

科技视点

中国科学技术大学科研人员深耕精准智能化学领域

“机器化学家”带来科研新范式

本报记者 吴月辉



在“机器化学家”实验室里，江俊在对机器人调试化学实验操作指令。

张岗摄

作为人工智能发展的一大趋势，国际学术界已对“人工智能驱动的科学研究”形成共识：人工智能将带来科研范式的变革和新的产业业态。

在中国科学技术大学校园里，化学与材料科学学院的一群科研人员正积极投身这项实践：深耕精准智能化学领域，推动科研范式变革，并取得了一系列令人瞩目的科研成果。

“机器化学家”展现出智能新范式的巨大优势

如何创制一款芬顿催化剂？在中科大“机器化学家”实验室里，大量瓶瓶罐罐的实验工作被人工智能“取代”，科研人员无需亲自来去，整个过程简单而高效。

记者在实验室看到，科研人员在人工智能程序中输入问题：什么类型的非贵金属元素常用于芬顿催化剂？很快，程序就会给出答案。程序提供的答案来自自主研发的文献机器阅读系统，它能迅速读取海量文献，基于统计数据进行分析，帮助科研人员选择最佳的元素组合。接下来，就可以调出“机器化学家”平台中保存的芬顿催化剂实验模板，根据人工智能推荐的元素组合编辑液体进样站的参数，并让名为“小来”的“机器化学家”平台帮助进行实验验证。这样，“小来”便可以开始它的芬顿催化剂创制之旅。

“实验数据经处理后，输入‘小来’独有的计算大脑中，产生人工智能模型，可以帮助科研人员优化实验方案。”中科大化学与材料科学学院教授江俊告诉记者。“小来”等人工智能工具和平台，是中科大化学与材料科学学院江俊团队的研究成果。其中，人工智能程序由化学数据驱动，并结合人类化学家的知识进行机器学习训练，能够针对使用者提出的问题给出初步的实验建议。“小来”则是团队自主开发的集阅读文献、自主设计实验、材料开发于一体的“全流程机器化学家”平台，它能够以数以亿计的可能组合中找到最优解，进而加快材料研发。

实验室里，由“小来”驱动的机械手臂伸缩自如，精确抓取配试剂。

“全流程机器化学家”平台到底有多大？以潜力巨大的高熵化合物催化剂为例：获得最优配方需要测试其庞大的化学配比组合，如果依赖传统研究范式，这一过程可能需要1400年，而“机器化学家”发挥数据驱动和智能优化的优势，从55万种可能的金属配比中找出最优的高熵催化剂，仅需要5周时间。

专家认为，这种“机器化学家”的研究工作摆脱了传统研究范式的限制，展现出智能新范式的巨大优势。

利用人工智能将科学知识数字化、代码化

猜测、尝试、纠错，再猜测、再尝试……在过去150多年里，传统的化学研究范式深度依赖“试错法”，其局限性使得物质创制的周期长、成本高，难以实现高效、节能。

此后，由量子力学发展而来的量子化学，成为化学家使用的工具。化学家们可以在计算机上进行模拟实验来验证某个理论，大大提升了效率。然而，化学研究对象日益复杂化、高维化，面对庞大的化学空间，配方和工艺的搜索常常止步于局部最优，无法进行全局探索。

在计算化学领域有过10年研究经历的江俊感慨：“我们的化学体系非常复杂，超算虽然进化很快，但还是无法应对它的复杂度。”

怎么办？必须找到新的方法。和江俊一样，中科大教授李震宇也一直在关注和思考这个问题。

“精准化是所有化学家的一个梦想。我希望把这个东西放进去，想让它转化成什么就能百分百转化成什么，过程中还不会产生任何另外的东西。”李震宇说，“这就要求整个化学研究能做到精准的设计、表征、制备和调控，要求整个过程是透明可控的，里面的机理也是清楚的。要实现这个目标，整个研究范式必须改变。”

逐渐兴起并快速迭代进化的大数据与人工智能技术，让江俊和李震宇看到了解决这些难题的希望。

江俊认为，大数据与人工智能技术可以把科学知识数字化、代码化，并进行迁移。“也就是说，我们随时调用优秀研究者发明的代码。他们的智慧结晶，只要我用一

个‘子函数’就能调用过来。如果只靠人脑来学习、实践和训练的话，整个过程就会很漫长，知识的迁移就会变得低效。”

于是，江俊心中萌生了一个想法：是否可以借助人工智能技术开发一种新工具？在他的构想当中，这个工具能够帮助科学家突破思维局限，利用数据建立有效的复杂模型，从而指导化学实践。

2014年，江俊团队提出“机器化学家”概念并开展相关科研工作。经过8年攻关，团队通过开发和集成移动机器人、化学工作站、智能操作系统、科学数据库等技术，在2022年成功研制出数据智能驱动的“全流程机器化学家”。

“机器化学家”助力催生化学研究新范式

如今，“全流程机器化学家”在科学研究中发挥着积极作用。中科大邹钢团队筛选光学活性薄膜材料时，为找到目标材料，需要混合多种分子来控制薄膜厚度、应力、灰度等工艺条件，其可能性有上百万种。团队努力了10年，终

于将不对称因子提高到了1.2，但离理论极限2.0还有非常大的差距。借助“小来”，他们在两个月内找到了不对称因子1.95的工艺条件，高度逼近理论极限。

江俊成功走出了第一步，让化学家们深受鼓舞，更加坚定了以人工智能技术推动化学科研范式变革的决心。

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，李震宇担任实验室主任。“实验室主要面向世界科技前沿，聚焦如何改变化学研究范式这一关键科学问题，探索建立化学研究的精准化、智能化双驱动模式。”李震宇介绍。

李震宇认为，当前人工智能技术应用于化学研究最大的困难和挑战来自数据。“已有的大量数据来源复杂，质量参差不齐。这些数据混在一起，让人工智能去学习，很可能会学到一些错误的知识。所以，我们希望发展一些新的技术，能够进行一些更高精度的表征，同时还能够形成一套数据标准，在这个基础上去做数据驱动的智能化学。”

“机器化学家”的出现，让化学家们解放了双手。也有人担心：未来化学家们可能会无事可做。江俊表示不用为此多虑：“一个好的技术工具出来，也会赋予更多的可能性，

让科研人员做更多的事，发现更多的前沿理论。”

“机器化学家”的出现，推动化学研究范式的改变，也对未来的化学发展提出了新的要求。江俊说，比如，在人才培养方面，既需要具备扎实的化学基础，还要有开放的心态，要善于、敢于学习各种新知识。

未来，江俊希望建成一个“机器化学家”大科学装置：在一整栋大楼里，布置上百个机器人、上千个智能化学工作站。基于这样一个大平台，各个课题组的实验数据可以交汇、共享，产生海量数据，自动提炼出数字化的知识图谱和人工智能的模型，进而指导机器人自动优化生产更好、更高效的化学品或新材料，实现数据智能驱动的化学研究新范式。

对于精准智能化学重点实验室的首个重点应用研究，李震宇和同事们目前有了一个明确的目标：基于精准化、智能化双驱动的化学研究新范式，对现有氮资源转化相关反应进行全面评估，提出绿色低碳转化新路径，创制新型催化体系，在氮资源综合利用领域实现突破。

李震宇说：“氮资源高效转化是一个极具挑战性的难题，希望新的研究范式能够给我们带来帮助。”

创新谈

社会科技奖的数量、水平和影响力，是一个国家尊重人才、尊重知识、崇尚科学、鼓励创新的重要体现

推动社会科技奖走“四化”发展之路

赵永新

前不久，科技部发布《社会力量设立科学技术奖管理办法》（以下简称《办法》）。《办法》共六章三十五条，从社会科技奖的设立、运行、指导服务和监督管理等方面明确了基本要求。这为提高社会科技奖的“成色”，推动其走专业化、特色化、品牌化、国际化“四化”发展之路，提供了制度性保障。

科技创新既是增进全社会、全人类福祉的崇高事业，同时也是艰辛探险。那些勇闯“无人区”、在探索道路上奋力攀登的科技人员，为科技事业发展添薪火、蓄动力，值得全社会的尊重与褒奖。社会科技奖的数量、水平和影响力，是一个国家尊重人才、尊重知识、崇尚科学、鼓励创新的重要体现。

社会科技奖一般是指国内外的组织或者个人利用非财政性经费，面向社会设立，奖励在基础研究、应用研究、技术开发以及推进科技成果转化应用等活动中为促进科学技术进步作出突出贡献的个人、组织的经常性科学技术奖。

改革开放以来，特别是党的十八大以来，随着科教兴国战略和创新驱动发展战略的深入实施，我国社会科技奖蓬勃发展。从港澳爱国人士设立的何梁何利奖、求是奖、邵逸夫奖，到一批企业家资助的未来科学大奖、科学探索奖、青橙奖、世界顶尖科学家协会奖，这些各具特色的社会科技奖，在弘扬科学精神、普及科学知识、激发科技人员创新积极性、推动海内外科学家交流合作等方面发挥了积极作用。同时也要看到，与一些历史较长、运作成熟的国际奖项相比，我国的社会科技奖在专业化、特色化、品牌化、国际化方面都有很大的提升空间。

此次出台的《办法》指出，国家鼓励设立社会科技奖，引导扶持培育品牌；支持在重点学科和关键领域创设高水平、专业化的奖项；鼓励面向青年和女性科技工作者、基础和前沿领域研究人员设立奖项；引导社会科技奖坚持学术性、荣誉性，坚持以科技创新质量、绩效、贡献为核心的评价导向，突出奖励真正作出创造性贡献的科学家和一线科技人员，走专业化、特色化、品牌化、国际化的“四化”发展道路。走好“四化”发展之路，一方面需要社会科技奖项设立高水平的科学委员会，通过科学、独立的评审机制评出业内同行认可的获奖者；另一方面，也要放眼长远，持之以恒，打造科技奖的“百年老店”。专业化是基础，特色化是关键，随着奖项的公信力、影响力不断提升，相信品牌化、国际化也会水到渠成。

高水平科技自立自强的加快推进和国际科技合作的纵深发展，对社会科技奖的发展提出了新要求。期待有更多的社会科技奖项在《办法》指引下不断提升“四化”水平，奖励、激励海内外科学家携手科学合作、勇攀科学高峰，为科技创新事业和人类文明进步作出新的更大贡献。

新闻速递

专家探讨交通行业数字化技术应用

本报电 日前，中国公路工程咨询集团有限公司在京举办首届科技峰会暨“数智交通+智慧养护”论坛。会上，专家们结合智慧交通、智慧城市、未来能源、基础设施安全维护、综合交通大数据等领域，共同探讨数字化技术在交通行业的融合应用。中咨集团全过程工程咨询发展研究院、数智交通发展研究院、公路交通全周期工程服务研究院等在会上揭牌，会议还同期举办了中咨集团科技成果展。（谷业凯）

产学研共议数实融合趋势

本报电 日前，阿里研究院联合企业级智能移动办公平台钉钉在京召开中小企业数实融合研讨会，来自中国工业互联网研究院政策研究所等机构的专家学者和企业代表出席会议，并就数实融合趋势展开研讨。会上，阿里研究院和钉钉联合发布中小企业数字化案例集，通过展示专精特新“小巨人”企业的创新实践，为中小企业数字化转型提供参考。近年来，钉钉大力推广低代码开发模式，助力中小企业自行创建、部署、使用和调整数字化应用。（陈沛然）

本版责编：谷业凯

华大智造研发超高通量基因测序仪

助力精准医学发展

本报记者 刘诗瑶

前不久，华大智造对外发布其研制的超高通量基因测序仪，该测序仪每年可完成5万例人全基因组测序，大幅降低个人基因组测序的成本。

作为基因测序的关键设备，测序仪的每一次重要突破都会给行业带来进步。上世纪90年代，全球科学家启动了“人类基因组计划”，旨在测出人类基因组DNA30亿个碱基对的序列，破译遗传信息。经过不懈努力，2003年该计划宣告完成。在此基础上，科研机构和技术公司持续攻关，不断提升基因测序仪器设备的性能。

据专家介绍，借助测序仪等科技手段，可帮助研究人员加深对基因组的认知，进而帮助人们更好诊断、治疗和预防相关疾病。例如，孕期产检无创项目就是通过基因测序技术，对唐氏综

合征等几种染色体异常进行筛查。2022年10月，上海交通大学医学院附属瑞金医院、上海交通大学转化医学研究院依托华大智造的测序平台，构建了首个中国人群血液病毒组学图谱，为疾病预防与流行病学研究提供了科学参考。

在动植物领域，基因测序也有用武之地。分子育种专家、中国农业大学教授胡晓湘介绍，借助基因测序仪对猪鸡等生物进行全基因组测序工作，可以探索重要经济性状的遗传基础，优化畜禽育种选育的流程。

专家认为，基因测序产业发展，既需要技术创新作为原始驱动力，在设备研发和检测手段上不断精进，也需要加快临床转化，持续推进应用。

以测序仪为例，降本增效是科研人员追求的目标。华大智造

副总裁倪鸣介绍，超高通量测序仪在短时间内能将测序生产规模提升至新的量级，根本在于创新。例如，团队自主研发了浸没式生化反应技术，直接将芯片浸没在试剂槽中进行生化反应，使得反应均匀且稳定，且试剂槽中的测序试剂可以支持芯片的多次浸泡，从而实现耗材成本降低的目标。

更大通量、更低成本、更大规模需求……在符合法律和伦理的框架下，基因测序技术大有可为。

倪鸣表示，通过不断减小测序仪的外形体积、提升测序仪的智能化水平和简化基因测序流程等，将助力推动传统医学向精准医学发展。

创新故事



数字化机房安装有技巧

近日，由中国建筑业协会、中国就业培训技术指导中心主办的2023年全国行业职业技能竞赛——“中建八一安装杯”全国数字化机房安装技能竞赛总决赛在济南举行。来自各地的36支代表队共计144名选手同台竞技。

温军摄（人民视觉）