



磐石 · 科学基础大模型

中国科学院自动化研究所
中国科学院计算机网络信息中心
中国科学院文献情报中心
中国科学院数学与系统科学研究院
中国科学院高能物理研究所
中国科学院香港创新研究院

中国科学院力学研究所
中国科学院动物研究所
中国科学院空天信息创新研究院
中国科学院上海硅酸盐研究所
中国科学院国家天文台
中国科学院大学

| 2025.8.26

“人工智能+科学” 正在重塑科研范式



重塑科研底层逻辑



倍增科研效率



促进学科融合



加速科学发现



AI

“人工智能+科学”亟待完成平台化转型

单学科散点作坊模式

重复造轮子、科研效率低、泛化性差



化学: Chemllm



数学: MathGPT



医疗: Med-PaLM



生物
xTrim



化学: 智能化学家



数学: DeepSeekMath



地理: 坤元

作坊式的“人工智能+科学”研发模式，与单学科单场景模型工具无法有效支撑交叉学科知识发现

平台化智能科研范式

科学思维、科学专识、推理可靠

智能高效

全流程支撑

跨学科泛化

平台化“人工智能+科学”研究与赋能模式，能够成为跨学科知识融合的核心枢纽，以共性基座带动各领域模型体系构建，为科研新质生产力提供数据模型工具支撑

科研平台与学科大模型



通用与平台型 科研大模型	发布机构	发布时间	功能简介	
NatureLM	Microsoft	2025.3.6	整合生物学、化学和材料科学等多学科数据，构建统一的知识框架，实现小分子、蛋白质、材料、DNA 和 RNA 等领域的生成与优化。	
ScienceDirect AI	Elsevier	2025.3.12	实现文献秒级摘要生成、实验数据横向比对、学术概念溯源查询等	
Copilot Agents	Microsoft	2025.4.24	与Copilot Chat集成，提供面向特定任务的附加功能，如查询文档、检索数据、执行特定操作及提供AI辅助编码建议等。	
AlphaEvolve	DeepMind	2025.5.14	应用于数学证明、硬件设计和复杂问题求解等场景。	
Deep Research	OpenAI	2025.2 2025.6.3开放	通过动态搜索和反思迭代，为用户生成浅层调研报告。	

学科大模型	发布机构	发布时间	学科	功能简介
mCLM	伊利诺伊大学厄巴纳 - 香槟分校	2025.5.18	化学	通过将分子拆解为功能模块进行标记化，生成可合成分子结构，加速药物发现流程。
AstroMLab 4	日本高能加速器研究机构美国橡树岭国家实验室等	2025.5.23	天文学	面向天文学、宇宙学和天体物理等领域设计的大语言模型
DreaMS	捷克科学院 捷克技术大学	2025.5.23	生物化学	通过预测遮蔽的质谱峰与色谱保留顺序，生成丰富的分子结构表征
AGThinker	爱荷华州立大学	2025.5.28	农业	基于地理分布、气候变化与聚集特征，辅助作物选择、干预策略制定等农业智能决策

科研平台与学科大模型



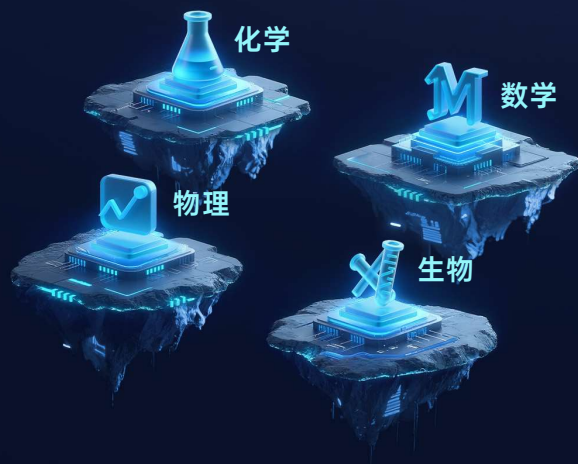
产品	发布机构	发布时间	功能简介
玻尔科研空间站	深势科技 北京科学智能 研究院	2025年	• Uni-Mol分子大模型、Uni-RNA基因大模型、Uni-Fold蛋白大模型、Uni-SMART科学文献大模型等 • 覆盖“读文献-做计算-做实验-多学科协同”的AI科研平台 • 已服务于北京大学、武汉大学、宜宾大学城等高校
书生通用 大模型体系	上海AI实验室	2024年	• 书生·浦语大语言模型InternLM2.5 • 书生·万象多模态大模型 • 书生·风乌气象海洋预报大模型体系 • 书生·济世金融领域大语言模型
天文系列模型	之江实验室	2024-2025年	• 时域光变模型FALCO • 恒星光谱模型SpecCLIP • 具身智能望远 • 天文大语言模型AstroOne
白玉兰 科学大模型	上海交通大学 百度智能云	2023年	• 领域模型：法律开源 (BAI-Law-13B)、化学合成 (BAI-Chem 2.0)、神经流体 (BAI-NeuroFluid) • 科学评测基准 (SciEval)
DeepSeek	深度求索	2025年	• DeepSeek-Prover-V2数学推理模型
悟界	北京智源研究院	2025年	• 脑科学多模态基础模型 (EEG、MEG、fMRI) • 全原子微观生命模型

“人工智能+科学” 平台化面临的核心挑战



“人工智能+科学” 平台化发展，在数据、模型和生态方面面临重大挑战

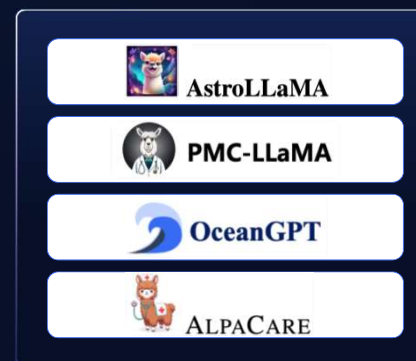
科学数据孤岛



模型幻觉严重



研发生态封闭



中国科学院主动布局



完整的自然科学学科体系



全栈式人工智能创新链



国家重大科技基础设施 和科学数据中心



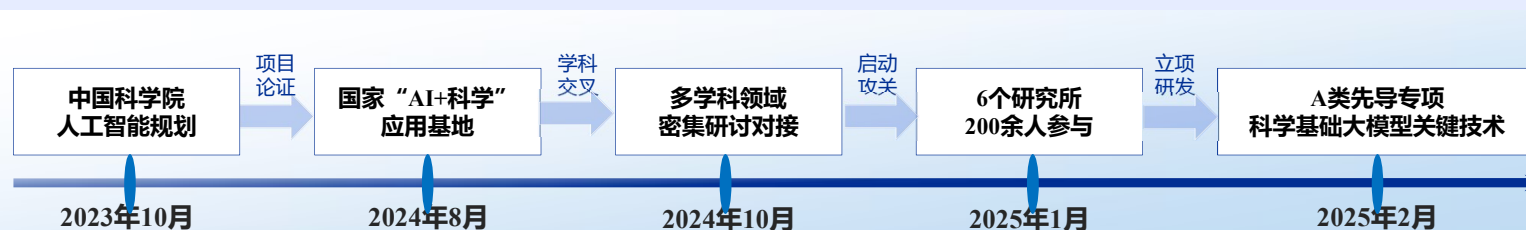
中国科学院主动布局

使命
任务

通过科技创新，抢占人工智能赋能科学研究战略制高点

中国科学院是国家“AI+科学”规划的重要攻关力量

- ◆ 成建制的AI研究力量，具备强大的AI技术创新供给能力
- ◆ 完备的学科体系，对AI4S需求尤为迫切，构成重要内在动力
- ◆ 人工智能工作推进组，吴朝晖、周琪、丁赤飏等院领导牵头



中国科学院主动布局

重塑
科研
范式

L3 工程技术模型

可与物理世界交互，产生
高水平工程技术解决方案

L2 学科大模型

推动基础学科的发展

L1 科学基础大模型

发现和运用科学规律

L0 通用基础大模型

基础的语言和多模态能力

体系性构建“科学基础大模型-学科大模型-工程技术模型”的层次化创新链条

标准
规范

多学科科研应用

领域创新试验场

智能科研平台

科学基础大模型

计算与科学数据资源

安全
体系

前沿科学发现

创新技术研发

科学资源管理

科学任务调度



磐石
ScienceOne

人工智能+科学的操作系统

科学数据专业理解 | 科学文献萃取融合 | 科学知识表征推理 | 科学工具编排规划

磐石核心积累



科学数据

1.7亿篇科技文献

90PB科学数据

(70%源自重大科学基础设施)



科学语料

250万条高质量科学
推理数据

50万条高难度学科
数据退火



科学工具

自主规划、按需调用

300+ 科学计算工具
智能求解器



学科场景

粒子物理 化学化工
数字细胞 材料创制
气动设计

打造科研智能核心能力



磐石赋能范式变革



“人工智能+科学”目标是科研、基础是模型、关键是应用

科研工作者

智能问答服务，开放API与智能体接口

专业模型研发

支持模型后训练，全面开放API、智能体与工具调用



聚焦重点学科、推进高价值科研应用攻关

领域	验证场景	关键问题
数学	机器证明与PDE求解	非光滑PDE高精度求解
物理	新粒子发现	发现新粒子及衰变模式
化学	AI驱动的合成化学	复杂化工反应体系的路径优化
材料	材料智能创制系统	材料构效关系与制备工艺的相互作用
天文	双中子星及黑洞中子星并合 引力波事件的模拟和发现	瞬变天文事件的快速多设备后随联动观测
地学	区域决策模拟	区域发展竞争与合作一体化决策
生命	数字细胞	生命动态过程的数字计算模拟 拟与实验相结合的干湿融合

服务真实科研需求、嵌入领域科研闭环, 迭代提升磐石的实用性与可靠性

磐石平台



磐石架构



磐石 · 科学基础大模型



S1-Base-Lite

S1-Base-Pro

S1-Base-Ultra

异构混合专家架构
基础学科核心知识体系

波谱场科学模态数据理解
领域微调与多学科复合奖励

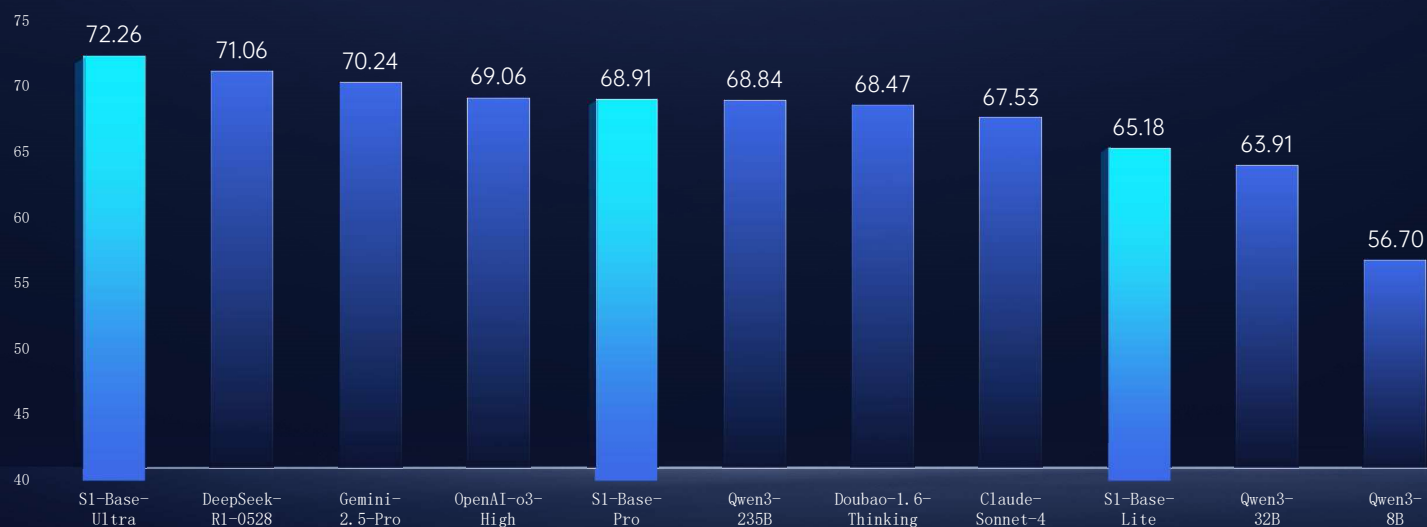
科学知识推理增强
多阶段课程式训练策略

科学基础能力评测

数理化材生等基础学科，磐石全面领先



科学榜单平均值



科学榜单数据

- 科学**
GPQA-Diamond/Scibench
- 数学**
AIME2024/AIME2025/AMC23/
LiveMathBench
- 生物**
ProteinLMBench/LAB bench
- 物理**
Qiskit HumanEval/PHYSICS
- 化学**
TOMG/ChemBench
- 材料**
MaScQA/MSQA/LLM-MSE

注：所有的结果均使用统一的评测框架，榜单评测脚本和数据见<https://github.com/ScienceOne-AI/ScienceEval>

复杂推理问题评测

科学推理与自主规划，磐石第一梯队

GAIA

通用AI助手测试基准



SimpleQA

事实性问答



HLE

人类终极考试



注：* 允许模型使用工具

谱数据理解

解析“准”

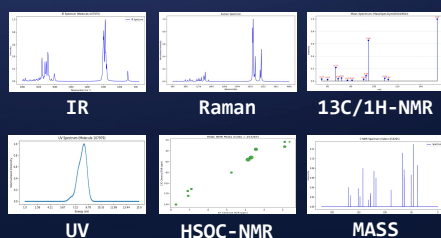
谱图理解

精准识别特征峰和峰形变化

结构解析

深入拆解子结构和成分组成

多谱融合



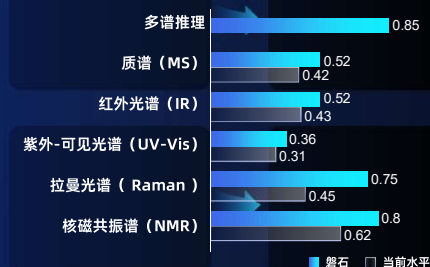
根据谱数据峰值
输入提示语



谱信号到物质微观结构的解析

分子结构预测任务:

分子结构平均相似度



相较于当前最优算法



真实分子结构

预测分子结构

磐石 · 文献罗盘

智能情报分析

调研报告自动生成



DeepResearch

😊 日常办公与总结性报告写作，支撑较好

😞 科研文献分析，局限性明显

不“全” - 信息覆盖有限

不“深” - 分析深度不足

不“透” - 思路梳理不清

● 收集国内外生物制药领域病毒清除过滤器的研究成果数据对比

2.3 病毒清除过滤器核心研究成果对比表

技术/产品	研发机构/企业	核心技术	性能指标	应用领域
Extreme™ PVDF过 滤膜	乐纯生物（中 国）	PVDF膜材，高通 量设计	单位处理量2-3倍于进口产 品	血制品、高浓度 白溶液
SaiClear®深层过 滤器	东富龙	微通道水作 为介质	1-5 LRV病毒去除	细胞培养基澄清
Planova™系列 过滤器	旭化成	大尺寸排阻 型	病毒清除率>10	血制品生产
纳米纤维素滤膜	瑞典研究机构	33μm纳米纤维素	对28nm噬菌体LRV>5	上游培养基过滤
碳纤维导电过滤器	韩国研究团队	6V电导天话	7.5分种灭活MS2噬菌体	可重复使用过滤器

4.3 病毒清除过滤器研究方向

研究方向	研究内容	挑战	潜在应用	代表进展
高性能膜材	PVDF、PEEK	性能、成本、工艺	药品生产	乐纯生物Extreme™ PVDF
超小孔径滤 膜	15-20nm孔径开发	通量与截留率平衡	细小病毒去除	旭化成新一代Planova™
多机制协同	尺寸排阻+静电+疏水	工艺参数优化	复杂生物制品	东富龙SaiClear®
电导天话	碳纤维集成过滤器	电源系统集成	可重复使用过滤器	韩国6V电导技术
上游应用	培养基直接过滤	处理量提升	上游生物工艺	瑞典纳米纤维素滤膜

理解“深”

深度理解

常用的科学数据类型

准确解读

科学公式与论文图表

科研人员的精读论文工具

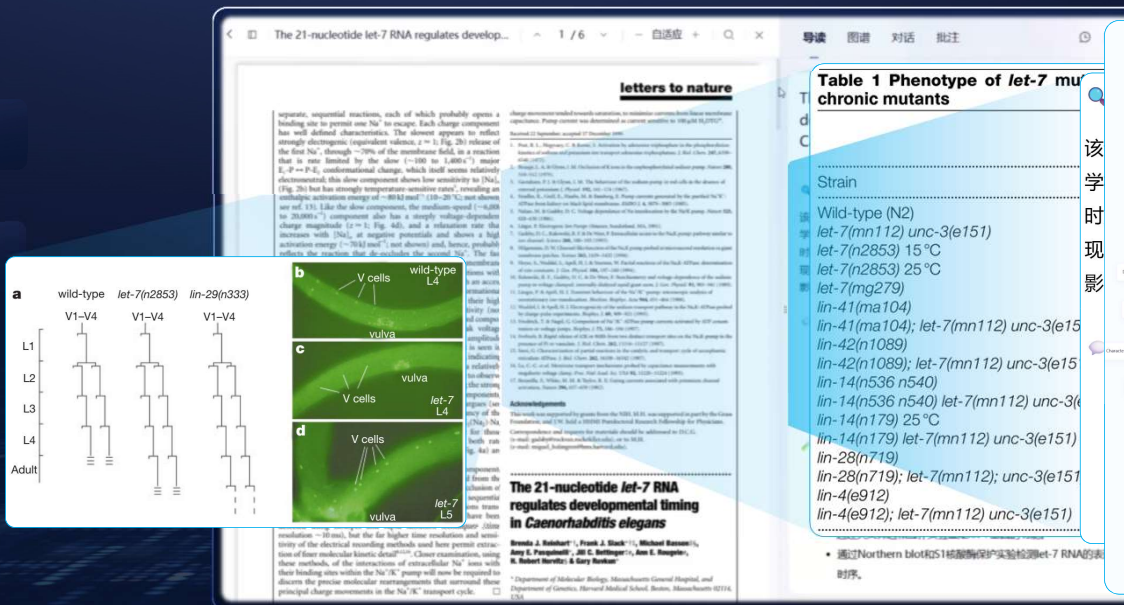
论文导读

引文回溯

研究图谱构建

关键技术路径提取

磐石·文献罗盘



1. let-7的功能验证

- **缺失实验**: 发现let-7基因突变导致成虫阶段重幼虫期细胞命运 (如细胞分裂持续、角质层结构缺失), 表明let-7是幼虫向成虫转变的必要开关。
- **过表达实验**: 增加let-7剂量会促使幼虫细胞提前退出细胞周期并分化为成虫表型, 进一步证实其作为时序调控因子的作用。

2. 分子机制解析

- let-7编码一个21核苷酸的小RNA, 其序列通过S1核酸酶分析确定为UGAGUAGUAGUAGUAGUAGU。
- let-7 RNA通过碱基互补配对直接靶向多个异位性基因 (如lin-14, lin-28, lin-41, lin-42和daf-12) 的3'非翻译区 (UTR), 负调控这些基因的表达。
- 报告基因实验显示, 携带lin-41 3'UTR的基因表达受let-7依赖的时序调控。

3. 遗传互作与通路整合

- let-7位于lin-29 (锌指转录因子) 上游, 调控其表达以启动成虫特异性分化程序。
- 与早期异位性基因 (如lin-4, lin-14, lin-28) 的遗传互作表明, let-7是发育时序提取中的晚期节点, 而lin-4是早期节点, 两者通过小RNA介导的翻译抑制协调发育阶段转换。

4. 保守性与普遍性

- let-7 RNA的序列和功能在进化上高度保守, 提示其在其他生物中可能具有类似的时序调控作用。

技术路径总结: 通过遗传筛选、表型分析、分子互作验证和时序表达研究, 揭示了let-7 RNA作为发育时序开关的核心机制, 即通过小RNA介导的转录后调控实现阶段特异性细胞命运转换。这一发现为理解非编码RNA在发育调控中的作用提供了范式。

分析“透”

针对学科需求

- 一次性梳理 上千篇文献
- 自动整理 综述骨架
- 自动撰写 完整综述内容

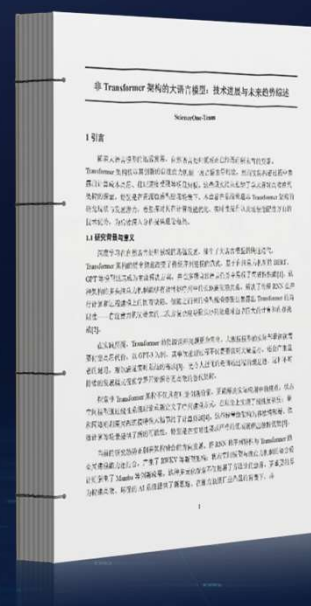
精 千字精炼
小综述

细 万字详实
大综述

- 软标题召回率=0.923 (满分1.0)
模型生成和人类大纲标题相似度
- 综合评估指标评分=4.496 (满分5.0)
模型生成大纲内容质量维度包括: 结构质量、内容覆盖度、主题相关性、批判性



OpenAI
DeepResearch



ScienceOne
Literature



4万字文献综述

数月 → 6小时



综述内容质量经初步评估

接近博士研究生水平

磐石 · 工具调度台

提供开放的插件机制，支持用户灵活接入工具，快速搭建专属科研应用

300+

科学计算工具

场景

数字细胞
高能物理
科学计算

高铁载荷
谱构效
其他场景

10+

场景

资源
能力

模型

生物医药
材料科学
气象科学

化学
数学
物理
...

30+

专业模型

应用赋能



标准协议工具接入



工具集API对外服务

应用场景：粒子物理数据分析

粒子物理探索物质的基本组成和宇宙的基本规律

北京正负电子对撞机：

目前世界上唯一运行在粲能区的大型实验装置，采集了海量的多维实验数据



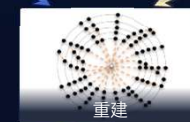
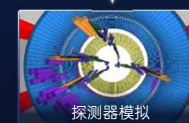
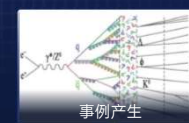
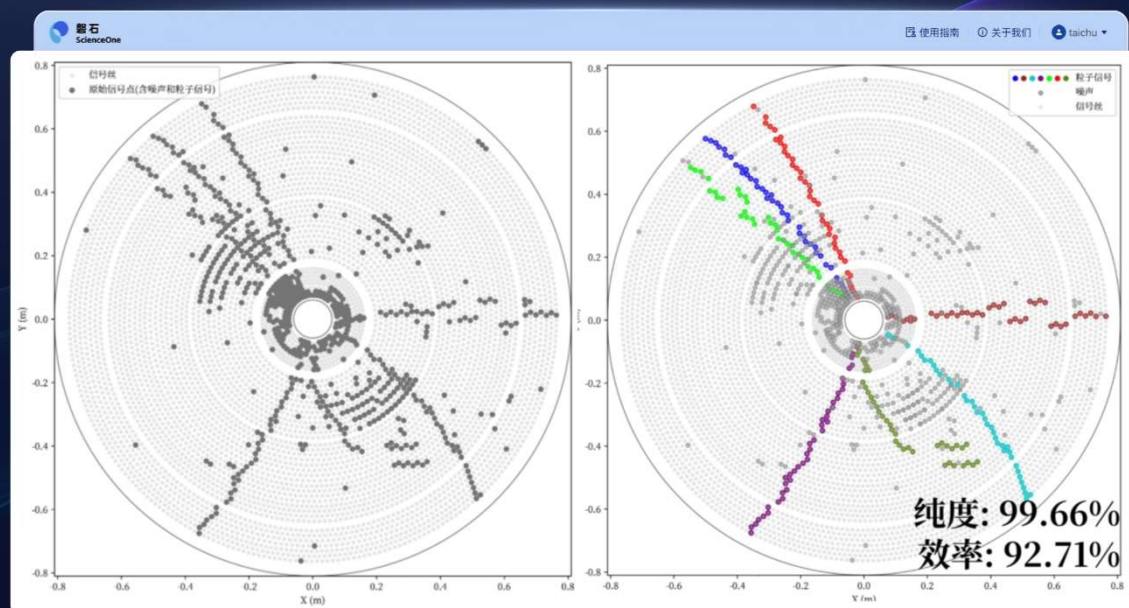
应用场景：粒子物理数据分析

任务自动分解

工具高效规划

分析程序生成

模拟重建提效



物理启发数据驱动的微分方程求解

- ❖ 研究内容：构建算子学习的通用神经网络微分方程求解器，用于求解 PDE 的正反问题
- ❖ 研究创新点：构建连续隐空间，解耦观测信息和预测信息，实现效率与精度的提升

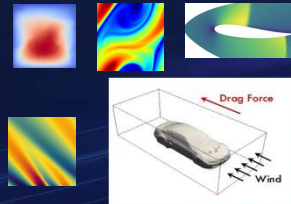
正问题

NS3D：三维稳态，空气动力学流速、气压分布

Darcy：二维稳态，根据土壤各处的渗透系数预测渗透压力

NS2d：二维含时，预测各处湍流速度在未来的变化

Pipe：二维稳态，根据管道形状预测各处流速



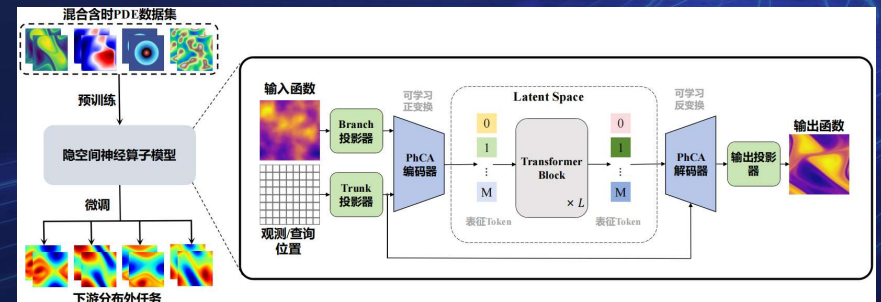
反问题

Burgers'：由时空域部分观测，预测激波变化的初始条件

- 提出神经算子预训练框架
- 统一微分方程正问题与逆问题的求解

正问题 求解效率：相比之前的SOTA方法显存占用减少了50%

逆问题 求解精度，提出2步求解路线，显著提高求解精度



模型	解耦合	相对 L2 误差 ($\times 10^{-2}$)					
		Darcy	NS	Airfoil	Elasticity	Plasticity	Pipe
Galerkin ^[123]	否	0.84	14.01	1.18	2.40	1.20	0.98
OFormer ^[74]	是	1.24	17.05	1.83	1.83	0.17	1.68
GNOT ^{†[114]}	是	1.04	13.40	0.75	0.88	3.19	0.45
FactFormer ^[82]	否	1.09	12.14	0.71	/	3.12	0.60
ONO ^[83]	是	0.76	11.95	0.61	1.18	0.48	0.52
Transolver ^{†[75]}	否	0.58	8.79	0.47	0.62	0.12	0.31
LNO	是	0.49	8.45	0.51	0.52	0.29	0.26

衡量标准	模型	Darcy	NS	Airfoil	Elasticity	Plasticity	Pipe
参数量 (百万)	Transolver	1.91	5.33	1.91	1.91	1.91	1.91
	LNO	0.76	5.08	1.36	1.42	1.36	1.36
显存占用 (千兆字节)	Transolver	17.11	17.17	4.49	1.48	18.41	5.94
	LNO	5.75	7.58	2.47	1.39	7.16	2.89
时间 (秒/轮)	Transolver	88.68	107.62	19.49	5.66	83.43	25.56
	LNO	38.98	57.83	9.35	5.33	41.62	14.13

NeurIPS 2024, ICONIPS 2024

应用场景：力学-高铁载荷计算

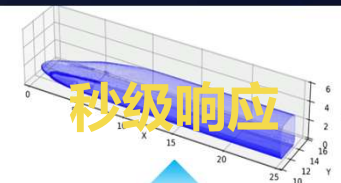
工具“全”

数据解析

参数提取

高效计算

数据可视



秒级响应

输入三维构型

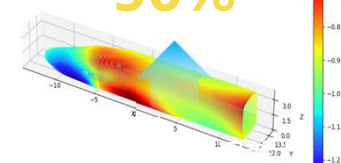
参数解析

速度向量: $x=75, y=0, z=0$

风速向量: $x=1, y=0, z=0$

误差降低

50%



输出载荷结果

应用场景：材料创制

 S1-MatAgent

意图理解

流程编排

工具选择

反思迭代



深度集成
磐石S1平台

全面打通材料问答、
材料计算、材料设计

大幅提升材料
设计效率

应用场景：数字细胞X-Cell



7个
专业数据库

5个
通专模型

86万+篇
生物文献检索规模

多轮
工具资源自主调度

S1-ToolChain任务调度

- 1 蛋白互作检索
- 2 寻找互作蛋白
- 3 结构建模+干实验模拟
- 4 RAG调研突变-疾病
- 5 X-Cell突变互作分析
- 6 X-Cell 疾病基因网络分析
- 7 湿实验验证

合作单位:中国科学院动物研究所

Centronuclear
Myopathy
(中央核肌病)



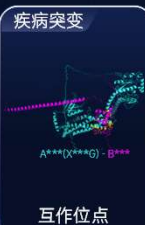
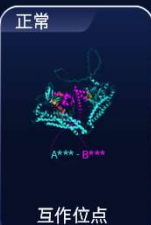
ER-Mitochondria
contact



Protein-protein
interaction



X***是介导疾病相关蛋白质A-B互作的关键靶点



磐石平台赋能靶点
发现全流程自动化

X-Cell赋能疾病基
因网络分析

>10倍
靶点发现加速

基于磐石的“人工智能+科学”合作



赋能日常工作

- # 科研人员
- # 科技管理人员
- # 科研支持人员
- # 研究生



学科大模型构建

- # 磐石云服务
- # 离线部署
- # 基础工具集支持
- # 新模型联合研发



项目合作

- # 发改委
- # 科技部 0-1专项
- # 其他规划

官网



欢迎扫码访问
ScienceOne 官网

磐石赋能科研范式重塑 开启科学研究无限可能

开源社区



Gitee



HuggingFace



GitHub



ModelScope