

材料行业 AI 赋能仿 真白皮书

AI 融合模拟计算与智能制造，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、生物医疗等战略领域发展的“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	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。