



香山科学会议上专家关注“AI+化学化工” 人工智能正在解放化学家的双手

本报记者 刘园园

近日,香山科学会议聚焦绿色生态与化学化工,除了各种前沿化学化工技术之外,人工智能在该领域的应用成为被关注的新议题。

“合成化学过程中的变数太多确实给通量制备和通量反应条件筛选增加了难度。但是在大数据与人工智能时代,这样的状况将会大大改变。”中科院上海有机化学研究所副所长马大为在会议上介绍,人工智能有望助力合成化学研究迈上新的台阶。

不同的路线。“研究人员可能只能想出20多个合成路线,而这些程序可能会提供上百条可能的合成路线,这对于研究人员来说非常有帮助,因为有些路线可能从未想过。”马大为说。马大为告诉科技日报记者,根据人工智能

程序提供的预测路线,有经验的研究人员可以从中判断出哪些路线是好的,哪些是有提示意义的,进而帮助研究人员思考一些问题。这可以为化学合成提供更多的机会。因为根据人工智能程序的提示,再加上人脑进一步深度思考,可能会设计出更好的化学合成路线。

“劳动密集型”将成过去

“在有机合成领域,合成化学家在上个世纪就号称给予足够的学生和经费资助,可以合成任何复杂的有机小分子。但是直到今天,无论是新药开发还是新材料发展,人们发现过程的决速步骤往往还是化合物的合成。”马大为介绍。

马大为解释说,这是因为,尽管化合物性质的评估大部分已进入通量筛选阶段,但化学合成仍然停留在手工操作阶段。

在化学合成领域,由于不同化学反应条件下的无穷变化,研究人员设计化学合成路线基本上还是依靠手工——在药物分子合成领域尤其突出。这就让化学合成更像一种“劳动密集型”工作。

但在人工智能时代,这种状况将逐渐成为过去。基于大数据与人工智能的计算机程序在辅助研究人员进行化学合成路线设计方面开始变得越来越成熟实用。

去年4月,一个德国研究团队在《自然》期刊

发表论文称,他们可以凭借人工智能系统以前所未有的速率进行化学合成分析,这将大大提升科研人员研发新药和其他化合物的效率。

根据这篇论文的内容,研究人员利用人工智能系统设计一个分子的合成路线,只需要5秒钟。马大为感叹说,人工去设计的话,5秒钟都来不及把分子结构看清楚,5分钟都不一定能把分子设计出来。

南京大学化学化工学院副教授李承辉了解到人工智能算法推荐分子的合成路线后,获得不少启发。他目前也在考虑如何用人工智能帮助他做化学研究。

李承辉前不久发现一种新的分子内成环反应,希望了解这种反应是否在其他分子内也存在。按照以前的研究方式,他的工作量会非常大。因为要检测这种反应是否具有普适性,需要用不同的分子做大量的实验才行。“如果有人工智能的帮助,就可以有针对性地去做好事。”李承辉说。

未来只需“照药开方”

马大为认为,上述变化对化学合成来说,意义非常重大。因为将来人工智能程序可能像“傻瓜机”一样,科研人员进行化学合成时只需按照它的推荐“照药开方”。

过去,了解一个化学反应条件是否可行,就是不断试错的过程。需要人工一个一个去测试,包含大量的重复性劳动。如今,可以利用人工智能对化学反应数据进行快速检测,然后在机器上进行通量的反应条件测试,整个系统一天可以做上千个反应条件的测试。换成人工,一个实验室里每天做20个化学反应测试就已经很不错了。

马大为告诉科技日报记者,一些大型制药公司已经将人工智能用于辅助设计化学合成路线,成为此类技术的第一批用户。除了药物研发,新材料研发等包含化合物合成的领域都可利用人工智能进行化学合成路线推荐。

“将来,合成以往不存在的分子就像盖房子

一样,先让人工智能把蓝图描绘出来,研究人员只要按着蓝图去搭建就行。”马大为说。

李承辉也认为,人工智能在化学领域将大有可为。在他看来,未来化学领域的人工智能应用将像人工智能医生一样,它能够掌握和消化海量合成方法、合成路线、材料结构和性能等,科研人员做化学合成研究时,它可以帮助分析和解决很多问题。

不过总的来说,人工智能扮演的角色仍是辅助性的。它可以把化学研究人员从繁重的手工劳动中解放出来,并为他们的研究提供一些参考和借鉴。但其推荐的结果也需要研究人员利用专业知识和经验去判断,哪些是真正可行的。

此外,人工智能推荐化学合成路线目前仍处于模型机阶段。马大为认为,化学研究人员需要不断地为人工智能提供创新策略,推动人工智能系统不断优化,后者再反过来推动化学研究人员进行更深入的研究。

相关链接

人工智能机器人助力快速发现新分子

早在去年,英国格拉斯哥大学的化学家们已经讨论了如何训练一个人工智能有机化学合成机器人来自动探索大量的化学反应。

这种“自我驱动”的系统以机器学习算法为基础,可以发现新的反应和分子,允许利用数字化学数据驱动的方法来定位感兴趣的新分子,而不是局限于一个已知的数据库和常规的有机合成规则。其结果可能降低发现新的药物分子、新化学产品(包括材料)、聚合物及用于高科技应用(如成像)分子的成本。

研究小组通过使用18种不同的起始化学物质的组合来模拟大约1000种反应,展示了该系

统的潜力。在探索了大约100种的可能反应后,机器人能够以超过80%的准确率预测出哪些初始化学物质的组合应该被探索以产生新的反应和分子。通过探索这些反应,他们发现了一系列以前不为人知的新分子和反应。研究人员发现了4个新反应,其中一个反应被归入已知最独特反应的前1%。

研究者表示,这种方法是化学数字化的关键一步,它将允许对化学空间(chemical space)进行实时检索,从而帮助新药物的发现,并削减成本,节省时间,提高安全性,减少浪费,帮助化学进入一个新的数字时代。

开始扮演得力助手

“小通量的反应条件筛选设备已经在一些公司和大学变成常规武器,高通量的大型反应矩阵机器人已经诞生。”马大为认为,这些设备的普及化有可能为将来的合成化学研究带来巨大变化,在很大程度上解放了合成化学家的双手,让研究人员花更多的时间进行数据分析和反应的顶层设计。

马大为在接受科技日报记者采访时介绍,人工智能程序用于预测普通的化学小分子合成路线已趋于成熟。即使一些复杂的有机小分子比如药物分子,由于结构单元比较单一,合成反应并不是很多,人工智能程序可以直接辅助设

计出合成路线。这对于初级的研究人员而言,会提供很大帮助。

“现在做药物合成研究,假如知道一个药物分子的结构,人工智能系统可以根据它的结构分析出很多种合成路线,并且推荐一个最佳路线。”李承辉说,如果是以前,这样的研究需要非常有经验的有机化学专家才能实现,但是将来在人工智能的帮助下,从事无机化学的研究人员也可以做到。

而在合成结构比较复杂的目标分子时,比如需要20多个步骤才能合成出来的自然界存在的复杂分子,人工智能程序可以预测出很多条

无人科技解锁“智能+”物流供应链

第二看台

本报记者 李禾

无人科技的自主创新和应用场景正在不断深入,相关政策也在不断完善。近日,中国民用航空西北地区管理局印发了《西北地区民用无人驾驶航空器物流配送运营活动管理办法(试行)》(以下简称《办法》),《办法》规定起飞重量不超过300斤的物流无人机可在陕西、甘肃、宁夏、青海等西北4省内“翱翔”。这将是继民航西北地区管理局向京东颁发全球首个省域无人机物流经营许可证以来,首次突破省际区域的限制。

作为人工智能应用的重要场景,无人物流技术已经逐渐从实验室走向市场。据中国物流与采购联合会发布的2018年全国物流运行数据,2018年全国社会物流总额283.1万亿元,同比增长6.4%,其中无人仓、互联网运输、物流货物追溯等智慧物流加速发展。那么,无人物流中的人工智能技术是如何实现落地的?

无人机让物流费用降低70%

随着科技快速发展,目前京东、顺丰、菜鸟等公司都在积极开发无人机物流。4月24日,无人机快递公司Google Wing也正式获得美国联邦航

空管理局(FAA)颁发的第一个本土无人机快递许可证,年内将在美国开展配送。

有数据显示,在我国,末端配送成本已占到物流行业总成本的30%以上,用无人机替代汽车送货至少能让物流费用降低70%。

“京东从2007年开始自建物流体系,经过12年的积累,拥有丰富的物流场景,也熟知物流行业的痛点。”京东相关业务负责人在接受科技日报记者专访时说,业务的高速发展,对物流在效率与成本方面也提出了更高要求,这都是京东物流开展智能物流无人科技研发、应用的重要因素。

为了应对高速发展的业务需求,京东物流提出了“干线—支线—末端”三级无人机+通航智能物流体系。目前,京东末端配送无人机已形成了成熟的运营模式,在陕西、福建、海南、江苏等9个省份实现常态化运营,并在印尼完成了首次飞行。

组成“无人”科技矩阵

无人物流不仅只有无人机,无人仓、无人车等也早已加入“无人物流矩阵”。

叉车从货架取下物品放上传送带,机器手臂有条不紊地分拣,小型翻斗车在既定路线来来往往……在京东“亚洲一号”,可以看到无数个各种类型的智能物流机器人,通过相互协作

或与人物的紧密配合,完成了整个仓储环境中的各种工作……像这样的大型智能仓储物流中心在全国已超过20座。

无人机、无人仓与无人车等组成了空地一体智能物流体系。在末端配送环节,京东物流配送机器人在全国20多个城市实现常态化配送,覆盖了封闭园区、开放道路、快递接驳等多个场景,积极探索解决城市物流配送“最后一公里”难题。

无人科技已应用在物流的方方面面。如菜鸟在南京启用了国内首个物联网机器人分拣中心,通过应用计算机视觉、多智能体机器人调度技术,实现了大件包裹在整个分拣中心内的全程可控、智能识别及快速分拣等,比传统人力分拣效率提升1.6倍。

京东有关负责人说,除内部创新和应用,从2018年10月,京东物流正式对外开放无人科技,面向全社会提供多场景智能机器人、大数据与机器学习、定制化无人系统解决方案、无界零售解决方案等,通过技术赋能、数据赋能、场景赋能推动各行各业成本优化和智能水平提升。

2019年,京东物流将继续扩大对外开放,通过更多新技术的高效研发、新设备的前沿应用和合作项目落地,帮助合作伙伴全面提升效率、降低成本、优化用户体验,共同推动物流行业转型,成为更多领域的智能化升级方案提供商。

向无人超市和餐饮延展

无人科技让智能物流体系从梦想变成了现实的同时,还推动了智能消费、智能餐饮等领域的创新。

通过人工智能、物联网、生物识别等技术的应用,京东X无人超市已在包括办公园区、景区、商超、高铁站、加油站等各种场景下完成落地运营。在智能科技与餐饮场景的融合中,点餐、配菜、炒菜、传菜到用餐、结算,智能机器人和人工智能后台贯穿餐厅运营全过程等。

无人科技背后的大数据、AI算法等科技成果还促进了建立了以消费者个性化需求为核心的C2M反向定制、物流价值供应链等技术。

“通过精准的补货预测进行商品布局,价值供应链可帮助商家把现货率、满足率做到95%以上,同时去库存,降低周转天数,优化整个仓储、运输成本和运营投入,90%的订单可以24小时完成履约,完成门店补货。”京东物流价值供应链业务负责人杨海峰说。

不过,京东等也表示,无人物流科技的发展尚处初级阶段,需要解决的问题还很多,如电池技术、5G网络真正覆盖、相应政策法规、行业标准还需进一步规范和完善,以指导行业更健康有序发展等。

瞭望站

医疗影像AI落地难 数据应用有“三痛”

本报记者 张佳星

“AI的‘燃料’是数据。”近日,在超声大数据与人工智能应用与推广大会上,上海交通大学附属瑞金医院教授詹维伟打了一个形象的比喻,他说,驱动AI落地临床,数据的可用性起着基础性的作用。

“顶级期刊发表的关于医学影像AI的论文大多需要大样本(10万以上)数据库训练。”詹维伟说,海量的数据意味着数据可用、不被污染,且能实现标准化。

事实上,中国的医学数据看似很多,但是可用性并不高,正是因为存在被污染、信息不健全、难以标准化的三大“痛点”。东南大学生物科学与医学工程学院教授万遂人表示,在多中心的数据库建立过程中,经常出现对同一医学问题的不同说法。他认为需要经过几年的时间,完成行业标准的工作。

另一方面数据的不统一还存有一定的客观原因,例如不同品牌的仪器成像机理和标准不同,因此对于同一病灶输出的影像并不相同,这也大大提高了数据库标准化的难度。

为此专家呼吁相关机构进行数据的标准化工作。“整个医学人工智能的基础是大数据,大数据的基础是我们数据样本的标准库是否建立。”国家卫生健康委员会规划信息司信息处处长沈剑锋表示,标准的医学影像数据库不仅应该对数据进行标准化,还应该对病灶有清晰的标注,且兼顾年龄分布、疾病分类等其他维度的信息。

据介绍,国家卫生健康委员会已经开始着手进行国家层面的数据标准库的建立。并发布了《全国医院信息化建设标准与规范》《全国医院数据上报管理方案》等指导性文件,对包括数据在内的相关信息进行标准规范。

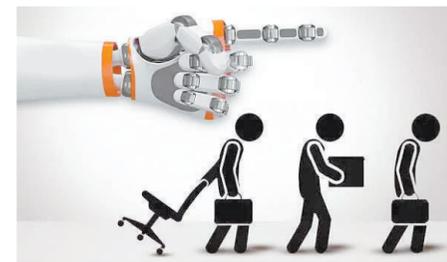
“拥有大数据的第三方公司也应该在数据规范方面从事更多的工作。”詹维伟说。

美年大健康集团董事长俞渝对此表示认同,他说:“我们的600家运营机构去年为两千多万人次提供体检服务,庞大的流量和数据理应承担更多的科研和技术突破的责任。未来将加强相关标准化数据的采集、质量控制、数据分析工作,以便将数据提供给相关部门,助力建立医学影像的专业数据库。”

当天,大数据算法与分析国家工程实验室杭州创新中心、浙江省数理医学学会、美年大健康集团三方达成合作,共建超声大数据库。医学影像AI合作开发联盟同步成立,并发出倡议呼吁各方积极推动资源的高效配置,推动医学影像AI技术落地,通过联合研发共同开展国家级和省部级重大专项、产业化基金、科技发展基金等项目的立项、申报和项目的执行工作,实现产学研的优势结合。

情报所

美电商巨头 借助人工智能解雇低效率员工



人工智能在社会生产生活中的应用似乎已势不可挡,它能够提高生产效率,让生活变得更便利,但也有企业借助它解雇被人工智能系统自动定性为低效率的员工。

据美国“临界点”网站近日独家报道,美国电商巨头亚马逊构建了一个高度自动化的人工智能系统,可以追踪公司仓储物流中心每一名员工的工作效率。如果一名员工上班时长时间不干活,系统会自动生成警告甚至解雇指令。

该网站获得的一份文件显示,亚马逊的律师表示,2017年8月至2018年9月,仅亚马逊位于美国巴尔的摩的某个仓储物流中心就有“数百名”员工遭解雇,原因是他们未达到生产率指标。这个仓储物流中心共有2500名全职工人。

亚马逊发言人对该网站证实,这个仓储物流中心在此期间共有300名工作效率低的员工离职。

报道援引批评者的话说,人工智能系统看到的只是数字,而不是人,有些工人抱怨说自己“被当成了机器人”,有些工人甚至声称不敢上厕所。但亚马逊强调,有关主管可以根据具体情况推翻人工智能系统作出的解雇决定。而且亚马逊会对工作表现不好的员工进行再培训,只有多次工作表现不好的员工才会遭解雇。

据报道,亚马逊在北美运营超过75个仓储物流中心,雇用超过12.5万名全职工人。亚马逊发言人说,过去两年里,北美仓储物流中心总体来说解雇员工的数量有所减少。(据新华社)

(本版图片来源于网络)

扫一扫 欢迎关注 AI瞭望站 微信公众号

