

# 材料行业 AI 赋能仿 真白皮书

AI 融合多尺度模拟与智能制造，构建全链条智能引擎

蓝图科技计算技术研究中心

蓝皮书广州智能技术研究有限公司 | 广州市天河区高科路 32, 34 号 B1

# 目录

一、引言与行业范畴 .....	1
二、政策背景与战略导向 .....	3
三、材料行业关键技术难点 .....	5
3.1 材料研发领域 .....	5
3.2 特种金属材料领域 .....	6
3.3 无机非金属材料领域 .....	7
3.4 高分子材料领域 .....	8
3.5 复合材料领域 .....	9
3.6 材料应用与服役领域 .....	10
四、AI 赋能解决方案 .....	11
五、系统级融合趋势 .....	14
六、未来展望 .....	15
6.1 技术趋势 .....	15
6.2 产业价值 .....	16
结语 .....	16

## 一、引言与行业范畴

材料行业是国民经济的基础性、先导性产业，是高端装备、新能源、电子信息、生物医药等战略领域发展的“工业粮食”。材料的性能直接决定下游产品的质量、寿命与竞争力，材料技术的突破往往引领着新一轮产业变革。

根据国家《“十四五”原材料工业发展规划》《新材料产业发展指南》《关于推动新材料产业高质量发展的指导意见》，材料行业涵盖以下核心领域：

领域	细分方向	战略定位
金属材料	钢铁、铝合金、钛合金、高温合金、稀有金属	基础工业支柱
无机非金属材料	陶瓷、玻璃、水泥、碳材料、耐火材料	关键基础材料
高分子材料	塑料、橡胶、纤维、胶粘剂、功能高分子	轻量化核心材料
复合材料	碳纤维复合材料、陶瓷基复合材料、金属基复合材料	战略性新兴材料

## 二、政策背景与战略导向

政策文件	发布机构	核心内容	AI 仿真战略导向
《“十四五”原材料工业发展规划》	工信部	推动原材料工业高端化、绿色化、智能化发展	鼓励数字孪生、智能控制技术在材料制备中的应用
《新材料产业发展指南》	工信部等四部门	突破一批关键战略材料，提升产业创新能力	支持 AI 赋能材料设计、工艺优化、服役评价
《关于推动新材料产业高质量发展的指导意见》	工信部	加快新材料研发、生产、应用全链条协同	推动材料基因工程与 AI 深度融合
《原材料工业数字化转型工作方案（2024—2026 年）》	工信部等九部门	打造一批数字化转型标杆场景	支持工艺仿真、质量预测、能效优化
《关于“人工智能+”行动（2024—2026）》	工信部	打造“人工智能+”标杆场景	明确 AI 与材料研发、制造深度融合
《工业重点	国家发改	明确钢铁、有色、建	为能效优化仿真提

领域能效标杆水平和基准水平》	委	材等重点领域能效标杆	供目标基准
----------------	---	------------	-------

### 三、材料行业关键技术难点

#### 3.1 材料研发领域

技术难点	具体表现
研发周期长	传统“试错式”研发模式周期 10-20 年，新型材料成分-工艺-组织-性能关系复杂
实验成本高	高温合金、碳纤维等高端材料制备实验成本高昂，一次试错损失巨大
多尺度关联难	从原子/分子尺度到宏观尺度的跨尺度关联建模困难，微观机理与宏观性能难以贯通
数据孤岛	材料数据分散于企业、高校、科研院所，缺乏统一的材料数据库

### 3.2 特种金属材料领域

技术难点	具体表现
冶炼过程控制难	电弧炉/转炉熔池温度场、流场复杂，成分均匀性控制难
连铸坯质量波动	中心偏析、裂纹倾向难以预测，探伤合格率波动大
轧制组织演化复杂	再结晶、晶粒长大过程受多因素耦合，组织预测精度低
热处理变形大	淬火、回火过程热应力、组织应力耦合，变形控制难

### 3.3 无机非金属材料领域

技术难点	具体表现
陶瓷烧结致密化难	烧结过程温度场、应力场耦合，产品密度均匀性差
玻璃成型缺陷多	气泡、条纹等缺陷在线检测难，光学均匀性难以保证
水泥煅烧能耗高	回转窑温度场-化学反应耦合复杂，能耗优化空间有限
碳纤维制备工艺敏感	预氧化、碳化过程工艺窗口窄，缺陷率高

### 3.4 高分子材料领域

技术难点	具体表现
聚合反应控制难	分子量分布、转化率受温度、压力、催化剂多因素影响
共混改性性能预测难	相形态与性能关系复杂，配方开发依赖大量实验
注塑成型翘曲变形大	充模-保压-冷却过程流-热耦合，变形控制难
老化寿命预测难	光、热、氧等多因素耦合，寿命预测精度低

### 3.5 复合材料领域

技术难点	具体表现
铺层设计优化难	各向异性、层间性能复杂，力学性能预测精度低
固化工艺窗口窄	热压罐成型过程温度、压力、真空度耦合，孔隙率控制难
界面结合强度低	纤维-基体界面结合质量受工艺影响大，失效风险高
无损检测效率低	分层、孔隙等内部缺陷检测依赖人工判读，效率低

### 3.6 材料应用与服役领域

技术难点	具体表现
疲劳寿命预测难	载荷谱、微观结构、环境多因素耦合，寿命预测精度低
腐蚀/氧化风险高	高温、腐蚀环境下材料退化机理复杂，服役安全风险大
失效分析耗时长	多因素耦合失效，根因定位依赖专家经验
回收利用率低	材料性能退化机制不清，再生材料性能难以保证

## 四、AI 赋能解决方案

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
材料研发领域		
研发周期长	成分-性能预测模型，基于高通量计算数据快速筛选最优成分区间	研发周期缩短 50%—70%，实验次数减少 80%
实验成本高	主动学习指导实验设计，智能推荐最有价值的实验方案	实验成本降低 60%，信息获取效率提升
多尺度关联难	跨尺度建模框架，整合分子模拟、相场模拟与宏观性能预测	微观机理与宏观性能贯通，预测精度提升
数据孤岛	材料知识图谱，整合文献、专利、实验数据，构建统一材料数据库	数据复用率提升，研发知识沉淀
特种金属材料领域		
冶炼过程控制难	电弧炉/转炉熔池流场-温度场耦合代理模型，实时优化供氧、造渣	能耗降低 5%—10%，金属收得率提升 1%—3%
连铸坯质量波动	连铸过程热-力耦合仿真，预测中心偏析、裂纹倾向	缺陷率降低 30%，探伤合格率提升
轧制组织演化复杂	轧制过程组织演化代理模型，预测再结晶、晶粒尺寸	产品性能稳定性提升，一次合格率提高 5%—8%

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
热处理变形大	淬火-回火过程温度场-应力场耦合仿真	变形量降低 40%，硬度均匀性提升
无机非金属材料领域		
陶瓷烧结致密化难	烧结过程致密化-晶粒生长代理模型，优化升温曲线	烧结周期缩短 20%，产品密度均匀性提升
玻璃成型缺陷多	玻璃熔制-成型过程热-流耦合仿真	气泡缺陷降低 50%，光学均匀性提升
水泥煅烧能耗高	回转窑温度场-化学反应耦合代理模型	能耗降低 8%-12%，产品质量稳定性提升
碳纤维制备工艺敏感	预氧化-碳化过程热-化学耦合仿真	碳化收率提升 5%，缺陷率降低 30%
高分子材料领域		
聚合反应控制难	聚合动力学代理模型，预测分子量分布、转化率	反应时间缩短 20%，批次稳定性提升
共混改性性能预测难	共混物相形态-性能代理模型	性能预测精度 >90%，配方开发周期缩短 50%
注塑成型翘曲变形大	充模-保压-冷却过程流-热耦合仿真	翘曲变形降低 30%，成型周期缩短 15%
老化寿命预测难	光-热-氧多因素耦合老化模型	寿命预测精度 >85%，质保成本降低
复合材料领域		
铺层设计优化难	复合材料宏观-细观力学代理模型，预测刚度、强度	减重 10%-20%，设计周期缩短 60%

技术难点	AI 赋能仿真解决方案	核心价值
固化工艺窗口窄	热压罐/热压机成型过程热-流-固化耦合仿真	孔隙率降低 50%，残余应力减小
界面结合强度低	界面结合强度-工艺参数关联模型	界面失效风险降低，疲劳寿命提升
无损检测效率低	超声/热成像 AI 识别，自动检测分层、孔隙缺陷	检测效率提升 3 倍，检出率 > 95%
材料应用与服役领域		
疲劳寿命预测难	载荷谱-微观结构-疲劳寿命代理模型	寿命预测精度 > 85%，可靠性评估更准确
腐蚀/氧化风险高	环境-材料耦合腐蚀动力学模型	服役安全预警，维护周期优化
失效分析耗时长	失效案例知识图谱+推理引擎	失效定位时间从天级缩短至小时级
回收利用率低	材料性能退化模型+分选工艺优化	回收利用率提升 20%，再生材料性能提升

## 五、系统级融合趋势

融合方向	核心内涵	AI 赋能价值
材料基因工程	构建“成分-工艺-组织-性能”高通量计算与实验平台	新材料发现速度提升 10 倍，研发成本降低
研发-生产-应用一体化	打通材料设计、工艺开发、生产制造、服役评价数据链	研发周期缩短 50%，工艺稳定性提升
数字孪生工厂	物理工厂与虚拟工厂实时映射，实现工艺在线优化	能耗降低 5%-15%，质量波动减少
材料数据仓库联盟	企业-高校-科研机构共建共享材料数据	数据孤岛打破，研发效率提升
绿色低碳制造	碳足迹动态核算，工艺碳排放优化	单位产品碳排放降低 10%-20%

## 六、未来展望

### 6.1 技术趋势

技术方向	发展趋势	AI 仿真作用
材料基因组	从“试错”走向“理性设计”，实现按需设计	成分-工艺-组织-性能全链条建模，设计周期缩短
多尺度仿真	从原子尺度到宏观尺度贯通，实现跨尺度建模	代理模型加速各尺度仿真，精度与速度兼得
智能制造	从自动化走向智能化，实现工艺自优化	过程实时控制，质量在线预测，能耗动态优化
绿色循环	从线性经济走向循环经济	材料寿命预测，回收工艺优化，再生材料性能提升
数字孪生	从单设备走向全产线、全生命周期	虚实映射、实时交互、闭环优化

## 6.2 产业价值

AI 赋能解决方案正推动材料行业从“经验试错”向“理性设计”转型，核心价值体现在：

**研发提速** 新材料研发周期缩短 50%-70%，实验次数减少 80%

**提质增效** 产品一次合格率提升 5%-10%，工艺调试周期缩短 50%

**降本降耗** 制造成本降低 8%-15%，综合能耗降低 5%-12%

**可靠寿命** 寿命预测精度 >85%，服役安全风险降低

**绿色循环** 回收利用率提升 20%，碳排放降低 10%-20%

## 结语

材料行业正处于从“规模扩张”向“质量效益”转型的关键期。AI 赋能解决方案以宏观仿真与理性设计为核心，正在破解长期存在的研发周期长、工艺控制难、质量波动大、服役预测难等核心难题。

本白皮书系统梳理了材料研发、金属材料、无机非金属材料、高分子材料、复合材料、材料应用与服役六大领域的关键技术难点与 AI 赋能路径，展示了从单点应用到系统级融合的演进方向。随着材料基因工程、数字孪生、多尺度仿真等融合趋势深化，AI 将从辅助工具升级为材料行业不可或缺的“智能大脑”，为构建高效、绿色、智能的现代化材料工业体系提供核心支撑。