

三、化工、冶金与材料工程

1 工程研究前沿

1.1 Top 11 工程研究前沿发展态势

化工、冶金与材料工程领域组研判得到的 Top 11 工程研究前沿涉及能源、材料、化学和生物技术学科方向等（见表 1.1.1 和表 1.1.2）。其中，“可再生能源系统”“膜生物反应器及膜污染防控技术”“多孔有机材料在 CO₂ 捕集中的应用”是基于科睿唯安提供的核心论文数聚类得出，另外的 8 个研究前沿为专家提出。

从表 1.1.1 可以看出，“可再生能源系统”和“人工智能设计催化剂”的平均出版年为 2016 年，“膜生物反应器及膜污染防控技术”的平均出版年是 2015 年年底，这 3 个研究领域相对来说是更新兴的方向。尤其是“人工智能设计催化剂”呈现出近年来核心论文增加的趋势（见表 1.1.2），虽然其引用并不高（见表 1.1.1），但仍然说明此研究方向的前沿性。“生物质催化转化”和“多孔有

机材料在 CO₂ 捕集中的应用”篇均被引频次超过 90 次，是更热门的研究方向。

（1）可再生能源系统

可再生能源是指“从持续不断补充的自然过程中得到的能量”。以风能、太阳能、生物质能、水力能、地热能、海洋能为代表的可再生能源系统，是实现清洁、低碳、安全、高效的能源系统的关键。近年来，尽管可再生能源系统发展迅速，但其成本较高、可靠性较差，以及不同系统间协同作用有待加强等问题，仍将是全球能源转型的关键挑战。

目前对可再生能源系统的研究是以能源的高效清洁利用为目标，并期望在生产、运输、分配、转化、存储、消费等全生命周期视角下实现不同种类的可再生能源的最优化协调。总体上，相关研究热点可分为以下 4 类：从宏观层面提出可再生能源系统的发展策略与路径；从微观层面提升可再生能源系统的（经济性、可靠性、有效性等）技术表现；

表 1.1.1 化工、冶金与材料工程领域 Top 11 工程研究前沿

序号	工程研究前沿	核心论文数	被引频次	篇均被引频次	平均出版年
1	可再生能源系统	26	1232	47.38	2016.2
2	高温合金	500	16 602	33.20	2014.6
3	材料生命周期工程	240	18 703	77.93	2014.8
4	人工智能设计催化剂	50	352	7.04	2016.7
5	航天航空用高性能 C/C 复合材料	139	4482	32.24	2014.7
6	膜生物反应器及膜污染防控技术	38	1401	36.87	2015.9
7	生物质催化转化	110	10 116	91.96	2014.3
8	化学生物技术	226	19 594	86.70	2014.4
9	多孔有机材料在 CO ₂ 捕集中的应用	80	7663	95.79	2014.8
10	高性能分离净化吸附-催化材料开发	84	6539	77.85	2014.8
11	温和条件人工固氮	80	4873	60.91	2014.9

表 1.1.2 化工、冶金与材料工程领域 Top 11 工程研究前沿核心论文逐年发表数

序号	工程研究前沿	2013年	2014年	2015年	2016年	2017年	2018年
1	可再生能源系统	1	3	5	4	8	5
2	高温合金	126	115	139	73	38	9
3	材料生命周期工程	57	61	47	42	23	10
4	人工智能设计催化剂	2	4	5	10	10	14
5	航天航空用高性能 C/C 复合材料	36	26	35	33	7	2
6	膜生物反应器及膜污染防控技术	6	4	4	6	8	10
7	生物质催化转化	27	44	26	12	0	1
8	化学生物技术	73	61	43	40	8	1
9	多孔有机材料在 CO ₂ 捕集中的应用	18	22	13	14	12	1
10	高性能分离净化吸附-催化材料开发	14	23	22	15	9	1
11	温和条件人工固氮	21	18	16	5	10	10

从能源生产角度探索不同类型（可再生、传统）能源之间的优化整合；从能源消费角度研究基于可再生能源的能源、工业、交通等产业发展。

（2）高温合金

高温合金是指以铁、镍、钴为基，能在 600℃ 以上的高温及一定应力作用下长期工作的一类金属材料，具有优异的高温强度，良好的抗氧化和抗热腐蚀性能，良好的疲劳性能、断裂韧性等综合性能，且合金化程度较高，又被称为“超合金”。高温合金可广泛应用到电力、舰船、汽车、冶金、玻璃制造、原子能等工业领域，是制造航空航天发动机热端部件的关键材料，在先进的航空发动机中，高温合金占发动机总重量的 40%~60% 以上，被誉为“先进发动机的基石”，已成为决定发动机技术发展进程的关键因素。当前高温合金领域的研究重点包括新型合金的研制、合金材料的表面处理、焊接工艺等方向。特别是近年来新型航空发动机研制的需要和高温合金应用领域的拓展，对高温合金使用性能提出了更高的要求，从而加速了新型高温合金的研制。

（3）材料生命周期工程

材料生命周期工程以生态设计为主导，以满足

性能要求、节约资源、保护环境为目标，将毒害替代、绿色工艺规划、清洁生产、资源循环等技术与理论应用到材料与产品的全生命周期中，系统优化全产业链条的性能、成本与环境表现。材料生态设计是有望缓解资源匮乏和环境污染问题的重要途径，在产品的设计阶段充分考虑资源和环境问题，从源头节能治污；在此基础上，利用生命周期工程降低甚至消除材料与产品在全产业链条的各个环节中对环境的负面影响。

目前，材料生命周期工程已发展为由材料科学、制造科学和环境科学等多学科交叉的国际重要科学研究前沿领域，其研究方向主要包括材料生态设计理论与方法、材料生命周期评价理论与方法、材料环境负荷评价数据库与分析软件开发以及材料生命周期工程中的循环回收技术等。

未来应进一步加强生命周期工程在材料领域的推广和应用，建立以生态设计技术为指导、生命周期评价技术为标尺、生命周期优化技术为工具的生态环境材料产业绿色化发展模式，逐渐缓和目前材料生产与资源环境间的巨大矛盾，实现材料领域的可持续发展，全面满足生态文明建设对材料的需求。

(4) 人工智能设计催化剂

人工智能是指利用算法和软件包构建人工神经网络,继而依托人工神经网络实现机器学习的过程。从机器学习角度看,待解决的所有问题可被分为两类,第一类问题被称为聚类,第二类问题叫做回归。因此,利用机器学习研究催化领域的问题,首先需要明确目标问题的种类;其次,研究人员需要并构建人工神经网络。神经网络中的神经元数量对于机器学习的精度具有较大影响,因此需要设立测试组对机器学习的结果进行检验,以防过度拟合或欠拟合。待研究人员获得可靠的人工神经网络后,它即可被用于预测一些简单体系的催化效果。此时,催化剂的活性一般只受到 1~2 个底物在其表面的吸附能的影响。因此,多组一一对应的吸附能与催化剂活性就成为机器学习的训练组。尽管机器学习在催化剂设计领域取得了一定成功,但是尚未有课题组使用它进行文献挖掘工作和与催化问题相关的图像分析(例如红外图谱)。这也是该热点未来的发展方向。

(5) 航天航空用高性能 C/C 复合材料

C/C 复合材料是指以连续碳纤维为增强相,以碳材料为基体组成的复合材料,具有低比重、高比强、高比模、低热膨胀系数、耐烧蚀、抗热冲击等一系列优异性能,作为火箭机翼前缘、前锥、火箭喷嘴和再入飞行器及空天飞行器热防护材料具有其他材料难以比拟的优势。近年来随着航空航天领域的快速发展,对长时间耐高温抗氧化 C/C 复合材料提出迫切需求。提高 C/C 复合材料抗氧化的方法主要有材料改性和涂层防护两种,其中发展高温长寿命抗氧化涂层是 C/C 复合材料主要研究热点之一。C/C 复合材料由于生产周期长、制备成本高、批量生产困难等因素,使得 C/C 复合材料的应用限制在航空航天和军事等特殊领域。研发新的制备工艺进而缩短制备周期和降低生产成本是新型 C/C 复合材料发展的紧迫需求。

(6) 膜生物反应器及膜污染防控技术

膜生物反应器(Membrane Bio-Reactor, MBR)

是一种由膜分离与生物处理相结合的新型废水处理技术。目前研究最多、应用也最为广泛的膜生物反应器是固液分离型膜/生物反应器,即采用分离膜取代传统活性污泥过程中二次沉淀池,实现了高效膜分离技术与传统活性污泥法的有机结合。得益于分离膜对微生物和大分子有机物的高效截留作用,反应器内可获得较高的生物浓度和有机物氧化效率。与传统活性污泥法相比,膜生物反应器系统具有出水水质高、污泥产量少、占地面积小、工艺运行成本低等显著优势,应用前景广阔,已成为目前国内外学者高度重视的废水处理技术。不过,由于膜反应器内的膜与混合溶液直接接触,在物理、化学或生物作用下混合溶液中的颗粒物、溶质大分子等不可避免地在分离膜表面或膜孔内吸附、沉积,造成膜孔堵塞,引起膜渗透通量降低、跨膜压差升高等现象。膜污染是制约膜生物反应器广泛应用的主要问题之一,其防控技术和膜再生方法研究具有重要意义,研究内容主要集中在膜材料与表面性质、污染物种类及工艺条件等方面。

(7) 生物质催化转化

生物质是指利用大气、水、土壤等通过光合作用而产生的各种有机体的总称,是自然界最主要的有机可再生碳资源。因具有来源广泛、储量丰富、碳中性等特点,生物质资源被广泛应用于合成燃料以及制备多种精细化学品,是一条极具潜力的石化资源替代路线。生物质催化转化是实现其高效利用的有效手段,目前主要研究的代表性生物质资源为木质纤维素(包括纤维素、半纤维素和木质素)、油脂、糖、微藻等。糖和纤维素等组分可以催化转化为低碳醇和平台化合物类产物,木质素经催化转化可制备芳香烃、芳香醛(羧酸)、酚类和烷烃燃料等产品,油脂可用于催化转化制备生物柴油,这些都是目前生物质催化转化的重要研究方向。由于生物质成分复杂,预处理、反应转化和分离提纯过程难度较大,因此,发展经济绿色的分离过程和催化体系是今后的发展趋势。此外,实现生物质多种

组分的完全利用，生产更高附加值的 H_2 、燃料和高碳化学品也是促进生物质高值化利用的发展目标。

(8) 化学生物技术

化学生物技术利用化学方法调控天然或工程化细胞的生长、代谢和生产行为，应用于生物制造、生物能源和生物医药等领域。细胞响应介入的化学分子或信号，重构胞内代谢网络和生理过程，可产生有益的生物学表型，如产物积累、副产物降低甚至抗逆性提升等。化学小分子可作用于转录、翻译和酶催化等不同层次，扰动胞内大分子合成及物质和能量代谢，最终导致表型差异。在基因工程和基因组编辑方法构建出基因型稳定细胞的基础上，采用化学生物技术可获得更宽泛的表型空间，不仅在工程应用领域具有重要意义，而且可丰富对生命活动运行机制的科学认识。特别地，将非生源的化学物质及来自传统石油化工的分子引入代谢网络，通过生物转化合成有用的产品，是当前化学生物技术研究非常活跃的方向，将持续产生具有重要创新性的成果。

(9) 多孔有机材料在 CO_2 捕集中的应用

近年来，二氧化碳在大气中的浓度极速增加，随之带来的温室效应问题严重威胁着人类社会的可持续发展。因此，开发经济有效环保的技术、材料对有效捕集 CO_2 缓解温室效应问题显得尤为重要。 CO_2 的捕集主要包括燃烧前捕集 (H_2/CO_2 分离)、燃烧后捕集 (CO_2/N_2 分离) 和富氧燃料燃烧捕集 (CO_2/H_2O 分离)。目前，工业上广泛应用的氨吸收捕集二氧化碳技术存在一系列问题，如再生能耗大，污染环境等。相比于氨吸收技术，利用多孔有机材料进行 CO_2 的吸附分离不仅能耗低、操作简单，而且易于再生吸附剂。新型多孔有机材料如金属有机骨架材料 (MOFs)，多孔有机聚合物 (POPs) 因其比表面积高，结构可调，可重复利用等优点在 CO_2 捕集方面表现出较好的应用前景。一般来说， CO_2 容量、选择性、物理化学稳定性以及生产 / 再

利用成本是衡量多孔有机材料二氧化碳捕集性能的 4 个常用指标。在 MOFs/POPs 合成前或合成后对其进行亲 CO_2 基团修饰可以提高其 CO_2 容量和选择性。利用这种方法，科学家们已经开发出高 CO_2 吸附能的 MOFs/POPs 材料并且一些 MOFs 材料可以被大规模合成。未来的研究应该集中在如何提高这些多孔有机材料在工业应用条件下 (如含 H_2O , CO , NO_x , SO_x 的混合气) 的稳定性以及如何降低这些材料的生产成本。攻克了这些难题，我们相信有机多孔材料有望成为下一代在工业上应用的 CO_2 捕集材料。

(10) 高性能分离净化吸附 - 催化材料开发

挥发性有机物 (VOCs) 会造成光化学烟雾、温室效应、臭氧层破坏、危害人体健康等一系列问题，已经严重威胁到人类的生存发展。就 VOCs 治理技术而言，吸附分离法技术成熟、能耗小、处理效率高，催化燃烧技术具有处理量大、无二次污染、易处理易燃易爆气体等优点。以上两种高效废气治理技术的关键在于吸附剂和催化剂的开发，高性能分离净化吸附 - 催化材料开发是实现化工过程节能减排的关键。对于 VOCs 的吸附剂，活性炭材料以及分子筛等已经被工业广泛应用，具有选择性吸附、吸附量大、易脱附等性能是高性能吸附剂开发的目标。贵金属催化剂是目前工业上应用较多的燃烧催化剂，然而贵金属易烧结、耐热性差、价格昂贵等缺点使其发展受到了一定的限制，价格低廉、稳定性好、更具广谱性的燃烧催化剂的开发是催化燃烧领域急需解决的问题。

高性能分离净化吸附 - 催化材料开发需要考虑以下问题：开发高效吸附剂 / 催化剂需要理解 VOCs 与吸附剂 / 催化剂之间的相互作用，通过表征技术和计算模拟建立对结构 - 活性关系的更深入的了解；对存在 VOCs 混合物、水蒸气以及 SO_x 和 NO_x 等情况进行系统研究，以模拟真实的 VOCs 排放环境；可以考虑同时具备高效吸附剂与催化剂作用的双功能材料的开发，即尾气中低浓度的

VOCs 可以经过材料上吸附位点选择性吸附浓缩后再通过材料上的催化氧化活性位点将其完全除去。

(11) 温和条件人工固氮

人工固氮反应是将空气中的氮气转化为农业和工业普遍应用的氮化学品的过程，对于工农业发展具有深远的影响。近百年来，工业合成氨是最重要的工业高效固氮过程，但存在能耗大（占全球近 1.4% 的能源消耗）、污染高（占全球近 1.6% 的 CO₂ 排放）等问题。生物固氮酶、光催化和电催化方法固氮可在温和条件下将 N₂ 还原为 NH₃，原料水和氮气来源广泛，被认为是一种环境友好的化学固氮方法，对确保人类社会可持续发展，缓解全球所面临的能源和环境等方面的危机有着重要的意义。高效氮还原催化剂和反应工艺的设计研发是目前该领域面临的关键挑战，也是目前国内外学者广泛研究的重点。

1.2 Top3 工程研究前沿重点解读

1.2.1 可再生能源系统

未来社会最大的挑战之一是推动能源的可持续性生产与消费革命，而可再生能源系统则是实现可持续性能源体系的核心。近年来，对于以风能、太阳能、生物质能等为代表的可再生能源系统的研究愈发受到关注，并形成了如下 4 项研究热点：第一，宏观上重在讨论能否以及如何利用可再生能源实现整个能源体系的去碳化。例如，以丹麦为代表的欧盟国家提出了以可再生能源最大限度的代替传统能源的能源转型长期计划；而为实现清洁、低碳、安全、高效的能源系统新愿景，我国则需在终端用能部门大力推行以风、光为代表的可再生能源，在以工业、交通为代表的终端消费中进一步提升能率，并着力于分布式可再生能源系统的发展。第二，对于可再生能源的大规模利用，其自身的技术进步仍是关键。因此，提升现有系统对可再生能源的转化/利用效率，强化可再生能源系统的成本竞争力、

开发更高效的储能技术以增强可再生能源系统的可靠性等技术层面的诉求仍将是今后的研究热点。第三，鉴于未来的新能源情景将涵盖从可再生能源到传统能源的多种能源形式，因此，以可再生能源为基础的多能源系统协同规划与运行优化将是未来的研究重点。例如，根据不同能源特点构建多能源互补系统、在混合能源系统中提升新能源的利用率等研究。第四，可再生能源系统提供了将可持续能源嵌入传统能源、工业、以及交通等行业的机会。其中，可再生能源与制氢系统的融合发展仍将是研究主线，它既拓展了可再生能源的消纳渠道，也实现了绿色制氢过程；进一步，基于可再生能源的氢能可被利用到除电力行业之外的多个领域，如：将氢能源作为连接冷、热、电能等不同形式能源的桥梁，以实现跨能源网络的协同作用与优化运行；

将绿色氢作为工业用气来促进工业系统的低碳化发展，如为炼化、冶金、化工等行业提供高效原料、还原剂以及热源等；利用可再生氢能源实现运输部门的去碳化，即通过再生能源-氢能源-燃料电池-新能源汽车的结合，从全生命周期角度构建可持续发展的运输系统。

2013 年以来，“可再生能源系统”焦点核心论文的主要产出国家（或地区）及机构分别见表 1.2.1 和表 1.2.2，其中，主要核心论文产出国家前三名为丹麦、德国和芬兰，分别占到论文发表量的 61.54%、42.31% 和 19.23%；而奥尔堡大学与奥胡斯大学是贡献最大的研究机构。如图 1.2.1 所示，在相关研究的国家或地区中，丹麦和德国的合作关系最好，德国-芬兰、丹麦-美国之间的合作网络也较为发达。而图 1.2.2 表明，各研究机构间最积极的合作来自于奥胡斯大学、法兰克福高等研究院与法兰克福歌德大学。根据表 1.2.3，焦点核心论文施引国排名前三的是德国，丹麦和美国；而表 1.2.4 表明，奥尔堡大学、拉彭兰塔理工大学和奥胡斯大学是对焦点核心论文引用最多的三大研究机构。

表 1.2.1 “可再生能源系统”工程研究前沿中核心论文的主要产出国家 / 地区

序号	国家 / 地区	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	Denmark	16	61.54%	944	76.62%	59.00
2	Germany	11	42.31%	594	48.21%	54.00
3	Finland	5	19.23%	161	13.07%	32.20
4	USA	4	15.38%	307	24.92%	76.75
5	Australia	3	11.54%	72	5.84%	24.00
6	Pakistan	1	3.85%	8	0.65%	8.00
7	Spain	1	3.85%	36	2.92%	36.00
8	Croatia	1	3.85%	11	0.89%	11.00
9	Netherlands	1	3.85%	13	1.06%	13.00
10	South Africa	1	3.85%	13	1.06%	13.00

表 1.2.2 “可再生能源系统”工程研究前沿中核心论文的主要产出机构

序号	机构	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	Aalborg Univ	8	30.77%	433	35.15%	54.13
2	Aarhus Univ	7	26.92%	315	25.57%	45.00
3	Lappeenranta Univ Technol	5	19.23%	161	13.07%	32.20
4	Frankfurt Inst Adv Studies	4	15.38%	83	6.74%	20.75
5	Goethe Univ Frankfurt	3	11.54%	214	17.37%	71.33
6	Stanford Univ	2	7.69%	80	6.49%	40.00
7	Australian Natl Univ	2	7.69%	41	3.33%	20.50
8	Karlsruhe Inst Technol	2	7.69%	20	1.62%	10.00
9	Forschungszentrum Julich	1	3.85%	6	0.49%	6.00
10	Rhein Westfal TH Aachen	1	3.85%	6	0.49%	6.00

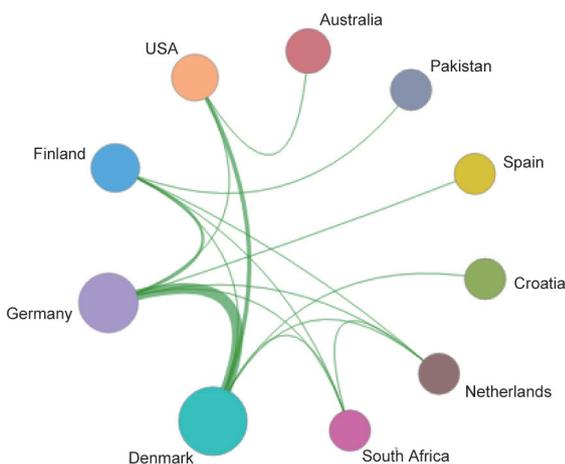


图 1.2.1 “可再生能源系统”工程研究前沿主要国家 / 地区间的合作网络

1.2.2 高温合金

高温合金是 20 世纪 30 年代发展起来的一种金属材料，最早被英国、德国、美国等国家应用于航空工业。第二次世界大战后，航空工业迅猛发展，对高温合金的性能提出了更高的要求，各国也加紧了研究高温合金新技术的步伐。随着高温部件应用的日益增多，高温合金的应用也随之拓展到舰船、火力发电、核能、化工、冶金、玻璃制造等领域。

高温合金材料成分十分复杂，含有铬、铝等活泼元素，在氧化或热腐蚀环境中表现为化学不稳定，同时机加工制成的零件表面留下加工硬化和残

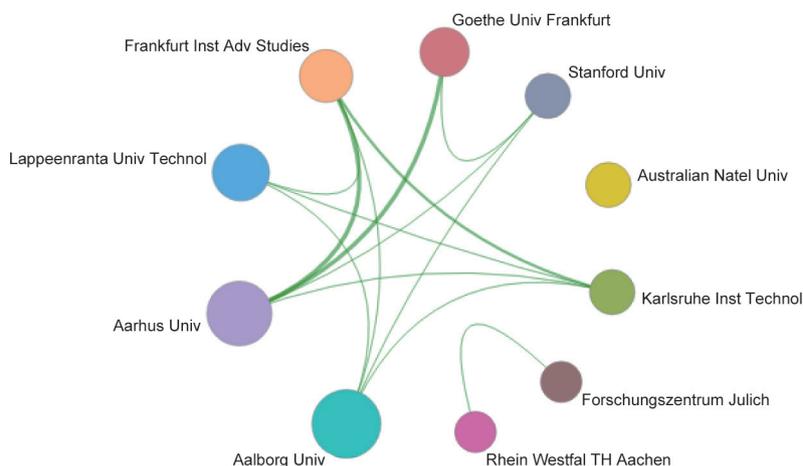


图 1.2.2 “可再生能源系统”工程研究前沿主要机构间的合作网络

表 1.2.3 “可再生能源系统”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出国家或地区

序号	国家 / 地区	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	Germany	132	16.92%	2017.0
2	Denmark	121	15.51%	2017.0
3	USA	120	15.38%	2016.3
4	China	77	9.87%	2017.4
5	Finland	65	8.33%	2017.3
6	UK	57	7.31%	2017.0
7	Italy	53	6.79%	2017.4
8	Australia	47	6.03%	2016.9
9	Spain	38	4.87%	2017.1
10	Switzerland	35	4.49%	2017.1

表 1.2.4 “可再生能源系统”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出机构

序号	机构	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	Aalborg Univ	52	19.40%	2017.3
2	Lappeenranta Univ Technol	46	17.16%	2017.3
3	Aarhus Univ	39	14.55%	2016.8
4	Stanford Univ	23	8.58%	2015.3
5	Tech Univ Denmark	21	7.84%	2016.4
6	Univ Zagreb	18	6.72%	2016.8
7	Forschungszentrum Julich	16	5.97%	2017.5
8	Univ Sydney	14	5.22%	2016.6
9	Karlsruhe Inst Technol	14	5.22%	2017.4
10	Frankfurt Inst Adv Studies	13	4.85%	2017.1

余应力等缺陷，为材料的化学性能和力学性能带来十分不利的影 响。由于合金化程度高，高温合金材料极易产生成分偏析，这种偏析对铸造高温合金和变形高温合金的组织与性能都有重大影响。高温合金的这些特点决定了它区别于普通金属材料的加工工艺。高温合金按制备工艺主要包括铸造高温合金（等轴晶铸造高温合金、定向凝固柱晶高温合金和单晶高温合金）、变形高温合金和粉末高温合金。

合金理论的进步与生产工艺技术不断改善和革新促进了高温合金的发展，通过合金强化+工艺强化来不断结合提高合金的材料性能。合金强化包括合金固溶强化、第二相强化剂晶界强化等；工艺强化包括改善冶炼、凝固结晶、热加工、热处理及表面处理等环节改善合金组织结构等。高温合金材料制备技术与工艺仍处于不断的进步和创新中。比如，冶炼工艺采用了真空感应+电渣重熔+真空自耗熔炼三联工艺，真空自耗熔炼采用了先进熔炼控制方法等；通过定向凝固柱晶合金和单晶合金工艺技术提高材料的高温强度；采用粉末冶金方法减少合金元素的偏析和提高材料强度等。此外，氧化物弥散强化高温合金、金属间化合物高温材料也在不断发展和创新中。

2013 年以来，“高温合金”前沿核心论文

的主要产出国家或地区及机构分别见表 1.2.5 和表 1.2.6，主要国家或地区及机构间的合作情况分别见图 1.2.3 和图 1.2.4，施引核心论文的主要产出国家或地区及机构分别见表 1.2.7 和表 1.2.8。

高温合金主要核心论文产出国家或地区前四名分别为中国、美国、德国和英国。其中，中国产出核心论文占比为 40.20%，排名第 2 的美国核心论文占比为 20.60%，德国和英国的核心论文比例均超过 10%。篇均被引频次排名前四的国家或地区为瑞典、日本、中国和英国。美国与德国之间的合作最多，其次是中国与美国，美国、中国与英国也多有合作，法国、加拿大与美国的合作也较多。由此可见，中国、美国、德国、英国、法国、加拿大等国较为注重该领域国家或地区间的合作。高温合金研究方向核心论文产出数量最多的机构分别是中国科学院、中南大学、西北工业大学，核心论文产出数均等于或超过 28 篇。施引核心论文产生最多的国家是中国，施引核心论文比例达到 46.93%，美国的施引核心论文比例为 16.54%。根据论文的施引情况来看，核心论文产出国排名前四的国家或地区施引核心论文数也比较多，其中中国施引论文数排名第 1，说明中国学者对该前沿的研究动态保持密切的关注和跟踪。施引核心论文产出最多的机构

表 1.2.5 “高温合金”工程研究前沿中核心论文的主要产出国家/地区

序号	国家/地区	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	China	201	40.20%	7174	43.21%	35.69
2	USA	103	20.60%	3269	19.69%	31.74
3	Germany	62	12.40%	1955	11.78%	31.53
4	UK	53	10.60%	1824	10.99%	34.42
5	India	30	6.00%	875	5.27%	29.17
6	France	28	5.60%	725	4.37%	25.89
7	Canada	27	5.40%	881	5.31%	32.63
8	South Korea	16	3.20%	457	2.75%	28.56
9	Sweden	14	2.80%	628	3.78%	44.86
10	Japan	13	2.60%	480	2.89%	36.92

表 1.2.6 “高温合金”工程研究前沿中核心论文的主要产出机构

序号	机构	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	Chinese Acad Sci	39	7.80%	984	5.93%	25.23
2	Cent S Univ	33	6.60%	1862	11.22%	56.42
3	Northwestern Polytech Univ	28	5.60%	912	5.49%	32.57
4	State Key Lab High Performance Complex Mfg	28	5.60%	1701	10.25%	60.75
5	Univ Erlangen Nurnberg	20	4.00%	641	3.86%	32.05
6	Univ Birmingham	14	2.80%	602	3.63%	43.00
7	Harbin Inst Technol	14	2.80%	521	3.14%	37.21
8	Ruhr Univ Bochum	13	2.60%	376	2.26%	28.92
9	Univ Oxford	13	2.60%	384	2.31%	29.54
10	Max Planck Inst Eisenforsch GmbH	12	2.40%	362	2.18%	30.17

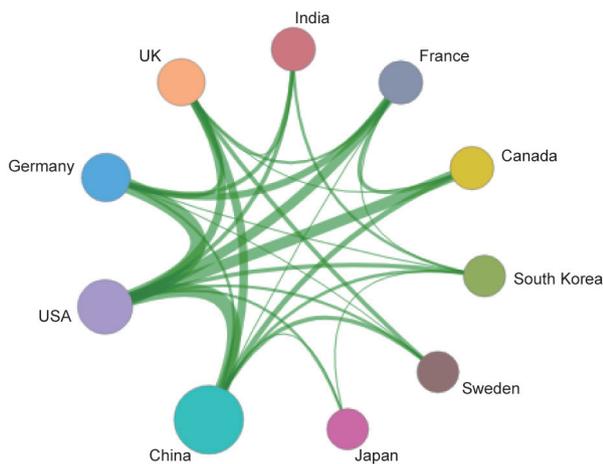


图 1.2.3 “高温合金”工程研究前沿主要国家 / 地区间的合作网络

是中国科学院，施引核心论文比例超过 20%。西北工业大学、北京科技大学的施引核心论文比例均超过 10%。通过以上的数据分析可知，中国和美国在高温合金的核心论文产出及施引数量均处在世界前列，中国机构的施引核心论文数量较多。

1.2.3 材料生命周期工程

面对日益严重的资源匮乏和环境污染问题，追求材料、资源与环境的协调统一，实现可持续发展已经成为全球共识。材料生命周期工程被认为是有效缓解资源匮乏和环境污染的重要途径，因此进入

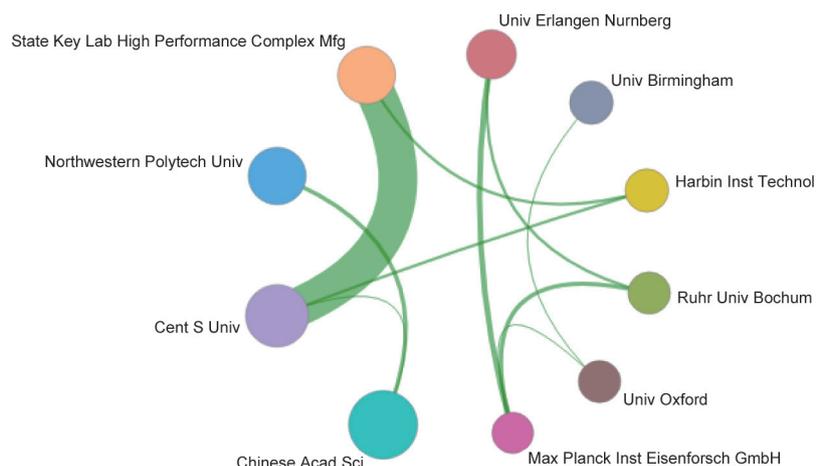


图 1.2.4 “高温合金”工程研究前沿主要机构间的合作网络

表 1.2.7 “高温合金”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出国家 / 地区

序号	国家 / 地区	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	China	4652	46.93%	2017.1
2	USA	1639	16.54%	2017.0
3	India	623	6.29%	2017.3
4	Germany	583	5.88%	2017.0
5	UK	555	5.60%	2017.0
6	South Korea	369	3.72%	2017.0
7	France	345	3.48%	2016.9
8	Japan	334	3.37%	2017.0
9	Iran	307	3.10%	2017.1
10	Canada	289	2.92%	2016.8

表 1.2.8 “高温合金”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出机构

序号	机构	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	Chinese Acad Sci	591	20.61%	2017.0
2	Northwestern Polytech Univ	418	14.58%	2017.1
3	Univ Sci & Technol Beijing	307	10.71%	2017.0
4	Cent S Univ	273	9.52%	2017.1
5	Harbin Inst Technol	263	9.17%	2017.1
6	Tsinghua Univ	205	7.15%	2016.8
7	Beihang Univ	202	7.05%	2017.0
8	Shanghai Jiao Tong Univ	171	5.96%	2017.0
9	Oak Ridge Natl Lab	148	5.16%	2017.1
10	Northeastern Univ	147	5.13%	2017.4

21 世纪以来，生命周期工程研究逐渐引起各国重视并得到了广泛发展。材料生命周期工程要求材料设计面向生命周期全过程，在对材料的使用性能、资源消耗和环境性能进行量化分析的基础上，追求全产业链条的最优化，并通过在材料制造、管理、回收等环节中持续地进行技术革新与工艺参数优化，有效降低材料产品全生命周期的环境影响。目前，材料生命周期工程的研究方向主要包括材料生态设计理论与方法、材料生命周期评价理论与方法、材料环境负荷评价数据库与分析软件开发以及材料生命周期工程中的循环回收技术等。

2013—2018 年“材料生命周期工程”研究前沿核心论文的主要产出国家 / 地区及机构分别见表 1.2.9 和 1.2.10。从表 1.2.9 可以看出，美国和意大利是“材料生命周期工程”核心论文的主要产出国，其核心论文占比分别为 19.17% 和 12.08%，英国以 11.67% 的比例排名第 3。其中，丹麦理工大学以发表论文 3.33% 的比例位居主要产出机构第 1，见表 1.2.10。图 1.2.5 是该领域主要国家 / 地区间的合作网络，可以看出中国与美国之间的合作最多。中国科学院与诺丁汉大学、卡塔尼亚大学与米兰理工大学之间有一定合作，见图 1.2.6。中国

表 1.2.9 “材料生命周期工程” 工程研究前沿中核心论文的主要产出国家 / 地区

序号	国家 / 地区	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	USA	46	19.17%	2923	15.63%	63.54
2	Italy	29	12.08%	2002	10.70%	69.03
3	UK	28	11.67%	3683	19.69%	131.54
4	China	22	9.17%	1623	8.68%	73.77
5	Spain	21	8.75%	1401	7.49%	66.71
6	Netherlands	12	5.00%	1478	7.90%	123.17
7	Switzerland	12	5.00%	539	2.88%	44.92
8	Belgium	11	4.58%	1415	7.57%	128.64
9	Germany	11	4.58%	1343	7.18%	122.09
10	Portugal	11	4.58%	861	4.60%	78.27

表 1.2.10 “材料生命周期工程” 工程研究前沿中核心论文的主要产出机构

序号	机构	核心论文数	论文比例	被引频次	被引频次比例	篇均被引频次
1	Tech Univ Denmark	8	3.33%	512	2.74%	64.00
2	Univ Lleida	5	2.08%	516	2.76%	103.20
3	Univ Perugia	5	2.08%	368	1.97%	73.60
4	Univ Catania	5	2.08%	197	1.05%	39.40
5	Univ Nottingham	5	2.08%	195	1.04%	39.00
6	Delft Univ Technol	4	1.67%	1033	5.52%	258.25
7	Univ Coimbra	4	1.67%	492	2.63%	123.00
8	Chinese Acad Sci	4	1.67%	172	0.92%	43.00
9	Politecn Milan	4	1.67%	150	0.80%	37.50
10	Univ Pittsburgh	3	1.25%	208	1.11%	69.33

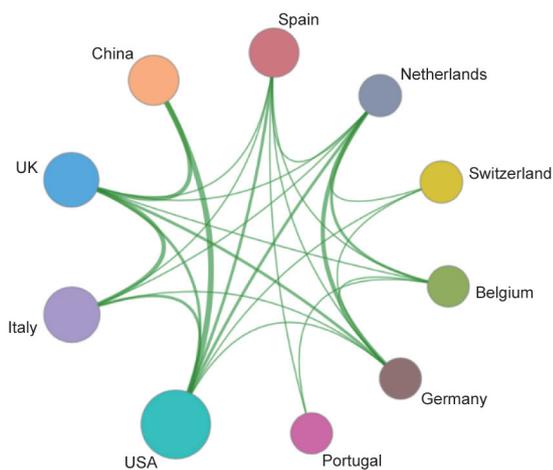


图 1.2.5 “材料生命周期工程” 工程研究前沿主要国家 / 地区间的合作网络

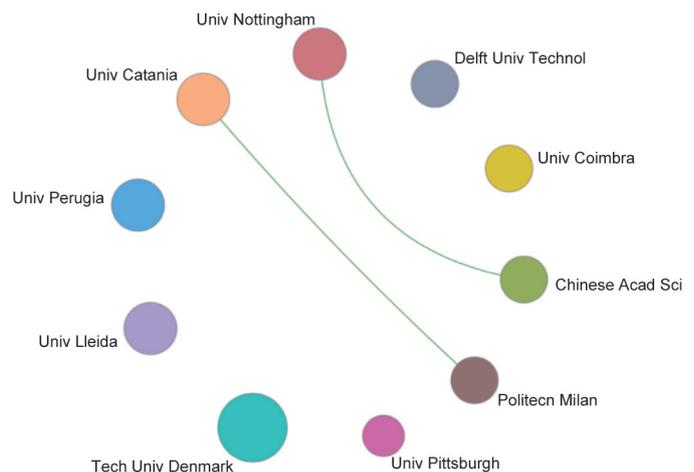


图 1.2.6 “材料生命周期工程” 工程研究前沿主要机构间的合作网络

和美国分别以施引核心论文 30.08% 和 16.81% 位居施引核心论文的主要产出国家 / 地区的排名第 1 和第 2，见表 1.2.11。从表 1.2.12 可以看出，排名前 3 的施引论文主要产出机构分别为中国科学院、清华大学和中国科学院大学，其施引论文比例分别为 26.32%、12.42% 和 9.87%。

2 工程开发前沿

2.1 Top 12 工程开发前沿发展态势

化工、冶金与材料工程领域组研判得到的

Top 12 工程开发前沿见表 2.1.1。其中，“人工智能与化工过程深度结合”“高分子材料的生物基替代”“微反应系统开发”“可穿戴柔性电子器件”“生物质炼制化学品及材料”“国防重大需求先进结构功能一体化陶瓷材料关键制备技术”“智能仿生自修复涂层技术”是基于科睿唯安提供的核心专利数据聚类得出，另外的 5 个开发前沿为专家提出。各开发前沿自 2013 年至 2018 年的逐年核心专利公开量见表 2.1.2。

入选工程开发前沿的“人工智能与化工过程深度结合”和“计算机辅助的材料‘靶向’功能设计”（见表 2.1.1），以及入选工程研究前沿的“人工

表 1.2.11 “材料生命周期工程”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出国家 / 地区

序号	国家 / 地区	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	China	3864	30.08%	2017.5
2	USA	2160	16.81%	2017.2
3	Italy	1052	8.19%	2017.2
4	UK	1004	7.82%	2017.3
5	Spain	919	7.15%	2017.3
6	Germany	852	6.63%	2017.3
7	France	677	5.27%	2017.2
8	India	631	4.91%	2017.5
9	Australia	624	4.86%	2017.5
10	South Korea	582	4.53%	2017.6

表 1.2.12 “材料生命周期工程”工程研究前沿中施引核心论文的主要产出机构

序号	机构	施引核心论文数	施引核心论文比例	平均施引年
1	Chinese Acad Sci	464	26.32%	2017.5
2	Tsinghua Univ	219	12.42%	2017.3
3	Univ Chinese Acad Sci	174	9.87%	2017.6
4	Tech Univ Denmark	133	7.54%	2016.9
5	Katholieke Univ Leuven	129	7.32%	2016.9
6	Hong Kong Polytech Univ	127	7.20%	2017.6
7	Natl Univ Singapore	117	6.64%	2017.1
8	Zhejiang Univ	109	6.18%	2017.6
9	Shanghai Jiao Tong Univ	100	5.67%	2017.6
10	Univ Sci & Technol China	97	5.50%	2017.7

智能设计催化剂”（见表 1.1.1），均涉及到计算机信息工程和化学工程的结合，意味着化学工程向智能化转型。

（1）人工智能与化工过程深度结合

随着现代化工生产过程大型化、精细化和复杂化的发展趋势，传统的设计、运行以及控制工具逐渐无法满足现代化工生产、安全、经济以及环保等

要求，大量的研究都在致力于将人工智能技术应用于化工过程的各个阶段。化学工程学科的发展为化工生产提供了重要的理论基础，目前人工智能在工程领域的研究方向主要包含两个方面：化工生产过程的问题抽象和化工专用人工智能技术的发展。按照研究对象的尺度由小到大的顺序，目前主要研究热点集中在以下几个方面：催化剂开发、设备检测

表 2.1.1 化工、冶金与材料工程领域 Top 12 工程开发前沿

序号	工程开发前沿	公开量	引用量	平均被引数	平均公开年
1	人工智能与化工过程深度结合	506	1326	2.62	2015.9
2	高分子材料的生物基替代	859	3331	3.88	2014.5
3	军用难熔金属材料	491	2398	4.88	2014.3
4	微反应系统开发	442	3660	8.28	2014.3
5	可穿戴柔性电子器件	696	4374	6.28	2014.9
6	煤转化制化学品	669	4655	6.96	2014.1
7	计算机辅助的材料“靶向”功能设计	664	7642	11.51	2014.9
8	极端服役环境下性能与服役行为检测与表征技术	325	4091	12.59	2012.7
9	生物质炼制化学品及材料	368	1341	3.64	2014.5
10	国防重大需求先进结构功能一体化陶瓷材料关键制备技术	1016	3793	3.73	2014.4
11	智能仿生自修复涂层技术	474	1437	3.03	2015.7
12	可反复循环生物降解高分子材料	947	10767	11.37	2013.7

表 2.1.2 化工、冶金与材料工程领域 Top 12 工程开发前沿核心专利逐年公开量

序号	工程开发前沿	2013年	2014年	2015年	2016年	2017年	2018年
1	人工智能与化工过程深度结合	60	79	64	93	93	117
2	高分子材料的生物基替代	223	210	226	138	60	2
3	军用难熔金属材料	71	67	45	63	66	79
4	微反应系统开发	146	133	85	58	17	3
5	可穿戴柔性电子器件	148	138	157	126	102	25
6	煤转化制化学品	229	210	151	73	6	0
7	计算机辅助的材料“靶向”功能设计	108	191	144	117	82	22
8	极端服役环境下性能与服役行为检测与表征技术	41	32	24	23	27	39
9	生物质炼制化学品及材料	101	98	95	51	19	4
10	国防重大需求先进结构功能一体化陶瓷材料关键制备技术	309	287	220	155	41	4
11	智能仿生自修复涂层技术	75	70	66	80	91	92
12	可反复循环生物降解高分子材料	114	135	104	110	124	107

与诊断、数字孪生、工艺过程监测与预警和资源与能源管理优化。

(2) 高分子材料的生物基替代

以塑料、橡胶、纤维等为代表的高分子材料使用量巨大，其发展速度与应用范围已超过传统的金属材料 and 无机材料，成为工业、农业、国防、科技和日常生活等领域不可或缺的重要材料。然而，目前绝大多数高分子材料的原料源于不可再生的石化资源（石油、煤炭和天然气），其可持续发展面临严峻的挑战。如何从高分子材料的原料可持续性出发，发展符合可持续发展目标的新型高分子材料是目前世界各国学者和工业界普遍关注的问题。

高分子材料的生物基替代就是以源于自然界动植物等可再生资源为合成原料，替代原有的石油基原料。目前主要研究热点集中在以下几个方面：

从价格低廉的生物基单体出发，开发可适应于高分子材料工业化规模生产的新型绿色聚合反应体系，合成结构可控、性能优异的生物基高分子材料；

由微生物通过各种碳源发酵制备不同结构和性能的聚羟基烷酸酯类聚合物；直接以淀粉、纤维素、甲壳素以及各种农林废弃物为原料，通过化学物理改性制备生物基高分子材料。未来的发展重点是如何降低生物基高分子材料的价格、提升其综合性能，使更多的生物基高分子材料获得大规模工业应用。

(3) 军用难熔金属材料

军用难熔金属材料一般指熔点在 2000℃ 以上的金属及其合金，例如 W、Mo、Ta、Nb 等金属材料，因其具有高熔点、低热膨胀系数、低蒸气压、良好的抗液态金属腐蚀性以及优异的高温强度等特殊物理化学性能，被广泛用于航空航天、电子电器、武器装备、核能系统等重要领域。

随着这些高科技领域的不断发展，对高性能难熔金属材料的需求越来越广泛，主要围绕极端条件下使用难熔金属材料的强韧化及高性能化开展大量的研究工作。W 的熔点高达 3420℃ 且其热中子捕获截面较小，被选为最有希望的国际热核聚变堆中

第一壁及偏滤器候选材料，但是其低温脆性及高温氧化性限制了应用，因此 W 及其合金的强韧化及高性能化是各国研究的重点。此外，难熔金属材料的粉末制备与增材制造紧密结合是拥有巨大发展潜力的研究方向，有望解决多年来传统粉末冶金产业的瓶颈问题，制备复杂形状或极端条件下使用的 3D 打印难熔金属产品，满足高端制造业、航空航天、国防等战略需求。

(4) 微反应系统开发

微化学工程与技术是化学工程领域新的学科方向和前沿，它着重研究特征尺度在微尺度范围内（< 亚毫米）的过程特征和规律。由于微反应系统的通道特征尺度微细化、低反应物持有量和模块化结构，因此具有优异的传热传质性能、安全性好、过程易于控制和直接放大等特点，可显著提高快速强放热反应过程的安全性和生产效率，并快速推进实验室成果的实用化进程；在医药、农药、含能材料等精细化工，以及高分子、石油化工、生物化工、医疗检测和微纳材料合成等领域将有广阔应用前景。微反应过程优化设计和工程化的系统设备亟待开发，包括微反应器结构优化设计、反应工艺开发、过程智能控制、系统集成和微反应设备制造等，涉及微尺度下传递过程机理、传递-反应耦合机制、微结构元件优化、过程安全控制策略、并行放大规律和系统集成与优化等方面。通过微反应技术可实现化工过程强化、过程安全和节能减排，对我国传统化工产业升级、改善化工过程安全和环境保护有重要意义。

(5) 可穿戴柔性电子器件

可穿戴柔性电子器件一般是指能够直接或者间接与皮肤接触并且具有机械柔性的电子器件。为了适应不同的工作环境以及人体对设备形变的要求，柔性可穿戴电子器件往往需要具有较大的机械灵活性，但是与此同时高技术难度同样限制了可穿戴柔性电子器件的发展。一是可穿戴柔性电子器件在不损伤本身电子性能的基础上要求的良好伸展性与

弯曲性，这对电路材料提出了更高的要求；二是目前柔性电子的制备条件和性能与传统电子还具有一定的差距。目前，柔性可穿戴电子器件的研究应用体现在人类生活的方方面面，研究内容主要集中在电子皮肤、可穿戴生理监测治疗装置、柔性导电织物、薄膜晶体管和透明薄膜柔性门电路等。

(6) 煤转化制化学品

以石油为原料的化工产业体系为国民经济的发展提供了重要支撑。然而，我国石油对外依存度已超过 70%，用于生产烯烃和芳烃的轻馏分对外依存度更高，对能源安全提出了严峻挑战。基于我国能源资源禀赋的特点，清洁高效地优化利用煤炭资源已成为解决环境问题并支撑经济社会高质量快速发展的重要一环。煤转化制化学品是现代煤化工发展的主要方向，可以弥补石油资源不足及其所造成的石油化工结构性缺陷。以煤制烯烃、煤制乙二醇和煤制油为代表的现代煤化工技术取得突破，打通了煤经合成气 / 甲醇生产清洁燃料和化学品的途径。进一步采用创新技术推进煤制化学品技术的开发和应用，突破煤制烯烃、煤制芳烃、煤制含氧化合物等技术瓶颈，降低生产过程能耗、提高过程经济性具有重要的现实意义和技术经济价值。

煤转化制化学品和石油化工所涉及的技术路线和化学反应体系不同，但二者的总体目标具有一致性。为了避免二者形成竞争的局面，积极探索煤制化学品和石油制化学品在原料、技术等方面的耦合互补，促进其与发电、生物质能等协调发展，提升资源能源利用效率，保障产业稳定可持续发展已成为新的发展方向。

(7) 计算机辅助的材料“靶向”功能设计

传统的材料开发，往往要经过不断地重复试错的过程，不仅会浪费大量人力物力，而且需要较长的开发周期。计算机分子模拟技术不仅能提供定性的描述，而且能模拟出分子体系的一些结构与性能的定量结果，其大体涵盖基于量子力学的模拟和基于统计力学的模拟两个方面。借助计算机技术和理

论计算方法，材料研究的模式也逐渐由传统的“经验指导实验”向“理论预测、实验验证”的方向转变。特别是针对大量样本而发展起来的高通量计算筛选技术，可以明显地加快优异材料的发现。在新材料的研发过程中，高通量筛选、大数据、高性能计算机的开发为材料“靶向”功能的设计提供了可能。

(8) 极端服役环境下性能与服役行为检测与表征技术

先进结构陶瓷材料多用于高温结构部件，其实际应用环境极为苛刻。要想精确体现材料在极端环境下的服役行为，材料所处的检测环境应尽量模拟实际服役环境，而现有相关检测与表征环境一般与实际环境相差较大，测试条件与测试技术有待进一步完善。目前在先进结构材料基础性能、极端或苛刻环境下的服役性能与行为检测表征的基础上，加强对部件或构件级别的性能检测与评估，实现对材料和构件实施性能考核和服役行为研究。推进重大典型产品的研发过程及其产业化，为本行业提供统一的检测标准规范等，都是本行业的重要发展趋势，也是先进结构陶瓷材料走向广泛应用的关键所在。

(9) 生物质炼制化学品及材料

生物炼制是以生物质可再生资源为原料生产能源与化工产品的新兴工业模式，是将生物质可持续地转化成能源、化学品和材料的过程集成，涉及食品、饲料、造纸、纺织、化工、能源等许多重要的工业领域。生物炼制可以实现对可再生生物质资源的深度加工和循环利用，理论上多数传统石油化工产品均可由生物炼制过程获得。与此同时，由于其原料的可再生性和与众多生物过程的结合，生物炼制过程可明显降低工业过程能耗、空气污染和水污染，符合当前社会绿色发展理念要求。因此，生物炼制材料及化学品具有广阔的发展空间。

(10) 国防重大需求先进结构功能一体化陶瓷材料关键制备技术

随着航空航天等高新技术的发展，对先进陶瓷材料的结构和功能特性有了更高的要求，结构功能

一体化已成为其在高新技术领域应用的关键。然而陶瓷材料具有不易成型、韧性较差、较难加工等缺陷，因此结构功能一体化复杂陶瓷构件的制造技术，是行业发展的难点所在。当前，国防高端装备对高性能和形状复杂特种陶瓷材料与构件有着迫切需求，突破高性能复杂形状精密部件近净尺寸低成本绿色快速成型关键技术，建立可靠性评价标准及寿命预测模型，攻克以多功能陶瓷纤维复合膜、耐高温耐腐蚀轻质高强多孔陶瓷和高导热陶瓷基板等为代表的典型产品工程化制备技术难关，实现产业化示范，能够有效提升我国典型先进陶瓷材料的研发水平与核心竞争力，为国家重大工程和战略性新兴产业发展提供支撑。

（11）智能仿生自修复涂层技术

智能仿生自修复涂层技术是泛指将源于医学和生物学的自愈合能力用于材料科学领域，即一般指涂层在产生裂缝后能够自动修复。自修复涂层的原理有很多，比如在聚合物基体中引入微胶囊形成愈合剂与引发剂，当在外力条件下产生裂缝后，嵌在其中的微胶囊被撕裂，之后引发聚合反应，将裂缝处重新黏合修补好。同时杂化的有机-无机纳米组成可作为细胞壁来组装形成微型管路，涂层一旦受损便能自发修复愈合。目前研究内容的重点主要集中在 PET 涂层，汽车漆面涂层，手机后盖涂层以及一些橡胶材料。

（12）可反复循环生物降解高分子材料

高分子材料用量巨大、在国民经济的各个领域均起着不可替代的重要作用。然而绝大部分的高分子材料在废弃后化学性能稳定，难以自然降解，目前主要通过焚烧、土地填埋等方式处理，仅有少量进入回收渠道；另一方面，进入回收渠道的高分子废弃物通常采用物理加工的方式再利用，这种方法虽然相对较为简单，但回收再加工过程会使得产品性能迅速恶化，难以达到多次循环利用，最终仍然只能废弃。随着人类社会对高分子材料依赖程度的不断加深，大量产生的高分子废弃物衍生出了严

峻的环境污染和资源浪费等问题，例如白色污染、海洋微塑料、石油危机等，已经成为制约人类社会可持续发展的重大阻碍。

开发既可与传统高分子材料性能相媲美，废弃后可降解，且同时可反复循环利用的新一代高分子材料，已成为科学界和产业界共同关注的重要课题。对于适合回收的情况，这类材料可在一定条件下高效裂解为单体，实现可反复多次循环利用；而对于不适合回收的场合，则可以在土壤、水体等自然环境中无害化降解为水和二氧化碳等小分子，从而为资源与环境等日益紧迫的全球性问题提供一种新颖、全面且有效的解决方案。

2.2 Top3 工程开发前沿重点解读

2.2.1 人工智能与化工过程深度结合

随着资源、能源、安全和环保的约束越来越高，传统的设计、生产和管控等方法无法满足现代化工工业高质量发展的要求。人工智能技术在人机博弈、机器视觉等方面的成功应用为化工生产过程的转型发展提供了借鉴，“智能+化工”必将推动化工过程生产、管理和营销的变革，提升行业核心创新力和竞争力。

人工智能在化工生产中的工程研究方向目前包含两个方面：化工生产过程的问题抽象和化工专用人工智能技术的发展。前者主要研究如何从化工生产过程中抽象出满足已有人工智能技术的问题种类，并进一步利用成熟的人工智能技术进行处理，后者主要研究如何在目前已有技术的基础上，结合化工过程的专有特点，进一步开发出适用于化工过程的智能算法和软件，这两个方面是未来人工智能技术在化工过程深度应用中需要关注的基础研发方向和主要工程问题。

当前，人工智能在化工过程中的应用已成为学术界的重要研究热点，主要有： 催化剂开发。催化剂开发过程需要大量实验数据和专业知识的结果。

合，人工智能技术能有效融合大数据和专业知识，加快催化剂、小分子设计和开发速度。通过预测小分子活性结合位点，进行合成路线规划和逆向分子设计，改变传统设计实验方式，提高开发效率。设备检测与故障诊断。动设备在运行过程中会产生大量的振动、声音、图像、电流等信号，利用基于大数据处理和知识推理的人工智能算法建立模型，实时监控动设备的运行过程，提前预测动设备故障的发生。数字孪生。采用工业大数据、人工智能技术，融合过程机理知识，建立能表征化工生产过程运行状态的模型，以可视化的方式实现化工生产过程的平行制造，并在此基础上实现化工生产过程的工艺优化、运行优化和管理决策。生产过程优化控制与预警。工业大数据、人工智能技术为化工生产过程全流程多目标协同优化控制与运行状态预警提供了新的方法，将提升复杂化工生产过程安全、平稳和高效生产的能力。资源与能源管理优化。基于工业互联网、大数据及知识型工作自动化构建人机合作、知识驱动的生产计划智能决策系统，实现需求驱动和融合装置运行特性的生产计划优化，进行资源和能源等生产要素的优化配置。

从表 2.2.1 可以看出，人工智能在化工应用方面的核心专利主要来自美国和中国，日本和韩国的

核心专利紧随其后；欧洲几个国家，如德国、瑞典、瑞士和法国等，也是相关专利的重要发布国家。结合图 2.2.1 可以看出，美国和欧洲等国的合作较多，而中国仅和美国有相关合作。但从表 2.2.2 和图 2.2.2 来看，核心专利的主要产出 Top 10 的机构主要来自美国，但即使这样，机构之间并没有相关合作。

2.2.2 高分子材料的生物基替代

进入 21 世纪以来，高分子材料广泛使用带来的环境污染、资源浪费以及对石化资源依赖性强等问题引起了国内外研究者和工业界的广泛关注。利用源于自然界动植物等可再生生物质制备生物基高分子材料不仅可以有效解决资源与能源安全问题，同时还可以缓解由碳排放快速增加带来的环境与气候问题。高分子材料的生物基替代的关键问题是生物质来源单体的大规模制备、高效聚合反应、生物基高分子性能的提升、降低生物合成高分子材料的成本等。当前已经有包括聚乳酸、聚羟基烷酸酯聚合物等在内的生物基高分子材料工业化产品，但是存在产量低、价格高、某些性能无法和石油基高分子相媲美的问题，因此研发具有高性价比、性能达到或部分超过石油基产品的生物基高分子材料是未来生物基高分子的重要发展方向。

表 2.2.1 “人工智能与化工过程深度融合”工程开发前沿中核心专利的主要产出国家/地区

序号	国家/地区	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	USA	165	32.61%	640	48.27%	3.88
2	China	131	25.89%	235	17.72%	1.79
3	Japan	64	12.65%	79	5.96%	1.23
4	South Korea	45	8.89%	22	1.66%	0.49
5	Germany	22	4.35%	15	1.13%	0.68
6	Sweden	14	2.77%	47	3.54%	3.36
7	Taiwan of China	14	2.77%	15	1.13%	1.07
8	Switzerland	12	2.37%	24	1.81%	2.00
9	France	9	1.78%	8	0.60%	0.89
10	Israel	8	1.58%	26	1.96%	3.25

表 2.2.2 “人工智能与化工过程深度结合”工程开发前沿中核心专利的主要产出机构

序号	机构	国家	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	KLAT	美国	12	2.37%	44	3.32%	3.67
2	GENE	美国	10	1.98%	37	2.79%	3.70
3	SKFK	瑞典	9	1.78%	37	2.79%	4.11
4	BOEI	美国	8	1.58%	25	1.89%	3.13
5	FICO	美国	7	1.38%	23	1.73%	3.29
6	DANH	美国	6	1.19%	52	3.92%	8.67
7	ASHF	英国	6	1.19%	19	1.43%	3.17
8	HONE	美国	5	0.99%	32	2.41%	6.40
9	UNAC	美国	5	0.99%	22	1.66%	4.40
10	SIEI	德国	5	0.99%	4	0.30%	0.80

注：KLAT 表示 KLA-Tencor Corp.；GENE 表示 General Electric Co.；SKFK 表示 SKF AB；BOEI 表示 Boeing Co.；FICO 表示 Fisher Controls International, Co., Ltd.；DANH 表示 HACH Co.；ASHF 表示 Ashford Tech Software Inc.；HONE 表示 Honeywell Int. Inc.；UNAC 表示 United Technologies Corp.；SIEI 表示 Siemens AG。

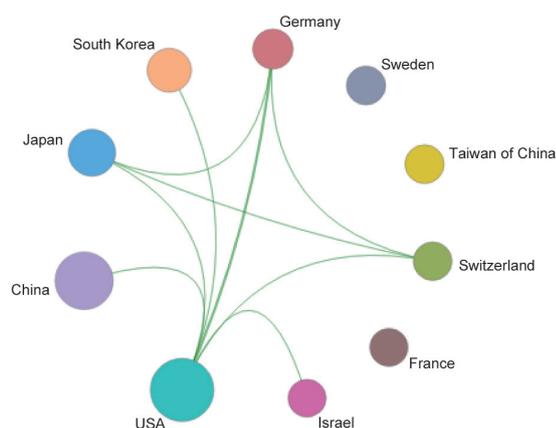


图 2.2.1 “人工智能与化工过程深度结合”工程开发前沿的主要国家/地区间合作网络

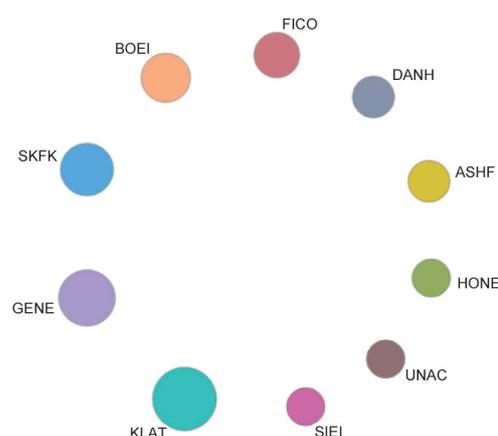


图 2.2.2 “人工智能与化工过程深度结合”工程开发前沿的主要机构间合作网络

2013 年以来，“高分子材料的生物基替代”核心专利主要产出国及机构分别见表 2.2.3 和表 2.2.4，主要国家或地区及机构间的合作情况见图 2.2.3。生物基高分子材料的研究主要集中在利用生物质来源的单体制备聚合物、用生物发酵法制备高分子、以淀粉、纤维素、甲壳素以及各种农林废弃物为原料，通过化学物理改性制备生物基高分子材料等方面。核心专利产出国家或地区前三名为中国、美国和日本。中国核心专利占比为 68.34%，被引数比例高达 59.95%，排名第二的美国核心专

利占比为 10.24%，被引数比例为 19.63%，日本核心专利占比也为 10.24%，但是被引数比例（9.07%）低于美国。美国和其他国家的合作最为广泛，合作的国家有日本、荷兰、英国、德国。此外，德国与瑞士、日本和美国之间存在合作，但是中国、奥地利、法国与其他国家都没有合作。中国的中国石油天然气集团、中国科学院长春应用化学研究所、美国陶氏化学、韩国 LG 公司、沙特基础化工、美国埃克森美孚等机构都拥有生物基高分子的核心专利，其中中国石油天然气集团拥有最多的核心专利。

表 2.2.3 “高分子材料的生物基替代”工程开发前沿中核心专利的主要产出国家 / 地区

序号	国家 / 地区	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	China	587	68.34%	1997	59.95%	3.40
2	USA	88	10.24%	654	19.63%	7.43
3	Japan	88	10.24%	302	9.07%	3.43
4	South Korea	40	4.66%	140	4.20%	3.50
5	Germany	22	2.56%	96	2.88%	4.36
6	Switzerland	8	0.93%	34	1.02%	4.25
7	France	7	0.81%	32	0.96%	4.57
8	Netherlands	6	0.70%	41	1.23%	6.83
9	UK	4	0.47%	38	1.14%	9.50
10	Austria	4	0.47%	31	0.93%	7.75

表 2.2.4 “高分子材料的生物基替代”工程开发前沿中核心专利的主要产出机构

序号	机构	国家	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	SNPC	中国	11	1.28%	48	1.44%	4.36
2	DOWC	美国	9	1.05%	76	2.28%	8.44
3	BADI	德国	9	1.05%	49	1.47%	5.44
4	CAAC	中国	8	0.93%	24	0.72%	3.00
5	TORA	日本	8	0.93%	13	0.39%	1.63
6	GLDS	韩国	7	0.81%	78	2.34%	11.14
7	ASAH	日本	6	0.70%	32	0.96%	5.33
8	SABI	美国	5	0.58%	39	1.17%	7.80
9	CPCH	美国	5	0.58%	31	0.93%	6.20
10	ESSO	美国	5	0.58%	30	0.90%	6.00

注：SNPC 表示 China Petroleum & Chem Corp；DOWC 表示 Dow Global Technologies LLC；BADI 表示 BASF SE；CAAC 表示 Chinese Acad. Sci., Changchun Inst. Appl. Chem. Inst.；TORA 表示 Toray Industries, Inc.；GLDS 表示 LG Chem. Co., Ltd.；ASAH 表示 Asahi Kasei Chem. Co.；SABI 表示 SABIC Global Technologies B.V.；CPCH 表示 Chevron Phillips Chem Co., LP；ESSO 表示 Exxonmobil Chem Patents Co., Ltd.。

2.2.3 军用难熔金属材料

军用难熔金属材料一般指熔点在 2000℃ 以上的金属及其合金，例如 W、Mo、Ta、Nb 等，因其高熔点、优异的高温力学性能及独特的物理化学性能，被广泛用于航空航天、电子电器、武器装备、核能系统等重要领域。鉴于难熔金属材料的重要战略地位，美国、日本、欧盟等均将其作为重要战略物资进行储备。伴随高科技领域的不断发展及服役环境的极端化，对高性能难熔金属材料的需求越来越广泛。

目前，军用难熔金属材料的研究主要围绕极端条件下使用难熔金属材料的强韧化及高性能化等开展。难熔金属材料的强韧化途径包括元素掺杂、强塑性变形及弥散强化，旨在通过细化晶粒或引入第二相弥散颗粒来改善其低温脆性及高温抗氧化性。随着 3D 打印这种先进制造技术的发展，将难熔金属材料的粉末制备与增材制造紧密结合是拥有巨大发展潜力的研究方向，有望解决多年来传统粉末冶金产业的瓶颈问题，制备复杂形状或极端条

件下使用的高性能 3D 打印难熔金属材料，满足高端制造业、航空航天、国防等战略需求。

表 2.2.5 和 2.2.6 分别是“军用难熔金属材料”工程开发前沿中核心专利的主要产出国家/地区和主要产出机构。从表 2.2.5 可以看出，中国和日本分别位居该领域核心专利主要产出国家/地区的第一和第二，其核心专利公开量比例分别为 59.47% 和 23.63%。尽管中国在“军用难熔金属材料”工程开发前沿的核心专利公开量位居全球第一，但是其核心专利平均被引数较低，只有 1.17。位居“军用难熔金属材料”工程开发前沿中核心专利

前三位的主要产出机构分别是日本的 HOOL、中国的 CQRZ 和日本的 NIHA，其核心专利公开量比例分别为 6.31%、3.05% 和 2.85%，见表 2.2.6。图 2.2.5 为“军用难熔金属材料”工程开发前沿的主要产出国家/地区之间的合作网络。可以看出，日本和德国之间有一定合作项目，其次美国和德国也有合作，但其他国家之间显示没有合作。图 2.2.6 为核心专利主要产出机构之间的合作网络图，其中德国的 CMTL 和日本的 NIPA 之间的合作最为密切，其次日本的 HOOL 与日本的 YAWA、德国的 HENK 之间也有较多的合作。

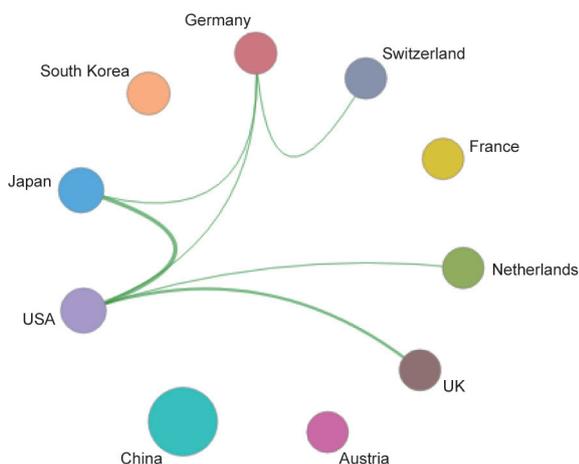


图 2.2.3 “高分子材料的生物基替代”工程开发前沿的主要国家/地区间合作网络

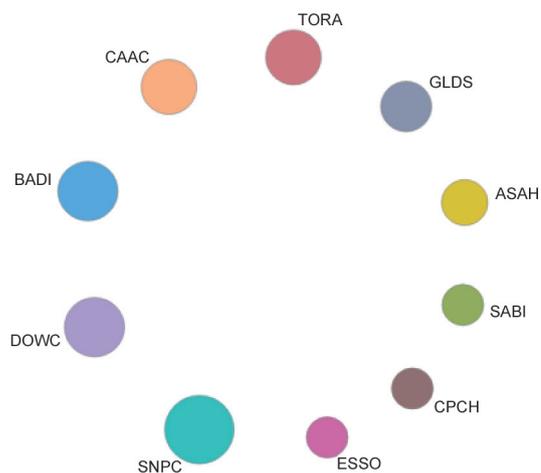


图 2.2.4 “高分子材料的生物基替代”工程开发前沿的主要机构间合作网络

表 2.2.5 “军用难熔金属材料”工程开发前沿中核心专利的主要产出国家/地区

序号	国家/地区	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	China	292	59.47%	343	14.30%	1.17
2	Japan	116	23.63%	1309	54.59%	11.28
3	USA	20	4.07%	282	11.76%	14.10
4	South Korea	18	3.67%	10	0.42%	0.56
5	Germany	13	2.65%	230	9.59%	17.69
6	Switzerland	5	1.02%	36	1.50%	7.20
7	France	5	1.02%	24	1.00%	4.80
8	Taiwan of China	4	0.81%	1	0.04%	0.25
9	Sweden	3	0.61%	118	4.92%	39.33
10	Brazil	3	0.61%	21	0.88%	7.00

表 2.2.6 “军用难熔金属材料” 工程开发前沿中核心专利的主要产出机构

序号	机构	国家	公开量	公开量比例	被引数	被引数比例	平均被引数
1	HOOL	日本	31	6.31%	512	21.35%	16.52
2	CQRZ	中国	15	3.05%	14	0.58%	0.93
3	NIHA	日本	14	2.85%	41	1.71%	2.93
4	YAWA	日本	10	2.04%	127	5.30%	12.70
5	CMTL	德国	9	1.83%	240	10.01%	26.67
6	NIPA	日本	9	1.83%	206	8.59%	22.89
7	ANSH	中国	8	1.63%	18	0.75%	2.25
8	KUNS	中国	6	1.22%	20	0.83%	3.33
9	SHAO	中国	5	1.02%	2	0.08%	0.40
10	HENK	德国	4	0.81%	78	3.25%	19.50

注：HOOL 表示 Nihon Parkerizing Co., Ltd.；CQRZ 表示 Chongqing Runze Pharm. Co., Ltd.；NIHA 表示 JX Nippon Mining & Metals Corp.；YAWA 表示 Nippon Steel & Sumitomo Metal Corp.；CMTL 表示 Chemetall GmbH；NIPA 表示 Nippon Paint Co., Ltd.；ANSH 表示 Pangang Group Panzhihua Iron & Steel Research Institute Co., Ltd.；KUNS 表示 Kunshan Qiaorui Metal Prod. Co., Ltd.；SHAO 表示 Shaoxing Wancheng Metal Sheet Co., Ltd.；HENK 表示 Henkel AG & Co KGaA.

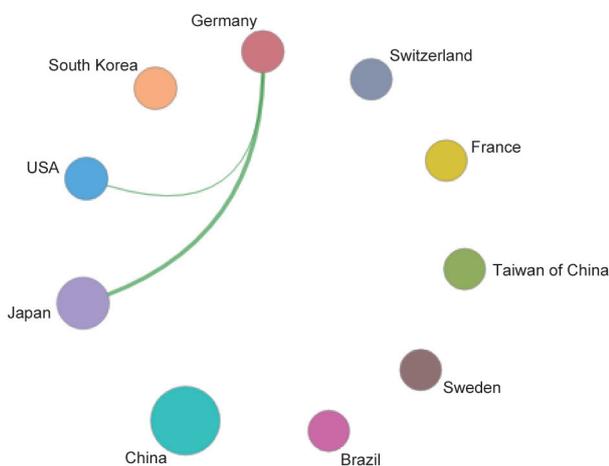


图 2.2.5 “军用难熔金属材料” 工程开发前沿的主要国家 / 地区间合作网络

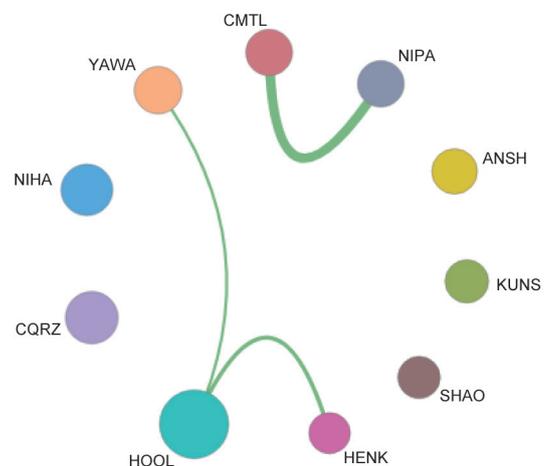


图 2.2.6 “军用难熔金属材料” 工程开发前沿的主要机构间合作网络

领域课题组人员

课题组组长 / 副组长：

组长：王静康 刘炯天

副组长：

李言荣 刘中民 毛新平 聂祚仁 谭天伟

周 玉 屈凌波 元英进

课题组成员：

陈必强 刘兴钊 席晓丽 杨治华 姚昌国

叶 茂 蔡 的 李达鑫 王 曼 王 静

王景涛 程路丽 高彦静 黄耀东 孙秀良

朱晓文

执笔组成员：

蔡 的 陈光文 丁 亚 郭潇佳 黄耀东
康国栋 李达鑫 李金哲 柳 林 单美霞
王 丹 王 曼 王 萌 汪秀丽 王 峰
徐 迪 姚昌国 朱晓文

致谢人员：

宝钢股份中央研究院武汉分院

王 媛 辜海芳 孙 竹

北京工业大学

刘 宇 马立文 文胜平 杨建参

北京化工大学

刘晶晶 张会丽 张卫东

大连化学物理研究所

刘慧芳 马怀军 祁 育 孙 剑 王 胜

谢 峰 赵宗保 朱何俊 朱雪峰

电子科技大学

蒋书文 颜 璟 闫裔超 张万里 朱 斌

哈尔滨工业大学

李 倩 牛 波 邱宝付

四川大学

陈思翀 王玉忠

天津大学

李艳妮 乔建军 杨祖国