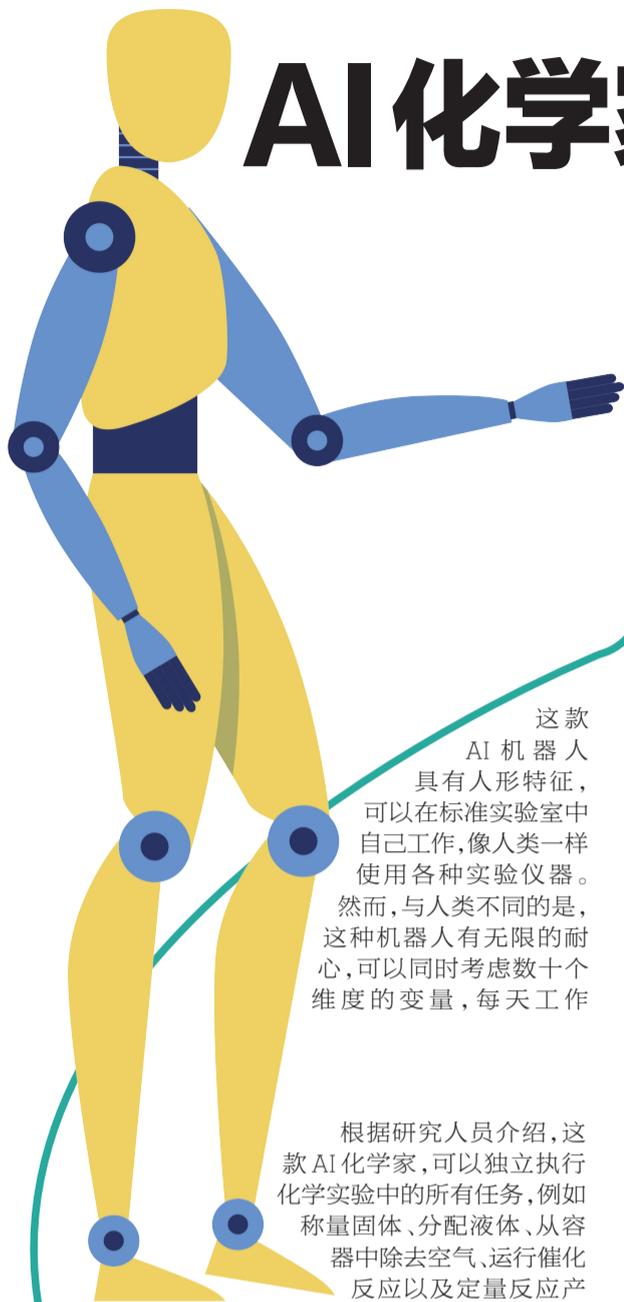


# AI化学家8天完成668个实验

■ 映寒



近日,《自然》杂志一篇题为《移动的机器人化学家》的封面文章引发热议。论文介绍了利物浦大学的科研人员成功研发了一款AI化学家。以往的人工智能大部分生活在硬盘和内存里,AI化学家则突破了“桎梏”,能直接将自己的“想法”在现实世界中通过物理手段来验证,在纷繁复杂的化学宇宙里穿梭。

## 不知“疲惫”的AI化学家

这款AI机器人具有人形特征,可以在标准实验室中自己工作,像人类一样使用各种实验仪器。然而,与人类不同的是,这种机器人有无限的耐心,可以同时考虑数十个维度的变量,每天工作

21.5个小时,剩下的时间用于暂停充电。

这种机器人可以独立思考,独立完成一系列的实验操作。在第一次测试中,这个1.75米高的AI机器人在8天时间里独立完成了668个实验,并研发出了一种全新的化学催化剂。

而且,这种AI机器人具有类似于人类的尺寸和可触及范围,因此可以使用专为人类操作而设计的实验设备。它结合了激光扫描和触摸反馈来进行定位,可以在实验室自由走动,执行各种任务。某种意义上来说,它就像人类研究员一样,可以使用

各种各样的仪器。

对此,本次研究的领导者、利物浦大学化学和材料系教授 Andrew Cooper 表示,我们的想法是让科研流程化,而不是让机器流程化。AI机器人的出现,可以让我们的工作更灵活。它不仅是实验室的一台机器,也是一个具有超能力的实验伙伴。

## 1亿个候选实验中确定最佳实验

这种AI机器人功能如此强大,离不开研究人员为其设计的强大的人工智能算法。AI机器人的“大脑”,根据前一个实验的结果,对10个维度的变量进行分析,可以在实验室中从1亿个候选化学实验中,确定下一步要进行的最佳实验。

因此,在第一次测试中,这种AI机器人便在没有任何研究人员的指导下,8天内进行了688次实验,工作了192个小时,进行了319次移动,完成了6500次仪器操作,并自主发现了一种活性非常高的催化剂。

对此,参与AI机器人算法研究的研究人员表示,因为机器人需要在多日内自主进行工作,并进行数千次精细操作,因此每项任务中,AI机器人的失败率必须极低。一旦AI机器人完成了这些实验,与人类相比,它所犯的错误一定会少很多。

同时,研究人员还表示,这种AI机器人可以解决目前我们无法掌握的大规模和复杂性实验问题。例如,AI机器人可以通过自动搜索广阔的、未开发的化学空间来寻找清洁能源材料或新药配方。

## 由科研人员进行调度

再厉害的AI机器人也是由人制造出来的。上海科技大学教授杨旸在称赞AI化学家的同时,也发现这个机械臂系统还不能自主设计和执行创造性的科学实验,它相当于一套先进的自动仿真系统。

杨旸进一步解释道:“科学家们让完整的化学实验过程和结果评判标准实现了数字化和自动化,再通过智能硬件和软件算法的精密组合及综合设计,构建了这套移动式、跨领域的自动仿真系统。精准的流程控制、智能算法和定位技术让机械臂可以不知疲倦地操作一些自动化程度很高的仪器设备。”

AI化学家问世的背后离不开科研人员们的知识积累,主体是由科研人员来驾驭自动化系统,进而操控AI机器人。这是一套整体解决方案,一间实验室也许一套机器人系统足够,如果是一层甚至一栋楼的试验平台,那么就需更复杂的操作系统,需要科研人员来设计和调度。

根据研究人员介绍,这款AI化学家,可以独立执行化学实验中的所有任务,例如称量固体、分配液体、从容器中除去空气、运行催化反应以及定量反应产物,甚至它还可以自己决定下一步需要进行什么化学实验。所有的这些实验都是在实验室中,由AI机器人本身操作实验工具来完成。

“实验室很需要这样的机器人。”新松机器人公司人工智能团队负责人王晓东说,“以滴剂实验为例,实验人员难免会存在误差以及实验记录的缺失。由AI机器人来操作的话,不仅可以提高实验效率,保证实验记录的完整性,还可以实现检测结果的可追溯性。”

## AI智能审图在海关一线立“新功”

■ 朱绍岳

近日,海关集中审像中心的智能审图系统仅用3.27秒,就对货物码头上扫描后的集装箱发出报警,提示箱内存在国家禁止入境的固体废物。经送检鉴定结果显示,嫌疑部位的货物中的确夹藏我国禁止进口的废塑料,海关智能审像系统在打击“洋垃圾”入境方面又立“新功”。

中国海关在世界海关业务领域率先推动人工智能技术与海关一线监管深度融合,运用智能审图系统对濒危物种、固体废物等加大监管,提升打击走私犯罪效果。

作为新技术试点单位之一,天津海关持续优化算法、创新流程,不断对智能审图系统进行“训练”,让人工智能变得更加“聪明”。“我们选取了天津口岸进口量大、代表性强的进出口重点商品进行图像标注,不断提高系统识别速度和精准度。”天津海关有关负责

人说。经过对智能审图系统进行大量的训练,系统目前已实现对天津口岸一半以上进出口商品的准确识别。今年上半年,天津海关通过智能审像系统已对12590票报关单、23229个集装箱开展机检查验,查获11起伪报、夹藏等多起案例。

天津海关在严格监管同时,对适宜机检查验的进出口货物原则上一律优先机检,对每幅机检图像的平均审核时间控制在5秒钟之内,助力口岸通关再提速。

此外,天津海关集中审像中心还建立起疑难图像集中研判机制,借助智能审图系统对机检货物实施自动比对筛查,降低转人工查验比例,最大限度压缩货物掏箱、开拆、装箱等环节。

“智能审图系统的加入,实现了海关关员人工敏锐判图和系统算法稳定高效的优势叠加,精准打击违法行为。”该负责人说。

## “多模态AI”会察言观色 更接近人类五感

“多模态AI”技术可以像人类通过五感理解周围那样,通过图像、声音和文件等多种数据作出高水平判断。

“您吃饭了吗?”“您吃药了吗?”可爱的机器人跟老人聊天的时候顺便提醒。虽然老人有些时候回答模糊不清,有些时候只是默默点头,AI可以通过观察情况,机智地判断出“没有问题”。

AI不仅可以理解对话内容,还可以通过视频读出感情和动作变化。传统AI可以对图像、声音和文件进行分析,但不具备察言观色的能力,打破这一壁垒的是“多模态AI”。

“多模态AI”应用范围今后将进一步扩大。日本电信电话公司(NTT)正打算有效利用“多模态AI”进行商标等调查。AI根据图片和解说文字两种信息检查过去是否有类似商标。(本报综合)