

AI for Science:打破边界,重塑科研范式

传统科研范式有两方面问题:一是生产力方面,传统的科研方法,无论是文献阅读、理论研究、计算方法或实验手段,其能力都受到很大限制;二是生产关系方面,尽管科研成果早已推动人类社会进入工业化时代,但科研本身仍然是小作坊模式。由于这两方面的原因,科研一直都是一个低效率、高门槛的封闭体系。更为糟糕的是,科研和社会需求往往是脱节的。

以深度学习为代表的人工智能技术给科研范式变革带来了新的希望。首先,深度学习本质上是一种极为基础的数学方法,它处理的是函数、概率分布等最基础的数学问题。但与传统数学方法不一样的是,深度学习可以解决更复杂的问题。例如,神经网络是逼近高维函数的有效工具,而传统数学方法却面临维数灾难的挑战;注意力机制可以有效模拟长程记忆和长程关联,而传统数学工具更擅长处理无记忆的马尔可夫过程和局部相关性。

其次,计算机科学中极为普遍的工程化思维对打破作坊模式也提供了有效帮助。从深度学习到大语言模型、智能体、技能(skills)、支撑框架(harness)等,这一系列工程化思维驱动的人工智能新技术,在很大程度上改变了人们的工作效率和工作方式。这种工程化思

维是其他学科,尤其是数学,不太擅长和不太重视的。事实证明,它对改变传统科研范式也是必不可少的。

以这两点为基础,近10年以来,AI for Science主要沿着两条路线发展。一是解决具体科学问题。这方面最瞩目的成果是蛋白质结构预测。二是建立新的科研基础设施。这方面最成熟的成果是玻尔(Bohrium)平台。随着AI for Science科研基础设施逐渐成熟,干湿闭环的自动化、智能化实验室建设已经成为新的热点。科研的“安卓模式”,

随着AI for Science科研基础设施逐渐成熟,干湿闭环的自动化、智能化实验室建设已经成为新的热点。科研的“安卓模式”,即在新的基础设施上通过垂直整合并开发一系列的智能体、skills和harness来完成特定的科研任务,正逐渐成为新的范式。

即在新的基础设施上通过垂直整合并开发一系列的智能体、skills和harness来完成特定的科研任务,正逐渐成为新的范式。

短短几年,AI for Science的理念和方法已经得到科学界的广泛认可,并且已经深入到许多重大科研计划和基础科研项目的核心环节,如人类蛋白组计划、植物星球计划、数字细胞、材料基因组计划等。一些企业也开始以这个理念和方法为基础重新布局其研发体系。更为令人欣慰的是,在这个过程中,一大批有理想、有战斗力的年轻人已经成长起来。这些年轻人正在引领AI for Science的发展,积极推动科研范式的改变。

什么才是AI for Science新范式?除了“安卓模式”以外,新的科研范式应



鄂维南

中国科学院院士
北京大学数学科学学院讲席教授

现任北京科学智能研究院学术委员会主任、北京大学国际机器学习研究中心主任。主要研究方向为机器学习、计算数学、应用数学,及其在化学、材料科学和流体力学中的应用。

北京大学数学科学学院,北京 100871

该实现三个“打破”。

一是打破学科与学科之间的界限。科学本来就是一个整体。在知识获取门槛高、学习和研究效率低的时代,不得不通过专业划分来提高效率,这直接导致了目前交叉学科机会多但门槛高的现状。AI for Science的基础设施使得知识获取的门槛大幅度降低、研究效率大幅度提升。因此,专业划分已经正在成为一个不必要的枷锁。这也意味着必须重新设计科学的教育和研究体系,在不同学科的共同基础方面下更大的功夫。

二是打破理论与实验之间的界限。这个界限在跨尺度特征比较突出的学科尤其明显。例如,材料科学,理论和计算必须从原子模拟开始,但科研人员真正关

心的材料性能都是体现在宏观层面的。人工智能赋能大幅度提升了理论和计算方法的能力。这些能力已经在许多方面,例如,新的表征算法,得到了充分体现。但是要真正打破理论和实验之间的界限,还需要进一步提升理论和计算方法的能力。

三是打破科研与产业之间的界限。传统的科研模式下,科研到产业的战线极长,以至于科研和产业之间形成了比较严重的脱钩。事实上,科学界已经构建起一个极其完整的、基于论文的评价机制和运行机制。这个机制之所以存在并且被广泛接受,是因为以真正解决问题作为评价机制是不现实的。人工智能赋能下科研效率的提升将有效地帮助科研人员解决这个问题。当然,要真

正实现这个目标,仅靠科研能力的提升是不够的。还必须在评价机制、组织形式上下功夫。这些已经成为 AI for Science 下一步需要解决的问题。

未来几年,随着人工智能赋能的科研基础设施的不断完善,“平台科研”的优势和具体形式将逐渐显现出来,产生两个方面的效果:一是部分科研工作将变得越来越工业化;二是最顶尖科研人才的作用将更为显著。这样的科研人才必须具备三方面的能力:第一,基于基本原理的思维能力。凡事能看到底层逻辑,而不只是表面现象。第二,深入了解社会的真实需求。第三,对工程的理解和把控能力。如何建立新的顶尖科研人才培养体系,将成为中国实现科技强国的主要问题。