

2025年中国AI for Science行业概览：创新驱动：AI如何助力科学创新的无限可能

China AI for Science Industry

中国AI for Science产业

概览标签：AI for Science、算力基础设施、高通量实验

报告提供的任何内容（包括但不限于数据、文字、图表、图像等）均系头豹研究院独有的高度机密性文件（在报告中另行标明出处者除外）。未经头豹研究院事先书面许可，任何人不得以任何方式擅自复制、再造、传播、出版、引用、改编、汇编本报告内容，若有违反上述约定的行为发生，头豹研究院保留采取法律措施，追究相关人员责任的权利。头豹研究院开展的所有商业活动均使用“头豹研究院”或“头豹”商号、商标，头豹研究院无任何前述名称之外的其他分支机构，也不授权或聘用其他任何第三方代表头豹研究院开展商业活动。

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

研究目标 Research objectives

01 | 研究目的

- 了解和分析中国AI for Science的驱动发展、范式变迁、产业应用

02 | 研究目标

- 了解中国AI for Science的发展历史和范式变迁过程
- 深入了解中国AI for Science行业核心技术情况
- 了解AI for Science的产业应用深度

03 | 本报告关键问题的回答

- **发展历程：**中国AI for Science行业目前所处阶段如何？
- **驱动因素：**中国AI for Science驱动构成？
- **核心技术：**中国AI for Science的核心技术有哪些？发展情况？



第一部分：行业综述

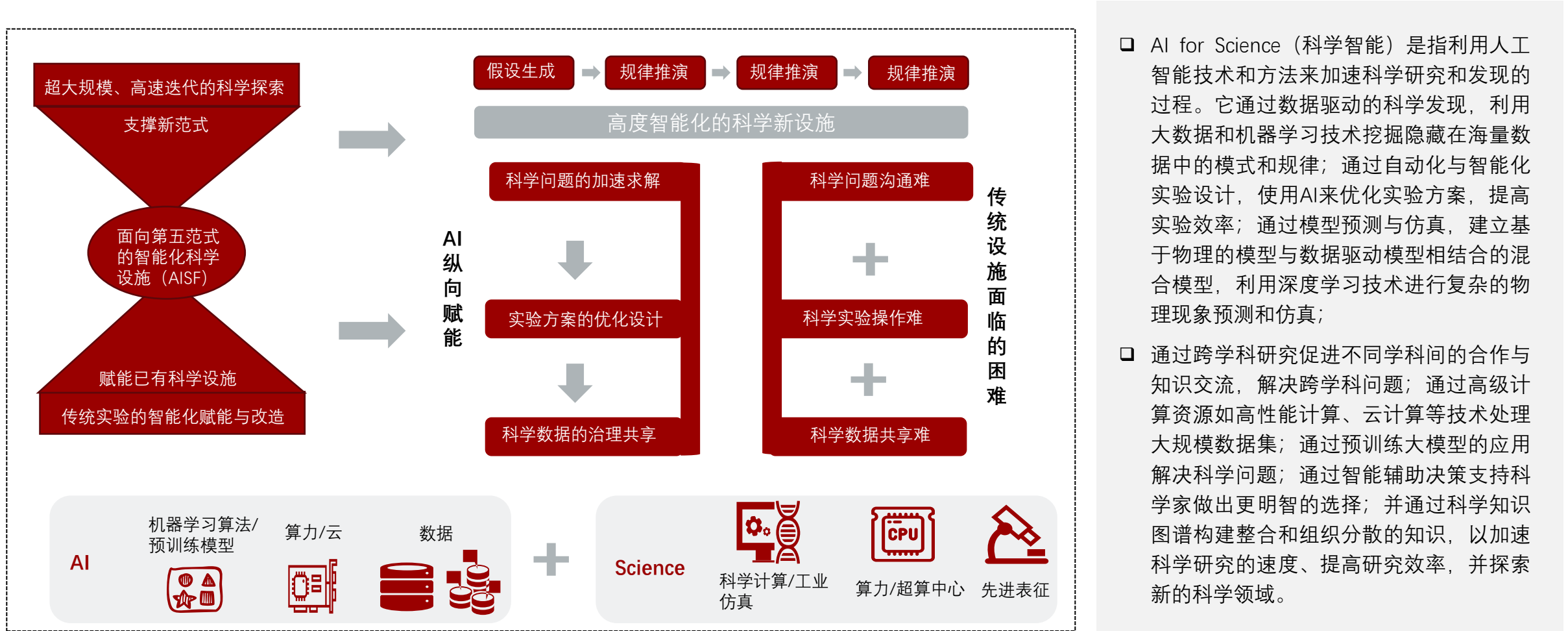
主要观点：

- AI for Science 的定义：AI for Science（科学智能）是指利用人工智能技术和方法来加速科学研究和发现的过程。它通过数据驱动的科学发现，利用大数据和机器学习技术挖掘隐藏在海量数据中的模式和规律。
- 模型驱动：模型驱动的科学研究的范式结合了传统的理论方法和现代计算技术，使得科学家能够在没有实际实验的情况下探索复杂系统的特性和行为。
- 数据驱动：数据驱动的科学研究的范式充分利用了大数据的力量和先进的分析技术，使科学家能够在没有深入理论背景的情况下探索复杂系统的行为。
- 范式变迁过程：科学范式的变迁是一个渐进的过程，每一步都基于前一步的技术和方法论的发展。从直接观察到理论构建，再到计算模拟和数据挖掘，最后到AI辅助的科学研究，每一次转变都推动了科学技术的进步。
- 发展历程：AI for Science的发展是一个持续的过程，从最初的初步探索到现在的广泛应用，未来还将向着深度融合的方向发展。随着AI技术的不断进步，AI for Science有望成为推动科学研究和发现新知识的强大工具。

中国AI for Science行业综述——定义

AI不仅提高了科学研究的效率和准确性，还通过发现新的模式和关系推动科学创新，增强了对复杂系统的预测能力

中国AI for Science 行业综述——定义



- AI for Science（科学智能）是指利用人工智能技术和方法来加速科学研究和发现的过程。它通过数据驱动的科学发现，利用大数据和机器学习技术挖掘隐藏在海量数据中的模式和规律；通过自动化与智能化实验设计，使用AI来优化实验方案，提高实验效率；通过模型预测与仿真，建立基于物理的模型与数据驱动模型相结合的混合模型，利用深度学习技术进行复杂的物理现象预测和仿真；
- 通过跨学科研究促进不同学科间的合作与知识交流，解决跨学科问题；通过高级计算资源如高性能计算、云计算等技术处理大规模数据集；通过预训练大模型的应用解决科学问题；通过智能辅助决策支持科学家做出更明智的选择；并通过科学知识图谱构建整合和组织分散的知识，以加速科学研究的速度、提高研究效率，并探索新的科学领域。

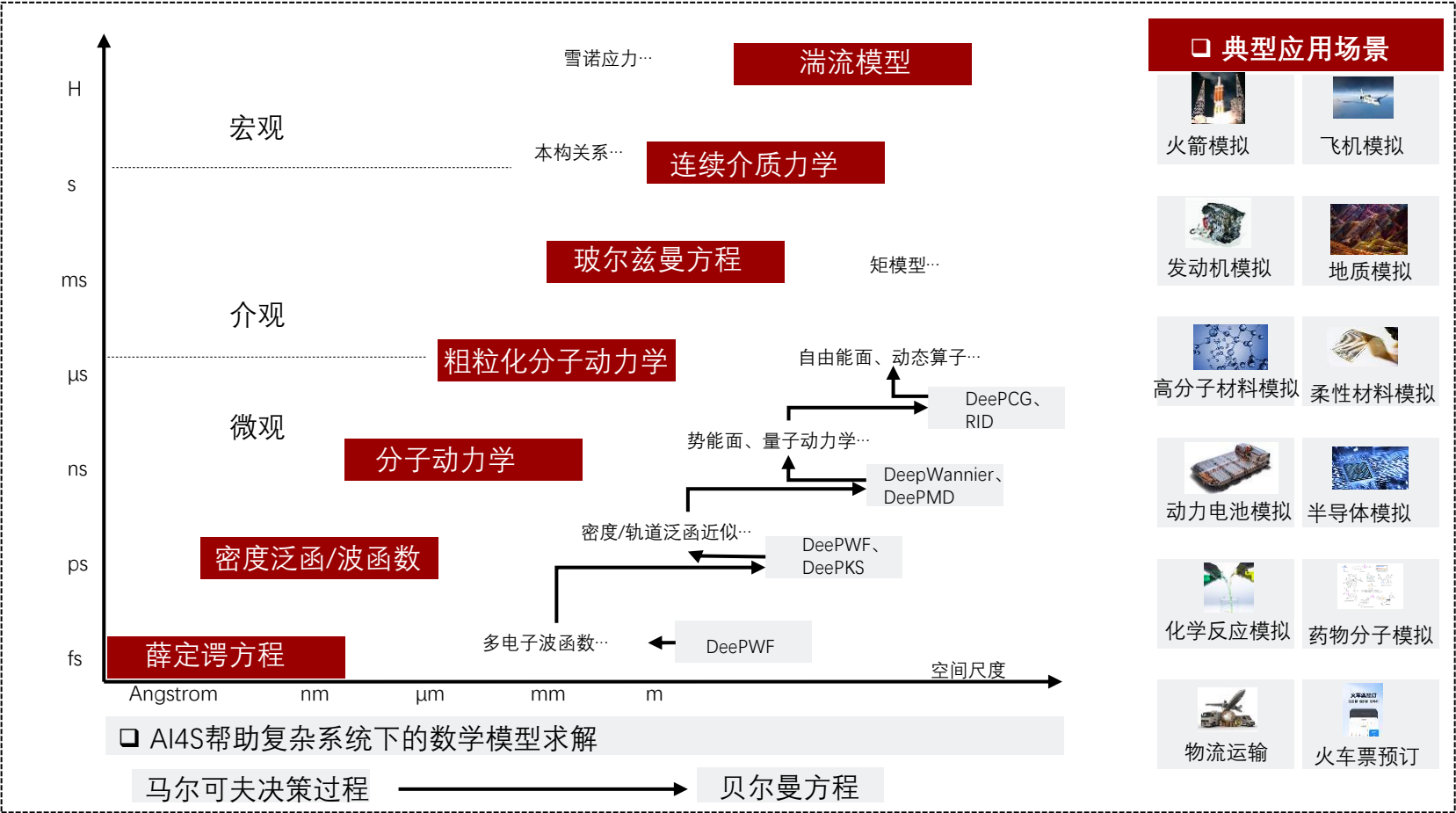
来源：中国科学院院刊，头豹研究院

中国AI for Science行业综述——模型驱动

模型驱动的科学研究的范式结合了传统的理论方法和现代计算技术，使得科学家能够在没有实际实验的情况下探索复杂系统的特性和行为

中国AI for Science 行业综述——模型驱动

➤ More Physics: 有效应用物理模型



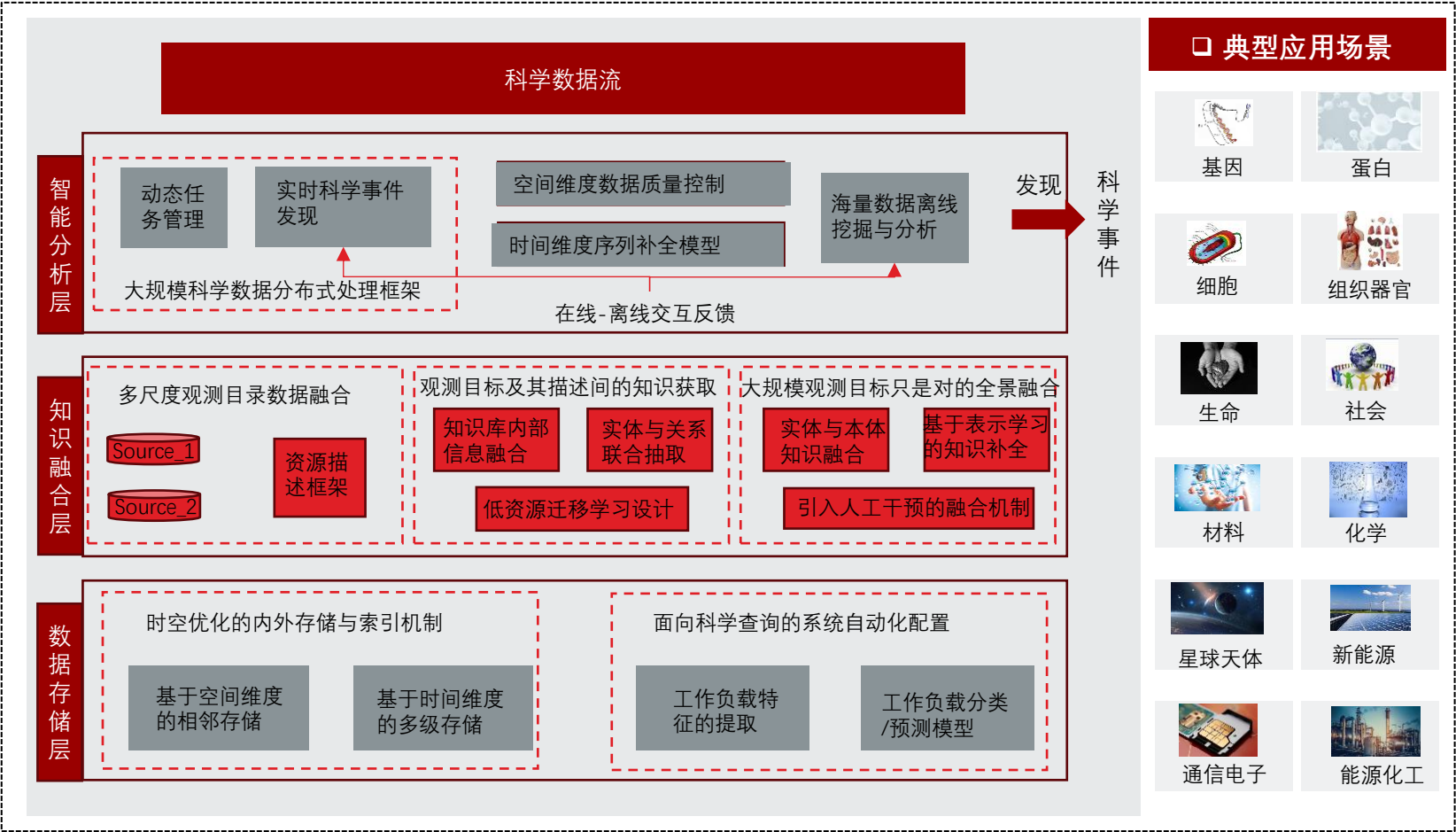
- 模型驱动的科学研究的范式是一种现代科学研究方法，其结合了理论背景与实验数据，通过建立数学模型或计算模型来模拟和预测自然界的现象。这一范式首先需要基于坚实的理论基础建立数学方程，并通过参数化来反映实际系统的特点。接着，利用数值方法求解这些方程，并借助软件工具如MATLAB或Python中的科学计算库来进行计算模拟。为了提高模型的准确性，还需要收集实验数据来校准模型参数，模型不仅可以用来预测未来的系统行为，还可以用于优化设计参数，找到最佳配置，甚至为决策者提供支持。
- 最终，通过可视化手段展示模拟结果，确保模型输出具有足够的可解释性，以便研究人员能够理解模型背后的机制，并形成反馈循环来不断改进模型。这种研究方法已经被广泛应用于多个领域，如气候模型、生物医学模型、材料科学等，极大地提高了科学研究的效率和精确度。

来源：NatureAI，头豹研究院

中国AI for Science行业综述——数据驱动

数据驱动的科学研究的范式充分利用了大数据的力量和先进的分析技术，使科学家能够在没有深入理论背景的情况下探索复杂系统的行为

中国AI for Science 行业综述——数据驱动



- 数据驱动的科学研究的范式是一种新兴的研究方法，它强调利用大量数据和先进的数据分析技术来探索自然现象和解决科学问题。这一范式首先需要收集大量、高质量的数据，这些数据可以来源于实验测量、传感器记录等，并经过数据清洗以保证质量。随后，通过对数据进行统计分析和应用机器学习算法。
- 接下来，构建数据驱动模型直接从数据中学习，而无需预先设定特定的数学形式或物理模型，并通过独立的数据集来验证模型的泛化能力和预测准确性。此外，还需要确保模型输出具有足够的可解释性，以便研究人员能够理解模型背后的机制，并形成反馈循环来不断改进模型。这种研究方法已经被广泛应用于多个领域，如气候科学、生物医学研究、材料科学和社会科学等，极大地提高了科学研究的效率和精确度。

来源：国家自然科学基金委员会，专家访谈，头豹研究院



更多免费行业报告

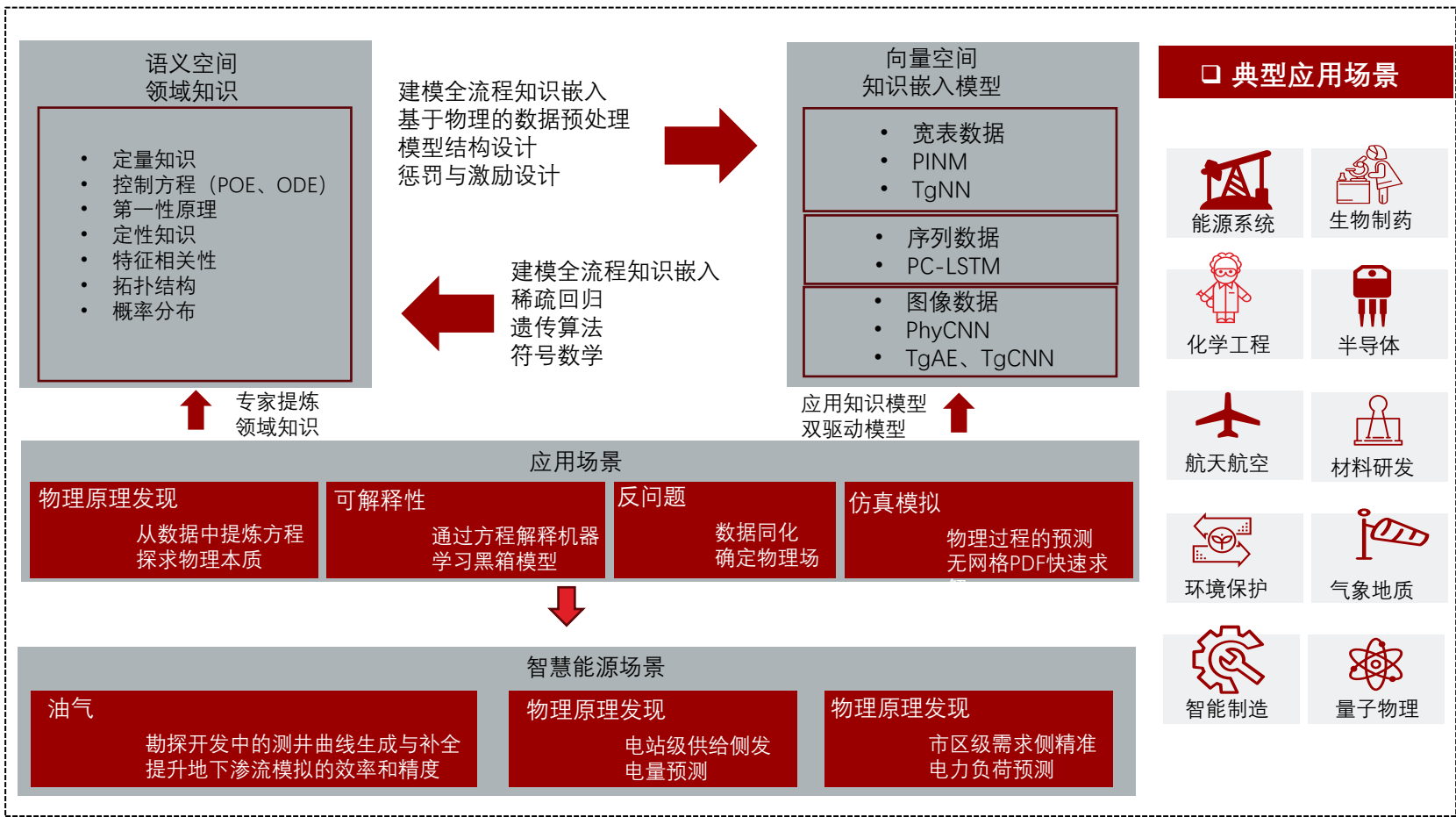
并购买

www.ipoipo.cn

中国AI for Science行业综述——模型与数据融合驱动

数据与模型融合驱动的科学研究的范式结合了数据驱动和模型驱动的优点，利用数据驱动方法自动发现模式和规律，同时结合模型驱动方法中的先验知识和理论背景，构建更为可靠和可解释的模型

中国AI for Science 行业综述——数据与模型融合驱动



- ❑ 数据与模型融合驱动的科学研究的范式是一种综合研究方法，它结合了数据驱动和模型驱动两种方法的优势。该范式首先需要收集大量的实验数据或模拟数据，并对原始数据进行预处理以确保数据质量。在此基础上，利用相关的科学理论和先验知识来指导模型的设计，确保模型具有一定的物理意义或生物学合理性，并通过实验数据来校准模型参数。接着，采用机器学习算法和深度学习技术来发现数据中的模式和规律，并不断优化模型性能。通过融合数据驱动和模型驱动的方法，如通过深度学习技术嵌入物理定律或生物学原理，形成一种新型的融合模型。这些模型可以用来预测未来或未观察到的情况下的系统行为，为决策者提供依据，并帮助他们在复杂情况下做出更明智的选择。
- ❑ 此外，还需要确保模型输出具有足够的可解释性，以便研究人员能够理解模型背后的机制，并形成反馈循环来不断改进模型。

来源：机器之心，头豹研究院

中国AI for Science行业综述——范式变迁过程

科学范式的变迁是一个渐进的过程，每一步都基于前一步的技术和方法论的发展。从直接观察到理论构建，再到计算模拟和数据挖掘，最后到AI辅助的科学研究，每一次转变都推动了科学技术的进步

中国AI for Science 行业综述——范式变迁过程

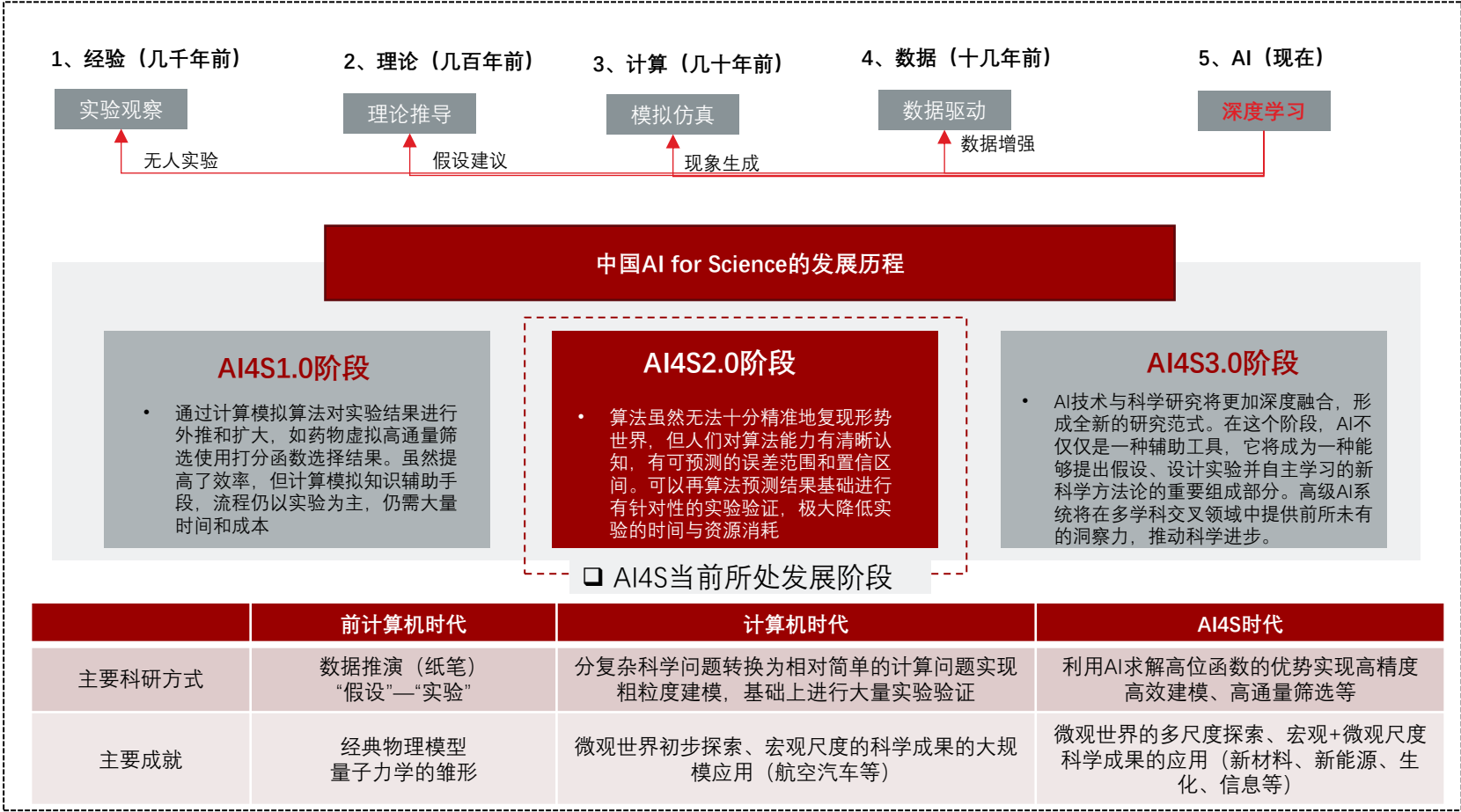
科学研究范式的演进



中国AI for Science行业综述——发展历程

AI for Science的发展是一个持续的过程，从最初的初步探索到现在的广泛应用，未来还将向着深度融合的方向发展。随着AI技术的不断进步，AI for Science有望成为推动科学研究和发现新知识的强大工具

中国AI for Science 行业综述——发展历程



- AI for Science的发展历程可以分为三个阶段：第一阶段始于20世纪末至21世纪初，科学家开始初步探索将机器学习技术应用于科学研究，主要是利用简单的机器学习算法进行数据分类和回归分析；第二阶段从2010年代中期至今，AI for Science进入了快速发展期，深度学习模型被广泛应用于生物医学、材料科学、天文学等多个科学领域，出现了一系列重要的里程碑事件，如使用AI预测蛋白质结构和开发新药物；第三阶段展望未来几年到几十年，预计AI将成为科学研究的标准工具，与科学研究深度融合，推动科学范式的重大变革，加速科学发现的速度，并解决长期以来悬而未决的重大科学问题。
- 目前正处于AI for Science的第二阶段，这一阶段的重点是利用深度学习技术解决科学问题，特别是在数据密集型领域，如生物信息学、化学、物理学等，并开发强大的AI算法和工具来支持更复杂的科学任务。

来源：专家访谈，迪乐姆教育科技，头豹研究院

第二部分：技术分析

主要观点：

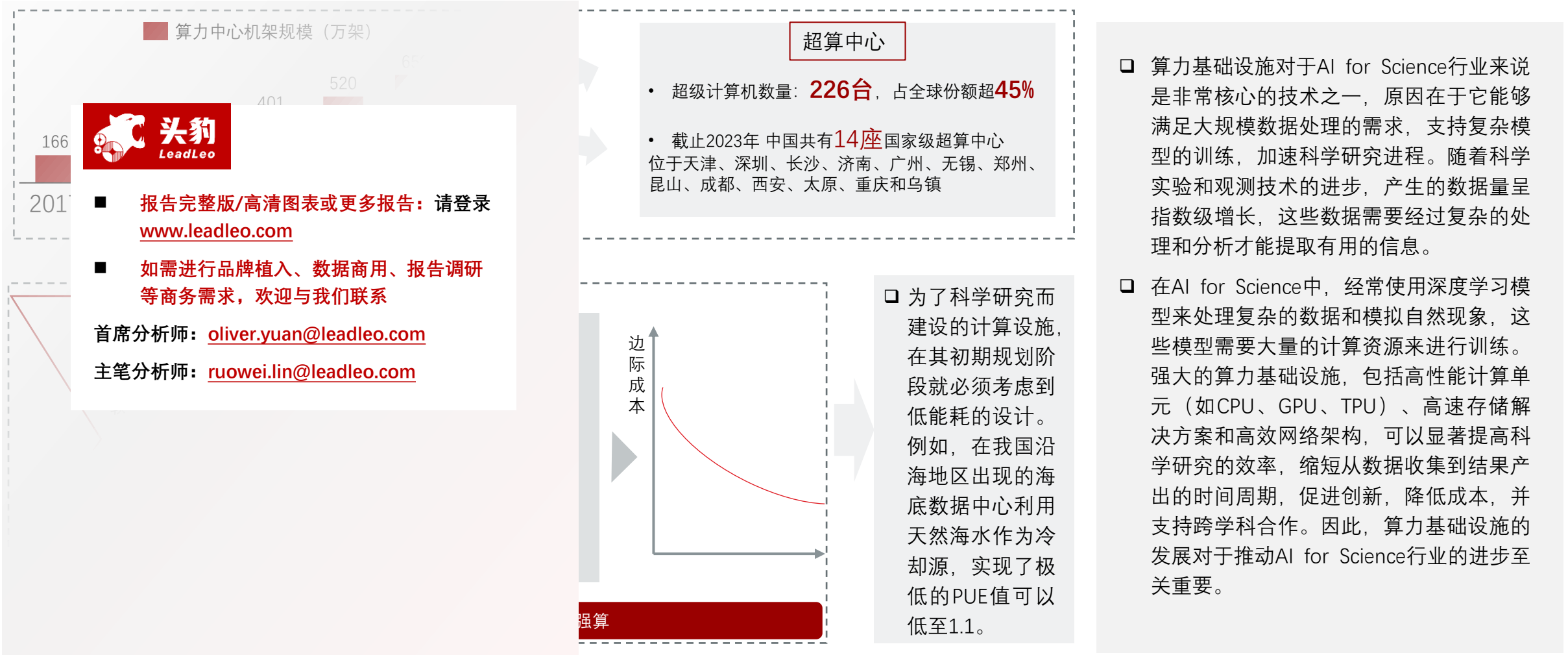
- **核心技术：**AI for Science的核心技术包括高性能算力、数据管理基础设施、科学计算软件、预训练大模型和高通量实验，共同加速了科学研究和发现的过程



中国AI for Science行业综述——算力基础设施

算力基础设施能够提供必要的计算资源来处理大规模数据、训练复杂的机器学习模型，并加速科学研究的进程

AI for Science 行业的核心技术分析——算力基础设施

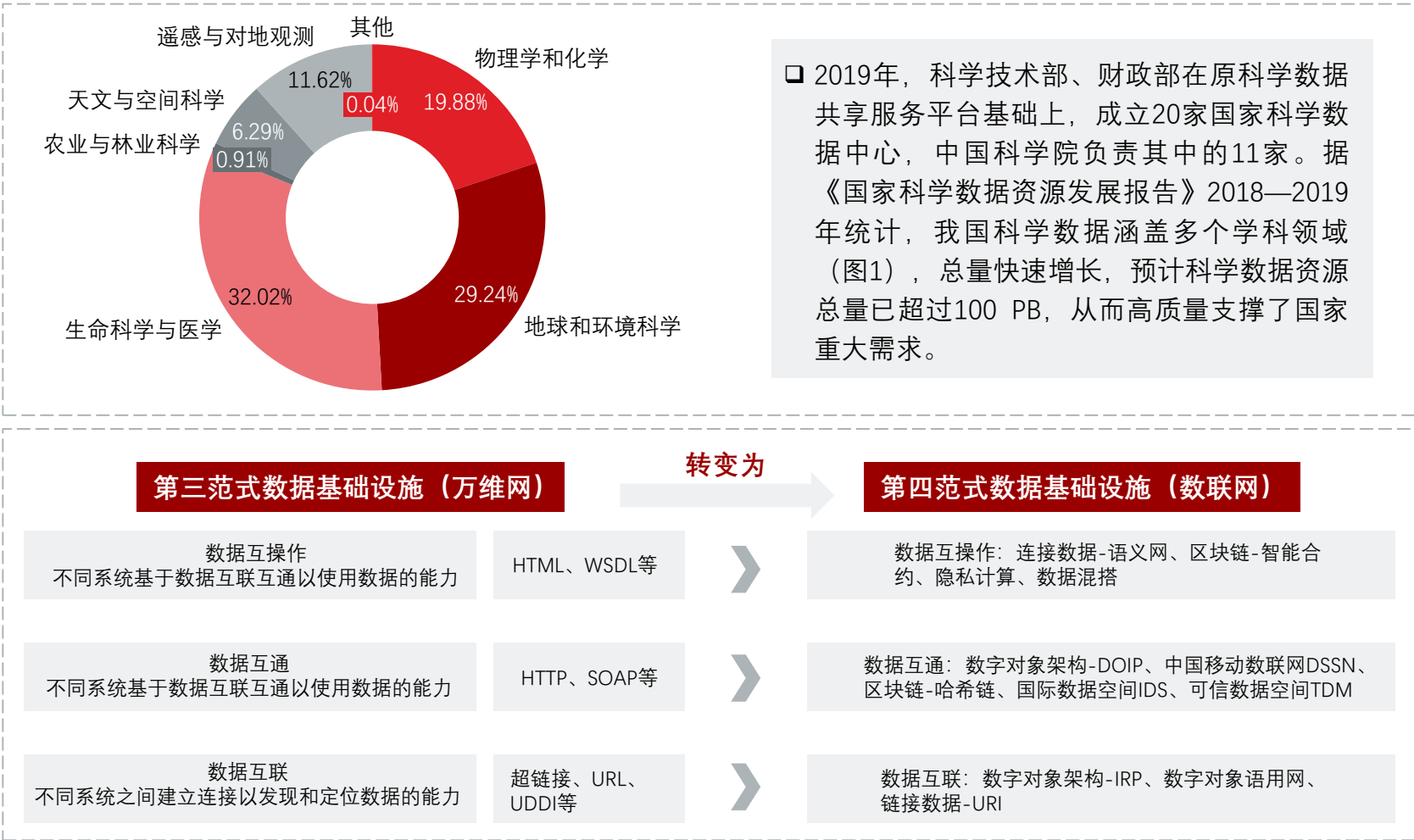


来源: 专家访谈, 中国信通院, 头豹研究院

中国AI for Science行业综述——软硬件数据基础设施

软硬件数据基础设施对于AI for Science行业至关重要，因为它能够提供必要的计算资源和数据管理能力，加速科学研究的进程

AI for Science 行业的核心技术分析——软硬件数据基础设施



- 软硬件数据基础设施对于AI for Science行业来说是非常核心的技术之一，原因在于它为科学研究提供了必要的计算资源和数据管理能力。
- 随着科学实验和观测技术的进步，产生的数据量呈指数级增长，高性能的存储解决方案能够支持大规模数据的快速读写和高效管理。高性能计算单元，如CPU、GPU、TPU等，能够提供强大的并行计算能力，这对于处理大规模数据集和训练复杂的机器学习模型至关重要。并行计算技术和软件栈，如编程框架（TensorFlow、PyTorch等）和并行计算库（MPI、OpenMP等），简化了模型开发和部署的过程，并支持大规模数据的分布式处理。这些强大的软硬件基础设施能够加速科学研究的进程，支持实时分析和模拟预测，促进创新与跨学科合作，并通过优化计算资源的使用来降低科学研究的成本。

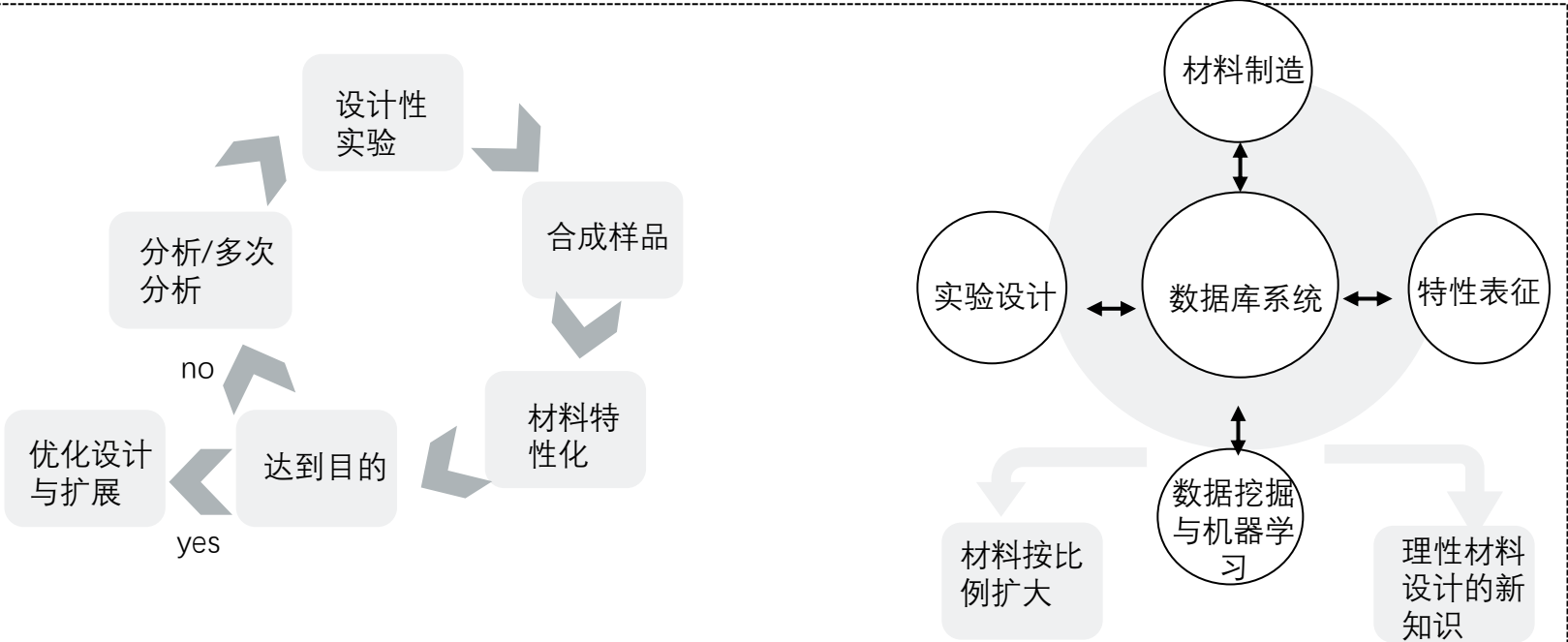
来源：专家访谈，悦智网，头豹研究院

中国AI for Science行业技术分析——高通量实验

高通量实验通过集成自动化设备和技术，高通量实验平台能够快速执行复杂的实验方案，生成大量数据用于训练机器学习模型

AI for Science 行业的核心技术分析——高通量实验

➤ 以材料研发为例，了解高通量实验技术



❑ (a) 传统材料研发设计流程

❑ (b) 高通量材料研发新模型

作为“材料基因组计划”（Materials Genome Initiative, MGI）的核心组成部分，高通量实验技术已经在多种材料的研究与开发过程中取得了显著成效。它能够显著缩短新材料从实验室研发到实际应用的时间周期，因此被视为推动新材料创新和产业化进程的重要工具。

- ❑ 高通量实验是AI for Science行业中非常核心的技术，因为它能够提供大规模、快速的数据生成能力，从而极大地加速科学研究的进程。这种技术通过生成大量的实验数据来训练机器学习模型，并且由于实验规模大，可以涵盖广泛的样本，增加数据的多样性和代表性。高通量实验能够快速执行多次实验，加快研究周期，缩短从假设到验证的时间。在材料科学与药物发现领域，它可以快速筛选出具有特定性质的新材料或潜在的药物候选物。
- ❑ 此外，高通量实验平台通常集成自动化设备，如机器人手臂，可以连续不断地进行实验操作，减少人为错误，提高实验的准确性和重复性。这些大规模数据可以用于训练更强大的机器学习模型，并在新的实验数据上进行验证，以评估其泛化能力和准确性。高通量实验平台还可以促进不同科学领域之间的数据共享，加强跨学科合作。

来源：专家访谈，北京科学智能研究院，头豹研究院

第三部分：产业发展实践分析

主要观点：

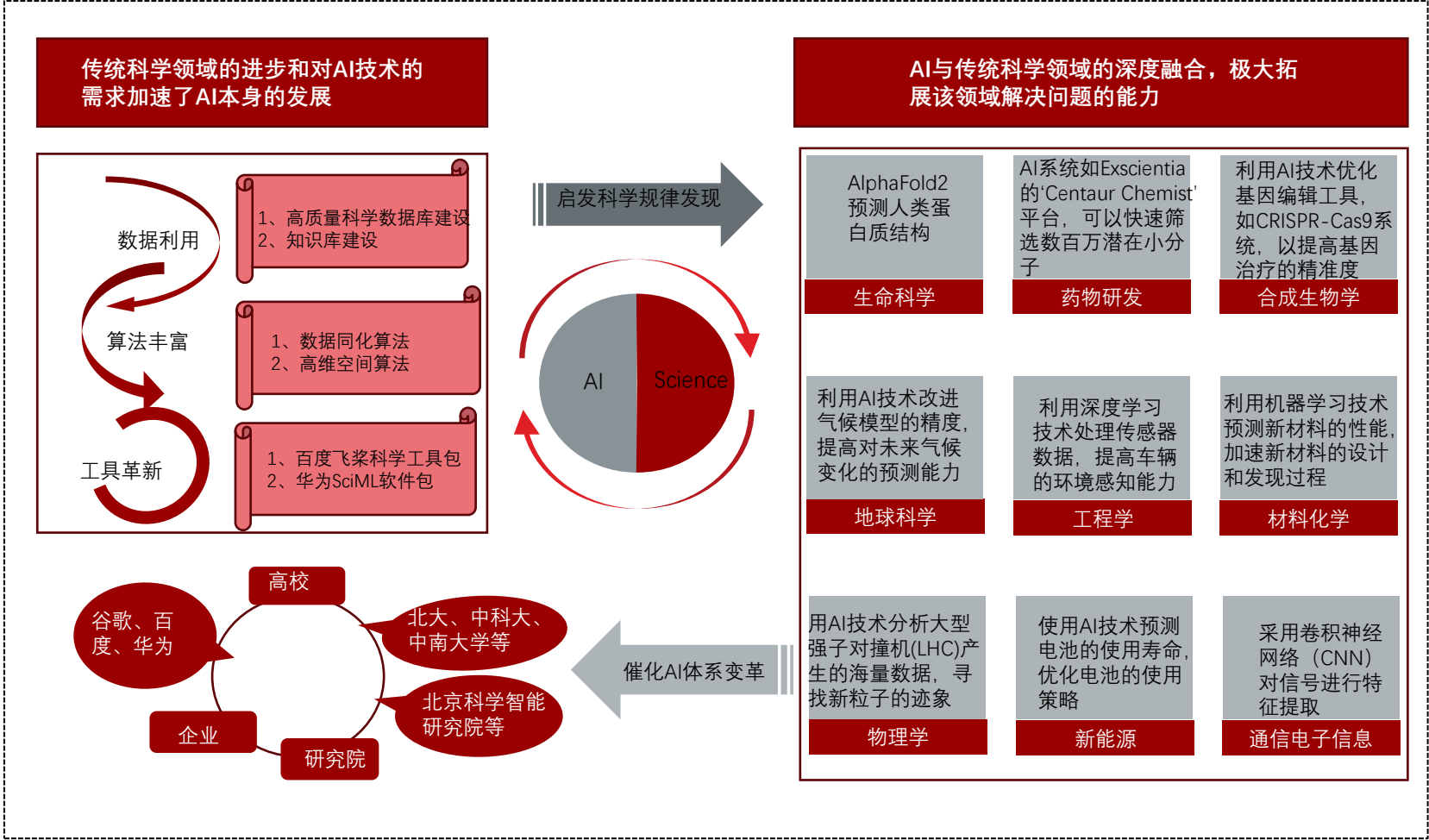
- AI for Science的核心产业发展实践分析：AI for Science是一个跨学科领域，它通过将人工智能技术应用于物理、化学、生物学、医学等传统科学领域，展现出推动科学研究和技术创新的巨大潜力。



中国AI for Science行业发展实践——应用场景

AI for Science正在多个科学领域中展现出巨大的潜力和应用前景，推动了科学研究和技术创新的进程

中国AI for Science 行业发展实践——应用场景分析



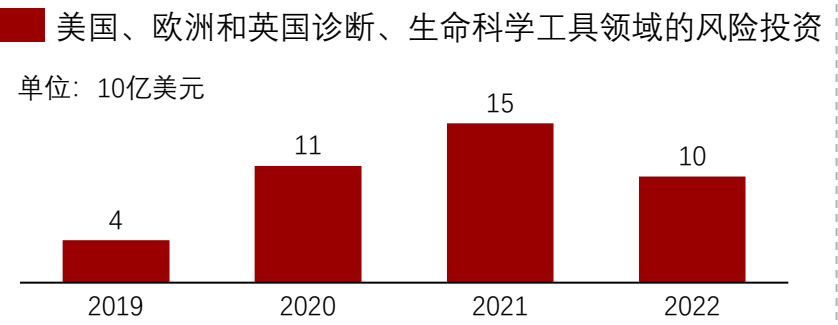
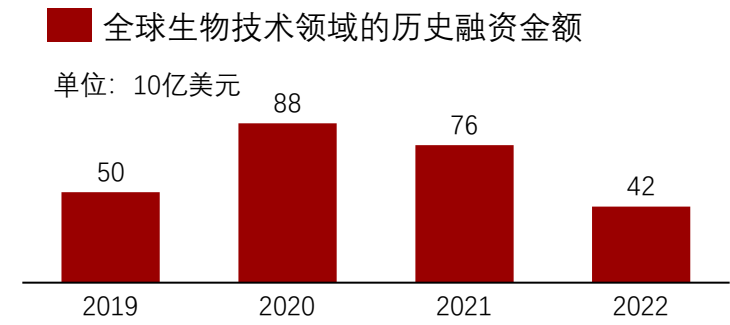
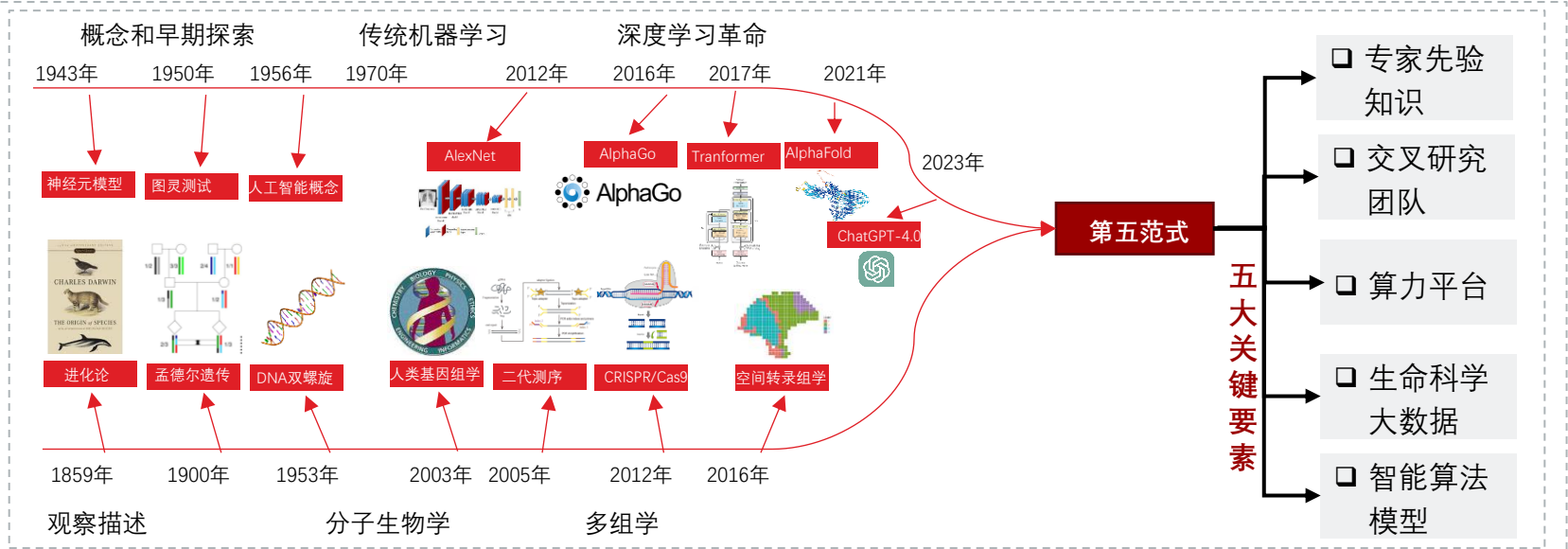
- AI for Science是一个跨学科领域，它通过将人工智能技术应用于物理、化学、生物学、医学等传统科学领域，展现出推动科学研究和技术创新的巨大潜力。在生命科学领域，AI正驱动药物研发和个性化医疗取得新突破；合成生物学中，AI与工程模式相结合，打造了“假设、构建、测试、学习”的闭环，优化基因编辑技术；药物研发方面，AI通过计算手段减少实验时间和成本，助力新药发现；物理学中，AI技术如LapNet算法加速量子化学计算；工程学和材料化学领域，AI预测材料特性，加速新材料研发；新能源领域，AI提高电池性能和能源效率。
- AI for Science的发展不仅需要技术创新，还需要政策支持、数据开放、软硬件生态完善、算力基础设施建设以及多学科交叉人才培养，以实现其在科学研究中的突破性应用。

来源：专家访谈，云技术，头豹研究院

中国AI for Science行业发展实践——生命科学

AI for Science正在生命科学领域引发变革，通过加速药物研发、优化基因组学研究、预测蛋白质结构、推动合成生物学发展、辅助疾病筛查和治疗、设计RNA药物、预测新抗原以及优化药物分子设计等应用

中国AI for Science 行业发展实践——生命科学



来源: 专家访谈, 中国科学院院刊, 头豹研究院



更多免费行业报告

并购家

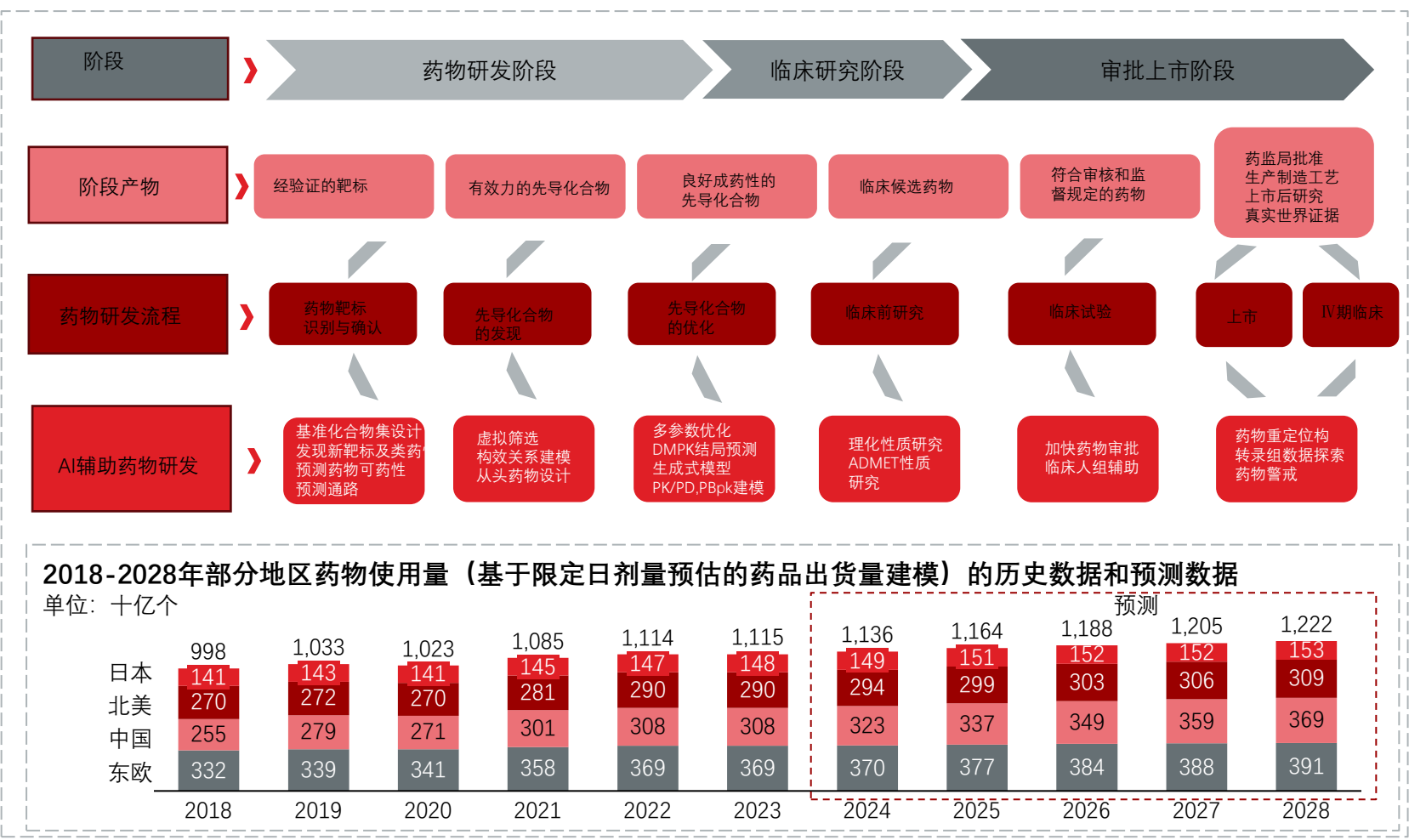
www.ipoipo.cn

- AI for Science在生命科学领域的应用正推动着行业快速发展，它在药物研发中通过分析海量数据，加速了药物发现和开发流程，提高了研发效率和成功率。AI技术在基因组学的应用深化了我们对疾病与基因关系的理解，为个性化医疗提供了强有力的数据支持。深度学习模型，如AlphaFold2，在蛋白质结构预测方面取得了突破，为生命科学领域带来了新的计算工具。AI与合成生物学的结合，促进了从实验室到工业规模的生物设计和生产。
- 在疾病筛查和治疗方面，AI技术通过分析医疗数据，辅助医生做出更准确的诊断和治疗决策。此外，AI在RNA药物设计、新抗原预测和药物分子设计中也展现出巨大潜力，推动了癌症免疫治疗和新药研发的进步。随着技术的持续创新，AI for Science预计将为人类健康带来更多的福祉和科学突破。

中国AI for Science行业发展实践——药物研发

AI在药物研发中的应用前景广阔，预计将进一步提高新药研发的成功率，降低成本，并缩短药物上市时间

中国AI for Science 行业发展实践——药物研发



- AI for Science正在彻底改变药物研发行业的面貌，其应用贯穿了从药物发现到临床试验的整个流程。AI技术通过分析庞大的生物医学数据，快速识别潜在的药物靶点，加速化合物的筛选和优化。例如，Exscientia公司的AI平台在短短8个月内就设计出了原本需要数年才能发现的新药候选分子。AI还助力药物重定向，快速找到可用于治疗特定疾病的现有药物。在临床试验设计中，AI通过分析患者数据，预测药物反应，提高试验成功率。AI技术在蛋白质结构预测方面也取得显著进展，如AlphaFold2，这有助于深入理解药物与靶标的相互作用。
- 此外，AI正推动个性化医疗的发展，通过深度分析患者的多组学数据，为特定患者群体定制药物。尽管存在数据质量、算法复杂性和监管等挑战，AI预计将在提高新药研发成功率、降低成本和缩短药物上市时间方面发挥越来越关键的作用。

来源：专家访谈，艾意凯咨询，头豹研究院

中国AI for Science行业发展实践——地球科学

AI for Science 在地球科学领域发挥了重要作用，通过提供更准确的数据分析和预测模型，帮助科学家们更好地理解 and 应对地球系统中的复杂问题

中国AI for Science 行业发展实践——地球科学

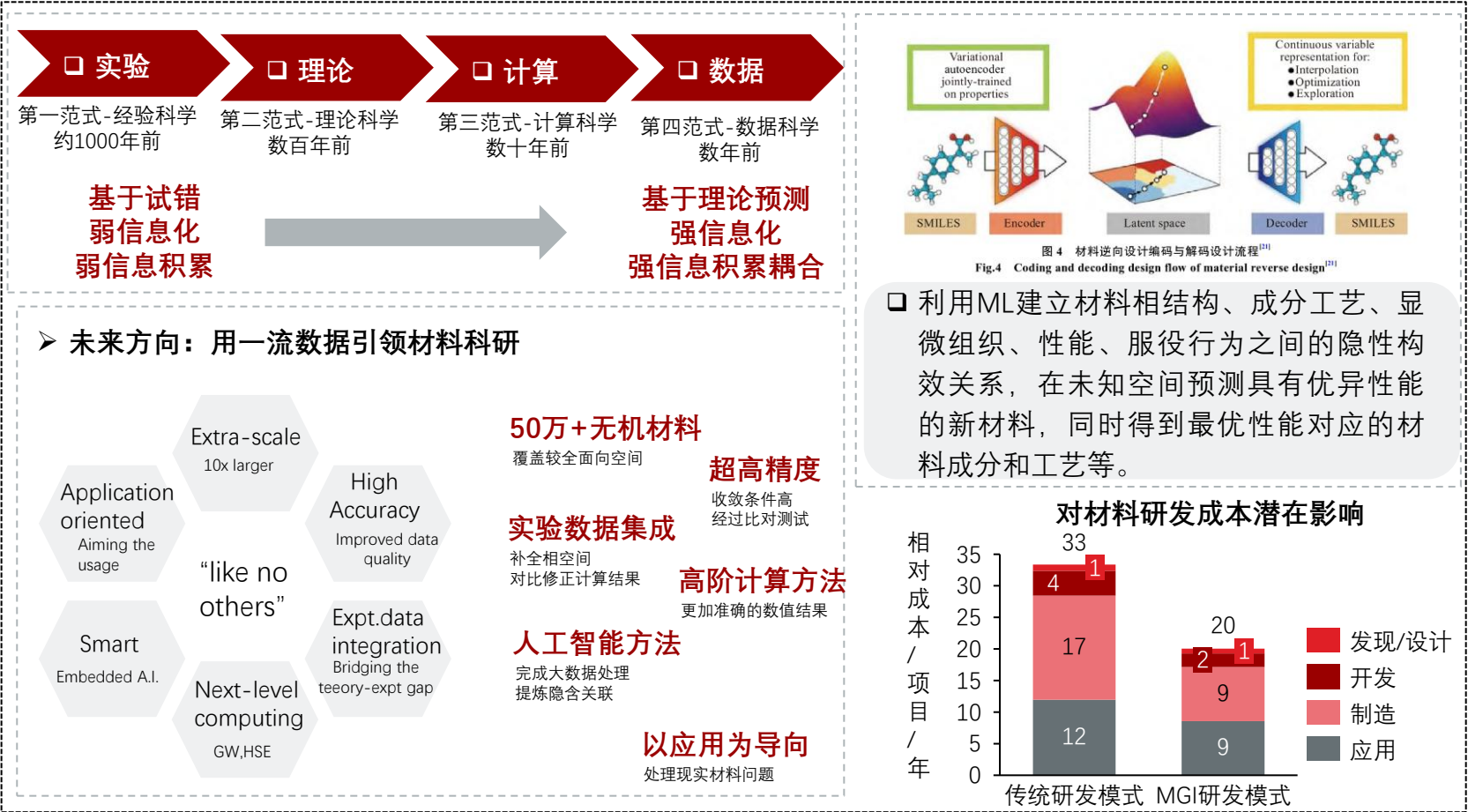


- AI for Science 在地球科学领域的应用十分广泛，涵盖了多个方面，帮助解决了地球科学中的一些复杂问题。具体而言，在气候变化研究中，使用机器学习方法改进气候模型，提高对未来气候变化的预测精度，并利用深度学习等技术预测极端天气事件的发生概率和强度。在地质学与地质灾害领域，通过分析历史地震数据和地球物理信号尝试预测地震发生的可能性，并利用AI技术分析地震波形数据，确定震源机制和断层特性。
- 在大气科学中，基于历史气象数据和污染物浓度数据预测空气质量指数，并利用计算机视觉技术识别和分类云层类型，预测天气变化。在地质勘探领域，利用AI分析地质数据辅助寻找新的矿藏，并通过机器学习技术解释地震波数据推断地下结构。在遥感影像分析方面，通过分析卫星图像监测土地覆盖的变化，并利用遥感数据评估植被生长状态和健康状况。

中国AI for Science行业发展实践——材料化学

AI for Science 在材料化学领域的应用非常广泛，通过提供更准确的数据分析和预测模型，帮助科学家们更好地理解 and 应对材料系统中的复杂问题，从而提升材料的性能、效率和可持续

中国AI for Science 行业发展实践——材料化学



来源：专家访谈，机器之心，头豹研究院

- AI for Science 在材料化学行业中的应用非常广泛，涵盖了多个方面，帮助解决了材料化学领域的一些复杂问题。具体而言，在材料设计与发现方面，利用机器学习技术预测新材料的性能，加速新材料的设计和发现过程，并通过深度学习技术预测材料的物理化学性质。
- 在催化剂设计方面，使用AI技术优化催化剂的选择，提高化学反应的效率，并通过数据分析预测最佳的化学反应路径。在材料性能优化方面，利用AI辅助设计更稳定的材料结构，并通过机器学习技术分析材料中的缺陷，改善材料性能。在材料老化预测方面，使用AI技术预测材料的老化速度和寿命，并通过数据分析评估材料在不同环境下的耐久性。在材料合成过程监控方面，使用AI技术实时监控材料合成过程中的关键参数，并通过监控大量数据预测合成过程可能出现的问题。

方法论

- ◆ 头豹研究院布局中国市场，深入研究19大行业，532个垂直行业的市场变化，已经积累了近100万行业研究样本，完成近10,000多个独立的研究咨询项目。
- ◆ 研究院依托中国活跃的经济环境，研究内容覆盖整个行业的发展周期，伴随着行业中企业的创立，发展，扩张，到企业走向上市及上市后的成熟期，研究院的各行业研究员探索和评估行业中多变的产业模式，企业的商业模式和运营模式，以专业的视野解读行业的沿革。
- ◆ 研究院融合传统与新型的研究方法，采用自主研发的算法，结合行业交叉的大数据，以多元化的调研方法，挖掘定量数据背后的逻辑，分析定性内容背后的观点，客观和真实地阐述行业的现状，前瞻性地预测行业未来的发展趋势，在研究院的每一份研究报告中，完整地呈现行业的过去，现在和未来。
- ◆ 研究院密切关注行业发展最新动向，报告内容及数据会随着行业发展、技术革新、竞争格局变化、政策法规颁布、市场调研深入，保持不断更新与优化。
- ◆ 研究院秉承匠心研究，砥砺前行的宗旨，从战略的角度分析行业，从执行的层面阅读行业，为每一个行业的报告阅读者提供值得品鉴的研究报告。

法律声明

- ◆ 本报告著作权归头豹所有，未经书面许可，任何机构或个人不得以任何形式翻版、复刻、发表或引用。若征得头豹同意进行引用、刊发的，需在允许的范围内使用，并注明出处为“头豹研究院”，且不得对本报告进行任何有悖原意的引用、删节或修改。
- ◆ 本报告分析师具有专业研究能力，保证报告数据均来自合法合规渠道，观点产出及数据分析基于分析师对行业的客观理解，本报告不受任何第三方授意或影响。
- ◆ 本报告所涉及的观点或信息仅供参考，不构成任何证券或基金投资建议。本报告仅在相关法律许可的情况下发放，并仅为提供信息而发放，概不构成任何广告或证券研究报告。在法律许可的情况下，头豹可能会为报告中提及的企业提供或争取提供投融资或咨询等相关服务。
- ◆ 本报告的部分信息来源于公开资料，头豹对该等信息的准确性、完整性或可靠性不做任何保证。本报告所载的资料、意见及推测仅反映头豹于发布本报告当日的判断，过往报告中的描述不应作为日后的表现依据。在不同时期，头豹可发出与本报告所载资料、意见及推测不一致的报告或文章。头豹均不保证本报告所含信息保持在最新状态。同时，头豹对本报告所含信息可在不发出通知的情形下做出修改，读者应当自行关注相应的更新或修改。任何机构或个人应对其利用本报告的数据、分析、研究、部分或者全部内容所进行的一切活动负责并承担该等活动所导致的任何损失或伤害。



头豹业务合作

会员账号

可阅读全部原创报告和百万数据，提供PC及移动端，方便触达平台内容

定制报告/词条

行企研究多模态搜索引擎及数据库，募投可研、尽调、IRPR等研究咨询

定制白皮书

对产业及细分行业进行现状梳理和趋势洞察，输出全局观深度研究报告

报告作者



袁栩聪
首席分析师
oliver.yuan@leadleo.com



莫舒棋
行业分析师
kay.mo@leadleo.com

招股书引用

研究覆盖国民经济19+核心产业，内容可授权引用至上市文件、年报

市场地位确认

对客户竞争优势进行评估和证明，助力企业价值提升及品牌影响力传播

行研训练营

依托完善行业研究体系，帮助学生掌握行业研究能力，丰富简历履历

业务咨询

- 客服电话：400-072-5588
- 官方网站：www.leadleo.com

深圳办公室

广东省深圳市南山区粤海街道
华润置地大厦E座4105室
邮编：518057

上海办公室

上海市静安区南京西1717号
会德丰国际广场 2701室
邮编：200040

南京办公室

江苏省南京市栖霞区经济开发
区兴智科技园B栋401
邮编：210046

