

北京市科学技术委员会、中关村科技园区管理委员会  
北京市发展和改革委员会  
北京市经济和信息化局  
北京市海淀区人民政府

关于印发《北京市加快人工智能赋能科学研究  
高质量发展行动计划  
(2025—2027 年)》的通知

京科发〔2025〕15 号

各有关单位：

现将《北京市加快人工智能赋能科学研究高质量发展行动计划(2025—2027 年)》印发给你们，请认真执行。

特此通知。

北京市科学技术委员会、中关村科技园区管理委员会  
北京市发展和改革委员会  
北京市经济和信息化局  
北京市海淀区人民政府

2025 年 7 月 4 日

# 北京市加快人工智能赋能科学研究高质量发展行动计划(2025—2027 年)

人工智能赋能科学研究(AI for Science,以下简称科学智能)作为加速科学研究的新型范式,已在全球范围内形成共识,将对未来科学技术和产业发展带来深远的影响。为抢抓科学智能战略发展机遇,推动人工智能与科学研究深度融合,加快建设具有全球影响力的人工智能创新策源地,特制定本行动计划。

## 一、发展目标

到 2027 年,立足北京人工智能科技创新优势,发挥人工智能强大赋能作用,加快开辟科学研究新路径,率先实现新旧科研范式更迭。开展前沿科学问题攻关。加强科学计算与多尺度建模等基础理论方法研究,建立科学基础大模型,研发新一代科学计算智能模拟软件工具,构建科学基础大模型和学科领域模型的模型协作体系。完善共性基础设施建设。系统搭建科学智能基础设施,建设不少于 10 个高质量科学数据库,全面支撑人工智能在多个科学研究领域应用,服务不少于 1000 万用户,加速原始科技创新突破。加速智能科研范式变革。推动科学智能在基础研究、医药健康、新材料、科学仪器、工业智能化等不少于 5 个领域开展深度应用,形成 8 个以上标杆应用案例,实现重点场景全流程智能科研范式赋

能。促进产业生态加速发展。搭建共性服务创新平台,引进培育一批复合型创新人才,构建多渠道投融资服务体系,加强国际交流与合作,营造开源开放生态,推动形成具有国际竞争力的产业集群。

## 二、重点任务

### (一)强化关键技术攻关

#### 1.开展科学智能的基础理论研究

探索基于人工智能的薛定谔方程求解方法、电子结构计算方法、湍流问题求解方法等基础理论研究。研究通过人工智能预测原子、分子等结构和性质,开展流体、电磁等仿真设计求解方法以及实验表征反演理论与自动化控制方法研究,实现多尺度建模理论突破。

#### 2.加快构建多学科通用的科学基础大模型

建立基于生成式人工智能的科学基础大模型,实现对多类别、高维度科学数据的统一表征、建模、分析和生成,助力科研人员快速迭代模型算法,加速科学发现。基于科学基础大模型,研发面向垂直领域的科学智能体和专业模型,构建模型交互迭代、持续演进的模型协作体系。

#### 3.研发新一代科学计算智能模拟软件工具

研发可识别分子结构、化学方程式、图表等多模态科学信息的数据采集与标注工具,高效率、高精度的实验表征与反演工具,以及适用于科学智能计算特点的任务调度、框架、编译等工具。

## (二) 夯实基础设施建设

### 4. 构建开放共享的科学数据平台

推动高质量科学数据资源汇聚,打造高质量科学文献数据库,以及计算模拟、实验数据相结合的科学数据库;研发能够全方位理解、分析科学数据的多模态科学知识大模型;构建重点领域科学数据库,以及开放共享的科学数据平台,辅助科学决策,提升科研效率。强化科学数据标准化建设,建立科学数据治理技术体系,发挥“北京数据基础制度先行区”优势,发展和应用区块链等技术,引导数据可信流通交易。

### 5. 搭建软硬件协同与高度整合的算力平台

研究面向分子动力学、密度泛函等计算方法下的软硬件协同设计方案,组织研制针对大规模并行计算、高精度等需求的专用计算芯片。加强高性能计算中心和云计算服务平台的统筹和建设,提升面向科学智能领域供给能力。搭建异构算力统一调度平台,满足科学智能多元化计算和灵活的资源分配需求,降低算力使用成本。

### 6. 建设智能化干湿闭环实验系统

研发自迭代的实验室仪器与数据采集软件,开发自动化接入、调度及控制的实验室操作系统,实现计算精确指导实验,实验高效反馈计算的新研发模式。开发面向通用实验场景的反应装置及检测设备,配置实验机器人,建设智能无人实验室,搭建全自动高通量小试线、中试线,实现算法验证与产品小规模批量生产。

### (三)加速领域应用落地

#### 7. 推动 AI 加速基础科学研究

研究通过 AI 技术自动挖掘科学数据的内蕴机理与潜在关联关系,助力数学、物理、化学等基础学科研究人员高效精准的挖掘事物本质和发现新的科学规律,提升科学研究的认知深度和研究效率。研究通过基础科学模型与大模型的深度融合,赋能复杂数学问题求解,支撑数学定理的自动化证明与数学猜想的提出,解决定理、引理及相关知识的自动生成与难题解析。研究通过 AI 技术增强计算机模拟等方法,模拟和预测天文、地理等基础学科的科学现象,推动数据、算法、实验的协同,促进理论模型的构建和实验设计的优化,加速新规律和新现象的自主发现进程。探索通过 AI 技术加速量子科技领域基础科学研究,助力量子线路优化、量子纠错算法等关键技术实现突破。

#### 8. 推动 AI 技术赋能医药健康产业创新

实施“人工智能+医药健康”创新发展行动计划。研究适用于解析生命本质规律及疾病复杂机制的基础理论和算法,构建医药领域专家级科学数据库,探索医药研发新范式。开发支撑多任务、多属性的药物研发模型,增强靶点发现、药物设计、临床试验的效能水平,提升药物有效性和安全性的预测评估能力。研发 AI 辅助诊疗、数字疗法、医用机器人等产品,推动医疗器械智能化发展。加速 AI 技术在药械生产制造全过程的赋能应用,实现药械产品的智能化评测、自动化生产,贯通药械智能化研发和生产。

## 9. 推动 AI 技术加速新材料研发

实施“人工智能+新材料”创新发展行动计划。研究适用于材料多尺度问题的基础理论和算法,开发适用于小样本和高维数据的机器学习方法,构建材料领域专家级科学数据库,加快材料科学理论突破和前沿新材料发现。面向材料发现—设计—制备—表征—测试—服役全流程,研发材料智能设计方法,实现组分、配方、结构的设计与筛选,合成和制备工艺的多目标优化。加速 AI 技术在新材料生产制造全过程的赋能应用,实现自动化生产线的精准操控,开发系列工艺包,辅助材料制造工艺优化改进,贯通材料智能化研发和生产。

## 10. 推动 AI 赋能高端科学仪器创新

鼓励人工智能技术赋能科学仪器发展,集中攻关自动化智能化电子显微镜、谱学仪器及高性能探测器等关键设备,推进仪器接口互通、通讯协议统一和数据开放,实现不同科学仪器间的数据交换、协同作业和智能决策,提升科学仪器高通量筛选、表征、分析和数据处理能力。鼓励高校、科研院所、新型研发机构与企业联合,研发具有新型表征和智能控制的高端科学仪器设备,加速科学仪器的全流程自动化、智能化和高通量改造升级。通过示范工程和试点应用,推动新型仪器设备在科研和工业领域的广泛应用,提升国产仪器在国际市场的竞争力。

## 11. 探索 AI 技术加速工业智能化升级

研发流体力学、多物理场耦合等工业仿真软件,提高模拟精

度,全面评估和优化复杂系统的性能,提升航空航天、汽车、消费电子等领域产品制造水平。研究利用 AI 技术和多尺度模拟技术优化能源化工产品加工工艺,实现高通量筛选和智能化设计,提升转化质量和效率,降低工业生产成本。以 AI 技术加速燃烧等离子体长时间、高参数、稳态运行约束和输运等物理和仿真技术研究,推动物理装置与数字孪生聚变堆的映射技术研究,加快数字聚变堆开发建设。开发面向工业领域的垂类大模型,探索 AI 技术赋能工业生产、控制系统升级改造,提升软件生态迁移效率。

#### (四)营造良好创新生态

##### 12. 搭建科学智能公共服务创新平台

依托重点领域科技创新企业,协同科研和产业创新主体,共同推出面向产业应用的体系化成果,打造集科研协作、赛事平台、算力支持与教学实训于一体的科研协作云平台,形成开放共享的服务能力,优化科研流程,提高科研效率,加快科学研究产业化落地。

##### 13. 大力吸引和培育创新人才

持续实施人才引进专项措施,着力引进一批高水平研究团队。完善本土人才培养体系和服务保障机制,创新人才培养模式,强化产学研协同育人,构建科技创新与产业创新深度融合的重要载体,加速培育产业技术创新人才。鼓励高等学校、科研机构加强交叉学科专业设置,培养一批既懂 AI 技术又懂应用的复合型人才。

##### 14. 构建多渠道投融资服务体系

协同国家级人工智能产业基金,北京市产业引导基金等,市场

化基金,企业等加大对科学智能领域的投资力度。构建多元科技金融服务体系,引导银行、担保、保险等金融机构开展面向科学智能的产品和服务创新,通过投保贷联动等模式,加大融资服务力度。推动人工智能企业利用多层次资本市场发展壮大,服务企业挂牌或上市。

#### 15. 打造科学智能产业集群

优化科学智能产业空间布局,结合全市人工智能应用“一区一品”发展布局,鼓励优势区根据主导产业定位,明确科学智能发展方向,支撑相关产业创新主体集聚发展,打造一批引领性强、配套设施完善、集聚度高的高端产业载体。加强区域间信息交流与供需合作对接,打通前沿技术成果转化、创业孵化和产业化服务支撑链条,形成特色鲜明、优势互补的区域发展格局。

#### 16. 推动国际交流合作

加强国内外学术交流与合作,组织开展科学智能峰会、中关村论坛科学智能平行论坛等具有国际影响力的学术会议。鼓励筹办科学智能相关赛事活动,推动人工智能在科学研究中的创新应用,鼓励国内外优势团队参与,充分链接理论与实践,发掘潜力突出的创新团队和成果,推动成果落地转化。

#### 17. 构建开源开放生态体系

建设科学智能开源社区,广泛吸引全球科研人员参与共建及成果共享;支持高等学校、科研机构和企业开展深入合作,凝聚学术界与产业界资源,加快推进科学智能数据、算法、工具软件、科学

仪器设备、智能实验室等开放共享。

### 三、保障措施

强化资源统筹,深化跨部门协同机制,积极承担国家级重点任务,主动融入国家战略体系,汇聚产学研用各方资源。创新组织机制,探索新型项目组织方式,推动创新主体围绕科学智能前沿技术及产业应用开展协同创新。加强供需对接,定期举办线上或线下供需对接会,持续开展科学智能新技术、新产品推广与应用,打造标杆示范。强化决策支撑,依托人工智能战略咨询专家委员会,为重大科研攻关方向遴选与技术路线论证提供权威决策支撑。

本行动计划自印发之日起施行,有效期至2027年12月31日。本行动计划实施期间如遇国家和北京市相关政策调整,按照国家和北京市最新政策规定执行。