



基础化工行业研究

买入（维持评级）
行业深度研究

证券研究报告

基础化工组

分析师：陈屹（执业 S1130521050001）

chenji3@gjzq.com.cn

分析师：杨翼荣（执业

S1130520090002）

yangyiyong@gjzq.com.cn

AI 系列深度（二）——AI for Science 应用端落地快速开启

本篇文章是 AI 系列深度报告第二篇，着重从 AI for Science 的演变，化工落地角度，应用切入口等进行分析，AI4S 从效率工具升级成为智能辅助，在 AI 传统关注的硬件、软件之上，更多聚焦化工的应用层研究。我们从几个维度进行了方向性梳理：①AI4S 发展演进，开始逐步形成了专业服务和内生研究两大方向；②AI4S 先期落地解决行业痛点着重关注三个维度；③创新应用中梳理出六大方向或赛道，优化改进能够有三个维度的赋能；④高质量数据的积累和获取成为拉大企业差距的重要方向。

投资逻辑：

当前 AI 赛道正在快速迭代发展，我们认为 AI for science (AI4S) 将对化工行业未来的竞争格局产生重大影响，本篇报告主要介绍了当前 AI4S 当前发展阶段，分析化工行业哪些赛道有望率先实现突破，论述化工企业应用 AI 中短期主要痛点和突破点，主要得出以下结论：

1、科学研究迎来“智能体主导”的新范式，已从学术层面跨入到商用层面

AI4Science 正在步入“多模态大模型+自动化实验”时代，“自驱动实验室”(Self-DrivingLab)等多智能体协同平台正加速发展。未来，AI 将与机器人实验密切配合，人机协同进行全流程闭环科学研究。当前 AI4S 已经从学术层面跨入到商用层面并产生实际的经济效益，不过并没有形成较为成熟的商业模式，业界普遍沿用合作研发模式、自主研发模式及混合模式。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），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。

2、创新应用中梳理出六大方向，实现智算平台的产品兑现；优化改进能够有三个维度的赋能，带动中长期的设备升级投资

以 AlphaFold2 为例，我们总结出 AI4S 应用场景的 3 类特点：①长研发周期与高成本。②数据驱动与大规模计算。③高维度设计空间。在创新研发维度，生物发酵行业菌株筛选和流程优化，新型材料的应用和适配，农药创新药等药剂产品的开发，辅材催化剂、添加剂等的升级优化及后续产物分离，微观结构带来的材料升级，配方设计、升级和应用 6 大方向将率先实现突破；而在优化改进方向，重复环节人工替代或者关键、危险环节检测，生产过程的智能优化，给予充分、实时市场信息进行的资源调配 3 个维度可以进行优化，从而带动局部的设备投资。

3、AI 布局进程将逐步拉大化工企业头尾部企业的差距，其中高质量数据是决定性因素

人工智能系统的性能取决于其所依赖的数据，高质量数据将是拉开化工企业 AI 布局的关键。在化工领域看，高质量数据更多偏向私有化，多数企业自身积累的数据极为有限，能够进行自身赋能的相对较少。因而从数据的角度看，历史管理相对规范的头部企业、有先期的战略规划能够有效外部合作的细分龙头、能够结合“机器人”和“智算平台”的生产企业有望可以获得持续 AI 竞争力。

投资建议：

AI 垂类应用正加速向化工全链条渗透：设备端聚焦“AI+机器人”高危巡检；研发端看好“AI+自动化实验”驱动分子发现及工艺优化；产品端关注 AI 辅助配方升级与新材料迭代。

风险提示：

技术快速迭代导致前期投入沉没成本风险；化工新材料验证周期长，若性能不达预期可能导致商业化验证风险；数据合规风险；高端人才争夺风险；当前 AI4S 标的交易拥挤度较高，存在估值回调风险

并购家 免费行业报告网

IPOIPO.CN 每日更新 不用注册会员 无广告 永久免费



内容目录

一、AI for Science 成为未来研究升级的重要路径.....	4
1.1、AI4S 已经成为科学研究领域“新范式”，进入加速发展期.....	4
1.2、伴随 AI4S 发展持续深入，开始衍生出新的合作状态.....	5
1.3、国内 AI 发展进一步向 AI+应用落地，大型企业已经开始思索先期布局.....	7
二、AI 应用从行业痛点着手，部分赛道有望率先实现突破.....	10
2.1、AI4S 应用以高效为核心驱动，率先对症三大痛点.....	10
2.2、创新是现阶段 AI 在化工应用的主旋律，关注六个细分方向.....	12
2.3、优化生产和资源调配也是 AI 将逐步兑现的领域，关注设备升级带来的长期变化.....	17
三、AI4S 多行业有应用空间，但个体差异仍然明显.....	18
3.1、高质量数据及应用将大幅拉开头尾部化工企业的差距.....	18
3.2、AI 适配性发展和高效的执行力也将是企业 AI 升级的重心.....	20
3.3、AI 布局，企业仍然需要硬件同步跟进.....	21
四、投资建议.....	22
4.1、晶泰科技.....	22
4.2、中控技术.....	23
4.3、志特新材.....	24
五、风险提示.....	25

图表目录

图表 1：AI4S 是继实验、理论、计算科学、数据科学之后的第五范式.....	4
图表 2：人工智能也进入深度学习和优化阶段.....	4
图表 3：人工智能已经到应用爆发阶段.....	5
图表 4：合同研究模式企业（包含混合模式）.....	6
图表 5：内部研发模式企业.....	7
图表 6：未来大型机构主要采用混合模式，而中小企业将以合作研究模式为主.....	7
图表 7：中国 AI4S 相关政策与提议.....	7
图表 8：AI 产业链上游和中游环节在大政策支持下率先崛起和发展.....	9
图表 9：头部企业 AI 人才招聘情况.....	9
图表 10：AlphaFold2 在 CASP14 以绝对优势击败其他实验室团队.....	11
图表 11：AlphaFold2 工作原理分为四步.....	12
图表 12：Eiseul 等用神经网络识别必需食品发酵细菌，准确率超过了 97%.....	13
图表 13：周勇等用人工神经网络与遗传算法优化生物发酵培养基，产量提升 63.33%.....	13
图表 14：理解并量化化学结构与性能之间的关联是复合材料核心难点.....	13



图表 15: 利用对抗生成网络结合预测模型实现材料逆向生成	14
图表 16: 农药和医药具备相似的药物研发流程	15
图表 17: 氟虫酰胺作用于鱼尼丁受体的过程示意图	15
图表 18: 新烟碱类农药作用机制	15
图表 19: 碱中毒导致催化剂失活	16
图表 20: 吸附膜材料种类众多	16
图表 21: 利用丰富的已知结构数据, 花费较低的额外计算成本即可预测新结构	16
图表 22: 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	17
图表 23: 机械狗在高位环境中辅助检测	17
图表 24: 中控技术为湖北三宁部署 AI 监测系统	17
图表 25: 全球数据交易市场规模 30 年将达 3000 亿美元	18
图表 26: 中国数据交易市场规模 30 年将达 5000 亿元	18
图表 27: 中国数据库规模持续提升 (亿元)	19
图表 28: 数据库的云部署目前是大方向	19
图表 29: 数据库的发展由野蛮生长进入质量要求阶段	19
图表 30: AI 投资的价值	20
图表 31: AI 领军者企业对数据源的利用率更高	20
图表 32: 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	21
图表 33: 鞍钢集团依靠华为云储存和算力平台降低配煤成本	22
图表 34: 煤矿智能化解决方案架构	22
图表 35: 机器人实验室产生大数据训练领域 AI 模型, 自主完成反应预测与实验设计	23
图表 36: 晶泰科技分业务收入 (亿元)	23
图表 37: 中控技术时序大模型 TPT	24
图表 38: 中控技术分业务收入 (亿元)	24
图表 39: 志特新材分业务收入 (亿元)	25



一、AI for Science 成为未来研究升级的重要路径

1.1、AI4S 已经成为科学研究领域“新范式”，进入加速发展期

AI for Science (AI4S) 是指将人工智能技术应用于科学研究之中，成为继实验、理论、计算机科学、数据科学之后的“第五范式”。它利用深度学习等方法解决生命科学、材料科学、化学反应等领域的核心难题。人工智能经历了 70 多年的发展，贯穿了符号主义、连结主义和行为主义，进入到深度学习阶段，不仅能够对“已有”进行高效拆解、学习和分析，也逐步能够对“未知”进行判断、模拟和自我修正，正因如此，人工智能开始在教育端具备更进一步的落地价值，不仅仅作为现有状态的效率提升工具，更能够辅助制造行业的创新、优化和预警。

DeepMind 团队在 2020 年用 AlphaFold 2 模型破解了蛋白质折叠难题，从而“显著加速了结构生物学研究”。2024 年诺贝尔化学奖授予 AlphaFold 的发明者，化学奖再次凸显诺委会对 AI 的青睐。最新的 AlphaFold 3 模型甚至能预测蛋白质、DNA、RNA 及药物分子的相互作用，时任谷歌 DeepMind 高级研究科学家的 John Jumper 认为其将显著加速生物学研究速度 5%-10%。这些实例表明，AI4S 正在从原子/分子层面深化对化学反应机制的理解，大大提高了研发效率和精度，

图表1: AI4S 是继实验、理论、计算科学、数据科学之后的第五范式

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

来源：原野等《创新联合体赋能新质生产力的理论机制与实践路径研究》，国金证券研究所

图表2: 人工智能也进入深度学习和优化阶段



来源：上交研究院，国金证券研究所绘制

人工智能的研发已经持续了近 80 年，开始有向“智能体主导”发展的新趋势。参考历史不同生产力阶段持续时间：①狩猎采集时期（公元前 38000 年-公元前 8000 年）共 3 万年；②手工业农业时期（公元前 8000 年-1430 年）共 9400 年；③贸易工业时期（1430 年-1955 年）共 525 年；④计算机科学时期（1955 年至今）已有 70 年，从线性推演来看，由 AI 引爆的生产力革命已经开始并且会有极快的迭代速度。



①1940s - 1990s: 机器学习和神经网络起源。1943 年 McCulloch 与 Pitts 提出了数学神经元模型，通常被视为机器学习的奠基；1958 年 Rosenblatt 提出感知器

(Perceptron)，这是首个能“学习”数据的人工神经网络原型，被认为是现代神经网络的基础。此后 Minsky 和 Papert 在 1969 年揭示了单层感知器无法解决异或问题的局限性，引发了简单神经网络的“冰河”期。到了 1980 年代，研究者又提出了反向传播等多层网络算法 (Bryson 和 Ho 等)，为后来的深度学习铺平了道路。

②1990s - 2010s: 深度学习的兴起。进入 90 年代后，卷积神经网络、循环神经网络等取得突破性进展，并应用于图像识别、语音识别等领域。2006 年之后，随着大数据和 GPU 算力的快速增长，深度学习逐渐爆发，如 2012 年 AlexNet 在 ImageNet 竞赛中胜出，标志着深度神经网络进入主流。这一阶段可以看作是 AI 算法和算力双重优化、ML 算法成熟的大融合期，为后续复杂科学任务提供了算法基础。

③2018 年至今: OpenAI 推出 GPT, AI4Science 应用相继爆发。近几年 AI 技术开始面向科学前沿领域落地，尤其是生物医药和材料科学等行业。2020 年 DeepMind 的 AlphaFold2 模型以接近实验精度预测了数以万计蛋白质结构，被《Science》评为 2021 年年度科学突破。2024 年 AlphaFold3 进一步扩展到蛋白质-蛋白质、蛋白质-DNA/RNA 复合物等多分子相互作用。与此同时，大规模语言模型和生成式 AI 在科研工具层面成熟，为 AI 辅助假设生成、文献分析等提供了强力支持。

图表3: 人工智能已经到应用爆发阶段



来源: Teachtarget, 国金证券研究所

下一阶段，AI4Science 有望进入“多模态大模型+自动化实验”时代。科研领域的基础模型构想正在兴起：欧盟等机构已启动“科研领域基础模型”项目，培养可用于化学、生物、物理等多学科的通用 AI 系统；NASA 也发布了针对地球科学的通用模型。同时“自驱动实验室” (Self-DrivingLab) 等多智能体协同平台正加速发展。未来，AI 将与机器人实验密切配合，人机协同进行全流程闭环科学研究：AI 提出假设、机器人执行实验、系统评估反馈，再迭代优化。长远来看，这意味着科学研究将从“以人类为主导”逐渐过渡到“智能体主导”的新范式。

1.2、伴随 AI4S 发展持续深入，开始衍生出新的合作状态

当前的 AI4S 已经从学术层面跨入到商用层面并产生实际的经济效益，不过并没有形成较为成熟的商业模式，业界普遍沿用两种极端或混合模式。一类是合同研究组织 (CRO) 的服务模式：科技公司利用 AI 算法对客户（如制药或材料企业）提供定向服务，包括预测靶点、筛选化合物、优化配方或仿真模拟等项目，一次性完成后收取服务费，不分享下游成果的知识产权；另一类是内部研发模式：公司自建 AI 平台用于自主发现创新成果（药物先导、材料配方等），并通过许可、合资或直接产业化获利。

当然目前相当多的企业自身的 AI 底层基础还尚未完善，因而有存在有公司通过参股、控股等方式切入初创型 AI4S 科研平台，或者和领先的大学科研团队合作，来弥补原本积累的底层数据、研究方向、技术人员等不足，加速实现 AI 的科研赋能。而企业主体更多承



担产品的工程化生产以及产品应用和推广等和实体业务更为协同的环节。

现代合同研究模式（CRO）兴起于 20 世纪 80 年代，当时大型制药公司开始寻找外包工作的方式，以降低成本并利用外部专业知识和能力。人工智能外包也不例外，因为人工智能服务提供商的技能和专业知识和可以在不同的时间和成本下应用于药物发现和开发项目。当前市场中许多公司将自身打造为“AI 加速实验室”向制药厂提供虚拟筛选或有限实验设计等服务，如 BenevolentAI、英矽智能、Reverie Labs、晶泰科技等。

图表4：合同研究模式企业（包含混合模式）

企业	成立时间	业务范围	合作案例	收益情况
BenevolentAI	2013 年	AJACS 人工智能系统, 海量信息中提取出能够推动药物研发的知识, 进行预测, 从而加速药物研发的过程, 和药企、药物研究机构合作	与阿斯利康（AstraZeneca）合作, 共同开发针对慢性肾病（CDK）和特发性肺纤维化（IPF）的创新疗法, 已发现两个创新靶点, 并已纳入阿斯利康的研发管线中	总共融资 2.07 亿美元
英矽智能	2014 年	基于生成对抗网络（GANs）、深度强化学习（RL）、预训练模型（Transformer）和其他机器学习技术, 识别靶点并生成具有特定属性分子结构的候选药物	与 Exelixis 合作开发 USP1 抑制剂 ISM3091, 用于实体瘤治疗（虚拟筛选优化分子设计）; 赛诺菲利用英矽智能人工智能驱动的 Pharma.AI 药物发现平台, 推进基于 6 个创新靶点的候选药物研发	与赛诺菲合作潜在价值 12 亿美元; 与 Exelixis 合作获 8000 万美元预付款
机数量子	2017 年	提供材料大数据咨询、人工智能分析、新材料定制开发等服务	瓮福集团磷矿石组分与化学结构双盲测试	当前已经完成三轮融资
Reverie Labs	2017 年	基于生物微分子的特性开发出最佳的结构预测模型, 处理药物开发过程中的实验数据, 并运用生物分子优化器分析最佳的生物微分子组合, 确定最佳的药物品种, 加速药物开发进程	与罗氏（Roche）达成多靶点合作协议, 利用其技术平台对激酶抑制剂项目进行大规模虚拟筛选, 加速早期药物发现	2021 年 A 轮获得融资 2500 万美元
晶泰科技	2014 年	用计算物理、量子物理、量子化学、人工智能与超大规模云计算相结合, 缩短药物设计、固相筛选和药物制剂的开发时间	与礼来签署药物发现合作, 以 AI+ 实验机器人驱动首创新药研发; 为 JW Pharmaceutical 提供一套药物发现自动化工作站和基于人工智能（AI）的化学反应优化平台, 以全面赋能 JW 的药物研发效率、重复性与成功率	与礼来合作收到预付款及里程碑总收益可达 2.5 亿美元; 与 JW 合作项目为万级人民币的战略合作协议
微观纪元	2022 年	提供基于量子计算的算法应用软件和行业解决方案, 重点服务于药物发现和新材料设计领域	埃格林医药公司借助微观纪元平台, 经过近 4 个月设计出 19 个全新的化合分子, 高效推进神经氨酸酶抑制剂的研发, 大幅降低客户药物发现阶段的成本, 显著缩短了研发应用案例周期	当前已完成三轮融资
深度原理	2022 年	为企业与科研用户等提供材料大数据咨询、人工智能分析、新材料定制开发等服务	与杉海创新联合开发 Synthrix JIMU 平台, 以 AI 引擎为核心, 在化学、材料学和工程学领域, 实现超分子材料设计-模拟-合成全链路	完成 4 轮融资, 最新 Pre-A 轮融资达到亿级

来源：《中国人工智能医疗白皮书》，亿欧数据，药智新闻，PR Newswire，Tracxn，公司官网，企查查，36 氪，投资界，InnoHere 国金证券研究所

内部研发模式下，AI 公司本质上像数字化的生物制药厂或材料厂，依靠所创造的候选成果来融资或合作。例如，美国 Cyclica、Atomwise 等 AI 药物公司主要依靠开发自有药物



管线，再以联合开发或上市等方式变现。大公司收购案例也较为典型，如 BioNTech 2023 年收购 BERG 全部资产，这种并购即是成熟公司直接买断 AI 能力和技术，反映出 AI4Science 公司可通过被收购退出。

图表5：内部研发模式企业

企业	成立时间	业务范围	项目案例	收益情况
BERG	2006	通过其 Interrogative Biology® 平台颠覆并重新定义药物发现、研发方法。该平台应用算法和基于概率的人工智能分析大量患者的基因型、表型和其他特征，从而识别疗法和生物标记物	研制 BPM31510 新型癌症治疗化合物，这种治疗化合物是由 Berg Interrogative Biology™ 平台发现和开发的系列内源性发生候选药物中的第一种产品	2023 年 BPG Bio 收购 BERG 全部资产
NURITAS	2014	基于专有 AI 平台 Nuritas Magnifier，帮助识别、解锁、进行临床测试并申请专利肽	向企业客户（玛氏、雀巢等）供应专利肽成分（PeptiStrong®等）	累计获得融资 1.17 亿美元

来源：BPG Bio, Pitch Book, 公司官网, RInstitute, 国金证券研究所

合作研发模式通常可以快速启动并降低初期成本而自主研发模式前期投入巨大。当前各国政府和机构都在非常积极推动 AI 科研合作，例如欧盟将 AI 视为加速解决气候、健康等重大问题的关键工具；美国发布“FASST”计划，期望建立世界级的超算设施和国家实验室网络，加速构建集成科学 AI 系统，可见 AI4S 极高的优先级和紧迫性。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），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。

图表6：未来大型机构主要采用混合模式，而中小企业将以合作研究模式为主

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

来源：国金证券研究所

1.3、国内 AI 发展进一步向 AI+应用落地，大型企业已经开始思索先期布局

在 AI 发展布局前期，我国的政策更多以大框架、大构想为主要的方向指引。我国 AI 政策呈现体系化、自上而下的特点，通过国家层面的统一规划和专项部署，整合全国的算力、数据和人才资源，以“集中力量办大事”的模式，在选定的关键领域实现快速突破。政策执行力强，目标明确，出台政策后相关领域会有快速突破。

图表7：中国 AI4S 相关政策与提议

政策/倡议	发布机构	发布时间	主要内容	分析
《新一代人工智能发展规划》	国务院	2017.7.20	这是中国人工智能发展的纲领性文件，提出了“三步走”战略目标。到 2025 年人工智能基础理论实现重大突破；2030 年人工智能理论、技术与应用总体达到世界先进水平	奠基性政策：该规划是后续所有 AI 相关政策的源头，确立了将人工智能提升至国家战略



政策/倡议	发布机构	发布时间	主要内容	分析
			界领先水平	高度的地位，其对基础研究的重视是 AI4S 发展的先决条件
《“十四五”国家信息化规划》及《“十四五”数字经济发展规划》	中央网络安全和信息化委员会、国务院	2021-2022	这两份规划强调了算力基础设施（如超算中心）的建设和数据要素市场的培育，这些都是 AI4S 发展不可或缺的“土壤”和“燃料”	基础设施支撑：AI4S 的实现高度依赖于强大的算力和海量的优质数据。这些规划为 AI4S 提供了国家层面的基础设施和资源保障
《生成式人工智能服务管理暂行办法》	国家网信办、国家发改委、教育部、科技部等七部门	2023. 5	该办法旨在规范生成式 AI 技术的发展和應用。虽然主要面向公众服务，制定数据合规、算法透明度、内容标识和安全评估的要求，为 AI4S 研究中使用的模型和平台提供了重要的合规框架和伦理指引	治理与规范：间接影响 AI4S。科学研究同样需要遵循数据安全和伦理规范，该办法为 AI4S 的健康发展提供了“安全护栏”，确保技术在可控、可信的轨道上前进
《科技伦理审查办法（试行）》及《关于加强科技伦理治理的意见》	多部门联合发布	2023	建立和完善科技伦理审查和监管框架。要求在人工智能等前沿领域的研究与应用中，必须进行伦理风险评估和审查	伦理先行：与上述《办法》共同构成了 AI4S 发展的伦理和治理基础，体现了中国在推动技术创新的同时，高度重视其潜在的社会和伦理风险
“人工智能驱动的科学研究”专项部署工作	科技部、国家自然科学基金委员会	2023. 3	这是中国首个直接针对 AI4S 的国家级专项部署。旨在推动 AI 与科学研究深度融合，重点布局： 1. 关键领域：聚焦数学、物理、化学等基础学科， 2. 平台建设：发展专用模型和算法平台，推动国家新一代人工智能公共算力开放创新平台建设 3. 范式变革：构建 AI 支撑科研的新模式，加速科学研究范式变革 4. 生态构建：鼓励数据开放，培养跨学科人才，搭建国际交流平台	核心专项：标志着中国 AI4S 政策从宏观战略转向具体实施。其特点是“问题导向”和“体系化布局”，试图通过整合算力、数据、算法和人才资源，形成合力。截至目前，详细的实施细则和 KPI 考核指标尚未公开发布，显示该专项尚处于初期部署和探索阶段
《“数据要素×”三年行动计划（2024—2026年）》	国家数据局	2023. 12	以科学数据助力前沿研究，面向基础学科，提供高质量科学数据资源与知识服务；聚焦生物育种、新材料创制、药物研发等领域，以数智融合加速技术创新和产业升级；探索科研新范式，加速科学研究范式变革	数据专项：目标明确优先解决当前 AI4S 数据层面痛点

来源：国务院、网信办、新华社、国金证券研究所

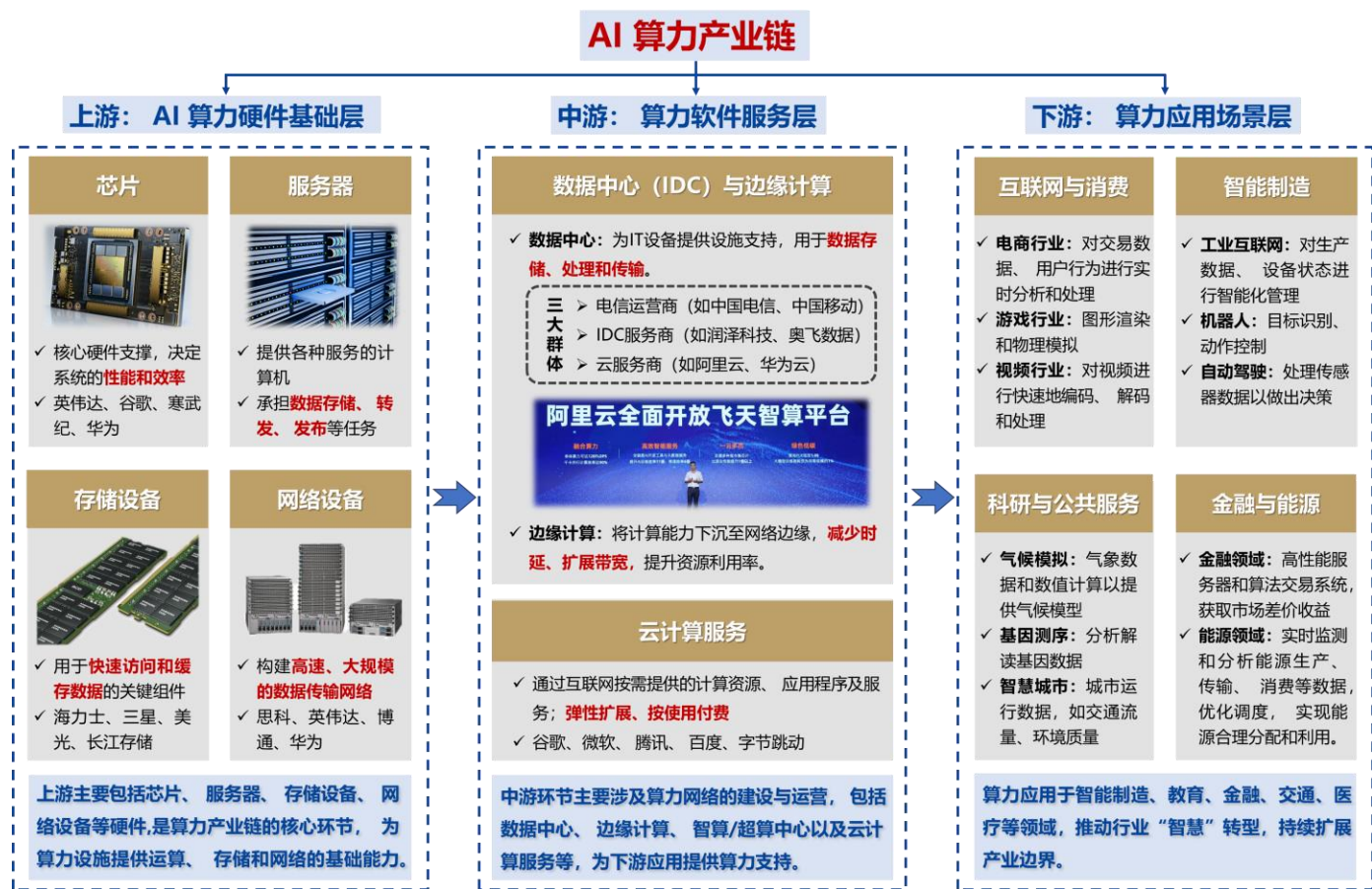
先期的国内政策带动了 AI 产业链上游和中游的崛起。在我国 AI 发展过程中，AI 的产业链获得了极大发展，自上而下的推广，使得 AI 产业链的上游和中游作为软硬件发展基础率先崛起。

在硬件环节，芯片、服务器、存储设备、网络设备行业预期大幅上调，行业产能快速扩充，规划产能持续加码，部分产能释放瓶颈环节带来了历史级别的高度景气，同时也带来高端产品加速研发突破国产化；

在软件环节，多阵营入场角逐，传统的移动运营商、专业的 IDC 服务商以及云服务商等多个阵营持续进行数据中心投资，大规模的互联网大厂也在持续进行云计算服务等业务的布局，包括到新型的创新性平台也在不断切入智能计算中心的布局，目前我国已经有超过 250 个智算中心，分布在不同的行业和区域，充分扩展 AI 的模型应用适配性和计算基础。



图表8: AI 产业链上游和中游环节在大政策支持下率先崛起和发展



来源：上交研究院，国金证券研究所绘制

2025 年以来，政策开始加大对于应用端的推进和指导，AI 产业链的下游的发展环境进一步优化，开始有利于创新企业、龙头企业牵头发展。2025 年 3 月，政府工作报告上提出，2025 年将持续推进“人工智能+”行动，将数字技术与制造优势、市场优势更好结合起来，支持大模型广泛应用，大力发展智能网联新能源汽车、人工智能手机和电脑、智能机器人等新一代智能终端以及智能制造装备。7 月 31 日，国务院常务会议审议通过《关于深入实施“人工智能+”行动的意见》，提出要深入实施“人工智能+”行动，大力推进人工智能规模化商业化应用。

2024 年中国科学院主管、科学出版社主办的商业期刊《互联网周刊》(CIW) 联合德本咨询 (DBC)、中国社会科学院信息化研究中心 (CIS) 发布了《2024 全国“人工智能+”行动创新案例 100》，就已经开始着重指导 AI+ 的落地应用，以先期的案例推动应用层的进一步快速发展。

在大环境下，中国大型化工集团纷纷成立专门的 AI/数智化事业部或研发机构，积极引进行业顶尖人才。政府层面也鼓励企业“引凤筑巢”，通过多元化渠道招揽战略科学家和技术领军人才。例如中国中化发布《中国中化科技人才培养工程实施方案》《中国中化关于加强高层次人才引进工作的指导意见》，明确人才工作的目标。在智联招聘上，我们观察到中国中化旗下的“中化学数智科技有限公司”发布“化工领域人工智能业务专家”岗位，要求应聘者具有谷歌、微软、亚马逊、百度、腾讯等大型科技公司或行业公认企业的 AI 部门工作经历，并担任过核心技术骨干。这一岗位还强调需精通深度学习、大模型等技术，并具备完整的垂直领域 AI 技术研发经验充分体现企业倾向招聘具备国际背景或顶尖企业经验的专家型人才。此外，诸如万华化学、中石油、中石化等龙头也纷纷发布高层次人才需求。

图表9: 头部企业 AI 人才招聘情况

企业	发布时间	人才具体要求	备注
中国中化	-	具备在大型科技公司或行业公认的专业公司（如谷歌、微软、亚马逊、百度、腾讯等）人工智能相关部门的工作经历，主持或作为核心技术骨干完	旗下数智科技有限公司负责招聘，该公司成立于 2022 年 12



企业	发布时间	人才具体要求	备注
		成人工智能项目的实施、调优和部署，具备完整垂直领域人工智能技术研发和配套产品开发经验	月，员工规模 100-299 人
中国石油	2024	精通人工智能技术（特别是大语言模型）的模型理论与应用技术，熟悉云计算、大数据、数字孪生等技术体系。对人工智能技术与流程工业的结合方法有深刻认知	旗下昆仑数智负责招聘。该公司成立于 2020 年，拥有专业技术人才超过 3000 名
万华化学	2024.3	招聘 AI 开发工程师、AI 数据工程师、AI 算法工程师	2024 年公司将管理主题定为“数智化年”，并将 AI 赋能业务作为重点研究课题，旗下智化部积极招聘相关人才
中国石化	2025.7	具有国际知名能源公司或顶尖 AI 实验室 5 年以上研发经验，或主持过国家级 AI/地球物理交叉领域项目，或曾任头部科技企业 AI 算法团队负责人；精通地球物理勘探技术，熟悉油气勘探全流程；掌握深度学习、强化学习、概率图模型等算法，具备独立开发 AI 框架的能力	中石化石油物探技术研究院招聘。该部门主要负责承担国家及中国石化地球物理勘探方面的重大项目和自主技术、软件攻关等

来源：智联招聘，中国石化，中国能源新闻网，科学人才网，校园招聘网，国金证券研究所

二、AI 应用从行业痛点着手，部分赛道有望率先实现突破

在新的趋势兴起过程中，发展和兑现也是有先后顺序的，投入和产出的衡量将是否进行革新的关键决策因素。当然受到不同行业的运行重点、发展模式、成长因素、核心竞争因素等不同，投入和产出的衡量会有明显不同，不同企业的规模、发展陆续、经营资金现状等也会对决策产生明显影响，但往往投资回收期短，或者能够再来“可接受”周期内收益的大幅提升，或者试错成本相对较低，有合理胜率、赔率比的应用往往能够刷新获得尝试应用。

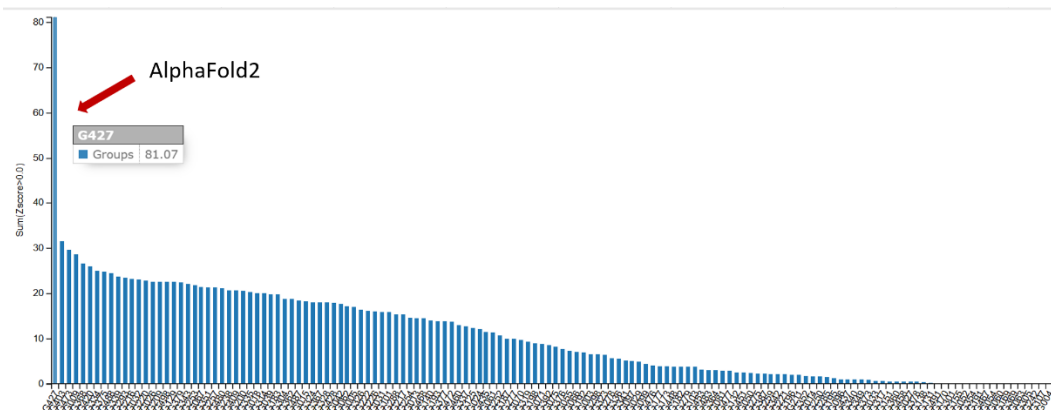
在 AI 发展过程中，能够率先解决行业痛点的应用方向有望获得率先落地。从 AI4S 现阶段的应用情况看，先期的优势主要集中于几大方向：①高效的信息资料摄取，能够全面、实时、快速的获取关联信息，为其他环节提供基础，比如原料市场监管，采购辅助决策；②初级的人工替换或者辅助性的效率提升，能够直接兑现高效降本的经济回报；③借助细分深度模型给与初级预判或者方案，并在使用过程中不断升级和改善，作为辅助工具进行底层工作替代，放大现有生产力的创收能力。

2.1、AI4S 应用以高效为核心驱动，率先对症三大痛点

AI4S 目前已广泛应用于药物研发、生物技术、材料科学、能源与环保等领域。总结他们的共性可以为化工行业的 AI 赋能提供有效参考。典型案例是 AlphaFold 模型预测蛋白质三维结构：在过去几十年里，确定蛋白质的三维结构是一个耗时且昂贵的过程，常用实验技术如核磁共振和冷冻电子显微镜虽然有效，但成本高昂并且解析速度慢，全世界仍然有数以亿计的蛋白质尚未被解析，而 AlphaFold2 较为完美的解决了上述问题，在 2020 年的 14 届蛋白质结构预测挑战赛（CASP14）中 AlphaFold2 以绝对优势 81.07 分打败其他实验室团队（第二名 31 分）。此外，还有 NLP 模型（GPT-4 等）解析海量生物学文献提出新假设、GNoME 模型预测无机晶体结构等。尽管应用场景各异，但其底层技术和方法论展现出高度的共性。



图表10: AlphaFold2 在 CASP14 以绝对优势击败其他实验室团队



来源：CASP14，国金证券研究所

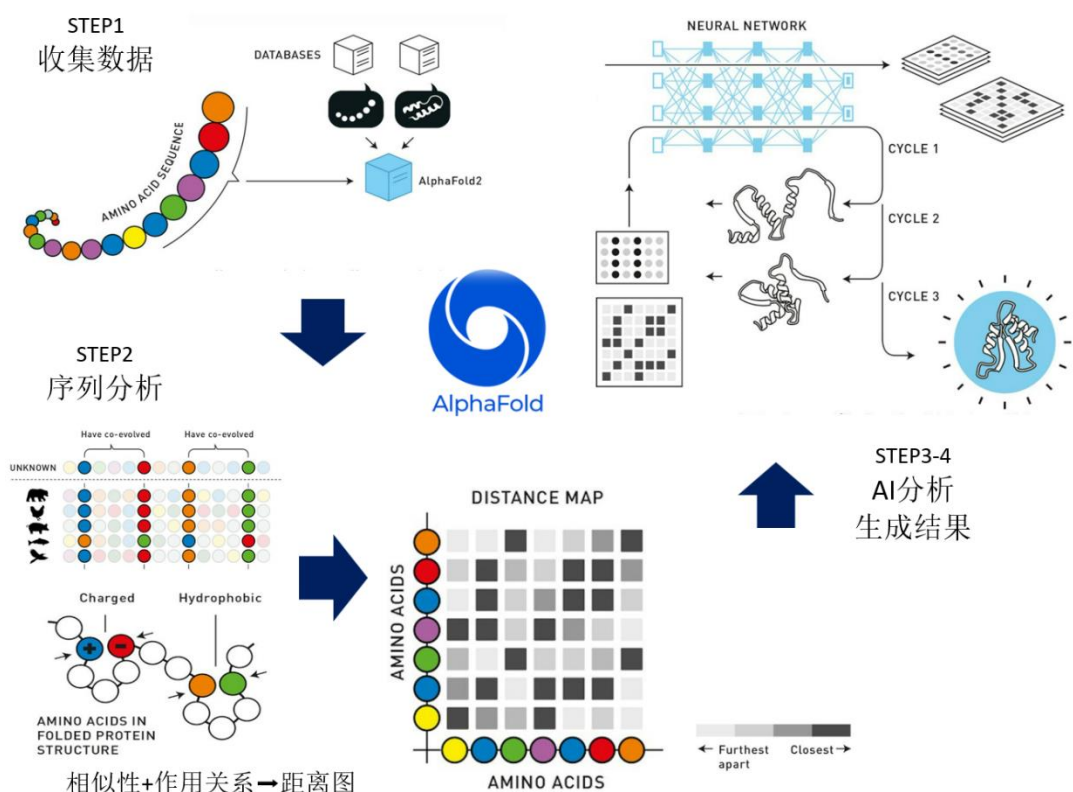
AlphaFold2 工作原理分为四步：①训练用数据库：使用来自 UniRef90、BFD、Uniclust30 和 MGnify 的多序列比对数据，总计约 220 亿条蛋白质序列。②序列分析：分析所有相似的氨基酸序列和可能相互作用的氨基酸，生成氨基酸在结构中的关系图。③AI 分析：使用神经网络识别需要特别关注的重要元素。④生成结果：将所有的氨基酸组合并生成一个假设的蛋白质结构并将假设的结构重复进行上述步骤通过多次循环后得到一个特定的结构。

以 AlphaFold2 为例，我们总结出 AI4S 应用场景的 3 类特点。

1. 长研发周期与高成本：这些领域的研发通常耗时长、耗资高，而 AI 能显著缩短周期。例如深度学习能将蛋白质结构解析从年度缩短到分钟。
2. 数据驱动与大规模计算：AI4S 应用的首要特征是其对海量数据的依赖和处理能力。科学研究本身就是一个产生和利用数据的过程，无论是实验测量、模拟计算还是文献记录。AI 模型，尤其是深度学习模型，擅长从多模态的复杂数据中（如图像、光谱、文本、序列数据）提取深层模式和关联性。
3. 高维度设计空间：这类问题通常具有大量组合可能，传统实验无法逐个验证。AI（尤其是生成式模型和图神经网络）擅长在高维优化空间中搜索最优解。比如在材料设计中，AI 根据成分预测性能并“先验筛选”大量候选。



图表11: AlphaFold2 工作原理分为四步



来源: NATURE, AJEX, 国金证券研究所

2.2、创新是现阶段AI在化工应用的主旋律，关注六个细分方向

(一) 生物发酵行业菌株筛选和流程优化

在发酵行业中，菌种是生产反应的核心，生产原料、生产成本、生产效率、环保危废等系列企业竞争中的核心因素都和菌种高度密切相关。无论是在传统生产中，进行菌种优化，提高效率，降低成本；还是在创新领域，研发生物工艺路径，解决物理、化学工艺难以突破的工艺难点，菌种都是核心关键问题。虽然合成生物获得了较快的发展，但是仍然以归纳以往数据，预判多种可能，不断测试排除为重要路径，即使能够借助高通量工具实现效率的大幅提升，成本的下降，但仍然有大量的环节存在优化效率或者人工智能模拟的空间，比如菌种鉴定、培养基设置等。

传统菌种鉴定方法存在耗时长、准确性不足等问题。在过程控制方面，微生物数量动态调控和风味物质检测仍依赖经验或复杂仪器如色谱联用技术，难以满足工业化生产对实时性和精准性的需求。而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，并通过多参数监测实现发酵过程的动态优化。

微生物发酵法具有来源丰富、条件温和、产品活性高等特点，许多化合物依靠其生产，但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。目前，研究学者已经尝试将人工神经网络与遗传算法用于发酵培养基的优化中，比如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%。



图表12: Eiseul 等用神经网络识别必需食品发酵细菌, 准确率超过了 97%

Classification accuracy of the training set and test set of the machine learning algorithm used to classify the three groups.

Machine Learning Models	Training Set Accuracy	Test Set Accuracy
ANN	0.997	0.978
PCA-KNN	0.954	0.941
SVM-sigmoid	0.973	0.904
SVM-RBF	1	1
Random Forest	0.987	0.975

来源: Eiseul Kim et.al 《Differentiation between Weissella cibaria and Weissella confusa Using Machine-Learning-Combined MALDI-TOF MS》, 国金证券研究所

图表13: 周勇等用人工神经网络与遗传算法优化生物发酵培养基, 产量提升 63.33%

遗传算法 (GA) 对神经网络模型的优化结果

表 3 培养基不同优化方案对辅酶 Q₁₀ 发酵的影响

Table 3 Effect of different optimization methods on CoQ₁₀ fermentation

Item	Optimization methods	Before optimization	Single-factor optimization	Uniform design optimization	ANN-GA optimization
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
Yield of CoQ ₁₀ (mg/L)	P-value	/	/	249	243
	R-value	150	211	221	245
	Error rate/%	/	/	11.24	0.82

Note: P-value; Predicted value; R-value; Replication Experiment value

来源: 周勇等《人工神经网络与遗传算法耦合优化辅酶发酵培养基》, 国金证券研究所

(二) 新型材料的应用和适配

目前新型材料研究热点集中在“高性能/多功能材料”与“绿色可持续材料”两大类, 存在三个共同挑战:

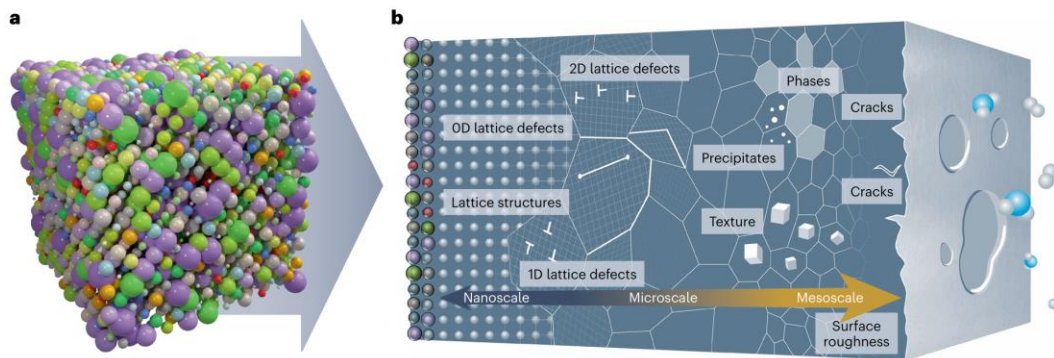
- ①搜索空间极其庞大, 一个新聚合物或复合物可以有数以万计的单体/组分和制备工艺组合, 传统人工作业无法逐一试验;
- ②多目标优化难度高, 新材料需同时满足强度、韧性、导电性、热稳定性等多重性能, 且往往存在相互矛盾, 需要在结构-性能-工艺的高维空间权衡取舍;
- ③合成路线复杂, 很多创新材料(如特殊纳米结构或金属有机框架)合成路径尚不清晰, 传统经验式优化既耗时又难以兼顾经济与环保要求。

而借助 AI 学习算法, 构建材料性能预测模型, 通过对海量材料数据(包括成分、结构、制备工艺等)的学习, 模型能够快速预测新材料的性能, 如强度、导电性、耐腐蚀性等。如, 利用深度学习算法对材料晶体结构数据进行分析, 预测材料在不同条件下的力学性能。同时, 结合遗传算法等优化技术, 对材料成分和制备工艺进行智能优化。在新材料研发过程中, 通过模拟不同成分和工艺组合, 快速筛选出最具潜力的方案, 极大的缩短研发周期:

- ①大规模虚拟筛选与预测: 机器学习模型可通过已有的材料数据库预测新化合物的性质, 将实验筛选转化为计算筛选。先进神经网络和图神经网络能够学习高维结构与性能的映射关系, 在短时间内评估数十万种候选物的物理化学性能, 从而优先确定最有潜力的配方;
- ②生成式逆向设计: AI 可根据目标功能“反向设计”材料结构。生成模型被用来创建满足设定性能指标的新分子或纳米结构。

比如在航空领域, 研究高强度、轻量化材料; 半导体领域, 筛选适合的元素组合和生长条件; 新能源领域, 筛选潜在的电池材料和组合等

图表14: 理解并量化化学结构与性能之间的关联是复合材料核心难点

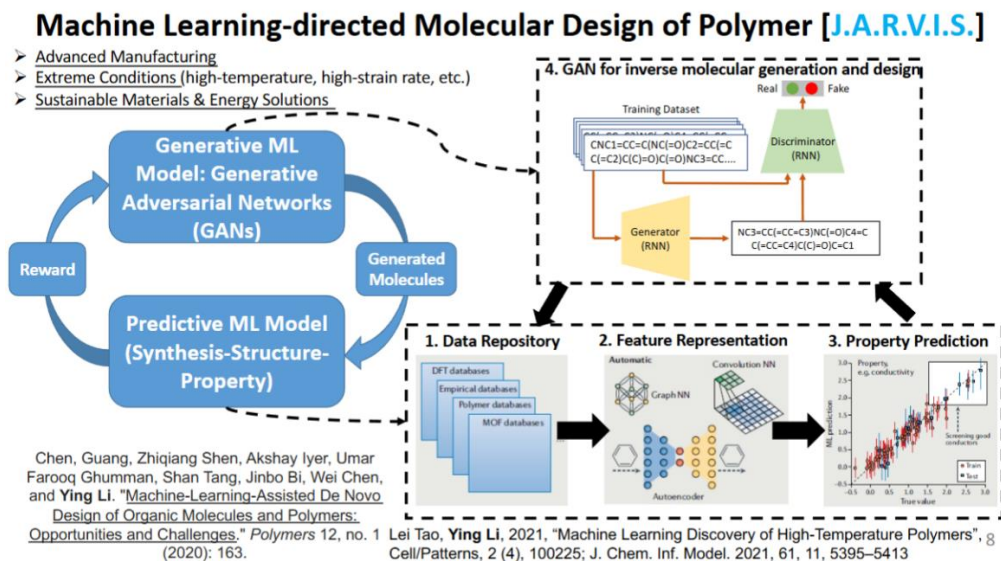


来源: Ierk Raabe et al 《Accelerating the design of compositionally complex materials via physics-informed



artificial intelligence》，国金证券研究所

图表15：利用对抗生成网络结合预测模型实现材料逆向生成



来源：Ying Li. et al 《Machine Learning-Accelerated Molecular Design of Innovative Polymers: Shifting from Thomas Edison to Iron Man》，国金证券研究所

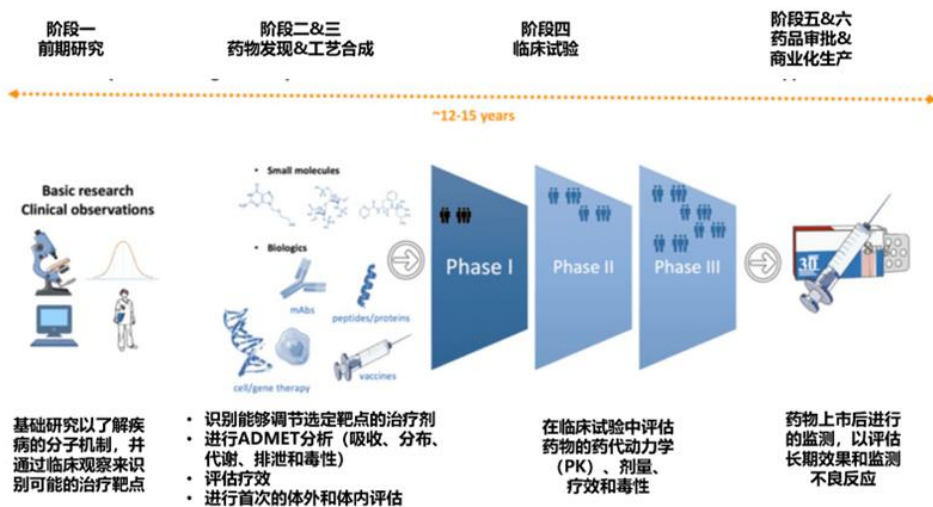
（三）农药创新药等药剂产品的开发

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（创制药）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技术环节。虽然应用领域不同，但其底层研发逻辑和技术体系基本一致。基于此，农药行业可借鉴医药行业从仿制向创新转型的成功经验，特别是在 AI 辅助分子设计和高通量筛选等领域，通过引入先进理念和成熟机制，进一步提升农药研发的创新能力和效率。

具体来讲，医药与农药在作用靶点层面存在高度同源性，这是因为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，从而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，医药领域通过兰尼碱类药物作用于心肌细胞的 RyR 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；乙酰胆碱受体（nAChR）是神经信号传导的重要靶点，加兰他敏通过调节 nAChR 治疗阿尔茨海默病，吡虫啉等新烟碱类农药则靶向昆虫 nAChR 致其麻痹。靶标的相似性推动了两行业研发策略的相似性。

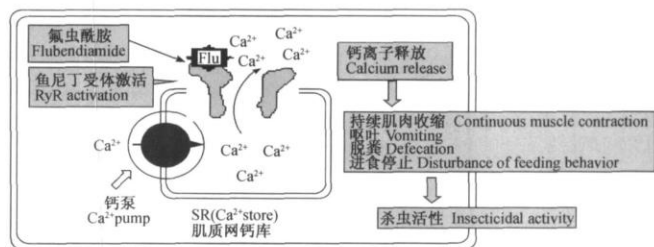


图表16：农药和医药具备相似的药物研发流程



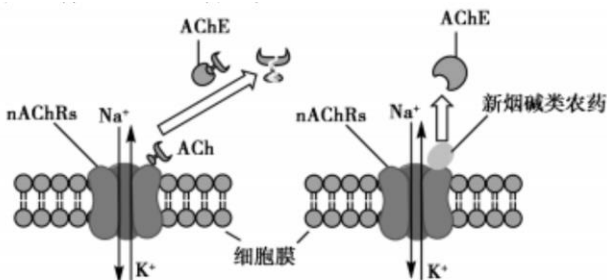
来源：Atlantis Bioscience，国金证券研究所

图表17：氟虫酰胺作用于鱼尼丁受体的过程示意图



来源：董卫莉等《昆虫鱼尼丁受体及其为靶标的杀虫剂的研究进展》、国金证券研究所

图表18：新烟碱类农药作用机制



来源：李昌兴等《新烟碱类杀虫剂的研究与开发进展》、国金证券研究所

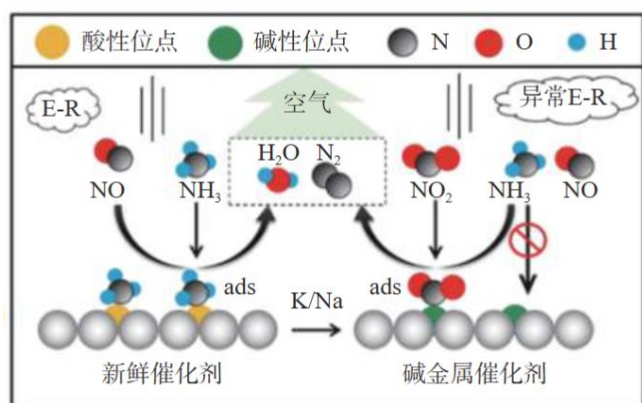
（四）辅材催化剂、添加剂等的升级优化及后续产物分离

催化剂在化工行业中具有不可替代的重要作用，是现代化工生产的核心技术之一，在连续运行的反应器中，催化剂是整个过程的“心脏”，其性能直接决定了反应的效率、选择性和经济性。然而，催化剂在严苛的连续反应条件下会不可避免地发生失活，这是制约装置长周期稳定运行的首要难题。首先，化学中毒是主要原因之一，例如，烟气脱硝（SCR）催化剂中的碱金属会破坏其酸性位点，造成不可逆失活。其次，积炭或焦化是高温烃类反应中普遍存在的失活途径，沉积的碳会覆盖活性位点，堵塞孔道。其他失活机制还包括水热老化、高温导致的活性组分烧结、流体冲刷造成的机械磨损、活性物种的浸出和脱落等。因此，研发人员需要综合考虑多维度数据才能有效解决失活难题，该特点符合 AI4S 应用特点。

反应后的产物往往是包含目标产物、副产物、未反应原料和催化剂的复杂多组分混合物。将其高效、低成本地分离提纯，是决定整个工艺链经济性的关键环节，其能耗通常占石化工业总能耗的相当大部分，为了克服传统技术的弊端，以膜分离、吸附分离、先进结晶等为代表的新兴分离技术应运而生。吸附剂/晶种的开发与规模化生产成本高昂，吸附/解吸或结晶/溶解循环的能耗与效率，以及设备复杂、操作周期长等问题，限制了其在超大规模石化生产中的广泛应用。而 AI 通过分析海量化学结构与性能数据，可预测新型吸附材料效果和成本，将传统“试错法”研发周期从数年缩短至数月。

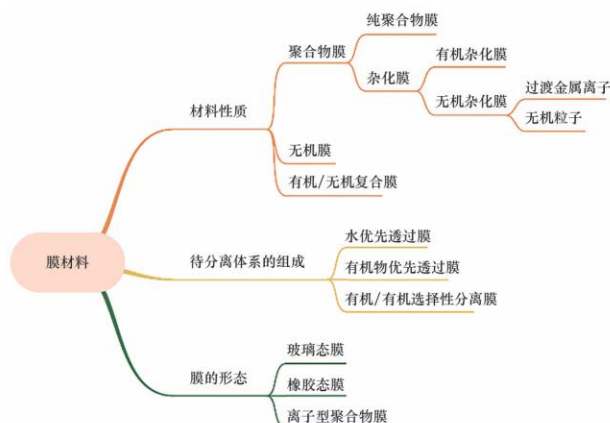


图表19: 碱中毒导致催化剂失活



来源: 靳嘉浩等《催化剂的失活机理及预防措施进展》, 国金证券研究所

图表20: 吸附膜材料种类众多



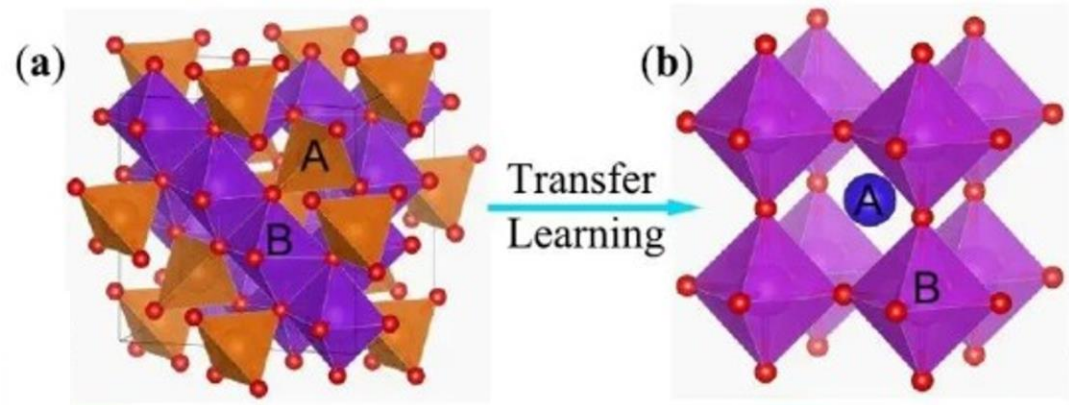
来源: 何燎等《石油烃中芳烃分离技术研究进展》, 国金证券研究所

(五) 材料的微观结构等升级、改造

由于材料组分和结构的巨大潜在组合, 研究人员系统地探索材料空间面临成本的巨大挑战。在目标材料数据有限的情况下, 从其他材料的大型已知数据集中进行跨晶体结构的高效迁移机器学习, 成为智能材料设计中的重要实用策略。

来自上海大学材料基因组工程研究院的刘轶教授和冯凌燕教授团队, 提出了一种基于大规模尖晶石氧化物计算数据集的深度迁移学习方法, 用于预测热力学稳定的钙钛矿氧化物。他们用 5329 个尖晶石氧化物结构的形成能开发了基于结构信息“中心-环境”(CE) 特征的深度神经网络 (DNN) 源域模型, 然后通过学习 855 个钙钛矿氧化物结构的小数据集对模型参数进行微调, 获得了在钙钛矿氧化物目标域中具有良好可迁移性的迁移学习模型。

图表21: 利用丰富的已知结构数据, 花费较低的额外计算成本即可预测新结构



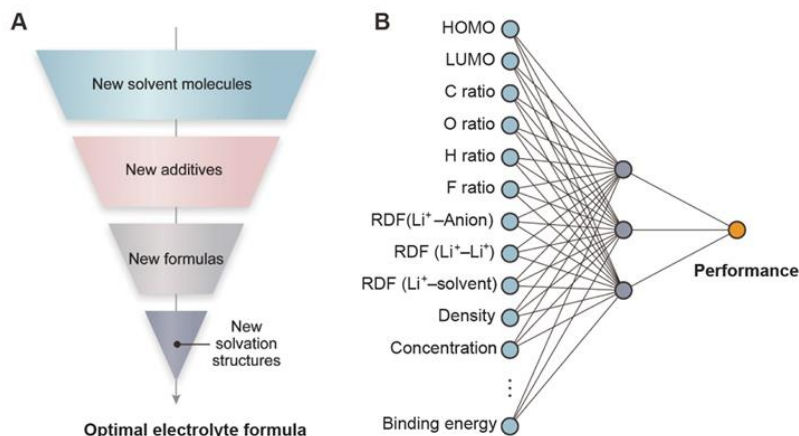
来源: 华算科技, 国金证券研究所

(六) 配方设计、升级和应用

电解液在锂离子电池中起着至关重要的作用, 不仅促进锂离子的传导, 还在正/负极界面处分解形成成分和结构各异的固体电解质界面 (SEI), 这些界面最终影响电池的电压范围和循环稳定性。然而, 电解液配方与电池性能之间的相关性尚未明确, 这给开发更高效的电解液带来了挑战。传统的电解液开发通常是基于试错法, 涉及电解液的制备、对电池进行大量的电化学测试以表征其性能、重复这些步骤以优化配方, 最终获得最优的电解液配方。然而, 这种方法成本高昂且效率低下, 难以精确控制电解液成分, 面临诸多挑战。利用 AI, 通过统计分析大量的数据 (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。



图表22: 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



来源: Yawei Chen et.al 《Artificial intelligence for the understanding of electrolyte chemistry and electrode interface in lithium battery》, 国金证券研究所

2.3、优化生产和资源调配也是AI 将逐步兑现的领域，关注设备升级带来的长期变化

和其他制造业差异相对较大，化工作为材料生产环节，生产涉及的参数相对较多，生产的安全性要求也明显较高，很多生产环节设计到高温、高压、有毒、易爆等危险环境，无论是在材料储备、生产制造、质量检测、检查维修等多个环节都更倾向于对高度智能化替代。

相比于海外企业，国内化工企业的起步时间确实相对较晚，但由于早期的基础相对薄弱，很多细分赛道的生产装置的建设周期横跨了多个阶段(技术引进、本土化改造、工艺升级、规模化放大等)，装置的新老程度明显不一，虽然部分大规模的产品经历了2016年的供给改革，但老旧装置仍有存留，小规模赛道产品的淘汰相对较低。目前看很多10年以上的装置的自动化程度仍然相对较低，虽然部分企业经过自身的技术改造，但仍然有进一步优化升级的空间，有望带动相关的自动化工程设备的需求提升。

(一) 重复环节人工替代或者关键、危险环节检测

大部分化工品类成熟度极高、改进难度大，当前更多的问题主要在于产能过剩和环境指标。国家发改委指出，我国纯碱生产技术已达国际先进水平，多数企业单位能耗已优于先进指标，节能降耗空间非常有限，且在更严环保要求下“领先企业的能耗可能会出现不降反增”的窘境。因此，AI4S 赋能较为有限，未来应用的方向更加偏向于全流程监控和精细化调控。比如，杭州电化集团研发的“AI+机器人”巡检系统在氯碱装置50-60℃高温、有毒环境下工作，“机器人狗”能精准检测约5000根PTFE管线是否断流，检测算法正确率达99.99%，远超人工巡检效率；中控技术为湖北三宁化工的硫酸装置部署了AI系统，通过大模型实时监测生产数据，实现关键指标的超前预警和自动调节建议。

图表23: 机械狗在高位环境中辅助检测



来源: 自动化网, 国金证券研究所

图表24: 中控技术为湖北三宁部署AI 监测系统



来源: 中控技术官网、国金证券研究所



(二)、生产过程的智能优化

由于多数大宗化工产品的生产同质化相对较高，产品难以形成销售溢价，因而各个生产环节对于成本的影响都极为重要，是企业利润兑现的关键。从原材料配比消耗、生产过程的能源利用、生产的连续和稳定性、生产装置的安全性、产品的转化率和副产物的利用、下游产品的设计和匹配等，都对生产成本产生极大影响。

虽然在部分头部企业生产过程中，已经实现了一定的自动化控制和远程监控，但借助于 AI 的模型优化不仅可以实现实时监管，还能有智能化的参数调整，未来运行的提前预判等。通过传感器实时采集材料生产过程中的数据，如温度、压力、流速等形成个体运行的数据基础，通过数据分析和机器学习算法，构建生产过程模型，实现对生产过程的实时监测和智能控制。如，基于神经网络算法的控制系统，根据实时生产数据调整设备参数，确保生产过程稳定，产品质量一致。同时，运用预测性维护技术，通过对设备运行数据的分析，提前预测设备故障，安排维护计划，避免生产中断。

同时在质量控制方面，通过实时监测和精准控制，AI 系统能够对生产过程中的每一个环节进行精细化控制，确保产品质量的一致性，生产的连续稳定，能够避免因为频繁调整修正带来的物料和能源损耗。

(三)、给予充分、实时市场信息进行的资源调配

虽然对于多数大宗产品具有同质化的属性，但仍然有相当多的领域具有特殊的行业运行模式，比如原材料的渠道布局，产品的市场拓展和销售等。比如生物质能源的原材料和产成本的市场对接。不同于化石能源，生物质能源具有区域、气候等区域差异，在进行原材料储备过程中需要充分了解供给、空间、库存、竞争对手等多维度信息，在产成品销售过程中，也需要有季节性、区域等产品定价差异，产品库存等压价差异，产品运输等排期差异。在盈利空间并不算非常丰富的产品领域，能够充分结合多维度信息形成资源调配也将明显赋能企业短期生产经营决策，以及未来长期规划避免过度竞争的发展规划。

三、AI4S 多行业有应用空间，但个体差异仍然明显

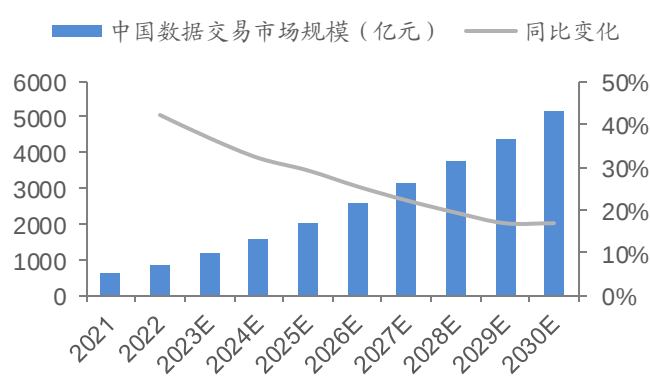
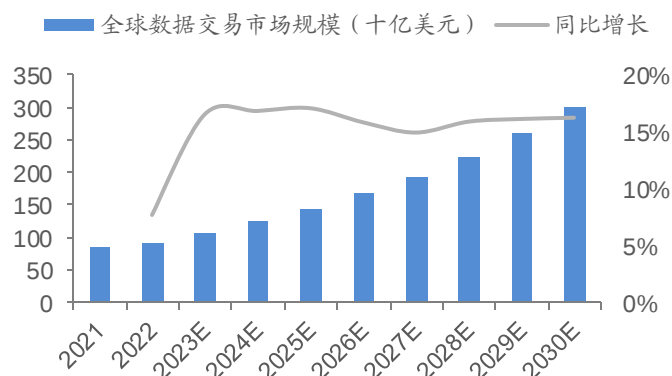
3.1、高质量数据及应用将大幅拉开头部化工企业的差距

伴随 AI 效率的持续提升，过去已经存在的公开数据已经有了充分的学习和利用，AI 的升级利用进入到专业化领域。近年来 AI 的效率在持续提升，已经公开数据的学习已经基本接近尾声，以现有 AI 模型的学习效率，实时的数据生产基本上可以实现实时消化，因而大模型对于公开数据的学习更多体现于数据的高质量标注和有效的解读。可以说公开数据的噪音过多，且不说高质量数据，单就真实数据的占比就相对较低，伴随时间的推演，能够公开可获得的数据构建的模型差异并不会拉开过大，无非是通过时间进行进一步的优化。

高质量数据的价值在持续凸显。由于公开数据的真实性较难判断，如果没有持续对模型进行修正，和多层逻辑设立，很容易产生 AI 幻觉。且进入更为专业的领域，大模型的适配性就有所下降，专业的应用模型需要更为专业模型修正和更为详细的数据输入，公开可获得性相对较低，很多数据的累积更是头部企业或者头部研究院所的核心竞争力，因而能够积累、处理、使用高质量数据成为 AI 在专业应用领域的重要基础和差异点。根据《中国数据交易市场研究分析报告》，2030 年，全球数据交易市场规模将达到 3000 亿美元，是 2022 年的 3.3 倍，中国数据交易市场规模将达到 5000 亿元以上，是 2022 年的 5.9 倍。

图表25：全球数据交易市场规模 30 年将达 3000 亿美元

图表26：中国数据交易市场规模 30 年将达 5000 亿元





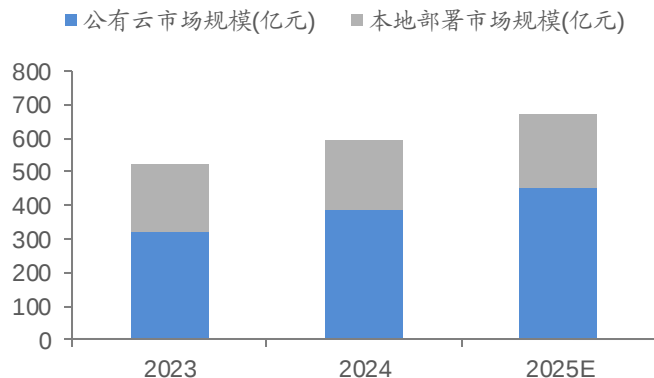
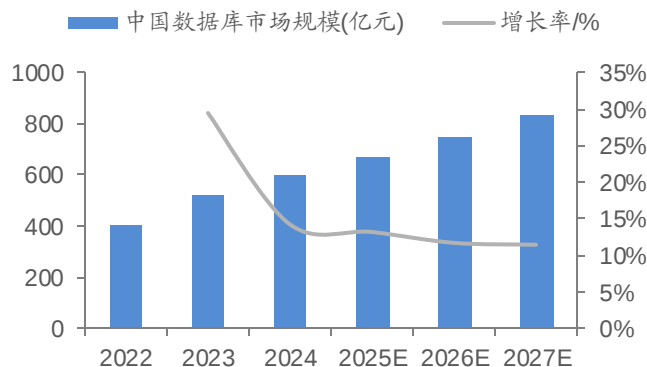
来源：《中国数据交易市场研究分析报告》，国金证券研究所

来源：《中国数据交易市场研究分析报告》，国金证券研究所

作为多数 AI 应用落地的底层基础，专业数据库成为重要的落地资源，我国虽然具有非常强大制造能力，但受制于历史积淀和过程认知的不足，我国的数据积累仍有较大差距。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，约占全球的 7.3%。放在化工行业内，中国化工市场占全球市场的 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%的数据库规模占比明显凸显了我国数据储备的严重不足。

图表27：中国数据库规模持续提升（亿元）

图表28：数据库的云部署目前是大方向

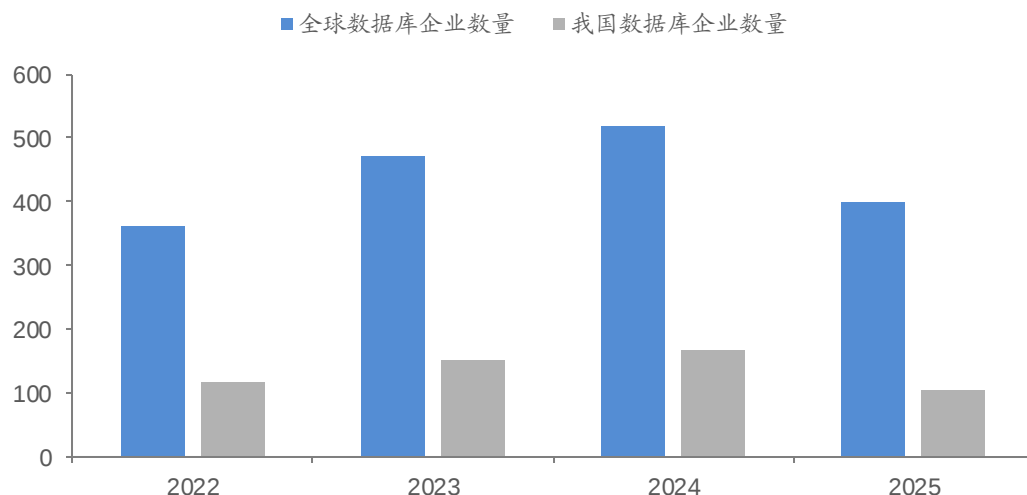


来源：CCSA，国金证券研究所

来源：CCSA，国金证券研究所

经过多年的野蛮生长，数据行业的发展更多向头部集中，质量的作用进一步凸显。而进入 2025 年，无论全球还是国内数据库企业数量都进入到明显的下行阶段，逆转了前期持续上行的趋势，2025 年，我国数据库企业的数量由 2024 年的 167 家，下行至 103 家，数据的简单堆积已经不能满足现阶段数据的要求，数据质量成为关注重点，因而高质量数据也成为细分领域精细化模型的关键资源。

图表29：数据库的发展由野蛮生长进入质量要求阶段



来源：CCSA，国金证券研究所

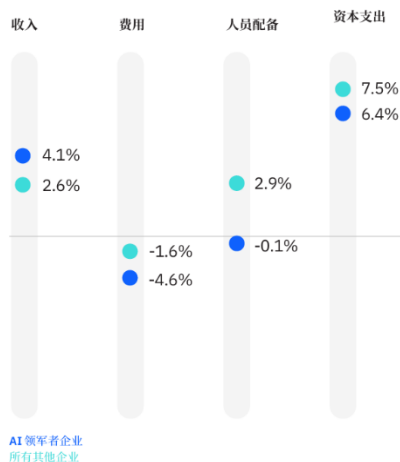
根据 IBM 数据，化工企业中，AI 领军者企业的 AI 投资回报率更高，平均达到 39%，而其他企业仅为 25%，但这两组企业在 AI 方面的支出基本相同，领军者企业每 10 亿美元收入中有 490 万美元用于 AI 投资，其他企业则为 440 万美元。与同行相比，AI 领军者企业已经能够借助 AI 计划进一步增加收入、降低支出、维持人员配置以及减少资本开支。假设同样是市值 50 亿美元、利润率 10%的企业，AI 领军者企业的利润平均要比同行高出 2 亿美元。

AI 的价值取决于企业利用数据的能力。根据 IBM 数据，化工企业中，97%的 AI 领军者企业建立了数据驱动型文化，相比之下，只有 59%的同行做到这一点。降低数据结构复杂度成为是应用 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。

图表30: AI 投资的价值



来源: IBM 商业价值研究院, 国金证券研究所

注: 该数据为问卷调查数据, IBM 采访全球 400 位化工企业高层得出。问题为“贵组织过去三年中的 AI 投资如何影响以下方面?” 百分比代表按照五分制选择 4 分或 5 分的受访者数量

图表31: AI 领军者企业对数据源的利用率更高



来源: IBM 商业价值研究院, 国金证券研究所

注: 该数据为问卷调查数据, IBM 采访全球 382-399 位化工企业高层得出。问题为“贵组织在多大程度上使用以下数据源来发挥 AI 的作用?” 百分比代表按照五分制选择 4 分或 5 分的受访者数量

在化工领域看, 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, 且由于很多企业的成立时间过短, 或者对数据重视不足, 或者装置先进向不够, 企业自身积累的数据极为有限, 能够进行自身赋能的相对较少。而能够加成研发和优化的高质量数据一般来看具有几个获得来源:

- ①规范有效的数据积累 (全面、充分标准、维度设立合理), 而非柜子里堆叠的历史文件;
- ②外部和高校或者研究院所合作的数据基础;
- ③通过高效的实验装置进行的多维度数据积累;
- ④通过收并购实现管控权的全面承接, 能够继承标的企业的数据资产。

因而从数据的角度看, 历史管理相对规范的头部企业、有先期的战略规划能够有效外部合作的细分龙头、能够结合“机器人”和“智算平台”的生产企业有望可以获得持续 AI 竞争力。

3.2、AI 适配性发展和高效的执行力也将是企业 AI 升级的重心

大模型并不完美适配化工精细度高, 场景专业化程度深的细分领域, 需根据自身的应用场景选择适配的专业模型。

- 化工不同于其他制造业赛道, 产品生产种类明显较多, 生产工艺流程有明显差异, 大模型在满足多领域、多产品的共同的情况下就会降低单一赛道的专业度和准确性。
- 且从应用和兑现情况看, 产品研发还仅是第一步, 能够生产工艺合理设计、规模化平稳安全生产、成本优势和经济性兑现、产品应用推广和场景适配等需要传统企业的落地和执行, 因而及时有 AI4S 的赋能加持, 化工企业也较难大规模横跨其他赛道, 脱离自身赛道和基础。而即使是化工的龙头企业基本也分属于不同赛道, 除少数具有平台性质的央企外, 多数企业并不需要进行多链条适配。
- 从投资的角度看, 专业模型的选择和训练的投入成本和时间周期和大模型远远不可比, 一般生产企业难以承当长周期的投资时间和高强度的资金要求, 在模型落地后, 也难以通过合理的商业模式兑现收益。

AI4S 的应用会对部分职位及运行路径产生明显影响, 推行起来不仅在资金、人才、资源等方面具有要求, 更是可能触及现有部分岗位和管理设置, 没有办法一直贯彻下去的 AI 策略反而不一定能够形成额外赋能, 反而使前期的投入成本变成沉默成本。

- 化工流程涉及复杂的物理化学机理和严格的法规要求, 普通的通用 AI 模型往往难以适配。这些基于公共数据训练的模型难以理解化工过程的专业细节和特殊流程, 如安



全合规检查或复杂配方属性。MIT 研究发现，借助 AI 完成其能力之外的工作反而会使工人绩效下降 19%。因此，若不使用针对化工设计的“垂直 AI”方案，模型很难准确处理行业专有知识。缺乏行业上下文的通用 AI 平台往往无法捕捉化工装置的多变量动态，而需要预置化工场景知识才能提高准确度。

- 人工智能系统的性能取决于其所依赖的数据。化工行业依赖非结构化数据（分散在 PDF 文件、遗留系统和电子邮件中），一方面数据整理需要较长时间，且有大量不规范、缺失、遗漏数据；另一方面，在数据整理过程中，仍然可能出现维度缺失，标注失误等问题，可能导致工作重复繁杂；如果统计失误，数据质量低下或缺乏集中化可能会导致“幻觉”，即人工智能生成看似合理但实际错误的输出。
- 引入人工智能系统不仅仅是技术上的转变，更是文化上的转变。员工的抵制，尤其是在数据驱动型岗位上的抵制，可能会减缓其采用速度。如果没有适当的模型训练和使用该工具的主题专家的支持，AI 工具可能无法无缝集成到现有的工作流程中。

图表32: 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



来源：Microsoft，国金证券研究所

注：微软以企业管理层问卷调查形式获得该数据，样本量 500

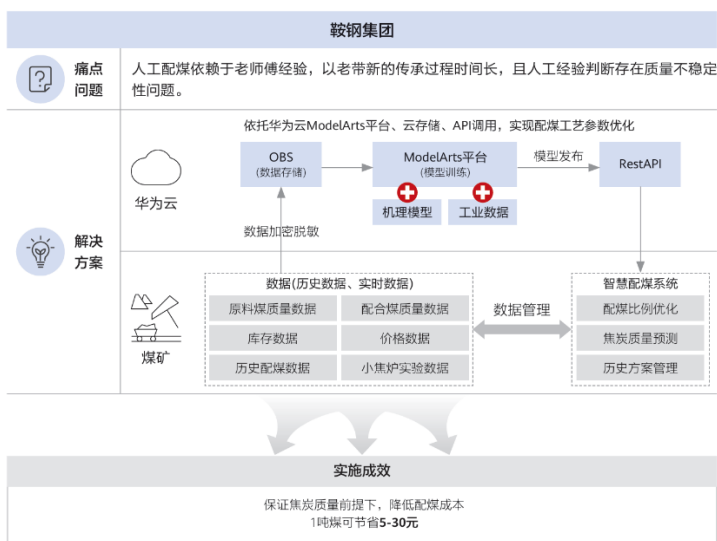
3.3、AI 布局，企业仍然需要硬件同步跟进

高性能算力设施：AI 模型训练与推理需要大量计算资源。参考国外科技巨头为了应对大规模模型训练和推理需求，购置的大量计算资源：Twitter 购买了约 10,000 个 GPU，微软与 OpenAI 合作的 AI 超级计算机配备了 285,000 个 CPU 和 10,000 个 GPU。化工企业可能需配置类似规模的计算资源，甚至采用 FPGA/ASIC 等专用 AI 芯片来提升运算能力。

数据存储与传输基础设施：AI 系统依赖海量数据，需高速采集与存储。企业通常要建设或租用数据中心，配置高速存储阵列和大容量数据库服务器。同时必须有高速网络支持，包括内部光纤网络、工业级以太网交换机以及 5G/工业物联网通信等，以保证从工艺控制系统到算力中心的数据实时传输。



图表33：鞍钢集团依靠华为云储存和算力平台降低配煤成本



来源：华为《工业数字化-智能化 2030》，国金证券研究所

现场采集与感知设备：化工生产依赖大量现场数据。部署 AI 前置条件是布设智能传感器和采集终端：如压力传感器、温度计、流量计、成分分析仪、PH/ORP 电极、湿度监测等各类传感器，它们将过程参数实时数字化。部分场景甚至需要嵌入式 AI 芯片的边缘服务器来预处理数据。此外，为了实现质量检测或安全监测等应用，还可能增配工业摄像头、红外扫描仪或无人机等硬件，用于采集视觉或环境数据。

辅助设施与安全设计：AI 硬件上线还需相应的配套设施保障：如专门的设计用于 AI 算力的机房架构，如带有严格温度湿度控制、冗余供电和防火防爆措施，以及网络安全硬件，如工业防火墙、VPN 网关。遇化工特有环境，对设备本身也可能有额外要求，如防腐蚀外壳、防燃料浓度防护等。

图表34：煤矿智能化解决方案架构



来源：华为《工业数字化-智能化 2030》，国金证券研究所

四、投资建议

AI 垂类应用正加速向化工全链条渗透：设备端聚焦“AI+机器人”高危巡检；研发端看好“AI+自动化实验”驱动分子发现及工艺优化；产品端关注 AI 辅助配方升级与新材料迭代。建议关注晶泰控股、中控技术、志特新材等。

4.1、晶泰科技

全球 AI 制药与材料科学领军者。晶泰科技作为数字化、智能化药物研发的先行者，以高



度并行的人工智能与量子物理算法结合平台定制的跨云超算，已在药物发现、药物晶型研究领域累计加速 100 多条新药管线的 500 多个药物研发项目，累计使用云超算 5 亿核时。全球排名前 20 的创新药企中，有一半为晶泰科技的客户和合作伙伴。目前，公司正着力打造以 AI 驱动的智能药物研发新基建，以更加可靠、完善的解决方案，广泛赋能药物创新，助力新药研发提速增效。《麻省理工科技评论》评论晶泰“掌握全球最高准确度的工业级别晶型预测算法”，将其纳入“50 Smartest Companies”榜单，同期上榜的还有腾讯、百度、京东、华为、阿里云等企业。

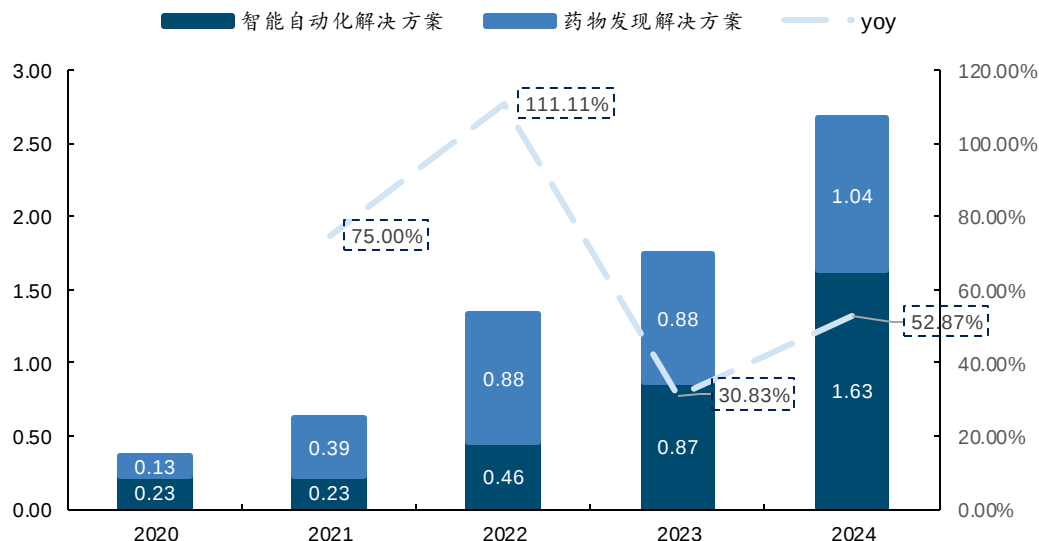
图表35：机器人实验室产生大数据训练领域 AI 模型，自主完成反应预测与实验设计



来源：晶泰科技官网，国金证券研究所

晶泰科技提供独立的解决方案或服务，包括智能机器人解决方案和药物发现解决方案。2024 年通用大模型及 AI Agent 取得突破性进展，且 AI 在医疗等领域实现商业化，标志着 AI 应用正踏入新的发展阶段。但在垂直领域的 AI 应用里，由于跨领域的有效数据相对有限且数据噪声广泛存在，通用大模型在细分领域的表现相对受限，如果要重塑药物及新材料研发流程，以“高质量数据驱动”为核心的垂直领域 AI for Science 大模型不可或缺。2020 年以来，公司业务处于高速发展阶段，4 年平均增速为 67.45%。2024 年营业收入 2.66 亿元，同比增长 52.87%。

图表36：晶泰科技分业务收入（亿元）



来源：iFinD，国金证券研究所

4.2、中控技术

中控技术是工业自动化控制领域的国内龙头，专注于流程工业（如化工、石化、建材等）的自动化、数字化和智能化解决方案。公司核心产品包括集散控制系统（DCS）、安全仪表系统（SIS）、工业软件（如 i-OMC）等。根据睿工业统计，2024 年度公司 DCS 市场占有率达到 40.4%，连续 14 年蝉联国内第一，其中化工领域 DCS 的市场占有率达到 63.2%，



石化领域 DCS 的市场占有率达到 56.2%，公司在化工、石化、建材、造纸四大行业 DCS 市场占有率均排名第一。公司 SIS 国内市场占有率 31.2%，连续三年蝉联国内 SIS 市场占有率第一名。AI 方面，公司 2024 年取得了自动化控制及工业 AI 领域的重大突破，推出了全球首款 UCS 通用控制系统和 TPT 时序工业大模型两款划时代的创新产品。

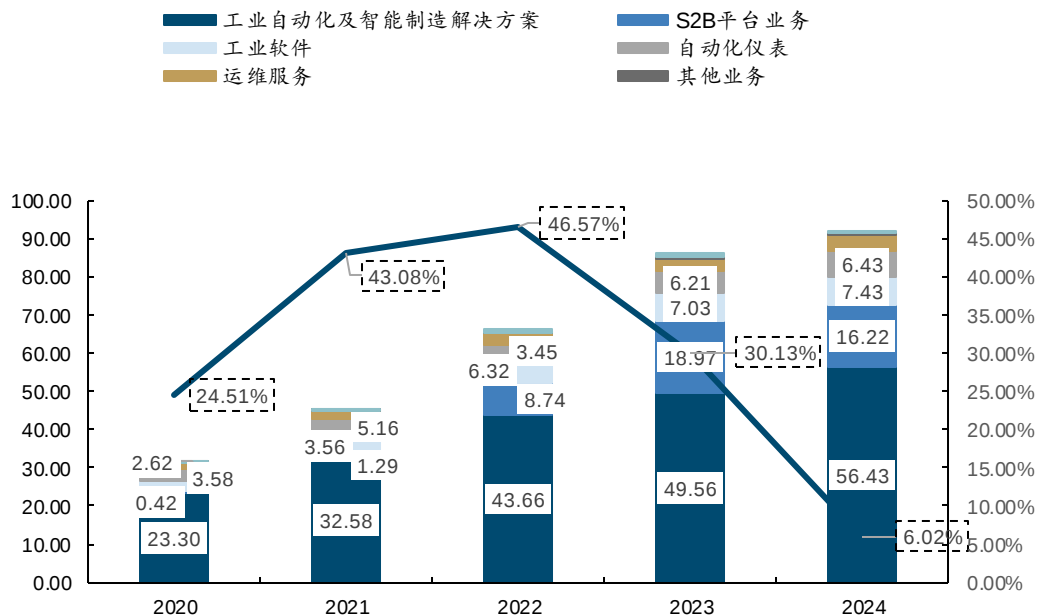
图表37：中控技术时序大模型 TPT



来源：公司年报，国金证券研究所

公司拥有长周期数据积累，依托广泛的用户基础，以及累计运行在 10 万套工业控制系统上超过 100EB 的庞大工业数据量，成为拥有流程工业各细分领域数据最为丰富的工业实时数据公司。营收方面，2024 年公司营业收入 91.39 亿元，同比增长 6.02%，工业自动化及智能制造解决方案收入为 56.43 亿元，占主营业务收入的比例为 62.11%，是公司主要收入来源。

图表38：中控技术分业务收入（亿元）



来源：iFinD，国金证券研究所

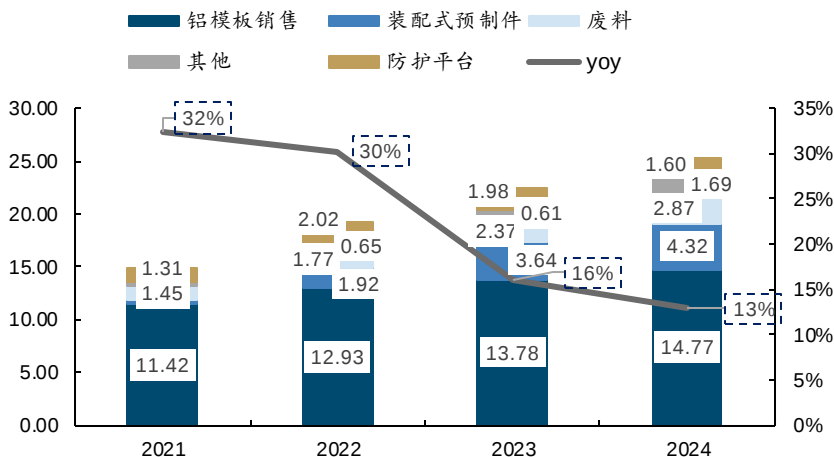
4.3、志特新材

积极布局 AIS4 领域。志特新材于 2025 年 3 月携手量子科技长三角产业创新中心、微观纪元签订了《战略合作协议》，打造“量子+AI”材料研发新范式。三方为推动人工智能与量子技术在新材料领域的产业应用和落地，基于各自技术、产业及资源等优势，面向量子科技在新材料领域的产业应用和落地展开合作，成立子公司上海志特纪元新材料。2025 年公司注册控股子公司志特小临，主要负责材料分子结构的智能设计与性能模拟，目前首个



产业化产品是一款超级隔热材料，可用于建筑隔热保温、安全屋防火等领域。营业收入方面，公司 2024 年营业收入 25.26 亿元，同比增长 12.88%，业务包括建筑模架（铝模、钢模等）、装配式建筑（PC、钢结构）和模块化房屋，AI 材料业还未带来业绩增量，我们认为 AIS4 将成为公司未来强有力增长点。

图表39：志特新材分业务收入（亿元）



来源：iFinD，国金证券研究所

五、风险提示

- 1、技术快速迭代导致前期投入沉没成本风险；AI 应用迭代速度极快，若企业算法更新滞后，可能导致前期投入沉没成本。
- 2、商业化验证风险；当前 AI 设计的新材料仍需通过长周期的化工装置验证，若性能不达预期可能引发客户索赔。
- 3、数据合规风险；化工企业工艺数据涉及国家安全，若《数据出境安全管理办法》收紧，可能限制跨国药企/材料公司的 AI 合作项目落地。
- 4、高端人才争夺风险；头部企业可能以高薪资挖角 AI 团队，导致中小服务商核心技术骨干流失，拖累项目交付进度。
- 5、当前 AI4S 标的交易拥挤度较高，存在估值回调风险。



特别声明：

国金证券股份有限公司经中国证券监督管理委员会批准，已具备证券投资咨询业务资格。

本报告版权归“国金证券股份有限公司”（以下简称“国金证券”）所有，未经事先书面授权，任何机构和个人均不得以任何方式对本报告的任何部分制作任何形式的复制、转发、转载、引用、修改、仿制、刊发，或以任何侵犯本公司版权的其他方式使用。经过书面授权的引用、刊发，需注明出处为“国金证券股份有限公司”，且不得对本报告进行任何有悖原意的删节和修改。

本报告的产生基于国金证券及其研究人员认为可信的公开资料或实地调研资料，但国金证券及其研究人员对这些信息的准确性和完整性不作任何保证。本报告反映撰写研究人员的不同设想、见解及分析方法，故本报告所载观点可能与其他类似研究报告的观点及市场实际情况不一致，国金证券不对使用本报告所包含的材料产生的任何直接或间接损失或与此有关的其他任何损失承担任何责任。且本报告中的资料、意见、预测均反映报告初次公开发布时的判断，在不作事先通知的情况下，可能会随时调整，亦可因使用不同假设和标准、采用不同观点和分析方法而与国金证券其它业务部门、单位或附属机构在制作类似的其他材料时所给出的意见不同或者相反。

本报告仅为参考之用，在任何地区均不应被视为买卖任何证券、金融工具的要约或要约邀请。本报告提及的任何证券或金融工具均可能含有重大的风险，可能不易变卖以及不适合所有投资者。本报告所提及的证券或金融工具的价格、价值及收益可能会受汇率影响而波动。过往的业绩并不能代表未来的表现。

客户应当考虑到国金证券存在可能影响本报告客观性的利益冲突，而不应视本报告为作出投资决策的唯一因素。证券研究报告是用于服务具备专业知识的投资者和投资顾问的专业产品，使用时必须经专业人士进行解读。国金证券建议获取报告人员应考虑本报告的任何意见或建议是否符合其特定状况，以及（若有必要）咨询独立投资顾问。报告本身、报告中的信息或所表达意见也不构成投资、法律、会计或税务的最终操作建议，国金证券不就报告中的内容对最终操作建议做出任何担保，在任何时候均不构成对任何人的个人推荐。

在法律允许的情况下，国金证券的关联机构可能会持有报告中涉及的公司所发行的证券并进行交易，并可能为这些公司正在提供或争取提供多种金融服务。

本报告并非意图发送、发布给在当地法律或监管规则下不允许向其发送、发布该研究报告的人员。国金证券并不因收件人收到本报告而视其为国金证券的客户。本报告对于收件人而言属高度机密，只有符合条件的收件人才能使用。根据《证券期货投资者适当性管理办法》，国金证券股份有限公司客户中风险评级高于 C3 级（含 C3 级）的投资者使用；本报告所包含的观点及建议并未考虑个别客户的特殊状况、目标或需要，不应被视为对特定客户关于特定证券或金融工具的建议或策略。对于本报告中提及的任何证券或金融工具，本报告的收件人须保持自身的独立判断。使用国金证券研究报告进行投资，遭受任何损失，国金证券不承担相关法律责任。

若国金证券以外的任何机构或个人发送本报告，则由该机构或个人为此发送行为承担全部责任。本报告不构成国金证券向发送本报告机构或个人的收件人提供投资建议，国金证券不为此承担任何责任。

此报告仅限于中国境内使用。国金证券版权所有，保留一切权利。

上海	北京	深圳
电话：021-80234211	电话：010-85950438	电话：0755-86695353
邮箱：researchsh@gjzq.com.cn	邮箱：researchbj@gjzq.com.cn	邮箱：researchsz@gjzq.com.cn
邮编：201204	邮编：100005	邮编：518000
地址：上海浦东新区芳甸路 1088 号 紫竹国际大厦 5 楼	地址：北京市东城区建国内大街 26 号 新闻大厦 8 层南侧	地址：深圳市福田区金田路 2028 号皇岗商务中心 18 楼 1806



【小程序】
国金证券研究服务



【公众号】
国金证券研究