

【专题研究:人工智能与科研范式革新】

人工智能驱动的 第五科研范式(AI4S)变革与观察

孙坦 李白杨 勇素华 左旺孟 杨光磊

【摘要】“人工智能驱动的科学”研究(AI for Science, AI4S)是一场正在发生的科技革命,是将人工智能技术与科学研究深度结合,帮助促进发现新知识、解决科学难题的新型科学研究范式。随着AI4S的研究推进,其发展脉络、机遇和挑战、需求和任务、实现路径等问题值得进一步讨论。为此本刊邀请了7位专家组织了本期笔谈。1)支撑AI4S的知识服务:AI4S对当下的知识服务提出了更高的要求,包括多层次知识发现与获取需求;跨学科研究和创新需求;以用户为中心的参与式服务需求,使得知识服务场景向多元化,智能化,专业化,个性化转变。为此须重新定位AI4S环境中知识服务的新角色,明确其在全面支撑科技创新进程中的新任务,树立大文献观,兼顾普惠与专深,以支撑跨学科创新。2)作为AI4S的知识底座:在AI4S发展中,科技文献作为高价值语料具有重要的价值和作用,为AI4S所需的查询循证、态势感知、推理预测和生成启示等提供支持。为此文献情报机构需要积极推动智慧数据体系建设。构建科技文献知识AI引擎,攻关文献内容的深度挖掘和智能分析关键技术,推进与各领域科研单位、头部AI企业的合作,充分发挥信息资源管理学科的创新价值作用。3)驱动AI4S的科学数据:科学数据有效聚合为发挥AI4S的强大功能奠定了数据基础,是图书馆实现AI时代角色与功能变革的前提,是推动科研服务转型、深化科研支持、加速科技创新的必要条件。目前图书馆有效聚合科学数据为AI4S提供支撑仍面临宏观和中观上的诸多挑战,应对该挑战有以下实现路径:明确图书馆在科学数据管理中的角色与作用;营造科学数据管理环境;构建科学数据管理合作网络;提升科学数据管理服务能力。4)AI4S与古典文献智能语言模型:AI4S技术能够用于文献和文本的分析,更快速、更全面地理解大量的历史文献和文化资料。古典文献智能语言模型是人工智能技术在古籍文献研究领域的一项重要突破,为古典文献研究带来了新的机遇和挑战。随着多模态、生成式GPT模型的流行,AI4S情境下古典文献智能语言模型将更加注重整合多样信息、提高适应性、增强知识表示和服务于更广泛的应用场景。5)面向AI4S的图书馆数字学术服务:基于LLM的AI4S和AIGC推动智慧图书馆建设的理念不谋而合,给图书馆数字学术服务带来了机遇和挑战。基于AI4S平台化趋势与数字学术服务中台化特征适配,以及图书馆界长期服务科研工作的历史传统两大特点,其数字学术服务平台的再造路径,包括自主打造AI4S服务平台、购买和使用第三方的AI4S平台和作为科学智能组件的嵌入式知识服务再升级3种。6)AI4S的历史演化与逻辑结构:AI4S是人工智能技术充分应用到各学科领域主导的科学范式变革,其逻辑架构包括“数据+模型”驱动、通过机器猜想打造知识生态和通过算法思维延展应用场景。数智文明时代中,AI4S驱动科学进步与社会发展需要发扬科技向善价值观,有效选择AI4S延展应用到社会科学和人文科学领域的理论论证与方案,并完善人类决策与机器智能融合共建的系列机制。7)AI4S的发展机遇与展望:随着生成式人工智能的发展,预训练算法和预训练大模型为不同学科领域的AI4S带来了巨大机遇,在工业检测、机器人技术和医学等多个领域表现出了巨大的应用潜力和价值。此外,预训练大模型的技术实施条件局限、数据/计算资源的可持续发展、技术的透明性、公正性和可访问性等关键因素也值得重视。

【关键词】AI4S;智能知识服务;科技文献;知识底座;科学数据聚合;图书馆数字学术服务;古典文献智能语言模型

支撑AI4S的智能知识服务:需求、趋势与任务

孙坦

【作者简介】孙坦(通信作者)(1970-),男,博士,研究馆员(二级),博士生导师,中国农业科学院(北京100081);农业农村部农业大数据重点实验室(北京100125),研究方向为数字信息描述与组织,E-mail:suntan@caas.cn。

【原文出处】《农业图书情报学报》(京),2023.10.4~9

【基金项目】国家社会科学基金“融合多种知识组织体系的认知搜索模式研究”(20BTQ014)。

“人工智能驱动的科学”研究(AI for Science, AI4S)是以“机器学习为代表的人工智能技术”与“科学研究”深度融合的产物,模型+数据的驱动、融合范式使其具备突破科学研究“维度灾难”(Curse of Dimensionality)的巨大潜能,一跃成为全球人工智能新前沿,给自然科学研究带来颠覆式变革性影响。从政府到产业,从业界到学界,从通用到领域,AI4S研究与应用不断涌现,其推进水平或将成为各国各机构在下一轮科技革命中走在前沿的竞争高地。也为科技文献知识服务领域带来了新机遇,提出了新需求和新任务。

1 AI4S赋能科研第五范式

算法、算力、数据的融合发展使得人工智能在自然语言处理、计算机视觉、内容生成等领域的研究成果累累。2022年底ChatGPT的横空出世,大语言模型(Large Language Model, LLM)在以深度学习为重要模型的人工智能及相关领域变得炙手可热,无疑为AI4S再添新的助力,加速科研范式的变革和科研模式的重构。

1.1 国际重大战略决策

AI4S势必引领新一轮科技革命,世界各国抓住技术变革机遇,强力推动战略政策发行与科研基础设施建设。

美国能源部DOE联合多个国家实验室针对能源和安全领域推进AI4S设施建设;美国国家超级计算应用中心面向科研人员提供AI4S实践培训;欧洲空间局、英国宇航署、美国国家航空航天局等联合资

助创立牛津AI4S实验室^[1];澳大利亚联邦科学与工业研究组织CSIRO追踪发布科学智能技术战略报告^[2];我国2023年科技部会同自然科学基金委启动“人工智能驱动的科学”专项部署工作^[3],同时加快推动公共算力开放创新平台建设,为AI4S发展打造智能算力基座。科技创新2030——“新一代人工智能”重大项目也将AI4S作为人工智能的重要发展方向,部署“重大科学问题研究的AI范式”任务。

业界及学界也纷纷开展相关研发,在AI4S领域竞争日趋激烈。微软研究院集成机器学习、计算物理、计算化学、分子生物学、软件工程等学科领域世界级专家创立科学智能中心;哈佛大学针对治疗科学研究科学智能模型^[4];巴黎文理研究大学依托地平线2020计划推出AI4S博士项目;加州理工学院发布AI4S倡议等;国内华为开展计算化学、AI辅助的药物研发、基因组序分析;百度推出PaddleScience基础软件等。

1.2 AI4S正成为一种科研模式新常态

当前人工智能的快速发展给传统机器学习长期存在的问题带来解决方案,并一定程度上填补了历史上限制人工智能发展的知识空白。人工智能开始通过改进、加速和使我们在广泛的空间和时间尺度上对自然现象的理解来推进自然科学研究^[5]。此种技术背景下针对特定或细分领域的AI4S研究应用蓬勃发展,催生大量的AI模型、基础软件和应用,如生命科学领域DeepMind的AlphaFold蛋白质折叠预测系统、化学领域通过模拟发现可用于可再生能源存储新催化剂的Open Catalyst、材料科学的三维分子预训练模型Uni-Mol、偏微分方程的神经算子DeepONet模型等。

随着LLM掀起的科研热潮,大量通用模型加速涌现、迭代,如OpenAI的GPT-4^[6]、谷歌的PaLM2^[7]、Anthropic的Claude^[8]、Meta的LLaMA^[9]、智谱AI的ChatGLM 6b、百度的Ernie 3.0 titan^[10]、华为的PanGuAlpha^[8]等,进一步推进人工智能技术在药物发现、计算化学、材料设计等更为复杂的细分专题上的应用。

2 科学智能环境下的知识服务

2.1 重新解读知识服务新需求

2022年我国科技部等六部门联合印发《关于加

快场景创新以人工智能高水平应用促进经济高质量发展的指导意见》,指出要积极推动人工智能技术成为解决数学、化学、地学、材料、生物和空间科学等领域的重大科学问题的新范式,充分发挥人工智能技术在文献数据获取、实验预测、结果分析等方面作用,融合人工智能模型算法和领域数据知识,实现重大科学问题和发现的研究突破^[11]。人工智能、知识环境、科研模式、学科融合等迅猛发展,科研人员知识素养与能力与日提升,对知识服务提出新的需求。

(1)多层次知识发现与获取需求。如果把文献的检索和获取当作知识发现的起点,那么在大数据、机器学习等技术的加持下,知识发现几经变迁与升级,从关键词到自然语言的查询,从相关列表到答案的结果生成。有赖于关联数据、知识图谱、知识推理等知识表示与计算技术的发展,科技文献、科学数据、概念术语、软件工具等资源逐渐走向可计算可关联,科研人员对知识挖掘分析、可视化、智能决策需求愈加旺盛。长远来看,AI4S下的知识服务需要能辅助科研人员发现新的科学原理,探索研究中的空白、转折以及可能性等。

(2)跨学科研究和创新需求。我们正从作坊式科研模式向开放协作的平台模式过渡转型,人工智能技术在各个科学领域的深入应用极大促进了学科交叉与融合,多学科、跨学科、超学科、融合科研、转换性科研等蓬勃发展,单一、孤立学科的知识服务远不能满足跨学科科研人员的研究和创新需求。新的知识环境需要融合的、关联的、可推理的知识内容。

(3)以“用户为中心”的参与式服务需求。传统观点习惯将科研人员仅当作知识服务客体,从科研活动流程的角度来看科研人员 and 知识发现过程的关系,后者是整个科研流程中必不可少的一环。随着参与式文化的发展,科研人员对图书馆等专业信息机构的期望或者需求发生根本性变化,从而引发了知识服务理论体系上的思维革命,形成“以用户为中心”“专家智慧+人工智能”的协作模式,甚至在基于LLM的服务场景中出现提示词AI指令工程师职业。

2.2 知识服务多元化、智能化转变

为应对科研人员多层次、跨学科、协作式的知识发现与获取需求,各信息机构、图书馆、出版商、研究

团队等纷纷推出竞争类知识产品及模式,知识服务场景逐渐走向多元化、复杂化、深层次、专业化、个性化。

(1)泛在知识发现。以谷歌搜索引擎、Semantic Scholar等为代表的智能或语义检索已成为知识发现常态,基于引用关系、主题分类、学者合作关系等挖掘分析的文献检索系统及可视化工具不断涌现,如基于原始论文生成文献关系图谱的Connected Papers、围绕关键词生成出版物地图的Open Knowledge Maps、依托论文集合实现精准推荐的Research Rabbit等。它们的特点在于提供与检索对象相关的知识或资源(如论文、研究数据、软件工具等)对象的揭示与关联发现。

(2)生成式内容服务。自动综述/摘要的研究超半个世纪,已经开展基于文献的综述自动生成实践,如法兰克福大学应用计算语言学(ACoLi)实验室研发算法Beta Writer生成的《锂离子电池:机器生成的最新研究综述》,受限于自然语言处理技术水平,效果不尽如人意。LLM的出现及其在自然语言理解和生成方面的优势给生成式内容带来新的生机,衍生出ChatGPT Writer、Writey A.I等写作助手应用及Paraphrase Tool、CONTENT.com等内容生成软件,综合性知识发现系统SciSpace可基于自然语言检索结果自动生成答案并标明出处。

(3)多轮交互服务探索。基于多模态可计算内容,结合文本分析、机器翻译等方法,实现针对单篇/批量文献的核心要素(总结、摘要、方法、知识点、局限性等)、图表、公式等的多轮智能问答,辅助科研论文阅读理解,如ChatGPT、ChatDoc、Zotero GPT等,这类服务的技术共性大多是基于OpenAI GPT或其他大语言模型。

3 知识服务新任务

AI4S战略及现实意义深远,必然会给自然科学带来变革性影响。2024新年伊始,国家数据局等17部门联合发布的《“数据要素×”三年行动计划(2024—2026年)》强调要面向基础学科提供高质量科学数据资源与知识服务,驱动科学创新发现;深入挖掘各类科学数据和科技文献,通过细粒度知识抽取和多来源知识融合,构建科学知识资源底座,建设高质量语料库和基础科学数据集,支持开展人工智能大模型

开发和训练。探索科研新范式,充分依托各类数据库与知识库,推进跨学科、跨领域协同创新,以数据驱动发现新规律,创造新知识,加速科学研究范式变革。为此,专业科技信息机构需要重新审视 AI4S 环境中知识服务及其在全面支撑科技创新进程中的重要角色与新的任务。

3.1 树立大文献观,深挖全文知识要素

科技文献全文蕴含丰富的知识,可以充分挖掘全文内容,向全文“要”知识,集聚人工智能场景数据资源,建设高质量多模态特色语料知识库。加强富知识要素的全文资源、领域特色资源等多源采集汇聚、深度碎片加工、语义知识组织(词表、图谱、专家库、机构库、领域实体库等)、本地长期存储,以及标注训练数据等建设工作,全面提升数据治理与知识组织水平,为人工智能应用提供坚实语料基础,为全面数字化转型提供理论方法、技术工具供给。

3.2 兼顾普惠与专深,自主打造核心产品

中国科技人员文献需求仍旧非常旺盛,亟须缓解高质量产品的需求与不平衡不充分的知识服务供给之间的矛盾,实现科技文献知识的“共同富裕”,实现科技文献基础性保障服务平台自主可控,助力科技强国建设。研发语义智能检索与泛在发现获取平台及大模型驱动的专业领域通用知识发现系统,构建问题和场景驱动的新型知识发现工具体系,深度集成应用深度学习、大语言模型等人工智能技术,研发人机对话式专题知识发现服务工具,如问答式检索、生成式综述等。

3.3 与专业领域深度握手,支撑跨学科创新

为了适应跨学科研究范式发展,需要建设“跨学科数据+AI驱动”的知识密集型数字科研计算平台。重点围绕我国在生物育种研发、基因研究、新材料研发等领域的战略部署,以需求为导向谋划人工智能技术应用场景,深度融合人工智能模型算法和领域数据知识,为重大科学问题和发现的研究突破提供助力,开辟新领域、新赛道,塑造新动能、新优势。

参考文献:

[1]Oxford AI4Science lab[EB/OL].[2023-08-12]. <https://oxai4science.github.io/>.

[2]HAJKOWICZ S, NAUGHTIN C, SANDERSON C, et al. Artificial intelligence for science—Adoption trends and future development pathways[C]. Brisbane, Australia: CSIRO Data61, 2022.

[3]中共中央办公厅,国务院办公厅.科技部启动“人工智能驱动的科学”专项部署工作[N].新华社,2023-03-27(1).

[4]Artificial intelligence for medicine and science[EB/OL].[2023-08-12]. <https://zitniklab.hms.harvard.edu/>.

[5]ZHANG X, WANG L M, HELWIG J, et al. Artificial intelligence for science in quantum, atomistic, and continuum systems[J/OL]. arXiv: 2307.08423,2023.

[6]OpenAI. Gpt-4 technical report[J/OL]. arXiv preprint arXiv: 2303.08774,2023.

[7]ROHAN A, ANDREW M D, ORHAN F, et al. Palm 2 technical report[J/OL]. arXiv preprint atXiv: 2305.10403,2023.

[8]ZENG W, REN X Z, SU T, et al. PanGu- α : Large-scale autoregressive pretrained Chinese language models with auto-parallel computation[J/OL]. arXiv: 2104.12369,2021.

[9]HUGO T, LOUIS M, KEVIN S, et al. Llama 2: Open foundation and fine-tuned chat models[J/OL]. arXiv preprint arXiv: 2307.09288,2023.

[10]WANG S H, SUN Y, XLANG Y, et al. ERNIE 3.0 titan: Exploring larger-scale knowledge enhanced pre-training for language understanding and generation[J/OL]. arXiv:2112.12731, 2021.

[11]科技部等六部门关于印发《关于加快场景创新以人工智能高水平应用促进经济高质量发展的指导意见》的通知[EB/OL].[2023-08-30]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/2022-08/12/content_5705154.htm.

AI4S背景下的图书馆数字学术服务创新发展

李白杨

【作者简介】李白杨(通信作者),博士,助理教授,研究员,南京大学数据智能与交叉创新实验室,研究方向为数据智能、数字素养、图书馆服务,E-mail: libaiyang@nju.edu.cn(南京 210024)。

【原文出处】《农业图书情报学报》(京),2023.10. 19~21

作为知识保存和交流的主要机构,图书馆一直与人类社会发展态势相适应。从古代藏书楼到现代

图书馆,再到如今智慧图书馆,图书馆界和图书馆人一直在追求资源建设、技术应用、空间优化和服务升级。正如印度著名图书馆学家阮纳纳赞所言,“图书馆是生长着的有机体”,在数智时代图书馆与人文、科技融合共生已成为大趋势。

近年来,以大语言模型(Large Language Model, LLM)为代表的生成式人工智能(Generative Artificial Intelligence, GAI)快速发展, AI赋能科学研究已成为现实。2021-2023年,多篇基于AI的科学发现相继发表在国际顶级期刊,涉及生命科学、材料学、气象学、天文学等多个学科,这表明AI在科学研究中已具备了泛化能力, AI for Science(AI4S)时代宣告到来。2023年,谷歌旗下的DeepMind在*Nature*发表研究论文^[1],展示了其开发的名为GNoME的科学模型发现了220万个新材料晶体结构,比传统材料开发方法的速度和准确度都大幅度提升。

面对AI科研工具、模型、方法的不断涌现,科学研究对AI服务需求不断上升。而作为知识存储、组织、查找、整合和推送的中介,图书馆应如何适应AI技术环境变革知识服务成为不可回避的问题。

1 国际视野下的研究与实践进展

自国际图书馆界提出数字学术服务(Digital Scholarship Service, DSS)理念以来,世界一流大学图书馆纷纷探索如何通过设立DSS中心提供高质量服务,包括美国常春藤联盟高校和英国G5大学联盟的图书馆都设置了DSS专门服务或机构,例如哈佛大学图书馆数字学术项目(Harvard Library's Distal Scholarship Program)、宾夕法尼亚大学图书馆的数字学术服务专门部门、剑桥大学的数字支持研究系列等。随着资源与服务的拓展,我国高校图书馆也探索开展DSS,如东南大学图书馆的数字学术中心,上海外国语大学图书馆的数字学术服务平台,温州肯恩大学的数字学术中心等。

2020年,国际图联(International Federation of Library Associations and Institutions, IFLA)发布“图书馆与人工智能宣言”,同时成立了人工智能小组,这标志着AI成为图书馆业务重要的探索内容。2023年11月,国际图联杂志(IFLA Journal)发布题为“人工智能:全球图书馆管理变革”特刊征稿,专门讨论生

成式人工智能和多模态人机交互等新技术对图书馆服务带来的影响。AI4S兴起后,高校图书馆在DSS建设中开始思考如何将AI引入服务内容和流程。2023年7月,中科院文献情报中心举办“第四届研究型图书馆数字学术服务研讨会”,对于AI技术重塑、颠覆、革新图书馆服务进行了广泛和深入讨论。2023年9月,中国图书馆年会的“数字学术服务与未来图书馆”主题论坛在郑州召开,共同聚焦图书馆数字化、智能化服务的前沿进展,探讨了数据驱动、LLM、AIGC等不同视角下DSS的发展趋势。

事实上,基于LLM的AI4S和AIGC与智慧图书馆建设理念不谋而合。上海图书馆和人海人工智能研究院等部门发布的《智慧图书馆大模型创新与应用白皮书》指出,大模型对于智慧图书馆的赋能主要表现在场景创新、落地实践、生态建设三大方面。2023年10月,在上海举办的“第十六届图书馆管理与服务创新论坛”将“AIGC技术赋能图书馆服务深层次变革”和“AI4S科研范式对高校图书馆的影响”作为两大分主题论坛,表明国内高校图书馆界已开始广泛讨论如何适应AI4S的新技术、新环境、新需求。

2 AI4S背景下我国图书馆的机遇与挑战

(1)AI4S平台化趋势与数字学术服务中台化特征具有适配性。科学研究范式发展大体上包括观察与实验、理论研究、仿真模拟、大数据分析、智能科学(AI4S)5个阶段, AI4S的主要特点就是在智能平台完成科学研究的部署、实验、分析、验证等流程。从资源层面来看,包括统一元数据的保存、组织、策展等;从算力层面来看,包括本地、云、边缘计算等算力供给方案;从模型算法来看,包括自研、开源、通用框架等使用;从过程模拟来看,包括实验表征方法、数字孪生、虚实融合等。AI4S呈现出算力、模型、数据、工具、平台等模块组配的特征。而数字学术服务本身就包括资源、工具、空间、平台等服务供给组配,其灵活性与AI4S具有相当匹配度。

(2)图书馆界具备长期服务科研工作的历史传统。从参考咨询到学科馆员、从知识服务到数字学

术服务,图书馆总是千方百计地通过数据、工具、空间、系统等各种要素的优化提供更高水平的科研辅助服务。在生成式人工智能流行后,许多高校图书馆已率先开展AIGC工具辅助科研教学和智能环境下的数字素养培训工作,图书馆提供的“AIGC+科研”服务已成为图书馆参与AI4S的重要基础。此外,随着研究型图书馆高层次人才队伍扩大、师资力量增强,能够产生一批极富专业素质与AI技能的新型馆员参与到数字学术服务中。

(3)图书馆深入开展AI4S仍存在现实困境。首先,图书馆受制于有限的财力、人力、资源,困扰着数字学术服务开展,这也是国内外图书馆学术服务发展差距的主要因素。其次,图书馆数字学术服务与科研用户的真实需求仍有差距,图书馆团队融合科研团队较为困难。再次,许多图书馆对数字学术服务的认知不足,较难理清其与学科服务、知识服务的差别,这阻碍了真正数字学术服务的落地和实施。最后,当前AI技术发展速度过快,在某种程度上图书馆员完全适应技术、工具、资源的更新速度存在现实难度。

3 AI4S背景下图书馆数字学术服务的破局与发展

首先,图书馆面向AI4S的数字学术服务应分层推进、循序渐进。在资源、技术、人力总体有限情况下,图书馆要立足本馆资源禀赋,通过拆解数字学术服务链由易到难逐步推进。例如,可以率先开展与AI4S有关的讲座、提示工程培训、科技查新、文献定制等服务;在此基础上,尝试通过购买较低成本的AI算力单机,作为开放的AI4S创新创业公用平台,也可以提供数据代管、工具提供等进一步支持。在有充足的项目、技术、人才支持下,可以探索使用开源模型开发面向特定领域的AI工具。

其次,重视AI4S环境下的用户需求。从2023年起,关于通用人工智能、大语言模型、生成式人工智能等相关研究开始在各领域出现,这表明具备泛化能力的AI模型可以支撑不同学科的研究工作,也就是说AI4S的用户广泛、需求旺盛。因此,图书馆更要采用多种方法准确地对用户需求进行摸底、感知、调研,例如对AI工具查找和使用、技术培训、组队开发、

测试等分层、多样的需求。

再次,知识组织与服务是图书馆切入AI4S的关键点。包括微粒度量化的语义组织、通过元数据和主题同表控制提供词效果、基于语义向量空间的多维度数据分析与展现,向量数据库的购买与使用支撑等。

4 数字学术服务平台如何再造

上文提到,AI4S对数字学术服务即使难得的发展机遇,却又充满挑战。总体上,主要有3种路径。

(1)重塑数字学术资源与服务,打造AI4S服务平台。这对图书馆的资源汇聚和服务开展能力要求较高,需要重新对科学数据、馆藏资源、人力资源、系统平台、服务能力等进行重构和整合,通过项目驱动、资金驱动、技术驱动、平台驱动等多股动力协同创新,打造图书馆服务AI4S样本项目。有的领域图书馆已有前期基础,例如多模态古籍挖掘、医学信息智能挖掘与分析等。

(2)购买和使用第三方的AI4S平台。系统平台的升级是图书馆智慧力的重要组成部分,如同之前的一站式检索、资源发现、知识导航系统平台,AI时代即将面世大量的科学研究平台,它们通过将馆内外资源的汇聚和整合,嵌入人工智能算法实现科学研究的范式创新。购买和使用第三方平台主要受限于图书馆财政能力,其次是对此类系统平台服务能力的准确评估。

(3)作为科学智能组件的嵌入式知识服务再升级。图书馆有较好的参考咨询、学科服务、知识服务等基础,在实际研究环境中有些AI4S科研团队可能需要图书馆更多地参与文献调研、选题、数据托管等服务,这是后续进行算法模型开发的基础。因此,嵌入AI4S工作流可以视为嵌入式这是服务的再升级,其服务逻辑不变,只是在服务内容、工具、范式上要与AI4S的平台化研发特点相适应。

参考文献:

- [1]MERCHANT A, BATZNER S, SCHOENHOIZ S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. Nature, 2023(624): 80-85.

科学智能范式(AI4S)的历史演化与逻辑结构

勇素华

【作者简介】勇素华(通信作者)(1977-),女,副教授,南京信息工程大学马克思主义学院,江苏省习近平新时代中国特色社会主义思想研究中心南信大基地研究员,研究方向为科技史、高等教育研究,E-mail:2218530445@qq.com(南京 210044)。

【原文出处】《农业图书情报学报》(京),2023.10.22~26

【基金项目】教育部人文社会科学研究一般项目“改革开放以来大陆惠台政策演变及成效研究”(22YJAGAT001);江苏省社会科学基金项目“改革开放以来苏台关系演变研究”(20LSB001);江苏高校哲学社会科学研究项目“涉台‘31条措施’实施绩效论析”(2018SJA0145)。

自17世纪以来,科学发现更像一场持续了四百年的多米诺骨牌效应,人类的巨大潜能突然被触发而接力式地释放出来^[1]。一代又一代的科研工作者秉持着理解和掌握万事万物运作规律的伟大理想,基于不同历史时期中常规科学研究主要依赖的各具特色的理论基础和实践规范,全面探索自然科学、社会科学和人文科学等领域的重大问题。通过从经验范式到数据范式的主导性科学方法的迭代跃迁,积极赋能科学原理释疑活动与科学规律发现过程,多元集成和持续拓展核心知识体系,加速推动科技创新转化为直接生产力,切实改善人类的精神面貌与文化层次,却越来越难以从极速集聚的海量数据资源中凝练基本规律与关键方法。

面对信息文明时代中科研范式的系统性危机与数据成为新生产要素、算力成为新基础能源、算法成为新创造工具的数智社会发展态势,迅速渗透经济生产与居民生活的人工智能大模型展现出解决“维数灾难”的强大潜能。亟待加速科学研究的范式转移,通过大力发展高质量智能工具驱动前沿探索的科学智能范式(AI for Science, AI4S),助力科学共同体采用基本方程数值解充当训练数据并基于智慧算法模型求解高维函数,逐步形成机器猜想赋能知

识生态的全新格局,拓展人类探索世界的新边界,推动生产生活、经济发展和社会治理方式的深刻变革。

1 科学智能范式的历史演化

16~17世纪的科学革命使得人类族群将求知的目光从天国转向人间。“日心说”标志着近代科学的诞生,万有引力与运动三大定律为物理学研究打下坚实基础,质量守恒原理与元素列表开辟化学探索的全新局面等等。数百年来,科学发展中不断突破陈旧科研方法的非积累性事件普遍采用具有时代特色的创新范式取代既存范式,持续推动广泛科学领域的知识体系改造与技术集成应用,实现人类对于客观世界的认知飞跃,充分优化资源配置,促进生产力高质量发展。

1.1 科学范式的词源分析

“范式”(Paradigm)是一个源远流长又纷繁复杂的概念。例如,柏拉图将之描述为相似的特殊对象的形式,具有神性的工匠能够凭借范式模仿理想世界建构近似的可感世界^[2];亚里士多德却在明确反对前述论点的基础上,主张范式是所有事物的基础实体。1962年,托马斯·塞缪尔·库恩(Thomas Samuel Kuhn)在《科学革命的结构》中将科学史概括为穿插着关键性科学革命的漫长常规科学时期。每一个科学发展阶段都存在着获得普遍认可的理论基础与实践规范的主导性科学范式。众多参与者运用公认的模式或模式努力解开当前面临的各种科学谜题,直至无法解释的问题逐步累积到引发范式危机的程度,才会通过全新范式取代旧有范式的激进变革恢复常规状态。现代意义上的科学范式作为科学理论系统的基础和核心,就是一个科学共同体的成员所共有的东西。集合模型至少包括共同信念、共同承诺、共同的基本理论与共有范例等内容,不仅是科学领域内获得最广泛共识的基本原则的整体总和,还是某一科学领域内关于研究对象的基本意向,它可以被用来界定应该研究什么、提出什么问题、如何质疑问题以及按照何种规则解释获得的答案等。

半个多世纪以来,基于有争议的科学史观的范式理论频繁遭遇动态剖析、展示、批判与更迭,却仍然逐步成长为完善科学体系的核心工具。例如,玛格丽特·马斯特曼(Margaret Masterman)系统阐明库恩

对范式的多重定义并分析具体特征;又如,道格拉斯·李·埃克伯格(Douglas Lee Eckberg)和莱斯特·希尔(Lester Hill)主张,范例较少且缺乏解密传统的社会学领域不宜引入范式逻辑^[3]。

1.2 从经验范式到数据范式的动态跃迁

科学研究是通过系统性收集、解释和评估数据而为知识组构做出贡献的探索活动^[4]。从启蒙运动到信息革命,每个历史阶段中基于公认的既存范式展开的包容性释疑实践为发现科学原理与归纳科学方法提供了关键工具,却也在阐述不同事物共性特征的长期探索中日益增加难以通过主导范式指引具象决策的异常事件,进而引发科学范式的动态跃迁。

数千年来,人类族群主要通过形形色色的观察和实验描述和理解客观世界及其背后规律。从《黄帝内经》到盖伦的“尖叫猪实验”,充分展示了从样本到规律的经验范式的重要价值。直至以牛顿定律、开普勒定律和麦克斯韦定律等为代表的建构崭新解释模式并通过逻辑推导和文献综述等验证和丰富内容的理论范式引领新一轮科学发现与技术进步,促进生产力飞速发展。随着计算机科学日渐支撑科技创新和重塑产业价值链,基于仿真建模的计算架构开始担当科学发现的主导范式,在运用有限数据模拟复杂宏观涌现以解决学科难题的同时亦逐渐暴露出无力处理高速发展的计算能力源源不断生成的数据洪流。大数据爆炸性增长的历史背景下,图灵奖得主、关系数据库的鼻祖吉姆·格雷(Jim Gray)在人生最后一次演讲“电子科学——科学方法的革命”中指出:“当前的科学范式是依靠信息设备收集或模拟产生数据、运用计算机存储信息或知识、使用数据管理和统计软件进行分析的数据探索范式”。微软研究团队在此基础上重点探讨了规模数据蓬勃发展的背景下数据密集型范式赋能科学发现的动态跃迁。美国国家标准与技术研究院在《大数据参考框架:定义卷》中明确指出,数据科学是继实验科学范式、理论科学范式和计算科学范式之后的第四科学范式。

1.3 数智时代科学释疑的范式转移

科学本质上是一种解题活动。虽然经验范式(第一范式)、理论范式(第二范式)、计算范式(第三方

式)、数据范式(第四范式)等各具特色的科学范式通过独立或复合指引的释疑活动推动不同阶段的科学研究与技术进步,却难以应对成熟学科的学理探索和实践求解中随着数据维度增加而呈现指数增长的计算代价与激进改变,无力辅助决策主体及时调整科研工具设定和科学探索方向,难以驱动创新资源持续集聚。

随着人工智能成为支撑产业数智转型和关键知识生成的核心工具,机器智能的实操模式从深度挖掘行业数据迅速演进到自大量代码中生成通用算法,无缝融合人工智能技术与科学共同体创新思想的科学智能范式(第五范式)开始登上历史舞台。社会各界协力掀起的人工智能引领科学发现的全新趋势深度渗透数学、物理学、生命科学等基础科学领域^[5],加快科学思维发展、创新技术迭代与专业知识涌现,拓展数智时代的核心知识体系与科学释疑路线。例如,谷歌DeepMind与欧洲生物信息研究所合作团队利用AI系统AlphaFold成功预测了超过100万个物种的2.14亿个蛋白质结构,引领生物学领域的全新革命,为整个人类世界应对未来的大流行病保驾护航^[6]。又如,生成式智能工具助力解决中美关系策略、大陆惠台政策实效等社会科学领域的重要难题。再如,华为云盘古大模型研发团队将三维神经网络用于精准中期全球天气预报,让人们重新审视气象预报模型的未来,模型的开放将推动该领域的发展^[7]。

当前,我国科技部汇同国家自然科学基金委员会启动“人工智能驱动的科学研究的专项部署工作,布局“人工智能驱动的科学研究的”前沿科技研发体系^[8]。美国能源部发布《面向科学、能源与安全的人工智能》,围绕人工智能在科学研究、能源开发和国家安全等重大领域的前沿方向开展讨论并规划后续工作^[9]。微软、华为、英伟达等巨头企业纷纷成立科学智能专项部门、开设相关课程或项目研究。经济合作与发展组织(OECD)颁布《科学智能:挑战、机遇与未来》,重点探讨了人工智能对于假设生成、实验监控和精准测量等科学任务的重要价值与广泛应用科学领域面临的资源不足与技术挑战^[10]。《自然》杂志等开展大规模的智能工具应用科学领域的状况调查^[11]。亟待深度剖解科学智能范式逻辑架构的基

基础上,积极整合高质量的训练数据、高效能的算力平台与高精度的算法模型等,迅速营建科学智能驱动社会发展的有序环境。

2 科学智能范式的逻辑架构

百余年来,科学发现的关键阻力并非缺少基本理论的有力支撑,而是无法准确描述愈加庞杂的海量数据,大部分物理学以及整个化学所需的数学理论的基本定律已完全为人们所知,而困难在于这些定律的精确应用会导致方程太过复杂而无法求解。基于超算中心、复杂算法生态与大规模数据资源的科学智能范式高效处理新型数据、加速代码撰写与算法迭代、自主生成可验证的机器猜想,大力推动从蛋白质结构预测到中长期天气预报、从医学诊断到科技传播、从学科教育到国际关系评估的数智化发展进程。

2.1 AI4S是“数据+模型”驱动的五范式

传统的数据处理方式是立足统计模型开展小规模样本的粗粒度模拟与预测,在精准性与表达能力上受到明显约束。科学智能充分利用人工智能能力来开发新的科学发现工具,从而让我们和科学界的其他同仁能够应对人类面临的最重要的一些挑战^[2]。科学智能范式(第五范式)基于能够辨识庞大复杂科学数据集的机器学习算法和开展预训练的生成式智能工具,展现出优质的智慧涌现能力、信息聚合适应能力、多任务高效处理能力与思维链交互能力^[3],通过机器猜想打造知识生态、依靠算法思维释疑场景难题,在智能涌现中推导未知结论,获得经验领域内尚未得到的前瞻性结果,使得“数据下的知识”更有效地过渡到“数据中的智慧”^[4],推动科学发现蓬勃发展。例如,AlphaFold通过人工智能训练策略彻底改变蛋白折叠的技术路线,塑造了解决生命科学领域高维数据处理难题的优质范本。又如,科学智能通过数据与模型的系统融合工程,实现具象场域中基础设施和终端产品的良性交互。

2.2 AI4S通过机器猜想打造知识生态

知识创造与知识传承是人类文明存续的重要基石。认知推理时代中人类族群日益加快探索未知的步伐,以GPT-4为代表的生成智能和仿生神经形态的类脑计算等正在改变知识增长的传统逻辑,迅速重塑科学共同体与机器猜想共建跨学科知识融合的核心

体系。包括生物智能、决策智能和群体智能等在内的人工智能系统充分引入跨学科的认知模型与知识结构,不仅定义不同科学领域的交互规则和激励机制,建立合理有序的知识创新目标体系与行为规范,还通过动态大模型解密复杂科学信息,基于超大规模的高精度计算模型输出的机器猜想逐步打造创新知识生态,解决有限的人脑容量与浩瀚的知识数量之间的深刻矛盾,支撑大规模的产业场景落地实践。例如,大语言模型的多步推理能力不仅辅助科研人员从海量文献数据库中找到最有价值的关联资料,还助力改进科研成果的逻辑错误与语法问题。

2.3 AI4S通过算法思维延展应用场景

传统的人工智能算法往往只是根据预设规则进行规模运算,难以高效精准地处理复杂的科学问题。随着循环神经网络、生成对抗网络、深度强化学习等算法日益成熟,科学智能范式逐渐具备了自动提取已有知识资源和经验数据的特征与规律进行推理决策并根据环境变化进行自主学习与自适应行为策略优化等思维能力。人工智能大模型能够模仿人类思维链,通过持续的人机互动在理解上下文的基础上生成适当响应,更好地延展应用到各种现实的科学探索场景。例如,DeepSpeed4Science通过智能系统技术超越用于加速大语言模型的通用方法,在解决结构生物学研究中的两个关键性挑战上取得初步进展^[5]。又如,包括美国麻省理工、我国台湾人工智能学校以及多所国内知名高校等在内的拔尖创新人才培养机构采用智能工具辅助完善培养目标与培养方法,参与引导学生更好地完成知识获取、知识运用与知识创造。再如,ChatGPT为科学共同体提供优质的代码编写、跨语种交流与论文撰写工具,助力科研合作发展与科技成果传播。

3 结语

从依靠实验观察的经验范式到基于建模演绎的理论范式,再到关涉仿真的计算范式和人物物一体化的数据驱动范式,最后到人工智能技术充分应用到各个学科领域的科学智能范式,主导性科学范式的迭代变革持续带来科学探索的重大突破。然而,“以数字技术主导的新质生产力跃迁已经成为未来发展的重要趋势”的时代背景下,第五范式实际应用

于自然科学研究的过程中日益暴露出原始数据质量不稳定、算法偏离较为严重以及主客观因素作用下的虚假生成等诸多风险,亟须建立和完善跨学科专家协同探索、高质量的巨量动态数据支撑以及海量复合型人才储备的保障机制。尤其是“如何在日新月异的科技创新环境中赢得主动,在关键领域取得创新突破,是时代给予教育的新命题。这不仅关系到人才培养,也关系到未来的国际竞争”^[16],数智文明时代中第五范式驱动科学进步与社会发展的关键在于通过秉持科技向善价值观的参与人员确保整个运作过程的价值对齐。同时,亟待解决科学智能范式延展应用到社会科学和人文科学领域的理论论证与方案选择。通过完善人类决策与机器智能融合共建的诚信机制、监管机制与服务机制等,迅速提升人类认识世界和改造世界的能力,保护和增进人类的共同福祉。

参考文献:

- [1]团结出版社.《规律简史》:发现规律的秘密[EB/OL]. [2022-06-29]. https://www.sohu.com/a/562251743_121119385.
- [2]The Seal of the Author: Paradigm, Logos and Myth in Plato's Sophist and Statesman[EB/OL]. [2014-10-15]. https://ruor.uottawa.ca/bitstream/10393/31303/1/Barry_John_Conor_David_2014_thesis.pdf.
- [3]ECKBERG D L, HILL L. The paradigm concept and sociology: A critical review[J]. American sociological review, 1979, 44(6): 925.
- [4]ÇAPARLAR C Ö, DÖNMEZ A. What is scientific research and how can it be done?[J]. Turkish journal of anaesthesiology and reanimation, 2016, 44(4): 212-218.
- [5]XU Y, LIU X, CAO X, et al. Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research[J]. Innovation(camb), 2021, 2(4): 100179.
- [6]DEMIS H. AlphaFold reveals the structure of the protein universe[EB/OL]. [2022-07-28]. <https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-reveals-the-structure-of-the-protein-universe/>.
- [7]BI K F, XIE L X, ZHANG H H, et al. Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks[J]. Nature, 2023, 619: 533-538.
- [8]科技部部署人工智能驱动科学研究!权威专家详解[EB/OL]. [2023-03-27]. <https://export.shobserver.com/baijiahao/html/596974.html>.
- [9]JONATHAN C, JOHN F, DOUG K, et al. Advanced research directions on AI for science, energy, and security[EB/OL]. [2022-06-25]. <https://www.anl.gov/sites/www/files/2023-06/AI4SESReport-2023-v6.pdf>.
- [10]OECD. Artificial intelligence in science: Challenges, opportunities and the future of research[EB/OL]. [2023-06-26]. <https://www.oecd-ilibrary.org/docserver/a8d820bd-en.pdf?expires=1705333946&id=id&accname=guest&checksum=CA9959349715EB454222D6E73AE1D550>.
- [11]RICHARD VAN N, JEFFREY M P. AI and science: What 1,600 researchers think[EB/OL]. [2023-09-10]. <https://www.nature.com/articles/d41586-023-02980-0>.
- [12]刘志毅. 第五范式的出现:科学智能+机器猜想[N]. 经济观察报, 2022-11-25(A5).
- [13]罗飞, 崔滨, 辛小江, 等. 大语言模型嵌入图书馆知识服务的风险范式与管控策略[J]. 图书与情报, 2023(3): 99-106.
- [14]XU Y, WANG F, AN Z, et al. Artificial intelligence for science-bridging data to wisdom[J]. Innovation(Cambridge(mass)), 2023, 4(6): 100525.
- [15]SONG S L, KRUF T B, ZHANG M J, et al. DeepSpeed4 Science initiative: Enabling large-scale scientific discovery through sophisticated AI system technologies[EB/OL]. 2023: arXiv: 2310.04610. <http://arxiv.org/abs/2310.04610.pdf>.
- [16]孙冰, 郭霁瑶. 名校校长访谈录 AI 时代的教育该直面应对[J]. 中国经济周刊, 2023(19): 40-47.

生成式人工智能时代的AI4S发展机遇与展望

左旺孟 杨光磊

【作者简介】左旺孟(通信作者)(1977-),教授,博士生导师,哈尔滨工业大学计算学部,研究方向为视觉感知与认知, E-mail: cswmzuo@gmail.com; 杨光磊, 博士, 助理教授, 哈尔滨工业大学计算学部机器学习研究中心, 研究方向为域适应、无监督学习、预训练模型等, E-mail: yangguanglei@hit.edu.cn(哈尔滨 150001)。

【原文出处】《农业图书情报学报》(京), 2023.10. 26~32

作为人工智能的一个分支,生成式人工智能(Generative Artificial Intelligence, GAI)能够学习和建

模输入数据的分布,生成全新的、逼真的文字、图像、声音和多模态数据。近年来,以ChatGPT^[1]为代表的文本生成式人工智能和以扩散模型^[2]为代表的图像生成式人工智能获得了前所未有的关注^[3],生成式人工智能正以其独特的力量影响现有的科技、经济和文化格局。

随着计算能力的发展和数据量的爆炸式增长,生成式人工智能技术近年来取得了突破性进展和广泛应用。在科学领域,GAI也正逐步成为一个强大的工具,帮助科学家在化学、物理、生物学等领域设计实验、发现新材料和预测复杂系统的行为。在工业和机器人领域,生成式人工智能已经开始变革传统制造业,通过优化产品设计、模拟生产流程和预测设备维护需求,极大地提升了生产效率和质量。在艺术领域,生成式人工智能同样引发了一场创作革命,提供了新的创作工具并拓展了艺术的边界和可能性。

然而,生成式人工智能的迅猛发展也带来了新的挑战和问题。在工业领域,如何确保人工智能系统的安全性和可靠性,如何处理自动化带来的就业转型,都是值得深入研究的问题。在艺术领域,版权、原创性和伦理等问题也日益凸显,艺术界对于人工智能创作的接受度和定义也在不断演变。我国于2023年7月10日出台了“生成式人工智能服务管理暂行办法”^[4],对生成式人工智能的诸多方面进行了有效规范,以促进健康良好生态的形成。

随着技术的不断进步和应用领域的不断拓展,生成式人工智能预计将在未来几十年内持续引领科技革命的浪潮。它不仅会深刻改变科学研究、工业生产、文化创作等领域,更将重塑人类生活的方方面面。本文旨在展望生成式人工智能在AI for Science (AI4S)变革中领域的影响,以及对不同学科的推动作用。

1 生成式人工智能发展概述

生成式人工智能是人工智能研究中最活跃和最具有变革性的领域之一。它不仅仅是关于模拟和理解现有的知识,更关注于创造出全新的、未曾存在的数据和模式,包括文本、图像、音乐等多种形式的内

容。这一领域从早期的简单模式识别发展到今日的高度复杂和细致的模型,历经了一段长久而富有成果的探索旅程^[5]。

生成式人工智能的早期研究主要集中在简单的图像和文本生成上,如自动作诗、基础图形设计等。尽管这些早期尝试相比现今的成果来看显得相对原始,但它们为后续技术的演进奠定了坚实的基础,并且揭示了人工智能生成内容(AIGC)的巨大潜力。随着深度学习的兴起和计算能力的飞速提升,生成式人工智能技术迎来了它的黄金时代。2014年,生成对抗网络(Generative Adversarial Nets, GAN)^[6]的诞生,开启了新一轮的技术革命。生成对抗网络通过对抗过程中的生成器和判别器的博弈,能够创造出逼真图像和视频,它的出现极大地推动了生成式人工智能的研究和应用。其应用领域主要集中在视觉领域。变分自编码器(Variational Autoencoder, VAE)^[7]也开始受到广泛关注。与生成对抗网络不同,变分自编码器通过优化潜在空间的结构来生成新数据,提供了一种不同的视角和方法。这些技术的发展,极大地丰富了生成式人工智能的理论和实践,也为后来的技术进步奠定了坚实的基础。

2017年,谷歌提出了一种新的深度网络架构,视觉自注意力模型(Transformer),其强大的自注意力机制和灵活的架构使其在生成任务中也极具竞争力。随后,基于Transformer的深度双向编码表示模型(Bidirectional Encoder Representations from Transformers, BERT)^[8]和生成式预训练模型(Generative Pre-trained Transformers, GPT)^[9]等语言大模型(Large Language Module, LLM)的出现,不仅在文本生成上取得了惊人的成果,更将生成式人工智能的应用推向了新的高度。这些模型呈现出强大的多任务和开放端特性,可用于文本生成、问答系统、语言翻译、摘要总结等多种语言任务,从而将GAI推向了一个新的高度。随着视觉自注意力模型的发展,掩码自编码器(Mask Autoencoders, MAE)^[10]和扩散模型(Diffusion Models)^[11]等新兴技术开始出现。扩散模型在图像和文本数据生成上展现了强大的潜力,在此基础上涌现出一大批生成式人工智能模型如DALL-E、Imagen、Stable Diffusion和Midjourney等,极大地推动了GAI

的研究和应用。总之,随着生成式人工智能的发展,我们有理由相信,现有的预训练和自监督学习算法以及现有的预训练大模型也将为不同学科领域的AI4S带来更多的机遇和可能性。

2 预训练算法可为AI4S带来新的发展机遇

在生成式人工智能时代,预训练算法取得了长足的进步与发展,涌现了自编码学习、对比学习、掩码学习等代表性算法。这将不仅为科学研究提供了新的工具,也为我们理解和探索未知科学世界开辟了新的途径。

在生物学领域,AlphaFold可以准确地预测蛋白质的三维结构,从而深化人类对生物分子机制和功能的理解^[12]。AlphaFold良好的泛化性能使其不仅能预测人类蛋白质组,还可以对20种不同有机体的蛋白质进行预测。虽然AlphaFold只能给出预测性结果,但AlphaFold提供的高置信结果可提供有效的起始搜索模板,使生物学家能够更便捷地建立蛋白质结构与功能之间的联系。随后,AlphaFold2可在几分钟内破译一般蛋白质的三维结构,还能预测一个由2180个氨基酸相连的大蛋白质的结构^[9]。此外,预训练算法在分析基因表达^[13]和分子表示^[14]方面也显示出强大的能力,能够学到更通用的表示特征,在诸多下游任务中展现出良好的性能与泛化能力。在药物发现领域,这些模型通过快速筛选和优化药物分子,加快了新药的发现过程和研发效率。通过将预训练和自监督算法应用于生物数据,科学家们能够更加精确地解析生命的奥秘,推动生物学研究和相关应用领域的发展。

医学领域也见证了预训练算法的发展与应用,尤其是在医学影像分析、疾病诊断和生物标志物发现等方面^[15]。通过将预训练算法应用于医学影像数据,能够帮助医生更快、更准确地诊断疾病,实现早期发现、早期治疗^[16]。在肿瘤学、神经科学、心血管病学等领域,这些模型正成为辅助诊断和治疗决策的重要工具。此外,预训练算法还在药物研发中发挥作用,它们能够预测药物分子的活性、优化药物设计、加速新药的上市进程。随着医学数据的增加和模型技术的进步,预训练算法在未来医学研究和临床应用中的作用将更加显著。

在天气预报领域,随着厄尔尼诺和拉尼娜等极端天气事件的频发,快速精确的天气预报变得日益重要。预训练算法通过分析历史气象数据和实时数据,提高了天气预报的准确性和时效性。例如,第一个在全球范围内预测地面风的深度学习模型FourCastNet^[17]。其预测精度与传统模型的均方根误差(RMSE)和异常相关系数(ACC)指标相媲美,且比传统模型运算速度快约45000倍。再如,中长期天气预报模型Pangu-Weather^[18]采用三维基于地球信息的视觉自注意力网络,首次在中长期气象预报上超过了传统数值方法。此外,预训练算法在气候变化研究中也发挥着作用,它们被用来模拟和预测全球气候变化的影响,为政策制定和环境保护提供科学依据^[19]。

预训练算法在AI4S领域已经展示出其巨大潜力,并为其他学科的发展带来了新的机遇。例如,AlphaFold算法在预测蛋白质三维结构方面的突破,加深了对生物分子机制的理解。在医学领域,预训练算法在影像分析、疾病诊断、药物研发等方面的应用,提高了诊断的速度和准确性,加速了新药物的开发过程。此外,在天气预报领域,如FourCastNet和Pangu-Weather等模型通过分析大量数据,显著提高了预报的准确性和时效性,对减少自然灾害的影响、指导农业生产和城市规划等方面发挥了重要作用。总的来说,预训练算法的进步不仅推动了AI4S的发展,也为医疗、药物开发、气候研究等领域的未来发展提供了新的机遇。

展望未来,预训练算法在生物学领域将实现更精准的蛋白质和基因表达分析,揭示生物体内的分子机制,推动医学研究和药物开发,以及改善健康管理和疾病诊断。在医学领域,这些算法可以进一步提升个性化治疗方案的制定,通过精确预测疾病进展和药物反应来优化治疗效果。在天气预报领域,预训练算法预计将提供更准确的长期气象和气候预测,帮助应对极端天气事件的影响,并为环境保护和政策制定提供科学依据。未来,通过结合不同学科领域数据形式和模型机理的特点设计恰当的深度学习,并积累不同学科的科学数据,预训练算法将在AI4S中发挥越来越重要的作用。

3 预训练大模型助力 AI4S 发展

在生成式人工智能时代,大语言模型作为一种重要的知识和能力的载体,在其他学科的应用正日益成为重要的研究方向。进而,预训练模型还可以扩展到其他模态数据(如图像、Lidar、IMU等),形成的多模态大模型(Large Multimodal Models, LMM)在工业检测、机器人技术和医学等多个领域表现出了巨大的应用潜力和价值。

在工业检测领域,大语言模型通过处理和分析从各种传感器和机器日志中收集的大量数据,支持对设备状态的实时监控和故障预测。例如,工业缺陷检测大模型 Myriad^[20]通过将多模态大模型与视觉专家知识结合,实现缺陷检测和缺陷描述。未来,工业检测大模型还能够识别出数据中的缺陷类型,预测可能的缺陷产生原因,为产品质量保障和制造工艺升级提供支持。同时,工业大模型还能够帮助解析复杂的工业数据,提供决策支持,优化生产流程和资源配置等。

在机器人领域,语言大模型也推动了机器人交互性、自主性和灵活性的变革。协作机器人在制造业中的应用越来越广泛,它们需要能够理解复杂的指令并与人类工作人员有效沟通^[21]。借助语言大模型,机器人能够更准确地理解自然语言指令,执行更复杂的任务,并能在某些情况下与人类进行对话式协作^[22]。此外,随着模型对环境数据的分析能力不断增强,机器人能够更加灵活地适应各种工作环境,提高任务执行的精确性和效率^[23]。

在医学领域,斯坦福大学、哈佛大学、耶鲁大学医学院最近在 Nature 上联合发文,探讨了预训练大模型在医学中的应用潜力,并提出了通用医学 AI (GMAI) 范式^[24]。GMAI 能够解析不同组合的医学模态,包括影像、电子健康记录、化验结果、基因组学、图形或医学文本的数据,根据用户需求产生多样化的输出,如医学诊断、医学报告以及诊疗方案等,使得在很少或没有特定任务标记数据的情况下执行各种任务成为可能。

在当今人工智能快速发展的背景下,以语言大模型为代表的预训练大模型在 AI4S 中发挥着越来越重要的作用。通过将语言大模扩展到其他模态并形

成多模态大模型,将为工业检测、机器人技术和医学等多个领域带来了巨大应用潜力和价值,也将为更多的 AI4S 领域带来显著的变革和进步。

此外,预训练大模型微调技术实施的各种条件和限制在 AI4S 中也日益引起了广泛的关注。例如,在工业应用中,多模态大模型需要能够处理和分析来自不同来源和类型的传感器数据,因而需要高效的数据集成和管理系统,以及具备任务和模态拓展能力的多模态大模型。在机器人技术中,模型的有效运用不仅取决于其算法的复杂度,还依赖于机器人硬件的交互和感知能力。而在医学领域,数据的敏感性和隐私问题尤为重要,需要确保在遵守相关法律和伦理标准的前提下发展联邦学习和持续学习方法。

总之,预训练大模型在 AI4S 中的发展将更加依赖于领域知识、模型算法设计、数据处理技术的进步,以及数据/计算资源的可持续发展。同时,为了确保这些技术能够公平、有效地服务于科学研究,开发者、研究人员和政策制定者需要共同努力,以确保技术的透明性、公正性和可访问性。

参考文献:

- [1]RADFORD A, WU J, CHILD R, et al. Language models are unsupervised multitask learners[J]. OpenAI blog, 2019, 1(8): 9.
- [2]ROMBACH R, BLATTMANN A, LORENZ D, et al. High-resolution image synthesis with latent diffusion models[C]//2022 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Piscataway, New Jersey: IEEE, 2022: 10674-10685.
- [3]KRYSTAL H. ChatGPT sets record for fastest-growing user base[EB/OL].[2023-02-02]. <https://www.reuters.com/technology/chatgpt-sets-record-fastest-growing-user-base-analyst-note-2023-02-01/>.
- [4]国家互联网信息办公室,中华人民共和国国家发展和改革委员会,中华人民共和国教育部,等.生成式人工智能服务管理暂行办法[EB/OL].[2023-02-02]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/202307/content_6891752.htm.
- [5]WANG H C, FU T F, DU Y Q, et al. Scientific discovery in the age of artificial intelligence[J]. Nature, 2023, 620: 47-60.
- [6]GOODFELLOW I J, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al.

Generative adversarial nets[C]//Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems–Volume 2. New York: ACM, 2014: 2672–2680.

[7]KINGMA D P, WELLING, M. Auto-encoding variational Bayes[EB/OL]. 2013: arXiv: 1312.6114. <http://arxiv.org/abs/1312.6114.pdf>.

[8]DEVLIN J, CHANG M W, LEE K, et al. BERT: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding [EB/OL]. 2018: arXiv: 1810.04805. <http://arxiv.org/abs/1810.04805.pdf>.

[9]JUMPER J, EVANS R, PRITZEL A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold[J]. Nature, 2021, 596: 583–589.

[10]HE K M, CHEN X L, XIE S N, et al. Masked autoencoders are scalable vision learners[C]//2022 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition(CVPR). Piscataway, New Jersey: IEEE, 2022: 15979–15988.

[11]HO J, JAIN A, ABBEEL P. Denoising diffusion probabilistic models[C]//Proceedings of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems. New York: ACM, 2020: 6840–6851.

[12]SENIOR A W, EVANS R, JUMPER J, et al. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning [J]. Nature, 2020, 577(7792): 706–710.

[13]JI Y R, ZHOU Z H, LIU H, et al. DNABERT: Pre-trained bidirectional encoder representations from transformers model for DNA-language in genome[J]. Bioinformatics, 2021, 37(15): 2112–2120.

[14]WANG Y Y, WANG J R, CAO Z L, et al. Molecular contrastive learning of representations via graph neural networks[J]. Nature machine intelligence, 2022, 4: 279–287.

[15]ESTEVA A, ROBICQUET A, RAMSUNDAR B, et al. A

guide to deep learning in healthcare[J]. Nature medicine, 2019, 25(1): 24–29.

[16]ZHOU Y K, CHIA M A, WAGNER S K, et al. A foundation model for generalizable disease detection from retinal images [J]. Nature, 2023, 622: 156–163.

[17]PATHAK J, SUBRAMANIAN S, HARRINGTON P, et al. FourCastNet: A global data-driven high-resolution weather model using adaptive fourier neural operators[EB/OL]. 2022: arXiv: 2202.11214. <http://arxiv.org/abs/2202.11214.pdf>.

[18]BI K F, XIE L X, ZHANG H H, et al. Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks[J]. Nature, 2023, 619: 533–538.

[19]REICHSTEIN M, CAMPS-VALLS G, STEVENS B, et al. Deep learning and process understanding for data-driven Earth system science[J]. Nature, 2019, 566: 195–204.

[20]LI Y Z, WANG H L, YUAN S H, et al. Myriad: Large multimodal model by applying vision experts for industrial anomaly detection[EB/OL]. 2023: arXiv: 2310.19070. <http://arxiv.org/abs/2310.19070.pdf>.

[21]SCHICK T, DWIVEDI-YU J, DESSI R, et al. Toolformer: Language models can teach themselves to use tools[EB/OL]. 2023: arXiv: 2302.04761. <http://arxiv.org/abs/2302.04761.pdf>.

[22]BROHAN A, BROWN N, CARBAJAL J, et al. RT-2: Vision-language-action models transfer web knowledge to robotic control[ER/OL]. 2023: arXiv: 2307.15818. <http://arxiv.org/abs/2307.15818.pdf>.

[23]DRIESS D, XIA F, SAJJADI M S M, et al. PaLM-E: An embodied multimodal language model[EB/OL]. 2023: arXiv: 2303.03378. <http://arxiv.org/abs/2303.03378.pdf>.

[24]MOOR M, BANERJEE O, ABAD Z S H, et al. Foundation models for generalist medical artificial intelligence[J]. Nature, 2023, 616: 259–265.