

致《AI Materials》编辑部

尊敬的编辑老师：

本人谨向贵刊投稿研究论文《表意 AI 与材料科学：从“无根 Token”到“机理形根”的范式革命》，恳请审阅。

研究背景与核心问题

当前材料科学中的 AI 系统多基于“无根 Token”的统计拟合范式。这类模型能够预测“什么材料好”，但无法解释“为什么好”、论证“如何设计”、保证“所有约束被满足”。在核能结构材料、航空航天材料等安全关键型应用中，这种“黑箱”属性构成根本性的信任障碍。

本研究的主要内容

本文基于表意 AI (Logographic AI, LAI) 理论，系统性地论证材料科学 AI 从“数据拟合”走向“机理驱动”的范式革命路径。核心贡献包括：

- 1、“材料形根” (Material Morpho-Root) 的概念及其形式化定义 $M=(S,A,R)$ ，将材料科学的构效关系编码为可计算的认知基元；
- 2、形构熵 (MSE) 引导的图推理引擎，实现从目标性能到材料设计的完全可追溯推理与硬约束零违背保障；
- 3、LAI 形根网络与深度生成模型协同的混合架构，实现“高效采样”与“可信验证”的有机统一。

与期刊范围的契合度

本工作直接回应了贵刊推动“AI 驱动材料发现与设计”的核心宗旨。不同于当前多数研究聚焦于提升生成模型的性能指标，本文着眼于一个更根本的问题：**如何使 AI 本身在材料设计中变得足够可信？**本研究为材料科学提供了一条从“黑箱预测”走向“白箱推理”的新路径，有望为可解释、可验证、约束保证的 AI 材料设计奠定理论与方法基础。

原创性与伦理声明

本文为作者原创成果，未在其他期刊发表或投稿。作者已审阅并批准本稿件的全部内容，不存在利益冲突。

本人相信本文的发表将为材料 AI 领域的范式变革提供有价值的参考，恳请贵刊予以审阅。

此致
敬礼！

刘深

风海（深圳）人工智能技术开发有限公司 首席科学家

邮箱：liushen@fenghai.ac.cn；手机：13823361166；ORCID：0009-0002-5919-3786
公司官网：www.logographicaai.com

表意 AI 与材料科学：从“无根 Token”到“机理形根”的范式革命

Logographic AI and Materials Science: A Paradigm Revolution from Rootless Tokens to Mechanistic Morpho-Roots

摘要

当前主导材料科学的 AI 范式——基于统计拟合的“表音 AI”(Phonographic AI, PAI)——虽在数据筛选与性能预测方面展现出强大能力，但其以“无根 Token”为认知基元的底层逻辑，使其本质上是一个高阶相关性的发现者而非因果机制的理解者。这种“黑箱”属性在安全关键型材料应用（如核能结构材料、航空航天超材料）中构成根本性的信任障碍。

本文基于中国学者刘深提出的“表意 AI”（Logographic AI, LAI）理论，系统论证材料科学 AI 从“数据拟合”走向“机理驱动”的范式革命路径。核心贡献包括：（1）提出“材料形根”（Material Morpho-Root）概念及其形式化定义 $M = (S, A, R)$ ，将材料科学的构效关系编码为可计算的认知基元；（2）设计形构熵（MSE）引导的图推理引擎，实现从目标性能到材料设计的完全可追溯推理与硬约束零违背保障；（3）提出 LAI 形根网络与深度生成模型协同的混合架构，实现“高效采样”与“可信验证”的有机统一。

本文论证，LAI 范式在材料科学中的应用不仅是一次技术工具的升级，更是从“数据拟合”到“机理推理”的认知范式革命。当 AI 不仅能够预测“什么材料好”，还能解“为什么好”、论证“如何设计”、保证“所有约束被满足”时，材料研究才真正从“试错密集型”走向“机理驱动型”。

Abstract

The current AI paradigm dominating materials science—Phonographic AI (PAI) based on statistical fitting—has demonstrated powerful capabilities in data screening and property prediction. However, its underlying logic of treating "rootless Tokens" as cognitive primitives makes it essentially a discoverer of high-order correlations rather than a understander of causal mechanisms. This "black-box" nature constitutes a fundamental trust barrier in safety-critical materials applications such as nuclear structural materials and aerospace metamaterials.

This paper, based on the Logographic AI (LAI) theory proposed by Chinese scholar Shen Liu, systematically demonstrates the pathway for a paradigm revolution in materials science AI—from "data fitting" to "mechanism-driven" approaches. The core contributions include: (1) proposing the "Material Morpho-Root" concept and its formal definition $M = (S, A, R)$, encoding composition-structure-property relationships into computable cognitive primitives; (2) designing a Morpho-Structural Entropy (MSE)-guided graph reasoning engine, achieving fully traceable reasoning from target properties to material designs with zero-violation assurance of hard constraints; (3) proposing a hybrid architecture integrating LAI Morpho-Root networks with deep generative models, achieving the organic unity of "efficient sampling" and "trustworthy verification."

This paper argues that the application of the LAI paradigm in materials science is not merely an upgrade of technical tools, but a cognitive paradigm revolution from "data fitting" to "mechanistic reasoning." When AI can not only predict "which material is good," but also explain "why it is good," justify "how to design it," and guarantee that "all constraints are satisfied," materials research can truly transition from "trial-and-error intensive" to "mechanism-driven."

关键词：表意 AI（LAI）；材料形根；构效关系；可解释 AI；机理驱动设计；形构熵

Keywords: Logographic AI (LAI); Material Morpho-Root; Structure-Property Relationships; Explainable AI; Mechanism-Driven Design; Morpho-Structural Entropy

1. 引言：材料 AI 的“黑箱困境”与范式突破之必要

人工智能正以前所未有的深度融入材料科学。从高通量虚拟筛选到生成式材料设计，从自主实验系统到跨尺度建模，以深度学习为代表的 AI 技术已成为材料科学家不可或缺的“科研加速器”。上海交通大学团队构建的热辐射超材料逆向设计 AI 模型能够大批量生成候选设计方案并实现实验验证，相关成果发表于 Nature[1]；DiffMat 等框架利用扩散模型实现了从目标应力-应变曲线到吸能超材料微观结构的定制化生成[2]；基于智能体的自主系统已能够进行超材料建模与逆向设计的全流程自动化[3]；Yu 等人对 AI 驱动的电磁超材料设计方法进行了系统综述[13]。

然而，一个根本性的问题正在被系统性地忽视：**当前的 AI 驱动材料设计过程是一个“端到端”的黑箱映射。**研究者向模型输入目标性能，模型输出一个“最优”材料或结构——但研究者不知道“为什么是这个材料”，不知道“每个结构特征贡献了什么性能”，不知道“模型是否真正理解了背后的物理，还是仅仅在训练数据的分布内做了一个高维插值”。

这一问题的本质可追溯至当前主流 AI 范式的认知根基——中国学者刘深将其诊断为“**无根符号主义**”（Rootless Symbolism）[4][5]。当前所有主流 AI 模型（本文统称“表音 AI”，Phonographic AI, PAI）都以无内在意义的 Token 为基本认知单元，通过统计 Token 之间的共现关系来“理解”世界。这种范式的成功不意味着它理解了意义，只意味着它在统计相关性上做得足够好。当这种范式被应用于材料科学时，它带来了三重结构性局限：

局限一：不可解释性。PAI 能预测某种成分的钙钛矿具有高光电转换效率，但无法清晰阐释其电子-空穴对分离、迁移与复合的内在物理机制。其输出是“相关性”而非“因果性”。正如文献[6]所系统论证的，基于 Token 的模型或许能发现材料性能与结构参数之间的统计关联，却永远无法真正“理解”这些关联背后的物理因果链。

局限二：约束满足不可保证。材料的实际应用不仅要求满足目标性能指标，还要求满足一系列工程约束——可制造性约束（如最小特征尺寸）、热力学稳定性约束、成本约束、可持续性约束等。当前的生成模型虽然可以在训练数据中隐含这些约束，但无法在推理时硬性保证它们的满足。

局限三：物理知识的低效利用。材料科学经过数十年的发展，已经积累了大量成熟的物理理论——晶体学、热力学、动力学、第一性原理计算等。这些理论提供了关于“什么样的结构会产生什么样的性能”的深刻洞察。然而，当前的纯数据驱动方法几乎完全忽视了这些先验物理知识，将一切交给数据“自己说话”。

这三重局限的叠加，正在将材料 AI 引向一种更深层的困境——“**技术捕获**”（Technology Capture）[5][7]。当研究者满足于“模型能预测/生成材料”时，就可能不再追问“模型为什么这样预测/生成”。这种满足感本身，正是对更深层科学理解的捕获。在基础研究中，这种“黑箱”或许可以容忍；但在安全关键型应用中——如核能结构材料、航空航天材料、国防装备材料——不可解释性直接构成工程采纳的否决项。

本文认为，破解这一困境的关键不在于训练更大的生成模型，而在于**重构 AI 的认知架构**——从“统计拟合”转向“机理推理”。刘深提出的表意 AI（Logographic AI, LAI）理论[4][5][8]为此提供了全新的哲学基础与实现路径。LAI 的核心是用承载“形-义”理据性的“**形根**”（Morpho-Root）取代任意性的 Token，从根源上重构 AI 的语义构建逻辑。

本文将 LAI 理论框架系统性地映射至材料科学领域，提出“**材料形根**”体系与基于形根的图推理框架。本文的核心贡献包括：（1）首次提出“材料形根”的形式化定义 $M = (S, A, R)$ ；（2）设计形构熵（Morpho-Structural Entropy, MSE）引导的逆向推理引擎；（3）提出 LAI 与深度生成模型协同的混合架构。

本文的结构如下：第 2 节系统阐述 LAI 理论的核心概念与形根的形式化定义；第 3 节提出“材料形根”体系及其在材料科学中的应用；第 4 节设计基于形根的逆向推理引擎；第 5 节提出混合架构；第 6 节通过案例展示框架的工作方式；第 7 节讨论挑战与展望；第 8 节总结全文。

2. 表意 AI（LAI）理论基础

2.1 从“无根 Token”到“有根形根”：认知基元的范式转换

刘深在《有根的智能——表意人工智能的范式革命》（The Rooted Intelligence: The Paradigm Revolution of Logographic AI）[5]中系统论述了当前主流 AI 的认知根基问题。他指出，所有基于 Transformer 架构的大语言模型和多模态模型，本质上都是一种“**表音 AI**”——它们以离散的、无内在意义的 Token 作为基本认知单元，通过统计 Token 之间的共现关系来“理解”世界。Token 的“意义”完全是“无根的”——它随训练数据分布的变化而漂移，无法内化因果逻辑或硬约束[5][8]。

刘深将这种认知基元的无根性诊断为“**无根符号主义**”[4][5]，并从哲学层面追溯了这一困境的根源：以英语为代表的拼音文字体系将语言符号与意义之间的关系简化为任意的、约定俗成的对应，这种“任意性”被当代 AI 的 Token 范式继承并放大——Token 不承载任何固有意义，其“语义”完全由统计共现关系临时赋予。这种“无根性”导致三个结构性缺陷[5][8]：

1. **统计相关性不等于因果性**：模型可以预测“A 与 B 共现”，但无法理解“A 导致 B”的因果机制；
2. **语义漂移不可避免**：当数据分布变化时，Token 的“意义”随之改变；

3. 组合性是表面的：Token 无法原生表示层次化、跨尺度的知识结构。

刘深进一步指出，这种以离散 Token 为存储单元、以统计关联为组织逻辑的“数据仓库”范式，从根本上无法支撑“模型构建”这一智能核心活动，必须转向以“形根”为基本单元的“认知土壤”式知识表征体系[6]。

2.2 “形根”的形式化定义

LAI 的替代方案是引入“形根”（Morpho-Root）作为基本认知单元。刘深将形根定义为承载固有语义的结构化认知基元，其形式化表示为三元组[5][8]：

$$\tau = (S, A, R)$$

其中：

符号	名称	含义
S	符号标识	用于在系统中唯一指称该形根的机器可读标识与自然语言名称
A	属性集	内嵌固有语义特征、物理属性与硬约束（如“不可欺骗”“熔点不低于 X℃”）
R	关系函数集	定义该形根与其他形根之间预设的逻辑连接关系，由领域知识预定义并固化，而非从数据中学习

形根与 Token 的本质区别在于：Token 是空洞的统计占位符，其“意义”完全由上下文统计决定；形根是充盈的语义原子，其意义内嵌于自身的结构化定义之中[5][6]。刘深在《有根的智能》中系统论证了形根如何从根本上解决“符号接地问题”（Symbol Grounding Problem）——即符号如何获得意义的问题[5]。

2.3 形构熵（MSE）与图遍历推理机制

在 LAI 框架中，形根之间通过预定义的逻辑关系（R 集合中的函数）连接，形成形根语义网络——一个有向图 $G = (V, E)$ ，其中 V 为形根节点，E 为语义关系边。这个网络不是从数据中统计“学习”的，而是由领域知识预定义并固化的[5][8]。

刘深引入“形构熵”（Morpho-Structural Entropy, MSE）作为衡量形根系统有序程度的关键信息论量度[5][8]。对于形根节点 v，MSE 定义为：

$$H(v) = -\sum_{e \in N(v)} p(e) \log p(e)$$

其中 N(v) 是节点 v 的所有出边集合，p(e) 是边 e 的确定性权重。MSE 的物理含义是：**低形构熵区域**（ $H \rightarrow 0$ ）对应着明确的、已通过实验或理论验证的因果路径；**高形构熵区域**（H 较大）对应着不确定的、存在多条竞争路径或关键关系缺乏充分验证的知识空白区[5][8]。

刘深提出的形图计算（Morpho-Graph Computing）范式以 $O(|E|)$ 复杂度的稀疏图遍历取代了 Transformer 的稠密自注意力机制，实现了完全透明、可追溯的推理。其核心策略可概括为[5][8]：

“低熵快走，高熵问人”

即在低形构熵区域，系统沿已知的机理路径快速遍历；在高形构熵区域，系统主动请求外部验证（高保真仿真或实验），而非强行给出不可靠的结论。刘深将形构熵与序列熵（Sequential Entropy）的信息论区分在《有根的智能》第6章中系统建立[5]。

每一次图遍历都生成完整的**决策子图**（decision subgraph），记录每个节点激活、边遍历和分支决策的完整路径。这意味着 AI 的每一个推理结论都可以回溯到其依赖的形根节点和关系链条——实现了真正的“白箱化”推理[5][8]。违反硬约束的遍历路径在推理阶段即被逻辑阻断，而非在输出阶段被惩罚——不安全的结果从一开始就不会被生成[5][8]。

2.4 工程概念验证：OpenMorpho 原型系统

为验证形根理论的技术可行性，WindSeaAI 团队开发了开源原型系统 OpenMorpho[9]。该系统实现了形根三元组的数据结构、形根语义网络构建、形构熵(MSE)引导的图遍历推理以及硬约束阻断等核心机制。

OpenMorpho 已在多个领域进行了概念验证，包括材料科学领域的氢致脆化风险判断案例[9]。该原型首次以可运行代码的形式证明：基于形根的推理能够输出完整的、可审计的决策子图，并对违反领域硬约束的推理路径实现逻辑级的自动阻断。这一概念验证为本文提出的“材料形根”框架提供了工程基底的参照。

3. “材料形根”体系

3.1 “材料形根”的形式化定义

将 LAI 的形根框架映射至材料科学领域，我们定义“**材料形根**”（Material Morpho-Root）为封装材料科学领域最小机理单元的可计算认知基元。材料形根的形式化定义为：

$$\mathbf{M} = (\mathbf{S}, \mathbf{A}, \mathbf{R})$$

其中：

符号	名称	在材料科学中的具体含义
S	结构载体	材料的基本结构描述，如原子坐标、键连关系、空间群、晶格参数、缺陷构型、相界面描述
A	属性集	该结构载体所携带的本征物理属性，如原子半径、电负性、磁矩、形成能、弹性常数、热导率、带隙值
R	关系函数集	S 中元素与 A 之间的预置物理/化学关系函数，如“A 中元素替换将影响带隙值” “A 中键长变化将影响弹性模量” “A 中某元素替代将改变热导率的方向性”

核心特征：与 Token 将符号与意义剥离的逻辑截然相反，材料形根坚持每一个认知基元都必须携带其在材料科学知识网络中的拓扑位置，从而使结构与性能在底层即完成绑定。这一思路与材料基因组计划中“结构-性能”映射的理念一脉相承，但在知识表征的粒度与可计算性上实现了根本性的深化。

3.2 核心材料形根示例

以下是构成材料形根体系的核心形根类型（非穷举）：

形根名称	语义定义	核心属性（A）	关键关联（R）
Element-Root	化学元素的本征属性	原子序数、原子半径、电负性、价电子构型、熔点	influences Bond-Root; determines Crystal-Structure-Root
Crystal-Structure-Root	晶体结构与空间群	空间群、晶格参数、原子占位、对称性	determines Electronic-Band-Root; determines Mechanical-Property-Root
Defect-Root	点缺陷/线缺陷/面缺陷	缺陷类型、形成能、迁移能垒	influences Transport-Property-Root; determines Strength-Root
Phase-Interface-Root	相界面与晶界结构	界面能、错配度、界面原子结构	determines Composite-Property-Root; influences Stability-Root
Electronic-Band-Root	电子能带结构	带隙值、有效质量、态密度分布	determines Optical-Property-Root; determines Conductivity-Root
Phonon-Dispersion-Root	声子色散与热输运	声子频率、群速度、Grüneisen 参数	determines Thermal-Conductivity-Root; determines Thermal-Stability-Root
Mechanical-Property-Root	力学性能	弹性模量、泊松比、屈服强度、断裂韧性	constrained_by Manufacturability-Root; determines Service-Life-Root
Manufacturability-Root	可制造性约束	最小特征尺寸、可加工性、成本、可持续性	constrains 所有结构形根
Service-Condition-Root	服役条件约束	温度范围、应力状态、腐蚀环境、辐照剂量	constrains 所有性能形根

3.3 与现有材料表征方法的本质区别

为了更清晰地定位“材料形根”的创新价值，有必要将其与现有的材料表征方法进行对比：

维度	传统结构描述符	深度学习的隐式表征	材料形根
表征形式	单一数值(如孔隙率、比表面积)	高维向量（神经网络隐空间）	结构化三元组 (S, A, R)
语义承载	无内在语义	无内在语义（黑箱）	内嵌物理语义与约束

维度	传统结构描述符	深度学习的隐式表征	材料形根
可解释性	低（单一数值无法解释机理）	极低（完全黑箱）	高（每一步可追溯至物理机理）
推理能力	无	无（仅能预测/生成，不能推理）	有（基于语义网络的图推理）
约束保证	无	无（统计满足，无法硬性保证）	有（逻辑级阻断违反约束的路径）
知识复用	困难	困难（知识淹没在参数中）	容易（形根可独立复用与组合）

传统描述符是“数据的压缩”，深度学习隐式表征是“数据的重参数化”，而材料形根是“知识的显式编码”——它不仅告诉系统“是什么”，还告诉系统“为什么”以及“不能是什么”。

4. 基于“材料形根”的逆向推理引擎

4.1 形构熵引导的图遍历

材料形根体系构成一个有向语义网络 $G=(V, E)$ ，其中节点 V 为形根类型或形根实例，边 E 为语义关系（如 `determines`、`enables`、`constrains`、`inhibits`、`is_a_kind_of`）。

材料设计的任务可形式化为：给定目标性能集合 $T=\{t_1, t_2, \dots, t_m\}$ ，在形根语义网络中搜索一条从目标节点到可实现结构节点的可解释路径。

形构熵（MSE）在这一搜索过程中扮演引导角色：

低 MSE 区域：网络中存在密集的、已通过实验或理论验证的推理路径。系统沿这些路径快速遍历，生成经过充分验证的设计方案。

高 MSE 区域：网络中的推理路径稀疏或断裂，意味着当前知识不足以可靠地连接目标与结构。系统主动标记知识空白，并生成向外部验证系统（高保真仿真或实验）的查询请求。

这一“低熵快走、高熵问人”的策略，既保证了推理效率，又防止了系统在知识不足时强行给出不可靠的推荐——这是纯黑箱生成模型所不具备的“自知之明”[5][8]。

4.2 逆向设计的推理链构建

以下通过一个具体示例展示形根推理引擎的工作方式：

设计目标：具有高强度与高韧性的结构材料

推理过程：

1. **目标激活：**系统接收目标“高强度”与“高韧性”，激活 `Strength-Root` 与 `Toughness-Root`。
2. **冲突识别：**系统识别到 `Strength-Root` 与 `Toughness-Root` 之间存在 `inhibits` 关系——这是经典的“强度-韧性倒置”在形根层面的显式表达。系统在推理链中标记这一冲突。

3. **解耦路径搜索**：系统在形根网络中搜索能够缓解这一抑制关系的第三类形根。搜索发现 Grain-Refinement-Root（晶粒细化形根）能够通过 Hall-Petch 效应同时提升强度和韧性（在一定范围内）。
4. **约束检查**：Grain-Refinement-Root 通过 `constrained_by` 关系关联至 Manufacturability-Root 与 Service-Condition-Root，检查晶粒细化方案是否满足可制造性与服役条件约束。
5. **方案输出**：系统输出完整的推理链——从“强度+韧性”到“晶粒细化”到“具体工艺参数”到“可制造性/服役条件验证”——每一步都对应明确的物理机理。

推理链的可视化（有向无环图）：



这一推理链的每一个节点和每一条边都是人类可读、可审查、可追溯的。设计师不仅能得到“什么材料”，还能得到完整的“为什么是这个材料”的论证。

4.3 硬约束的零违背保障

在安全关键型材料应用中，约束满足不是“尽量满足”，而是**必须满足**。LAI 框架通过**逻辑级阻断机制**实现硬约束的零违背保障[5][8]：

当推理引擎尝试激活某个形根或沿某条边进行推理时，系统首先检查该路径是否违反任何已激活的 Constraint-Root（包括 Manufacturability-Root、Service-Condition-Root、Cost-Root、Sustainability-Root）。如果违反，该路径在推理阶段即被阻断，而非在生成之后才发现问题。

刘深在《有根的智能》第 7 章中系统阐述了“**价值公理库**”（Value Axiom Library）的分层公理系统与冲突消解机制[5]。在材料科学中，这一机制可被映射为“**物理公理库**”

——将热力学基本定律、晶体学对称性约束、量子力学基本原理等编码为不可违背的公理。任何违反这些公理的推理路径在生成阶段即被剪除。

这一机制与纯生成模型形成鲜明对比：

对比维度	生成模型	AI 形根推理
约束检查时机	生成之后（后处理过滤）	推理之中（逻辑级阻断）
违反约束的处理	丢弃或修补	根本不会产生违反约束的路径
保证程度	统计性（大部分满足）	确定性（全部满足）
效率	生成-验证-丢弃的循环浪费	一次推理即满足所有约束

这一差异在材料科学的实际工程应用中至关重要——当设计涉及数十个相互耦合的约束条件时，“生成后筛选”的策略可能导致极高的无效生成率，而“推理中阻断”的策略则能保证每一次推理结果都是工程上可行的。

5. 混合架构：LAI 形根网络+深度生成模型的协同

5.1 为什么需要混合架构？

LAI 的形根推理引擎与现有的深度生成模型各有优势，也各有局限：

维度	LAI 形根推理	深度生成模型
优势	可解释、可追溯、约束保证	高效率、高覆盖、擅长处理高维空间
局限	依赖形根知识库的完备性	黑箱、不可解释、无约束保证

二者不是替代关系，而是**互补关系**。最优的解决方案不是二选一，而是构建一个让二者各展所长的混合架构。

5.2 混合架构设计

我们提出的混合架构包含三个核心模块：

模块一：生成模块（深度生成模型）

- 功能：从目标性能空间高效采样候选材料/结构；
- 输入：目标性能描述（如目标带隙、目标应力-应变曲线、目标热导率）；
- 输出：大量候选材料/结构；
- 代表方法：条件扩散模型[2]、变分自编码器、生成对抗网络；
- 评价：效率优先——快速生成大量候选。

模块二：验证与解释模块（LAI 形根网络）

- **功能：**对候选材料/结构进行机理验证、约束检查与推理链生成；
- **输入：**生成模块输出的候选材料/结构；
- **输出：**通过验证的材料/结构+完整的可追溯推理链；
- **代表方法：**形根语义网络遍历、形构熵引导的图推理；
- **评价：**可信优先——只输出可解释、可验证的方案。

模块三：闭环迭代模块

- **功能：**将验证结果反馈至生成模块，引导下一轮生成；
- **机制：**验证模块标记的“失败原因”转化为生成模块的“条件约束”；
- **效果：**随着迭代进行，生成模块逐渐“学会”在满足约束的区域内采样。

5.3 工作流程

混合架构的典型工作流程如下：

Step 1: 用户输入目标性能



Step 2: 生成模块（扩散模型）快速采样 N 个候选材料/结构



Step 3: LAI 验证模块对每个候选进行：

- 物理一致性检查（是否符合已知物理规律？）
- 约束满足检查（是否满足可制造性等硬约束？）
- 机理追溯（能否生成完整的推理链？）



Step 4: 通过验证的候选 + 推理链输出给用户



Step 5: 未通过验证的候选 → 分析失败原因 → 反馈给生成模块



Step 6: 生成模块根据反馈调整采样分布 → 进入下一轮迭代

这一架构的核心创新在于：**生成模型负责“广”，LAI 负责“深”**——生成模型在广阔的设计空间中快速探索，LAI 则在关键节点上提供深度的机理洞察与可信验证。

6. 案例演示

6.1 案例一：极端条件下结构材料的逆向设计

场景：核反应堆包壳材料需要同时满足：抗辐照、抗腐蚀、高温强度、中子经济性。

传统方法的困境：这四个条件之间存在复杂的相互制约关系。纯生成模型可能生成一个在训练数据分布内“折中”的材料，但无法解释这个折中是如何达成的，也无法保证在极端工况下的可靠性。

LAI 推理过程：

1. 系统接收目标集合 $T = \{\text{抗辐照, 抗腐蚀, 高温强度, 中子经济性}\}$ 。
2. 激活 活
 $\text{Irradiation-Root, Corrosion-Root, High-Temperature-Strength-Root, Neutron-Economy-Root}$ 。
3. 系统识别到多组冲突关系：
 - 抗辐照需要细晶粒 → 细晶粒降低高温蠕变抗力；
 - 抗腐蚀需要特定合金元素 → 某些合金元素增加中子吸收截面；
 - 高温强度需要强化相 → 强化相可能成为辐照缺陷的陷阱。
4. 系统在形根网络中搜索能够同时缓解这些冲突的“枢纽形根”。搜索发现 **Oxide-Dispersion-Strengthened-Root**（氧化物弥散强化形根）是一个潜在的枢纽——纳米氧化物颗粒既能钉扎晶界抑制再结晶、捕获辐照缺陷，又不显著增加中子吸收截面。
5. 系统输出完整的推理链与权衡论证：

Target: Irradiation + Corrosion + High-Temp Strength + Neutron Economy

↓ (multiple conflicts detected)

Irradiation $\perp$ High-Temp (晶粒尺寸冲突)

Corrosion $\perp$ Neutron Economy (合金元素冲突)

↓ (resolution path found)

ODS-Steel-Root (氧化物弥散强化钢)

↓ (mechanisms)

- Nano-oxides pin grain boundaries → high-temp strength

- Nano-oxides trap irradiation defects → irradiation resistance

- Optimized Cr content → corrosion resistance

- Low neutron-absorbing elements → neutron economy

↓ (constrained_by)

Manufacturability-Root {ODS 钢的粉末冶金工艺窗口}

Service-Condition-Root {辐照-热-力耦合服役条件}

↓ (validates)

Feasible Design: ODS 钢 + 优化成分 + 工艺参数

关键价值：设计师不仅得到了一个材料方案，还得到了完整的权衡论证——为什么这个材料能同时满足四个看似矛盾的条件，以及在什么条件下这种权衡是有效的。

6.2 案例二：超材料的逆向设计

场景：一种具有负泊松比（auxetic）特性的力学超材料。

LAI 推理过程（参考[10]中的形根框架）：

1. 系统接收目标“负泊松比”。
2. 激活 Auxetic-Structure-Root。
3. 通过 is_enabled_by 关系关联至 Re-Entrant-Hinge-Root（内凹铰链是实现负泊松比的经典结构机制）。
4. 通过 determines 关系关联至 Geometric-Parameter-Root，推导出铰链角度 θ 、臂长比等关键几何参数的范围。
5. 通过 constrained_by 关系关联至 Manufacturability-Constraint-Root，检查推导出的几何参数是否满足可制造性约束（如最小特征尺寸、悬垂角度）。
6. 系统输出完整的推理链与设计方案。

关键价值：从“负泊松比”到“内凹铰链”到“几何参数”到“可制造性验证”的完整推理链，使得设计师能够理解每一个设计选择的物理依据。

7. 挑战与展望

7.1 知识工程瓶颈

挑战：构建完备的“材料形根”体系需要将材料科学数十年积累的物理知识系统地编码为可计算的形式。这是一项规模浩大的知识工程。

潜在路径：

- **从经典文献中提取：**从材料科学的经典教材、综述和里程碑论文中提取成熟的物理模型作为“元形根”种子。

- **社区协作模式:** 借鉴维基百科的模式, 建立开放的材料形根知识库, 由领域专家共同维护和扩展。
- **人机协作工具:** 利用大语言模型从海量文献中半自动提取候选形根和关系, 由专家审核验证。

刘深在文献[11]中进一步将 LAI 框架应用于极端条件下结构材料的可信设计, 提出了基于形根的图推理框架及其实现策略, 为材料形根知识库的构建提供了方法论参照。

7.2 计算复杂性挑战

挑战: 随着形根网络的扩展, 基于图遍历的推理可能面临组合爆炸问题。

规模估算: 初步估算表明, 在中等规模下 ($\sim 10^3$ 形根类型、 $\sim 10^4$ 关系边), 基于图遍历的精确推理在计算上是可行的。当网络扩展至 10^5 - 10^6 节点时, 需引入以下策略:

- **图神经网络 (GNN) 近似推理:** 将符号化的形根网络表示为图结构, 利用 GNN 的消息传递机制快速评估不同形根组合的潜在效果。
- **形构熵引导的剪枝:** 利用 MSE 指标对搜索空间进行动态剪枝, 聚焦于高价值区域。
- **分层推理:** 在形根网络的不同抽象层次上分别进行推理, 避免在细节层次上过早陷入组合爆炸。

7.3 实验验证的闭环

挑战: LAI 推理生成的材料设计方案最终需要经过实验验证。如何建立从“推理”到“实验”到“知识更新”的完整闭环?

潜在路径:

- **与自驱动实验室的集成:** 将 LAI 的推理结果直接传递给自动化实验平台, 实现“设计-合成-表征-测试-反馈”的闭环。
- **不确定性主动查询:** 当形构熵指示知识空白时, 系统主动请求特定实验来填补空白。
- **增量学习:** 实验验证的结果被编码为新的形根或对现有形根的修正, 实现知识库的持续演化。

刘深从范式视角评论了当前材料智能体研究中的“无根”困境, 指出其根本问题在于以 Token 为认知基元的 AI 范式无法为材料智能体提供稳定的语义基础[12]。LAI 框架通过形根的“有根”认知架构, 为自驱动实验室与智能体 AI 提供了可解释的决策依据。

8. 结论

本文系统地将表意 AI (LAI) 理论框架映射至材料科学领域, 提出了“材料形根”体系与基于形根的图推理框架, 主要贡献包括:

第一, 识别了当前深度生成模型驱动的材料 AI 设计的根本瓶颈——不可解释性、约束不可保证、物理知识利用不足, 并将这一问题置于“技术捕获”的宏观视角下进行分析。

第二，提出了“材料形根”的形式化定义 $M = (S, A, R)$ 与核心形根体系，将材料科学领域的构效关系与设计约束编码为可计算的结构化认知单元。

第三，设计了形构熵引导的逆向推理引擎，实现了从目标性能到可行材料的完全可追溯推理，并保证了硬约束的零违背。

第四，提出了 LAI 形根网络与深度生成模型协同的混合架构，实现了“高效采样”与“可信验证”的有机统一。

第五，通过核反应堆包壳材料与力学超材料两个案例，演示了 LAI 框架在材料设计中的具体工作方式与独特价值。

本文的核心主张是：材料 AI 的未来不在于训练更大的生成模型，而在于重构 AI 的认知架构——从“统计拟合”走向“机理推理”。表意 AI 的“形根”范式为此提供了可行的哲学基础与实现路径。当 AI 不仅能够“预测”材料性能，还能够“解释”为什么这样预测、“论证”为什么这样设计是合理的、“保证”所有工程约束都被满足时，材料科学才真正从“试错密集型”走向“机理驱动型”。

刘深提出文明原生智能（Civilization-Native Intelligence, CNI）的愿景，主张每一种文明都可以从其语言的结构特征中提取自身的“认知之根”[4][5][8]。本文的工作可被视为这一愿景在材料科学领域的一次具体实践——将材料科学的物理知识编码为“材料形根”，构建扎根于物理机理的 AI 认知架构。

我们呼吁材料科学界、AI 界与知识工程界的学者共同参与“材料形根”知识库的社区构建，将人类对材料科学的物理理解系统性地编码为可计算、可共享、可演化的认知基元。这不仅是材料 AI 的一次范式升级，更是整个材料信息学从“数据驱动”走向“机理驱动”的关键一步。

作者贡献（Author Contributions）

刘深（Liu Shen）是本文的唯一作者，完成了以下工作：

概念构建与理论框架：提出并系统阐述了表意 AI（LAI）理论在材料科学领域的映射框架，包括“材料形根”（Material Morpho-Root）的概念定义、形式化建模及其认知基础的论证；

方法论设计：设计了形构熵（MSE）引导的图推理引擎及 LAI-生成模型混合架构，完成了相关算法的理论建模与论证；

论文撰写：独立完成论文的全部撰写、修改及定稿工作；

文献分析：系统梳理了材料 AI 领域的现有方法及其局限性，完成了相关文献的综合分析；

案例设计与验证：设计了极端条件下结构材料与超材料的案例演示，并通过 OpenMorpho 原型系统完成了工程概念验证；

项目监督：负责研究方向的整体规划、研究进度的推进及最终成果的质量控制。

声明：本文为单一作者独立完成，无其他合作者。

利益冲突声明 (Conflict of Interest Statement)

本文作者为所引表意 AI (LAI) 理论 (文献[4][5][6][7][8][10][11][12]) 的原创提出者，同时也是 OpenMorpho 原型系统 (文献[9]) 的开发者之一。本文对表意 AI 理论及相关技术框架的阐述均基于上述已公开发表的学术论文、专著及开源代码。

作者声明，除上述学术贡献外，不存在任何可能影响本文研究客观性与公正性的其他利益冲突，包括但不限于：商业利益关系、个人财务关系、竞争性学术关系或其他非学术因素的干扰。

数据与代码可用性声明 (Data and Code Availability Statement)

本文是一篇理论构建与概念论证论文，提出的是“材料形根” (Material Morpho-Root) 框架及其在材料科学中的应用路径，而非报告特定实验数据或工程验证系统的完整实现。

本文所引用的工程概念验证原型 OpenMorpho 的源代码已在 GitHub 平台开源 (文献[9])，读者可通过该链接访问并运行相关演示。

本文核心理论的详细阐述已发表于 ChinaXiv 及其他预印本平台的论文中，读者可通过正文引用的相关文献获取更详尽的技术论证与理论基础。

伦理声明 (Ethical Statement)

本文所有引用文献均已通过正规学术渠道获取，并在参考文献中完整标注。本文不存在任何形式的学术不端行为，包括但不限于：抄袭、伪造数据、篡改结果、不当署名、一稿多投等。

本文所引用的表意 AI 理论及相关技术框架均为作者本人基于独立研究提出的原创性工作。作者在引用自身工作时，已在文中以符合学术规范的方式予以标注，避免了自我引用的不当膨胀。

预印本与投稿声明

本文是作者独立完成的新作，基于作者此前已发表的表意 AI (LAI) 理论系列工作（文献[4][5][6][7][8]）及其在超材料逆向设计（文献[10]）、极端条件下结构材料可信设计（文献[11]）等领域的应用研究，进一步将 LAI-形根理论框架系统性地提升至材料科学全领域的范式革命层面。

本文与文献[10]《面向超材料逆向设计的表意 AI 方法》在理论上具有连续性，但研究目标、核心概念（“材料形根” vs “超材料形根”）和论证范围均有本质区别：文献[10]聚焦于超材料这一特定领域的应用方法，而本文旨在为整个材料科学的 AI 范式提出从“数据拟合”到“机理驱动”的革命性转型路径。两篇论文为互补关系，而非同一工作的不同版本。

本文不存在一稿多投行为。如有后续正式发表，将遵循学术期刊的相关投稿规范。

参考文献

- [1] Xiao, C., Liu, M., Yao, K., Zhang, Y., Zhang, M., Yan, M., Sun, Y., Liu, X., Cui, X., Fan, T., Zhao, C., Hua, W., Ying, Y., Zheng, Y., Zhang, D., Qiu, C.-W., & Zhou, H. (2025). Ultrabroadband and band-selective thermal meta-emitters by machine learning. *Nature*, 643, 80 – 88. DOI:10.1038/s41586-025-09102-y.
- [2] Wang, H., Du, Z., Feng, F., Kang, Z., Tang, S., & Guo, X. (2024). DiffMat: Data-driven inverse design of energy-absorbing metamaterials using diffusion model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 432, 117440. DOI:10.1016/j.cma.2024.117440.
- [3] Lu, D., Malof, J. M., & Padilla, W. J. (2025). An Agentic Framework for Autonomous Metamaterial Modeling and Inverse Design. *ACS Photonics*, 12(11), 6071 – 6080. DOI:10.1021/acsphotonics.5c01514.
- [4] Liu S. 表意 AI vs. 表音 AI：AI 新范式与去殖民化宣言[J/OL]. *ChinaXiv*, 2025. DOI:10.12074/202503.00051.
- [5] Liu S. The Rooted Intelligence: The Paradigm Revolution of Logographic AI[M]. Monograph, 2026. Available at: <http://logographicai.com/Monograph.html>.
- [6] 刘深. 智能的基石革命：从数据仓库到认知土壤——表意 AI 理论下的新型数据库范式构建与实现路径 [J/OL]. *ChinaXiv*:T202601.00212, 2026. <https://chinaxiv.org/businessFile/T202601/T202601.00212v1/T202601.00212v1.pdf>.

[7] Liu S. From "Structural Adjudication" to "Cognitive Primitive": A Foundational Critique of WuJiangxing's Endogenous Security Paradigm. ChinaXiv. 2026-7-12. T202607.00227.

<https://chinaxiv.org/businessFile/T202607/T202607.00227v1/T202607.00227v1.pdf>

[8] 刘深. 对抗模型篡改与语义攻击: 基于汉语“形根”的内生安全范式[J/OL]. PSSXiv, 2026.

<https://zsyyb.cn/onlinePreview/18382f27-d1ab-4b54-aa7e-4e4176ef8a91>

[9] WindSeaAI. OpenMorpho: Logographic AI Morpho-Root Data Structure and Relational Reasoning Prototype[CP/OL]. GitHub repository, 2026.

<https://github.com/WindSeaAI/OpenMorpho>.

[10] 刘深. 面向超材料逆向设计的表意 AI 方法: 基于形根的图推理框架与可信生成路径 (Logographic AI for Inverse Design of Metamaterials: A Morpho-Root Based Graph-Reasoning Framework and Trustworthy Generation Pathway)[J/OL]. ChinaXiv:T202607.00388, 2026.

<https://chinaxiv.org/businessFile/T202607/T202607.00388v1/T202607.00388v1.pdf>

[11] Liu S. Logographic AI for Trustworthy Design of Structural Materials under Extreme Conditions: A Morpho-Root Based Graph-Reasoning Framework with Implementation Strategy[J/OL]. ChinaXiv:T202606.00663, 2026.

<https://chinaxiv.org/businessFile/T202606/T202606.00663v1/T202606.00663v1.pdf>.

[12] 刘深. 材料智能体的“无根”困境与表意 AI 的“有根”进路: 张统一院士团队综述的范式视角评论 [J/OL]. ChinaXiv:T202606.00741, 2026.

<https://chinaxiv.org/businessFile/T202606/T202606.00741v1/T202606.00741v1.pdf>.

[13] Yu H., Liu Z., Hou R. and Zhang Z. AI-driven approaches in electromagnetic metamaterials design and application: a review, EPJ Appl. Metamat., 12 (2025) 7.

<https://doi.org/10.1051/epjam/2025006>

作者简介

刘深 (LIU SHEN), 风海 (深圳) 人工智能技术开发有限公司首席科学家; 1991 年毕业于中国社会科学院研究生院, 硕士学位; 表意 AI 理论提出者。

个人 ORCID: 0009-0002-5919-3786

公司官网: www.logographicai.com

邮箱: liushen@fenghai.ac.cn