

“AI+新材料”的基石为高质量数据集

► 本报记者 叶伟

“目前,全球新材料发展呈现三级梯队竞争格局,我国处于第二梯队。”中国工程院院士、中国工程院原副院长、国家新材料产业发展专家咨询委员会主任干勇在5月19日举行的2025年北京新材料大会上表示,随着产业转型升级,我国新材料产业发展进入关键窗口期,要加大研发投入,构建“AI(人工智能)+新材料”技术体系,向“以自主创新为主”的科技创新模式转变,迈入全球新材料第一梯队,建设材料强国。

创新体系逐步完善

根据工信部发布的《新材料产业发展指南》,新材料主要包括先进基础材料、关键战略材料、前沿新材料三大类。先进基础材料包括高性能金属、特种塑料与橡胶、陶瓷、玻璃等;关键战略材料包括稀土功能材料、先进半导体材料、新型能源材料及新型显示材料等,是发展战略性新兴产业的重要原材料;前沿新材料包括用于高端医疗器械的纳米材料、石墨烯材料等。

“新材料是经济社会发展的物质基础,是高新技术和高精尖产业发展的先导。”中国工程院院士、北京科技大学学术委员会主任谢建新说。

我国高度重视新材料产业的发展,先后出台《“十三五”国家战略性新兴产业发展规划》《国家新材料生产应用示范平台建设方案》《“十四五”原材料工业发展规划》《标准提升引领原材料工业优化升级行动方案(2025-2027年)》等,旨在推动新材料产业高质量发展。

同时,我国材料创新体系逐步完善。截至目前,我国拥有国家级材料科技创新平台近200个,其中建有70余个材料领域国家重点实验室,正在建设材料国家实验室;各部委建设百

余个国家材料技术(工程)创新中心及重大平台,推动我国新材料产业自主创新能力不断提升。

“我国自主开发的半导体照明材料、光伏材料、非线性激光晶体、分离膜材料、非晶合金等新材料技术已达到或接近国际水平,部分处于国际领先。”干勇表示,关键新材料的不断突破,为我国航空航天、能源交通、工程建设、资源节约与环境治理等领域国家重大工程的实施提供了不可或缺的物质基础和保障。比如高性能钢材材料、轻合金材料、工程塑料等产品结构持续优化,有力支撑和促进高铁、载人航天、海洋工程、能源装备等国家重大工程建设及轨道交通、海洋工程装备等产业“走出去”。

市场需求旺盛

随着新型工业化的加速推进,我国新材料产业面临重大机遇,新材料市场需求旺盛。

“当前,在新一轮科技革命和产业变革的大背景下,新材料和新物质结构不断涌现,新材料科技创新保持高度活跃,材料科技创新呈现需求牵引和交叉学科驱动的态势。”干勇说,传统硅基半导体材料已难以满足未来社会对智能化和高效能的需求,信息功能材料的不断创新是先进计算、人工智能、新一代通信及网络、物联网、柔性显示、量子科技、生物医药等新技术发展的关键,具有不可替代作用,可推动器件、系统、整机的功能和性能发生质的飞跃和革命性变化。

干勇举例说,在运载工具领域,预计到2030年,我国大客机将达到数千架,航空发动机用量将达3万台,修换件会加大,对高温合金的需求量达到7万余吨;高速列车基础零部件用轴承钢、齿轮钢、模具钢的年需求量分别

为300万吨、200万吨和50万吨。在能源动力领域,预计到2030年,我国需建设上千台600℃、700℃超超临界火电机组,需耐热钢和耐热合金数千万吨;海洋资源勘探、开采、储运及基础设施建设对钢及耐腐合金需求量达到60万吨。在生命健康领域,预计到2035年,用于胃肠道疾病、皮肤疾病常用药物的填料,矿物纳米材料的需求量将达到30万吨。

工业和信息化部赛迪研究院材料工业研究所张海亮表示,人形机器人的发展,对轻量化材料、驱动材料和感知材料等新材料的需求巨大。

在巨大的需求驱动下,我国新材料产业加速跑。工业和信息化部发布的数据显示,2024年1-11月,我国新材料产业总产值同比增长10%以上,连续14年保持两位数增长,预计2025年新材料产业总产值将达到10万亿元规模。

探索“AI+新材料”融合方式

“伴随着AI、机器学习等新技术的发展,AI正改变着新材料研发和制备方式。”干勇表示。

“数字化和AI技术迅速发展成为材料领域前沿、共性关键技术,为从根本上解决新材料研发效率低、成本高的瓶颈问题提供了崭新途径。”谢建新介绍说,应用AI技术能够对海量数据进行挖掘,从中提取、总结出材料“成分—结构/组织—工艺—性能”内禀关系或科学机理,实现新材料发现和材料成分设计、工艺优化、性能/质量提升,加速新材料、新工艺的研发和应用。

比如,小米汽车身上的“泰坦合金”,实现从实验室到量产车的智能跃迁;中国钢研6个月内设计开发出世界上强度最高(800MPa级别)的高性能抗氢厚板材料;中石化以AI赋能的

分子筛催化绿色氧化工艺开发推动传统研发模式的变革,助力新型催化工艺自主化;北京科学智能研究院引入AI分子表示学习模型,设计出不含贵重金属的新一代OLED发光材料……

如何进一步加快AI技术和新材料的融合发展?干勇说,要加快建立中国特色“AI+新材料”创新体系。

“‘AI+新材料’的基石在于高质量数据集。”中国钢研数字化研发中心首席科学家苏航表示,高质量材料数据集的特征是同源性、分散性、规模性、可信性、完备性,“为此,要通过高通量计算、高通量实验、区块链数据发现等手段,分别构建可信计算数据集、可信实验数据集、可信应用数据集,才可能形成大量细分领域的完备数据集,支撑垂直领域新材料AI与多智能体群建设,支持材料科学AI化发展。”

“数据、算法、算力是AI三大要素,数据是AI的重要基础。”谢建新表示,要构建关键材料全覆盖、研发—生产—应用全融通的数据资源体系,让数据资源丰富、可靠、好用;要创新材料数据产权和共享机制,构筑高效可持续流通交易生态,让数据畅通共享、数据市场繁荣;要不断研发和供给材料数据产品,推动新材料数字化智能化发展,让数据创新价值、赋能发展,推动“AI+新材料”创新体系建设。