首个材料领域轻量化、双模型协作的智能体发布

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42006.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

首个材料领域轻量化、双模型协作的智能体发布。随着人工智能技术的发展，科学家们开始研发能够辅助科学研究的大模型，模型越大，能力也就越强，但训练、部署和长期使用的成本也就越高。模型做小了又无法兼顾专业的科学推理和复杂的科研工具调用。那么，能否不依赖单个无所不能的超级大模型，而是让多个小模型协同合作获得复杂的科研能力呢？

9月10日，中国科学院深圳先进技术研究院材料人工智能研究所喻学锋研究员领衔的研究团队在《自然-机器智能》发表最新研究成果，正式发布了材料研究领域内的首个轻量化双模型协作智能体材智云脑MatBrain。

该智能体由两个轻量化的小模型Mat-R1、Mat-T1组成，前者就像材料专家，负责材料知识理解、科学推理和结果判断；后者则像科研执行者，负责调用材料数据库、结构生成模型和计算软件。两者通过不断地执行—分析—反馈—再执行，共同完成科研任务。

据介绍，该智能体在材料科学研究中的预测综合准确率较GPT-5、DeepSeek-R1等大模型提升 66%，部署成本较同类大模型降低95%，这种轻量模型协作方式在材料性质预测、晶体结构设计等任务中能够达到远超前沿通用大模型的水平。期刊编辑对该文章给予了高度评价，认为该成果是AI for Material领域非常有价值的工作。

AI材料专家与科研执行者

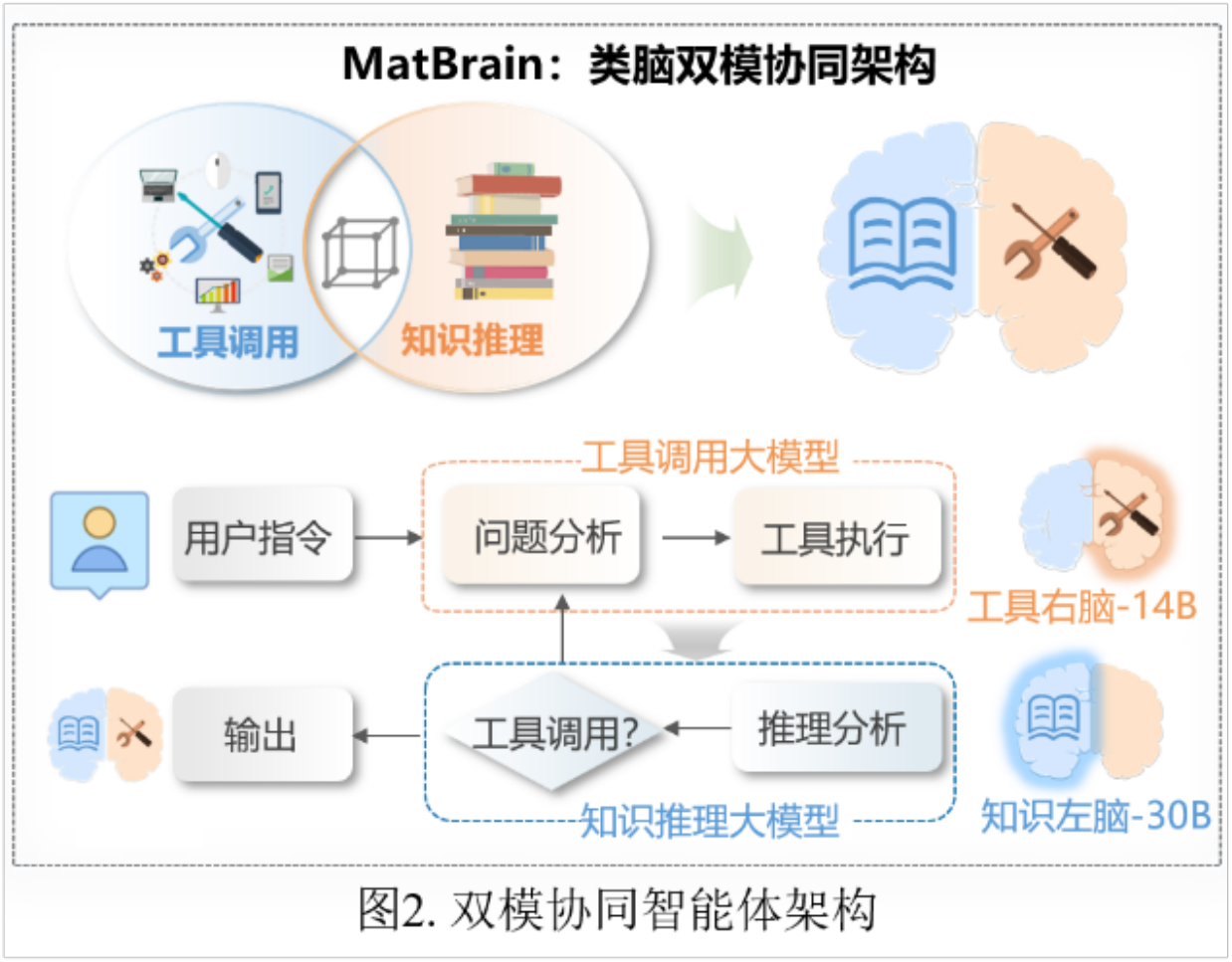
传统的材料科学研究中，一个新材料的发现从概念验证到应用往往需要较长的研发周期，这一过程需要科研人员不断进行理论分析、计算筛选和实验试错。近年来，大语言模型、高通量计算、机器学习以及Materials Project等大型材料数据库快速发展，研究人员得以更快地获得晶体结构和数据，并更高效地开展科学研究。

但在真实的工作中，科学推理和工具执行具有不同的任务特征。材料推理要求大模型尽可能准确、稳定，判断材料结构是否合理、分析材料性质、解释计算结果时，模型必须遵循化学组成、晶体对称性、原子几何和物理规律，不能随意发挥。单个大模型在给出专业判断、执行任务时，需要在不同的软件之间选择，构造正确的参数，读取中间结果，并根据信息灵活决定下一步的行动，其有效执行路径往往并不统一。

科学推理和科研工具调用这两种科研能力很难在同一个轻量化模型中做好，换成数千亿参数的通用大模型虽然可以提高科研能力，但会带来巨大的计算和部署成本。论文第一作者、深圳先进院博士后史桐雨介绍，与其让单一模型同时承担所有功能，不如将科学分析和科研执行进行专业化

分工，并通过模型协作完成复杂材料研究。

基于这一思路，研究团队开发出了材智云脑MatBrain智能体。该模型由Mat-R1、Mat-T1两个轻量化的模型组成。其中，300亿参数（30B）模型Mat-R1主要负责想，即理解材料结构和性质，判断计算结果是否合理，并根据已有证据决定下一步研究方向。140亿参数（14B）模型Mat-T1主要负责做，即调用材料数据库、晶体结构生成模型和性质计算程序，完成结构生成、计算分析和结果整理等任务，两者通过反复执行—分析—反馈—再执行共同完成科研任务。



MatBrain双模型协同框架。研究团队供图

判断更准确，部署成本更低

既然要让两个小模型来分工合作，那么如何训练它们，从而实现更高效的材料科研工作？

对于负责想的Mat-R1模型，研究人员整合了Materials Project、OQMD、ICSD等材料数据库和科研文献，将晶体结构、材料性质、合成方法与应用信息进行关联，构建了约25.2万条高质量材料指令数据，对模型进行训练。

对于负责做的Mat-T1模型，则构建了Mat-MCP材料科研工具平台，将以往公开的Materials Project、MatterGen、Pymatgen、CHGNet、和VASP等数据库、生成模型和计算程序统一封装成Mat-

T1模型可调用的科研工具，并通过2万个复杂材料科研问题对其进行强化学习。

两个模型角色明确，分工合作。Mat-R1就像‘材料专家’，负责判断，Mat-T1就像‘科研执行者’。如果结果不合理或者信息不充分，Mat-R1就会重新提出下一步研究要求，再让Mat-T1继续执行。史桐雨介绍。

研究结果表明，两个模型组成完整的MatBrain智能体后，不仅能够完成材料结构生成、性质预测、稳定性分析和合成路线规划等材料科研任务，还能够进一步参与开放式材料发现过程。在电催化剂的应用中，该模型完成了从科学假设形成、3万个候选结构生成、多阶段计算筛选，到候选材料实验验证的完整研究链条。

另外，在执行长时程复杂的材料创制任务中，MatBrain的材料预测综合准确率较GPT5、DeepSeek-R1等大模型提升66%。相较于依赖数千亿参数通用模型的技术路线，MatBrain由30B和14B两个相对轻量的模型组成，其硬件部署成本可降低超过95%，使先进材料科研智能体有望从大型计算中心进一步走向普通实验室工作站。



研究人员将MatBrain与具身智能技术相结合，构建具身智能机器人科学家（Dr. Mind）

赋能新材料研发

一直以来，喻学锋团队围绕人工智能技术赋能材料创制展开科学研究与技术转化，而MatBrain正是基于此前的技术基础，在不断优化和迭代后诞生的。团队相关核心专利一种双模型协同的轻量化材料科学智能研究方法与系统已获得授权，同时登记了材料科学模型协同生态平台软件V1.0软件著作权，相关成果入选2025年度中国科学院网信工作十大进展。团队已经将MatBrain开发成可应用的AI智能体软件。

在推动成果转化方面，我们将MatBrain与材料中试生产数据相结合，为产业定制化开发材料智能

体——材智云脑，为新材料等领域的突破提供高效的智能化解决方案。喻学锋介绍。相关技术已应用于深圳先进院团队孵化的中科先进材料科技有限公司，构建了数据驱动的先进功能材料中试平台，于2025年成功获批首批国家级制造业中试平台（全国仅21家，材料领域仅2家）。

另一方面，团队还与多家企业共建创新联合体，助力企业研发提质增效。例如团队与磷化工龙头企业兴发集团开展长期合作，将材智云脑MatBrain融合企业数据、构建面向磷化工及新材料领域的智能研发平台兴发云脑，实现了从文献检索、知识分析、实验方案设计到工艺优化的全流程智能辅助，帮助兴发集团向新能源领域转型，使其成为在磷酸铁锂电池原料赛道中成长速度最快的企业之一。

此外，研究团队正致力于将MatBrain作为机器人决策大脑，与具身智能技术相结合，构建具身智能机器人科学家（Dr. Mind）,其在灵巧手控制、离心机操作、精准反馈移液、精准微量加粉、样品表征分析等方面实现了精准、智能的自主实验，帮助科研人员高效完成生化合成、材料创制、细胞培养、样品检测等科研任务，从而推动构建具身智能自主实验室新范式。（来源：中国科学报刁雯蕙）

相关论文信息：https://www.nature.com/articles/s42256-026-01298-6

作者：喻学锋等 来源：《自然-机器智能》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发