

当科研遇到人工智能

——来自北京的调查

本报记者 杨学联

北京市

近日，国务院印发《关于深入实施“人工智能+”行动的意见》指出，加快探索人工智能驱动的新型科研范式，加速“从0到1”重大科学发现进程。北京作为教育、科技、人才资源富集地，人工智能竞争优势明显。在人工智能迎来从技术突破向价值落地的关键拐点时，北京如何围绕创新、转化、产业、服务等关键环节，打造新质生产力发展的重要发动机？

科研新模式、计算新工具、研发新流程、产业新生态……AI for Science（以下简称AI4S）正在成为新一代科技革命的重要推动力量。当科学研究遭遇人工智能这顶席卷而来、赋能一切的新技术，会激发怎样的“化学反应”？

在高校、科研院所、创新企业云集的北京，经济日报记者深入调查采访发现，当地积极布局、率先探索AI4S科研创新路径，近年来已形成一批具有示范意义的创新成果，成为发展新质生产力的生动实践。

瞄准前沿 搭建基础设施

提起搞科研，很多人脑海中会浮现实验室里的瓶瓶罐罐、连轴转的研究人员、大量快速更新的文献。这是以往科学的研究常态，却也面临难题的尴尬——有了基本原理却难以实际应用，理论研究与实际问题差距不小，许多问题只能通过经验和试错解决；“作坊模式”让科研效率亟待提高；实验手段、数据收集、处理、分析手段有限……

2024年，诺贝尔化学奖表彰人工智能破解蛋白质结构的密码，成为突破的重要里程碑。基本原理驱动、数据驱动的科研模式在人工智能助力下走向大幅提升与融合。AI4S作为加速科学的新范式，已是全球共识，正在成为新一轮科技革命的重要推动力量，也正由概念导入期进入应用落地期。

提到科学智能，不能不提北京科学智能研究院。这是全球首个专注于AI4S领域研究与发展的新型研发机构。该院于2021年9月成立，将人工智能技术与科学研究结合，加速不同学科的融合和突破，以构建“平台科研+垂直整合”模式为指导，加速构建下一代科研范式下的基础设施。“研究院以‘解放科学家、赋能新工业’为使命，围绕变革传统科学计算研究范式开展关键技术攻关，加速开源生态建设。力争在重大科学问题研究方面取得重大突破，诞生一批原始创新成果，让北京成为全球科学智能的发起人、先锋队、引领者。”北京科学智能研究院院长李鑫宇告诉记者。

想向上生长，先要向下扎根。北京科学智能研究院着手布局科学智能的“四梁八柱”建设。“四梁”是平台系统——即基本原理与数据驱动的模型算法与软件，高效率、高精度的实验方法，替代文献的数据库与知识库，高度整合的算力平台。“八柱”则对接、支撑国家战略需求。如应用于汽车行业的锂电池，生命科学领域的医疗制药等。

今年春天，DeepFlame Rocket（临界燃料）火箭燃烧智能仿真软件一发布，就成为AI4S领域从科研迈向商业航天应用的典型案例。该软件依靠人工智能驱动的“超级大脑”，实现火箭发动机的全流程数值模拟。在极度高温、高压环境中，哪里有隐患、哪里有优化空间，一目了然，打通了流体力学求解的“最后一公里”。

燃烧模拟计算量非常大。但有了AI加持，以前大量人员几个月才能完成的计算，被压缩至一天甚至更短。火箭发动机研发如果能借助工业仿真软件，模拟流体力学、燃烧、传热等一系列物理过程，实际试车次数至少减少50%。一款算得准、算得快的仿真软件，能大幅降低研发成本，缩短研发周期。这个开发和测试工具还为跨学科交叉合作提供了开源平台。今年6月，DeepFlame 1.6发布，新应用不断“长出来”，在能源、电力、化工等多个领域行业案例中，展现出巨大想象空间。

今年8月，北京科学智能研究院燃烧流体（DeepFlame）团队主导开展的“深度学习赋能的超大规模高精度火箭发动机超临界燃烧流体模拟”工作夺得CCF HPC China 2025“超算年度最佳应用”奖项。这是我国高性能计算领域最具权威性的奖项之一，代表我国HPC应用研究的最高水准。这一奖项的颁出，再次印证AI赋能科学的研究的应用价值。

“当前，北京在人工智能领域形成了完整的创新和产业链条，科学智能底层技术持续领先。”北京市科委中关村管委会党组成员、副主任刘卫华表示，北京已产出全球首个覆盖90多种元素的大原子模型DPA、新一代科研知识库与文献开放平台Science Navigator等一批重大原创成果，涌现出一批创新型企业及潜在独角兽企业。

发力科学智能赛道，今年7月，北京市科委、中关村管委会、北京市发展改革委、北京市经济和信息化局、北京市海淀区人民政府联合发布《北京市加快人工智能赋能科学研

今年7月发布的《北京市加快人工智能赋能科学高质量发展行动计划（2025—2027年）》是全国首个面向科学智能的专项地方政策，其中提出

到2027年

- 建立科学基础大模型
- 建设不少于10个高质量科学数据库
- 服务不少于1000万用户
- 营造开源开放生态
- 推动形成具有国际竞争力的产业集群



2024年科学智能峰会现场。

（资料图片）

打破界限 突出应用赋能

科学智能不仅带来单一技术领域的突破，更不断打破学科、领域的局限，托举出一种全新的科学研究范式——打破学科的界限，实现“作坊”到“平台”的转变；打破理论和实验的界限，借助科研新工具，实验与模拟能力大幅提升；打破科研与产业的界限，形成产业需求驱动的原始创新闭环。

科学研究中，无论哪个学科方向，都少不了基本原理、实验、文献、算力的支撑，离不开查阅文献、提出假设、模拟计算、实验验证等步骤。数据显示，19世纪以来，人类文献数量增长4000倍，但人们研读文献的速度仅提升2倍。当科学研究越来越需要多学科研究者同时参与，解决问题需要的各类工具日益增加且愈加复杂，研究者陷入效率瓶颈。

工具平台如果能像DeepSeek一样好用，输入一些很简单的文字就能调用智能体完成任务，将大大减轻研究者工作量——这种AI赋能的体验已经成为现实。

如果你刚结束今天的重复试验，希望获得自动化改造方案；如果你有闲置的代码，想开发属于自己的智能体；如果你刚好需要查阅大量文献，快速整理一份研究报告……被称为“全球AI4S时代下的云科研入口”的玻尔科研空间站，正是科学的研究的基础设施之一，成为科研人员强大的“外挂”助手。

玻尔科研空间站是通过人工智能技术，覆盖“读一算一做”全流程和“教学研用”多样化应用场景，系统性解决科研人员在文献检索与管理、跨学科知识发现及实验计算融合等环节中的关键痛点，释放科研人员的精力，其由北京科学智能研究院与深势科技联合研发。

在鼎好大厦安家的北京深势科技有限公司，一批年轻科学家不断帮这个“外挂”助手“脑洞大开”。这家国家专精特新“小巨人”企业在，北京、上海、深圳等城市布局研发中心。科研团队汇集了超百位数学、物理、化学、生物、材料、计算机等领域的优秀青年科学家和工程师，博士及博士后占比超过35%。

如今，玻尔科研空间站用户规模已突破100万，在北京大学、浙江大学、上海交通大学、中国科学技术大学等全国50余所高校院所，以及宁德时代、广汽埃安、云南白药、联合利华等40多家企业上线应用。

“玻尔是一个非常典型的AI赋能科研、综合能力叠加的代表。已经形成类比于‘图书馆、教学楼、实验室、计算中心’的各类型AI4S基础设施的产品形态。”深势科技创始人兼首席科学家，北京科学智能研究院理事长张林峰表示，玻尔目前已收录超2000万全球活跃学者，超14万本期刊资源，覆盖26大学科领域，1000+研究主题；玻尔App应用商店已集成300+科研工具。

“AI4S正在激发一场新的科学变革，重塑很多传统产业和科研模式。我们已经站在这场变革的起点。”深势科技创始人兼首席执行官孙伟杰表示，通过构建“深势·宇知”大模型体系，他们将众多学科的科研方法从“实验试错/计算拟合”时代带入了“预训练模型时代”，

打造了玻尔科研空间站、药物计算设计平台、难成药靶标研发平台、电池设计自动化平台和新材料研发设计平台等科研和工业研发基础设施，形成AI4S的“创新—落地”链路和开放生态，赋能千行百业。

可以说，北京发展科学智能的优势得天独厚。这里聚集了北大、清华、中国科学院、北京科学智能研究院等众多顶尖高校和科研机构，技术研究基础国内领先；拥有深势科技、百度等一批科技创新企业，聚焦重点领域，推出多个细分方向科学智能大模型，加速赋能科学的研究和产品研发；重大场景丰富多元，新业态新模式逐步形成。

开源共建 推进协同创新

迎接科学智能时代，除了打好基础，还要建好生态。在共建的AI4S创新生态中，研发机构、创新企业分别扮演着怎样的角色？共建大原子模型的实践，打造出微观世界研究基础设施，颇具代表性。

世间万物均由原子构成。原子只有100多种，组合却无穷尽。就像石墨和金刚石均由碳元素构成，只因结构不同，硬度天差地别。手机折叠屏能折而不断，也在于其屏幕材料的微观结构。如果能在纷繁的原子世界中，将结构和性质一一对应起来，就能“征服”元素周期表，在需要特定属性时选取对应的组合并构建出来。

以新药研发为例，大原子模型可以帮企业找出最优结构、最好配方。药物的效果受成分的化学结构影响。以前，找到一个能成药的结构可能要做上千次实验，花费10年光阴。现在借助AI赋能的高通量筛选，可以从上千个候选结构中筛出100个符合条件的，进行针对特定病种的大模型再次筛选，最终送进实验室验证的可能只有10个。

然而，将原子结构和性质一一对应，这项基础研究耗时耗力，绝非易事。目前，已有30多家共建单位参与到大原子模型计划（OpenLAM）项目中，为微观科学的研究提供新的基础设施。将原子间相互作用研究透彻，开放给材料、能源、生物制药等领域工业微尺设计使用，无疑将带动相关产业的创新突破。

如今，被誉为“自然科学界的GPT”的大原子模型已迭代至第三代，覆盖90种



参观者在中关村展示中心参观展出的人形机器人产品。

新华社记者 鞠焕宗摄

走进中关村科学城，空气中仿佛都弥漫着“0”和“1”的味道。在北京科学智能生态加速演进之际，一条完整产业链在这里悄悄闭环。科学智能这株“未来之花”把根须扎进北京这片科技创新“高原”最肥沃的土壤，拔节、孕蕾、绽放。

北京这片科创沃土拥有让众多创新主体接踵而至的“土壤配方”。具体到科学智能的推动力，不仅有北大、清华、中国科学院等顶尖院校沉淀百年的学术累积，为产业提供足够浓郁的学术氛围，更有许多不能不提的必备“养分”。比如，统筹算力资源建设，推动海淀、朝阳、亦庄、京西等地打造智算高地，累计智算资源超3.3万P；上线人工智能数据运营平台，开放共享一批科技期刊论文多模态解构数据集……

为推动科学智能发展，仅中关村科学城所在的海淀区，就设立200亿元科技成长基金，构建“子母基金联动”的投资矩阵；推出“人工智能人才特区20条”，吸引全球顶尖科学家和青年才俊到此发展；打造人工智能创新街区、AI原点社区、AI北纬社区，多措并举厚植科学智能发展沃土，建立具有全球影响力的创新生态。

此外，基于北京人工智能数据训练基地建立数据沙盒监管机制，北京还为产业发展提供可信数据空间和智算资源，推动科研数据等参与模型训练。算力券、场景开放清单就像毛细血管，把政策“血液”输送到每个科研团队的神经末梢；从“AI4S”到“AI+医药健康”“AI+新材料”，层层搭棚，将阻碍创新的“风刀霜剑”隔绝在外。

正因这些阳光雨露的滋养，北京才成为科学智能快速发展的“沃土”，能在最短时间内孕育出全球首个“读文献—做计算—做实验”全链路AI科研空间站、首个2100亿参数的跨模态生物语言大模型……让“从0到1”的原创之花、“从1到10”的转化之花、“从10到100”的产业之花，在同一座城市绽放。

值得一提的是，北京并不急于用一把尺子衡量成败，而是让“乔木”“灌木”“苔藓”各得其所。不仅有算力、数据、资本、政策的叠加，更有对“长远”二字的耐心——愿意给一颗种子时间，给一次失败包容，给一个青年团队时间去成长参天大树。

在这里，顶尖团队做0到1的原始突破，中小企业做场景落地，政府则是默默耕耘的“园丁”，疏通阻碍创新的底层“梗阻”，却也不喧宾夺主。在这片土壤中，问题从来不是判决书，而是下一次“追肥”的配方。

如今在北京，科学智能作为人工智能与基础科学深度融合的前沿领域，正推动形成工业研发新模式，加快具身智能、新能源新材料等领域关键技术创新，初步呈现出产业化应用潜力。这座城市，正在用首都的站位、全球化的视野、十年磨一剑的耐心，孕育下一批能够改变人类命运的“前沿之花”，探索更多连接未来的可能。

最肥沃
查手记