(a)展示了环己烷中所有原子和碳原子的 Betti 数条形码。此类元素特异性拓扑描述符在分子和蛋白质的机器学习研究中展现出良好的适用性^[32,35]。

在研究周期性晶体时,必须引入截止半径以确定所有组成原子对中心原子持久条形码结构的参与范围^[36]。图 11(b)展示了钛酸钡的元素特异的持久同源性。这种方法虽然能够在拓扑抽象过程中保留化合物的物理和化学信息,但所导出的特征依赖于截止半径的选择,这可能会限制机器学习模型的预测能力。

与基于结构图和库仑矩阵的描述符相比,基于持久同调的拓扑描述符能够在局部和全局水平上唯一地编码结构,而无需依赖于实际物理假设。这种特性使得持久同调在处理复杂材料结构时极具吸引力,尤其是在描述无机晶体材料方面。尽管持久同调在计算生物学中受到广泛关注,但其在材料科学中的应用,尤其在无机晶体材料的机器学习特征构建中,仍处于探索阶段。

这可能源于持久同调复杂的数学表达,给不熟悉代数拓扑的研究人员带来了较高的入门门槛。此外,拓扑描述符缺乏传统的物理和化学直觉,这限制了对原子结构与材料性质之间隐式关系的理解。因此,当与深度学习算法结合时,拓扑描述符更适合在大规模数据集上捕获非线性原子相互作用。这种结合能够有效增强模型对复杂结构的识别能力,尤其是在处理具有复杂拓扑特征的数据

时。例如,在图像生成任务中,基于持久同调的 GAN (PHGAN) 通过将拓扑特征集成到生成器中,可显著提升模型对全局结构信息的捕捉能力。这表明拓扑描述符在机器学习中具有广阔的应用潜力,尤其适用于需要处理复杂结构和非线性关系的场景。

1.3 基于概率密度的图表征

Court 等^[39]提出了一种基于自动编码器的生成式深度表示学习流程,用于几何优化的三维晶体结构。该方法的核心在于采用密度矩阵代替传统的原子位置矩阵,从而更全面地表征材料的结构特征。通过条件自动编码器,该体系能够同时编码电子密度图和每个原子的形成能,使 VAE 可同步学习结构和属性信息。

这种基于概率密度的方法具有高度通用性,能够快速生成高质量的候选材料。通过对单胞进行旋转和扩展以扩充训练数据集,原子位置可由模型重建,且预测结构与真实结构之间的原子位置误差可控制在 0.5 \AA 以内。此外,训练后 VAE 隐空间的核密度估计图显示,多数维度呈近似正态分布,表明该方法能够有效地捕捉材料结构的内在分布特征。

如图 12 所示,通过电子密度图之间的隐空间插值,可生成具有不同形成能条件的晶体结构。在稀土铬铁矿钙钛矿之间的插值实验中,模型成功实现了 A 位原子沿镧系元素的连续分布,并保持了一致的晶体结构。这种基于概率密度的表征方法不仅能够加速材料设计,还能为复杂晶体结构的生成提供新的思路。

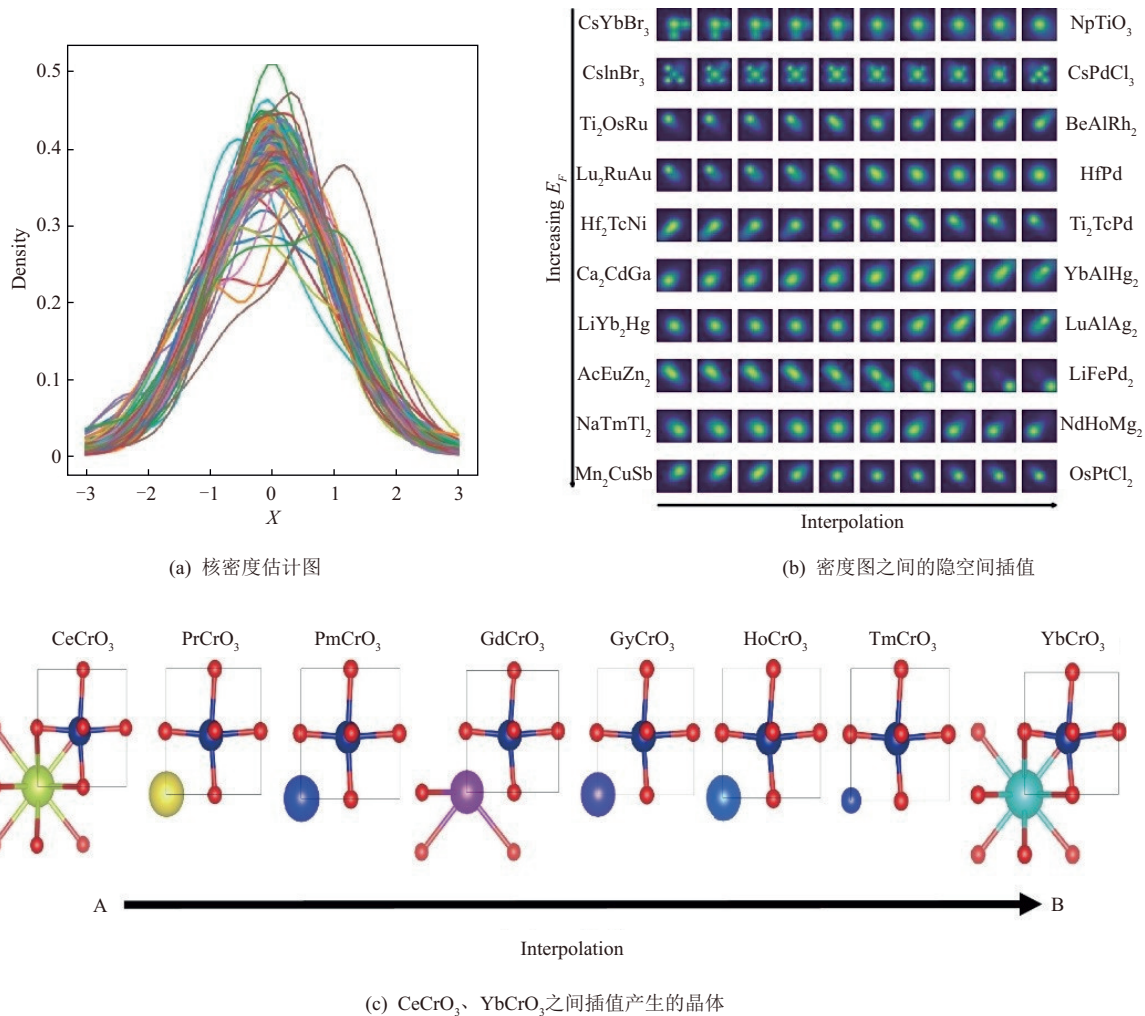


图 12 三维晶体结构的潜在编码^[39]

Fig. 12 Potential coding of three-dimensional crystal structure^[39]

首先,将晶体学单胞表示为体素化的电子密度图,训练条件深度特征一致性 VAE (conditional deep-feature consistent VAE, Cond-DFC-VAE),使其学习晶体结构及属性的潜在编码。通过在隐

空间中采样并结合用户指定的属性条件,可以生成新的电子密度图。其次,利用 UNet 语义分割网络与形态学变换的组合,将电子密度图转换为原子位置。最后,借助晶体图卷积神经网络 (crystal graph

convolutional neural networks, CGCNN) 预测材料的相关属性。该研究表明,VAE的隐空间是平滑且可解释的,能够通过采样生成高质量的电子密度图,并精准重建原子位置与单胞参数。在此过程中,采用坐标卷积技术,将电子密度图的每个体素与原始晶体几何的三维笛卡儿坐标相连接,从而在输入VAE前赋予单胞尺寸的隐含信息。因此,仅从电子密度图即可计算出生成晶体的单胞参数。此外,几何优化的DFT计算可在较少迭代中收敛,且键长和单胞参数的变化极小。

此外,神经网络还可以自主学习编码需求。Noh等^[40]开发了一种三维图像表示方法(图13),该方法本质上与密度矩阵表示类似,但其基于原子的高斯核分布。他们提出的框架用于学习材料的连续表示,并利用隐空间表示构建新的模型。在没有实验材料的前提下,该方法通过重新发现已知的实验结构,展示出其生成实验材料的能力,这一成果是利用生成模型实现无机功能材料逆向设计的重要进展。

图13展示了晶体结构及其逆变换过程。晶体结构以晶胞(图13(a),在 m^3 个网格点的空间中)和原子(图13(b),在 n^3 个网格点的空间中)进行编码;通过简单的逆变换方案,可以从晶胞图像中精确恢复晶体的晶格参数,并通过图像滤波器从原子图像中重建原子位置。该方案基于三维图像的可逆输入表示,实现了数据驱动的材料生成。

构建无机材料的连续表示是该研究的核心目

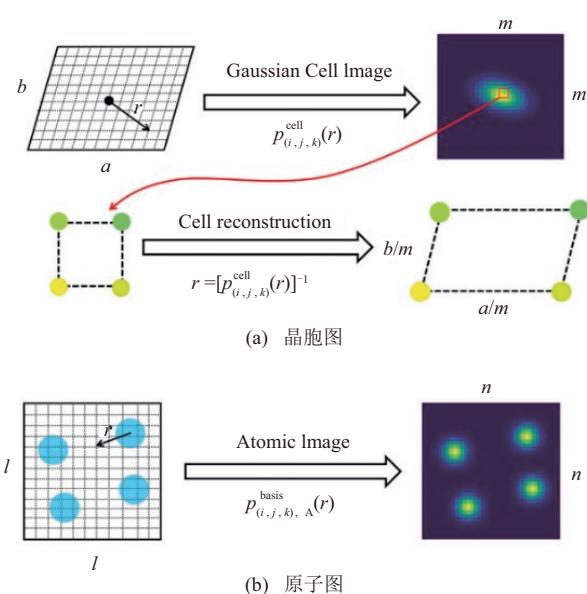


图13 晶体结构的图表示与逆变换^[40]

Fig. 13 Graph representation and inverse transformation of crystal structure^[40]

标,包括晶体结构与组成的连续性描述。研究者采用基于三维网格的图像表示作为初始输入,将晶体结构分解为晶胞图像(包含晶胞的长度和角度信息)和基矢图像(包含晶胞内原子的位置信息)。这种分解方法不仅为晶体结构的表示提供了新的视角,还为材料生成模型的设计提供了便利。

这种表示方法也被称为体素表示,即将晶胞划分为体积元素,并利用计算机视觉技术构建模型。然而,原子可能被误判为具有邻近原子序数的原子类型,并且大多数生成的结构无法通过DFT计算稳定优化,仅在材料空间的有限区域内可以实现^[41-43]。为解决这一局限性,后续方法可为每种元素构建单独的体素表示,并引入能量约束;或通过增加表示维度,采用描述每个体素占有率的矩阵与记录被占体素对应原子序数的矩阵,降低分割误差。

该研究提出的生成模型具备高效探索化学成分空间和设计未知材料的能力。通过调整训练数据库,并在隐空间中引入独立的属性优化任务,该模型可以扩展至具有特定属性的功能材料设计中。这一特性为材料科学中的逆向设计提供了新的思路。然而,数据增强虽然在一定程度上解决了对称不变性问题,却显著增加了计算负担。因此,如何在生成模型中实现无机固体材料的有效表示,仍然是一个值得深入探索的方向。

1.4 基于光谱的图表征

除了上述表征方法外,还有一类强调无限周期晶体全局特征的描述符——衍射指纹,其设计灵感来源于傅里叶变换。由于周期性和对称性可以从衍射图案中推导,衍射指纹在研究长程结构性质时表现出更强的辨识能力。Ziletti等^[44]提出了晶体结构的衍射指纹,通过模拟入射平面波在晶体中的散射,解决了二维X射线衍射(X-ray diffraction, XRD)图案的生成问题。图14展示了二维衍射指纹的示意图:入射平面波经材料散射后,衍射图案被计算在垂直于入射辐射的平面上。基于8类晶体材料的原型及其二维衍射图案可以发现,菱面体与六角形结构具有相似的二维衍射指纹。不同原子组成的材料,只要晶体结构相似,其衍射指纹也表现出相似性。这种表征方法计算简单、易于理解,具有明确的物理意义,并且对结构缺失具有鲁棒性。即使在结构高度缺失的情况下,这一特性对分类模型仍尤为重要。

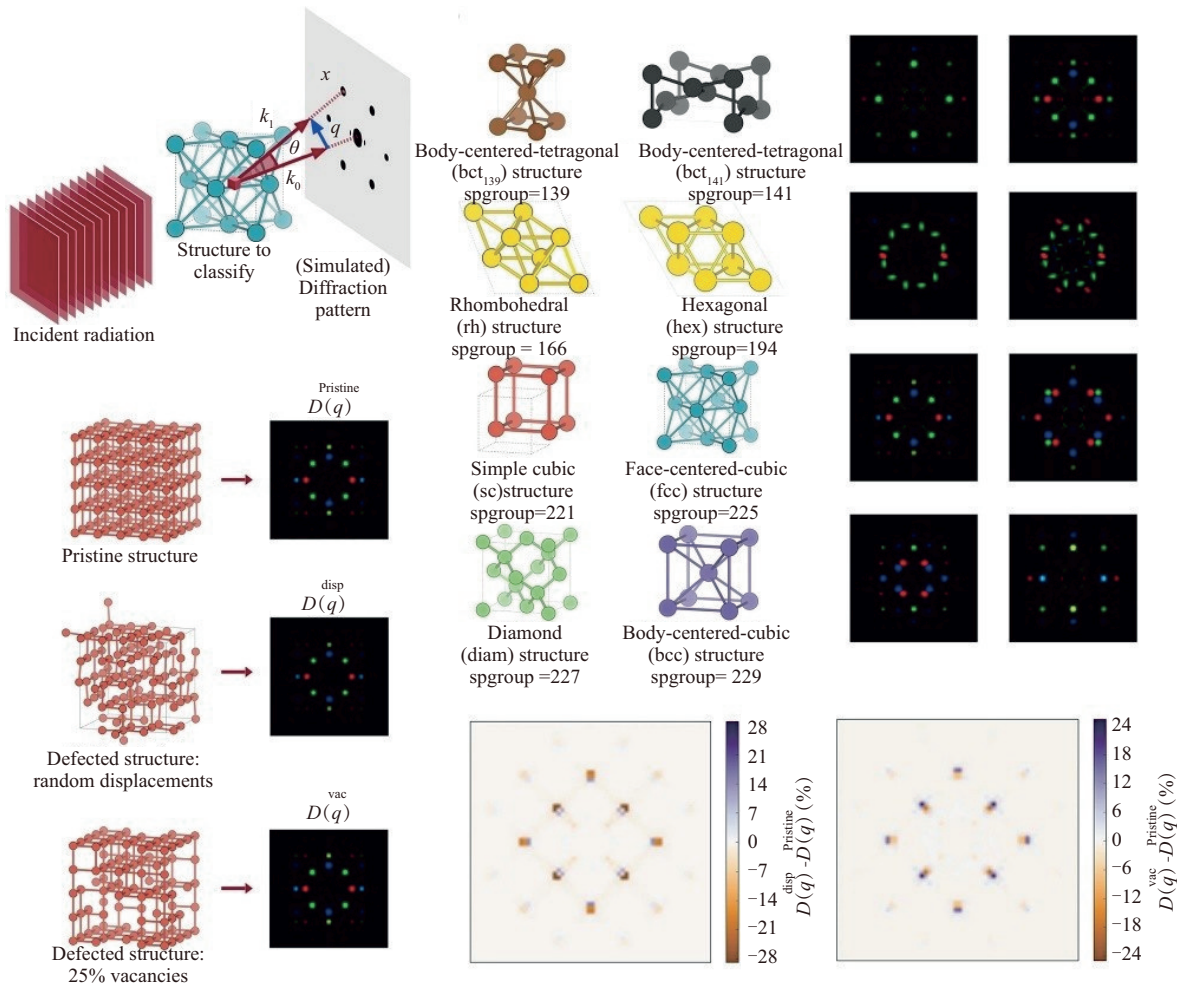


图 14 二维衍射指纹的构造和衍射图案的衍射实例^[44]

Fig. 14 Construction of 2D diffraction fingerprints and examples of diffraction patterns^[44]

受量子力学对实空间和动量空间电子运动的描述启发, Ren 等^[45]提出将实空间和倒空间描述符结合,用于固态材料的逆向设计。在实空间中,提取晶胞基矢、原子坐标以及原子的电负性、第一电离能等性质,构建特征矩阵。倒空间部分与衍射指纹具有相同的物理本质,将所有原子的元素性质整合到倒空间表示中。最终,将实空间与倒空间表示拼接,作为神经网络框架中的晶体描述符。

光谱表示虽允许成分和结构发生变化,但很难实现算法自动化。该领域的一个突出挑战是开发一种可逆的晶体表示法,使其能够适配各类化学体系(成分变化)和各类晶体空间群(结构变化),从而实现通用的(属性驱动的)逆向设计^[46]。

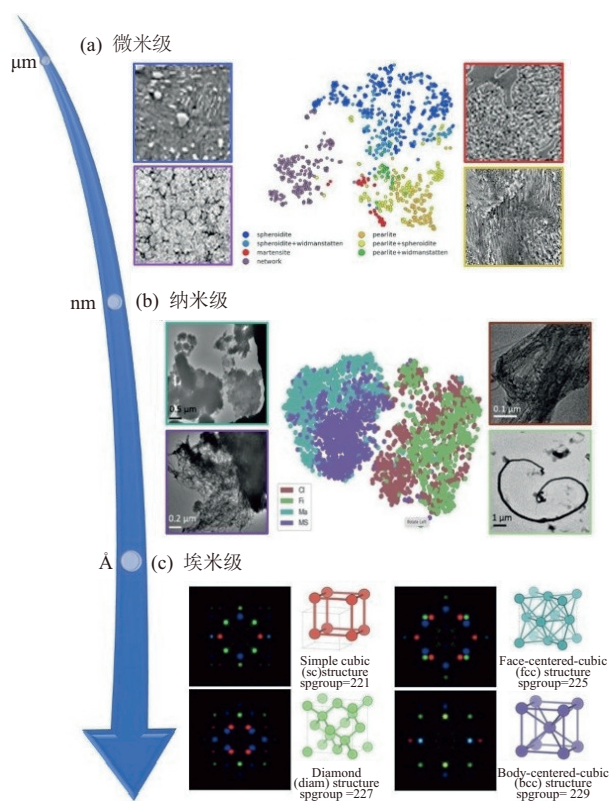
微观结构的分类尤为重要,它是深度学习应用于显微镜图像,进行材料分类的开创性演示之一^[47]。图 15 展示了微观结构、结构形态和晶体结构分类的示例。随着结构尺度不断细化,分类的准确性和可解释性也随之提升。这对研究材料的外

在性能表现与内在结构的关系具有一定的推动作用。更有多项研究^[17-18, 20, 36, 44, 47]表明,材料的性能更多依赖于结构,而非元素种类。

小角度散射是研究多尺度三维非晶态聚合物结构的核心表征技术^[48]。小角度中子散射和小角度 X 射线散射已被广泛应用于聚合物科学与工程领域。对于各向异性结构的材料,其测量和分析流程远较各向同性结构复杂:散射测量需沿精心选定的方向进行,所得数据分析为二维散射轮廓。与一维轮廓相比,二维轮廓的分析方法更为复杂,通常需要借助专用软件完成。

非晶态聚合物通常缺乏精确的原子顺序和空间排布,而半结晶态聚合物则呈现出原子、链段级的周期性精确排列。为了表征半结晶态聚合物材料中的原子排列结构和结晶度,可以使用 X 射线衍射技术(XRD)和广角 XRD(WAXD)技术。

将衍射指纹与倒空间描述符引入机器学习预测,为研究晶体材料的整体性质提供了新的途径。然而,这类方法无法提供单个原子的元素信息,也

图 15 多尺度结构分类^[47]Fig. 15 Multiscale structural classification^[47]

缺乏原子间相互作用的细节,这限制了其在结构分类之外的应用。这一不足可通过结合实空间与倒空间表示来弥补,但目前仍有大量工作有待开展。

1.5 其他表征方式

2007年, Behler和Parrinello^[49]提出了原子中心对称函数(atom-centered symmetry functions, ACSF)的描述符。ACSF通过捕捉每个原子的局部环境(如与邻近原子的距离和角度)来生成描述符,为每个原子构建对称函数向量,且该函数确保系统满足平移、旋转和镜像对称性。ACSF主要适用于神经网络模型的输入特征表示。随后, Bartók等^[50]对ACSF进行了推广,采用径向高斯函数与角动量项的叠加来表征原子环境。此后,研究人员开发了机器学习模型以预测表面吸附质的相互作用^[51],结果表明,选取表面偶极子与分子偶极子之间的夹角作为描述符时,模型性能最优。另一项研究证实,键角是无机晶体电子能带结构机器学习分析中最重要的描述符之一^[52]。上述研究表明,面向材料物理特性的机器学习模型,可通过获取材料角度相关信息实现性能提升。

除了上述表征方式外,还有其他多种表征方法^[53-54]。这些方法在原理、功能及适用范围上各具特点,针对特定任务选用合适的表征方式,往往能达到事半功倍的效果。其设计思想和原理,也可为研究者开发效率更高、适用性更广的新型表征方法提供思路与借鉴。表1简要总结了各类表征方式的优缺点和适用范围。

表 1 各种表征方式及其特点

Tab. 1 Various characterization methods and their features

表征方式	优点	缺点	适用范围
原子袋	简单易懂	不包含结构信息,仅为优化成分设计	小分子的成分设计
字符串	原理简单、对应唯一分子	空间结构信息有限,每种材料有多种表示,大分子表示复杂	小分子材料、特定原子团的较大分子
分子图、邻接矩阵、距离矩阵	灵活、允许较多可能的扩展,具有高度可解释	依赖于最近邻居的确定,难以对全局结构信息进行编码	有机材料
原子位置矩阵	具有高度可解释	空间信息获取不易,缺乏原子相互作用信息	晶体材料
库仑、Ewald求和、正弦矩阵	原理简单,基于物理模型并具有一定解释性	用零填充确保矩阵的大小恒定,不方便处理不同元素的数据集	晶体材料
键袋	灵活、允许较多可能的扩展,具有高度可解释	需要事先确定元素和键的类型	分子材料
拓扑条形码	包括结构位点和全局信息,能够表征孔隙和空腔	与传统的物理和化学知识相关性差,数学表达式复杂,数据维度高	有机材料、晶体材料(依赖截止半径)
密度图、体素图	信息更全面,高度的通用性,生成质量高、速度快	原子类型解码失灵,难以通过DFT稳定优化,计算负担显著增加	晶体材料
衍射指纹图谱	计算简单,易于理解,具有明确的物理意义,有一定鲁棒性	元素信息有限,无法描述原子距离和相互作用,数据维度高,仅用于结构分类	晶体材料

2 材料生成

随着材料科学的快速发展,传统试错法和经验

驱动的研究模式已难以满足高性能材料研发的需求。AI技术的突破为材料发现带来了范式革新,尤其是GAN、GNN与VAE等方法的深度融合,显著

提升了材料生成、筛选与优化的效率。本章聚焦 AI 辅助材料生成的核心技术,系统梳理了基于机器学习的主动学习与监督回归模型、基于 GAN 的对抗生成框架、基于 GNN 的对称性感知生成策略、基于 VAE 的隐空间建模方法、基于扩散模型的高保真跨尺度生成技术,以及面向材料科学的大规模预训练模型的最新研究进展,揭示了 AI 如何通过算法创新与领域知识的协同,突破传统材料研发的高维瓶颈、计算瓶颈与物理约束,推动材料生成向高效化、智能化方向迈进。

2.1 基于机器学习的方法

在当今材料生成领域,深度学习凭借其强大的非线性建模能力占据主导地位,但传统机器学习方法仍展现出不可替代的核心竞争力。相较于深度学习对大数据量和计算资源的高度依赖,机器学习算法凭借其模型可解释性强、小样本学习效率高、物理特征融合灵活等优势,在材料生成中持续发挥着重要作用。

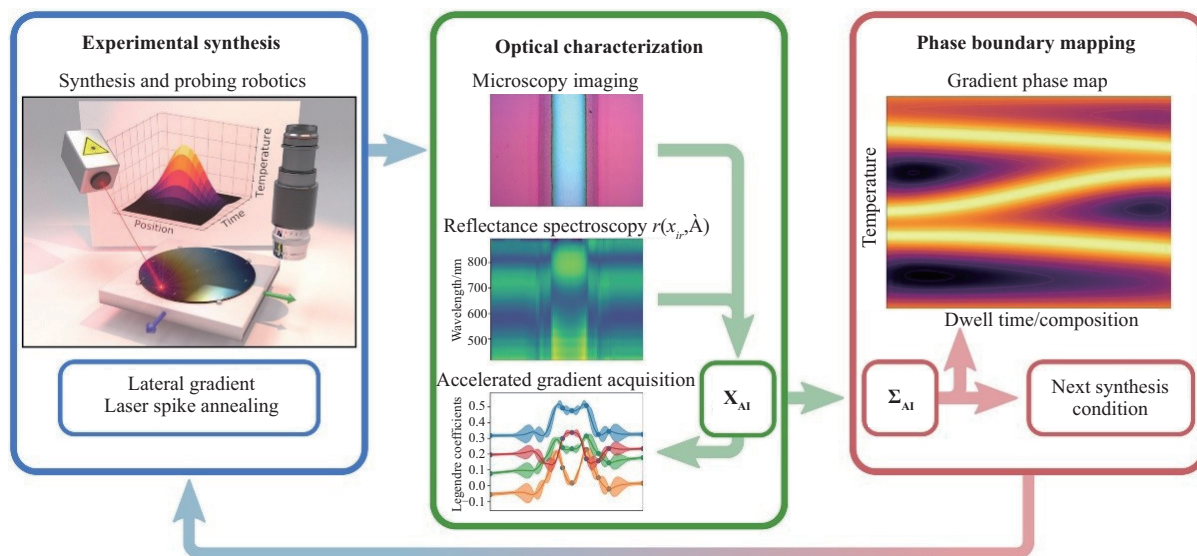
支持向量回归 (support vector regression, SVR) 是一种基于统计学习理论的监督学习算法,其核心原理在于通过核函数将非线性数据映射到高维特征空间以实现线性回归,同时采用 ϵ -不敏感损失函数控制模型对噪声的敏感度,并运用结构风险最小化原则平衡模型复杂度与预测精度。这些特性使其在材料生成中具有独特优势。

针对 DFT 计算弹性模量的成本高昂、对复杂体系存在局限性的问题, Tehrani 等^[55]提出了一种基于 SVR 的机器学习框架。该模型通过遗传算法优化变量选择,采用径向基核函数构建非线性回归模型,并引入十折交叉验证以防止过拟合。模型预测弹性模量的均方根误差 (root mean square error, RMSE) 与 DFT 结果高度吻合。这一方法突破了 DFT 在复杂体系中的计算瓶颈,成功将预测范围拓展至 Pearson 晶体数据库中的 118 287 种材料。通过筛选体积模量大于等于 300 GPa 且剪切模量大于等于 150 GPa 的材料, Tehrani 等^[55]锁定了三元铈钨碳化物和四元钨钨硼碳化物为候选材料。

除了 SVR, 梯度提升回归 (gradient boosting regression, GBR) 方法在材料科学中也展现出了其独特的应用价值。GBR 通过逐步叠加多个简单模型修正前序模型的预测误差,最终提升整体模型的精度。其流程从初始化基础预测值开始,经多轮迭代优化:在每一轮中,先计算当前模型对各样本的预测误差,再训练新的弱学习器拟合误差的方向和

大小。GBR 凭借其高精度和鲁棒性,成为材料研究中不可或缺的工具。Ren 等^[56]通过 GBR 模型成功发现了 9 种潜在的 212-Zintl 相化合物。该研究首先构建了一个包含 344 组晶格热导率数据的训练集,涵盖 30 种已知 Zintl 相化合物。Ren 等^[56]选取了 21 个关键特征,经皮尔逊相关性分析剔除冗余特征,最终保留了 20 个特征构建输入矩阵。采用十折交叉验证和贝叶斯优化对 GBR 超参数进行调优和模型性能评估,实现了测试集决定系数 R^2 达到 0.988、RMSE 仅 0.083 W/(m·K) 的高精度预测。基于模型预测,研究团队筛选出 9 种未被探索的 212-Zintl 相化合物。该工作通过 GBR 与 DFT 的协同策略加速了材料发现,同时为开发高效热电材料提供了新思路,验证了 GBR 在复杂材料体系高通量筛选中的可行性。

虽然 SVR 和 GBR 通过特征工程与模型优化显著提升了材料生成效率,但其本质仍依赖于预先构建的完整标注数据集。在材料科学领域,这往往意味着需要耗费大量计算资源进行第一性原理计算或实验验证以获取标注数据。特别是在探索新型化合物或极端条件相变等场景下,SVR 和 GBR 的数据获取成本可能成为制约研究进程的瓶颈。此时,主动学习通过动态优化数据标注过程的策略优势便凸显出来:它不再被动接受既定数据集,而是通过智能采样机制主动识别对模型优化最具价值的数据点,在保证预测精度的同时将计算资源聚焦于关键样本的标注。其具体流程通常从少量初始标注数据开始,通过迭代循环逐步优化模型性能。主动学习辅助材料生成的代表性研究包括科学自主推理代理 (scientific autonomous reasoning agent, SARA) 系统等^[57-58]。Ament 等^[59]提出的 SARA 通过分层主动学习框架实现了非平衡相图的高效绘制。如图 16 绿色边框所示,在内部循环中,表征智能体利用基于物理约束的高斯过程回归模型加速反射光谱数据采集:首先,通过显微镜图像提取条纹对称性与梯度峰值位置作为先验知识,构建条纹特异性核函数;随后,通过 Legendre 多项式降维,并采用集成梯度不确定性采样策略,仅需 15 次迭代即可将反射梯度预测的 R^2 提升至 0.9,相比传统随机采样加速近十倍。如图 16 所示,在外部循环中,合成智能体整合多条纹数据,通过温度梯度映射与高斯过程回归结合的主动学习策略提出最优退火条件 (温度、停留时间),最终,在 Bi-O 体系中成功锁定 δ -Bi₂O₃ 的室温稳定条件,实验周期相比穷举搜索缩短两个数量级。

图 16 SARA 的闭环自主材料合成和发现周期^[59]Fig. 16 Closedloop autonomous materials synthesis and discovery cycle of SARA^[59]

传统机器学习方法凭借其物理可解释性和灵活的特征工程能力,在材料生成领域仍占有一席之地。但随着材料数据维度呈现指数级增长,传统机器学习方法在处理高维非线性关联时已显现不足。深度回归模型凭借其多层次特征抽象能力,为突破这一瓶颈提供了新思路。深度回归通过堆叠非线性变换层自动提取材料数据的潜在特征,特别适用于晶体场畸变、电子云分布等复杂场景。例如, Jha 等^[60]提出的 IRNet 框架是一种基于残差学习的深度回归框架,其每个全连接层后均引入跨层残差连接,并通过逐层学习输入-输出残差映射,在 OQMD-SC 数据集上实现 0.038 eV/atom 的平均绝对误差,较随机森林提升 47%。该工作为无机材料高通量筛选提供了端到端回归框架,已被成功应用于组合式新材料搜索,直接服务于材料发现流程。然而,这类深度回归方法在材料生成中仍面临根本性约束:在处理多目标优化或非连续设计空间时,模型易陷入局部最优解。这促使研究者转向深度学习模型,通过构建隐变量与材料特征的联合概率分布,实现可控生成与跨域插值,从而开展基于 GAN、GNN 等深度学习模型的生成式材料辅助研究。

2.2 基于生成对抗网络的方法

自 2014 年 Goodfellow 等^[61]首次提出 GAN 以来,GAN 凭借强大的数据生成能力,在众多领域得到了广泛应用。GAN 的核心机制在于其由生成器与判别器构成的对抗结构,分别负责生成数据、评估生成数据的真实性。通过两者的持续博弈,模型逐步优化生成效果,最终实现高质量数据生成。

GAN 通过多维度建模显著推动了材料成分设

计的革新。在分子几何生成方向, Hoffmann 等^[62]突破了传统自回归模型的限制,提出了一种基于欧几里得距离矩阵的 Wasserstein GAN (WGAN)。该模型通过对称矩阵参数化和 SchNet 不变性卷积网络,直接生成满足三维嵌入约束的分子距离矩阵。其在 QM9 异构体数据集上成功实现了化学式与几何构型的协同生成,利用软激活函数约束矩阵半正定性,并通过特征值截断损失控制嵌入维度,最终实现 $C_7O_2H_{10}$ 的 EDM 生成,并证明其可有效避免原子重叠等冲突。随后,基于 GAN 的无机材料成分生成技术也取得了重大突破。Dan 等^[63]提出的 Materials GAN (MatGAN) 模型采用 WGAN 架构,结合稀疏矩阵编码技术,实现了无机材料成分的高效生成。生成器网络由全连接层与 7 层反卷积层构成,输入潜在噪声向量后逐步上采样;判别器则采用 7 层卷积网络,通过空间维度压缩提取特征并判断样本真伪。两个网络交替训练,通过最小化 Wasserstein 距离优化各自的损失函数,促使两者性能共同提升(图 17)。该模型以 ICSD 数据库中的 25 万材料为训练集,生成 200 万候选成分后,利用电荷中性和电负性平衡规则筛选出 169 万化学有效样本。为进一步评估生成多样性,他们还设计了基于 Dice 系数的自编码器,通过对比原始与重建矩阵的重叠度验证生成材料的合理性,发现 MatGAN 生成的样本覆盖了训练集未占据的化学空间,证明其具备高效探索隐式化学规则的能力。紧接着, Song 等^[64]将 MatGAN 模型扩展至二维材料发现领域,结合随机森林分类器筛选潜在二维材料,最终通过 DFT 验证了 12 种稳定结构,展示了 GAN 在材料成分设计中的潜力。

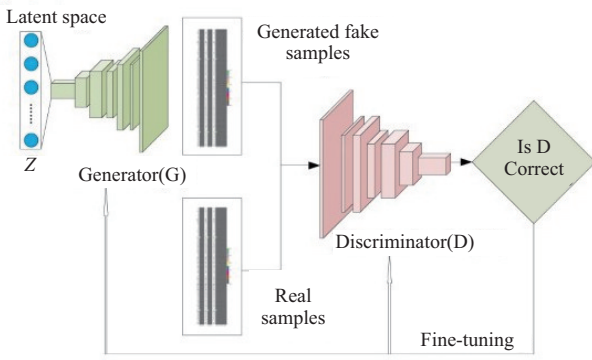


图 17 MatGAN 框架图^[63]
 Fig. 17 Framework diagram of MatGAN^[63]

在材料科学领域,晶体材料因原子周期性排列决定了机械强度、催化活性和热力学稳定性等关键性能,是能源存储、半导体器件等领域的核心基础。GAN 可从数据中学习晶体结构的内在规律,并将物理约束嵌入生成过程。面对高通量筛选的巨大计算成本,Long 等^[65]基于深度卷积 GAN (deep convolutional GAN, DCGAN)^[66]提出约束晶体深度卷积 GAN (constrained crystals deep convolutional GAN, CCDCGAN, 图 18),将形成能优化与生成过程深度融合。其核心原理是通过两种策略实现物理约束的整合:其一为“DCGAN+约束筛选”,即在生成后通过形成能阈值筛选稳定结构;其二为“反馈循环式 CCDCGAN”,通过反向传播将形成能损失直接嵌入生成器训练,利用判别器输出的稳定性信号实时调整隐空间采样方向,从而引导生成器优先输出能量更低的候选结构。CCDCGAN 的工作原理如图 18 所示。生成器(图 18 左)从随机数开始创建二维晶体图;判别器(图 18 右下)负责辨别生成晶体图的真伪;生成的晶体图还会经过形成能预测模块,其输出的形成能信息作为约束,通过反馈回路直接影响生成器的训练过程(图 18 右上)。形成能损失与判别器损失共同优化生成器,使其在隐空

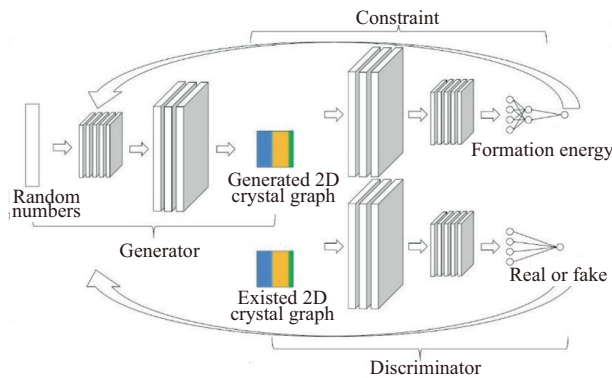


图 18 CCDCGAN 框架图^[65]
 Fig. 18 Framework diagram of CCDCGAN^[65]

间中自动搜索并优先生成能量较低的候选结构。该模型采用体素化的二维晶体图作为连续表征,通过卷积层捕获局部原子排列模式,并结合形成能预测模块实现多目标优化,成功克服了传统高通量筛选的计算瓶颈。

Kim 等^[67]开发的沸石生成对抗网络 (Zeolite GAN, ZeoGAN, 图 19) 则针对多孔材料的三维拓扑复杂性,基于带梯度惩罚的 WGAN (WGAN with gradient penalty, WGAN-GP) 框架构建生成模型。其关键创新在于将能量维度与材料维度联合编码为 3^2 的分数坐标张量输入,通过三维高斯核函数将原子位置映射为连续密度场,并利用梯度惩罚机制约束生成结构的化学计量比和孔隙连通性。生成器通过对抗训练学习真实沸石的原子分布与吸附能关联性,结合清洗操作剔除不满足键长和周期性边界条件的伪结构,成功生成 121 种新型多孔材料。但 ZeoGAN 生成的沸石结构存在部分不符合空间群对称性要求或原子间距不合理的问题,需通过后续清洗步骤修正,增加了时间成本。

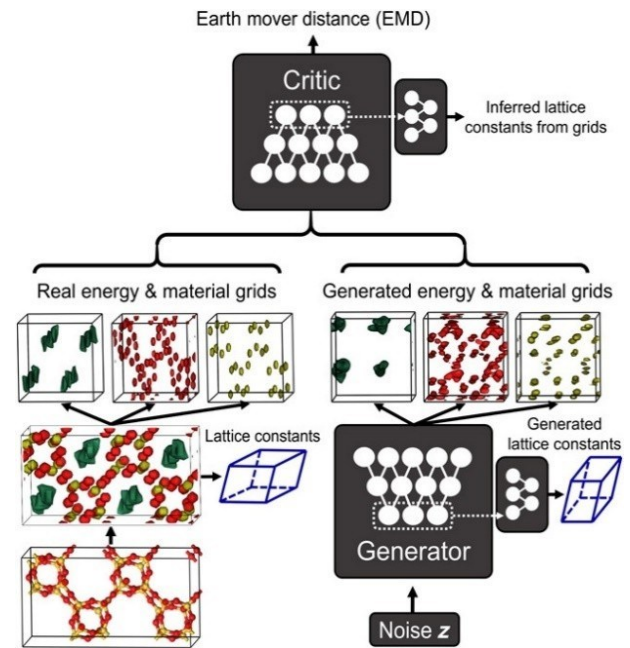


图 19 ZeoGAN 整体示意图^[67]
 Fig. 19 Overall schematic of ZeoGAN^[67]

为了解决 ZeoGAN 等模型在对称性约束和物理合理性方面的不足,Zhao 等^[68]提出了物理引导生成模型,通过对称性自适应编码策略将空间群衍射变换规则融入生成过程。生成器采用反卷积层与多层感知机捕获原子间长程关联,同时设计原子间距损失和空间群对称性损失,将物理规则转化为可微损失项以反向优化网络权重。此外,该模型采用自增强技术对隐空间采样进行数据扩增,结合贝叶

斯优化,提升对称性松弛结构的能量稳定性,最终在保证生成多样性的同时,将结构有效性提升 700%。

近年来,随着深度学习的快速发展,结合 GAN 灵活性与材料科学跨尺度需求的多尺度及微结构生成研究取得了显著进展^[69-70]。在近期研究中,Fuchs 等^[71]提出了一种基于立体 GAN 的创新方法,通过融合参数化随机场与深度学习技术,实现了从二维实验数据生成统计等效的三维颗粒及其内部晶粒结构。该方法的核心框架分为宏观颗粒外壳建模与微观晶粒结构生成两个尺度,并采用 GAN 进行立体学优化。在宏观尺度上,利用球谐函数对颗粒外壳进行参数化建模,通过随机场拟合纳米 CT 数据中颗粒的形态分布;在微观尺度上,引入广义平衡功率图 (generalized balanced power diagram, GBPD) 描述晶粒空间分布,结合泊松点过程

生成晶粒种子点,并通过全连接神经网络动态调整晶粒形态参数。该工作通过 GAN 实现立体学优化,生成器与判别器的对抗训练通过立体学投影机完成:生成器输出三维 GBPD,经随机切片生成二维投影;判别器对比投影图像与电子背散射衍射 (electron backscatter diffraction, EBSD) 图像 (图 20),驱动模型学习径向晶粒取向特征。训练中采用动态强度调整策略,通过迭代优化泊松点过程强度,使生成与实测晶粒密度匹配。此外,引入数据增强技术提升模型泛化性,并通过旋转不变性设计确保晶粒取向的径向对称性。结果表明,生成颗粒的直径、致密度、长宽比和球形度等形态学参数与实测数据高度吻合,其星形近似模型对纳米 CT 分割颗粒的体积覆盖率达 96%,同时公开的模拟数据集支持电化学-力学耦合仿真。

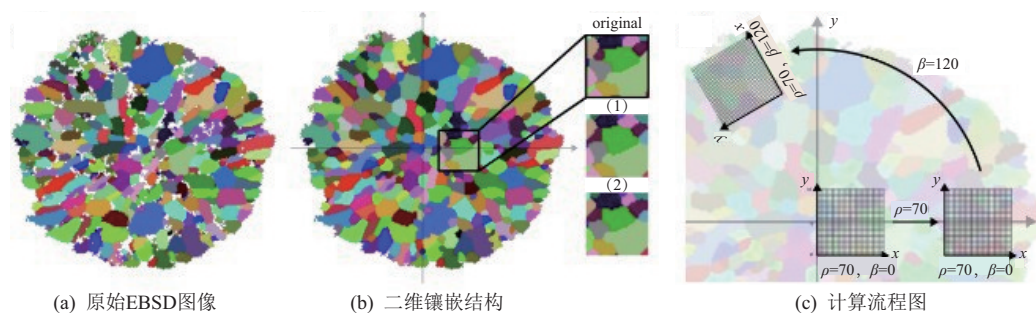


图 20 从 EBSD 图像生成适配 GAN 训练的输入形式^[71]

Fig. 20 GAN compatible input formats generated from EBSD images^[71]

在极致性能材料领域,混合生成模型为复杂材料生成提供了新的范式^[72-73]。其中,Mao 等^[74]提出了一种基于 GAN 的无经验依赖系统化方法,解决了传统材料设计方法对先验知识的高度依赖、效率低下及对初始猜测敏感等核心问题。该研究创新性地构建了包含数百万随机生成结构的数据库,按 7 种二维晶体学对称性分类,并训练对称性专属的 GAN 模型,实验流程如图 21 所示。具体而言,首先生成数百万个随机微结构单元,通过有限元模拟计算其等效弹性常数和各向同性指标,形成包含结构拓扑、弹性模量及各向同性度的数据库(图 21(a))。随后,针对高潜力对称性,训练具有 5 层生成器和 3 层判别器的 GAN 模型,生成满足目标孔隙率且接近 Hashin-Shtrikman (HS) 上限的结构。生成器通过对抗损失与风格迁移损失的联合优化,确保输出结构的连通性与孔隙率精度;判别器则基于卷积神经网络评估结构性能的优劣(图 21(b))。最后,即可生成具有目标属性的新型材料(图 21(c))。结果表明,GAN 生成的 400 多种结构,在孔隙率 0.05~0.75 的范围内,均达到 HS 理论值的 94% 以上,各

向同性度 $\Omega \leq 5\%$ 。此方法框架可扩展至三维及其他极端性能目标,为极致性能材料的生成开辟了新路径。

GAN 在材料生成中展现出强大的数据生成与优化能力,推动了多领域的创新应用。GAN 在材料成分生成、晶体结构设计与优化、多尺度与微结构生成、混合生成模型等方面均表现突出,为材料生成提供了系统化、高通量的解决方案。

2.3 基于图神经网络的方法

GNN^[75]作为深度学习的重要分支,凭借其在节点间信息传递与聚合方面的强大能力,能够精准捕捉图的结构特征以及节点间的复杂关系。这一特性使其在材料科学领域,尤其是材料设计与生成方面,得到了广泛且深入的应用。

在材料科学领域,高通量生成与筛选的协同优化是突破传统发现瓶颈的关键,其核心在于如何高效探索庞大的化学空间并精准筛选稳定材料。传统方法依赖 DFT 计算,虽精度高但计算成本巨大,且难以覆盖复杂多元素体系。在此背景下,Graph networks for materials exploration (GNoME) 框架

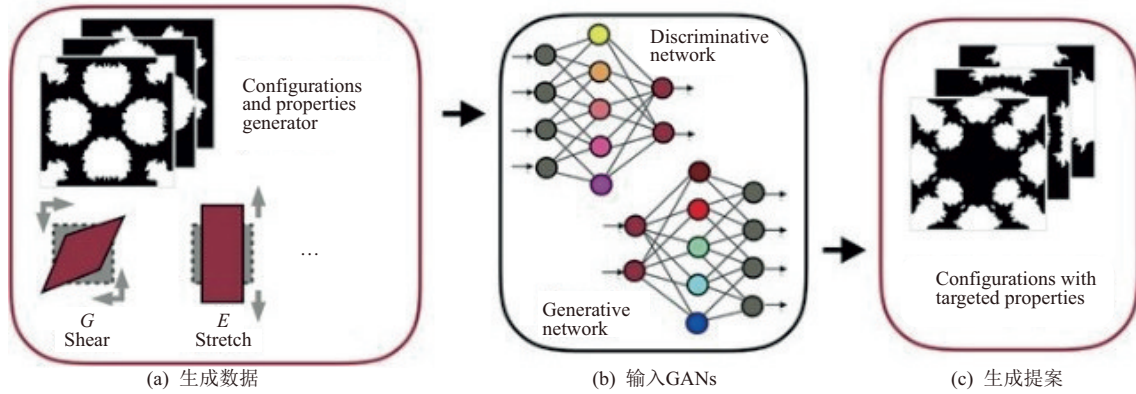


图 21 生成复杂材料的程序示意图^[74]

Fig. 21 Schematic of the procedure for generating complex materials^[74]

(图 22)^[76]应运而生。它通过 GNN 与主动学习的深度融合,实现了材料发现效率的革新性突破。其核心原理在于将对称性感知结构生成、高精度 GNN 稳定性预测与动态数据闭环相结合。具体来说, GNoME 包含结构流程和组成流程:结构流程通过对称性感知的部分原子替换保留晶格对称性,以探索化学空间;组成流程则以化学式为输入,并结合

从头算随机结构搜索生成高熵或复杂元素组合的候选结构。两流程产生的候选结构均被编码为图数据,输入 GNN 模型预测稳定性,预测结果随后通过 DFT 计算验证。这些验证数据不仅用于扩充已包含 220 万稳定结构的 GNoME 数据库,还用于生成能量模型和原子间势;更关键的是,会反馈至模型进行再训练,形成动态数据闭环。

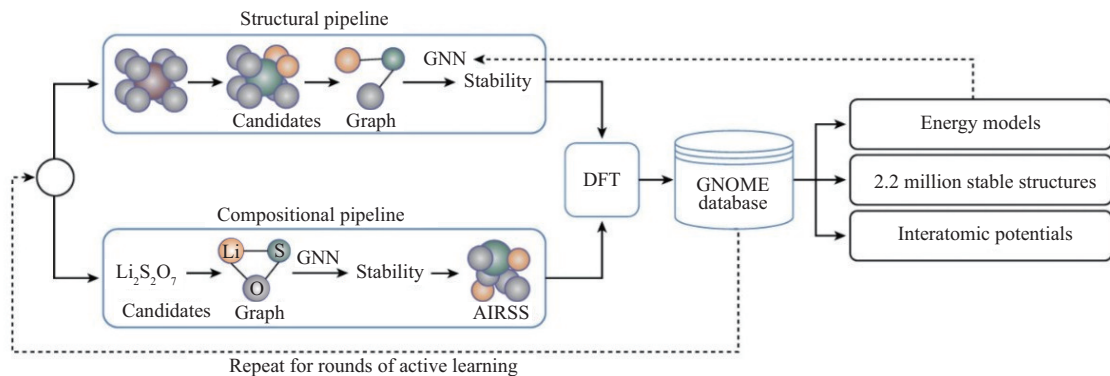
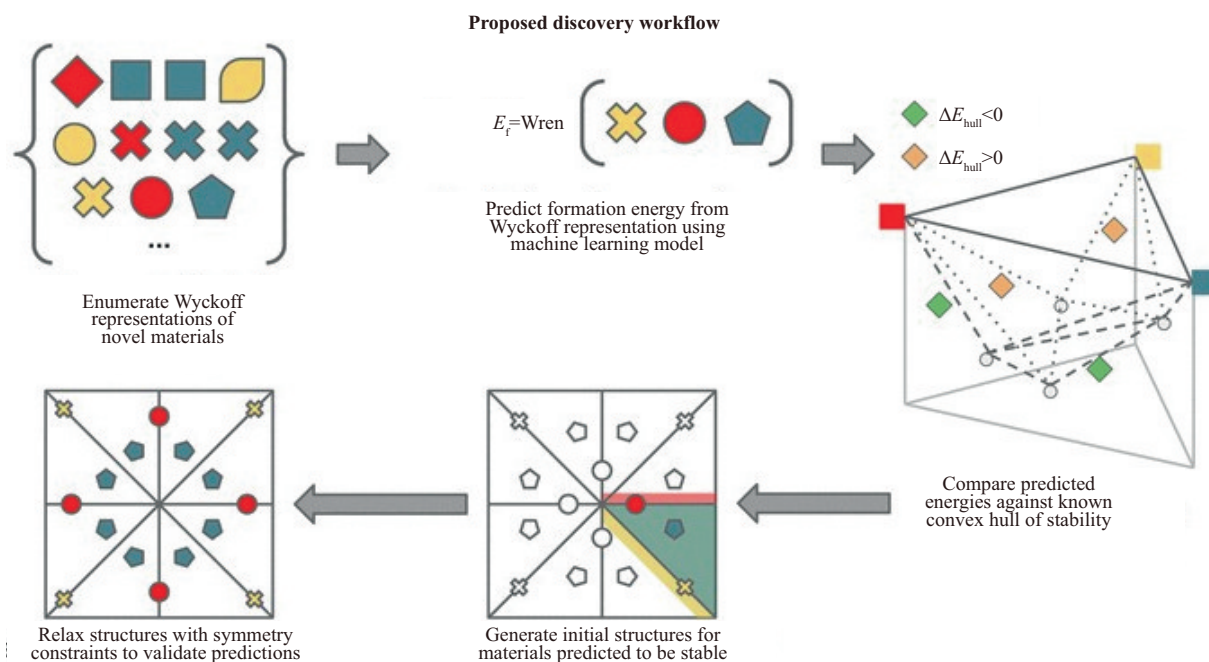


图 22 使用 GNoME 进行晶体材料生成图^[76]

Fig. 22 Crystal material generation using GNoME^[76]

同样地, Ojih 等^[77]为了减少对 DFT 的依赖,提出了一种基于图论与 GNN 的协同 workflow。该 workflow 通过图论辅助的通用结构搜索器生成超过 340 万种晶体结构,利用预训练的晶体哈密顿 GNN (crystal hamiltonian graph neural network, CHGNet) 实现了快速结构优化与动态稳定性筛选。CHGNet 基于 Materials Project 的弛豫轨迹数据训练,通过对称性感知的等变消息传递层显式处理晶体对称性,确保模型对旋转和平移操作保持等变性,从而精准预测复杂晶格的物理性质。此外, CHGNet 还采用多任务联合学习框架,可同步预测总能量、原子力、维里应力和磁矩,无需针对特定材料重新训练即可泛化至 63 种元素,进一步验证了 GNN 在辅助减少 DFT 计算量方面的巨大潜力。

传统机器学习方法依赖原子坐标作为输入,导致探索未知材料时效率低下。而与坐标无关的粗粒度表示学习为解决材料生成中的计算瓶颈问题提供了新思路^[78]。其中, Goodall 等^[79]提出了一种基于对称性编码的粗粒度表示框架 Wyckoff。该方法将晶体结构的无限原子坐标空间转化为可枚举的 Wyckoff 表示空间,如图 23 中第一步所示,通过描述晶体空间群、Wyckoff 位置及对应元素,在保留结构对称性信息的同时避免显式坐标计算。基于此构建的 Wren 模型,其核心是基于 Roost 架构的 GNN,利用消息传递机制对 Wyckoff 位置的多重集进行嵌入学习,并结合对称性增强和深度集成不确定性,估计提升预测鲁棒性,如图 23 中第二步所示。这一方法有效解决了传统元素组成模型无法区分

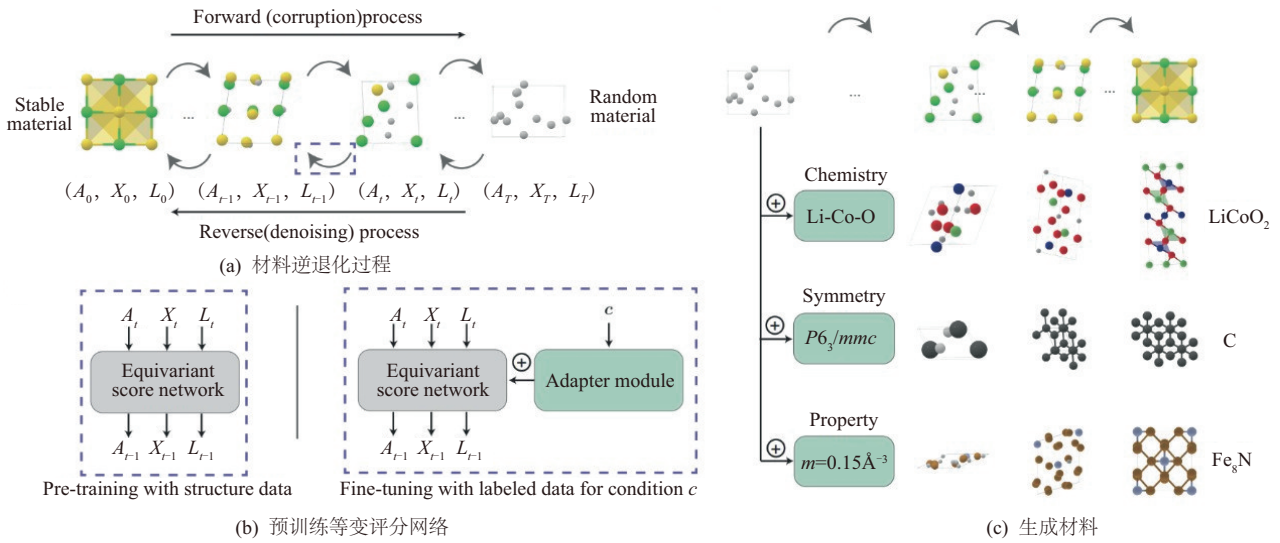
图 23 使用 Wren 模型进行材料生成流程图^[79]Fig. 23 Material generation flowchart using the Wren model^[79]

同素异形体的缺陷,同时克服了依赖 DFT 结构优化的循环依赖问题。通过结合数据驱动的元素替换概率和 Wren 模型的稳定性预测,该工作不仅将材料发现效率提升至新高度,还为对称性导向的粗粒度表示学习奠定了方法论基础,推动了 GNN 在跨尺度材料生成中的应用。

传统方法(如 G-SchNet 等)虽尝试利用 GNN 编码材料结构,但受限于扩散过程的通用性,生成的晶体常存在稳定性低或多样性不足的问题。而微软研究院提出的 MatterGen (matter generation) 模型^[80]成功结合等变 GNN 架构实现了高效生成。MatterGen 通过分阶段扩散原子类型 A 、分数坐标 X 和晶格结构 L ,实现了物理驱动的噪声过程:原子类型采用掩码扩散逐步替换为吸收态,分数坐标使用包裹正态分布保持周期性边界约束,晶格则通过对称矩阵扩散固定旋转自由度(图 24(a))。同时采用等变 GNN 作为评分网络,通过多层消息传递机制联合预测原子类型、坐标和晶格的去噪梯度,从而在生成过程中同步优化对称性与能量稳定性(图 24(b))。为了实现材料特性精准调控、进一步达成属性导向生成, MatterGen 引入适配器模块,允许在预训练模型上通过小规模标注数据微调,并结合分类器自由引导技术调整生成方向(图 24(c))。实验流程上,模型首先在包含 60.7 万稳定结构的 Alex-MP-20 数据集上预训练,随后针对特定任务微调适配器。结果显示, MatterGen 生成的晶体中,75% 能量低于 Alex-MP-ICSD 凸包的阈值;在目标对称性

生成任务中,其成功生成 20% 符合指定空间群的结构,远超基线模型。MatterGen 通过融合物理约束的扩散机制与 GNN 的几何感知能力,为跨周期表、多属性约束的材料生成提供了通用框架。

无独有偶,面向材料生成的文本引导扩散模型(text-guided diffusion model for material generation, TGDMat)等工作^[81-83]同样通过结合扩散模型的生成能力与 GNN 的几何建模优势,推动了材料生成的进展。然而, TGDMat 模型从联合建模原子类型 A 、分数坐标 X 与晶格结构 L 的方向入手。传统方法(如 SyMat 等)采用 VAE 与得分网络分阶段生成 A 和 L ,而 DiffCSP 也仅仅聚焦于结构预测,均未实现三者的端到端联合学习。为此, TGDMat 创新性地提出了联合扩散框架:对于连续变量 L ,采用去噪扩散概率模型(denoising diffusion probabilistic model, DDPM),通过逐步添加高斯噪声并学习逆过程的晶格参数预测;对离散变量 A ,引入吸收态离散扩散,通过马尔可夫链逐步遮蔽原子类型并重建。模型核心为周期性 $E(3)$ 等变 GNN,其通过多层等变图卷积传递原子特征与坐标信息,同时将通过预训练语言模型 MatSciBERT 提取的文本嵌入融入原子特征,引导生成结构满足文本描述的全局约束。在随机生成任务中, TGDMat 模型生成的材料结构覆盖率达 99.52%,且生成材料属性与文本条件匹配度超 95%。TGDMat 通过融合文本条件与联合扩散机制,实现了用户可定制的高效晶体生成,为材料逆向设计提供了新范式。

图 24 使用 MatterGen 进行无机材料生成^[80]Fig. 24 Inorganic material generation using MatterGen^[80]

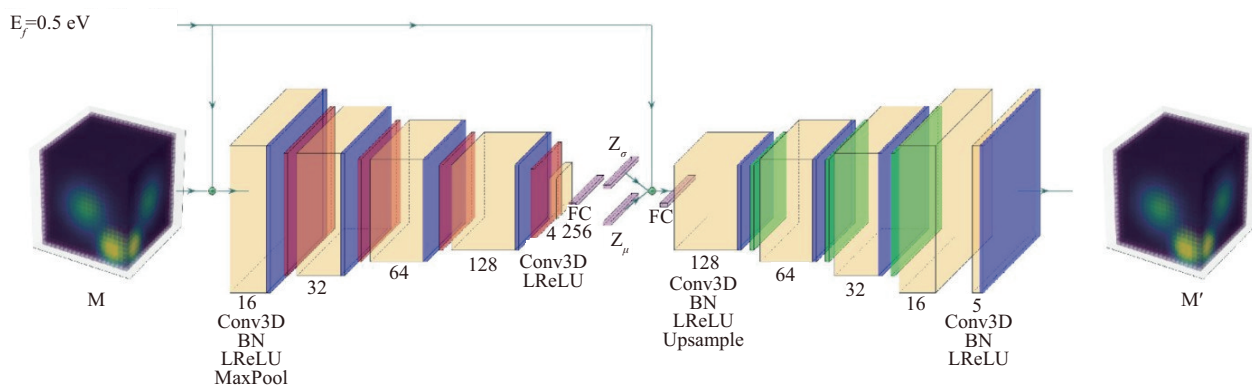
GNN 在材料科学中展现出强大的结构建模与跨尺度优化能力,推动了材料发现范式的革新。GNN 在化学空间高效探索、稳定材料筛选、对称性约束生成及多属性逆向设计等方面表现卓越,不仅突破了材料生成对传统方法的依赖,还实现了对复杂晶体、高熵合金等材料的高效生成。

2.4 基于变分自编码器的方法

VAE^[84]通过神经网络学习数据的隐含表示,可实现新的数据生成,使其在许多领域,尤其在材料科学中具有重要应用价值。VAE 通过最大化似然函数的变分下界进行训练,能有效捕捉数据的隐空间分布,进而生成新的样本。

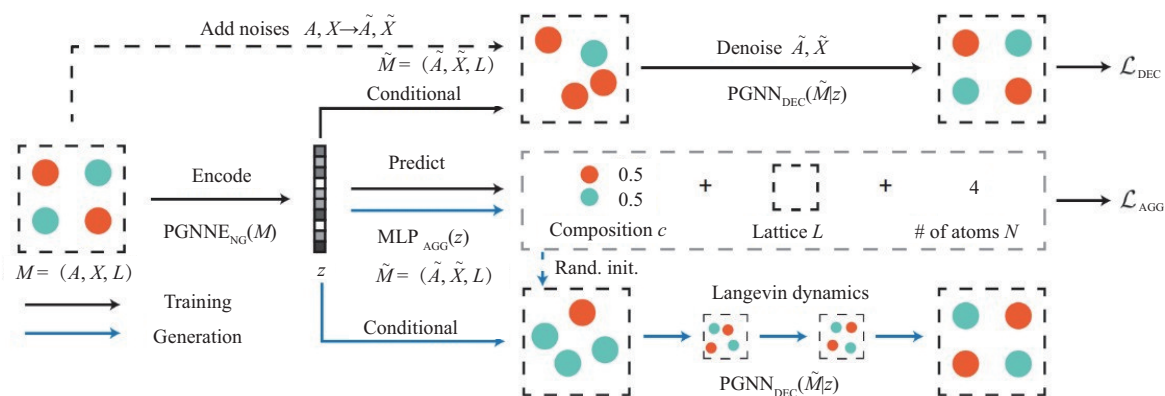
VAE 功能强大, Kim 等^[85]仅通过 VAE 结合基于离子取代材料相似性函数,便缓解了无机材料合成参数筛选中的数据稀疏问题。该方法通过文本挖掘提取合成参数,构建 30 维稀疏描述符,同时结合基于离子替换相似性算法和上下文相似性扩展邻域数据,将数据量从不足 200 条扩充至 1 200 条以上,有效缓解了数据稀缺问题。其中,VAE 编码器将稀疏输入映射至隐空间,并约束为高斯分布,解码器重构合成参数;同时采用逻辑回归分类器来验证 VAE 学习特征的有效性。发现 VAE 能生成逼真的 SrTiO₃ 合成参数,为无机材料合成筛选提供了有效途径。Hoffmann 等^[86]则将 VAE 与 3D U-Net 结合,提出了一种针对晶体结构的三维连续编码方法。该工作将晶体单胞转化为 30³体素化电子密度图,编码器采用 4 层 3D 卷积提取特征(卷积核尺寸为 3×3×3,步长 2),解码器通过上采样和卷积重构密度图,同时引入 U-Net 分割网络,对解码输出进行

原子位置分割与种类分类。训练数据包含 46 744 个单胞结构,经随机旋转增强至约 140 000 个样本,损失函数结合均方误差与交叉熵。实验结果表明,隐空间采样生成结构的原子间距中位误差低于 0.2 Å,原子种类分类准确率达 89%,且在稀土铬酸盐钙钛矿的隐空间插值中成功生成过渡结构。尽管该方法实现了三维结构的精确重建,但生成材料的物性控制仍需进一步结合条件生成机制,以支持面向功能的定向设计。为此, Court 等^[39]进一步提出 Cond-DFC-VAE,将生成与物性预测深度耦合。该模型(图 25)以电子密度图与形成能条件向量作为联合输入,通过 3D 卷积编码器提取特征,隐空间维度扩展至 266 维,其中 10 维专用于属性条件。解码器采用对称结构重构密度图后,由 U-Net 分割原子位置,并利用 CGCNN 预测 8 种物性。测试表明,Cond-DFC-VAE 生成结构的晶格参数误差约 1.2%。具体而言,其核心编码器-解码器结构为:编码器接收电子密度图(M)和特定的属性条件,通过一系列三维卷积、批量归一化、LeakyReLU 激活和最大池化操作,压缩为隐空间特征(Z);解码器以该隐空间特征和属性条件为输入,通过对称的卷积、归一化、激活及上采样操作,重建生成新的电子密度图(M'),如图 25 所示。这种设计使得模型不仅能学习晶体结构的特征,还能在生成过程中融入特定的物性导向。Cond-DFC-VAE 的关键创新在于属性条件的联合编码机制,隐空间的可视化显示,相同材料类别按形成能形成连续梯度分布。这些工作借助 VAE 的生成与压缩能力,成功实现了跨尺度材料参数优化。

图 25 Cond-DFC-VAE 模型框架图^[39]Fig. 25 Cond-DFCVAE model framework^[39]

在材料生成领域,基于VAE的模型逐渐成为重要工具,其中晶体扩散VAE(crystal diffusion VAE, CDVAE)及其改进版本的影响突出,显著提升了生成材料的稳定性和多样性。Xie等^[87]提出的CDVAE(图26)的核心在于将VAE与噪声条件分数网络(noise conditional score networks, NCSN)结合。模型主要包括3个部分:周期性GNN编码器,采用SE(3)等变架构直接处理材料的原子类型、坐标和晶格参数,通过消息传递捕捉跨周期边界的相互作用,并严格保持置换、平移、旋转和周期不变性;属性预测器,从潜变量 z 预测材料的化学组成、晶格参数及原子数,用于约束初始随机结构的生成;扩散解码器,通过NCSN逐步去噪原子坐标与类型。扩散过程中,初始随机结构经朗之万动力学逐步优化,解码器的周期性GNN输出梯度场驱动原子向局部能量极小方向移动,同时利用周期性正态分布避免分数匹配的大步长偏差。实验表明,CDVAE在重构输入结构、生成多样有效材料及优化特定属性上均优于同期已有模型。Lyngby等^[88]在CDVAE发表次年

进一步验证了其性能。他们训练CDVAE生成二维材料,经DFT松弛后发现,生成的5003个结构中73.8%具有与训练数据相当的稳定性,且化学组成和晶格复杂度显著高于传统晶格装饰方法。尽管其DFT收敛成功率略低于晶格装饰方法,但能量降幅表明初始结构更接近稳态。最终CDVAE预测了8599个新型二维材料,其中2004个接近基态,验证了其在复杂化学空间中的探索能力。由于CDVAE在原子位置精细化建模和基态逼近上的潜力,后续研究进一步探索扩散模型的理论优势。其中Pakornchote等^[89]基于CDVAE提出了扩散概率CDVAE(diffusion probabilistic CDVAE, DP-CDVAE),将原分数匹配替换为DDPM,进一步优化了生成结构的基态近似性。DDPM通过逐步去噪的马尔可夫链建模原子坐标分布,结合周期性的正态扰动,避免分数匹配方法的大步长偏差。DP-CDVAE同时引入多层感知机和图同构网络增强编码器,更加精准地预测晶格参数与原子数。这些改进也凸显了DDPM在精细化建模原子位置中的巨大优势。

图 26 CDVAE 模型概述^[87]Fig. 26 Overview of the CDVAE model^[87]

不同于Pakornchote等的研究,Ye等^[90]不满足于CDVAE的无条件生成,认为其无法高效生成满

足特定属性条件的材料。于是,Ye等^[90]提出了条件CDVAE(conditional CDVAE, Con-CDVAE),通

过引入属性条件嵌入与扩散模型融合机制,成功实现了可控晶体生成。该模型在 CDVAE 的基础上,新增条件嵌入模块、属性预测器和去噪扩散先验块,并采用两阶段训练策略,如图 27 所示。第一阶段联合优化编码器、解码器与预测器,利用属性预测损失约束隐空间结构,使相似属性晶体在潜变量空间中聚集;第二阶段基于 DDPM 训练先验块,将目标属性映射为潜变量分布,通过噪声逐步去噪,生成符合物性条件的潜变量。在生成阶段,模型将期望的目标属性分别输入到先验嵌入和属性嵌入模块;先验嵌入模块的输出随即被送入先验解码模块,以生成条件潜变量;这些潜变量与属性嵌入模块输出的属性嵌入向量相结合,最终一同送入解码器,从而生成具有目标属性的新晶体结构。实验结果显示,全条件策略在单属性生成中表现最优,而 DFT 验证表明 94.1% 的生成结构可成功弛豫,其中 22 种晶体与已知材料结构匹配,5 种为新候选材料。相较于同期工作,Con-CDVAE 通过嵌入属性条件与扩散模型融合,在复杂物性组合生成中展现出更高的灵活性。未来研究需进一步优化对称性约束生成,以提升空间群匹配精度。

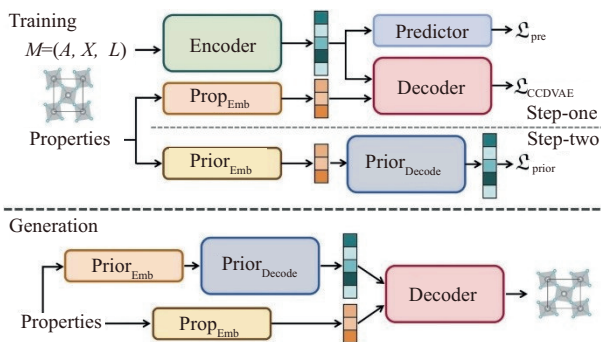


图 27 Con-CDVAE 的训练流程图^[90]

Fig. 27 Training flowchart of Con-CDVAE^[90]

CDVAE 及其改进模型生成的材料未能完全满足平移不变性和周期性变换的对称性要求,导致其生成材料的物理合理性受限,因此如何准确地捕捉物理对称性成为了一大难题。而 Luo 等^[91]提出的对称性感知材料(symmetry-aware material, SyMat)生成模型,通过融合 VAE 与基于分数的扩散模型,开创性地解决了周期性材料生成中对称性建模难题。SyMat 模型提出了分层生成框架:首先利用 VAE 生成原子类型、数量及晶格参数,通过对称性不变性避免置换和旋转对生成结果的影响;其次,针对原子坐标的复杂空间分布,引入基于分数的扩散模型,通过多图表示构建周期性邻域图,将坐标生成转换为边距分数的预测,并结合 SphereNet 架

构确保分数函数在旋转、平移和周期性变换下的不变性。与以往的 ConfGF 和 DGSM 等工作不同, SyMat 通过链式法则将坐标分数分解为边距分数的加权,并采用去噪分数匹配框架训练模型,从而在扩散过程中严格保持对称性约束。在随机生成任务中, SyMat 在结构有效性、元素分布经验模态分解和覆盖率等指标上显著超越 CDVAE 和 G-SchNet。不过, SyMat 通过分离原子类型与坐标的生成流程,在保持结构复杂性的同时,利用 VAE 加速原子类型和晶格参数的生成,但其坐标生成仍受限于扩散模型的采样速度。

VAE 及其衍生模型通过高效学习材料数据的潜在分布,为跨尺度材料生成与性能优化提供了新思路。其核心在于利用编码-解码架构,实现稀疏数据增强、三维结构精确重建及物性条件约束生成。VAE 成功应用于钙钛矿等复杂体系,逐步推动材料生成从“随机探索”向“定向设计”的智能化跃迁。

2.5 基于扩散模型的方法

扩散模型(diffusion models)作为近年新兴的生成模型,凭借分阶段噪声注入与可逆去噪的核心机制,通过马尔可夫链将数据逐步扩散为高斯噪声,再由神经网络学习逆向去噪路径实现数据生成。正向过程按预设调度策略逐层破坏数据分布,反向过程则通过训练模型预测噪声并逐步重构原始数据。这种“先破坏后重建”的范式可有效建模复杂数据分布,同时借助条件引导灵活控制生成方向。

在晶体材料生成领域,扩散模型通过结合对称性约束与条件生成机制展现出显著潜力。Tsukaue 等^[92]提出了一种基于物理约束的扩散方法,通过 X 射线衍射强度直接指导晶体生成。该方法利用 Tweedie 公式推导条件得分,将衍射强度作为理论约束融入反向扩散过程,无需额外标注数据,解决了传统条件生成方法依赖大规模样本-条件对的问题。实验表明,该方法能有效生成符合衍射强度的简单晶体结构,但在处理混合重轻原子或大体系时存在挑战。Sinha 等^[93]则提出了 StructRepDiff(structure representation-space diffusion models),通过将扩散过程转移至表示空间提升对称性约束能力。采用物理描述符(如嵌入原子密度)编码晶体结构,确保生成满足平移、旋转和置换不变性,并通过梯度优化算法从表示空间重建笛卡儿坐标,避免了直接生成中要考虑的周期性边界复杂性。该方法在基准测试中表现出色,且在有限数据条件下性能良好。Levy 等^[94]聚焦于晶体对称性的显式建模,

提出了 SymmCD (symmetry-constrained diffusion models)。该框架基于不对称单元与对称变换联合扩散机制,如图 28 所示。通过分解晶体为不对称单元及其对称操作,结合二进制矩阵编码对称性信息,模型在生成过程中严格维护空间群对称性。图 28 左半部分展示了二维 $p4m$ 对称性晶体的晶胞,其中不对称单元通过位点对称性的高效组合即可重构完整晶体结构,显著提升了表征的紧凑性。图 28 右半部分则揭示了扩散过程的核心机制:针对原子

类型和位点对称性采用离散扩散,对坐标和晶格参数则使用连续扩散。这种分组件扩散策略在去噪过程中严格保持空间群对称性,解决了 DiffCSP 和 CDVAE 生成低对称性晶体的问题。实验证明, SymmCD 不仅能生成多样化的高对称性晶体,且在计算效率上显著优于传统方法。这 3 项工作分别从物理约束、表示空间优化和对称性分解角度推动了扩散模型在晶体生成中的应用,为复杂对称性条件的可控生成提供了多维度解决方案。

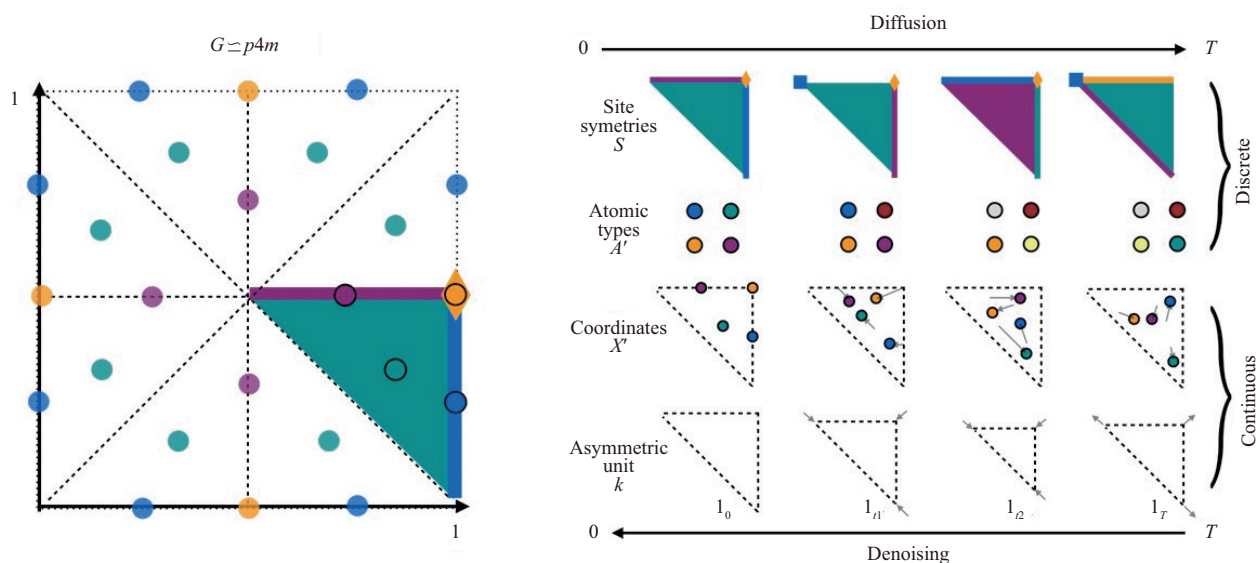


图 28 SymmDD 框架原理图^[94]

Fig. 28 Schematic of the SymmDD framework^[94]

与 SymmCD 聚焦对称性建模不同, Chen 等^[95]提出的 MatInvent (material inventory generation via neural transformers) 框架通过强化学习优化扩散模型, 实现了目标导向的 3D 晶体生成。MatInvent 将去噪过程视为多步决策问题, 引入奖励加权 KL 正则化、经验回放及多样性过滤器, 在多属性优化任务中表现优异。Khastagir 等^[96]提出了一种基于 VAE 与扩散模型的联合框架 Crystal latent diffusion model (CrysLDM), 通过将 3D 晶体结构映射到低维隐空间, 解决了传统扩散模型在高维特征空间中联合建模原子类型、坐标与晶格结构时存在的计算复杂性问题。该方法利用 EGNN 编码器, 将晶体结构编码为平滑的潜在表示, 使扩散过程能够在低维空间进行, 从而将 Perov-5 和 MP-20 数据集的采样速度分别提升至 CDVAE 的 32 倍和 45 倍, 同时生成材料的稳定性与 DiffCSP 相当。这些工作通过隐空间降维、条件编码优化与物理约束融合, 显著提升了生成效率与材料物性准确性, 为资源受限场景下的材料生成提供了新范式。

通过引入扩散模型, 多孔与复杂材料设计也取得了突破性进展。Park 等^[97]提出 Zeolite diffusion models (ZeoDiff), 首次将 DDPM 应用于多孔材料生成, 解决了 GAN 在生成沸石时结构有效性低的问题(图 29)。该模型将沸石表示为包含能量、硅和氧通道的三维网格(图 29(a)); 其中, 能量网格通过甲烷探针气体与沸石骨架的相互作用能计算得到, 硅和氧网格则通过高斯函数在原子位置处生成, 组合成类似图像 RGB 通道的三维输入表示。通过渐进去噪过程(图 29(b)), 模型从随机噪声中逐步生成新的沸石结构。生成的三维网格从图 29(c) 中 $t=T$ 的噪声分布, 逐渐演化出明确的孔隙与原子分布特征, 形成化学合理的沸石框架。生成的网格经后处理进一步修正, 显著提升了结构的化学合理性。与 ZeoGAN 相比, ZeoDiff 的结构有效性提高了 2 000 倍以上。研究还验证了扩散模型在多通道数据表征上的灵活性。另一方面, Lim 等^[98]的研究聚焦于颗粒复合材料的微观结构设计, 开发了一种条件扩散模型, 以替代传统有限元分析。该模型基于

UNet 架构,通过嵌入微结构几何信息预测应力分布,并结合多目标优化生成兼具高断裂韧性和光敏感性的复合材料。研究采用确定性 DDIM 采样提升生成可控性,并验证了生成样本的形态保真度。

两项研究均基于 DDPM 框架,并通过条件生成扩展模型功能,展示了扩散模型在复杂材料生成与性能优化中的普适性,为多孔材料与复合材料的定向设计提供了高效计算工具。

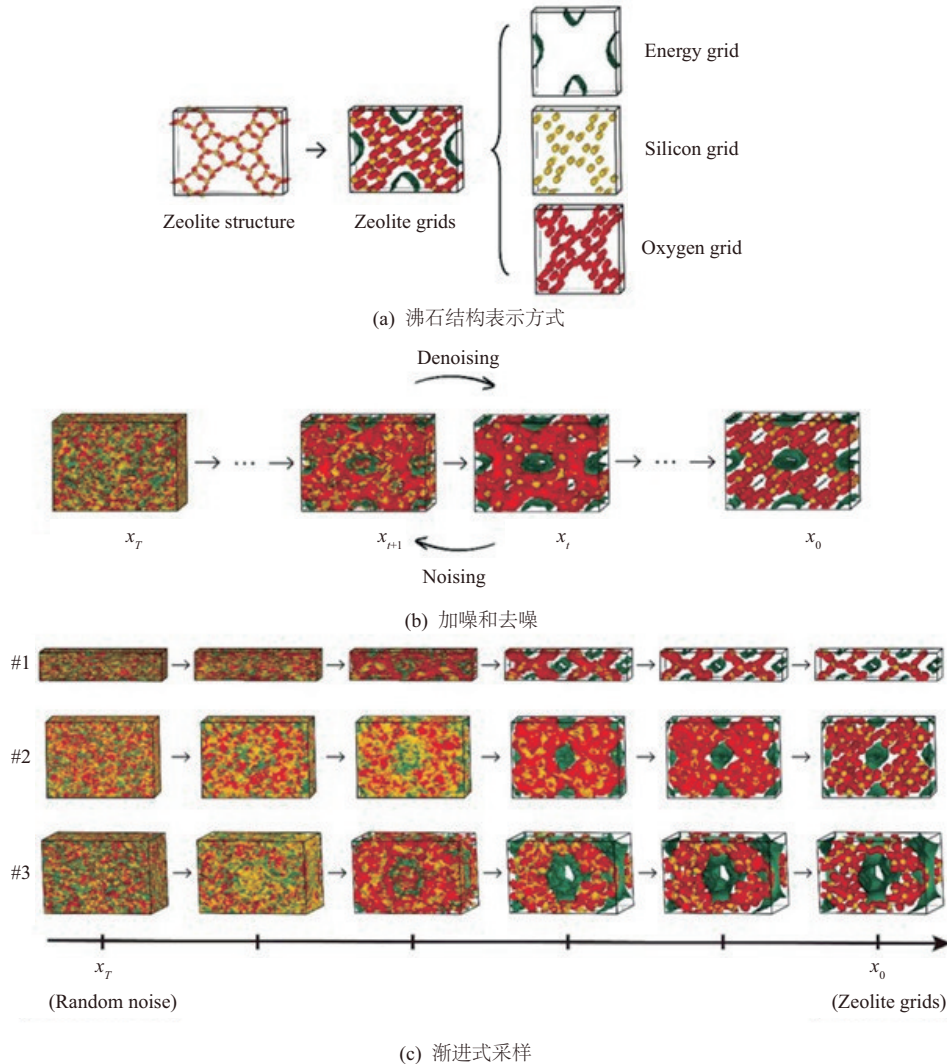


图 29 ZeoDiff 进行沸石合成的扩散流程图^[97]

Fig. 29 Diffusion flowchart for zeolite synthesis using ZeoDiff^[97]

扩散模型在晶体材料生成领域的应用,展现了其在处理复杂对称性约束、物性优化与多尺度结构设计方面的突破性潜力。相关研究^[92-98]不仅实现了高保真度、高对称性晶体的可控生成,更通过引入条件生成范式,为功能导向的材料设计开辟了新路径。未来研究可进一步探索多尺度联合建模、动态物性反馈机制与实验数据的闭环验证,推动扩散模型从结构生成向性能预测-优化一体化平台演进,从而加速新型能源材料、量子材料与多功能复合材料的智能化发现进程。

2.6 基于材料大模型的方法

大语言模型 (large language models, LLM) 作

为人工智能领域的颠覆性技术,其核心原理在于通过海量数据预训练与任务适配微调,构建能够理解和生成复杂语义的通用表征能力。基于 Transformer 架构的自注意力机制,大语言模型可高效捕捉文本、符号与结构化数据之间的多维关联,并结合嵌入技术处理结构化信息。

近年来,面向智能体的大模型方法在材料生成领域展现出显著潜力。以 AtomAgents 和 HoneyComb 为代表的多智能体框架,通过协同整合多模态数据与物理仿真工具,突破了传统单一模型的局限性。Ghafarollahi 等^[99]提出了一种基于多模态多智能体的人工智能平台 AtomAgents,通过融合大语

示其在 MOF 生成任务中达到 87.5% 的生成准确率。Ding 等^[102]提出的 MatExpert 则通过“检索-转换-生成”三阶段框架,模拟人类专家的迭代优化过程。该方法利用对比学习对齐材料属性与结构描述,并通过链式推理驱动的 LLM 生成结构修改路径。

在 NOMAD 数据集的条件生成任务中,MatExpert 在属性分布相似性、覆盖率等关键指标上均优于 Crystal-LLM。这两类方法均通过多阶段协作与领域工具的结合,为复杂材料的逆向设计提供了全新思路。

近年来,面向特定材料或任务的生成式大模型通过跨模态架构创新与领域知识深度融合,在精准材料设计领域取得突破性进展,构建出了兼具化学合理性与工程适用性的生成范式。Sriram 等^[103]提出了一种混合生成框架 FlowLLM,将 LLM 与黎曼流匹配(riemannian flow matching, RFM)相结合,解决了传统模型在晶体材料生成中离散原子类型与连续晶格参数协同建模的难题。该方法通过微调 LLM 生成基于文本的初始晶体表示,利用 RFM 在流形空间迭代优化原子位置与晶格参数,克服了扩散模型在离散序列生成与连续变量精确建模间的局限性。实验表明,FlowLLM 生成稳定材料的效率较现有方法提升 300%,生成结构更接近弛豫态,显著降低了后处理计算成本。Mok 等^[104]针对催化剂设计了 CatGPT,通过文本序列生成包含表面与吸附原子的复杂催化剂。为解决生成结构的有效性验证难题,他们引入基于 BERT 的异常检测模型,识别不完整结构与晶格比例异常,并通过“绕过重叠原子”策略提升结构合理性。实验显示,CatGPT 生成催化剂的结构有效性达 99.7%,且可定向生成适用于特定反应的高效催化剂,验证了语言模型在复杂多组分材料生成中的优势。此外,Tian 等^[105]针对钢铁材料提出 SteelBERT,构建了从自然语言描述到机械性能的端到端预测框架。该方法将钢铁成分与加工流程文本映射为上下文感知向量,解决了传统特征工程在高维稀疏流程表示中的瓶颈。实验证明,模型通过小样本微调可优化特定钢种的加工工艺,生成强度与延展性超越已知新材料的新钢种。这些工作表明,生成式大模型通过领域适配的架构设计与监督策略,正在推动材料生成从通用探索迈向任务驱动的精准确设计。

材料大模型的相关研究,揭示了智能体协同框架与领域增强生成技术的突破性发展。但当前方法在复杂相变过程建模、跨尺度特征对齐等方面仍

面临显著挑战,如何在保持生成多样性的同时确保材料的热力学稳定性,将成为下一代材料生成大模型的关键突破方向。

本节探讨了 AI 在材料设计与发现中的多种应用方法,尤其是基于 GAN、GNN、VAE、扩散模型和材料大模型的方法。通过这些技术,可从大规模材料数据中提取潜在特征和规律,极大地加速新材料的发现和优化过程。GAN 凭借对抗训练机制,在无机材料成分设计和多孔材料逆向生成中实现了高通量探索,但其生成结构常需后处理验证物理合理性;GNN 通过图结构建模精准捕捉原子间相互作用与对称性约束,但依赖高质量标注数据与计算资源;VAE 以隐空间压缩与重建为核心,在小样本合成参数优化与三维晶体生成中表现优异,但其生成多样性与可控性相对受限;扩散模型通过分阶段噪声注入与可逆去噪机制,在晶体高对称性保持、多孔材料高效合成及物性定向优化中突破传统瓶颈,但对复杂体系的生成仍面临挑战;材料大模型实现了全流程自动化生成与任务导向精准设计,但在跨尺度动态物性建模与热力学稳定性保障方面仍亟待进一步探索。未来,融合物理约束的混合模型与跨模态生成技术的深化,将推动材料设计从“随机探索”迈向“功能导向”的新阶段,加速高性能材料与复杂多尺度体系的智能化发现。

3 AI 辅助材料属性预测

材料属性预测作为材料科学的核心任务之一,对于新材料的发现、性能优化及工业应用具有至关重要的作用。随着计算能力的显著提升和数据科学方法的快速发展,尤其是深度学习技术的突破性进展,材料属性预测已从传统的理论计算与实验测试,逐步转向更高效、更精确的计算驱动型方法。目前,已有大量研究致力于开发新型模型,以实现晶体材料属性的精准预测^[106-113]。由于晶体材料具有特殊的结构特性,研究人员通过深度神经网络技术,从海量晶体材料数据中学习晶体结构表示与材料属性之间的映射关系,进而对各类未知材料的属性进行准确预测。根据所采用神经网络类型的不同,当前晶体材料属性预测方法可分为 3 类,包括基于图神经网络(GNN)^[114]的材料属性预测方法、基于 Transformer^[115]的预测方法以及其他模型驱动的晶体材料属性预测方法。

3.1 基于图神经网络引导的材料属性预测

由于晶体在三维空间中的原子排列具有固有的周期性和无限性,采用 GNN 进行材料属性预测

时,需设计精细的图构建技术,以有限的图数据有效模拟无限晶格及其原子间的相互作用。在构建的图结构中,节点通常代表原子及其在三维晶体空间中的周期性重复单元,边则用于表征这些原子之间的相互作用关系。图构建完成后,基于GNN的方法会利用监督学习策略,在晶体属性数据集上完成模型训练;训练结束后,该GNN模型即可被用于预测晶体材料的各类相关属性。

为准确预测分子的势能与原子间作用力, Schütt等^[116]基于GNN提出连续滤波卷积神经网络SchNet,专门用于量子相互作用建模。在量子化学领域,分子的势能和原子间作用力是描述分子稳定性及化学反应特性的关键指标。SchNet的核心创新在于其连续滤波卷积层,该层无需依赖规则网格状数据即可实现有效建模。在处理图像、音频等常

规数据时,传统卷积层通过在固定网格上定义滤波器完成特征提取,但原子位置具有无序性,若简单将其映射到固定网格,会丢失关键物理信息。SchNet通过设计滤波器生成函数解决这一难题,该函数可根据原子间距离动态生成对应滤波器值,使模型能够精准捕捉原子间的复杂相互作用关系。如图31所示,离散滤波器无法捕捉原子的细微位置变化,进而导致能量预测结果出现不连续性;而连续滤波器可有效捕捉这些细微位置差异,生成平滑的能量预测曲线。此外,由于周期滤波器具有旋转等变性,能够自适应保留最终属性预测过程中的旋转不变性,保障预测结果的物理合理性。SchNet凭借连续滤波器架构,可精确模拟分子局部的相互作用过程,但在捕捉更复杂的长程相互作用及整体分子几何构型方面仍存在一定局限性。

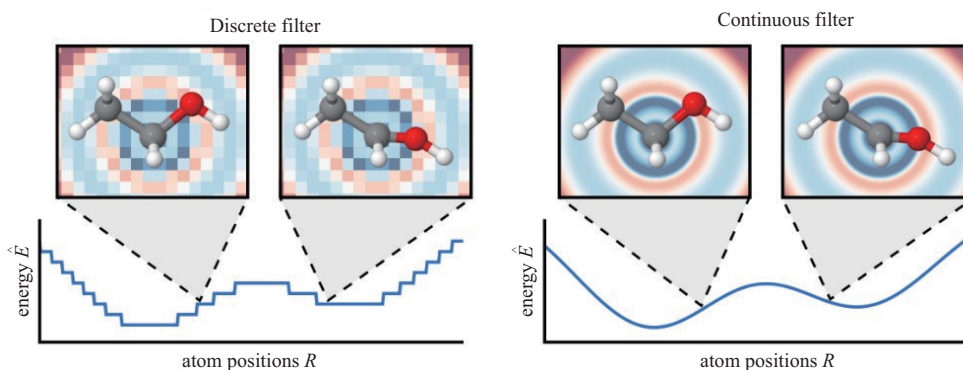


图 31 离散滤波器和连续滤波器对比^[116]

Fig. 31 Comparison of discrete and continuous filters^[116]

传统机器学习方法需手动构建特征向量或对原子坐标进行复杂转换^[29,117-123],不仅限制了模型的适用范围,也难以提供有价值的化学见解。同时,已有方法需将晶体表示为固定长度的向量,才能与大多数机器学习算法兼容,这就导致其难以处理任意大小的晶体系统。为更简洁高效地处理晶体结构,Xie等^[124]提出晶体图卷积神经网络(CGCNN),该模型将晶体结构转换为晶体图进行表示,其整体框架与工作原理如图32所示。其中,图32(a)描述了晶体图的构建过程:晶体被转化为一个无向多重图,由于晶体具有周期性,相同节点对之间可存在多条边。每个节点由一个特征向量表征,包含原子自身的属性信息;每条边则由另一个特征向量表征,包含键的相关属性信息。基于该晶体图表示,图32(b)中的CGCNN结构通过在每个节点上应用卷积层与隐藏层,捕捉原子的局部环境特征。经过多次卷积操作后,网络会整合每个原子的局部环境信息,随后池化层对这些信息进行汇总,生成一个

代表整个晶体的特征向量,该向量不受原子排列方式与晶胞大小的影响,研究中采用归一化求和作为池化函数。此外,模型还包含 L_1 和 L_2 两个全连接隐藏层,用于拟合晶体结构与材料属性之间的复杂映射关系;最终通过输出层基于学习到的特征预测材料属性。这些层级在晶体图上迭代更新原子特征向量,实现对每个原子局部环境的自动学习。模型训练以最小化预测属性与DFT计算属性之间的差异为目标,采用反向传播与随机梯度下降算法进行参数优化。GCNN框架从晶体结构的原子连接关系中学习材料属性,提供了一种通用、可解释的晶体材料表示方法。该方法通过 10^4 个数据点的训练,能够对8种不同的晶体属性进行高精度预测,其预测准确度可与DFT计算结果相媲美。

尽管CGCNN取得了显著成就,但仍存在较大的改进空间。例如,CGCNN无法考虑全局状态变量(如温度),而这类全局状态变量对于预测与状态相关的材料属性(如自由能)至关重要。为克服这

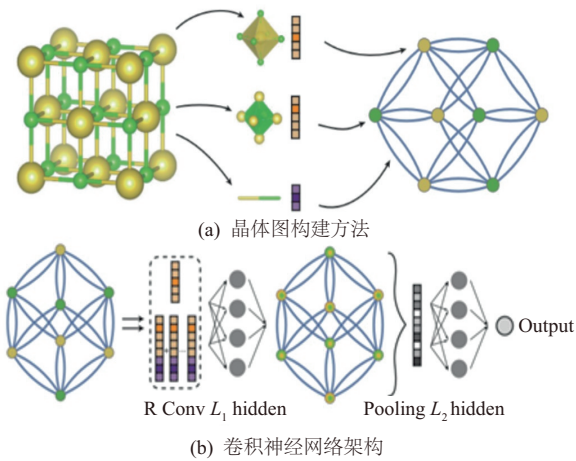


图 32 晶体图卷积神经网络 (CGCNN) 示意图^[124]
 Fig. 32 Schematic of crystal graph convolutional neural network (CGCNN)^[124]

一局限性,Chen 等^[19]提出通用材料图网络(MatErials graph networks, MEGNet),该模型通过引入全局状态属性及元素嵌入的转移学习策略,有效弥补

了 CGCNN 的不足。图 33 展示了 MEGNet 模块的工作流程,该流程以包含原子属性集 v 、键属性集 e 和全局状态属性 u 的初始图为输入。图中每个节点和边均被赋予相应的属性特征,其中全局状态属性 u 涵盖系统级别的关键信息(如温度、压力等)。MEGNet 模块通过迭代更新原子、键及全局状态 3 类属性,将分子或晶体的初始图表示转换为可用于属性预测的优化图表示。这一更新过程包含 3 个关键步骤:①更新键属性,②更新原子属性,③更新全局状态属性。通过这一系列步骤,模型能够更全面地捕捉原子间的复杂相互作用,为材料属性预测提供精准的图结构信息。其中,全局状态属性的引入使模型可有效考虑温度、压力、熵等系统条件的影响;转移学习策略则允许模型利用大规模数据集上的训练成果,提升其在小数据集上的预测性能。此外,相关研究还验证了简化特征集的有效性,并通过调整模型复杂度、采用集成模型等方式,进一步提高了 MEGNet 的预测准确度。

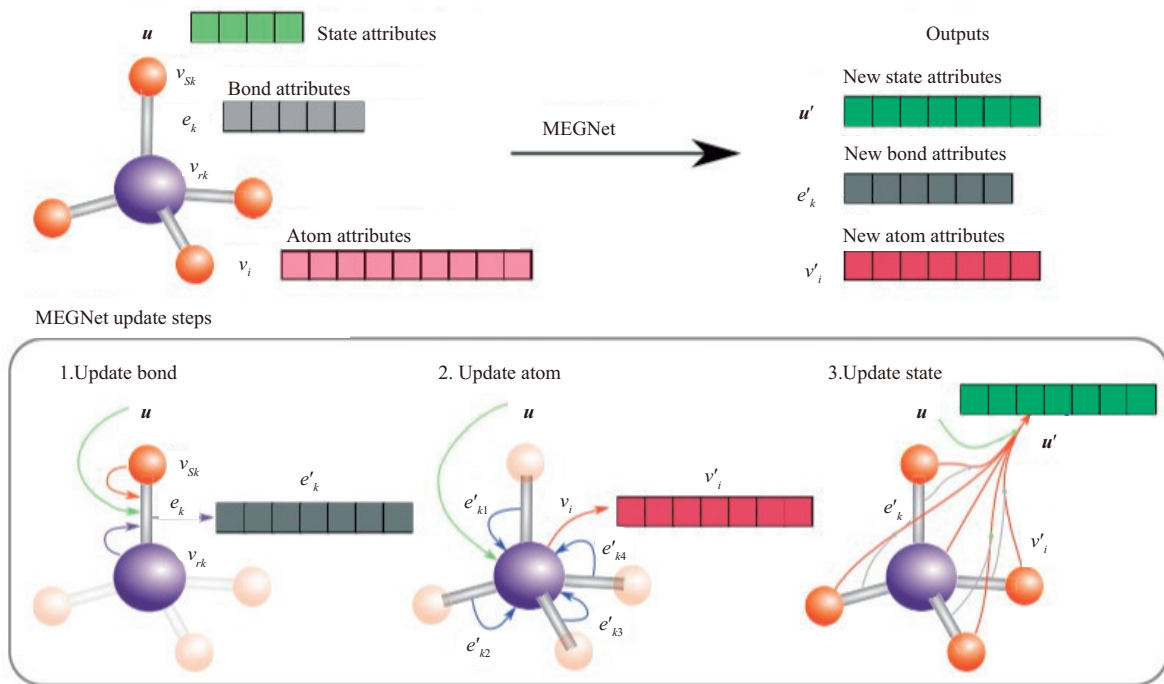


图 33 MEGNet 模型架构图^[19]
 Fig. 33 MEGNet model architecture diagram^[19]

Louis 等^[125]在 CGCNN 的基础上,提出全局注意力卷积网络(global attention GNN, GATGNN)模型,该模型引入全局注意力机制,通过增强图注意力层与全局注意力层的协同作用,改进了无机材料属性的预测性能。GATGNN 充分考虑到晶体中不同原子对材料整体特性的贡献存在差异:增强图注意力层通过计算相邻节点间的注意力权重实现信息聚合,突出关键原子的作用;全局注意力层则专

注于处理图的整体结构特征,弥补局部注意力的局限性。但该模型中 softmax 函数的应用,限制了其对不同重要程度节点的区分能力。为解决这一问题,Choudhary 等^[126]提出原子线图神经网络(atomistic line GNN, ALIGNN)架构,旨在提升模型对不同重要程度节点的区分能力。ALIGNN 创新性地结合原子间键图(重点关注原子间距离特征)和线图(重点关注键角特征),通过在两种图结构之间交

替执行消息传递操作,将键角信息显式融入原子特征表示中。同时,该模型借助边门控图卷积机制,同步更新节点与边的特征信息,能够更全面、精准地捕捉原子间键与键角的相互作用关系,进一步提升材料属性预测的准确性。

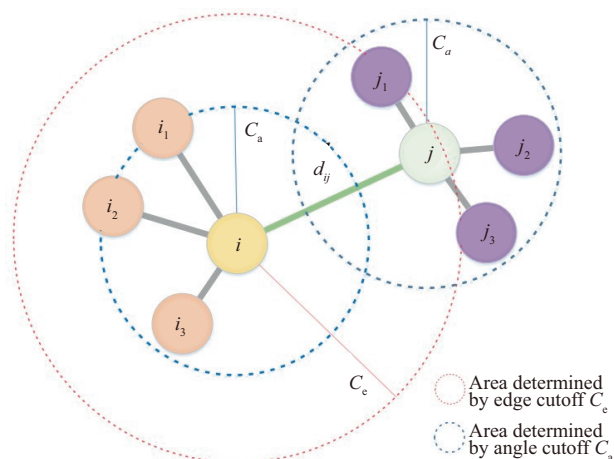


图 34 边邻域和角邻域的划分机制图解^[127]

Fig. 34 Illustration of edgeneighborhood and cornerneighborhood partition mechanisms^[127]

然而,ALIGNN所采用的图构建方式较为复杂,其键角处理过程存在较高的时间成本,进而导致模型推理时间显著增加。为解决这一问题,Huang等^[127]提出原子-距离-角度图神经网络(atom-distance-angle GNN, ADA-GNN),该模型基于双重尺度邻居划分机制,有效降低了推理成本,其工作原理如图34所示。该机制采用不同尺度的截止值区分边邻居与角邻居:较大的尺度截止值用于选择边邻居,较小的尺度截止值用于选择角邻居(图中大圆代表边邻域的截断半径 C_e ,小圆代表角邻域的截断半径 C_a)。其中,边邻域用红色圆圈表示,包含所有处于截断半径 C_e 范围内的原子;角邻域用青色圆圈表示,包含所有处于截断半径 C_a 范围内的原子。通过这种双重尺度划分,可显著降低输入数据的复杂性,进而减少模型推理时间。基于上述双重尺度建模思路,ADA-GNN能够将原子属性与结构信息分开处理,通过独立的嵌入模块分别对原子特征和结构信息进行嵌入处理,有效提升了模型训练稳定性与预测准确性。从模型结构来看,ADA-GNN由嵌入模块、消息传递模块和读出模块3部分组成:嵌入模块负责完成原子特征与结构信息的嵌入;消息传递模块通过一系列交互块聚合邻居节点的特征与结构信息;读出模块则利用平均池化操作,整合晶胞内所有原子的特征信息,最终完成材料属性预测。

由于晶体材料相比分子具有更规整的结构,近期研究者愈发关注晶体的固有属性,例如对称性^[128-129]。晶体材料通常具有高度对称性,这一特性对理解其物理性质至关重要。然而,现有图神经网络(GNN)模型在处理晶体结构时,未能充分利用这类对称性信息^[124,19]。为此,Kaba等^[130]提出等变晶体网络(equivariant crystal network, ECN),通过引入等变建模思路解决了上述问题。该模型对GNN的消息传递机制进行泛化,使其可适配更广泛的置换群,等效于在晶体结构图上执行卷积操作。为捕捉晶体的局部有序性,模型采用超胞表示,并通过对称性破缺提升模型表达能力。此外,作者基于原子间相对位置与距离构建晶体图,并设计了一种新型等变消息传递机制:对不同原子与键采用差异化的消息传递函数,从而在信息传递过程中严格保持对称性。实验在Materials Project数据库上开展,结果表明,ECN模型性能与基线方法相当或更优。

关于晶体属性预测,大多数现有GNN模型均为监督式模型,这类模型需要大量带属性标记的数据用于训练。然而,此类方法在泛化至标记数据不足的属性预测任务时面临较大困难。Hu等^[131]提出一种预训练图神经网络模型,通过自监督学习方法(如上下文预测、属性掩蔽等),利用海量未标记数据训练模型,使其捕获晶体领域的特定知识。同时,该研究采用图级别多任务监督预训练策略,以提升模型对晶体整体图属性的预测能力。这种双级预训练策略(自监督预训练+图级别多任务监督预训练)不仅有效提升了模型的泛化性能,还规避了预训练过程中常见的负迁移问题,最终在多个下游晶体属性预测任务上实现了显著的性能提升。

然而,该模型难以泛化到具有复杂结构及丰富节点、边特征的晶体材料上。为此,Das等^[106]提出晶体可解释属性预测器(crystal explainable property predictor, CrysXPP),以GCNN为核心,用于预测晶体材料的电子、磁性和弹性等属性。该框架包含一个自编码器CrysAE,其通过大量可用的晶体图数据进行训练,以学习晶体结构的关键信息。CrysAE的编码器部分负责提取结构特征,随后这些特征被输入至属性预测模块CrysXPP中。CrysXPP通过特征选择器进一步增强模型的可解释性,使预测过程更加透明。此外,CrysXPP可通过微调预训练的CrysAE模型,即便仅拥有少量实验数据,也能有效降低基于DFT计算的数据集偏差。该框架在多个属性预测任务上均表现出优于现有方法的性能,且

能够提供与领域知识一致的特征重要性解释,显著增强了模型的可信度与实用性。

但 CrysXPP 的预训练模型与下游任务模型需采用相同架构,这在一定程度上限制了预训练模型的知识转移能力^[106,132]。Das 等^[133]提出晶体图神经网络(crystal GNN, CrysGNN)框架,旨在通过预训练与知识蒸馏技术克服上述不足^[134],进而提升晶体属性预测的准确性与鲁棒性。该框架利用大量未标记晶体数据开展预训练,有效解决了模型对标记数据依赖性强的问题;同时,通过引入知识蒸馏技术,进一步提升了不同属性预测模型的预测精度。CrysGNN 采用自监督学习方法,在节点级别与图级别分别重建节点特征和晶体结构相似性,从而充分

学习晶体材料的局部化学特征与全局结构特征。如图 35 所示的节点级编码与图级编码,在节点级别解码阶段,模型通过自监督学习方式重建节点的特征属性及节点间的连接关系,以捕捉晶体中原子周围的局部化学环境。CrysGNN 采用多任务学习框架(如图 36 所示),融入知识蒸馏思想,从预训练模型中提取对下游属性预测任务有用的关键结构与化学信息,并将其输入至属性预测过程中。在属性预测阶段,该框架整合了知识蒸馏损失与属性预测损失,进一步优化了模型性能。实验结果表明,CrysGNN 在处理数据稀疏性、降低 DFT 计算带来的偏差方面具有显著优势,且其在多个基准材料数据集上的性能已通过实验得到验证。

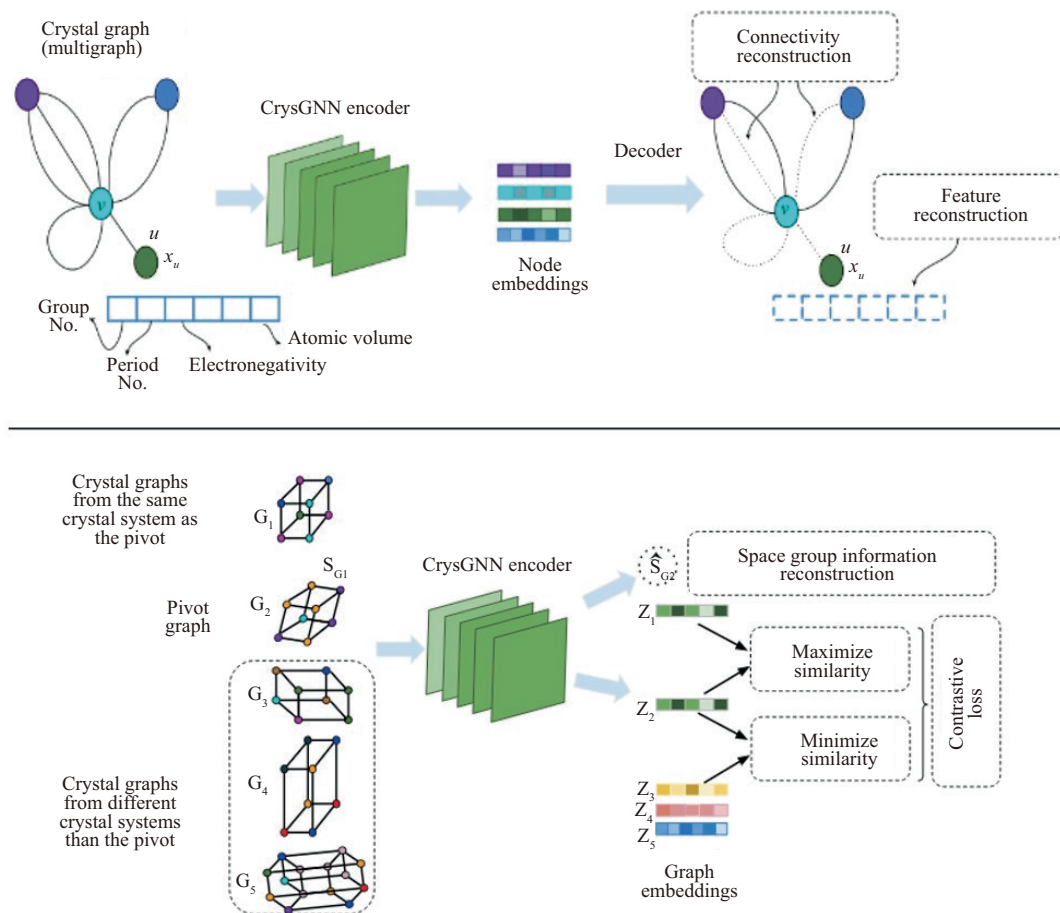


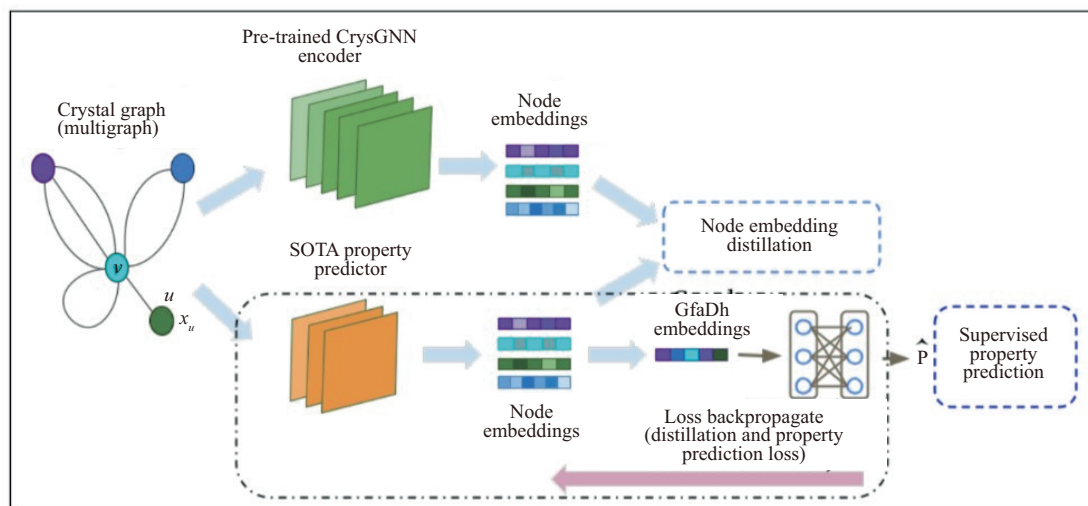
图 35 节点级编码和图级解码^[133]

Fig. 35 Node-level encoding (top) and graph-level decoding (bottom)^[133]

但 CrysGNN 仍存在不足,其严重依赖从头训练的属性预测器,且未考虑晶体的对称性质。针对这一问题,Song 等^[107]提出基于扩散模型的晶体性质预测预训练-微调框架 CrysDiff,有效解决了上述缺陷:在预训练阶段,该框架通过重建任务学习晶体结构的分布特征,无需依赖标记数据;在微调阶

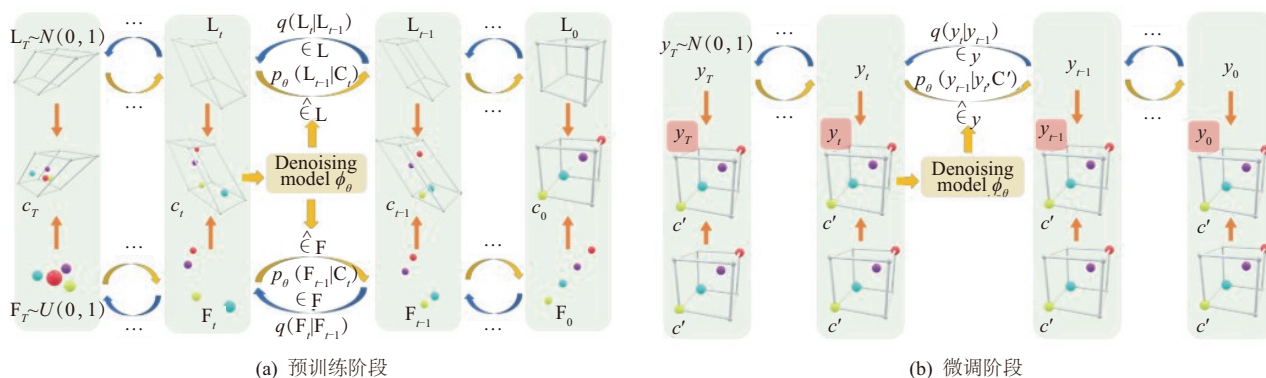
段,则利用少量标记数据对模型进行调整,使其适应特定的属性预测任务。

图 37 展示了 CrysDiff 模型预训练与微调两个阶段的工作流程。在预训练阶段,模型通过联合去噪扩散模型重建晶体结构,此阶段仅依据原子类型信息,尝试还原原始晶体结构(包括晶格矩阵与原

图 36 基于 CrysGNN 的知识精馏的属性预测^[133]Fig. 36 Property prediction via knowledge distillation based on CrysGNN^[133]

子的分数坐标)。前向扩散过程逐步将这些结构信息转化为噪声,而反向过程则通过 EGNN^[128] 去噪模型维持晶体的对称性,逐步消除噪声以恢复清晰的晶体结构。在微调阶段,模型利用预训练阶段学到的晶体结构知识,通过在目标属性值上进行扩散,

同时固定晶体结构的方式,学习给定晶体结构条件下目标属性值的条件分布。CrysDiff 模型能够在预训练阶段捕捉晶体结构的潜在分布,并在微调阶段将这些知识应用于具体的属性预测任务,进而在有限标记数据下提升预测性能。

图 37 CrysDiff 模型的预训练和微调阶段的工作流程^[107]Fig. 37 Workflow of pre-training and fine-tuning for CrysDiff model^[107]

传统 GNN 在预测需考虑方向属性的任务时存在兼容性问题,这使得其目前仅能应用于不变标量属性的预测。材料中的张量属性(如介电张量、压电张量等)具有方向性,对材料功能至关重要,但这类属性的预测要求模型满足旋转等变性。针对这一问题,Zhong 等^[135]提出基于边的张量预测图神经网络(evidential temporal-aware GNN, ETGNN),该模型通过将张量属性表示为多尺寸簇边方向上投影的局部空间分量的线性组合,实现旋转等变性,同时保证预测系数的旋转不变性,使其易于通过传统 GNN 进行预测。

该框架基于 DimeNet++^[136] 引入三元组消息传递机制,通过边和三元组的特征更新获取张量展

开系数;并通过多层感知器从精炼后的边消息或三元组消息特征中映射张量展开系数,有效提升了模型的泛化能力与预测准确性。ETGNN 在多个张量预测任务上均表现出更高的精度,包括力预测、响应属性预测,以及 Born 有效电荷、介电张量、压电张量等材料特性预测,并在非金属数据库上展现出作为通用模型的潜力。但 ETGNN 在生成张量预测时引入了较高的计算复杂性,且在处理张量预测任务时未考虑反对称性,未能在张量预测中强制执行晶体对称性约束,导致预测的张量性质不符合晶体的物理对称性要求。Yan 等^[137]提出材料张量网络(global dynamic matching transformer networks, GMTNet),专门用于晶体材料张量性质的预测,该

网络通过融入晶体对称性信息,可生成符合物理特性与晶体对称性的张量预测结果。GMTNet由四个核心模块组成,分别为:对称性信息的晶体图构建模块、晶体级等变特征提取模块、等变张量性质预测模块及晶体对称性强制模块。其设计核心是确保预测的张量在 $O(3)$ 群变换下表现出等变性,并在晶体空间群变换下保持不变性。

Mao等^[138]提出的介电常量神经网络(dielectric tensor neural networks,DTNet),解决了无机材料介电张量预测中存在的数据库稀缺、计算成本高及无法有效预测张量性质等问题。DTNet采用预训练的通用神经网络势能 Preferred Potential(PFP)作为特征编码器,能够捕捉原子和键周围的电子环境信息,并将其转换为标量、向量和张量表示;其中PFP模型已预先在2 200万个结构上完成训练,可提供丰富的高阶信息。DTNet通过设计等变读出解码器,能够实现总介电张量、电子贡献及离子贡献的预测,同时保持对输入结构的 $O(3)$ 等变性。在数据集方面,DTNet采用Materials Project数据库中的6 648个材料结构及其介电张量数据进行模型训练,在电子、离子及总介电张量的预测任务上均表现出更高的精度。此外,DTNet还通过虚拟筛选与迭代主动学习策略,从Materials Project数据库中筛选出具有高介电常数和各向异性的候选材料,并通过第一性原理计算验证了这些候选材料的性能。

传统DFT计算电子密度时,面临效率瓶颈及大规模系统计算不可行的问题。DFT计算复杂度较高,这限制了其在大规模系统中的应用;而现有机器学习方法虽在一定程度上提高了计算效率,但受限于低阶特征表示,难以准确捕捉复杂材料系统的电子密度分布。针对上述问题,Koker等^[139]提出用于预测原子系统中电子密度的 $E(3)$ 等变GNN——ChargE3Net,该模型通过结合高阶等变张量操作与GNN,可直接从原子位置和原子种类预测电子密度分布,无需依赖具体的基组或复杂的量子力学计算特征。这种方法不仅能显著减少DFT计算中的自洽场迭代次数,提升计算效率,还可处理超出传统DFT计算范围的 10^4 个原子的系统。ChargE3Net的高阶等变性使其能够更好地捕捉电子密度的复杂空间分布,因此在多种材料和分子数据集上表现出色,包括QM9、NMC数据集以及Materials Project数据库中的十万多种材料。此外,利用ChargE3Net预测的电子密度进行非自洽DFT计算时,能够在极低的计算成本下,获得接近DFT精度的电子和热力学性质预测,这对于快速筛选和设计新材料具有重

要意义。然而,ChargE3Net主要在较小的数据集上进行训练和验证,数据规模的限制可能导致模型在泛化能力和预测精度上存在不足。Chen等^[140]提出的ECD数据集解决了ChargE3Net面临的数据规模问题。该数据集包含140 646个稳定晶体几何结构的中等精度PBE泛函数据,以及其中7 147个几何结构的高精度HSE泛函数据。这一大规模混合精度数据集的构建,旨在为机器学习模型提供更丰富的训练资源,从而提升模型在电子电荷密度预测任务中的性能。

3.2 基于Transformer引导的材料属性预测

在材料属性预测领域,基于GNN的方法通常仅聚焦于局部邻域信息,难以捕获材料中的长程相互作用,且无法同时分析多种材料属性,预测效率较低。相比之下,Transformer模型凭借其自注意力机制、并行处理能力及位置编码的独特优势,在序列数据处理任务中表现优异,这些特性使其在材料发现研究中具备广泛的应用潜力。尤为重要的是,Transformer能够有效捕获材料结构的全局特征,这对于深入理解材料的复杂物理化学性质至关重要。具体而言,在将Transformer网络结构适配于材料属性预测领域时,首先需对晶体图的节点与边特征进行嵌入编码,随后可结合GNN对节点特征进行初步处理,以更好地挖掘局部结构信息。材料属性预测对于新材料的高效发现具有重要意义^[19,126,141-144];与分子和蛋白质不同,晶体材料由三维空间中规则晶格上重复排列的最小单元(晶胞)构成,其结构可自然表示为周期图,这也为Transformer模型的域适配提供了重要结构依据。

基于GNN的材料属性预测方法中,多数未充分考虑晶体结构的周期性边界条件^[19,106,124-126,128]。为此,Yan等^[108]提出面向晶体材料性能预测的周期图Transformer模型——Matformer。该模型专为周期图表示学习设计,旨在提升晶体材料属性预测精度。Matformer通过多边图构建与全连接图构建两种策略实现周期不变性,保证模型在晶胞边界平移下保持结构不变;并通过相邻周期晶胞中相同原子间的几何距离,显式编码周期模式,从而有效捕获晶格尺寸与取向信息。如图38所示,Matformer通过自连接边编码晶体的周期性结构,并确保图构建方式满足周期不变性。其中,图38(a)表明,基于截断半径的图构建方法可在周期边界平移时保持图结构不变;图38(b)阐述通过自连接边编码晶格矩阵 L 对应的几何距离,从而隐式融入晶格取向信息;图38(c)以二维体系为例,展示包含周期模式编码

的图构建方式,利用自连接边同时捕捉晶格尺寸与方向。模型的消息传递机制采用基于边的注意力

机制,通过计算查询(query)、键(key)与值(value)实现节点特征更新,进一步提升预测性能。

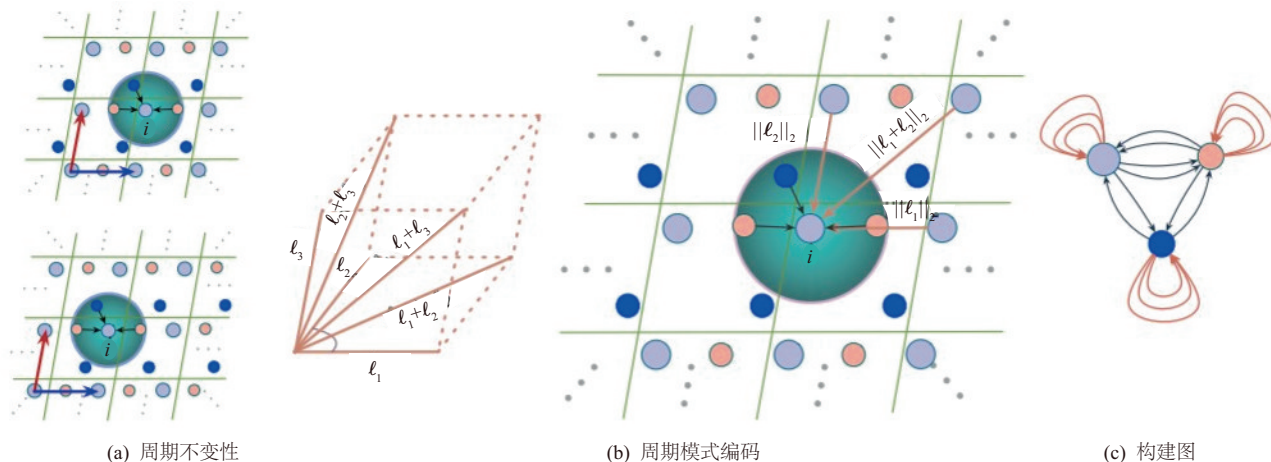


图 38 Matformer 自连接边编码周期性模式图^[108]

Fig. 38 Matformer selfconnection edge encoding for periodic patterns^[108]

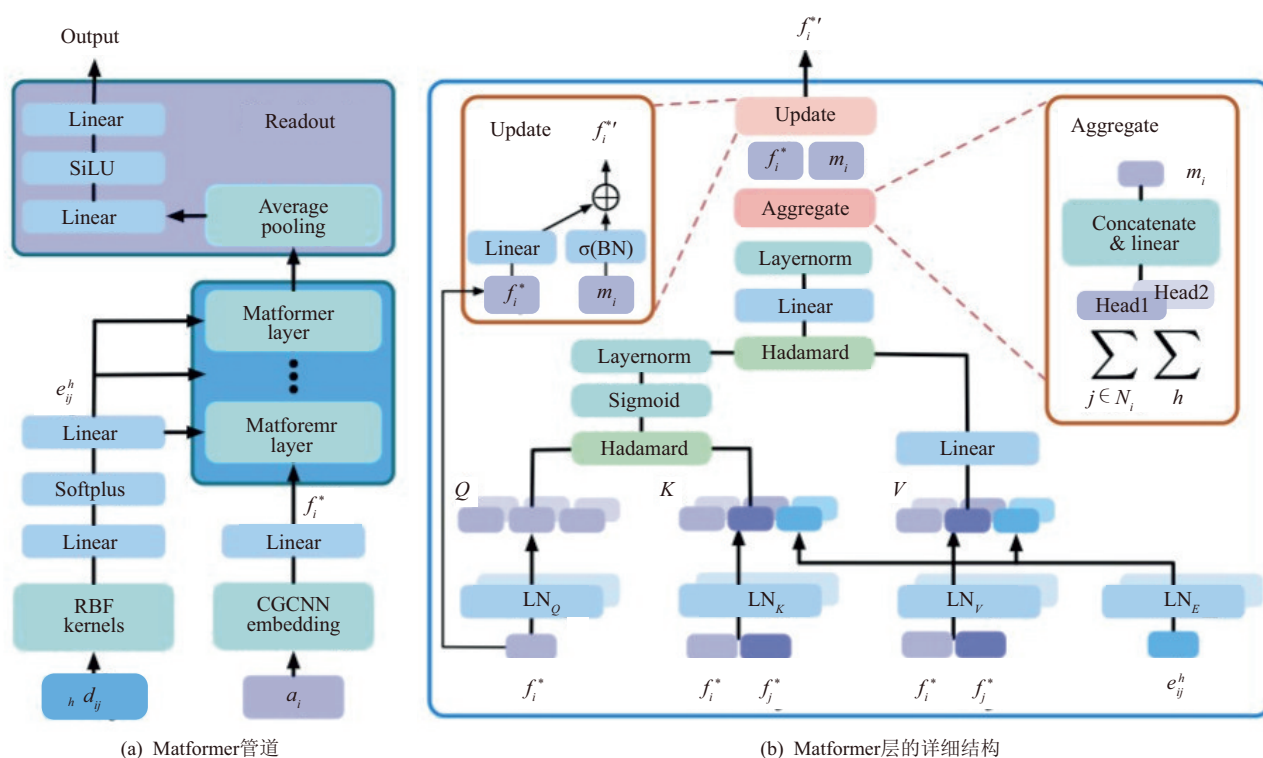


图 39 Matformer 的架构和处理流程^[108]

Fig. 39 Architecture and processing pipeline of Matformer^[108]

针对 MatFormer 在捕捉晶体完整几何信息方面存在的不足,Yan 等^[109]提出了一种专为晶体材料设计的 SE (3) Transformer 模型——ComFormer。该模型充分利用晶胞的周期性特征,提出基于晶格的原子表示方式,能够高效且高表达力地刻画晶体的图结构。ComFormer 的设计目标是处理晶体的几何完整性与被动对称性,例如晶格的 SE (3) 不变性与 SO (3) 变性。模型包含两种变体:iCom-

Former 与 eComFormer,前者采用 SE (3) 不变的晶体图,后者采用 SO (3) 等变的晶体图。如图 40 所示,该模型通过节点嵌入、结构嵌入、消息传递 3 个关键步骤实现晶体结构的图表示学习。其中,节点嵌入部分将原子序数等原子特征映射至高维空间,使模型能够有效捕捉原子的物理与化学属性;结构嵌入部分处理晶体结构中的键长与键角等几何信息,通过径向基函数与余弦函数将几何特征嵌入至

模型中。消息传递模块由多个交互块构成,包含节点级变换与边级变换,负责聚合邻域节点特征,并借助注意力机制完成节点特征更新。在 eComFormer 中,模型额外引入节点级等变更新层,专门处理边的向量特征,从而严格保证 $SO(3)$ 等变性。模型最终通过平均池化聚合所有节点特征,并利用

线性层将图级特征映射至目标属性预测值。两种变体均可高效处理大规模晶体数据集,且计算复杂度较低。实验结果表明,ComFormer 在多个晶体属性预测基准任务上均取得了当前最优(SOTA)性能,有效弥补了 MatFormer 等传统方法在完整几何信息建模方面的缺陷。

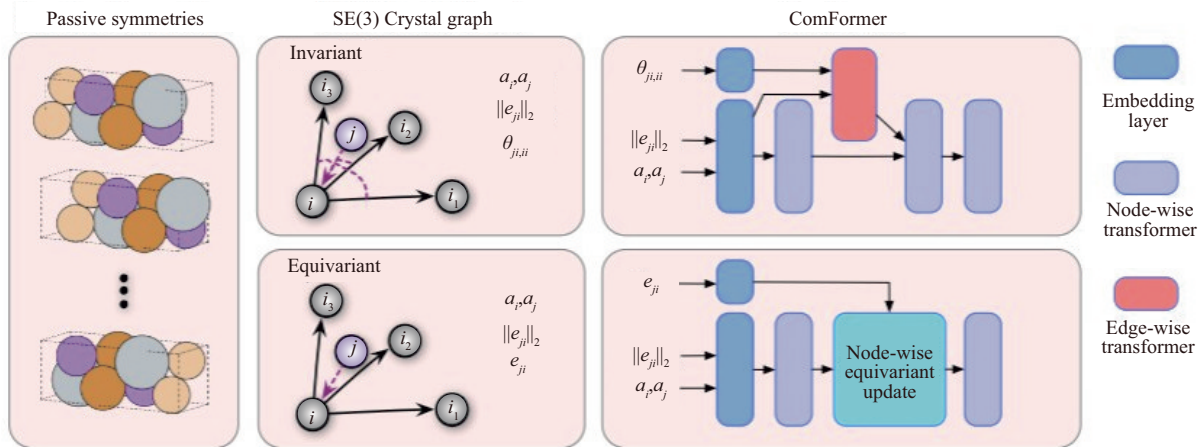


图 40 ComFormer 模型架构图^[109]

Fig. 40 ComFormer model architecture diagram^[109]

晶体结构具有一个独特的结构特征——周期性,该特征使其在三维空间中形成无限重复的原子周期性排列。由于周期性的存在,晶体结构中原子之间的完全连接会导致一种非平凡的表达式,即无限连接注意力,这种注意力涉及重复原子的无限序列。MatTransformer 避免了此类复杂表述,而是采用 Transformer 与消息传递 GNN 相融合的混合架构。

Taniai 等^[110]提出了一种具有周期结构编码的无限连通注意力模型 CrystalFormer。该模型将无限重复的原子排列视为无限连接注意力,有效解决了传统模型在处理晶体结构时面临的计算难题。研究将注意力权重解释为随原子间距离衰减的势能,实现了对无限原子间相互作用的近似计算。与以往的 Transformer 模型相比, CrystalFormer 的参数数量大幅减少,同时仍保持优异性能,这一优势得益于其简化的架构设计与高效的编码策略。此外, CrystalFormer 通过引入物理启发的势能求和概念,进一步强化了模型对长程相互作用的捕捉能力,进而在多个材料属性预测任务中,性能均超越了当时的最先进方法。

Wang 等^[145]提出了具有周期不变性鲁棒编码的共形晶体图 Transforme 模型——CrystalFormer,用于解决 MatTransformer 中角度信息与长程信息捕捉不足的问题。为有效捕捉三维晶体结构中的角

度信息, CrystalFormer 引入近似保角映射技术,该技术利用谐波映射与狄利克雷能量最小化方法,实现晶体图中角度信息的有效保留。该架构以角度保留为核心优势,同时增强了长程信息的处理能力,使得模型的预测精度显著超越现有基线方法。此外, CrystalFormer 在训练与推理效率上也展现出显著优势,这一优势得益于其无需构造复杂线图、无需进行角度数据预处理的简洁设计。在 Jarvis 材料基准数据集上的全面实验评估表明, CrystalFormer 在多个晶体性质预测任务中均表现出优越性能,同时验证了其在材料设计领域的潜在应用价值。

传统方法在嵌入原子信息时存在局限性:例如,简单的 0-1 嵌入所生成的矩阵较为稀疏,不利于模型有效提取特征信息,进而限制了预测精度的进一步提升。此外,对于部分复杂材料体系(如混合有机-无机钙钛矿晶体),因其合成过程复杂、大规模高质量数据库匮乏,存在数据稀缺问题,给传统深度学习模型带来了巨大挑战。为解决上述问题, Jin 等^[146]提出了基于 Transformer 架构的通用原子嵌入模型 CrystalTransformer (crystal transformer-based universal atomic embeddings, CT-UAEs)。该模型可直接利用晶体数据库中的化学信息进行端到端学习,为每个原子生成独特的特征“指纹”,从而有效捕捉原子在材料中的作用角色与原子间相

互作用。与传统方法相比,CT-UAEs可适配任意目标材料性质,无需依赖预定义的原子属性。为进一步提升原子嵌入的通用性与泛化能力,研究采用多任务学习策略:模型同时在形成能、带隙、总能量、总磁化强度等多个任务上联合训练,通过优化多任务综合损失函数,使所生成的原子嵌入能够适配多种材料性质预测,而非仅局限于单一任务。此外,为增强模型的结构不变性与泛化能力,研究引入数据增强策略,对晶体结构执行随机旋转与平移变换,使模型学习到晶体结构的旋转、平移不变性。将CT-UAEs嵌入多种经典深度学习模型(如CGCNN、MEGNET、ALIGNN等),并在多个材料数据库上进行验证。结果表明,CT-UAEs在提升预测精度、跨模型/跨数据集可迁移性及应对数据稀缺问题方面表现优异,可显著提升模型在形成能、带隙等关键材料性质预测中的准确性与鲁棒性。

Lee等^[111]提出的态密度Transformer(density of states transformer, DOSTransformer),是专门针对光谱性质——态密度(density of states, DOS)^[147]预测而设计的模型。由于DOS不仅受材料本征属性影响,还与计算中所选取的能级相关,DOSTransformer采用多模态Transformer架构,用于实现晶体材料态密度的精准预测。与传统仅依赖材料自身特征的方法不同,DOSTransformer通过融合晶体结构与能级的异构信息,并借助交叉注意力机制建模二者间的复杂关联,显著提升了DOS预测精度。此外,为捕捉晶体体系特有的相互作用,模型引入可学习提示(learnable prompts),进一步增强了预测性能。DOSTransformer通过交叉注意力与自注意力层对多源信息进行处理,并利用能量解码器输出各能级对应的DOS数值。该模型在多种真实场景中开展了充分验证,涵盖声子DOS与电子DOS预测任务,结果证实其在分布内与分布外场景下均具备优异性能。

MOF^[148-149]是一类具有高度多孔结构的材料,在气体存储、分离与催化等领域应用广泛。由于MOF所对应的化学空间极为广阔,通过改变分子构建模块可合成出种类繁多的MOF结构,因此如何高效探索这一化学空间、筛选出具有理想性能的MOF,成为当前研究的重要挑战。Kang等^[150]提出MOFTransformer模型,通过结合原子基础图嵌入与能量网格嵌入,实现对MOF局部与全局特征的有效捕捉。MOFTransformer在预训练阶段采用百万量级假设MOF进行训练,并在微调阶段针对不同材料属性进行优化,表现出优异的预测性能。此

外,该模型可通过分析自注意力层的注意力权重提供化学层面的机理解释,有助于揭示MOF结构与性能之间的关联规律。其预训练任务包括MOF拓扑预测、空隙率预测以及金属簇/有机连接体分类。微调结果表明,MOFTransformer在氢气吸附、扩散系数及带隙等多种属性预测任务中均优于现有模型,且可通过迁移学习拓展至其他属性预测,展现出良好的通用性与应用潜力。

与MOFTransformer相比,Wang等^[151]提出了一种面向多用途气体预测的大规模三维MOF表示学习创新框架——Uni-MOF。该框架能够利用更广泛的数据进行训练,提升了模型在未知数据上的预测准确性,同时降低了对有限标记数据的依赖。此外,Uni-MOF在多任务学习方面表现优异:不仅可预测多种气体在不同条件下的吸附容量,还能准确表征材料的结构特征,使其在科学研究与工程应用中均具有广泛的适用性。如图41所示,该框架基于Transformer模型构建:图41(a)描绘了MOF晶胞的基本构成,包括晶胞基矢,这些向量定义了晶胞在三维空间中的重复模式;图41(b)以点云形式呈现了MOF的原子排列,突出其周期性重复的有序性;图41(c)和图41(d)通过二维示例阐释了晶体的对称性质,包括晶胞基矢L的O(3)不变性与分数坐标F的周期平移不变性——这些对称性质意味着晶体结构在经历旋转、反射或周期性平移变换时保持不变。Uni-MOF通过在大规模MOF及共价有机框架(covalent organic frameworks, COF)结构数据集上进行自监督学习,有效克服了MOFTransformer等早期模型在泛化能力与多任务处理方面的局限。

通过预训练与微调两个阶段,Uni-MOF模型学习了材料的三维结构表示,进而提高了预测准确性并降低了过拟合风险。预训练阶段,该模型利用晶体结构文件(CIF)预测被遮蔽原子的类型,同时恢复噪声数据中的三维位置,显著增强了对材料空间结构的理解能力。微调阶段则融合预训练权重与大量标记数据,专门预测MOF材料在不同气体种类、温度及压力条件下的吸附性能。Uni-MOF在多个数据库的测试中展现出优异的预测能力,预测精度最高可达0.98,且能够准确预测未知气体的吸附属性。

本节探讨了AI在材料属性预测中的应用,重点围绕GNN与Transformer模型展开。GNN通过模拟晶体的原子排列与相互作用,可有效处理复杂结构,并在持续优化中不断提升预测性能。Transformer则凭借自注意力机制与并行处理能力,能够

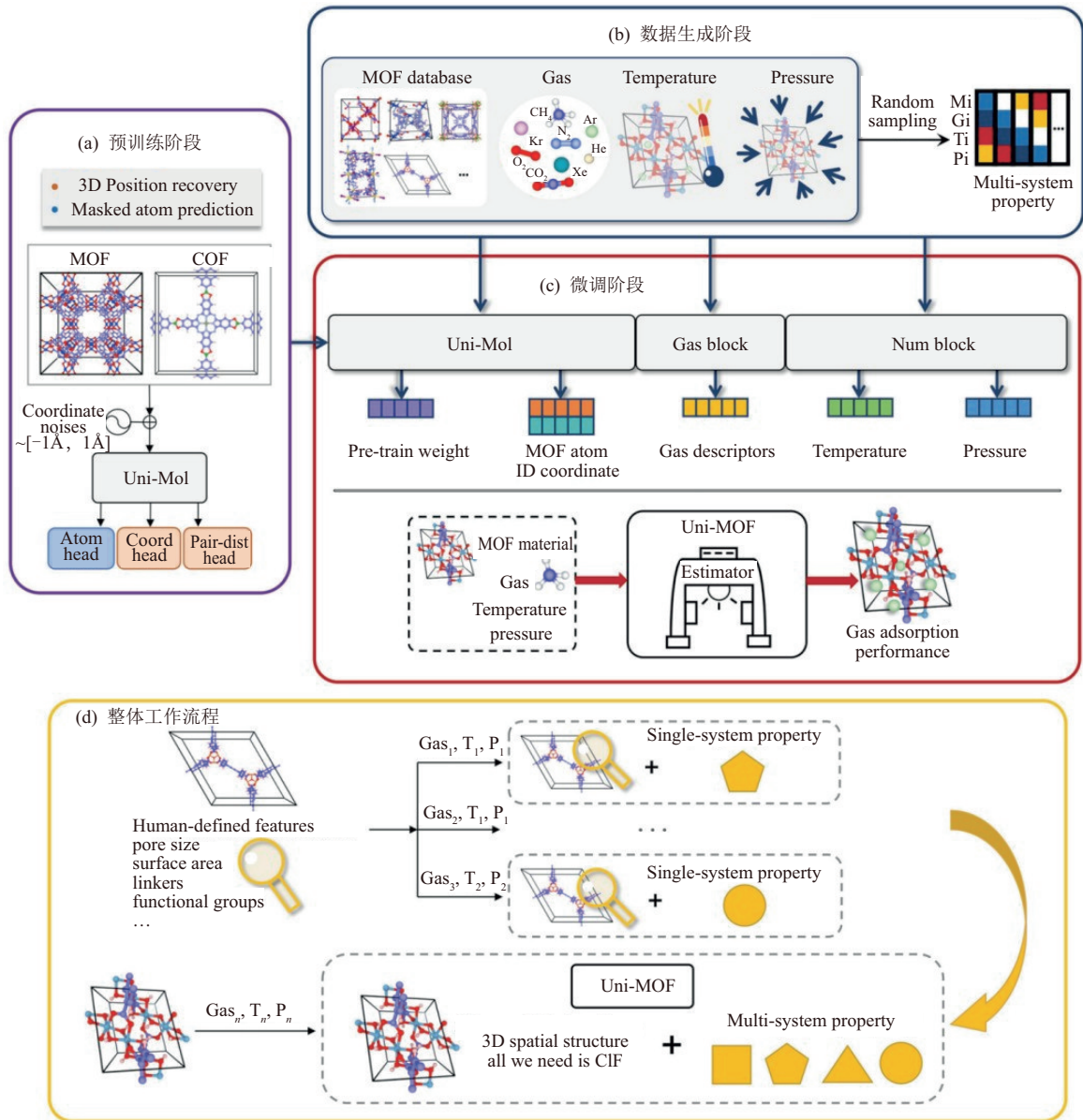


图 41 Uni-MOF 框架示意图^[151]

Fig. 41 Schematic of the Uni-MOF framework^[151]

捕捉材料的全局特征;通过创新的图构建方法与注意力机制设计,解决了传统模型在长程相互作用捕捉及泛化能力方面的不足。上述模型及其改进方案显著提升了材料属性预测的准确性与效率,为材料科学领域提供了强有力的工具,展现出广阔的应用前景。

4 总结与展望

文中对材料逆向设计中涉及材料表征、材料生成与属性预测的相关研究进行了概述与总结。材料表征不仅能够捕捉材料的局部与全局结构信息,还可通过数据驱动方式加速新材料设计,助力研究人员更高效地探索材料空间。材料生成通过学习材料结构与性能间的映射关系,可在实验前对材料的组成与结构进行优化,显著缩短实验周期、降低

研发成本。属性预测通过刻画材料的局部与长程相互作用,实现对材料物理化学性质的精准预测;多任务学习与自监督学习方法进一步提升了模型的泛化能力与预测精度。

尽管 AI 技术在材料发现领域已取得显著进展,但其实际应用仍面临诸多挑战。例如,材料数据的稀缺性与多样性不足,限制了模型的训练效果与泛化能力。AI 模型可解释性不足,也导致难以揭示其预测背后的物理化学机制。此外,如何实现 AI 技术与现有材料研究框架的深度融合,以及如何从大规模数据中高效提取高价值信息,均为当前亟待解决的关键问题。

材料表征需要大量高质量数据用于模型训练,而当前材料实验物性数据普遍匮乏、测量结果存在

不一致性;现有各类材料数据库又多以 DFT 计算结果为主,数据缺乏全面性与多样性。尽管利用自然语言处理技术解析文献已构建出诸多新数据集,但获取原始文献数据并进行有效解析仍存在较大困难。此外,针对小样本数据分析,往往需要借助多保真度建模、混合特征化与神经网络、迁移学习等技术,以充分利用已有大规模数据集的信息。

可解释性是另一大研究难点,其不仅有助于揭示模型内部决策机制,还能明确模型适用的有效范围。然而,当前即便精度最高的模型也往往具有较强的“黑箱”特性。尽管已有部分解释方法可供应用,如部分依赖图、个体条件期望图、沙普利可加性解释及代理建模等,但这类方法尚无法完整刻画底层模型,也难以充分解释其决策过程。

对于新型材料或具有特殊性质的材料,现有表征技术往往难以提供足够精细的结构信息。随着 AI 的发展以及对新材料性能要求的不断提升,对新型表征方法也提出了新的需求。此外,表征方法的通用性与预测精度在一定程度上可能存在矛盾。材料性能通常受多尺度结构的共同影响,涵盖从原子尺度到宏观尺度的多级结构;如何有效整合不同尺度的表征结果,以全面理解材料构效关系,仍是亟待解决的关键问题。整合 X 射线衍射、电子显微镜、光谱分析等多种表征手段所获得的数据,实现多模态数据融合,有望成为更全面描述材料结构与性能的有效途径。

在生成复杂材料结构时,仍面临难以精确控制微观结构与缺陷等难题。对于复杂材料体系,生成模型的训练与优化需要大量计算资源,尤其在处理多元素、多尺度材料结构时更为突出。开发更高效的生成模型,提升其生成能力与可解释性,有望更精准地生成具备特定性能的材料结构。在材料生成过程中,还需综合考虑多目标优化,以满足实际应用中的多样化需求。

现有属性预测模型大多基于特定数据集训练,对于未见材料体系或新应用场景,模型泛化能力普遍较弱。材料的部分复杂性能(如多物理场耦合性能、动态性能等)受多种因素共同影响,现有模型难以精准刻画其复杂关联关系。不同材料体系的数据特征与物理规律存在差异,需选择适配的模型架构与参数,以满足多样化材料的属性预测需求。通过引入迁移学习、元学习等技术,有望提升模型对新任务与新数据的适应能力,进一步增强其泛化性能。

当前 AI 技术在材料科学领域的应用已从算法验证阶段逐步迈向工程化应用。美国劳伦斯伯克利

国家实验室开发的 A-Lab 自主实验系统,实现了材料合成-表征-优化的全流程闭环。其核心突破在于将传统试错实验转化为“实验设计→机器人执行→数据反馈→模型更新”的智能迭代循环,使新型固态电解质材料的研发周期由传统方法的 18 个月缩短至 6 周。该系统为材料研发提供了可复制的技术路线图,已在钙钛矿光伏材料、高温超导材料等领域取得突破性进展,验证了 AI 驱动实验范式的工程可行性。

在知识挖掘方面,多模态大语言模型正在重塑材料发现的知识范式。以 Materials Transformer 为代表的专业模型,通过融合材料数据库、文献语料、实验报告等多源数据,构建了跨模态材料知识图谱。该类模型借助实体识别技术,从百年材料文献中提取超 1 000 万组材料性能关联关系,解决了历史知识碎片化问题。研究团队还开发了“语言模型+计算模块”的混合架构,可通过自然语言指令直接调用 VASP、LAMMPS 等专业软件。更值得关注的是 AI 智能体(AI agent)系统的突破,如 DeepMind 开发的“材料探索者”系统,可自主拆解复杂研发任务,协调多个计算模块完成从结构预测到性能验证的全流程作业,并在新型储氢材料开发中实现了无人干预、连续 42 d 的自主研究。

在计算层面,DFT 计算虽精度优异,但其计算开销巨大,单次计算往往需要数千 CPU 小时。中国科学院团队^[152]通过开发基于深度势能模型的机器学习势函数,构建了包含 10^5 量级 DFT 数据的训练集,采用图神经网络捕捉原子间相互作用,最终得到误差低于 10 meV/atom 的替代模型。这种“机器学习势”在电池材料界面演化、催化剂表面反应等长程动态模拟中展现出独特优势,使原本需要超级计算机数月乃至更久才能完成的电化学腐蚀模拟,在 workstation 级设备上仅需 72 h 即可完成。更值得期待的是,结合主动学习算法的自适应势函数优化系统,可根据模拟过程中识别的误差区域自动触发 DFT 计算进行修正,形成了精度与效率兼顾的动态平衡机制。

这些技术突破共同勾勒出 AI for Materials 的演进路线:从单点算法创新向系统工程架构升级,从辅助工具定位向研发主体角色转变。未来需重点突破跨尺度建模、小样本学习、实验-计算数据融合等关键技术,同时构建涵盖材料基因工程数据库、智能实验机器人、云端计算集群的新型基础设施,最终实现材料研发从“经验驱动”到“知识驱动”再到“AI 原生”的范式跃迁。

此外,AI 在材料发现中的应用需要计算机科学、物理学、化学和材料科学等多学科的合作。

这需要不同领域的专家共同开发新的 AI 工具和方法,以解决材料发现中的复杂问题。这种跨学科的合作将为材料发现带来更多的创新和突破。随着技术的不断进步和跨学科合作的加强, AI 将在材料发现中发挥更加重要的作用,推动材料研究向更高效、更智能的方向发展。 AI 将成为未来材料发现创新的核心驱动力之一,为解决人类面临的能源、环境和健康等重大挑战提供有力支持。

参考文献:

- [1] PATHAK Y, JUNEJA K S, VARMA G, et al. Deep learning enabled inorganic material generator[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, 22 (46) : 26935-26943.
- [2] WEININGER D, WEININGER A, WEININGER J L. SMILES. 2: Algorithm for generation of unique SMILES notation[J]. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 1989, 29(2): 97-101.
- [3] GÓMEZ-BOMBARELLI R, WEI J N, DUVENAUD D, et al. Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules[J]. *ACS Central Science*, 2018, 4(2): 268-276.
- [4] SKINNIDER M A. Invalid SMILES are beneficial rather than detrimental to chemical language models [J]. *Nature Machine Intelligence*, 2024, 6(4): 437-448.
- [5] KIM S, CHEN Jie, CHENG Tiejun, et al. PubChem 2023 update[J]. *Nucleic Acids Research*, 2023, 51(D1): D1373-D1380.
- [6] MICHELS J, BANDARUPALLI R, AHANGAR AKBARI A, et al. Natural language processing methods for the study of protein-ligand interactions[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2025, 65(5): 2191-2213.
- [7] GE Wei, DE SILVA R, FAN Yanan, et al. Machine learning in polymer research[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(11): 2413695. DOI:10.1002/adma.202413695.
- [8] DANGAYACH R, JEONG N, DEMIREL E, et al. Machine learning-aided inverse design and discovery of novel polymeric materials for membrane separation[J]. *Environmental Science & Technology*, 2025, 59(2): 993-1012.
- [9] DALMAU D, ALEGRE-REQUENA J V. ROBERT: Bridging the gap between machine learning and chemistry [J]. *WIREs Computational Molecular Science*, 2024, 14(5): e1733. DOI:10.1002/wcms.1733.
- [10] SHI Yunfei, YANG Zhengxin, MA Sicong, et al. Machine learning for chemistry: Basics and applications[J]. *Engineering*, 2023, 27: 70-83.
- [11] EHRT C, KRAUSE B, SCHMIDT R, et al. SMARTS. plus: A toolbox for chemical pattern design [J]. *Molecular Informatics*, 2020, 39 (12) : e2000216. DOI:10.1002/minf.202000216.
- [12] KRENN M, HÄSE F, NIGAM A, et al. Self-referencing embedded strings (SELFIES): A 100% robust molecular string representation [J]. *Machine Learning: Science and Technology*, 2020, 1 (4) : 045024. DOI:10.1088/2632-2153/aba947.
- [13] LO A, POLLICE R, NIGAM A, et al. Recent advances in the self-referencing embedded strings (SELFIES) library [J]. *Digital Discovery*, 2023, 2(4): 897-908.
- [14] LI Yibo, ZHANG Liangren, LIU Zhenming. Multi-objective de novo drug design with conditional graph generative model [J]. *Journal of Cheminformatics*, 2018, 10(1): 33. DOI:10.1186/s13321-018-0287-6.
- [15] TODESCHINI R, CONSONNI V. *Molecular descriptors for chemoinformatics* [M]. 2nd ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2009.
- [16] LIM J, RYU S, KIM J W, et al. Molecular generative model based on conditional variational autoencoder for de novo molecular design [J]. *Journal of Cheminformatics*, 2018, 10(1): 31. DOI:10.1186/s13321-018-0286-7.
- [17] WAN Yue, WU Jialu, HOU Tingjun, et al. Multi-channel learning for integrating structural hierarchies into context-dependent molecular representation [J]. *Nature Communications*, 2025, 16(1): 413. DOI: 10.1038/s41467-024-55082-4.
- [18] FANG Xiaomin, LIU Lihang, LEI Jieqiong, et al. Geometry-enhanced molecular representation learning for property prediction [J]. *Nature Machine Intelligence*, 2022, 4(2): 127-134.
- [19] CHEN Chi, YE Weike, ZUO Yunxing, et al. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals [J]. *Chemistry of Materials*, 2019, 31(9): 3564-3572.
- [20] KIM S, NOH J, GU G H, et al. Generative adversarial networks for crystal structure prediction [J]. *ACS Central Science*, 2020, 6(8): 1412-1420.
- [21] RUPP M, TKATCHENKO A, MÜLLER K R, et al. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(5): 058301. DOI:10.1103/PhysRevLett.108.058301.
- [22] HANSEN K, MONTAVON G, BIEGLER F, et al. Assessment and validation of machine learning methods for predicting molecular atomization energies [J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2013, 9(8): 3404-3419.
- [23] MONTAVON G, RUPP M, GOBRE V, et al. Machine learning of molecular electronic properties in chemical compound space [J]. *New Journal of Physics*, 2013, 15(9): 095003. DOI:10.1088/1367-2630/

- 15/9/095003.
- [24] HANSEN K, BIEGLER F, RAMAKRISHNAN R, et al. Machine learning predictions of molecular properties: accurate many-body potentials and nonlocality in chemical space[J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2015, 6(12): 2326-2331.
- [25] FABER F, LINDMAA A, VON LILIENFELD O A, et al. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies [J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2015, 115(16): 1094-1101.
- [26] BARKER J, BULIN J, HAMAEEKERS J, et al. LC-GAP: Localized coulomb descriptors for the Gaussian approximation potential [M]//*Scientific Computing and Algorithms in Industrial Simulations*. Cham: Springer International Publishing, 2017: 25-42.
- [27] HIMANEN L, JÄGER M O J, MOROOKA E V, et al. DDescribe: Library of descriptors for machine learning in materials science [J]. *Computer Physics Communications*, 2020, 247: 106949. DOI:10.1016/j.cpc.2019.106949.
- [28] HUO Haoyan, RUPP M. Unified representation of molecules and crystals for machine learning [J]. *Machine Learning: Science and Technology*, 2022, 3(4): 045017. DOI:10.1088/2632-2153/aca005.
- [29] ISAYEV O, OSES C, TOHER C, et al. Universal fragment descriptors for predicting properties of inorganic crystals[J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 15679. DOI:10.1038/ncomms15679.
- [30] SCHMIDT J, MARQUES M R G, BOTTI S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science [J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5: 83. DOI:10.1038/s41524-019-0221-0.
- [31] WENG Mouyi, WANG Zhi, QIAN Guoyu, et al. Identify crystal structures by a new paradigm based on graph theory for building materials big data [J]. *Science China Chemistry*, 2019, 62(8): 982-986.
- [32] CANG Zixuan, WEI Guowei. Integration of element specific persistent homology and machine learning for protein-ligand binding affinity prediction [J]. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, 2018, 34(2): e2914. DOI: 10.1002/cnm.2914.
- [33] CANG Zixuan, WEI Guowei. Analysis and prediction of protein folding energy changes upon mutation by element specific persistent homology[J]. *Bioinformatics*, 2017, 33(22): 3549-3557.
- [34] CANG Zixuan, WEI Guowei. TopologyNet: Topology based deep convolutional and multi-task neural networks for biomolecular property predictions[J]. *PLoS Computational Biology*, 2017, 13(7): e1005690. DOI:10.1371/journal.pcbi.1005690.
- [35] WU Kedi, ZHAO Zhixiong, WANG Renxiao, et al. TopP-S: Persistent homology-based multi-task deep neural networks for simultaneous predictions of partition coefficient and aqueous solubility [J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2018, 39(20): 1444-1454.
- [36] JIANG Yi, CHEN Dong, CHEN Xin, et al. Topological representations of crystalline compounds for the machine-learning prediction of materials properties [J]. *npj Computational Materials*, 2021, 7: 28. DOI: 10.1038/s41524-021-00493-w.
- [37] CHEN Xin, CHEN Dong, WENG Mouyi, et al. Topology-based machine learning strategy for cluster structure prediction [J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, 11(11): 4392-4401.
- [38] LEE Y J, BARTHEL S D, DŁOTKO P, et al. Quantifying similarity of pore-geometry in nanoporous materials [J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 15396. DOI:10.1038/ncomms15396.
- [39] COURT C J, YILDIRIM B, JAIN A, et al. 3-D inorganic crystal structure generation and property prediction via representation learning [J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2020, 60(10): 4518-4535.
- [40] NOH J, KIM J, STEIN H S, et al. Inverse design of solid-state materials via a continuous representation [J]. *Matter*, 2019, 1(5): 1370-1384.
- [41] DAMEWOOD J, KARAGUESIAN J, LUNGER J R, et al. Representations of materials for machine learning [J]. *Annual Review of Materials Research*, 2023, 53: 399-426.
- [42] MORTAZAVI B. Recent advances in machine learning-assisted multiscale design of energy materials [J]. *Advanced Energy Materials*, 2025, 15(9): 2403876. DOI:10.1002/aenm.202403876.
- [43] PARK H, LI Zhenzhu, WALSH A. Has generative artificial intelligence solved inverse materials design? [J]. *Matter*, 2024, 7(7): 2355-2367.
- [44] ZILETTI A, KUMAR D, SCHEFFLER M, et al. Insightful classification of crystal structures using deep learning [J]. *Nature Communications*, 2018, 9: 2775. DOI:10.1038/s41467-018-05169-6.
- [45] REN Zekun, NOH J, TIAN Siyu, et al. Inverse design of crystals using generalized invertible crystallographic representation [EB/OL]. (2020-05-15) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2005.07609>.
- [46] REN Zekun, TIAN S I P, NOH J, et al. An invertible crystallographic representation for general inverse design of inorganic crystals with targeted properties [J]. *Matter*, 2022, 5(1): 314-335.
- [47] RAGONE M, SHAHABAZIAN-YASSAR R, MASHAYEK F, et al. Deep learning modeling in microscopy imaging: A review of materials science applications [J]. *Progress in Materials Science*, 2023,

- 138:101165. DOI:10.1016/j.pmatsci.2023.101165.
- [48] LU Shizhao, JAYARAMAN A. Machine learning for analyses and automation of structural characterization of polymer materials [J]. *Progress in Polymer Science*, 2024, 153: 101828. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2024.101828.
- [49] BEHLER J, PARRINELLO M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(14): 146401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.146401.
- [50] BARTÓK A P, KONDOR R, CSÁNYI G. On representing chemical environments [J]. *Physical Review B*, 2013, 87(18): 184115. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.184115.
- [51] WANG Xijun, YE Sheng, HU Wei, et al. Electric dipole descriptor for machine learning prediction of catalyst surface-molecular adsorbate interactions [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2020, 142(17): 7737-7743.
- [52] CHONG S S, NG Y S, WANG Huiqiong, et al. Advances of machine learning in materials science: Ideas and techniques [J]. *Frontiers of Physics*, 2023, 19(1): 13501. DOI:10.1007/s11467-023-1325-z.
- [53] LI Shunning, LIU Yuanji, CHEN Dong, et al. Encoding the atomic structure for machine learning in materials science [J]. *WIREs Computational Molecular Science*, 2022, 12(1): e1558. DOI: 10.1002/wcms.1558.
- [54] CHEN Litao, ZHANG Wentao, NIE Zhiwei, et al. Generative models for inverse design of inorganic solid materials [J]. *Journal of Materials Informatics*, 2021, 1:4. DOI:10.20517/jmi.2021.07.
- [55] MANSOURI TEHRANI A, OLIYNYK A O, PARRY M, et al. Machine learning directed search for ultraincompressible, superhard materials [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2018, 140(31): 9844-9853.
- [56] REN Qi, CHEN Dali, RAO Lixiang, et al. Machine-learning-assisted discovery of 212-Zintl-phase compounds with ultra-low lattice thermal conductivity [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12(2): 1157-1165.
- [57] POGUE E A, NEW A, MCELROY K, et al. Closed-loop superconducting materials discovery [J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9: 181. DOI: 10.1038/s41524-023-01131-3.
- [58] LOTFI S, ZHANG Ziyang, VISWANATHAN G, et al. Targeting productive composition space through machine-learning-directed inorganic synthesis [J]. *Matter*, 2020, 3(1): 261-272.
- [59] AMENT S, AMSLER M, SUTHERLAND D R, et al. Autonomous materials synthesis via hierarchical active learning of nonequilibrium phase diagrams [J]. *Science Advances*, 2021, 7(51): eabg4930. DOI: 10.1126/sciadv.abg4930.
- [60] JHA D, WARD L, YANG Zijiang, et al. IRNet: A general purpose deep residual regression framework for materials discovery [C]//*Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. Anchorage, AK, USA: ACM, 2019: 2385-2394. DOI: 10.1145/3292500.3330932.
- [61] GOODFELLOW I, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial networks [J]. *Communications of the ACM*, 2020, 63(11): 139-144.
- [62] HOFFMANN M, NOÉ F. Generating valid Euclidean distance matrices [EB/OL]. (2019-11-15)[2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/1910.03131>.
- [63] DAN Yabo, ZHAO Yong, LI Xiang, et al. Generative adversarial networks (GAN) based efficient sampling of chemical composition space for inverse design of inorganic materials [J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6:84. DOI:10.1038/s41524-020-00352-0.
- [64] SONG Yuqi, SIRIWARDANE E M D, ZHAO Y, et al. Computational discovery of new 2D materials using deep learning generative models [J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2021, 13(45): 53303-53313.
- [65] LONG Teng, FORTUNATO N M, OPAHLE I, et al. Constrained crystals deep convolutional generative adversarial network for the inverse design of crystal structures [J]. *npj Computational Materials*, 2021, 7: 66. DOI:10.1038/s41524-021-00526-4.
- [66] RADFORD A, METZ L, CHINTALA S. Unsupervised representation learning with deep convolutional generative adversarial networks [EB/OL]. (2016-01-07)[2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/1511.06434>.
- [67] KIM B, LEE S, KIM J. Inverse design of porous materials using artificial neural networks [J]. *Science Advances*, 2020, 6(1): eaax9324. DOI: 10.1126/sciadv.aax9324.
- [68] ZHAO Yong, SIRIWARDANE E M D, WU Zhenyao, et al. Physics guided deep learning for generative design of crystal materials with symmetry constraints [J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9: 38. DOI:10.1038/s41524-023-00987-9.
- [69] CHUN S, ROY S, NGUYEN Y T, et al. Deep learning for synthetic microstructure generation in a materials-by-design framework for heterogeneous energetic materials [J]. *Scientific Reports*, 2020, 10: 13307. DOI:10.1038/s41598-020-70149-0.
- [70] SHEN S C, BUEHLER M J. Nature-inspired architected materials using unsupervised deep learning [J]. *Communications Engineering*, 2022, 1: 37. DOI: 10.1038/s44172-022-00037-0.

- [71] FUCHS L, FURAT O, FINEGAN D P, et al. Generating multi-scale Li-ion battery cathode particles with radial grain architectures using stereological generative adversarial networks[J]. *Communications Materials*, 2025, 6:4. DOI:10.1038/s43246-024-00728-5.
- [72] HSU Y C, YANG Zhenze, BUEHLER M J. Generative design, manufacturing, and molecular modeling of 3D architected materials based on natural language input [J]. *APL Materials*, 2022, 10 (4) : 041107. DOI:10.1063/5.0082338.
- [73] ZHAO Yong, AL-FAHDI M, HU Ming, et al. High-throughput discovery of novel cubic crystal materials using deep generative neural networks [J]. *Advanced Science*, 2021, 8 (20) : 2100566. DOI: 10.1002/advs.202100566.
- [74] MAO Yunwei, HE Qi, ZHAO Xuanhe. Designing complex architected materials with generative adversarial networks[J]. *Science Advances*, 2020, 6(17) : eaaz4169. DOI: 10.1126/sciadv.aaz4169.
- [75] SCARSELLI F, GORI M, TSOI A C, et al. The graph neural network model [J]. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2009, 20(1): 61-80.
- [76] MERCHANT A, BATZNER S, SCHOENHOLZ S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery [J]. *Nature*, 2023, 624(7990) : 80-85.
- [77] OJIH J, AL-FAHDI M, YAO Yagang, et al. Graph theory and graph neural network assisted high-throughput crystal structure prediction and screening for energy conversion and storage[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12(14): 8502-8515.
- [78] YANG Zhenze, BUEHLER M J. High-throughput generation of 3D graphene metamaterials and property quantification using machine learning[J]. *Small Methods*, 2022, 6 (9) : 2200537. DOI: 10.1002/smt.202200537.
- [79] GOODALL R E A, PARACKAL A S, FABER F A, et al. Rapid discovery of stable materials by coordinate-free coarse graining [J]. *Science Advances*, 2022, 8(30) : eabn4117. DOI: 10.1126/sciadv.abn4117.
- [80] ZENI C, PINSLER R, ZÜGNER D, et al. A generative model for inorganic materials design[J]. *Nature*, 2025, 639(8055) : 624-632.
- [81] DAS K, KHAstagir S, GOYAL P, et al. Periodic materials generation using text-guided joint diffusion model [EB/OL]. (2025-03-01) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2503.00522>.
- [82] KLIPFEL A, FREGIER Y, SAYEDE A, et al. Vector field oriented diffusion model for crystal material generation[J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2024, 38(20) : 22193-22201.
- [83] ZUO Yunxing, QIN Mingde, CHEN Chi, et al. Accelerating materials discovery with Bayesian optimization and graph deep learning[J]. *Materials Today*, 2021, 51: 126-135.
- [84] KINGMA D P, WELLING M. Auto-encoding variational Bayes [EB/OL]. (2022-12-10) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/1312.6114>.
- [85] KIM E, HUANG K, JEGELKA S, et al. Virtual screening of inorganic materials synthesis parameters with deep learning [J]. *npj Computational Materials*, 2017, 3: 53. DOI:10.1038/s41524-017-0055-6.
- [86] HOFFMANN J, MAESTRATI L, SAWADA Y, et al. Data-driven approach to encoding and decoding 3-D crystal structures[EB/OL]. (2019-09-03) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/1909.00949>.
- [87] XIE Tian, FU Xiang, GANEA O E, et al. Crystal diffusion variational autoencoder for periodic material generation [EB/OL]. (2022-03-14) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2110.06197>.
- [88] LYNGBY P, THYGESEN K S. Data-driven discovery of 2D materials by deep generative models[J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8: 232. DOI:10.1038/s41524-022-00923-3.
- [89] PAKORNCHOTE T, CHOOMPON-ANOMAKHUN N, ARRERUT S, et al. Diffusion probabilistic models enhance variational autoencoder for crystal structure generative modeling[J]. *Scientific Reports*, 2024, 14:1275. DOI:10.1038/s41598-024-51400-4.
- [90] YE Caiyuan, WENG Hongming, WU Quansheng. Con-CDVAE: A method for the conditional generation of crystal structures [J]. *Computational Materials Today*, 2024, 1: 100003. DOI: 10.1016/j.commt.2024.100003.
- [91] LUO Youzhi, LIU Chengkai, JI Shuiwang. Towards symmetry-aware generation of periodic materials[EB/OL]. (2024-05-27) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2307.02707>.
- [92] TSUKAUE K, YASUDA K. Crystal structure generation using a diffusion model conditioned on X-ray diffraction intensities without label learning [C]//Proceedings of the 4th AAAI Workshop on AI to Accelerate Science and Engineering (AI2ASE). Philadelphia: AAAI Press, 2025:13711-13719. https://ai2ase.github.io/papers/22_Tsukaue_Yasuda.pdf.
- [93] SINHA A, JIA Shuyi, FUNG V. Representation-space diffusion models for generating periodic materials [EB/OL]. (2024-08-13) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2408.07213>.
- [94] LEVY D, PANIGRAHI S S, KABA S O, et al. SymmCD: Symmetry-preserving crystal generation with diffusion models[EB/OL]. (2025-05-23) [2025-05-26]. <https://arxiv.org/abs/2502.03638>.
- [95] CHEN J W, GUO J, SCHWALLER P. MatInvent: Reinforcement learning for 3D crystal diffusion genera-

- tion [C]//Proceedings of the Workshop on AI for Accelerated Materials Design (AI4Mat) at the 13th International Conference on Learning Representations (ICLR 2025). Singapore: PMLR, 2025: 1-14. <https://openreview.net/forum?id=Ovxfri7l5L>.
- [96] KHASTAGIR S, DAS K, GOYAL P, et al. CrysLDM: Latent diffusion model for crystal material generation [C]//Proceedings of the Workshop on AI for Accelerated Materials Design (AI4Mat) at the 13th International Conference on Learning Representations (ICLR 2025). Singapore: PMLR, 2025: 1-14. <https://openreview.net/forum?id=mhe4EejyAS>.
- [97] PARK J, GILL A P S, MOOSAVI S M, et al. Inverse design of porous materials: A diffusion model approach [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2024, 12(11): 6507-6514.
- [98] LIM H, LEE K H, YUN G J. Microstructure design of multifunctional particulate composite materials using conditional diffusion models [EB/OL]. (2023-01-23) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2301.09051v1>.
- [99] GHAFAROLLAHI A, BUEHLER M J. AtomAgents: Alloy design and discovery through physics-aware multi-modal multi-agent artificial intelligence [EB/OL]. (2024-07-13) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2407.10022>.
- [100] ZHANG Huan, SONG Yu, HOU Ziyu, et al. HoneyComb: A flexible LLM-based agent system for materials science [C]//Findings of the Association for Computational Linguistics: EMNLP 2024. Miami, Florida, USA Association for Computational Linguistics, 2024: 3369-3382.
- [101] KANG Y, KIM J. ChatMOF: An artificial intelligence system for predicting and generating metal-organic frameworks using large language models [J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 4705. DOI: 10.1038/s41467-024-48998-4.
- [102] DING Qianggang, MIRET S, LIU Bang. MatExpert: Decomposing materials discovery by mimicking human experts [EB/OL]. (2024-10-26) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2410.21317>.
- [103] CHEN R, MILLER B, SRIRAM A, et al. FlowLLM: Flow matching for material generation with large language models as base distributions [C]//Advances in Neural Information Processing Systems 37. Vancouver, BC, Canada. Neural Information Processing Systems Foundation, Inc. (NeurIPS), 2024: 46025-46046.
- [104] MOK D H, BACK S. Generative language model for catalyst discovery [EB/OL]. (2024-07-19) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2407.14040>.
- [105] TIAN Shaohan, JIANG Xue, WANG Weiren, et al. Steel design based on a large language model [J]. *Acta Materialia*, 2025, 285: 120663. DOI:10.1016/j.actamat.2024.120663.
- [106] DAS K, SAMANTA B, GOYAL P, et al. CrysXPP: An explainable property predictor for crystalline materials [J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8: 43. DOI:10.1038/s41524-022-00716-8.
- [107] SONG Zixing, MENG Ziqiao, KING I. A diffusion-based pre-training framework for crystal property prediction [J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2024, 38(8): 8993-9001.
- [108] YAN Keqiang, LIU Yi, LIN Yuchao, et al. Periodic graph transformers for crystal material property prediction [EB/OL]. (2022-06-20) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2209.11807>.
- [109] YAN Keqiang, FU Chengxi, QIAN Xiaoning, et al. Complete and efficient graph transformers for crystal material property prediction [EB/OL]. (2024-03-19) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2403.11857>.
- [110] TANIAI T, IGARASHI R, SUZUKI Y, et al. Crystalformer: Infinitely connected attention for periodic structure encoding [EB/OL]. (2024-03-18) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2403.11686>.
- [111] LEE N, NOH H, KIM S, et al. Density of states prediction of crystalline materials via prompt-guided multi-modal transformer [EB/OL]. (2023-11-23) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2311.12856>.
- [112] LIN LIN Yuchao, YAN Keqiang, LUO Youzhi, et al. Efficient approximations of complete interatomic potentials for crystal property prediction [EB/OL]. (2023-06-17) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2306.10045>.
- [113] LI Chuannan, LIANG Hanpu, ZHANG Xie, et al. Graph deep learning accelerated efficient crystal structure search and feature extraction [J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9: 176. DOI:10.1038/s41524-023-01122-4.
- [114] ZHOU Jie, CUI Ganqu, HU Shengding, et al. Graph neural networks: A review of methods and applications [J]. *AI Open*, 2020, 1: 57-81.
- [115] HAN Kai, XIAO An, WU Enhua, et al. Transformer in transformer [C]//Advances in Neural Information Processing Systems. [S. l.]: Neural Information Processing Systems Foundation, Inc., 2021, 34: 15908-15919. https://proceedings.nips.cc/paper_files/paper/2021/hash/854d9fca60b4bd07f9bb215d59ef5561-Abstract.html.
- [116] SCHÜTT K, KINDERMANS P J, FELIX H E S, et al. SchNet: A continuous-filter convolutional neural network for modeling quantum interactions [J]. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, 30: 992-1002.
- [117] HUANG Bing, VON LILIENFELD O A. Communication: Understanding molecular representations in machine learning: The role of uniqueness and target

- similarity [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2016, 145(16): 161102. DOI: 10.1063/1.4964627.
- [118] BARTÓK A P, CSÁNYI G. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction [J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2015, 115(16): 1051-1057.
- [119] SEKO A, TOGO A, HAYASHI H, et al. Prediction of low-thermal-conductivity compounds with first-principles anharmonic lattice-dynamics calculations and Bayesian optimization [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(20): 205901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.205901.
- [120] XUE Dezhen, BALACHANDRAN P V, HOGDEN J, et al. Accelerated search for materials with targeted properties by adaptive design [J]. *Nature Communications*, 2016, 7: 11241. DOI: 10.1038/ncomms11241.
- [121] GHIRINGHELLI L M, VYBIRAL J, LEVCHENKO S V, et al. Big data of materials science: critical role of the descriptor [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(10): 105503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.105503.
- [122] ISAYEV O, FOURCHES D, MURATOV E N, et al. Materials cartography: representing and mining materials space using structural and electronic fingerprints [J]. *Chemistry of Materials*, 2015, 27(3): 735-743.
- [123] SEKO A, HAYASHI H, NAKAYAMA K, et al. Representation of compounds for machine-learning prediction of physical properties [J]. *Physical Review B*, 2017, 95(14): 144110. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.144110.
- [124] XIE Tian, 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. DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.145301.
- [125] LOUIS S Y, ZHAO Yong, NASIRI A, et al. Graph convolutional neural networks with global attention for improved materials property prediction [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, 22(32): 18141-18148.
- [126] CHOUDHARY K, DECOST B. Atomistic line graph neural network for improved materials property predictions [J]. *npj Computational Materials*, 2021, 7: 185. DOI: 10.1038/s41524-021-00650-1.
- [127] HUANG Jiao, XING Qianli, JI Jinglong, et al. ADA-GNN: Atom-distance-angle graph neural network for crystal material property prediction [EB/OL]. (2024-01-22) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2401.11768>.
- [128] BATZNER S, MUSAELIAN A, SUN Lixin, et al. E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials [J]. *Nature Communications*, 2022, 13(1): 2453. DOI: 10.1038/s41467-022-29939-5.
- [129] HAN Jiaqi, RONG Yu, XU Tingyang, et al. Geometrically equivariant graph neural networks: A survey [EB/OL]. (2022-02-22) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2202.07230>.
- [130] KABA S, RAVANBAKHS S. Equivariant networks for crystal structures [C]// *Advances in Neural Information Processing Systems*. New Orleans: Neural Information Processing Systems Foundation, Inc., 2022: 4150-4164.
- [131] HU Weihua, LIU Bowen, GOMES J, et al. Strategies for pre-training graph neural networks [C]// *International Conference on Learning Representations*. Virtual: ICLR, 2020: 1-18. <https://openreview.net/forum?id=HJlWWSFDH>.
- [132] JHA D, CHOUDHARY K, TAVAZZA F, et al. Enhancing materials property prediction by leveraging computational and experimental data using deep transfer learning [J]. *Nature Communications*, 2019, 10: 5316. DOI: 10.1038/s41467-019-13297-w.
- [133] DAS K, SAMANTA B, GOYAL P, et al. CrysGNN: Distilling pre-trained knowledge to enhance property prediction for crystalline materials [J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2023, 37(6): 7323-7331.
- [134] HINTON G, VINYALS O, DEAN J. Distilling the knowledge in a neural network [EB/OL]. (2015-03-09) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/1503.02531>.
- [135] ZHONG Yang, YU Hongyu, GONG Xingao, et al. A general tensor prediction framework based on graph neural networks [J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2023, 14(28): 6339-6348.
- [136] GASTEIGER J, GIRI S, MARGRAF J T, et al. Fast and uncertainty-aware directional message passing for non-equilibrium molecules [EB/OL]. (2020-11-28) [2025-04-06]. <https://arxiv.org/abs/2011.14115>.
- [137] YAN Keqiang, SAXTON A, QIAN Xiaofeng, et al. A space group symmetry informed network for O(3) equivariant crystal tensor prediction [C]// *International Conference on Machine Learning*. Proceedings of Machine Learning Research. Vienna: PMLR, 2024: 28271-28286. <https://proceedings.mlr.press/v235/yan24d.html>.
- [138] MAO Zetian, LI Wenwen, TAN J. Dielectric tensor prediction for inorganic materials using latent information from preferred potential [J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 265. DOI: 10.1038/s41524-024-01450-z.
- [139] KOKER T, QUIGLEY K, TAW E, et al. Higher-order equivariant neural networks for charge density prediction in materials [J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 161. DOI: 10.1038/s41524-024-

- 01343-1.
- [140] CHEN Pin, XU Zexin, MO Qing, et al. ECD: A machine learning benchmark for predicting enhanced precision electronic charge density in crystalline inorganic materials [C]//International Conference on Learning Representations. Singapore: ICLR, 2025: 1-19. <https://openreview.net/forum?id=SBC-MNc3Mq3>.
- [141] MEREDIG B, AGRAWAL A, KIRKLIN S, et al. Combinatorial screening for new materials in unconstrained composition space with machine learning [J]. *Physical Review B*, 2014, 89 (9) : 094104. DOI:10.1103/PhysRevB.89.094104.
- [142] OLIYNYK A O, ANTONO E, SPARKS T D, et al. High-throughput machine-learning-driven synthesis of full-Heusler compounds [J]. *Chemistry of Materials*, 2016, 28(20): 7324-7331.
- [143] RAMPRASAD R, BATRA R, PILANIA G, et al. Machine learning in materials informatics: Recent applications and prospects [J]. *npj Computational Materials*, 2017, 3:54. DOI:10.1038/s41524-017-0056-5.
- [144] WARD L, AGRAWAL A, CHOUDHARY A, et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials [J]. *npj Computational Materials*, 2016, 2: 16028. DOI: 10.1038/npjcompumats.2016.28.
- [145] WANG Yingheng, KONG Shufeng, GREGOIRE J M, et al. Conformal crystal graph transformer with robust encoding of periodic invariance [J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2024, 38(1): 283-291.
- [146] JIN Luozhijie, DU Zijian, SHU Le, et al. Transformer-generated atomic embeddings to enhance prediction accuracy of crystal properties with machine learning [J]. *Nature Communications*, 2025, 16:1210. DOI:10.1038/s41467-025-56481-x.
- [147] KONG Shufeng, RICCI F, GUEVARRA D, et al. Density of states prediction for materials discovery via contrastive learning from probabilistic embeddings [J]. *Nature Communications*, 2022, 13: 949. DOI: 10.1038/s41467-022-28543-x.
- [148] FREUND R, ZAREMBA O, ARNAUTS G, et al. The current status of MOF and COF applications [J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2021, 60(45): 23975-24001.
- [149] QIAN Qihui, ASINGER P A, LEE M J, et al. MOF-based membranes for gas separations [J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(16): 8161-8266.
- [150] KANG Y, PARK H, SMIT B, et al. A multi-modal pre-training transformer for universal transfer learning in metal-organic frameworks [J]. *Nature Machine Intelligence*, 2023, 5(3): 309-318.
- [151] WANG Jingqi, LIU Jiapeng, WANG Hongshuai, et al. A comprehensive transformer-based approach for high-accuracy gas adsorption predictions in metal-organic frameworks [J]. *Nature Communications*, 2024, 15:1904. DOI:10.1038/s41467-024-46276-x.
- [152] WANG Jiantao, LIU Peitao, ZHU Heyu, et al. Efficient moment tensor machine-learning interatomic potential for accurate description of defects in Ni-Al Alloys [J]. *Physical Review Materials*, 2025, 9(5): 053805. DOI:10.1103/PhysRevMaterials.9.053805.

Application of Artificial Intelligence in Materials Discovery

SHEN Ao¹, MA Mei¹, GAO Le², MA Ning², MA Wei³, LIU Hao^{2*}, XIA Mingxu³

(1. School of Physics, Ningxia University, Yinchuan 750021, China;

2. School of Information Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China;

3. School of Materials and New Energy, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

Abstract: This paper reviews the application of artificial intelligence (AI) in materials discovery, focusing on the latest advancements in three core areas: material characterization, generation, and property prediction. First, the principles of descriptor design for material characterization were introduced, emphasizing the transformation of complex information, such as micro-structure and chemical composition, into machine-readable quantitative features. Then, an in-depth analysis of the technical pathways employed by generative models in the inverse design of materials was provided, detailing the specific applications and advantages of the generative adversarial networks (GANs), graph neural networks (GNNs), variational autoencoders (VAEs) diffusion models, and large language models (LLMs). Furthermore, material property prediction technologies based on GNN and Transformer architectures were reviewed, summarizing the performance of these methods in terms of prediction accuracy, computational efficiency, and model interpretability. Finally, the core challenges and potentials of AI-driven materials discovery were discussed, offering insights into future research directions.

Key words: artificial intelligence; materials discovery; materials characterization; materials generation; property prediction; inverse design; generative models

(责任编辑 张 娣)