

人工智能撬动“科技变革”

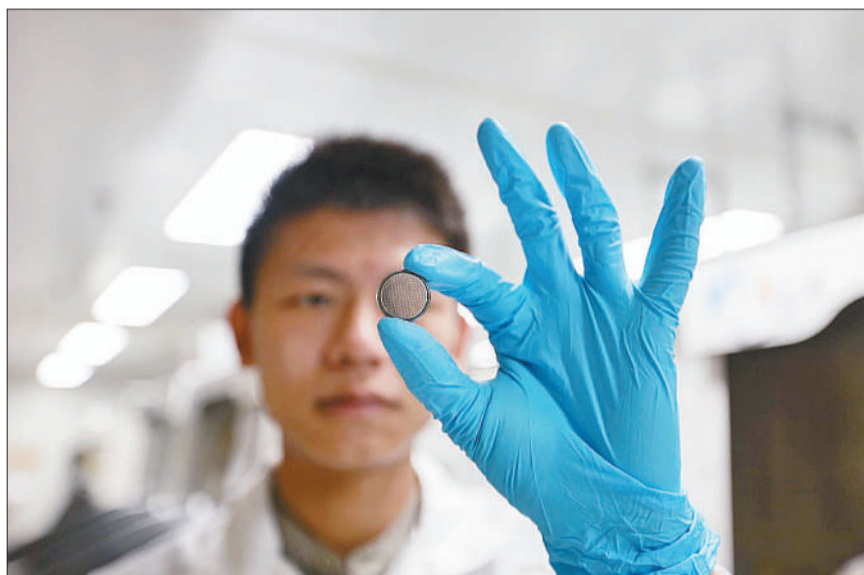
“冷板凳”式科研过时了吗

传统方法要1400年,人工智能只需5周



江俊(右)和副研究员朱青在做实验。

张大岗/摄



姚宏斌团队博士后殷逸臣展示实验成果。

代蕊/摄

代机器人学家小福“诞生”。

如今,团队又自主研发了一款阅读了50万篇文献的化学领域聊天机器人程序Chem-GPT,它能够针对使用者提出的问题,给出从文献中学习到的可靠答案,从而驱动机器人学家做实验,助力化学品和新材料研发。

江俊分析,人工智能给化学研究带来如下改变:基于大语言模型,从文献、专利、教科书等数据源中挖掘化学物质,建立化学知识图谱,用于支持化学研究决策和创新;建立物质的结构、组分、制备工艺等因素与性质间的关系模型,用于指导新型分子、材料、催化剂、药物等的设计与优化;结合人工智能技术帮助化学家自动设计实验方案、优化实验过程,并进行自动测量表征。

他谈到,对人工智能机器人平台而言,首要挑战是“如何赋予机器人物质级别的感知能力和对化学过程的预判能力”。这两个能力是让人工智能能够真正理解复杂物质世界、捕捉化学系统的本质特征规律的关键。在他的科研蓝图里,未来研发出模仿学习人类科学家创造力、具备“看”“闻”“听”“触”环境感知的“智慧科学家”,进而实现数据与智能驱动的化学研究新范式。

李震宇总结道,传统的研究范式深度依赖于“试错法”,效率低。公众对化学的认识停留在不环保、不经济、不安全等刻板印象,迫切需要提升化学研究的精准程度与效率,让公众对化学面貌有新的认识。而人工智能等先进技术,无疑有助于探索建立化学研究的精准化、智能化双驱动模式。

人工智能浪潮下,科研还需要坐“冷板凳”吗

当先进技术不断迭代应用,让人不禁思考,我们是否还需要“冷板凳”式的科研,反复试错的意义又在哪里?

近日,中国科学技术大学姚宏斌课题组、李震宇课题组与浙江工业大学陶新永

课题组合作,基于双碳背景下电化学储能发展的新范式,设计开发出镧系金属卤化物基固态电解质新家族LixMyLnzCl3,在无任何电极修饰的情况下实现了室温可运行的全固态锂离子电池,成果于今年4月5日发表在《自然》(Nature)杂志上。

这一被业内专家称赞为电化学储能领域固态电解质材料新突破的背后,一群年轻人就饱受“冷板凳”之苦。从湘潭大学材料科学与工程专业推免至中国科大读研的罗锦达是其中之一,进组3年,他从零基础“小白”成长为科研主力。

2021年2月,还在读大四的罗锦达抱着学习的心态来到中国科大做毕业设计,刚好赶上上述课题的萌芽状态。大四毕业后,没有毕业旅行和假期,他几乎每天都在实验室中度过。每位前辈都耐心解答这位准研一新生提出的每个问题,正是在这种尊重科研的氛围下,“跨界”应用化学方向的罗锦达,往研究中心地带快速成长靠拢。

由于对计算机编程感兴趣,罗锦达每天一有空就前往图书馆读论文、书籍。研究中,他的小伙伴每天晚上在实验室待到很晚,每人分别分析和复盘研究进展。此前,组内一位学长尝试用第一性原理计算来研究材料扩散性质,但由于没有考虑到材料尺寸效应以及界面的应力作用,结果和预期相反。

“因为实验原材料、环境天气等客观因素和操作不当、经验不足等主观原因,研究过程中遇到挫折是家常便饭,尤其是理论计算,有时花费大量时间精力,最后发现结果不尽人意。不能因为一条路走不通,就否定大的科研方向,要不断总结经验。”罗锦达说。

那位学长毕业离组后,罗锦达接过关键的理论计算模拟任务,并调整思路,从零开始学习分子动力学知识。他尝试运用密度泛函理论、分子动力学模拟和键价能等方法,来研究实验对象独特的结构和离子传导机制,从原子尺度更好地理解锂离子的扩散行为,对后续实验合成有很大的指导作用。

处理计算模拟数据时,罗锦达又化身“程序员”,自学编程语言python,他觉得,每天都专注解决一个新问题,这种生活开心且充实。

最终,团队根据计算机模拟结果,设计出常温条件下可以稳定存在的镧系金属氯化物,合成出相应的固态电解质。他们把研究数据录入合肥先进计算中心进行模拟分析,最终实现锂离子在空间里的快速传导。

“先进的技术可以帮助科研人员快速分析和处理知识、提取有用信息、找出规律和趋势。”在姚宏斌看来,有了先进的计算方法,未来计划引入人工智能机器学习,可以优化出更好的电解质体系,探索新的高性能固态电解质材料,实现更稳定的界面并适配到实际的电池中。

但他同时指出,科研的本质创新和发现,以及对问题深入思考和探索,这些过程往往需要反复试错和不断尝试。即使在数据处理方面已经有了成熟的技术工具,年轻人在做科研的数据积累阶段仍然需要坐“冷板凳”,这是帮助年轻人更好理解问题的必经之路。

李震宇持有相同看法。他观察到,人工智能擅长高通量的精准实验、大规模数据处理等能力,但并不具备人类的创造性和判断力等思维能力,无法创造出超越现有新颖化学思想的方法。因此,“冷板凳”有助于培养对化学有深刻理解和洞察力的人才。

据江俊课题组核心成员肖恒宇博士分析,年轻人在科研数据积累时,可以利用人工智能技术来加速数据生成、收集、整理,但在研究尚未深入的领域,缺乏经验的学生需要反复试错。

人和AI如何“打配合”,科研效果才能最优

采访过程中,很多师生提到了科研中“数据”的重要性——数据和技术相伴相生,人与技术的“合作关系”也离不开数据的支撑。

国产“离子膜”弯道超车背后的青年力量

粗沙细沙都能过去(选择性差)。离子膜的研究重点,就是如何在膜内构筑仅允许“细沙”快速通过的高效通道。

据研究团队介绍,传统的离子膜材料,用于传导离子的通道不够“坚固”,长时间使用后,结构可能会发生老化,从而导致性能下降。

徐铜文团队创新性地设计了一种具有贯通亚纳米离子通道的微孔框架离子膜材料,解决了传统离子膜材料中离子通道老化和吸水溶胀问题。

此外,团队在通道壁面进行了化学修饰,使离子在膜内的扩散系数接近在水中的状态,实现近乎“零摩擦”地传导,从而打破了传导性和选择性间的相互制约关系。

杨正金介绍,离子膜,就是含功能基团的、对溶液里的离子具有选择透过能力的高分子膜,包括早期的“异相离子膜”和代表未来发展趋势的“均相离子膜”,其在清洁能源、节能减排、能量转换与储存等方面有着广泛的应用前景。离子膜关键材料及制备技术,属于重点发展的国家战略新兴产业。

一头扎进“离子膜”的世界,从“奋力追赶”到“弯道超车”

纵观离子膜的研究历史,1949年美国人发明了离子膜,并于1950年成功研制了第一张具有商业用途的离子膜。我国的离子膜研究起步于1958年,作为我国



徐铜文、杨正金、左培培(从左至右)在实验室。校方供图

功能膜研究的最早领域,其初衷是为了支持原子能事业的发展。

到20世纪末,我国的离子膜研究还一直局限于从离子交换树脂制备的异相离子膜,其电阻大、选择性差,只能用于初级水处理,与发达国家存在较大差距。21世纪以来,在以徐铜文教授等为代表的中国科学家的努力下,我国的离子膜研究已经从最初的“奋力追赶”,来到目前有望实现“弯道超车”。

1995年,徐铜文跟随我国著名高分子化学家、被誉为“中国离子交换树脂之父”的何炳林院士,从事博士后研究。当时,由于技术限制,离子交换树脂存在资源浪费、需要频繁再生的缺陷,这也成为何炳林院士的两大“心病”。于是他启发了工科背景的徐铜文,开展“离子交换树脂制备离子交换膜”的技术攻关。

自此,徐铜文一头扎进“离子膜的世界”。



徐铜文课题组团队合影。校方供图

1997年,徐铜文入职中国科大,一切从零起步,开展异相膜过渡到均相膜的研究。为了实现均相离子膜连续制备,徐铜文慕名前往浙江镇海一家涂布机厂,请教涂布成膜技术,厂长被其真诚所打动,找出600多张技术图纸相赠。

深耕“离子膜”研究近三十载,徐铜文团队发表有关“膜”的论文达到500多篇,已跻身世界离子膜材料研究第一梯队;申请国内外发明专利100余项,获得授权95项。根据国际权威数据库的检索,近10年来,徐铜文领导的课题组在

离子交换膜方向的论文数量稳居国际第一,研究水平在国际上处于领先地位。

做“因材施教”的科研布局,将成果从“实验室”推向“生产线”

厚积薄发,多年来徐铜文获得诸多学术认可:获得2018年度国家技术发明二等奖,2008年、2009年、2021年中国石油化工联合会科技进步一等奖,侯德榜化工科技创新奖,中国科大-唐立新优秀学者奖……在学生眼中,徐铜文具有前瞻性的科研眼光,能根据学生的个性化特点,做“因材施教”的科研布局。

2014年,杨正金从清华大学博士毕业后,慕名来到中国科大,跟随徐铜文从事博士后研究。“为拓展课题组研究方向,徐老师建议我去国外继续学习。”杨正金说,“我当时选择了‘多孔材料研究’世界领先的爱丁堡大学,徐老师高瞻远瞩,建议我去哈佛大学学习有机液流电池技术。”

在徐铜文的举荐下,杨正金2016年前往美国哈佛大学进行博士后研究。学成后,杨正金将当时国际上最先进的有机液流电池技术带回中国,如今他已成长为徐铜文团队核心成员,31岁获得国家优秀青年基金资助,32岁晋升中国科大教授。自2020年开始,杨正金小组集中精力进行水系有机液流电池专用离子膜的科研攻关,“徐老师带着我们,将论文前前

平的化学研究。

姚宏斌也期待,“希望整个范式更加精准化、智能化,通过人工智能自主学习 and 优化,可以针对复杂环境体系得到全局最优解,最终有望跳出原有的试错法框架。”

技术加持下,人类科学研究的边界在哪里

近年来,随着人工智能算法、大数据技术等“火爆”名词的出现,有关“人类能否拓展科学研究边界”的话题再度回归。

“物理学领域,人类能够探究到宇宙的起源和演化,但仍然无法解释暗物质和暗能量的本质;生命科学领域,我们已经能够破解基因密码,但无法完全理解生命的起源和演化;社会科学领域,我们能够通过大数据分析来研究人类行为和社会现象,但无法完全预测人类行为的复杂性和多样性……”姚宏斌说,先进技术为人类探究更深层次的科学问题提供更多可能性和机会。然而,科学探究的边界并不由技术的发展所决定,它同时被人类对自然界的认知和理解所限制着。

在他看来,当科学技术不断发展,人类可以更深入地探究自然界的奥秘,但科研工作者也需要不断拓展自身认知和理解,才能更好地理解和解释自然界的复杂和多样。

冯毅告诉记者,当发达的技术解放了科学家的双手,让他们有更多的时间去思考,激发更多创新性成果,大家对于科学的认知也就越深入,就会发现越来越多的问题和无法解释的现象可以继续探索。

乔钦禹也认为人类的科学探究没有边界。他说:“先进技术的出现,就是让我们不断地拓展边界。相应的,有关部门应该给予坐‘冷板凳’的年轻人更多物质上和精神上的支持。对知识的渴求,永远是人类前进的动力之一。”

江俊的观点是怀抱更开放的胸怀和心态去提升自我。他说:“现阶段科研知识树已经无比庞大,没有人能看到全局,我们应该找到自己喜欢的叶面。在任何一个专业,在自身专业领域把知识脉络看清楚,精准、扎实掌握知识精髓。”

几年来,他学习了很多新知识,甚至试着向本科生学习弄清一些新问题,开组会时,他甚至插不上嘴,只提供方向上的指导。

肖恒宇觉得,如果科学探究的边界一词是指科学的前沿,那么科学研究本身就是在不断拓展科学的边界、加强人类对自然的认知过程;如果科学探究的边界一词是指人类科学不能超越的限制,该限制或许就代表人类目前所能观测到的自然现象的集合,当人类所创造的理论、预测的自然现象超越了这个集合之后,就无法证实或证伪理论,使得理论失去现实意义。

“当讨论话题回到原点,其实人工智能是典型的问题驱动学科,相关研究尚处于初级阶段。化学研究的体系是独特且复杂的,看似简单的化学反应,影响因素涉及分子结构、材料性质等。”李震宇呼吁,应该研发专门服务于精准化学研究的人工智能新算法,发展先进的理论计算与实验表征方法,细化到温度、压强、分子式等各种参数,必将大幅提升化学研究效率。”

他进一步解释道:“科学研究本身就是在不断拓展边界、加强人类对自然的认知过程。精密的仪器、高性能的计算方法、人工智能等先进技术能够帮助人们更快、更好地进行科研探索,在可预见的将来加速扩大科学研究的边界。”

后后修改了40余遍,反复推敲原理的创新性。”为了做出传导性强、选择性好的离子膜材料,团队历时3年潜心研究,花了近两年时间进行论文撰写、修改以及数据补充。

多年来,徐铜文培养了众多优秀人才。截至目前,他指导研究生和博士后150余名,本科生毕业论文80余篇,其中40余人在国内外知名大学担任(副)教授职位。他将科研和育人相结合,正如他写的一首诗:“制备膜,精益求精又柔又韧;塑造人,胸怀远大能屈能伸;兴科技,学以致用为国为民;创效益,腾飞中华强国为魂。”

“目前的研究范式偏向量体裁衣,就是针对某一个应用对象,预测满足这种膜性能需要什么样的材料、修饰、化学反应、制备工艺等,再通过倒推来解决膜结构与膜性能的定量关系、膜使用过程中结构演变或性能变化等关键性问题,最终实现制膜、选膜、应用流程的成本最低。”徐铜文的团队中,有7位年轻骨干、9位博士后、60余位研究生。徐铜文根据各自特点,将他们分成7个研究小组,分别攻克离子膜材料制备、孔道调控、表征、膜过程和模拟等不同方向。

“未来我们重点开展三个方面的应用:一是有机液流电池专用离子膜的开发及其规模化制备,逐步推动储能技术产业化;二是希望实现碱性膜以及碱性膜电解水制氢产业化;三是发力特殊情况的离子膜应用,如高温、高酸、高碱等条件,相应解决一些环保问题。”徐铜文介绍,眼下团队正着手将科研成果逐个从“实验室”推向“生产线”,并进一步围绕“双碳”目标,着力为中国膜材料研究注入更多“中国芯”。



扫一扫 看视频

“化学研究的初级阶段好比交通方式中的‘步行’,随着技术手段升级,研究程度加深、效率变高,等于用上了自行车、摩托车、汽车。当引入人工智能,好比坐上火箭。最终必然‘量变引起质变’,带我们去以前去不了的地方。”在中国科学技术大学,精准智能化学重点实验室主任李震宇用这样一个比喻形容化学研究的变革。

“去以前去不了的地方”是李震宇和所在实验室团队孜孜不倦的科研追求。今年1月,中国科学院精准智能化学重点实验室正式获批建设,由近100位年轻人组成,除化学与材料科学专业的师生外,还包括计算机、人工智能、大数据等方向的研究人员,聚焦如何改变化学研究范式这一关键科学问题,形成集群和协同攻关优势。

纵观历史,化学研究由炼丹、炼金演变而来,人类衣食住行离不开化学物质。同时,作为基础科学的化学,也是多学科交叉的聚集点和出发点,化学研究在能源、环境、材料、生物医药等应用领域扮演日益重要的角色。

历经数百年科研攀登,如今,精准智能化学成为化学家的梦想,更是实现化学学科跨越式发展的契机。而以人工智能为代表的新技术会不会重新定义化学的未来,改变化学研究的面貌?新兴技术的双刃剑会对研究范式带来哪些冲击和影响,师生们又有哪些对策和新招?这些问题一直萦绕在科研工作者心中。

化学版GPT来了,激起科研范式变革浪花

在精准智能化学重点实验室中的机器人学家实验室,青年科研人员只需在控制大屏输入指令,两个动作灵活的机器人“小来”和“小福”就可以在几个操作台间穿梭,伸出机械手臂进行试剂配制。

中国科大化学与材料科学学院教授江俊团队开发了全球首个集阅读文献、设计实验、自主优化于一体,覆盖化学品开发全流程的机器人学家平台,从数百万的可能组合中找到全局最优解加快材料研发。业内专家认为,该成果引领化学研究朝着知识理解数字化、操作指令化、创制智能化的趋势前进,将对化学科学产生巨大影响。

江俊团队有近30位成员,大多是90后、95后,大家怀抱“做中国人自己的材料数据库”的科研梦想。在关键节点——建立数据库知识图谱时,团队曾吃了不少苦头:数据质量良莠不齐,无法进行高效检索,不得不投入大量人力物力为数据打上识别标签。

无奈和碰壁倒逼江俊提升研究效率,2014年,建立会思考的“化学大脑”的念头在江俊心中萌发。他找来人工智能、电子科技、数学、化学等专业方向人才,组成交叉学科背景的团队,将大数据和人工智能技术注入平台的计算大脑,建立理实交融的智能模型。历经8年探索,打造初代机器人学家“小来”。

值得一提的是,在高熵催化剂等实验中,“小来”可以从55万种可能的金属配比中找出全局最优解,将传统“试错法”实验所阅读1400个科研周期缩短为5周。

论文阅读、机器人做实验、数据分析、优化筛选……当前,江俊团队科研全流程都有人工智能的贡献印记,今年年初,在多任务处理性能上实现升级的第二