科技周刊

科技点亮生活 第327期

编者按 人工智能(AI)正在改变千行百业,也包括科学研究领域。AI for Science(人工智能驱动的科学研究),成为全球AI新前沿。《国务院关于深入实施"人工智能+"行动的意见》鼓励和支持科研人员更多利用AI技术赋能科学研究,加快各领域科技创新突破。

当前,AI给科研带来哪些变化,AI能力存在哪些局限,对AI的应用又带来什么新课题?近日,《科技周刊》记者走近江苏5位不同学科领域的科研人员,听他们讲述利用AI赋能科学研究的实践,以及对AI驱动科研范式变革的思考。

人工智能,这样赋能科学研究

数学:需要AI,也支撑推动AI

讲述者:江苏省应用数学科学研究中心执行主任,东南大学数学学院院长、首席教授 **虞文武**

□ 本报记者 **徐冠英**

江苏省应用数学科学研究中心2023年底依托东南大学数学学院立项建设,立足数学与系统科学两大领域,面向数学前沿理论、大规模复杂优化理论、AI大模型与数据科学等5个方向开展研究,既要力争取得"从0到1"的重大理论创新,也要解决通信、新能源、新材料、智能无人系统和医学等领域的关键瓶颈难题。

目前,中心科研人员在科研和教学中普遍用上了AI这个助手,也见识了AI所能发挥的作用。例如,在证明命题方面,AI快速提供可能的思路,大幅节省试错时间;在教学中,AI 帮助教师将抽象概念可视化,提高教学效果。

我的研究领域是系统科学和人工智能的数学研究。系统科学就是面向交叉学科,针对其中的大规模复杂系统开展研究,可以说是建立数学与实际应用之间的桥梁。

系统科学较为重要的两个研究方向,是认知论和调控论。认知论主要研究复杂系统的精准建模。要提高建模的准确性,主要且有效的方式是训练系统与环境交互产生的复杂、海量数据。此时,AI就提供了有力的支撑。调控论主要研究系统的高效决策,涉及参数搜索与计算加速等。AI在这些方面潜力显著,有助于大幅提升复杂问题的求解效率。

最近,依托于科技部重点研发项目牵头实施的"智能物流示范应用"顺利完成。在这个示范应用里,平台开发方希望优化平台性能,做到接单又快取消率又低、司机接单后还能顺路再拼个单等等,最终实现平台和司机收益最大化且货主花费最小化。这本质上是解决一个三方博弈的数学问题。求解这个问题,我们首先需要建立一个数学机理模型,会涉及一系列数学方法,也会在数据的处理分析中用到AI大模型。平台使用我们的数学机理模型及求解算法后,在日均发货货主近1400个、接单司机近400个的情况下,将日均派单取消率从40%多降至26%,单次派单决策时间从大于5秒缩短至小于3秒。

日常生活中,AI大模型完全可以满足拟方案初稿、查询资料、对话问答等需求,但涉及安全问题、重大决策的情况,仅有AI大模型是不够的,还需要与数学机理模型相结合。此外,在一些缺少数据样本的领域,由于AI欠缺学习素材,要进行预测、分析等工作,也需要依赖数学机理模型。

近几年,科研人员深刻体会到AI给科学研究带来的变化,比如为数学研究注入新的内容和方法,甚至开辟新的研究方向。同时,我们也看到AI并不能完全替代数学研究,数学作为一门基础学科,不仅仅在AI的驱动下发生研究范式的变化,也始终在支撑、推动着AI的发展。我认为,数学基础研究是AI的一块核心基石,想让AI更好地驱动科学研究,就需要数学与AI领域的学者共同发力,将AI与数学更紧密地结合起来。

水环境:AI从辅助到不可或缺

讲述者:中国科学院南京地理与湖泊研究所研究员 **黄佳聪**

□ 本报记者 **蔡姝雯**

我们课题组与AI结缘始于2007年。当时太湖蓝藻水华大规模暴发,威胁群众饮水安全,快速、精准的蓝藻水华短期预测迫在眉睫。然而,机理模型(基于系统内部机理建立的数学模型)的参数数量多、优选难度大,手动调参耗时往往长达一周或数周。我们将目光投向AI,尝试引入遗传算法,完成机理模型关键参数的智能优化,不仅耗时缩短至几小时,模型精度也大幅提升,实战效果立竿见影。

从此AI成了我们的科研伙伴,并从最初的辅助角色逐步成长为不可或缺的力量。我们强化与AI团队合作,将遗传算法、机器学习等AI方法,应用于多项国家级科研项目研究,在湖泊藻类水华预测、流域水质时空变化解析等关键领域取得重要进展。

AI帮我们实现了以前难以做到的大尺度、长时间序列的水环境研究。比如,基于我国142个重点湖泊的14年数据,构建湖泊藻类水华预测与风险评价模型,重建湖泊藻类水华规模的时空格局。

AI也帮我们开展更为"精细"的水环境研究。比如,构建一套以"天"为时间尺度的水质参数估算模型,深化认识平原河网区水质参数的高频动态变化趋势,发现短期人工引排水对水质的深刻影响。这项研究中,AI不仅提升科研效率,也帮我们挖掘出传统方法无法察觉的机理过程规律。

不过,AI并不能替代现有科研方法。在一些探索性研究中,我们尝试构建AI模型,但它们常常"看起来很准、用起来不稳"——精度在训练期超过90%,但进入全新应用场景后却大幅下滑;部分模型甚至生成违背科学规律的虚假结论。

我们课题组逐步摸索出AI应用规律:不唯模型精度,优先选择逻辑合理、对新样本适应能力强的模型;用传统机理模型为AI划定科研"红线",避免AI违背"湖泊一流域"系统的基本规律;科研人员全程深度介入模型筛选与约束,杜绝对AI的盲目信任。

我们划定了AI与传统机理模型的适用边界:在大尺度、广覆盖、传统监测难以触及的区域研究,以及需要快速处理多源异构数据场景中,让AI发挥优势;但在蓝藻水华预报、水环境决策等需要严格遵循"物理—生态"过程的业务化应用,以及要求高可靠性的预测工作中,仍然依赖传统机理模型。近年来,我们参与建设的"数字巢湖""数字滇池"等平台中,核心主体依旧是传统机理模型。

当前,AI在水环境科研领域的应用,面临数据零散、标准不统一、接口不兼容等瓶颈。大量科研精力被迫消耗在数据前期处理环节,而非真正的科学问题攻关。期待国家层面加快搭建标准化水环境数据平台,推动多源数据格式统一与资源共享。

我们的研究根基,永远是实地调研与治理需求。只有牢牢守住科学本质、深刻认清生态系统规律,才能让AI真正发挥价值,助力"湖泊一流域"的精准治理水平,切实保障水安全。

药物研发:节省试错时间和成本

讲述者:南京医科大学药学院教授、博士生导师,人工智能辅助药物设计中心主任 **陈勋**

□ 本报记者 **蒋明睿**

大概在2016年、读本科阶段,我就开始用AI做科研。那时的AI只能处理结构化数据,如今我可以很明确地说:它几乎可以参与药物研发的每个环节。

从找选题起,AI就深度参与。过去选择一个研究方向,科研人员要查大量文献,还不一定查得全。现在,我可以让AI先把相关信息"扫一遍",包括提取一些零散的信息、潜在信号,我再去判断这个方向值不值得做。

在药物研发链条中,靶点初筛是关键环节之一。传统生物信息学分析方法需要数月乃至半年,而现在用AI一天就能得到初步结果,再经过人工校验和迭代,数周就可以完成靶点初筛。

在南京医科大学,我的主要工作方向是开发AI设计工具,就是给不同类型的药物搭建一套"通用AI设计系统",改写传统药物研发"盲人摸象"般不断试错的状态,节省时间和成本。以大分子药物为例,养细胞、买试剂都是真金白银的投入,而一种候选药物往往需要经过多轮筛选与验证,失败即意味着前期投入"归零",因此需要进行计算,缩小范围,降低成本。然而传统计算方法不仅算得慢,而且门槛高,普通实验室难以配备专门的计算工作人员。AI的一大价值,正是大大降低计算门槛,让实验人员可以初步算一个结果,降低整体的药物研发实验成本。

AI大幅压缩研发前期时间,但药物的一期、二期、三期临床试验必须在人身上完成,这一部分目前很难被AI替代。约90%的药物折戟于临床开发过程,但受伦理、成本、样本量限制,AI目前无法提供完美的替代方案。

过去,药物研发的10年历程,可能5年在临床前研究及临床一期、二期,5年在临床三期。现在前半程有望压缩到2年甚至更短,但临床三期阶段依然难以缩短。这带来新的问题,更多候选药物不断涌向临床试验通道,但资源有限,"排队"愈发明显。如何用AI优化临床设计,提高临床试验成功率,是未来药物研发的关键突破点。

科研模式的改变,背后是思路的转变。过去人做主导、AI辅助,现在很多环节变成AI主导、人来校验。随着AI越来越多参与科研,判断和验证的能力对科研工作者而言变得更为重要。这也让本科生教育变得"棘手",我们曾经在不断犯错中提升科研能力,但现在AI帮学生绕开许多错误,学生从哪里习得科研经验,如何向AI提问?这些是当前的重要课题。

随着对科研的理解加深,我发现AI不仅是工具,更是科研范式的革新者。它极大地解放了生产力,使得科研人员能专注于更具创造性和挑战性的工作。对科学家而言,拥抱AI已成定局。

材料科学:AI将成为创新的底层引擎

讲述者:南京工业大学材料科学与工程学院教授 **何一燕**

□ 本报记者 **谢诗涵**

配方怎么调?参数怎么设?芯片怎么做?过去,我们团队面对这些问题,只能靠经验一次次试错。如今,一个AI模型就能直接给出答案。

这个AI模型,是我们基于一个拥有超过1万条数据、分类准确率高于90%的多模态数据库开发出来的,可直接用于材料配方、打印参数与芯片结构的智能优化。依托这一模型,我们日前成功制备水凝胶生物墨水,并用这种墨水3D打印出高仿生类器官。相关成果进入工程化验证阶段,有望形成可量产的器官芯片解决方案。

过去我们的研究流程更多是"经验驱动+反复试验"。比如水凝胶材料的制备,以往我们通常先凭经验设定几个配方,然后一个个制备、测试、调整,一轮又一轮。2022年—2025年,我们团队参与完成"面向肿瘤诊治的生物3D打印多重器官芯片的智能设计构建与工程化"国家重点研发计划时,首次将AI技术引入科研工作。我们尝试把已有实验数据整理起来,让机器学习算法去"吃透"这些高保真数据,找出材料配方与性能之间的规律,从而精准定位最优配方与工艺条件。

对于水凝胶材料的3D打印,一个非常实际的问题是:如何设计出既"能顺利挤出"又"能快速成型"的材料体系?这类材料的性能本质上由流变特性决定,但传统方法需要不断调整配方,再逐一进行流变测试,过程依赖经验且耗时。而AI模型学会"配方参数—流变性能"的关系后,不仅能预测不同配方的力学和流动行为,还可以反向给出更有潜力的配方组合。

这种变化带来的好处是实实在在的。原来需要几周以上时间筛选配方,现在周期明显缩短,实验成功率也明显提高。同时,AI也促进我们思维转变:过去大家习惯盯着"单一因素"的影响,但材料的很多性能其实是多因素耦合的结果。模型有时会提示一些非直观的组合——某些参数单独看没什么用,凑在一起却效果显著,这让我们更好地从"整体关联"的角度看问题。

如今,AI已经不只是处理基础数据的技术,而是逐步进入材料设计和实验决策的核心环节,成为科研中的一个"协同决策工具"。尽管AI推荐的方案仍有一部分会"翻车",但命中率明显高于经验或随机。因此,在低试错成本的情况下,我们更敢于尝试以前不敢碰的方向,比如跨度很大的参数组合、成本虽高但潜力巨大的材料体系。可以预见,未来AI技术会像如今的手机一样成为科研人员的"标配"。

高端制造、新能源、电子信息、航空航天、生物医药等战略性新兴产业,无一不靠材料创新支撑。AI带来从"经验试错"到"数据驱动"的范式革命。几乎每一类材料的研发、设计、制备与优化,都能从AI中显著获益。未来,AI将成为材料创新的底层引擎,助力我们更快突破一批"卡脖子"关键材料,为我国战略性新兴产业高质量发展筑牢坚实的材料根基。

气象:AI是强大辅助但不能取代人

讲述者:江苏省气象局人工智能气象应用创新团队负责人 **庄潇然**

□ 本报记者 **张 宣**

我长期深耕气象预报预警科研。大约从2022年开始,AI成为气象预报预警科研中不可或缺的关键工具。如今,AI已经全面深度融入日常天气监测、强对流预警、低空气象服务、大气机理研判等"全链条"气象预报科研业务,极大提升了灾害天气预报、预警发布、气象服务研判的效能。

利用AI,我们可以从海量繁杂气象数据里快速抓取灾害天气前兆信号,过滤雷达、卫星传回的无效杂波与干扰信息,精准推算未来短时段降水、气温、风力等关键天气变化。

传统数值预报运算一次需要两个多小时,而AI模型仅用短短十余分钟就能完成海量数据运算,还能把以往二维平面预报升级为大气三维立体CT式预报。就像去年9月8日苏南罕见龙卷天气过程,传统预报模式完全无法预判此次隐匿强对流天气,而AI模型提前6小时精准捕捉到天气异常信号,准确预报出如东龙卷、南京江宁雷暴大风过程,为灾害防范、人员疏散、预警发布抢足宝贵时间。

日常科研工作中,我会借助AI梳理预报模型原理、复盘历史灾害天气过程、归纳同类天气演变规律。AI能够快速汇总文献资料与历史实况形成总结结论,但所有预报判断、机理分析、模式误差订正,依旧需要我们科研人员深挖大气物理原理、核验实时天气实况、严谨复盘检验全过程。气象预报预警不能单纯依靠AI输出结果、草率定论。

有观点认为,未来可以依靠大气数值模拟、天气数字孪生,替代真实气象观测与天气实况检验。行业内外经常探讨一个话题:AI未来会不会取代气象预报科研人员?

我认为,AI只能学习归纳现有气象数据、复用成熟预报规律,无法自主发现未知天气现象、原创大气物理新理论,更不能独立完成机理创新与灾害研判决策。天气系统越复杂,AI自主推演难度就越高。高精度全域天气数字孪生更需要科研人员吃透强对流发展机理、垂直大气变化规律、低空气象扰动特征。因此气象科研人员、预报预警业务人员完全不必担心被AI取代。

AI是气象预报预警提质增效的强大辅助工具,人类始终把握天气机理核心、预报研判方向与技术创新内核,坚持"物理模式与人工智能"双轮驱动、人机协同智慧预报,才是气象预报预警事业高质量长远发展的必由之路。

声音

□ 本报记者 **徐冠英**

作为江苏4个省基础科学中心之一,江苏省应用数学科学研究中心不仅汇聚东南大学50余名教师,还通过在全国范围发布揭榜挂帅、非共识项目,吸引一批省内外学者加入研究行列。经由江苏省应用数学科学研究中心这个平台,记者听到更多科研人员关于AI驱动科学研究和教学的观点。他们的话语为AI勾勒"剪影",触及AI使用规范,包含对育人的深层思考,现摘录如下:

北京大学先进制造与机器人学院特聘研究员、人工智能研究院双聘研究员、博士生导师 **李阿明**

AI深刻改变着研究与教学的方式,但AI并非替代数学家与教师,而是推动形成人机协同的新范式:研究中,AI负责繁琐计算与校验,人类专注创新思考;教学中,AI承担基础辅导,教师聚焦思维引导。

四川大学数学学院教授、博士生导师 **陈刚**

一方面,AI作为一项前沿技术工具,革新了科研范式,大幅加速了数学研究的进程;另一方面,AI的发展深度依赖于数学算法与数据科学的支撑。因此,数学科研工作者的使命绝不仅限于使用AI工具,更应深入解析AI的底层逻辑,以数学理论赋能AI发展。

东南大学数学学院教授、博士生导师 **赵杰**

AI for Science是一个研究意义非常重大的领域。因为它触及的是科学研究本身的生产方式。如果科研过程可以被部分自动化甚至规模化,那么不仅效率会发生数量级的提升,很多原本难以探索的问题也会变得可及。

苏州大学数学科学学院教授、博士生导师 **马欢飞**

在科研过程中,我们已经尝试使用AI辅助阅读和整理文献,帮助快速梳理相关领域的研究脉络、代表性问题与已有方法,从而提高前期调研和问题凝练的效率。需要强调的是,所有由AI生成的结论、分类和归纳,都必须回到原文核查,尤其是关键定义、理论条件、公式推导和代表性结论,不能直接照搬。

东南大学数学学院青年首席教授、副院长、博士生导师 **许文盈**

AI对数学基础教育的影响是颠覆性但可控的。它迫使我们放弃一些曾经神圣但已过时的教学目标,转向更本质、更适应未来的能力。数学教育将变得更难也更重要,难在教师需要重新设计一切,重要在它培养的是人类区别于AI的核心能力——提出好问题、识别隐藏假设、在不确定中做出合理判断。

哈尔滨工业大学(威海)理学院数学系特聘副教授、硕士生导师 **王萌欣**

我对AI的认识和态度,大致经历了从"审慎观察、初步试用"到"主动融合、科研赋能"再到"深入机理、反哺教学"的阶段。当前,我不再局限于"如何用AI",而是开始思考"AI为什么有效"。在这一过程中,我更加重视将我的认识转化为教学内容,引导学生不仅学会使用AI工具,更学会从原理层面理解AI、审视AI,并思考未来如何改进AI。

声明:本周刊来稿一经刊发,即视为作者同意授权本单位及所属平台、本单位合作平台使用,不再另行支付费用。