

AI遇上化学：“不可能”变为“可能”

AI世界

◎本报记者 张佳星

8天完成688次化学实验，7天研究1000种催化配方……人类夜以继日多年才能完成的工作，人工智能(AI)在短时间内就能完成。

“AI从一个研究领域变成了一类赋能技术。”在12月9日至10日召开的香山科学会议第768次学术讨论会上，中国科学院院士白春礼说，在化学领域，得益于AI的应用，化学反应预测与新化学物质发现、化学试验的自动化与智能化等方面均取得了显著突破。

AI将如何改变化学研究？如何进一步推进AI与化学的深度融合？这些问题引发与会专家学者热议。

2个月内完成
2000年的工作

AI让枯燥、危险、重复的化学实验来了个“大变身”：机器人自动操作化学合成平台，甚至具备观察、分析实验结果的能力。

中国科学技术大学研发的机器人化学家系统“小米”，可以完成文献读取、合成、表征、性能测试、机器学习模型建立和优化等全流程任务。中国科学技术大学教授罗毅介绍，通过运用“小米”系统，团队加速了新材料的发现过程，2个月内就完成了需要验证2000年才能完成的复杂优化工作，利用火星陨石制备出实用的产氧电催化剂。

面向“远方”，AI能帮助人类探索出一条在地球外星系就地取材研制化学品的新路；聚焦“眼前”，有研究单位仅用一年时间，便利用高精度的预训练模型，从6000万个有机小分子的结构中筛选出符合冷却液不同性质和要求的目标分子，并成功完成这些分子的合成及实际产品的测试工作。

“科学研究的基本工具来自理论、实验和科学文献三方面。受工具的限制，过去的化学研究采取依赖经验和不断试错的方法，组织形式也往往是

作坊模式。”中国科学院院士鄂维南说，AI将助力打造有效的理论、实验和文献工具平台，使科学研究迈向平台化模式。

中国科学院院士张锦也认为，利用AI、大数据、虚拟现实等工具，人类能够扩展思维，提升理解力，不断突破认知边界。通过构建覆盖研发全流程的一系列智能体来弥补短板，可以让科学家有工程思维、工程师有产品思维，打破实验室研究与产业化要求难以匹配的困境。

高效表达复杂
微观世界

微观层面，AI在化学研究中的优势进一步显现。电子自旋、电荷密度、分子势能等与化学性质息息相关的参数，都变得可预测、可求解。

阿尔法折叠3这种模型为什么能准确预测蛋白质、DNA、RNA、配体等生命分子的结构及相互作用？白春礼介绍，它通过分析大量的输入和输出数据寻找规律，掌握分子间相互作用的力、角度等参数，再模拟出现实情况，预测可能的情况。

从读懂现象到摸清规律，再到高效表达复杂的微观世界，AI在化学领域让“不可能”的探索成为“可能”。

“在化学动力学理论研究方面，AI展现了巨大潜力。”中国科学院院士张东辉说，化学理论中的分子体系势能面构造存在“指数墙”困难，即计算量会随分子体系中原子个数增长而呈指数级增长。AI神经网络能高效表达复杂的高维函数，解决了这个难题。借助AI，团队解决了包含十几个原子的分子体系高精度势能面构造问题。

张东辉介绍，近年来，神经网络在求解电子运动薛定谔方程的基态波函数方面也取得了重要进展。在不存在费米共振的情况下，团队仅使用15000个参数，就能精确求解丙烷分子(包含11个原子)的振动能量。而这在此前被认为是难以求解的。

针对求解多电子薛定谔方程这一量子化学领域的核心问题，AI提供的新范



中国科学技术大学一名博士研究生在实验室调试机器人化学家系统“小米”。

新华社记者 张瑞摄

式有望突破计算消耗随体系扩大呈指数级增长的瓶颈。中国科学院院士杨金龙介绍，基于生成式AI的“乾坤网络”(QiankunNet)可实现多电子薛定谔方程的直接求解。“化整为零、分而治之”的策略，使较复杂材料体系的计算从“不可能”逐步走向“可能”和“精准”。

模型建构需
“垂直发力”

“化学是唯一能够获得稳定新物质的科学。”白春礼说，AI将为发现更多前所未有的反应类型与合成方法带来无限可能。

然而，要承担起“从0到1”的创新任务，AI仍面临巨大挑战。

一方面是化学数据的质量与可用性问题。“化学研究数据类型复杂且高度多样化，涵盖分子表征、光谱图像、实验记录等多模态数据。”中国科学院自动化研究所所长徐波解释，现有模型往往难以高效表征、难以整合不同模态数据里的信息。化学研究还需AI具备更高阶的推

理能力，以完成化学反应预测、分子逆向设计、多步合成路径规划等任务。

另一方面是AI化学知识储备问题。现有算法多为“黑箱式”模型，融入的化学知识不够。换句话说，要拿下“化学博士学位”，AI还需“垂直发力”。徐波说，当前许多AI系统主要依赖数据驱动的方法，与不同领域知识结合程度不足。为解决这个问题，AI领域学者与化学学者正在进行跨领域合作，为化学领域开发专用算法和模型，发展各类科学化学语言表征等基本能力，以构建更强大的模型。

中国科学院院士、南京大学党委书记谭铁牛认为，应在基座大模型的基础上，着力建构以知识和数据双驱动的多任务多目标垂直模型。

白春礼也认为，加快AI和自动化实验的深度融合，亟需构建高质量、开放共享的化学基础数据库，并考虑数据安全等因素。他建议，应建立自主可控、开放共享的基础大模型，开发针对化学复杂问题的专用AI算法等，进一步加强学科交叉并重视AI化学领域的人才培养，加快建设AI化学生态平台。

专家学者盘点近两年AI发展——

加速应用落地 变革科研范式

◎本报记者 陆成宽

当前人工智能技术和产业有哪些热点？我国人工智能产业发展呈现怎样的特点？12月12日举行的中国科学院人工智能产学研创新联盟2024年会，为这些问题提供了答案。

本次年会以“人工智能助力科研范式变革(AI for Science)”为主题，旨在推动我国人工智能产学研多方合作及技术成果孵化落地。会上，《人工智能前沿研究与产业发展报告2024》(以下简称《报告》)发布。

《报告》系统分析了全球人工智能发展态势：2023—2024年，语言模型不断创新，生成式人工智能基座进一步发展；多

模态支持大模型适应更多需求，快速实现商业化进程；人形机器人市场规模快速增长，人工智能加速融入真实物理场景；人工智能实现全方位商业化应用，加速汽车行业产业链革新；人工智能芯片市场爆发式增长，向大算力、大集群、低功耗发展。

根据牛津大学技术与管理发展研究中心主任傅晓岚视频发布的《AI初创企业价值创造白皮书》，全球人工智能初创头部企业分布形成了以中国北京和美国加利福尼亚州为核心的双中心格局，行业主要集中在人工智能大模型开发、自动驾驶、智能机器人制造、医疗人工智能等领域。

谈及我国人工智能发展，中国科学院科技战略咨询研究院原副院长、中国

科学院人工智能产学研创新联盟秘书长张凤说，2023—2024年，我国在人工智能领域持续发力，从顶层规划到技术创新、从场景应用到产业融合、从标准体系到风险治理，一系列政策密集出台，为我国人工智能技术和产业发展提供了有力支持。“我国生成式人工智能市场活力迸发，大模型厂商多维度竞争加剧；同时，智能道路与自动驾驶并行推动智能驾驶快速发展，人工智能与制造业深度融合，智能工厂成为全球标杆。”张凤说。

会上，人工智能如何助力科学研究成为专家热议的话题。中国科学院科技战略咨询研究院院长潘峰在视频致辞中说，人工智能正以前所未有的速度渗透到科研的每一个环节，深刻改变着科研的思维方式和模式，以及科学认

知的速度、深度、广度和精度。它将重塑科研组织模式，带来科研管理各环节深层次的变革。

“人工智能持续赋能千行百业。在科研领域，人工智能技术应用也加速落地。”科大讯飞股份有限公司高级副总裁胡国平介绍，科大讯飞正与中国科学技术大学等高等院校共同开展“AI+生物科技”“AI+科学装置”的交叉科研攻关。

“人工智能为研究复杂系统提供了新科研范式。作为从数据到应用的桥梁，人工智能可以很大程度上解决传统研究手段面临的难题。”中国科学技术大学教授刘海燕介绍，他在团队将人工智能应用于蛋白质预测和设计问题上，已成功设计了48个自然界不存在的全新蛋白质。

数智技术赋能南水北调工程

◎实习记者 于紫月

从上古的大禹、春秋的孙叔敖，到宋代的苏轼、元代的郭守敬，再到新中国的无数水利人，自古以来人们治水以安邦，从泥浆中挖出了一个沟通南北、联通东西的水系网络。如今，在大数据、人工智能、数字孪生等技术加持下，我国水网建设更加智能化。

近日，在第二届国家水网及南水北调高质量发展论坛“数字孪生与国家水网智能化发展”平行论坛上，水利部南水北调司副司长王勇表示，为加快推进水利智慧发展，水利部明确将数字孪生水网列为推动水利高质量发展六条路径之一，系统构建数字孪生水网、数字孪生水网、数字孪生工程的数字孪生水网框架体系。

数字孪生水网北调初建成

我国南方水多、洪涝多发，北方水

少、干旱频发。如果能从南方“借”一些多余的水给北方，有利于缓解北方的水资源短缺问题——这是我国推进南水北调工程的核心。

南水北调工程是国家水网的主骨架、大动脉，南水北调东线、中线和西线工程沟通黄河、淮河、海河、长江四大流域，将构建起“四横三纵、南北调配、东西互济”的水资源配置格局。目前中线后续引江补汉工程进展顺利，东线后续工程、西线工程前期工作正在抓紧推进。

今年是南水北调东线一期工程全面通水10周年。中国南水北调集团有限公司党组书记、董事长汪安南在论坛上介绍，通水10年来，南水北调东线一期工程向北方累计调水超760亿立方米，直接受益人口超1.85亿人。

这离不开数字孪生的保驾护航。王勇说，数字孪生水网北调已初步建成并投入运用，并取得显著成效。

以数字孪生水网北调中线1.0为例，

通过多模态数据汇集、多业务专业模型协同、多芯融合算力平台建设等，数字孪生水网北调中线1.0实现了冰情预测预报模型和冰期输水业务应用。它能科学预测未来3天、5天、7天、10天、15天各渠段位置的水温、冰情，可以在水温、岸冰、流冰、冰盖达到临界值时及时预警，针对冰情生成相应预案。它还能优化调度方案，大幅提升中线工程冬季输水能力。

水利工程建设更智能高效

在部分水利工程建设中，建设隧道与地下工程是重要一环，而复杂地质条件往往会带来重大安全风险。数智技术有望实现对隧道不良地质灾害源的准确预报与灾害防控。

中国工程院院士、山东大学校长李术才打了一个形象的比方：要想知道病灶在哪里，就得给病人拍X光片、拍CT。在数字技术的加持下，给隧道“拍CT”成为可能。多年来，他带领团队给

隧道“拍CT”，实现对突水突泥等灾害的预报和分析，为后续施工规划的调整和决策提供帮助。团队还研发出预报结果指引的施工智能决策系统，可实现超前地质预报数值模拟、隧道掘进数字孪生与智能决策等。

李术才以全断面硬岩隧道掘进机智能掘进为例，介绍了团队在杭州市第二水源输水通道工程中开展的工程验证。通过应用智能决策系统，与相同地质条件下采用人工决策掘进的方法相比，掘进速度提升约10%，总成本降低约10%。

另一个案例来自中国科学院自动化研究所研究员王军平团队。他们研发的水网基础设施主动预警系统，提出水网全流域水利工程数字孪生体系构建路径，可实现对复杂水利设施高精度精准掌控，有效应对极端天气和重大自然灾害。

王军平告诉记者，未来人工智能如何与水利工程深度融合，还需要花大精力、下真功夫、用长时间去解答。

数出一源 全域共享

——探访广东石化智能工厂

◎本报记者 龙跃梅
通讯员 赵凤莉

日前，中国石油广东石化公司(以下简称“广东石化”)智能工厂通过国家智能制造能力成熟度四级评估，这是目前国内制造企业所能达到的最高等级认证。

科技日报记者近日在广东石化采访时了解到，依托全域数据共享与智能化模型，广东石化构建了数字化调度指挥、智能物料平衡等一系列数智化应用场景，实现了数据串联、点对点、全域共享，为企业智能化运营注入强大动力。

打通“数据孤岛”

炼化企业具有流程连续性强、装置关联度高、数据流转关系复杂等特点，普遍面临“数据孤岛”问题。作为一家2023年全面投产的炼化企业，广东石化同步推进智能工厂与工程项目建设。通过采用云原生技术，广东石化创新实现了新一代MES(炼油与化工运行系统)、企业生产指挥平台、数字孪生工厂等智能化应用，以及全业务域数据深度集成与共享，建成中国石油炼化企业首家采用工业互联网技术构建的云原生智能工厂。

广东石化采用的数据中台在打通“数据孤岛”方面发挥了重要作用。数据中台基于工业互联网平台微服务体系架构和企业综合数据库打造，可为智能工厂提供统一数据服务。

记者在广东石化数据中心看到，系统运维人员陈锴斯正在运用数据中台进行巡检。只见他迅速打开采集管理选项，进入任务调度栏，几秒钟就完成了数据采集。通过“零代码、可视化、向导式”的配置界面，陈锴斯用4步操作展示了如何“秒开”新数据源共享服务。

数据共享是数据中台的一大特色。“其最大作用，就是为跨域跨业务数据交互提供统一的‘语言’。”陈锴斯说，一旦数据处理完毕，就会传送到数据目录存档，需求部门可以直接在数据中台拉取有效数据。

广东石化信息工程高级专家陈运庆介绍，广东石化采用数据源治理新模式开展全域数据治理，使

用数据中台覆盖各业务领域的数据共享需求，做到了“数出一源、全域共享”，从顶层架构和业务系统设计源头上避免“数据孤岛”现象。

确保运营安全

广东石化智能工厂追求的不仅是高效管理，更是安全运营。广东石化规划和科技信息部智能管理高级主管吕斌介绍，炼化企业在生产运行时容不得一丝差错，在不改变原有装置的情况下，运用数字孪生技术和机理建模方法，可以“克隆”出与现实工厂相对应的虚拟工厂。利用虚拟工厂，可以对生产过程进行模拟优化，从而使决策更加精准高效，实现实际生产运营的优化与提升。

广东石化数字孪生工厂集成全厂17000个关键生产工艺指标数据，并接入1815路重点区域视频，可在三维场景中快速定位、直观展示厂内生产情况和现场情况。当工厂出现异常状况时，数字孪生工厂能够迅速定位设备并提供相关信息，支持故障快速处理。

目前，数字孪生工厂已向诊断、预测、自适应阶段升级。例如，进行动土作业前，施工人员可以通过数字孪生工厂模拟开挖过程，快速查看地下管线和电缆布局，避免出现挖断电缆和误伤管线等问题。数字孪生工厂还具有断面分析功能，可以快速识别管线泄漏介质及周边高风险介质管线分布情况，为及时应对、减少风险提供有力支持。

盲板是一种重要的工业元件，它用于封堵管道或设备端口，在防止物料泄漏和事故发生方面发挥着重要作用。盲板管理是数字孪生工厂的一个重要应用场景。通过盲板台账线上管理，工作人员可以摸清“家底”，清晰掌握盲板的数量和状态，保障装置安全投料试车。

广东石化化工一部副经理王宏全介绍，过去，工人需要现场手填盲板信息，不仅费时，还容易出错。随着时间推移，字迹往往会变得模糊不清，难以进行追溯查找。现在，员工可以从三维模型上快速了解现场盲板位置、分布等详细信息。工作人员只需进行一次盲板标注，后续仅需上传和更新盲板台账，即可实现现场与台账一致，有利于提高工作效率和安全管理水平。



广东石化员工正查看乙烯物料平衡图。受访单位供图

全球首款电力智能仿真器

具备投用条件

科技日报(记者叶青)记者12月16日从中国南方电网有限责任公司(以下简称“南方电网”)获悉，该公司“取电”智能仿真大模型日前基于云南电网3500节点数据完成人工智能技术训练，成功实现未来海量电网运行方式的智能生成，并正在实际电网运行中推广试用。这标志着全球首款人工智能电力智能仿真器具备投用条件。

据悉，“取电”大模型是南方电网依托国家自然科学基金联合基金集成项目“新型电力系统背景下的大电网异步分区规划与控制研究”，联合华南理工大学、武汉大学、华为，以产学研合作方式研发出的新型电力系统智能仿真计算工具。

随着新能源大规模并网，电力系统规划和运行面临多种技术挑战。为确保电力系统安全稳定，同时最大限度利用好新能源，对电力

系统进行仿真分析十分重要。但高比例新能源接入增加了电力系统的不确定性，传统仿真工具容纳的场景少、计算速度慢，难以满足需求。

作为电力行业大模型，“取电”大模型在底层算子和训练机制中嵌入电力系统规律，打造电力系统分析与控制的“超强大脑”。与经典仿真方法相比，“取电”大模型在潮流计算和稳定分析方面的速度提升了1000倍，计算误差小于1.5%，可广泛用于电网规划、调度控制和市场出清等重要领域。

南方电网相关负责人表示，下一步，“取电”大模型将陆续在南方地区开展示范应用，检验不同新能源渗透率下系统的安全稳定性，为高比例新能源系统的安全经济运行提供指导，推动新型能源体系和新型电力系统建设。