

Copyright reserved to EqualOcean Intelligence, August 2021



Part 1 全球新材料产业发展背景

Part 2 AI+材料科学发展概况

Part 3 AI+材料科学产业应用梳理

Part 4 AI+材料科学企业解析

Part 5 中国AI+材料科学产业发展痛点、趋势及展望



全球新材料产业持续扩张,差异化显著,产业重心逐渐向亚太区转移



- ◆ 全球新材料产业差异化显著,美国、欧洲和日本等国拥有成熟的新材料(Advanced materials)市场,多数产品占据全球市场的垄断地位,是 新材料产业主要的创新主体。其中,美国在新材料全领域位于领先地位;欧洲在复合材料、化工材料领域优势显著;日本在电子信息材料领域 领跑于世界;俄罗斯在航天航空材料等方面趋于领先地位;中国在前沿新材料等领域发展有一定优势。随着全球新材料产业巨头迅速扩张,新 材料产业链的中低端逐渐向亚太地区(如中国)转移。
- ◆ 2019年全球新材料产业规模达到2.23万亿美元,2020年仍保持10%左右增长。目前,全球范围内都在积极发展新材料,尤其是发达国家,新材 料已成为决定一国高端制造及国防安全的关键因素和国际竞争的重点领域。2019年全球新材料产值中,先进基础材料产值比重占49%,关键战 略材料产值占43%, 前沿新材料比重8%。

亿欧智库:全球新材料产业版图 欧盟 Europe 俄罗斯 Russia 化工材料、复合材料具有优势 金属材料、航天材料优势显著 《欧盟能源技术战略计划》、 《2030年前能源战略》 《能源2020战略》 《2030年前科学技术发展优 《欧洲2020战略》等 先方向》等 日本 Japan 电子信息材料世界领先 《第五期科学技术基本计划》、 《能源基本计划》 美国 USA 《元素战略研究》等 基于科技实力,全面领先 《能源材料网络计划》 韩国 Korea 《国家纳米技术计划》、

半导体材料具有优势

《新增长动力规划及发展战略》 《第四次科学技术基本计划》等

第一梯队 美国 占绝对优势 欧洲 日本 第二梯队 中国 韩国 高谏发展 俄罗斯 第三梯队 巴西 印度 奋力追赶

亿欧智库:全球新材料产业竞争格局

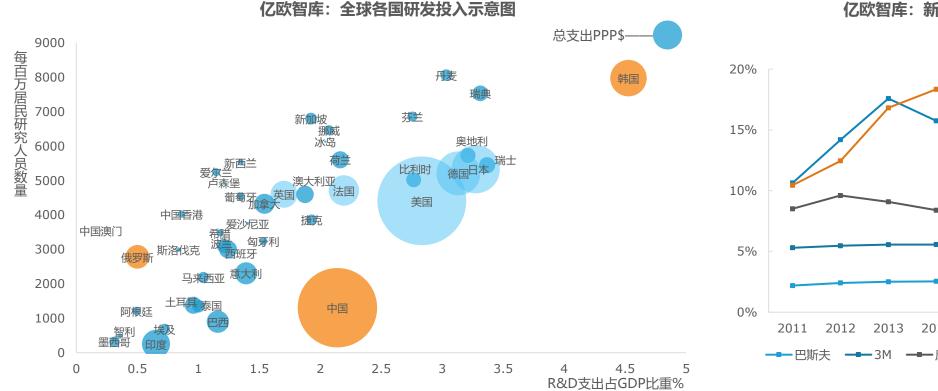
资料来源:公开资料整理、亿欧数据

《先进伙伴制造计划》等

国家和企业的研发投入是保持核心竞争力的关键,中国应持续加大投入



- ◆ 美国、日本等发达国家早期通过高强度的研发快速实现了高度成熟的工业化,日本1980年代研发强度已经超过2%,相关配套产业十分成熟,因此进一步的实体创新越发困难。但近20年来美国、日本的研发强度增长趋势十分缓慢,美国基本维持在2.6%-2.8%,日本维持在3.0%-3.5%,而韩国对基础科研的重视程度持续加深、科研投入不断加大。
- ◆ 研发是新材料企业保持核心竞争力的关键,新材料研发周期长、回报慢,因此自主研发的企业必须具备足够的抗风险能力。从全球化工及材料巨头,如BASF、3M、陶氏、杜邦等企业看,并不存在单一的新材料企业,这些企业均具有多元化的业务结构,并且多数企业最初都是通过石化或基础化工形成规模优势及稳定的盈利,从而有能力在新材料领域投入持续的研发,并且其新材料产品多是基于石化产品的延伸。而石化化工产品在二十世纪七八时代开始便趋于成熟。因此近四十年来,化学工业基本不再产生新学识,新物质、新品种的创造愈发困难。



资料来源:联合国教科文组织、公开资料整理、亿欧数据

亿欧智库:新材料代表企业研发营收占比%

5

2020

新材料产业是国民经济和制造业升级的基础,涉及国防、民生等各方面



- ◆ 根据国家标准《GB/T 37264-2018 新材料技术成熟度等级划分及定义》,新材料指新出现的具有优异性能和特殊功能的材料,及传统材料改进后性能明显提高或产生新功能的材料。国家统计局将新材料分为六大类,包括特种金属功能材料、高端金属结构材料、先进高分子材料、新型无机非金属材料、高性能复合材料和前沿新材料。工信部《新材料产业发展指南》中指出,新材料三大战略发展方向包括先进基础材料、关键战略材料、前沿新材料。作为工业发展的先导,新材料产业是基础性、支柱性产业,已成为国民经济发展、高端制造业升级的基石。
- ◆ 材料科学是经济发展的重要上游环节,是工业制造和国防发展的关键保障。从材料性能、材料属性、物理性质可以将材料进行归类,分别对应 到应用环节的各个下游领域。作为中国七大战略新兴产业之一,材料产业的发展对于中国经济建设具有重要意义。

亿欧智库:中国新材料产业战略示意图 先讲基础材料 关键战略材料 前沿新材料 智能仿生与超材料 高性能分离膜材料 高性能纤维材料 增材制造材料 先进钢铁材料 先进有色金属材料 新材料 稀土功能材料 半导体材料 石墨烯 液态金属 先进化工材料 先进建筑材料 战略方向 先进轻纺材料 新型能源材料 高温超导材料 新材料应用是制造业升 按性能分类 按材料属性分类 按物理性质分类 高强度材料 耐高温材料 结构材料 功能材料 金属材料 高分子有机材料 基础材料学 磁性材料 导电材料 级的驱动力 无机非金属材料 透光材料 应用领域 新能源 交通运输 国防军工 电子信息 建筑材料 生物医药

新材料产业上升为国家战略性新兴产业,产业规模逐年递增



- ◆ 新材料广泛应用于各领域,其研发和应用与技术和产业变革息息相关,新材料的发展为技术创新和产业升级注入推动力。为应对新材料产业在快速发展中遇到的核心竞争力不强、创新力不够、产业化缓慢、进口依赖度高、人才匮乏等问题,近十年中国政府制定了一系列新材料产业政策,积极推动新材料产业发展。尤其是在2009年中国明确将新材料产业列为战略性新兴产业,并予以重点支持的背景下,中国新材料产业的发展获得充分的政策保障。2012年工信部发布《新材料产业"十二五"发展规划》,为新材料产业制定明确的发展方向和任务后,新材料产业发展进一步提速。
- ◆ 中国发改委、工信部等联合发布的《中国新材料产业发展报告》指出,2010至2019年中国新材料产业蓬勃发展,市场规模由人民币7000亿元增长至人民币4.1万亿元,年复合增长率达23.9%。

亿欧智库:新材料关键产业政策

2015年5月•国务院

《"十三五"国家战略性新兴产业发展规划》

新材料产业被定为"国家战略性新兴产业"。 规划提出应提高新材料基础支撑能力,为材料下游应用领域的发展需求和制造业水平的 提升提供良好保障,到2020年重大关键材料 自给率达到70%以上。

2017年1月•工信部

《中国制造2025》

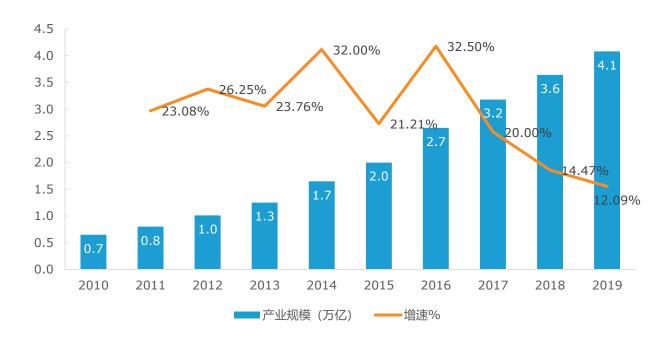
提出通过"三步走"实现制造强国的战略目标,到2025年初步实现中国从材料大国向材料强国的转变,并将新材料产业列为十大重点领域。

2016年12月·国务院

《新材料产业发展指南》

要求新材料保障能力大幅提升,到2020年, 先进基础材料总体实现稳定供给,关键战略 材料综合保障能力超过70%,前沿新材料取 得一批核心技术专利;新材料创新能力不断 提高;材料产业体系初步完善,新材料产业 规模化、集聚化发展态势基本形成。

亿欧智库: 2010-2019年中国新材料产业规模与增速

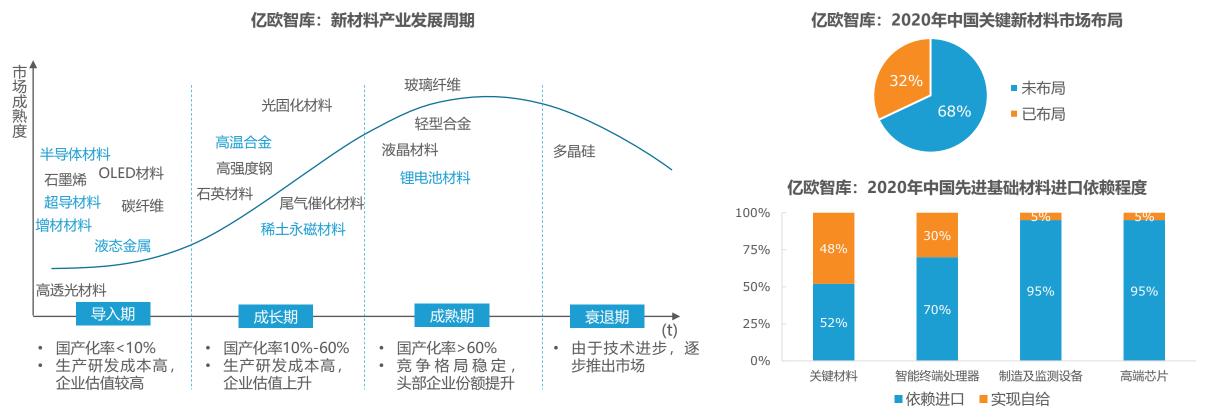


资料来源: 《中国新材料产业发展报告》、公开资料整理

中国新材料产业自主创新能力不强,关键技术仍受制于人



- ◆ 材料科学是整个国民经济的基础,服务范围极广,涉及从国防到民生的各个方面,而且需求迫切。目前我国很多关键核心材料核心竞争力不强,32%中国关键材料领域为市场空白,进口依赖现象严重,如高铁齿轮制动装置、电子产品存储芯片等。具体来讲,航空发动机、雷达、军工等方面所需的材料比较复杂,往往是多种元素或者多种化合物组成的复杂混合物,单纯依靠传统"试错式"的材料研发模式非常困难,而材料的研发及生产周期较长,导致新材料的研发无法跟上产品设计的速度,严重制约了我国科技的进步和工业的发展。
- ◆ 尽管中国新材料产业迅速发展跻身于全球材料大国行列,但存在材料支撑保障能力不强,产学研用衔接不紧密,产业集群效益弱,产业基础设施不健全等问题,具体表现为产品结构不合理、关键技术受制于人、国际市场竞争力不强。



资料来源:头豹研究院、公开资料整理、亿欧数据



以"大数据+AI"为标志的数据驱动,成为材料科学发展的第四范式



- ◆ 传统的材料研发模式,以实验和经验为主。 2011年美国提出"材料基因组计划"(Materials Genome Initiative, MGI),旨在解码材料的不同组成成分和性能的对应关系,通过结合计算工具平台、实验工具平台和数字化数据(数据库和信息学)平台,借助高通量计算、大数据、人工智能等技术,有效整合现有的材料研究力量和设备,将高通量实验工具的效能发挥最大,以缩短材料研发周期和研发成本至少50%。
- ◆ 2016年Nature发布了哈佛福德学院和普渡大学的研究成果,科研人员利用机器学习算法,用"失败"的实验数据预测了新材料合成,意味着机器学习将改变传统材料发现方式。通过计算机建模和人工智能(机器学习)技术,根据所需要的性能预测候选材料,从而加快新材料的研发速度和效率,降低研发成本。

亿欧智库: 材料科学演进历程

实验驱动~1600 Empirical science

- "试错式"材料研究方式,依赖于经验 和理论,需要经历反复实验。新材料研 发周期长、效率低。
- 基于表征实验,直接优化与筛选(类似穷尽),通过量变引起质变。

理论驱动~1950 Model-based theoretical science

- 随着各领域研究的深入,材料科学的理论基础逐渐成熟。
- 理论模型中热力学、分子动力学等应用, 为材料研究提供了众多帮助,提高了新 材料研究的效率。

计算驱动~2000 Computational science (simulations)

- 基于理论(密度泛函理论DFT、分子动力学MD等)计算模拟,预测有希望的 候选材料,缩小试验范围
- 以计算引领,通过实验验证。

数据驱动2001~ (Big) data driven science

- 基于大数据+人工智能(机器学习、深度学习、神经网络等)的材料信息学。
- 人工智能擅长建立数据间的关系,通过 计算机建模和机器学习,预测候选材料。

亿欧智库: MGI架构示意图

人类基因

人的基因排列决定了人体机能

测定、分析和储存人类基因组 图谱

高通量快速实验方法、生物信息 学等

Experimental Digital Tools Experimental Data Materials Innovation Infrastructure Next Gorentiform

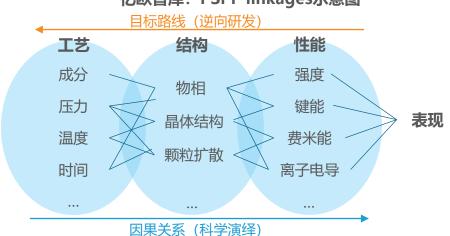
材料基因

材料显微组织及其中的原子排列决定了材料性能

寻找和建立材料从原子排列、到相的形成、到显 微组织形成、到材料宏观性能与使用寿命之间的 相互关系

材料理论计算与模拟、高通量快速实验方法、材 料性能数据库和信息学

亿欧智库: PSPP linkages示意图



资料来源:公开资料整理

10

美欧日等布局材料基因工程时间早,中国借鉴其模式投入资源紧随其后



- ◆ 美国宣布"材料基因组计划MGI"后,欧盟、日本、韩国和俄罗斯等也迅速启动了类似的研究计划,争取在新一轮材料革命性发展中抢占先机。
- ◆ 中国科学院和工程院在开展了广泛咨询和深入调研后,科技部于2015年启动了《材料基因工程关键技术与支撑平台重点专项实施方案》,开展 材料基因工程基础理论、关键技术与装备、验证性示范应用的研究,布局了示范性创新平台的建设。政府、高校和企业的积极参与和持续投入, 为我国材料基因工程的可持续发展奠定了良好的基础。

亿欧智库:全球代表性材料基因组计划

2011 美国 材料基因组计划 MGI

- 2011年,美国政府率先启动"材料基因组计划 MGI"。美国能源部(DOE)、国防部(国防部),国家科学基金会(NSF),国家标准与技术研究所(NIST),美国国家航空航天局(NASA)与科研机构和企业一起开发全新的材料创新体系,以研发面向国家安全、清洁能源、人类健康的新材料,并培养新一代材料研发团队。
- 为实现材料基因组计划的重要举措,美国政府主导建设了约45个材料基因组创新平台,每个平台政府投资0.7-1.2亿美元,建设周期约5-7年。
- 执行了一系列计划和部署加快材料研发, 缩短材料市场化过程中,并取得了一系列 关键成果典型材料的示范应用领域。

2011 欧盟 加速冶金计划 AccMet

2012 欧盟 2012-2022 冶金欧洲

- 2011年,欧盟启动关于合金设计和模拟的 "加速冶金计划 AccMet",旨在缩短合 金的研发周期,将原本研发周期为五年或 六年的传统方法压缩至一年内完成。
- 2012年欧洲科学基金会(ESF)推出"冶金欧洲复兴计划",其中列出了高通量合成与组合筛选技术及其应用,以加速高性能合金的发现和应用。此计划确定17个材料需求与50多个冶金研究主题,涉及清洁能源、绿色交通等,成功加速了高性能冶金及新一代材料的研发。
- 2014年,应该实施了"地平线计划2010" 项目,这是欧盟最大的科研和创新框架计划,横跨7个板块,涉及19个研究领域。总预算为770亿欧元,旨在整合欧盟国家,提高研究效率,促进科技创新。

2015 **日本** MI2I信息集成型物质材料研发计划

2014 **韩国** 制造业创新3.0战略

- 日本是亚洲最早进行材料基因工程研究的 国家之一,收集、处理和应用已建立的材料数据数干个,材料数据库和知识库适用 于玻璃、陶瓷、合金钢等各个领域,例如 日本国家金属研究所建立了许多关于材料 力学性能的数据库金属材料和复合材料。
- 韩国成立关于金属、化学和陶瓷材料的在 线数据库。
- 俄罗斯联邦纳米技术研发中心Ulnanotech, 通过引进美国Intermolecular公司完整的 高通量研发技术平台,较快地完成了其高 通量材料研发能力的建设。
- 印度甘地原子研究中心(IGCAR)建立了 在线材料数据库,提供机械材料的数据服 务性能、腐蚀性能等的热性能和光学性能 的评估。

2015 中国 材料基因工程关键技术与 支撑平台

- 2015年4月,上海大学联合中国科学院硅酸盐研究所、上海交通大学等7家科研院校,率先成立上海材料基因组工程研究院。
- 2015年5月,依托北京科技大学建设材料 基因工程北京市重点实验室。
- 2017年4月,中国科学院物理研究所牵头, 在北京怀柔科学城建设了材料基因工程平 台,总投资5.6亿元人民币。
- 2017年,深圳立项建设"材料基因组工程 大科学平台",总投资7.1亿元人民币。
- 2018年广东省设立"材料基因工程重点领域研发计划"。

高通量计算、高通量实验、材料数据库三方协同,是材料基因工程的核心



- ◆ 作为材料研究的新方法和新理念,材料基因工程是材料科学领域的一次革命与飞跃。材料基因工程是将传统材料研发过程倒转,从应用需求出发,逆向研发出符合相应功能需求的材料成分和结构,以显著缩短学术研究和工业生产之间的间隙,引发新材料领域科技创新模式的变革。材料基因工程主要由高通量实验、高通量计算和材料数据库三大要素组成,融合材料学、材料信息学、数学、物理、力学等学科,采用数值模拟、实验表征、数据库及数据挖掘、人工智能等技术与方法研究材料微/细观结构、综合性能及服役行为等。
- ◆ 高通量计算是实现"材料按需设计"的基础,可以有效缩小高通量实验的范围,为高通量实验提供科学依据;高通量实验不仅可以为高通量计算 提供大量的实验数据和验证,还可以丰富材料数据库;材料数据库可以为高通量计算提供基础数据,为高通量实验提供依据,同时高通量计算和 高通量实验所获得的材料数据亦可以加快材料数据库的建设。

亿欧智库: 材料基因工程架构

高通量实验

• 高通量计算主要是通过相图热力学、密度泛函理论、分子动力学、相场模拟等方法,利用高性能计算设备,运用已有材料数据,实现成分/组织/性能等的高效筛选,解决新材料"工艺-结构-性能-表现"之间的关系和工艺优化问题,从而加速新材料的研发进程,并显著降低材料研发成本。

扩散多元节方法 | 光谱成像方法

| 热导率测试方法

| ...

高通量计算

- 高通量实验技术具有快速制备、快速表征各类材料的能力。高通量实验技术为高通量计算和各种计算模拟工作提供计算目标。
- 此外,材料制备工艺仿真与服役行为模拟,需要大量材料本构关系与热物性参数。对于新材料和新工艺的涌现,需要及时提供大量的热物性参数与本构模型用于材料和工艺的计算机模拟。

DFT和MD方法

| CALPHAD方法

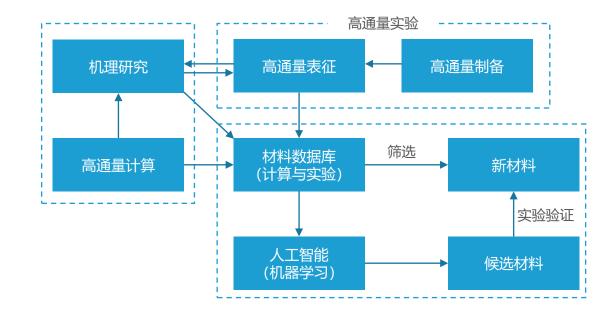
蒙特卡洛模拟方法

l ...

材料数据库

- 材料数据库是整合材料相关信息的有效手段,可实现跨尺度、跨领域、跨学科材料信息的共享与挖掘。
- 材料数据库可分为材料基础性能数据库和材料信息数据库: 前者的数据主要包括材料的晶体结构、热力学数据和物理性能等,为材料设计提供基础数据;后者则利用人工智能等技术,从文献、互联网等渠道提取和解读材料数据,包括材料生产工艺数据、性能数据等。

亿欧智库: 材料基因工程总体研发路线图



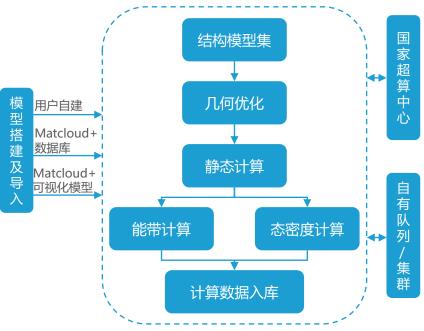
打造材料计算数据平台,以实现材料基因工程技术要素协同运行



- ◆ 数据、算力和算法是AI材料科学数据平台的三大技术核心。材料基因工程将材料信息学的理念扩展到整个材料科学、材料产业技术与工程链条,贯穿于从新材料发现到应用的全过程。数据方面,原始数据主要来自高通量实验及高通量计算,经过多轮数据清洗,最终获得可建模的数据,并储存于数据库中。算力方面,GPU、云计算等资源为"AI+材料科学"提供了重要的计算支撑。随着高性能计算设备及云计算等科技的发展,算力已逐渐不再成为制约其发展的决定性因素。
- ◆ 为满足材料计算批量化和自动化的需求,应通过计算机技术集成各种材料计算软件和代码,结合材料分析工具,建成高通量材料计算平台。目前国内外已经形成了多个高通量材料计算数据平台,代表性的有高通量材料发现计算流程平台 AFLOW、自动化交互式计算流程平台AiiDA 、第一性原理高通量计算平台Materials Informatics Platform、以及针对特定材料体系或特定性质计算平台Pylada和MPInterfaces等。中国科学院于2017年上线了高通量材料集成计算与数据管理平台MatCloud, 2019年迈高科技在此基础上推出MatCloud+。

终端Web apps

亿欧智库: Matcloud+材料云计算平台示意图



数据是AI材料科学基础,建立完善的数据标准、提升数据质量是关键



- ◆ 数据是进行材料科学研究的基础,而采用机器学习进行材料研究,更是需要庞大的数据量支持,材料信息数据库可以便捷地整合和利用现有严重碎片化的材料数据。材料数据库作为材料基因工程的核心技术之一,在材料基因工程领域研究中具有不可忽视的作用,同时也为研究中数据的获取提供了便捷。数据库在机器学习研究过程当中具有不同的应用方式。
- ◆ 然而,结构材料通常需要经过多道加工工序才能制造成部件。材料的最终性能(特别是对结构敏感的性能)通常与加工工艺过程的细节相关,也与微观组织结构的细节相关。要最有效使用材料的性能数据,必须详细记录材料的整个制造和加工过程、样品制备、测试方法和条件等,因此数据标准及质量极其重要。美国国家标准与技术研究院NIST正在开发若干面向制造系统技术和两个颠覆性制造领域(即机器人系统和增材制造)的测量标准。中国于2017年先于其他国家建立了中国材料与试验团体标准委员会(CSTM)材料基因工程领域委员会,并于2019年发布全球首个材料基因工程通则标准,为全面推行材料大数据模式奠定基础,确保未来"数据工厂"批量生产的材料数据符合可发现、可获取、可交互、可再利用,即FAIR原则。

亿欧智库: 全球主要材料数据库

数据库	国家	材料类型	数据库特点		
Materials Project	美国	锂电池、沸石、金属有机框架等	数据具有较高的准确性		
AFLOW	美国	金属材料等	最大的数据库		
OQMD	美国	钙钛矿材料等	用户可以下载完整的数据库		
NIST	美国	几乎涵盖所有材料体系	由百余个子库构成,具有严格评估标准		
MatNavi	日本	聚合物、陶瓷、合金、超导材料等	材料综合性数据库		
Atomly	中国	无机晶体材料等	包含17万+无机晶体材料的第一性原理计算结 果(电子结构信息:DOS+energy bands)		
MGED	中国	核材料、特种合金、生物医用材料、催化材料 和能源材料等	我国最大的材料基因工程数据库平台,拥有第 一原理在线计算引擎、原子势函数库等功能		

亿欧智库:数据FAIR原则

Findability 可发现

增强的元数据 (Metadata) 可以清楚显示 数据内容、数据源、数据入口等信息

A Accessibility 可访问

可以轻松访问数据

I Interoperability 可交互 建立标准以描述和引用数据

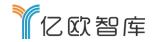
建立你准以抽还和引用致据, 使其能与其他应用或工作流交互操作

Reuse 可再用

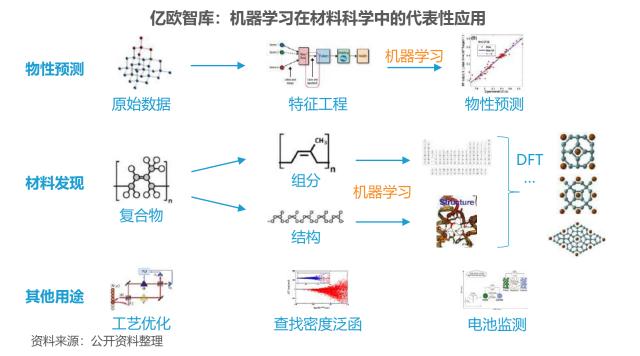
其他研究人员可以使用数据进行新发现

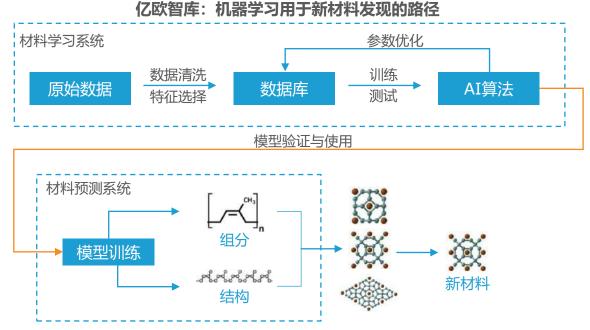
资料来源:公开资料整理、亿欧数据

机器学习已广泛应用于新材料发现、物性预测、机理研究等材料科学领域



- ◆ 人工智能技术已被广泛应用于生物、医疗、工业等各领域。2020年,Nature报道波兰科学院Bartosz Grzybowski等研究者宣布对化学软件 "Chematica"进行了改进,使其可以设计出复杂天然产物的全合成路线,该程序设计的路线与人工设计的路线几乎没有差别,并已通过化学版"图灵测试"。2021年,DeepMind宣布AplhaFold2成功预测98.5%的人类蛋白质结构,数据集中预测的所有氨基酸残基中,有58%达到可信水平,其中更有35.7%达到高置信度。而在此之前科学家花费数十年的努力,只覆盖了人类蛋白质序列中17%的氨基酸残基。
- ◆ 机器学习Machine Leaning凭借其强大的预测性能,已广泛应用于材料科学各领域,如(a)高效材料特性预测的代用模型开发。(b)适应性设计和主动学习的迭代框架。(c)使用变异自动编码器VAE和生成对抗网络GAN的生成性材料设计。(d)通过将实验设计算法与自动机器人平台结合,实现ML自主材料合成。(e)使用基于ML的力场来解决一系列的原子学材料模拟问题。(f)深度学习用于原子尺度材料成像数据的精确表征。(g)使用自然语言处理和ML从科学文本中自动提取科学知识和见解。机器学习不仅能够对材性能进行预测,同时挖掘边界条件等信息,也有助于推进对相关机理的认识。美国加州大学伯克利分校Gerbrand Ceder教授小组开发了将第一性原理计算与信息学(数据挖掘)相结合来预测晶体结构的方法。





以机器学习算法训练材料模型,提高"结构-性能"关系预测准确性和效率



- ◆ 使用人工智能技术的材料研发,能够在物性预测和新材料研发过程中,基于更强的数据分析能力,同时利用机器学习算法,自动优先选择最能提供实验合成和测试所需信息的化合物,简化材料科学家耗费在数据分析、大规模文献查阅和实验等工作上的时间。机器学习已被证明可以有效加速材料的研发进程,通过机器学习获得的材料模型及机理,进而用于材料发现和设计。材料模型建立在足够多且质量高的数据之上,建模步骤包括选择合适的算法,从训练数据中进行训练,进而做出准确的预测,机器学习算法主要可分为监督学习、无监督学习和深度学习等。对于AI材料科学企业来说核心壁垒是算法,其核心创新点在于建模的精度及产生新机能的能力。
- ◆ 近期深度学习已逐渐代替传统的机器学习并在众多领域中有着优异的表现,在学习模型中深度神经网络、卷积神经网络、循环或递归神经网络等是较常用的深度学习算法,深度神经网络的灵活性使模型理论上可以从数据最原始的表示中不断学习更高阶的特征。在一部分任务中将深度神经网络与传统回归方法相结合以得到更高精度的预测结果,如使用神经网络从材料结构中抽取高层特征,然后利用传统的回归模型根据高层特征对材料性能进行预测。但深度学习作为机器学习的一个新趋势,尚未得到很好的研究,许多缺陷仍不清楚。





制造业应考虑产业多重因素,人工智能可贯穿新材料相关企业价值链



- ◆ 制造业具备大量数据积累,是人工智能应用的蓝海。由于中国市场广大,技术与场景的深入融合仍有很大空间,端到端的产品覆盖和数据触达能力需要AI企业进一步落实。材料行业应用场景与AI深度融合的趋势下,人工智能将不再是单点替代的形式,而是真正融入到材料产业的研发、制造、供应链等各环节中,推动材料产业的研发、工艺、流程等核心业务的高效创新。
- ◆ 先进的制造技术使构建更复杂的多尺度特征成为可能,从而改变材料性能,这取决于几何特征、制造技术和工艺参数。制造技术、工艺参数及与之相关的可变性需要在设计材料时进一步研究,以确保安全和结构的可靠性。现代结构材料系统的设计是一个高度耦合的多物理多尺度问题,需要多种考虑因素,包括产品全生命周期管理、供应链管理和功能性能等。

亿欧智库: AI应用新材料企业价值链

材料研发 材料制造 Ø 按需设计,逆向研发 提升产品质量,降低不良率 缩短研发周期,提升研发效率 制造流程工艺优化 降低研发总成本 隆低研发风险 订单管理及自动化排产 材料应用 材料供应链 需求管理与预测 突破产品瓶颈 产品生命周期管理 仓储管理及物流服务 运输与网络设计管理 设计环保产品 设备与资产管理 减少材料浪费

亿欧智库: 自驱动材料研发实验室示意图

基于既定性能

假设

- 选择可行方案
- · 数据库中搜索候选材料
- 预测符合标准的新材料
- 计划下一实验或合成路径

数据获取及处理

- 优化高通量实验
- 加速仿真模拟
- 计算方法优化
- 机器辅助机制及数据管理

知识提取

闭环

- 发现结构(成分)-性能关系
- 反作用于数据库
- 无监督模式探索
- 数据利用最大化

数据分析

- 利用表征数据
- 特征鉴别
- 图像分析
- 加强统计分析

资料来源:深圳市人工智能产业协会、公开资料整理、亿欧智库

材料基因工程是打破新材料概念与商业化之间瓶颈的有效手段



- ◆ 材料基因组是集基础研究、共性技术、工业放大技术和产品集成技术为一体的综合性技术,是对材料发现、开发、生产、应用等阶段的全过程加速,是打破新材料研究与市场化之间瓶颈、加速新材料产业化的有效手段。通过9大要素协同建设,新数据、数据共享、数据分析工具、先进建模能力、有效的协作能力、通用化标准方法将成为未来新材料设计、低成本高效率制造的重要基础。此外,建立在对制造工艺和材料性能深入了解下的产品生命周期评估,将使资源利用率、工艺效率、产品的环境性能大幅提升。
- ◆ 美国通用电气GE基于原始合金GTD222开发的燃气涡轮机用GTD262高温合金,从设计和开发的概念到生产仅4年时间,研发经费是之前同类合金的研发成本约1/5。通过将计算热力学相稳定性的预测与GE内部的材料性能模型和数据库的整合,考虑到了诸多如可铸性、可焊性和抗氧化等因素,从未在设计GTD262成分时一次到位。

亿欧智库: NASA2040新材料制造能力愿景

现实能力

材料设计和工程设计分解 产品每一步发展和生命周期不连续 工具、知识体系和方法理论属于特定领域 材料数据源于测试曲线或经验值 产品鉴定依靠物理测试方法

未来能力

工程设计和材料设计一体化 产品每一步发展和生命周期无缝连接 工具、知识体系和方法理论是具有实用性的共同体 材料数据是通过模拟计算获得的特定环境下的实际值 产品鉴定主要依靠模拟测试方法

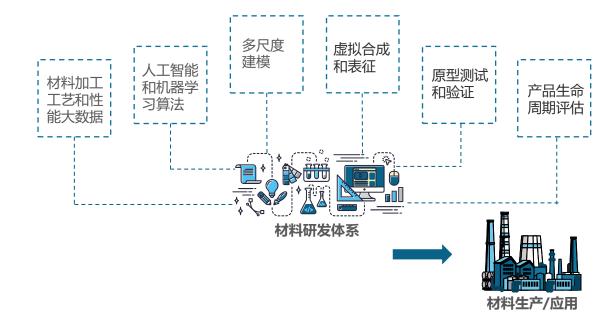
亿欧智库: NASA材料科学和工程应用链条协同发展9大要素



- 2040 1. 计算模型和理论方法
 - 2. 多尺度测试表征工具和方法
 - 3. 优化流程和优化方法
 - 4. 决策与不确定度量化及管理
 - 5. 验证与确认

- 6. 数据信息与可视化
- 7. 工作流程和组织框架
- 8. 教育培训
- 9. 计算基础设施

亿欧智库: 材料基因组模式下新材料产业

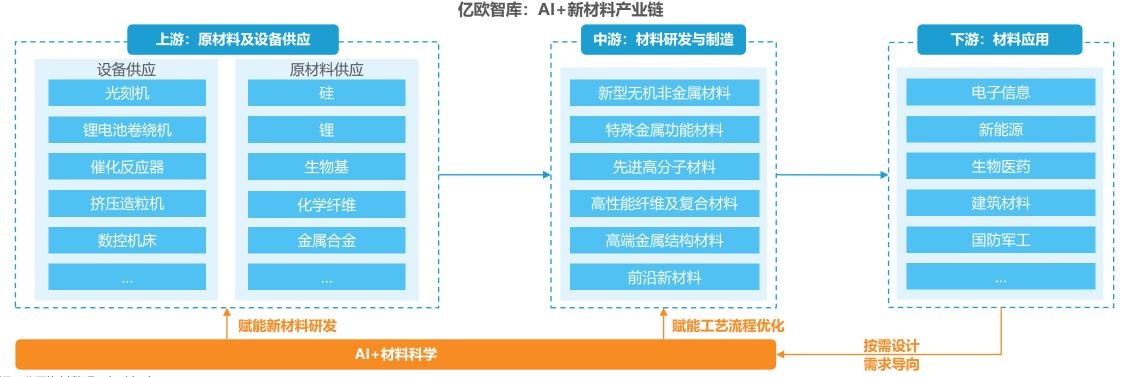


资料来源: NASA、公开资料整理

AI赋能新材料产业可打通研发到商业化的全链条,或将重塑新材料产业链



- ◆ 新材料产业周期长,情况复杂,打通材料科学和工程应用的链条需要多方协同发展。AI赋能材料科学,有助于打通新材料产业从研发到产业化的全链条。就目前而言,中国AI+新材料产业链尚未成熟。各大传统材料企业在面临研发周期长、研发成功率低以及研发费用高的困境下,都在努力尝试通过技术创新来加快新材料研发速度、提高成功率和降低成本,以能更好满足日益增长的材料需求,这为AI技术在新材料研发领域的应用带来了契机。
- ◆ 亿欧智库认为,随着前端技术的不断发展,新材料的发展进步对各领域的生产技术推动明显。"以需求为导向"的材料研发新模式下,下游市场对于材料的需求和性能,将倒逼材料企业进行研发模式改革,从而推动新材料产业进一步升级。对于材料创新需求大的领域,将率先进行研发模式的变革,如新能源、军工、生物制药等领域,以创新研发驱动企业利润增长。未来的材料企业甚至可能发生裂变,从现在既有材料设计、又有制造的垂直模式演变成材料设计产业+材料制造产业,从而具备更专业的分工,材料的研发和生产也将更有效率。



资料来源:公开资料整理、亿欧智库

材料基因工程(AI+材料科学)产业图谱





BOEING











数据应用服务





科研机构

























MICHELIN



C DASSAULT

SYSTEMES

BASF



Panasonic



Discovery Technologies



















AFLOW

Automatic - FLOW for Materials Discovery











NOMAD

NOVEL HATERIALS DISCOVER





I OQMD

The Open Quantum Materials Database



OTI



Ares Materials





计算建模软件

Noble.



数据基础服务















&CASTEP

Nanodcal



RESCU



















计算设备商

GÅMESS



Hewlett Packard







inspur



Lenovo











PURESTORAGE

HUAWEI



Extreme



D¢LLTechnologies









Enterprise









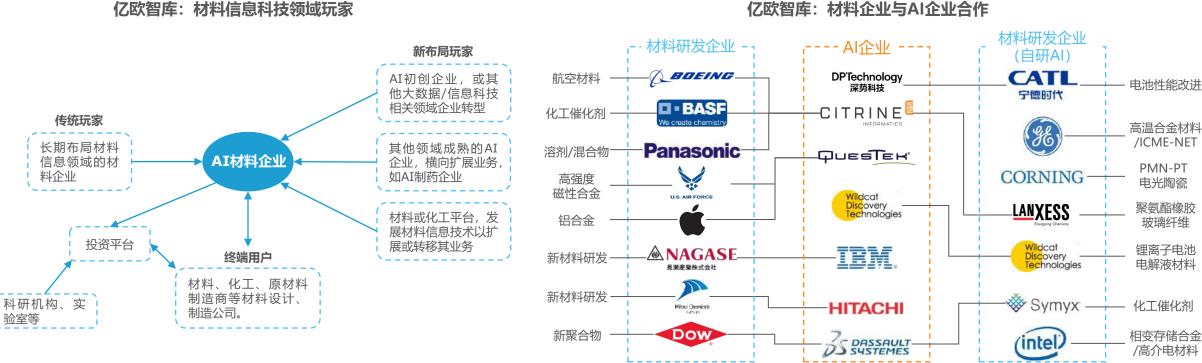




AI企业积极布局材料科学领域,材料企业应用人工智能已成趋势



- ◆ 面对新材料研发领域日趋激烈的同质化竞争,AI技术在材料研发过程中带来的诸多底层创新无疑也展现出了巨大的价值。伴随着新材料产业巨大的增长潜能和人工智能产业的快速发展,AI企业正加快布局新材料产业。2020年初创型AI企业中,布局制造业占比达23%,成为全行业最高。蓬勃发展的初创企业正在为AI材料科学行业带来全新的视角和分析工具,例如中国基于"多尺度物理模型+AI+高性能计算"新一代分子模拟平台的深势科技,基于跨尺度模拟的迈高科技等新兴公司,都在尝试利用人工智能技术解答材料科学中最本质的问题,从而赋能新材料的研发。
- ◆ 全球领先的材料企业正积极采用AI技术变革材料研发模式,缩短材料发现到应用的时间。材料研发制造企业选择自建内部开发平台,如英特尔和丰田等公司建立内部人工智能中心;或是与AI供应商或其他材料信息科技企业合作,如波音公司与Citrine Informatics合作开发数据驱动的研发项目,以研发航空新材料。目前国内活跃的材料企业与AI企业合作的案例相对较少,如果与AI企业合作的材料企业数量能过快速提升,将会使得整个行业变得非常活跃,届时将有更多的材料企业参与进来,从而使AI材料研发进入到快速增长期。

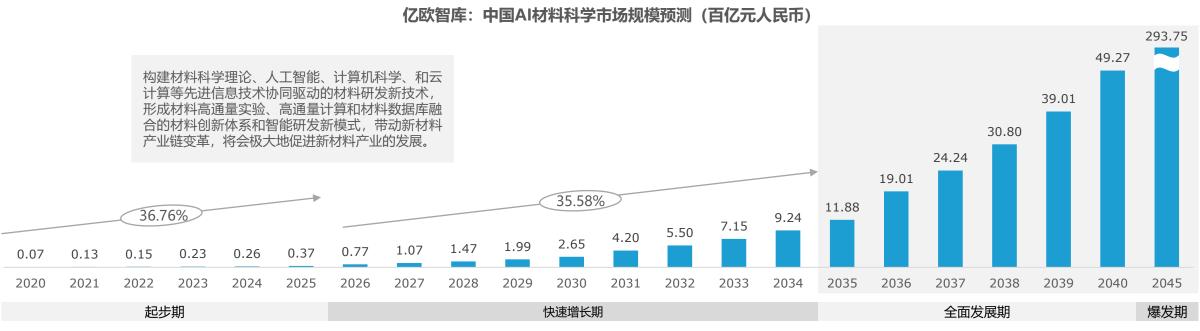


资料来源:公开资料整理、亿欧智库

中国新材料与AI产业发展需求,为AI材料科学市场提供巨大增长潜能



- ◆ 中国作为全球最大的材料制造及消费国之一,伴随着新一代信息技术、高端装备制造等领域的蓬勃发展和材料基础研究及技术创新的稳步推进,AI材料科学领域获得了发展动力。据工信部数据,2025年中国新材料产业将达到10万亿市场规模,复合增长率达13.5%,到2035年我国新材料产业的总体实力将跃居全球前列。其中AI技术对材料科学赋能的关注度明显上升,AI材料科学相关技术的迭代速度也明显加快。
- ◆ 目前AI材料科学市场仍处于发展初期,市场规模较为有限,但具有强劲的增长潜力。亿欧智库认为,2020年至2025年,中国AI材料科学CAGR 预计将达36.76%,材料企业将逐步采用材料基因组模式进行新材料研发,以替代传统成本高、时间长、风险大的"炒菜式"研发模式。长期来看,中国AI材料科学或达到万亿市场规模。



- 目前中国AI材料科学产业尚不完善,技术成熟度不高,产业成熟度低,商业落地程度普遍不足。
- 资本对AI材料科学关注度逐渐升温,各方资本持续注入。
- 2026年至2034年,中国AI材料科学产业将进入快速增长期。伴随着全球AI材料科学企业大幅增多,中国AI材料科学领域进入发展快车道。
- 随着AI技术的进步和材料数据库的逐步完善,AI技术所带来的产业变革 逐渐显现。材料企业不论自研或是与AI企业合作,应用AI技术已成趋势。
- 2035年后,中国AI材料科学产业将进入全面发展阶段,AI 等信息技术或全面渗透材料领域,将极大促进材料研发效率和质量,从而推动制造业产业升级。
- 2045年后,中国AI材料科学产业将进入爆发期,由技术的 量变引起的产业质变,或将引发新材料产业全面变革。

全球AI材料行业整体发展尚处早期,中国AI材料企业迎来新机遇



- ◆ 2020年,AI材料科学领域正受到全球资本的关注。对于AI技术在新材料研发中的真正作用也引发了一系列讨论。从供给端看,随着各国政府的不断投入、各种材料研发数据的不断积累以及计算机硬件设备与人工智能算法的改良,使得AI技术在材料科学领域的发展获得了良好的条件。而在需求端,传统材料研发企业在进行新材料研发时,长期存在的研发周期长、失败率高、成本高等痛点也给AI材料科学行业带来了巨大的增量。来自供需两端的驱动力也真正助推了这场资本热潮。互联网企业纷纷布局AI材料科学领域,腾讯于2018年投资Citrine Informatics,而百度则在2020年投资Kebotix。
- ◆ 除却全球市场的火热,AI材料科学在中国也迎来了发展良机,有望成为改变中国新材料产业的机遇。2018年国家不断释放利好信号,各项扶持制造业发展的政策相继出台,在创新环境下,AI材料企业正逐步探索自己的商业化之路。AI材料科学的难点在于底层知识图谱的构建、模型的训练、以及高性能计算设施提供的算力支撑。因此AI材料企业在前期需要大量的技术积累,在早期商业化进程方面稍显吃力。为解决这一问题,AI材料企业往往会先选择从新材料研发的某一细分领域切入再逐步扩大布局,目前多数企业选择的切入点是将视觉技术应用于材料检测。



亿欧智库:中	国部分AI材料企业融资情况
--------	---------------

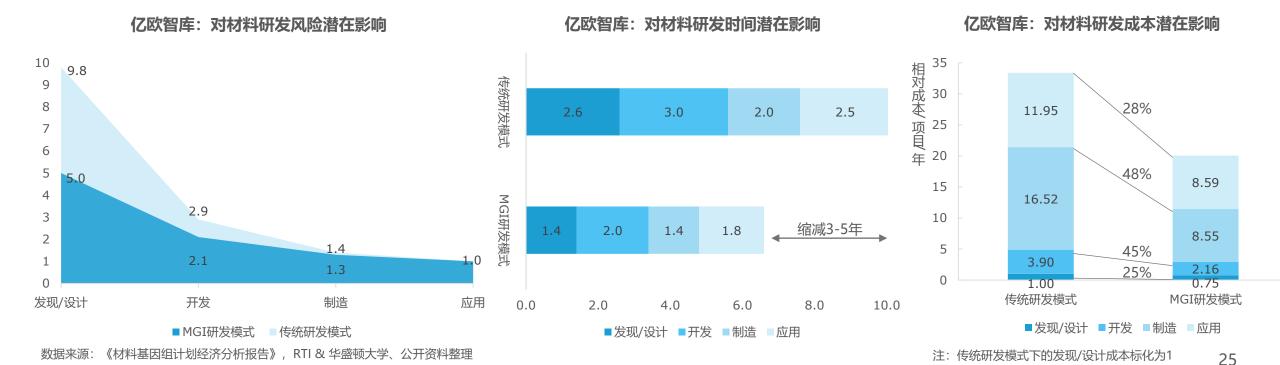
企业	成立时间	融资轮次	融资时间	融资金融	投资方
深势科技	2018-11	A轮 Pre-A 天使轮	2021-08 2021-03 2020-08	数千万美元 数千万元 数千万元	高瓴创投、经纬中国等 元璟资本、清流资本等 百度风投、盛景网联等
鸿之微科技	2014-09	股权融资 股权融资	2019-01 2016-03	未披露	嘉铭浩春、兴泓资产等 上海科投等
机数科技	2017-06	股权融资 股权融资 天使轮	2021-06 2019-11 2017-09	未披露	润通基金 合肥高投 赛富投资基金
迈高材云科技	2019-07	Pre-A	2020-08	未披露	武岳峰资本

24

材料基因组研发模式可降低企业研发风险、缩短研发时间、节约研发成本



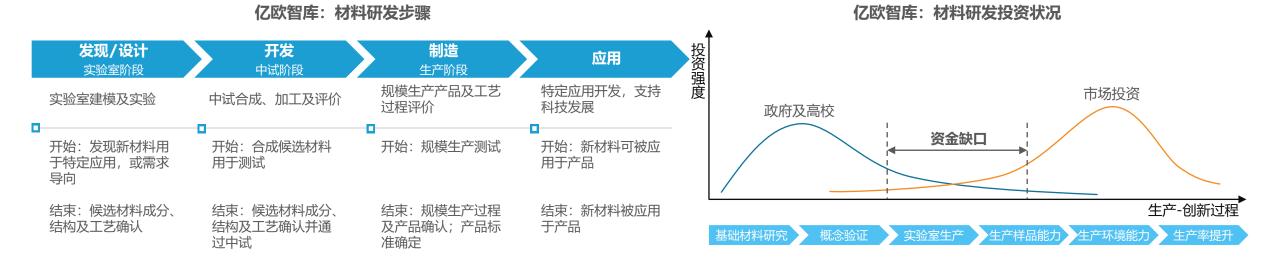
- ◆ 新材料研发周期长,产业化速度慢,投入成本高。新材料"发现/设计-开发-制造-应用"环节通常需要10-20年时间,较长的研发和生产周期为企业带来较高的摊销费用,同时也造成材料产业化速度缓慢,导致新材料企业难以快速盈利。此外,风险伴随着新材料研发生产周期的全过程,材料企业面临着研发项目无法实现应用和投资回报风险。因此降低研发费用,缩短研发周期,开发有差异性、竞争力、技术门槛高的材料是各大材料企业迫切需要解决的问题。通过采用材料基因组研发模式,在发现/设计阶段仅需5个项目同时进行研发,传统研发模式下则需要约9.8个;项目进入开发阶段后,有48%的机会被应用,传统模式下仅为35%;研发速度相较传统研发模式平均提速3至5年;在材料研发的四个阶段可显著降低25%-48%研发成本。
- ◆ 总体而言,材料基因组关键技术和基础设施的应用,可以降低新材料研发风险50%以上,缩短新材料从发现到工程化应用时间30%以上,降低研发成本1/3,产生经济效益约1230~2700亿美元/年,预计综合可提高研发效率达71%。除此之外,材料基因组研发模式还会为材料企业带来新的增长机会,如提升产品的质量、扩展产品供应、开拓新市场等。



基础科研和商业化生产间存在资金缺口,材料研发需要机制创新



- ◆ 材料研发过程中往往存在巨大资金缺口,需要通过机制创新。美国总统科技顾问委员和先进制造伙伴关系指导委员会一致认为,导致美国高科技制造业衰落的因素,在于将"发现"转换为"制造"的流程。创新是一个完整的链条,技术开发与技术转化是一个连续的过程,技术必须形成商业化应用或进入规模化生产,才能完成一次创新过程。科技到生产力中间存在巨大的缺口,如何将基础科研转化为商业化生产,是制造业解决创新问题必须跨过的一道坎。对于如何填平这个鸿沟,美国提出建立工业界和学术界合作的制造创新机构,通过"握手机制",政府负责前半棒,后半棒交接给工业界。 美国"先进制造伙伴"计划AMP,其最主要任务就是识别工业界、学术界和政府之间的合作机会。
- ◆ 在此基础上,美国国家制造业创新网络(NNMI)设想被提及并得以落实,并相继建立多个制造创新研究院。作为促进政府激活美国先进制造潜力的战略计划,其主要聚焦于"制造创新",即通过"制造创新"来降低成本、提升性能、稳定性等,让处于初始阶段的产品原型,成为更具市场竞争力的技术与产品。在运作机制上,该计划主要采取PPP模式,即政府,学术界,工业界三方合作,共同出资,共同致力于解决NNMI计划的目标问题,共同分享成果。而NNMI正是为应对私人资金无力解决资金缺口问题的对策。2019年美国发布的材料基因组计划人才培养报告认为,中国材料基因工程的发展理念和实施成效体现出了更广泛的产学研一体化的特点。

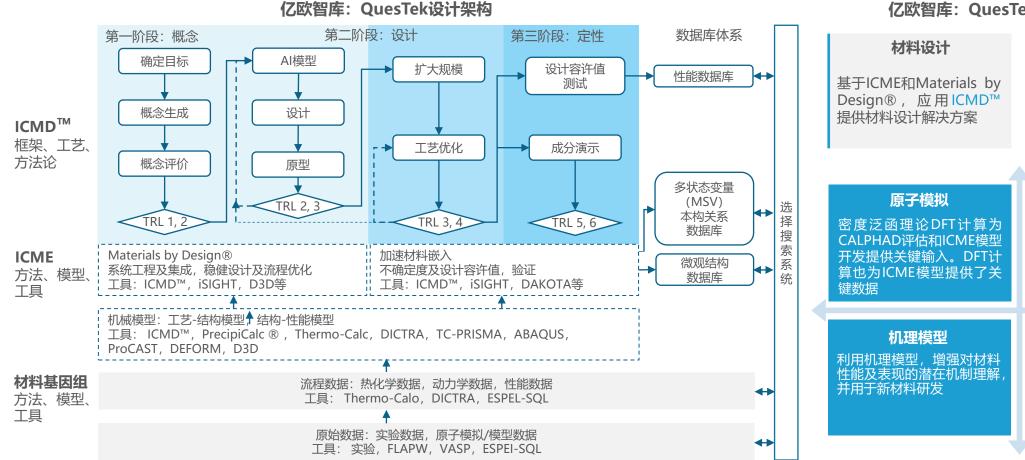




QuesTek提供从概念到实验室,再到最终产品验证和应用的完整服务



◆ 美国QuesTek Innovation致力于材料全流程生产工艺的ICME设计总成,通过对铸造、增材制造、热处理等关键工艺过程中材料组织-性能演变 进行建模和计算,开发出用于航空航天、超临界发电机组、海工结构等领域的高性能新材料。区别于传统试验试错方法,QuesTek的研发核心 是"大设计、小试验",通过多尺度计算和数据库辅助设计,将材料成熟度提升至5-6级,再付诸实验室或工程试验,大幅度提升研发效率。 QuesTek已成功应用ICME设计了Ferrium S53飞机着陆架用齿轮钢,并承担了美国空军、海军、能源部等材料研发项目。



亿欧智库: QuesTek材料解决方案

材料流程优化

通过使用工艺-结构和结构 -性能关系模型,改善热处 理等加工工艺,提升材料 性能、降低风险

计算热力学

使用热力学工具(如 CALPHAD),以工艺参数 及成分, 表现材料微观结构 的演讲

机器学习

机器学习模型被应用于各种 材料研究及ICME辅助材料 设计工作流,包括但不限于 贝叶斯推理UQ, NN, RF SISSO

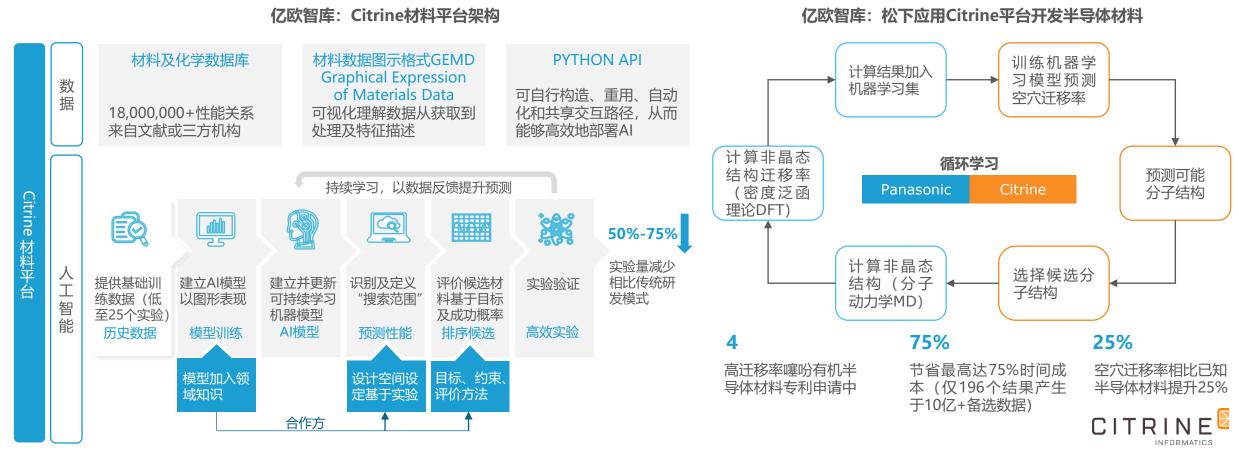
QUESTER

注: ICMD™、Materials by Design®为QuesTek注册商标,CALPHAD为Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry,ICME为集成计算材料工程

Citrine材料创新平台已被广泛商业应用,以大幅提升研发效率



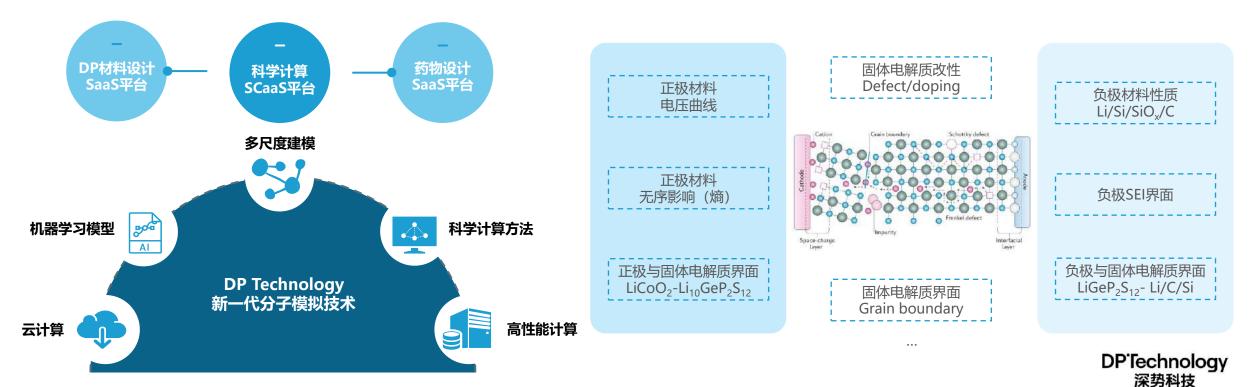
- ◆ 美国Citrine Informatics运行着全球最大的商业材料数据库平台。Citrine利用材料平台构建人工智能,以推动更高效的发现、优化、制造和应用材料。该平台通过各种来源吸纳结构性和非结构性材料数据,并利用人工智能引擎来识别数据中的重要信息,从而助力材料企业的研发与制造。Citrine服务于先进材料研发企业,如3M、BASF、Showa Denko、LANXESS、AGC等;科研机构,如加州大学伯克利分校;政府机构,如美国能源部等,涵盖汽车、航空、消费品、电池和电子等领域。
- ◆ Citrine Informatics在B轮融资中筹集了近2100万美元,由Prelude Ventures和Innovation共同牵头,公司估值约7,500万美元。



深势科技聚焦物理模型,并以AI+HPC赋能,加速驱动新材料研发



- ◆ 深势科技致力于以新一代分子模拟技术解决微观尺度工业设计难题。深势科技基于"多尺度物理模型+AI+高性能计算"新一代分子模拟平台,对合金材料、锂电池材料、半导体材料、储氢材料等新材料进行高效准确的性质计算与预测;材料性质预测包括相图计算、光谱计算、力学性质预测、热力学性质预测等。基于新一代分子模拟方法的DP材料设计平台,目前已经初步实现了材料的结构搜索、组分搜索等解决方案,并与国内头部材料厂商达成合作。
- ◆ 深势科技自主研发的高效分子模拟算法在保持量子力学精度准确性的基础上,将分子动力学的计算速度提升了五个数量级以上,同时所需算力和体系的原子数量呈线性依赖关系。



鸿之微科技填补中国材料仿真软件空白,建立材料设计平台



◆ 上海鸿之微科技是一家致力于材料设计与工艺仿真软件、集成电路工艺参数提取软件及集成电路器件设计软件的科技公司,同时提供高性能计算云平台等解决方案。依托其独特的"产学研"模式研发出诸多软件,鸿之微是国内目前唯一在TCAD商业领域有所布局的企业,弥补了中国在高科技软件普遍匮乏的窘境。鸿之微软件被广泛应用于半导体材料及器件设计、新兴电子材料设计、锂电材料设计、精细化工材料设计、合金金属材料设计等领域,以缩短材料研发时间,提升加工工艺水平。

亿欧智库: 鸿之微云架构示意图

Device Studio

从微观电子结构到宏观性能 预测的跨尺度材料设计平台 Nanodcal (量子运输性质) RESCU (大体系KS-DFT) MOMAP (有机发光性能)



结合AI与材料数据库的 材料筛选平台 FIRST材料机器学习虚 拟筛选平台

Data Studio

数据分析平台 Nsnoskif (紧束缚参数 拟合优化软件) HAPC (制程控制软件)

亿欧智库: 鸿之微材料数据库



分子材料

数据库







80,000,000+ 320,000+

无机材料 数据库

1,000,000+

有机材料 数据库 10.000+

锂电材料 数据 亿欧智库: Device Studio示意图

模型搭建

Device Studio能进行分子结构、晶体结构、纳米器件结构的建模与仿真。

软件平台

集成Nanodcal、RESCU、MOMAP、STEMS、TOPS、VASP、LAMMPS、Gaussian等软件。

机理模型

Device Studio可根据用户需求将输入文件传输给远程或本地进行计算。

机器学习

Device Studio可对 Nanodcal、RESCU、 MOMAP、STEMS等计 算结果进行数据可视化 现实与分析。

亿欧智库: FIRST材料筛选平台示意图

材料数据库内置有机小分子和 无机晶体材料数据库,支持分 子式、描述符、AI模型、相似 度、元素种类等多种检索方式。

AI模块支持SVM、LASSO等机器学习算法,并根据材料科学深度改进以匹配QSPR,虚拟筛选、物性预测等需求。

数据可视化模块支持散点图、 热力图等10余种方式,便于直 观观察、掌控数据。



106~107
Basic Filter 1
105~106
Basic Filter 2
103~104
Al Filter
Hits~102

统计分析模块将支持离群点检测,特征高亮,以及多种数据降维算法,包括但不限于PCA,2SOMAP,LLE等。



关注科研和产业、研究和应用的交叉点, 打破新材料产业各领域制约



◆ 材料研究中的许多现实挑战和机遇发生在传统学科之间的交叉点,以及基础研究和应用研究之间的交叉点。纯科学是由于接近应用研究而产生的。不同学科之间以及学术界、工业界和科研机构之间的协作和信息传递,大大提高了成功应对这些挑战和利用这些机遇的可能性。近十年来,中国新材料产业的发展无论在科研还是产业,都存在诸多问题。这些问题阻碍着中国从材料大国迈向材料强国,制约中国进一步推动应用技术创新和产业升级,亟待政府通过政策引导等手段予以解决。

产研结合



科研向产业转化率低(核心)

虽然国家已加大政策力度,促进科研成果向产业转化。但目前科研院校体制决定了研究人员重论文而非市场需求,研究项目不够专注和持续,科技成果转移转化的平台对企业开放度不够,技术供给和产业需求难以融合。相关转化机制仍不够健全,技术成果转化的社会化中介组织培育和发挥作用不够。此外,促进科技成果转化的金融、税收、财政等政策有待进一步优化。

产业应用与研发结合度不够

由于材料的研发与应用结合不够紧密、工程应用研究不足等问题,不仅导致面向 材料实际服役环境有针对性的研究缺失,还导致材料的质量工艺不稳定、性能数 据不完备、技术标准不配套、产品验证不充分,从而造成大量的新材料难以跨越 从研制到应用的"死亡之谷",有材不能用、有材不会用问题十分突出。

基础科研薄弱 (核心)

基础研究决定国家科技创新的深度和广度。中国对数学、信息科学、物理、材料等基础科研缺乏重视,使得其严重滞后于产业发展。基础科研能力不足严重制约了新材料产业可持续创新和发展。

材料数据量不足

材料数据积累量远远不足,已有的几个国家级数据库中的材料数据类目不够丰富,还处于建设初期。在"大数据"时代背景下,相比于其他领域数据量的积累速度,材料领域的数据量积累速度也较慢。

新材料产业研发能力不足(核心)

中国材料新技术开发的原始创新力不够,缺乏核心技术和知识产权,严重制约新材料产业的可持续发展。新材料企业作为创新主体的作用不明显,大多集中在产业链中低端环节,参与创新研发少、配套能力不强,缺乏核心竞争力。

研发投入不足

技术创新是国家和企业的核心竞争力,虽然中国在研发投入 逐年增长,科技创新、技术进步亦取得一定成效,但总体而 言研发投入依然不足。

资本关注不够

由于新材料产业投资回报周期长、投资风险高、新材料产业技术及理论门槛较高等原因,导致材料企业和资本投资意愿不高。相较5G、高端制造等热门新兴产业,其2020年融资总规模仅为1/5-1/2。

人才因素 (核心)

中国新材料产业发展中普遍存在高端人才短缺。尤其是AI材料科学需要信息技术学与材料科学等交叉学科的协同创新,这无疑增加了AI材料科学领域的创新门槛。企业一方面需要计算所需的材料信息学、计算化学、AI算法设计等背景的人才,另一方面也需要引入材料、化工等方面的人才。同时拥有算法和材料研发复合背景的人才更是市场上的稀缺资源。

科研

资料来源: 亿欧智库

夯实基础科研、推动产学研结合,服务"中国智造2025"国家战略



- ◆ 大力推广和应用材料基因工程先进技术,利用创新平台,促进材料基因工程关键技术和方法在材料研发周期内全链条的深度交叉融合、产学研用的高效协同创新,提升新材料和新工艺技术的研发、应用水平和效率,促进高端制造业和高新技术关键材料的发展,增强高端关键材料的自主保障能力。在材料研发与应用全链条推广应用材料基因工程的新理念和新技术,提高高端制造业关键材料研发、制造、应用的水平,提升战略前沿新材料的自主创新能力,是我国未来材料基因工程和"中国智造2025"国家战略发展的核心目标。
- ◆ 与美国和欧洲国家相比,亚洲国家,尤其是中国和韩国目前在材料研究方面的投资占其国内生产总值GDP的比例更大,发达国家和发展中国家 之间在现代经济驱动力(包括智能制造和材料科学等)各领域的激烈竞争将在未来10年持续增长。

科研

加强基础科研,如数学、物理等基础学科;基础数据库建设、表征设备技术;大力发展大科学装置。瞄准我国创新发展的关键制约,夯实基础研究和应用基础研究。科研院校、科学基金会和相关政府机构应加大对基础研究长期稳定支持力度,提供资金保障,并引导企业增加基础研究投入。

量子信息科学(Quantum Information Science)应用于材料科学,或将成为下一个发展方向并将为材料科学带来巨大进步。量子信息科学不仅包含量子计算,还包括存储、量子传感和通信技术,且已应用到了超导体、半导体、磁体以及二维材料和拓扑材料(Topological Materials)的研究中。中国应提前提前布局相关科学研究。

为了适应新时代发展,各高校应培养具备材料基因程相关基础的新一代科研人员。为适应未来行业转型的需求,大力培养兼具信息科技能力和材料科学背景的复合型人才。深化国际交流,包括鼓励相关学科、新材料产业的国际间人才交流、技术合作等。

产业

材料基因组计划需要科学家和工程师了解制造业实际问题,也要求国家部门和制造业专家参与科学计划的顶层设计,组织需求牵引的产、学、研融合的材料研发计划,建立科研机构、国家实验室和企业间更紧密的联系。从根本上改变科研、开发与生产脱节的局面,使材料基因组技术充分发挥出"材料加速器"效能。

新材料的制备工艺和生产设备是研发制造新材料的基础,掌握关键制备工艺和实现生产设备国产化是新材料产业自主可持续发展的重要基石。因此,应加大对生产工艺及设备的投入研发,打破工艺装备制约,提升装备配套能力。

政策应向产业倾斜,加大对新材料自主创新能力、成果转化能力、技术应用研究的支持,推动产业转型和自主创新。鼓励材料企业应用材料基因工程研发模式用于新材料研发,鼓励AI企业进入材料产业,不断积累材料数据,形成正循环。

国家战略

根据国家战略需求和发展现状,遴选出需要重点支持的材料门类,重视原始创新和颠覆性技术创新,加强前瞻基础研究与应用创新,部署相关研究计划和项目促进重点前沿新材料的发展,抢占未来先进材料竞争的制高点。

加大财税金融支持,包括发挥财政资金对新材料产业的支持,同时增强新材料产业对社会资本的吸引力,为新材料产业提供便利的融资环境。

国家需要建立支持工业界采用计算材料设计新技术的机制,促进产业数字化转型升级,并大力提倡以应用为背景的材料研究与开发。在开发重要实用材料的过程中大力促进材料设计方法和工具的发展。

资料来源: 亿欧智库

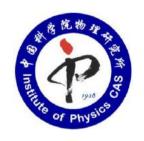
结语



- ◆ 未来已来,将至已至。我们始终坚信,人工智能终将融入现实,以科技赋能新材料产业转型升级,打造具有核心竞争力和原始创新力的新材料 研发体系,推动中国新材料产业高质量发展。
- ◆ 由于时间所限,本报告对于材料基因工程(AI+材料科学)应用的研究与讨论难免存在疏漏与偏差,敬请谅解。未来,亿欧智库将持续关注新材料领域,通过对于行业的深度观察,持续输出更多研究成果。欢迎专家学者、读者与我们交流,提供宝贵意见。
- ◆ 在此特别感谢材料科学姑苏实验室高级专家陈忻博士、中科院物理所特聘研究员刘淼博士、清湛人工智能研究院副院长杨磊博士、鸿之微科技 CEO王音博士、深势科技CEO孙伟杰等对本报告给予的支持,为报告撰写提出了宝贵的专业观点与建议。







DP'Technology 深势科技



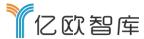


参考资料 Reference



- ◆About, J., & Council, T.. (2011). Materials Genome Initiative for Global Competitiveness.
- ◆Ceder, G., Morgan, D., Fischer, C., et al. (2006). Data-mining-driven quantum mechanics for the prediction of structure. Mrs Bulletin, 31(12), 981-985.
- ◆Jain, A., Hautier, G., Moore, C. J., et al. (2011). A high-throughput infrastructure for density functional theory calculations. Computational Materials Science, 50(8), 2295-2310.
- ◆JiazhenCai, XuanChu, KunXu, et al. Machine learning-driven new material discovery. Nanoscale Advances, 2.
- ◆Liu, X., Furrer, D., Kosters, J., & Holmes, J.. (2018). Vision 2040: A Roadmap for Integrated, Multiscale Modeling and Simulation of Materials and Systems.
- ◆Liu, Y., Zhao, T., Ju, W., & Shi, S.. (2017). Materials discovery and design using machine learning. Journal of Materiomics, 3(3).
- ◆MD Wilkinson, Dumontier, M., Aalbersberg, I. J., et al. (2016). The fair guiding principles for scientific data management and stewardship. Scientific Data, 3(160018 (2016)), 167-172.
- ◆Pilania, G. . (2021). Machine learning in materials science: from explainable predictions to autonomous design. Computational Materials Science, 193(8), 110360.
- ◆Raccuglia, P., Elbert, K. C., Adler, P., et al. (2016). Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments. Nature, 533(7601), 73-76.
- ◆Robertson I M., Schuh C A., Vetrano J S., et al (2011). Towards an integrated materials characterization toolbox. Journal of Materials Research, 26(11), 1341-1383.
- ◆Warren, J. A. . (2018). The materials genome initiative and artificial intelligence. MRS bulletin, 43(6), 452-457.
- ◆Zhao, J. C. . (2014). A perspective on the materials genome initiative. Chinese Journal of Nature.

团队介绍和版权声明



◆ 团队介绍:

亿欧智库(EqualOcean Intelligence)是亿欧EqualOcean旗下的研究与咨询机构。为全球企业和政府决策者提供行业研究、投资分析和创新咨询服务。亿欧智库对前沿领域保持着敏锐的洞察,具有独创的方法论和模型,服务能力和质量获得客户的广泛认可。

亿欧智库长期深耕科技、消费、大健康、汽车、产业互联网、金融、传媒、房产新居住等领域,旗下近100名分析师均毕业于名校,绝大多数具有丰富的从业经验;亿欧智库是中国极少数能同时生产中英文深度分析和专业报告的机构,分析师的研究成果和洞察经常被全球顶级媒体采访和引用。

以专业为本,借助亿欧网和亿欧国际网站的传播优势,亿欧智库的研究成果在影响力上往往数倍于同行。同时,亿欧EqualOcean内部拥有一个由数万名科技和产业高端专家构成的资源库,使亿欧智库的研究和咨询有强大支撑,更具洞察性和落地性。

◆报告作者:



秦志豪

亿欧智库 分析师 Email: qinzhihao@iyiou.com

◆报告审核:



刘欢

亿欧 EqualOcean 总监 Email: liuhuan@iyiou.com



王彬 博士

亿欧 EqualOcean 总裁 Email: wangbin@iyiou.com

团队介绍和版权声明



◆ 版权声明:

本报告所采用的数据均来自合规渠道,分析逻辑基于智库的专业理解,清晰准确地反映了作者的研究观点。本报告仅在相关法律许可的情况下发放,并仅为提供信息而发放,概不构成任何广告。在任何情况下,本报告中的信息或所表述的意见均不构成对任何人的投资建议。本报告的信息来源于已公开的资料,亿欧智库对该等信息的准确性、完整性或可靠性作尽可能的追求但不作任何保证。本报告所载的资料、意见及推测仅反映亿欧智库于发布本报告当日之前的判断,在不同时期,亿欧智库可发出与本报告所载资料、意见及推测不一致的报告。亿欧智库不保证本报告所含信息保持在最新状态。同时,亿欧智库对本报告所含信息可在不发出通知的情形下做出修改,读者可自行关注相应的更新或修改。

本报告版权归属于亿欧智库,欢迎因研究需要引用本报告内容,引用时需注明出处为"亿欧智库"。对于未注明来源的引用、盗用、篡改以及其他侵犯亿欧智库著作权的商业行为,亿欧智库将保留追究其法律责任的权利。

◆ 关于亿欧:

亿欧EqualOcean是一家专注科技+产业+投资的信息平台和智库;成立于2014年2月,总部位于北京,在上海、深圳、南京、纽约有分公司。亿欧EqualOcean立足中国、影响全球,用户/客户覆盖超过50个国家或地区。

亿欧EqualOcean旗下的产品和服务包括:信息平台亿欧网(iyiou.com)、亿欧国际站(EqualOcean.com),研究和咨询服务亿欧智库(EqualOcean Intelligence),产业和投融资数据产品亿欧数据(EqualOcean Data);行业垂直子公司亿欧大健康(EqualOcean Healthcare)和亿欧汽车(EqualOcean Auto)等。

亿欧服务



◆ 基于自身的研究和咨询能力,同时借助亿欧网和亿欧国际网站的传播优势;亿欧EqualOcean为创业公司、大型企业、政府机构、机构投资者等客户类型提供有针对性的服务。

◆ 创业公司

亿欧EqualOcean旗下的亿欧网和亿欧国际站是创业创新领域的知名信息平台,是各类VC机构、产业基金、创业者和政府产业部门重点关注的平台。创业公司被亿欧网和亿欧国际站报道后,能获得巨大的品牌曝光,有利于降低融资过程中的解释成本;同时,对于吸引上下游合作伙伴及招募人才有积极作用。对于优质的创业公司,还可以作为案例纳入亿欧智库的相关报告,树立权威的行业地位。

◆ 大型企业

凭借对科技+产业+投资的深刻理解,亿欧EqualOcean除了为一些大型企业提供品牌服务外,更多地基于自身的研究能力和第三方视角,为大型企业提供行业研究、用户研究、投资分析和创新咨询等服务。同时,亿欧EqualOcean有实时更新的产业数据库和广泛的链接能力,能为大型企业进行产品落地和布局生态提供支持。

亿欧服务



◆ 政府机构

针对政府类客户,亿欧EqualOcean提供四类服务:一是针对政府重点关注的领域提供产业情报,梳理特定产业在国内外的动态和前沿趋势,为相关政府领导提供智库外脑。二是根据政府的要求,组织相关产业的代表性企业和政府机构沟通交流,探讨合作机会;三是针对政府机构和旗下的产业园区,提供有针对性的产业培训,提升行业认知、提高招商和服务域内企业的水平;四是辅助政府机构做产业规划。

◆ 机构投资者

亿欧EqualOcean除了有强大的分析师团队外,另外有一个超过15000名专家的资源库;能为机构投资者提供专家咨询、和标的调研服务,减少投资过程中的信息不对称,做出正确的投资决策。

◆ 欢迎合作需求方联系我们,一起携手进步; 电话 010-57293241, 邮箱 hezuo@iyiou.com



获取更多报告详情 可扫码关注





查看更多研究报告请访问亿欧网 WWW.iyiou.Com

- 更有超多垂直领域研究报告免费下载



扫码添加小助手 加入行业交流群