

# AI 正撬动科学研究的革新

话题主持

本报记者 易蓉

实验室里，机器人的机械臂灵巧操作，实验数据自动储存、传输、分析。操控它的，是一个科研智能体。

这样的实验室正在中国高校生长。人工智能赋能科学研究(AI for Science, AI4S)已经从某个领域、某些环节的效率提升，迈向更广领域和更高层次。随着数据库、底座模型、智能体等新 AI4S 科研“基础设施”的建设和不断完善，成为科研“合伙人”的 AI 会否超越人类承担起“发现”的使命？科研是否能获得“自动驾驶”般的体验？



## AI for Science 一场关于科学发现底层逻辑的革命

中国工程院外籍院士、香港科技大学首席副校长 郭毅可

过去一年，人工智能领域发生的大事让人应接不暇，科学的智能化也成为大家最关心的话题。而科学研究中最重要的就是科学发现，作为科学家，我最关心的是人工智能究竟能否作出“发现”？这个“发现”是人类的专属领地，还是机器也能参与其中？这正是我今天想探讨的核心命题。

### AI能“发现”吗？从贝叶斯大脑到主动推理

要回答这个问题，我们必须回到第一性原理：什么是“发现”？我们赖以认知的世界，真的是我们“看见”的吗？

人类的大脑只有1.4公斤，紧锁在我们的颅骨里。我们对外部世界的所有感知都来自五官接收的信号。这些信号有两个特点：第一是离散，二维的，第二是有许多噪声。我们能够拼凑出一个连续、生动、三维的世界图像，靠的不是摄像式的记录，而是大脑的“猜测”。这个“猜世界”的理论，在认知科学中叫作“预测编码”理论。大脑中有一个生成模型，它不断根据已有的先验知识预测世界，同时从感官接收信号——只有那些与预测不符的“意外”，才会被大脑捕获，成为我们修正

认知的素材。

所以，什么叫“发现”？发现就是“没想到的事情”。贝叶斯定律告诉我们：不是看见了才相信，是相信了才看见。这与“情人眼里出西施”是一个道理。当你看到一个人觉得对方美丽，是因为你心中已经有了“美”的模型和喜欢对方的先验。先验是主观的认知，似然是你的观察，先验和观察结合形成新的认知。当观察与先验出现偏差，这个偏差就是“误差”，在物理学中被称为“自由能”。这个自由能对大脑有两个作用：一是修正认知，这叫感知推理；二是改变世界，让它符合预期，这叫主动推理。

主动推理正是人工智能赋能科学研究(AI4S)最重要的理论依

据。感知推理是我们熟悉的机器学习，而主动推理指向的则是具身智能——它不是把大模型放进机器人里就万事大吉，而是让“行动”本身成为推理链条的一环。行动不是输出，而是消除误差的手段。好奇心从哪里来？探索行为从哪里来？都源于我们试图减少世界的不确定性。发现的动力，正源于此。

所以我的结论是：人和机器的智能在物理上是同源的，数学上是同构的。我们没有必要怀疑机器是否具有发现能力，因为人的认知本身也是一套完整的、可描述的机制。从这个意义上说，机器不仅能发现，而且它发现的方法、逻辑，与人类可能并无本质区别。

### 科学实验的AI化：从被动记录到主动推理

过去几年，我们看到了AI提高药物筛选效率、加速蛋白质结构预测、优化材料合成路径……但这些更多是解决“效率问题”——让本来要做三年的事情缩短到三个月。这个效率的提高很大程度上是把科学实验智能化(AI for Lab)了，系统地把科学实验真正用AI做起来，让AI从“效率工具”变成“合伙人”，让实验室管理系统从“被动记录”走向“主动推理”。

我现在正在主导AI原生创新环境(AINA, AI Native Arena)的研究，就是这种探索的实践。传统科研流程是：科学家提出假设—设计实验—收集数据—分析结果—撰写报告。其中充斥着大

量重复性、流程性工作，比如填电子表格、做实验笔记、管理库存、归档数据。而现在，我们要用大模型和智能体把这些工作自动化。

我们正在做科研人员的“实验分身”。它可以在7×24小时内自主运行，基于已有的先验模型和实验结果，计算误差，驱动实验室设计，触发工作流。我们已经在药物管理、动物中心管理等场景中实现了全流程自动化。举个例子：教授确定一个研究方向后，智能体自动生成实验方案，整理数据，发现问题后自动修改，最后生成报告，整个流程两天完成。这套系统的核心，是一套智能体自主协作机制：任务的触发、智能体间的协作、持续的自我

进化。主动推理在这里体现得淋漓尽致——发现不对，重新设计实验，重新改变工作流。这不是简单的自动化，而是真正的自演化。

与过去那种“用AI解决某个具体问题”的模式不同，今天的AINA要构建完整的生态系统：从数据采集、知识管理，到实验设计、结果验证，再到报告生成、知识传播，全部被纳入一个由人、AI集群、智能体协作的闭环中。第一层是人，负责提出方向和最终决策；第二层是智能体集群，负责数据分析、推理、实验设计；第三层是智能体自主协作机制，负责任务的触发、执行和自我进化。这三层架构，构成了AI原生的科研新范式。

### 愿景、现状与挑战：通向AI科学家的漫漫长路

作为科学家，我心中理想的人工智能赋能科学发现(AI for Discovery)是什么样的？

我希望未来的科研，是“人+AI”的深度融合。科学家不再是孤独的探索者，而是与一群智能体协同工作的“指挥家”。当一个想法产生时，AI可以瞬间完成文献综述、实验设计、代码生成；当实验进行时，AI可以实时监控、自动调整、持续优化；当结果出现时，AI可以撰写报告、提出新问题，推动下一步探索。科学家从繁琐的重复劳动中解放出来，专注于提出真正原创的假设、洞察真正深刻的规律。

我们距离这个愿景还有多远？实事求是地说，我们还在起步阶段。今天的智能体在处理流程化、权限清晰的工作时已经表现出色。比如在科学实验室中，

所有工作流程一清二楚，权限管理严格，正是智能体发挥作用的理想场景。但一旦离开这种边界清晰的领域，智能体的不确定性就会急剧增加，这也是为什么我不建议用它来管理个人文件系统——保密性和不确定性带来的风险太大。

当前面临的挑战至少有三个：第一，多模态对齐。蛋白质分子、化学分子、语言文字，这些不同模态的信息如何对齐？今天我们可以让视频中的人瞬间换装，但要让一个分子结构精准对应到一段文字描述，还需要底层的突破。第二，数据的质量与标准化。AlphaFold之所以成功，是因为它建立在数十年高质量、标准化的蛋白质结构数据之上。在其他领域，这样的数据基础还不存在，清洗数据的精力往往超过建

模本身。第三，信任与验证。人工智能有幻觉，人类也有幻觉，但在科学领域，幻觉必须被验证、被约束。每一个环节的质控、每一个发现的验证，都至关重要。

但即便如此，我仍然充满信心。AI for Lab是AI for Discovery的关键一步，也是第一步。实验室的数据吞吐量巨大，验证知识、分析知识的瓶颈正在被AI逐步打破。这是一个巨大的产业，也是智能体技术一个绝佳的切入点。那些以为AI只能“炒概念”的人会失望，因为在科学实验室里，AI真的很能干实事。

最后，我想说：AI for Science不仅是一场技术革命，更是一场认知革命。它让我们重新审视“发现”的本质，重新思考“智能”的边界。在这场远征中，人永远是智能中枢，但我们不再独行。

中国高校围绕人工智能赋能科学研究，已纷纷展开系统化布局，加快平台、工具建设，正推动科研范式发生变革。一批以科研智能体为核心的新型科研基础设施相继落地，AI从“辅助科研”迈向“深度参与甚至主导科研全流程”。

复旦大学联合上海科学智能研究院发布全面升级的“星河启智科学智能开放平台”，并推出超级科研合伙人“大圣”，整合多模态科学大模型、300余个专家级科研技能模块(Skills)与长周期群体记忆架构，能够通过自然语言理解科研任务，自主完成“假设—实验—验证—迭代”的完整闭环。

上海交通大学发布通用科研智能体SciMaster及其底座科学基座模型Innovator，构建覆盖“搜、读、算、做、写”全链条的一体化能力体系。该平台不仅能自动调用各类科研工具，还配套建立智能体评测系统，为未来规模化部署科研智能体提供标准化基础设施。

港科大正推进“AI for Lab”计划，开发实验室智能体AINA，推动主动推理与自动化实验深度融合，让AI能“动手”能“思考”。

AI4S已展现突破传统科研效率瓶颈的优势，让人工智能承担重复性工作，释放科学家的创新精力，实现科研周期的大幅压缩，科研成果的高效转化。

复旦“大圣”智能体凭借96%的RNA分类与设计准确率，在siRNA设计中将实验成功率提升超50%，还支撑了转化价值2000万元的新型补剂研发与潜在价值5亿美元的FIC类药物发现，实现科研成果的高效产业化。上海交大通用科研智能体SciMaster展现出极致的科研效率，其6小时的运行成果即可比肩资深理论物理学博士1至3个月的饱和工作量，为科研工作提供“自动驾驶”般的体验。

不仅如此，AI4S还实现了跨领域的科研能力突破：香港科技大学副教授、香港科技大学潘乐陶气候变化与可持续发展研究中心主任陆荫茜的团队通过AI技术颠覆了地球系统科学的可预报性认知，提前1个月预报台风数量的实测误差仅0.5个；中国科学院院士、上海大学材料基因组工程研究院副院长张统一的团队通过AI多目标优化，破解了材料强度与韧性相互制约的行业难题，推动新材料研发取得新进展。

多位专家直言，当前AI4S发展仍处于起步阶段，诸多瓶颈亟待突破，成为制约其规模化落地的关键因素。首先，硬件掉链子与模拟反馈慢是急需解决的问题。例如，科学实验中的机械臂损坏、设备故障等问题会导致实验停滞，而化学、材料等领域的实验结果反馈周期长，与AI的快速推理形成矛盾，缺乏新的理论和方法支撑。其次，模型的可解释性与物理融合不足。此外，纯数据驱动的AI模型对复杂系统物理规律的捕捉欠佳，长程任务的执行稳定性不足。不仅如此，AI4S的发展需要既懂专业领域知识，又掌握AI技术的复合型人才，因此跨学科人才的稀缺，也成为行业发展的制约。

本报记者 易蓉 实习生 李馨

中国高校的AI4S正在进行时  
从「辅助科研」迈向「深度参与全流程」



本版图片 ©