

2025 年

AI for Science 化工行业报告

AI4S 从学术走向商用，六大方向率先突破

三个皮匠报告网 www.sgpjbg.com

全行业研究报告、财报、峰会、数据、产业政策下载平台



| 目录



01 **AI for Science** 发展背景与商业模式

02 **AI4S** 在化工行业的六大创新方向

03 **高质量数据与 AI** 布局的差距拉大



01

AI for Science 发展 背景与商业模式



- AI for Science（AI4S）将人工智能技术应用于科学研究之中，成为继实验、理论、计算科学、数据科学之后的“第五范式”。前四范式分别为实验科学（古至今，以观察与实验为主）、理论科学（文艺复兴后，以抽象建模与推理为主）、计算科学（20 世纪中期，以数值模拟与仿真为主）、数据科学（21 世纪初，以数据挖掘与统计分析为主）。第五范式以人工智能算法驱动科学发现，具备自动化探索和跨学科融合的独特优势，尽管目前尚存在可解释性不足的局限，但以 AlphaFold 蛋白质结构预测为代表的成果已充分展现其巨大潜力。

科学范式	时间阶段	主要方法	核心技术	优势	局限性	代表性成果
第一范式 (实验科学)	古至今	观察与实验	实验仪器	直接验证现象	受限于实验条件	牛顿力学实验
第二范式 (理论科学)	文艺复兴后	抽象建模与推理	数学工具	普适性强	理想化假设	相对论
第三范式 (计算机科学)	20 世纪中期	数值模拟与仿真	计算机	可模拟复杂系统	计算能力约束	气象模拟
第四范式 (数据科学)	21 世纪初	数据挖掘与统计分析	数据库与统计	从数据中发现规律	数据质量依赖	人类基因组计划
第五范式 (AI for Science)	现在与未来	AI 驱动的科学发现	人工智能算法	自动化探索、跨学科融合	可解释性不足	AlphaFold 蛋白质结构预测

■ 人工智能已经到应用爆发阶段

- 人工智能研发已持续近 80 年，开始向 " 智能体主导 " 发展的新趋势演进。从 1940-1990 年代机器学习和神经网络起源，到 1990-2010 年代深度学习的兴起，再至 2018 年至今 OpenAI 推出 GPT 及 AI4Science 应用相继爆发，AI 技术已进入面向科学前沿领域落地的关键时期。2020 年 DeepMind 的 AlphaFold2 模型以接近实验精度预测数以万计蛋白质结构，被《Science》评为 2021 年年度科学突破；2024 年 AlphaFold3 进一步扩展到多分子相互作用，标志着 AI4S 已从学术层面跨入商用层面并产生实际经济效益。



未来大型机构主要采用混合模式，中小企业以合作研究模式为主

- 合作研究模式可快速接入前沿技术、分担研发成本和风险，但存在过度依赖外部技术、数据安全及知识产权归属风险；内部研发模式则可完全掌控技术路线和数据、打造企业独有的 AI 能力，但投入巨大且见效周期长。两种模式各有优缺点及适用场景。未来大型机构将以混合模式为主，如大型企业或国家级实验室建立自己的 AI 研究平台（内部自主开发），同时对外开放部分能力，与高校、初创企业共建创新网络；小型企业则倾向于使用开放或商业化平台，采用合作研究模式。

模式	优点	缺点	适用场景	未来展望
合作研究模式	①可以快速接入前沿技术，充分利用合作方已有的专业知识和平台 ②分担研发成本和风险	①过度依赖外部技术，可能导致控制力不足 ②面临数据安全和合规风险 ③利益分配和知识产权归属可能产生纠纷	合作模式通常可以快速启动并降低初期成本，例如通过购买服务或联合建模迅速获得成果；而自主研发需先行大量投入时间和资金，通常启动较慢。对于追求短期效果或预算有限的公司，合作更易见效	我们认为未来大型机构将会以混合模式为主，比如大型企业或国家级实验室可能建立自己的 AI 研究平台（内部自主开发），
内部研发模式	自主研发可以完全掌控技术路线和数据，打造企业独有的 AI 能力和知识产权	自研投入非常巨大且见效周期长，需要持续高额投入包括算力和顶尖 AI 人才	自主模式下企业掌握全盘主动权，可高度定制解决方案，适合有独特需求或高度保密要求的行业（如国防、尖端制造等）。合作模式虽灵活，但受制于合作方的技术和协议，难以完全个性化	同时对外开放部分能力，与高校、初创企业共建创新网络。小型企业则倾向于使用这些开放或商业化平台，采用合作研究模式



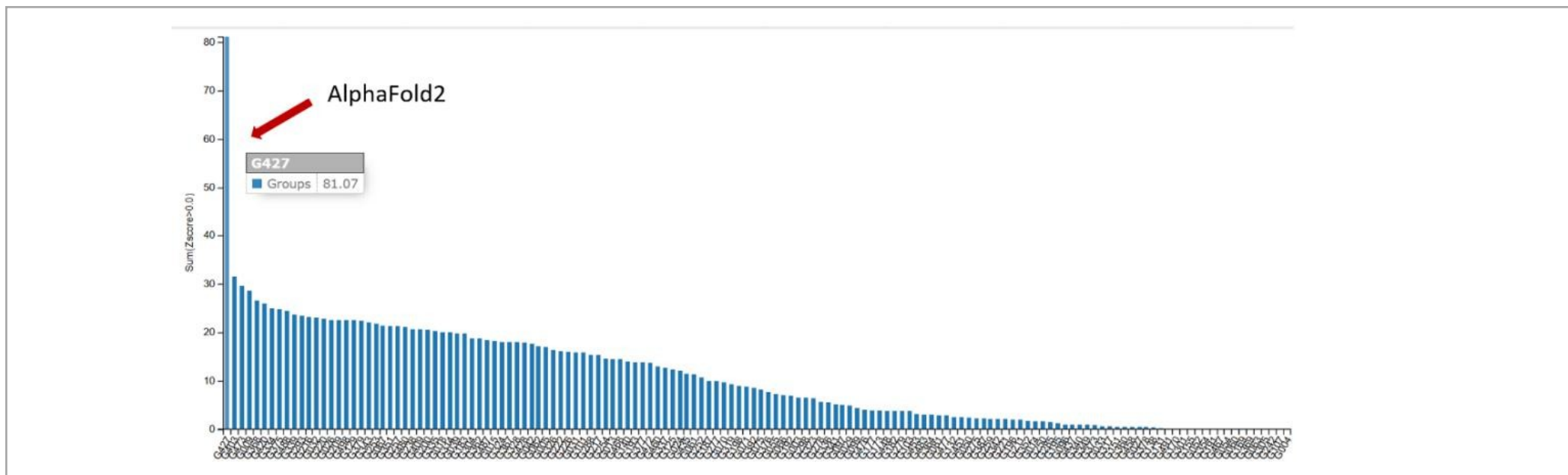
02

AI4S 在化工行业的六大创新方向



AlphaFold2 在 CASP14 以绝对优势击败其他实验室团队

- DeepMind 团队在 2020 年第 14 届蛋白质结构预测挑战赛（CASP14）中，AlphaFold2 以绝对优势 81.07 分击败其他实验室团队（第二名仅 31 分），破解了蛋白质折叠难题。AlphaFold3 模型甚至能预测蛋白质、DNA、RNA 及药物分子的相互作用，将显著加速生物学研究速度 5%-10%。以 AlphaFold2 为例，AI4S 应用场景具备三大特点：长研发周期与高成本（深度学习将蛋白质结构解析从年度缩短到分钟）、数据驱动与大规模计算（从海量多模态复杂数据中提取深层模式）、高维度设计空间（在高维优化空间中搜索最优解）。

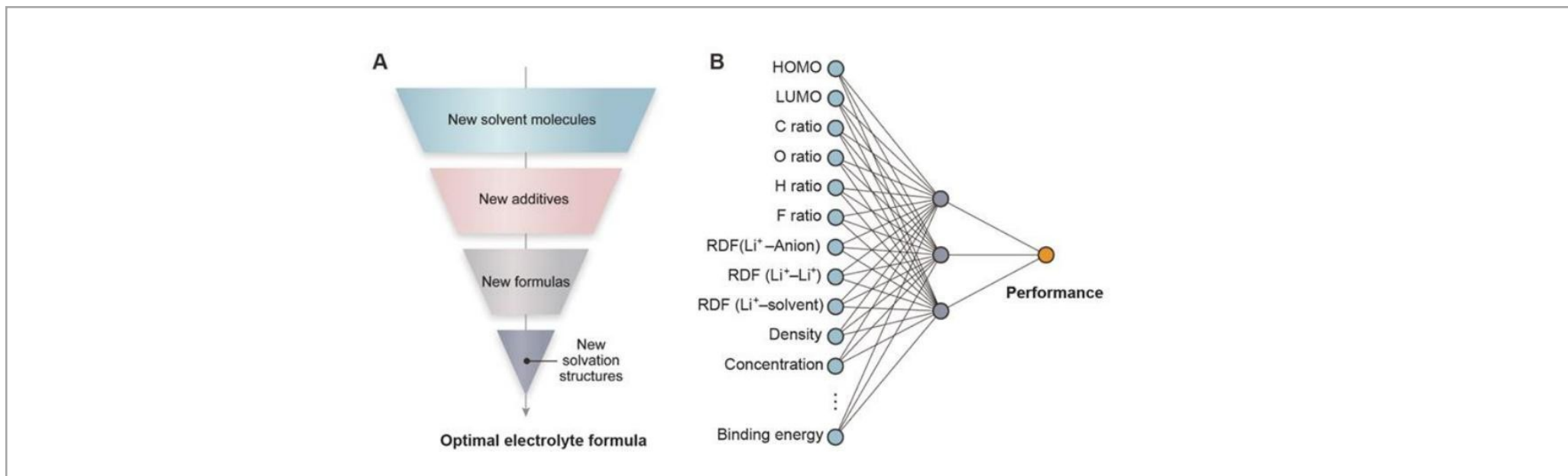


- 在生物发酵行业，菌种是生产反应的核心，直接决定生产成本、生产效率及环保水平。传统发酵过程是一种非线性、非结构化的复杂系统，涉及多种影响因素，难以获得令人满意的优化条件。研究学者将人工神经网络与遗传算法用于发酵培养基的优化中，周勇等用人工神经网络与遗传算法优化脂溶性醌类化合物发酵培养基，使其化合物产量提升了 63.33%。此外，机器学习模型如神经网络、随机森林可显著提升菌种鉴定准确率，Eiseul 等用神经网络识别必需食品发酵细菌，准确率超过 97%。

Optimization methods		Before optimization	Single-factor optimization	Uniform design optimization	ANN-GA optimization
Item					
Optimized factors in medium(g/L)	Glucose	20	30	38	35.6
	NH ₄ SO ₄	4	5	7.5	6.28
	aginomoto	2.5	7	6	7.39
	corn steep	3.5	6	7	6.39
	P-value	/	/	249	243
Yield of CoQ ₁₀ (mg/L)	R-value	150	211	221	245
	Error rate/%	/	/	11.24	0.82

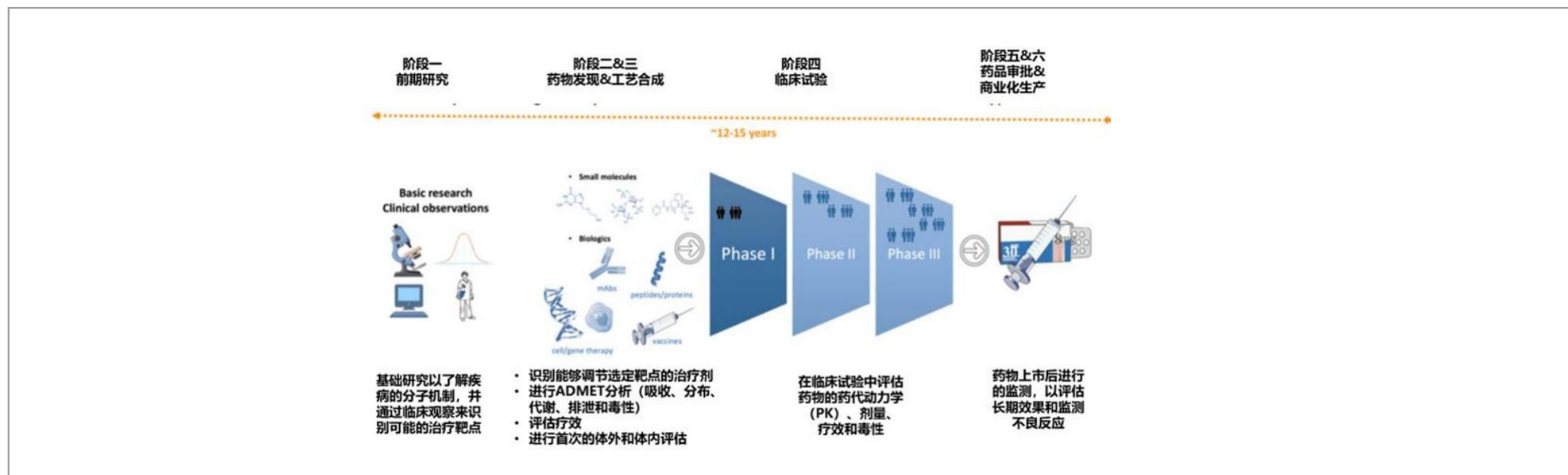
■ AI 被用于预测新的溶剂分子、新的添加剂、新的配方和新的溶剂化

- 电解液在锂金属电池中起着至关重要的作用，但电解液配方与电池性能之间的相关性尚未明确，传统的电解液开发基于试错法，成本高昂且效率低下。利用 AI 通过统计分析大量数据（包括盐、溶剂、添加剂及其配方），可以指导新溶剂分子、新添加剂、新配方和新溶剂化结构的预测，最终实现最优的电解液设计。这一方法论同样适用于催化剂、添加剂等的升级优化及后续产物分离，研发人员需综合考虑多维度数据才能有效解决失活等难题，符合 AI4S 应用特点。



农药和医药具备相似的药物研发流程

- 农药与医药的研发存在高度相似的逻辑框架，两者均涵盖仿制药与创新药的开发路径，核心流程涉及活性分子筛选、靶点识别、结构优化及安全性评价等关键环节。医药与农药在作用靶点层面存在高度同源性——二者均干预生物体的基本生命活动，如神经传导、细胞分裂与代谢调控等，许多分子靶点在结构和功能上具有一致性。例如鱼尼丁受体（RyR）是调控细胞钙离子通道的关键蛋白，医药领域用于治疗心律失常，氟虫酰胺等农药则通过激活昆虫 RyR 诱导钙流失致死。





03

高质量数据与 AI 布局 —— 的差距拉大



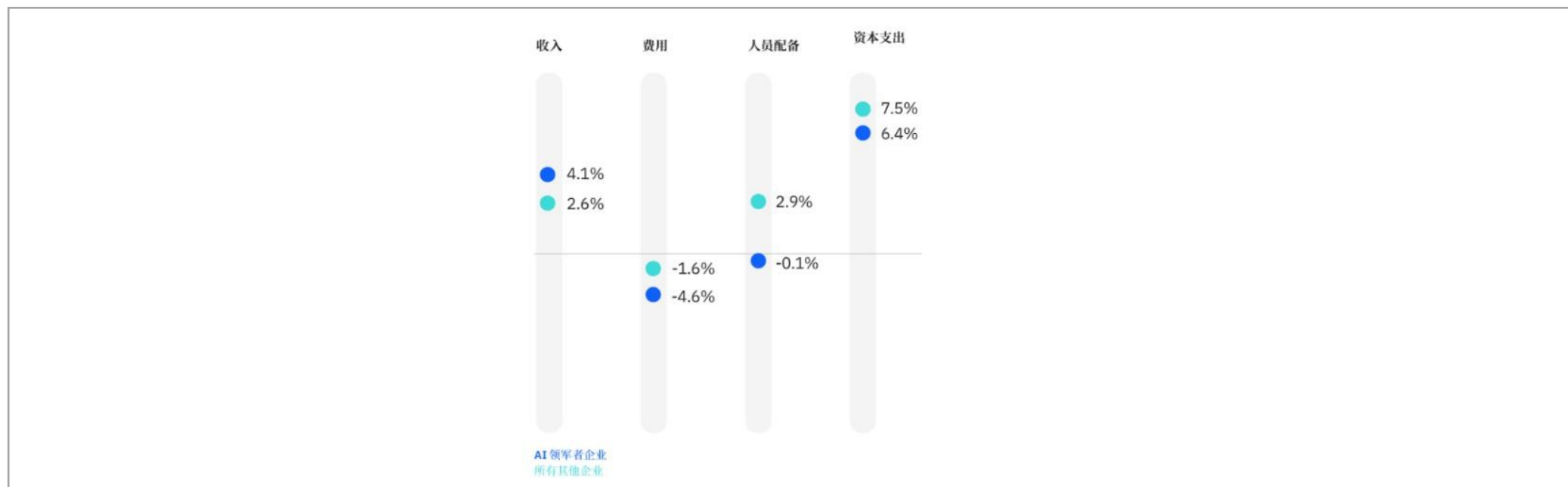
AI 领军者企业对数据源的利用率更高

- 根据 IBM 调查数据（382-399 位化工企业高层），化工 AI 领军者企业已建立数据驱动型文化的比例达 97%，而同行仅为 59%。降低数据结构复杂度是应用 AI 的先决条件，这意味着化工企业必须优先建立数据标准和企业数据治理框架。在数据源利用率方面，领军者对结构化数据的利用率显著高于同行，包括交易数据（97% vs 87%）、运营数据（94% vs 82%）、客户数据（94% vs 85%）、机器日志数据（87% vs 77%）及非结构化数据（85% vs 71%）等方面均全面领先。



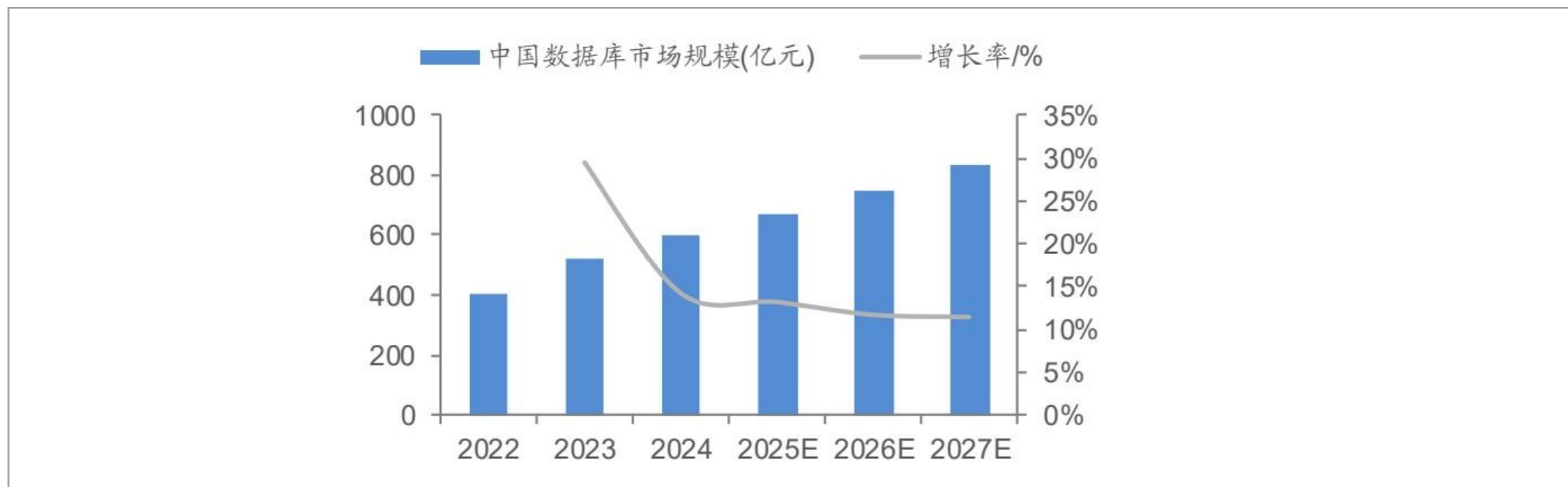
AI 投资的价值

- 根据 IBM 调查数据（400 位化工企业高层），化工 AI 领军者的 AI 投资回报率平均达 39%，而其他企业仅为 25%，但两组企业在 AI 方面的支出基本相同（领军者每 10 亿美元收入中投入 490 万美元，其他企业为 440 万美元）。假设同样是市值 50 亿美元、利润率 10% 的企业，AI 领军者企业的利润平均要比同行高出 2 亿美元。在化工领域，除高质量文献、专利信息、成熟工艺包外，赋能生产、研发的高质量信息更多偏向私有化，能够成功研发和优化的高质量数据获得来源包括规范有效的数据积累、外部合作数据基础、高效实验装置的数据积累及收并购数据资产继承。



中国数据库规模持续提升（亿元）

- 作为多数 AI 应用落地的底层基础，专业数据库是重要的落地资源。2024 年全球数据库市场规模约为 1154 亿美元，其中中国规模约为 83.7 亿美元（折合人民币约 600 亿元），约占全球的 7.3%。放之化工行业内，中国化工市场占全球市场 40% 以上，中国化工研发投入占全球化工研发投入的 1/3，不到 10% 的数据库规模占比凸显了我国数据储备的严重不足。2025 年我国数据库企业数量由 2024 年的 167 家下行至 103 家，数据的简单堆积已不能满足现阶段需求，数据质量成为关注重点。



查看完整报告

- 获取完整报告及数据请前往【三个皮匠报告】官网



电脑端官网



浏览器访问电脑端官网
www.sgpjbg.com

微信小程序



扫码访问手机端



全行业研究报告、财报、峰会、数据、产业政策下载平台



微信公众号



商务合作、报告定制



小红书

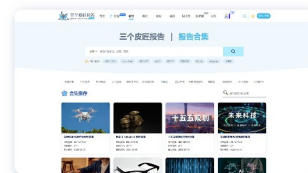
网站栏目



自研报告库



券商&投行研报



专题合集



会议峰会



英文报告



数据图表



产业政策



财报&招股书



报告分发

自研报告库

⑦ 十五五全系列产业深度报告
新质生产力、未来产业、战略性新兴产业

⑦ 前沿技术·趋势前瞻
核聚变能、AIDC、深地经济、具身智能...

⑦ 未来消费·投资风口
银发经济、宠物经济、情绪消费...

报告定制业务



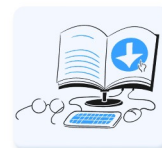
产品形式: 纸质版+电子版

电子版格式: WORD版+PDF版

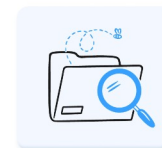
交付时间: 6-10个工作日, 特殊要求另行商定



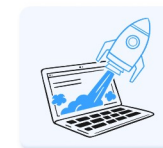
核心产品



500万+报告



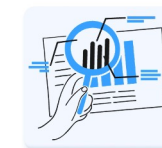
2800+合集



450万+财报



500万+政策



1200万+数据



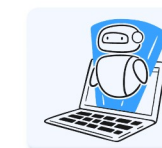
6000+全球智库
咨询/机构/协会



会议峰会PPT
产业峰会/国际大会



投研报告
内资券商/外资投行



AI工具集
搜索/翻译/辅读



自研报告
报告定制/原创报告库