Raelon Veritas Lee 出品

基于 ChatGPT Deep Research 系列提示生成

Produced by Raelon Veritas Lee

via ChatGPT Deep Research Prompt Series

原始仓库链接 / Original Repository

https://github.com/roclee2692/deep-research-openai-gpt

协议类型 / License

CC BY-NC-SA 4.0 International

署名 - 非商业性使用 - 相同方式共享

Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0

仅供非商业使用，转载请保留署名和仓库链接

Non-commercial use only; attribution and original link required

好的，我将为您撰写一份系统性综述，综合探讨AI大模型在基础科研中的潜力。

这篇综述将涵盖AI大模型在多个基础科学领域的应用，包括物理、化学、生物学、天文学、地球科学、数学与计算科学等。内容将包括：

* 目前的研究应用现状，探讨AI如何在各个领域发挥作用。
* 具体案例分析，如AlphaFold在蛋白质结构预测中的突破。
* AI在科学研究中的潜力，以及未来可能的发展方向。
* 目前AI大模型的局限性和挑战，包括计算成本、可解释性问题等。

我会尽快完成研究并向您提供完整的综述报告。

**引言**

人工智能（AI）大模型是指具有海量参数和训练数据、能够在复杂任务上表现出色的人工智能模型。这类模型正日益成为科学研究的强大工具。在基础科学领域，AI已经展现出加速发现和提高分析能力的潜力。例如，DeepMind开发的AlphaFold模型成功预测蛋白质结构，被视为解决了生物学上持续50年的“蛋白质折叠问题”，**展示了AI对科学发现的巨大影响以及显著加速基础研究的潜力** ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=problem%E2%80%9D%20en,explain%20and%20shape%20our%20world))。总体而言，从物理到生命科学，各领域研究者正尝试将AI大模型应用于理论推导、模拟计算和数据分析等方面，以应对海量数据和复杂问题。下文将系统综述AI大模型在各基础科学领域的应用现状、典型案例、未来方向，以及面临的局限与挑战。

**AI在各基础科学领域的应用**

**物理学**

在物理学中，AI模型被用于解决从量子尺度到宇宙尺度的各类问题。在量子力学领域，深度学习正成为求解复杂量子系统的新工具。传统方法求解多体薛定谔方程非常困难，而**深度神经网络已经用于变分近似计算原子和分子体系的基态能量**，取得了接近高精度量子化学方法的结果 ([FermiNet: Quantum physics and chemistry from first principles - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/ferminet-quantum-physics-and-chemistry-from-first-principles/#:~:text=In%20an%20article%20published%20in,make%20them%20in%20the%20lab)) ([FermiNet: Quantum physics and chemistry from first principles - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/ferminet-quantum-physics-and-chemistry-from-first-principles/#:~:text=FermiNet%20was%20the%20first%20demonstration,accurate%20AI%20method%20to%20date))。例如，DeepMind的FermiNet模型将电子的波函数表示为神经网络，成功计算出多电子系统的能量，其精度足以用于实际研究 ([FermiNet: Quantum physics and chemistry from first principles - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/ferminet-quantum-physics-and-chemistry-from-first-principles/#:~:text=In%20an%20article%20published%20in,make%20them%20in%20the%20lab))。同时，在经典力学和连续介质力学中，AI辅助建模和求解也有重要进展。物理信息神经网络（PINNs）将偏微分方程的物理约束融入深度学习，可用于流体力学等复杂体系的模拟和参数反演。相比传统计算流体力学，PINNs能够**无缝融合噪声数据与物理模型，解决高维参数下的流动问题，并在逆问题上展现出高效性** ([[2105.09506] Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: A review](https://arxiv.org/abs/2105.09506#:~:text=,dimensional%20wake%20flows%2C%20supersonic)) ([[2105.09506] Physics-informed neural networks (PINNs) for fluid mechanics: A review](https://arxiv.org/abs/2105.09506#:~:text=and%20new%20computer%20codes,dimensional%20wake%20flows%2C%20supersonic))。在高能粒子物理中，AI更是成为分析海量碰撞数据的关键手段。大型强子对撞机（LHC）每秒产生上亿次粒子相互作用事件，数据流率高达每秒60 TB，仅极少数包含新奇物理信号 ([Learning by machines, for machines: Artificial Intelligence in the world's largest particle detector | ATLAS Experiment at CERN](https://atlas.cern/Updates/Feature/Machine-Learning#:~:text=Collider,hardware%20optimization%20can%20be%20studied))。机器学习被广泛用于事例触发筛选、粒子分类和统计分析，以**智能筛选海量数据、精确刻画标准模型并搜索暗物质等超出标准模型的新现象** ([Learning by machines, for machines: Artificial Intelligence in the world's largest particle detector | ATLAS Experiment at CERN](https://atlas.cern/Updates/Feature/Machine-Learning#:~:text=a%20natural%20and%20symbiotic%20one,BSM)) ([Machine learning could help reveal undiscovered particles within data from the Large Hadron Collider | Argonne National Laboratory](https://www.anl.gov/article/machine-learning-could-help-reveal-undiscovered-particles-within-data-from-the-large-hadron-collider#:~:text=Particle%20physicists%20are%20tasked%20with,that%20scientists%20suspect%20is%20incomplete))。例如，研究人员应用**异常检测算法在ATLAS探测器数据中寻找异常信号，以发现标准模型之外的新粒子**，这一AI方法有望提高新物理搜寻的效率 ([Machine learning could help reveal undiscovered particles within data from the Large Hadron Collider | Argonne National Laboratory](https://www.anl.gov/article/machine-learning-could-help-reveal-undiscovered-particles-within-data-from-the-large-hadron-collider#:~:text=Particle%20physicists%20are%20tasked%20with,that%20scientists%20suspect%20is%20incomplete))。总体来看，AI大模型在物理学中已用于加速量子多体计算、发现隐藏的物理规律、模拟复杂连续介质流动，以及从海量实验数据中挖掘稀有事件，为物理学研究提供了全新手段。

**化学与材料科学**

在化学和材料科学领域，AI大模型正改变着分子设计和材料发现的范式。一方面，深度学习模型被用于**预测化学反应结果和优化反应条件**，帮助化学家在计算机中模拟实验，从而节省时间和资源 ([Twenty ways AI is advancing chemistry | News | Chemistry World](https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing-chemistry/4020269.article#:~:text=By%20collecting%20and%20analysing%20data,production%20of%20active%20pharmaceutical%20ingredients))。通过学习大量已有反应的数据，AI可以给出给定反应物在不同催化剂、溶剂和温度条件下可能的产物及产率 ([Twenty ways AI is advancing chemistry | News | Chemistry World](https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing-chemistry/4020269.article#:~:text=By%20collecting%20and%20analysing%20data,production%20of%20active%20pharmaceutical%20ingredients))。这使得研究者能够在尝试实际实验前，虚拟筛选出最有希望成功的方案，大大加速了有机合成和药物化学的研究。另一方面，在新材料发现上，AI通过对材料结构和性质大数据的学习，能够**预测材料的性能并发现潜在的新材料组合** ([Twenty ways AI is advancing chemistry | News | Chemistry World](https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing-chemistry/4020269.article#:~:text=By%20analysing%20large%20datasets%20of,stronger%20and%20more%20sustainable%20solutions))。例如，2023年DeepMind的研究利用图神经网络模型（GNoME）评估了数百万种晶体结构的稳定性，**一次性发现了220万种全新的晶体材料，其中有38万种被预测为稳定结构，相当于人类约800年的材料发现量** ([Millions of new materials discovered with deep learning - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-learning/#:~:text=Today%2C%20in%20a%20paper%20published,the%20stability%20of%20new%20materials))。这些候选材料中包含未来可能用于超导、动力电池等前沿技术的有趣材料 ([Millions of new materials discovered with deep learning - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/millions-of-new-materials-discovered-with-deep-learning/#:~:text=knowledge,the%20stability%20of%20new%20materials))。此外，在分子模拟和高通量筛选方面，AI也极大提高了效率。例如，深度学习势能面和强化学习策略可用于**加速分子动力学模拟**，使研究者能够在短时间内探索化学反应路径和材料相变过程。综上，AI大模型正帮助化学家和材料学家更快地**预测化学反应、设计分子结构以及筛选新材料**，从而加速催化剂开发、新药物发现和功能材料设计等领域的进展。

**生物学与生命科学**

生命科学领域的数据规模和复杂性非常适合AI大模型发挥作用。从基因组学到蛋白质科学，AI已经取得了一系列突破。最引人注目的是蛋白质结构预测：AlphaFold模型在2020年CASP14竞赛中取得压倒性成功，被认为**解决了持续数十年的蛋白质折叠预测难题** ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=problem%E2%80%9D%20en,explain%20and%20shape%20our%20world))。AlphaFold2模型的预测精度接近实验解析精度，大会组织者将其认定为这一生物学“世纪难题”的解决方案 ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=problem%E2%80%9D%20en,explain%20and%20shape%20our%20world))。这一突破**证明了AI能够极大加速科学研究**，并很快在全球范围内产生影响。到2022年，AlphaFold已公开提供了超过2亿条蛋白质序列的结构预测结果，几乎涵盖了科学界已知的所有蛋白 ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=In%20July%202022%2C%20we%20released,the%20latest%20blog%20here))。这使全球生物学家能够即时查询蛋白结构，大幅推动了新药靶标发现、酶工程等研究进展。此外，AI大模型也应用于基因组学分析，例如谷歌的DeepVariant利用深度卷积网络来从测序数据中识别基因组变异，其准确率达到99.4%，比传统方法大幅降低错误率 ([Improving the Accuracy of Genomic Analysis with DeepVariant 1.0](https://research.google/blog/improving-the-accuracy-of-genomic-analysis-with-deepvariant-10/#:~:text=whereas%20an%20early%20version%20of,10))。在细胞生物学上，深度学习用于从海量显微镜图像中识别细胞结构与行为模式，也取得了显著成果。研究者训练卷积神经网络对组织切片、活细胞成像等数据进行自动分类与定量分析，有助于发现新的细胞类型、疾病标志物和发育过程模式等。在生命科学的大数据挖掘方面，AI可以整合基因组、转录组、蛋白质组等多组学数据，找出潜在的分子关联和调控网络。这种跨尺度的数据驱动分析以前几乎不可能手工完成，而AI模型可以从中提炼出有生物学意义的信息。可以说，从基因到蛋白再到细胞，AI大模型正在成为生命科学研究不可或缺的工具，加速解析生命系统的复杂机理，并推动新药研发和精准医疗的发展。

**天文学与宇宙学**

天文学进入大数据时代后，AI为探索宇宙提供了强有力的支持。当今的大型巡天项目每天产生海量观测数据，包括多波段的图像和光谱，传统方法难以及时处理。机器学习算法已被广泛用于**天文数据的自动分类与异常检测**。例如，NASA利用Google的神经网络在开普勒望远镜数据中发现了一颗新的系外行星Kepler-90i，这是首次通过AI在其它恒星周围找到第八颗行星的行星系统 ([Artificial Intelligence, NASA Data Used to Discover Eighth Planet Circling Distant Star - NASA](https://www.nasa.gov/news-release/artificial-intelligence-nasa-data-used-to-discover-eighth-planet-circling-distant-star/#:~:text=The%20newly,solar%20system%2C%20known%20as%20exoplanets))。研究人员训练计算机识别恒星光变曲线中的微弱凌日信号，从海量数据中挖掘出了人类先前遗漏的行星 ([Artificial Intelligence, NASA Data Used to Discover Eighth Planet Circling Distant Star - NASA](https://www.nasa.gov/news-release/artificial-intelligence-nasa-data-used-to-discover-eighth-planet-circling-distant-star/#:~:text=The%20newly,solar%20system%2C%20known%20as%20exoplanets))。正如NASA天体物理学负责人所言：“我们的海量天文数据中潜藏着激动人心的发现，只等待合适的工具来将它们发掘出来” ([Artificial Intelligence, NASA Data Used to Discover Eighth Planet Circling Distant Star - NASA](https://www.nasa.gov/news-release/artificial-intelligence-nasa-data-used-to-discover-eighth-planet-circling-distant-star/#:~:text=%E2%80%9CJust%20as%20we%20expected%2C%20there,%E2%80%9D))。这表明AI正成为释放天文数据价值的“合适工具”。在宇宙学研究中，深度学习也用于从模拟和观测中提取大尺度结构的信息，加速参数估计。例如，生成对抗网络（GAN）被用来快速生成与N体引力模拟相匹配的宇宙大尺度结构分布，以用于宇宙学模型检验。此外，AI模型还能融合多波段多信使的数据，实现跨电磁波段的综合分析。例如将光学望远镜、射电望远镜及引力波探测的数据结合，通过机器学习识别出关联的天体事件或统一的分类。在恒星和星系演化研究中，机器学习通过分析星表数据来**发现新的天体类型及揭示星系形态的模式**。总的来说，在天文学和宇宙学中，AI大模型已成为应对海量复杂数据的利器，不仅提高了已知天体的分类和测量精度，也帮助天文学家从数据洪流中发现新的天体和宇宙现象。

**地球科学与气候学**

地球科学和气候研究高度依赖对复杂系统的建模和对海量观测的分析，AI大模型在这些方面展现出巨大潜力。在气象学中，深度学习模型正用于提高天气和气候预测的速度与精度。传统的数值天气预报需要强大的超级计算机和较长的计算时间，而最新的AI天气模型已经能够实现媲美传统方法的精度，同时显著提升速度。例如，华为开发的Pangu-Weather模型利用3D神经网络进行中期天气预报，**其预测精度首次超过传统数值预报方法，并将全球天气预报时间从数小时缩短到几秒，实现了约1万倍的加速** ([Prestigious science journal Nature publishes paper about Pangu Weather AI Model authored by HUAWEI CLOUD researchers - Huawei](https://www.huawei.com/en/news/2023/7/pangu-ai-model-nature-publish#:~:text=Pangu,independent%20verifications%20of%20these%20capabilities))。这种突破挑战了人们对AI预报精度不及物理模型的既有认知，也为实时灾害预警提供了新手段。在气候学中，AI被用于模拟长期气候变化情景和分析复杂的地球系统反馈。一些深度学习模型可以用来替代部分耗时的物理过程模拟（如云物理参数化），从而加快气候模式运行或提高分辨率。同时，AI还能将卫星遥感、大气探空和地面观测等多源数据融合，构建**高分辨率的地表和大气状态映射**，帮助科学家更好地监测气候变化带来的影响 ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=With%20the%20Prithvi,in%20weather%20and%20climate%20models))。NASA与IBM最近合作开发了一个“Prithvi”天气-气候基础模型，训练自海量的地球观测数据，能够支持**检测和预测极端天气、结合局地观测改进区域预报、以及将全球气候模拟下尺度到区域**等多种应用 ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=With%20the%20Prithvi,in%20weather%20and%20climate%20models))。在地球物理领域，机器学习也用于从地震波形中快速提取地震事件信息、从卫星图像中识别火山喷发或冰川变化等，为自然灾害的监测预警提供支持。生态和环境科学方面，AI可以帮助分析生态系统的大数据，例如通过遥感影像和传感器数据预测森林火灾风险、跟踪野生动物种群变化等。总体而言，AI大模型在地球科学与气候学中扮演着**加速模拟、融合数据和提高预测**的角色，有望提升人类应对气候变化和自然灾害的能力。

**数学与计算科学**

在数学和计算科学领域，AI大模型开始展现辅助解题和发现新结果的能力。虽然数学问题往往抽象且严格，但近年出现了一些将机器学习应用于数学难题的成功案例。一方面，AI被用于**优化求解复杂计算问题**。DeepMind开发的AlphaTensor是一例突出成果：这是首个用于发现全新算法的AI系统，**成功找到了矩阵乘法的更高效算法，解决了数学界关于矩阵乘法最快算法的50年公开难题** ([Discovering novel algorithms with AlphaTensor - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/discovering-novel-algorithms-with-alphatensor/#:~:text=In%20our%20paper%2C%20published%20today,way%20to%20multiply%20two%20matrices))。AlphaTensor通过强化学习在庞大的搜索空间中发掘出比人类已知算法更优的解法，为基本线性代数运算提供了新见解。这表明AI不仅能在棋类等游戏中超过人类（如AlphaZero），也能拓展到纯数学领域寻找新算法 ([Discovering novel algorithms with AlphaTensor - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/discovering-novel-algorithms-with-alphatensor/#:~:text=mathematics%20about%20finding%20the%20fastest,way%20to%20multiply%20two%20matrices))。另一方面，AI还开始用于**辅助数学定理证明和新猜想的发现**。2021年，数学家与DeepMind研究者合作，使用机器学习在**拓扑学的结理论和表示论领域提出了新的猜想并协助证明** ([Maths researchers hail breakthrough in applications of artificial intelligence](https://phys.org/news/2021-12-maths-hail-breakthrough-applications-artificial.html#:~:text=For%20the%20first%20time%2C%20computer,knot%20theory%20and%20representation%20theory))。这是首次有AI帮助数学家在纯数学中形成有意义的猜想 ([Maths researchers hail breakthrough in applications of artificial intelligence](https://phys.org/news/2021-12-maths-hail-breakthrough-applications-artificial.html#:~:text=,for%20unproven%20ideas%20in%20mathematics))。他们的模型从大量已知数据中寻找数学量之间的潜在关系，提示人类探索证明思路。这一突破展示了AI有可能成为数学研究“灵感的助推器”。在计算机科学中，AI模型同样用于改进编译优化、网络调度等组合优化问题求解，以及推进大规模并行计算的效率。此外，在数理统计和优化建模方面，机器学习算法提供了强有力的非线性拟合和全局优化能力，可用于求解过去难以处理的高维优化问题。甚至在抽象的代数几何领域，也有探索使用深度学习猜测代数结构属性的工作。虽然AI在数学领域的应用还处于起步阶段，但这些案例表明，它能够**协助解决一些长期悬而未决的问题并拓展人类的解题思路**，这为未来AI参与数学和计算科学研究带来了令人兴奋的前景。

**实验设计与数据分析**

在基础科学研究中，实验获取的数据规模和复杂程度不断提高，AI大模型正发挥作用帮助科学家更有效地设计实验、分析数据。首先，在实验数据的模式识别上，深度学习模型擅长从复杂数据中提取有意义的特征。例如，在高通量显微镜成像或粒子探测实验中，卷积神经网络可以自动对海量图像进行分类、分割，**识别出人眼难以察觉的结构或异常**。这种自动化的模式识别不仅减轻了科研人员的负担，也提高了一致性，避免了人工分析的主观偏差。其次，AI可以辅助优化实验设计。通过结合机器学习的预测和贝叶斯优化策略，研究者能够**自适应地选择下一步实验条件**，从而以最少的尝试获得最大的信息产出。例如，在新材料或新药物研发中，“自驱动实验室”系统利用机器人执行实验并由AI实时分析结果，然后决定下一个实验配方或参数，使研发过程大幅加速。已有案例表明，AI指导下的实验策略可以在远少于传统实验次数的情况下找到性能最佳的材料组合或反应条件，从而显著降低研发成本和时间。此外，AI还能帮助**自动标注实验数据和处理噪声**。在需要人为标记的大型数据集（如天文巡天或基因组测序变异数据）中，机器学习模型可以学习专家的标注规则，批量地将新数据分类或注释，随后再由专家复核极少量疑难案例。这种人机协作提高了效率。在实验仪器控制方面，AI算法也可用于实时调整设备参数以保持最佳状态，例如显微镜的自动对焦、粒子加速器束流的智能校准等。跨学科的自动化实验平台正在兴起，将AI用于从实验规划、执行到数据分析的各个环节，形成闭环的高效科研流程。总体而言，AI大模型正在实验科学中扮演“智能助手”的角色——**帮助研究者更聪明地设计实验、更快地处理数据，并从中挖掘更深层的模式和规律**，从而加速科学发现。

**多学科交叉应用**

AI大模型还展现出连接不同学科知识、促进交叉研究的潜力。许多科学难题往往涉及多个领域的知识，而大型AI模型（例如预训练的语言模型或多模态模型）可以从海量跨学科数据中学习到广泛的概念。这为融合不同学科的方法提供了可能性。例如，自然语言处理领域的科学文献分析模型可以将生物学、化学、医学等领域的文献进行文本挖掘，**找出跨领域的潜在关联**（如某种疾病的分子机制在不同物种中的共同点，或者某种材料特性在地质和行星科学中的类似规律）。再如，一些研究者探索使用知识图谱和深度学习，将物理定律、化学反应和生物通路等信息连接起来，以发现新的跨学科见解。AI还可以帮助跨领域团队更有效地合作：大型语言模型可以充当“知识翻译”，将一个领域的专业术语解释给另一个领域的研究者，从而降低沟通门槛。此外，诸如GPT-4这样的通用大语言模型已经表现出理解和生成不同学科文本的能力，研究者开始尝试利用它们来**辅助编写综述、撰写跨学科研究提案**等。这些模型在一定程度上整合了各学科的知识，有望在交叉科学问题上提出创新的解决思路。当然，多学科交叉的AI应用也面临挑战，例如如何确保模型对各领域语境的正确理解、不传播某领域中的偏误到其他领域等。但可以预见，随着基础模型训练数据的日益广泛和多样，AI将逐渐成为跨学科研究的纽带，**帮助不同领域的知识实现融合，催生新的学科交叉突破**。

**具体案例分析**

**AlphaFold在蛋白质结构预测中的突破**

AlphaFold是AI在基础科学中取得重大突破的里程碑案例。长期以来，“给定氨基酸序列预测蛋白质三维结构”被誉为生物学中的重大未解难题，科学家为之努力了数十年。DeepMind开发的AlphaFold模型通过深度学习训练，在2020年的第14届蛋白质结构预测评测（CASP14）中大放异彩。其预测结果平均误差接近实验解析精度，大幅超越其他参赛方法 ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=problem%E2%80%9D%20en,explain%20and%20shape%20our%20world))。CASP的组织者宣布AlphaFold取得了“令人震惊的突破”，认为其**解决了蛋白质结构预测这一50年的挑战** ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=problem%E2%80%9D%20en,explain%20and%20shape%20our%20world))。AlphaFold采用了神经网络结合进化信息、共进化分析和物理约束的创新架构，能够精准地预测出蛋白质折叠成的三维结构。这个成果对生命科学影响深远：了解蛋白质结构是阐明其功能、设计药物分子的重要前提。借助AlphaFold，研究者可以快速获得以前只有通过耗时昂贵的实验（如X射线晶体学、冷冻电镜）才能获得的结构信息。例如，在AlphaFold发布后不久，就有科学家利用其预测结构解释了细胞内蛋白质复合物的构造，并用于筛选药物作用位点。DeepMind在2021年将AlphaFold模型和代码开源，并与欧洲分子生物实验室-欧洲生物信息学研究所（EMBL-EBI）合作公开了全球主要物种约98%蛋白质（超过2亿个）的预测结构数据库。这意味着任何研究人员只需上网查询，即可获得目标蛋白的结构模型，大大加速了生命科学研究 ([AlphaFold: a solution to a 50-year-old grand challenge in biology - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/#:~:text=In%20July%202022%2C%20we%20released,the%20latest%20blog%20here))。当然，AlphaFold也有局限性，例如对某些无同源序列参考的蛋白质和多蛋白复合物的预测精度仍有限，但整体而言，其成功标志着AI在基础科学领域取得了划时代的成果。AlphaFold的突破激励了更多“AI for Science”的研究浪潮，例如用于RNA结构预测、蛋白质动力学、分子设计等方向的AI模型纷纷涌现，预示着AI将成为生命科学研究的基本工具之一。

**AI在高能物理数据分析中的贡献**

高能物理实验（如大型强子对撞机LHC）每年产生海量的数据，包含可能指向新物理发现的稀有事件。人工分析如此庞大的数据几乎不可能，AI技术因此深度融入了高能物理的数据处理链。从触发系统开始，机器学习算法用于**实时挑选感兴趣的碰撞事件**。例如，在ATLAS和CMS实验中，训练了深度神经网络来根据探测器信号快速判断碰撞产物类型，以决定是否保存该事件。这大大提高了记录关键事件（例如希格斯玻色子衰变）的效率。在离线分析阶段，研究者也广泛采用机器学习对事例进行分类和回归分析，以测量粒子属性或发现异常信号。一个典型的贡献是**利用AI的异常检测来寻找新粒子的踪迹**。Argonne国家实验室的科学家与ATLAS合作，应用深度自编码网络扫描碰撞数据，寻找与标准模型预测不符的异常事例 ([Machine learning could help reveal undiscovered particles within data from the Large Hadron Collider | Argonne National Laboratory](https://www.anl.gov/article/machine-learning-could-help-reveal-undiscovered-particles-within-data-from-the-large-hadron-collider#:~:text=As%20part%20of%20the%20ATLAS,scientists%20from%20172%20research%20organizations)) ([Machine learning could help reveal undiscovered particles within data from the Large Hadron Collider | Argonne National Laboratory](https://www.anl.gov/article/machine-learning-could-help-reveal-undiscovered-particles-within-data-from-the-large-hadron-collider#:~:text=The%20team%20leveraged%20a%20brain,It))。这种“不依赖具体模型”的方法有助于发现意料之外的新物理迹象。结果表明，**机器学习能够从巨大且复杂的数据集中筛选出潜在的新粒子信号，提高发现概率** ([Machine learning could help reveal undiscovered particles within data from the Large Hadron Collider | Argonne National Laboratory](https://www.anl.gov/article/machine-learning-could-help-reveal-undiscovered-particles-within-data-from-the-large-hadron-collider#:~:text=Particle%20physicists%20are%20tasked%20with,that%20scientists%20suspect%20is%20incomplete))。另一个实例是利用生成模型（如GAN）**替代耗时的蒙特卡洛模拟**，以更快地产生逼真的碰撞事例用于分析训练，从而缓解计算瓶颈。在粒子鉴别方面，深度学习模型结合探测器多维信息，实现了比传统判别方法更高的轻子/强子辨识准确率，为精确测量提供了帮助。高能物理社区也在探索所谓“物理信息机器学习”，将基本对称性和物理定律融入模型，以提高外推可靠性。总的来说，AI已经成为高能物理发现的“助推器”。事实上，从1990年代早期神经网络用于粒子鉴别开始，机器学习就伴随该领域发展 ([Learning by machines, for machines: Artificial Intelligence in the world's largest particle detector | ATLAS Experiment at CERN](https://atlas.cern/Updates/Feature/Machine-Learning#:~:text=High,Bs%20meson%20at%20the%20LHC))。如今随着深度学习的兴起，高能物理正以AI为利器，在庞杂的数据中挖掘微弱信号，验证标准模型并探寻其背后的新物理疆域。

**AI在药物设计中的应用**

药物研发是一个耗时长、成本高的复杂过程，AI大模型正为其带来革命性变化。以新药发现为例，传统的小分子药物筛选需要从成千上百万化合物中寻找有效候选，而AI可以显著缩小这一搜索空间。**生成式深度学习模型**能够在“化学空间”中学会分子结构的表示，并创造性地设计出具备特定性质的新分子。Insilico Medicine公司利用生成对抗网络和强化学习，设计出针对特定蛋白靶标的新化合物，不仅满足活性要求，还具有良好的药物性质。著名的案例是Insilico在2019年用AI设计出针对纤维化疾病的新分子（后来命名为INS018\_055），从靶点选择到先导化合物优化仅用了约18个月 ([From Start to Phase 1 in 30 Months | Insilico Medicine](https://insilico.com/phase1#:~:text=On%20this%20same%20day%20one,in))。经过临床前验证后，该候选药物进入临床试验，总用时不到30个月——**远远快于制药行业常规数年的周期** ([From Start to Phase 1 in 30 Months | Insilico Medicine](https://insilico.com/phase1#:~:text=We%20are%20thrilled%20to%20announce,speed%20for%20the%20pharmaceutical%20industry))。2022年，这一AI发现并设计的抗纤维化新药正式进入了人体临床I期试验，成为业界首个由AI生成的新药物候选 ([From Start to Phase 1 in 30 Months | Insilico Medicine](https://insilico.com/phase1#:~:text=We%20are%20thrilled%20to%20announce,speed%20for%20the%20pharmaceutical%20industry))。除了全新设计药物，AI在**药物重定位**（即已有药物的新适应症）方面也大显身手。2020年新冠疫情初期，初创公司BenevolentAI运用其知识图谱驱动的AI系统，在海量生物医学文献中寻找可作用于新冠病毒感染路径的已上市药物。结果在短短几天内，它**识别出一款原用于风湿病的药物Baricitinib可能对抗新冠** ([RECOVERY Trial Results Demonstrate Baricitinib Reduces Deaths In Hospitalised COVID-19 Patients | BenevolentAI (AMS: BAI)](https://www.benevolent.com/news-and-media/press-releases-and-in-media/recovery-trial-results-demonstrate-baricitinib-reduces-deaths-hospitalised-covid-19-patients/#:~:text=,0.001))。BenevolentAI团队迅速在《柳叶刀》上发表这一AI生成的假说，随后临床试验验证了Baricitinib可降低新冠重症患者的死亡率 ([RECOVERY Trial Results Demonstrate Baricitinib Reduces Deaths In Hospitalised COVID-19 Patients | BenevolentAI (AMS: BAI)](https://www.benevolent.com/news-and-media/press-releases-and-in-media/recovery-trial-results-demonstrate-baricitinib-reduces-deaths-hospitalised-covid-19-patients/#:~:text=,0.001))。该药后来被各国纳入新冠治疗方案，并获得美国FDA正式批准用于新冠住院患者 ([FDA Converts Emergency Approval Of Baricitinib — First Identified As A COVID Treatment By BenevolentAI — To A Full Approval | BenevolentAI (AMS: BAI)](https://www.benevolent.com/news-and-media/blog-and-videos/fda-converts-emergency-approval-baricitinib-first-identified-covid-treatment-benevolentai-full-approval/#:~:text=The%20U,19))。这是AI辅助药物发现的经典成功案例。此外，制药企业也利用深度学习预测候选药物的ADMET性质（吸收、分布、代谢、排泄和毒性），筛除不良化合物以节省实验资源。AI还可以优化药物合成路线（如利用NLP模型进行**逆合成分析**，给出目标分子的合成方案 ([Twenty ways AI is advancing chemistry | News | Chemistry World](https://www.chemistryworld.com/news/twenty-ways-ai-is-advancing-chemistry/4020269.article#:~:text=18%20Automated%20synthesis%20planning))），以及通过分析海量生物实验数据发现新的药物作用机制。在临床试验设计上，机器学习可用于患者分层和入组预测，提高试验成功率。总体而言，AI大模型已深度介入药物研发链条的各个环节，实现了从**分子设计、靶标发现、药物重用到研发决策**的赋能，正显著加速新药的发现和上市进程。

**AI用于气候预测的案例**

全球气候变化的复杂性和潜在影响使得提高预测能力至关重要。AI技术正被气候科学家和机构采用，来改进气候预测和服务决策。美国国家海洋和大气管理局（NOAA）和美国航空航天局（NASA）等机构近年启动了多项AI气候计划。例如，NASA与IBM合作开发了气象-气候基础模型“Prithvi”，希望将其用于**天气预报、季节气候展望以及长期气候情景分析** ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=foundation%20model%20will%20help%20us,%E2%80%9D)) ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=foundation%20model%20will%20help%20us,%E2%80%9D))。这一模型训练自NASA数十年的地球观测资料，能够模拟大气中的复杂物理过程，并通过微调应用于不同任务 ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=Foundational%20models%20are%20large,broad%20range%20of%20additional%20scenarios)) ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=With%20the%20Prithvi,in%20weather%20and%20climate%20models))。通过这一AI模型，研究人员可以更好地**预测极端天气事件并改进气候模拟的区域细节** ([NASA, IBM Research to Release New AI Model for Weather, Climate - NASA Science](https://science.nasa.gov/open-science/ai-model-weather-climate/#:~:text=With%20the%20Prithvi,in%20weather%20and%20climate%20models))。除了官方机构，科技公司和研究机构也投入AI用于气候问题的创新实践。前述的Pangu-Weather是天气预测的里程碑成果，展示了AI在中短期气候预测中的潜力 ([Prestigious science journal Nature publishes paper about Pangu Weather AI Model authored by HUAWEI CLOUD researchers - Huawei](https://www.huawei.com/en/news/2023/7/pangu-ai-model-nature-publish#:~:text=Pangu,independent%20verifications%20of%20these%20capabilities))。另一个值得关注的方向是**将AI用于气候变化影响的预测**，例如利用深度学习分析卫星遥感数据，预测极端天气导致的粮食减产、森林火灾风险等。NASA正开发地球观察领域的AI模型，将卫星数据转换成高分辨率的洪水、火灾地图，以帮助人们应对气候变化带来的环境挑战 ([A new AI model could help track and adapt to climate change](https://research.ibm.com/blog/geospatial-models-nasa-ai#:~:text=A%20new%20AI%20model%20could,reveal%20our%20planet%27s%20past))。在学术界，研究人员使用机器学习改进传统气候模型中的次网格过程，例如降水的对流参数化，从而提高长期气候预测的准确性。还有团队应用生成模型对气候数据同化，以在数据缺口处提供合理的估计。总的来说，AI在气候科学中的应用案例表明，它能够**处理海量多源观测、加速复杂模型运行并识别潜在模式**，为改进气候预测和服务决策提供了新工具。例如，借助AI的气候预测模型可以更及时准确地发出灾害预警，或评估不同减排政策对未来气候的影响，从而帮助社会更好地适应和缓解气候变化。虽然气候系统的复杂性意味着AI模型也需与传统物理模型相结合，但这些案例显示了AI作为新一代气候工具的光明前景。

**AI在基础科学研究中的潜力**

结合以上各领域的进展，可以发现AI大模型在基础科学研究中蕴含巨大的潜力。首先，**AI能够加速科学研究进程**。许多过去需要数月数年才能完成的计算或实验，在引入AI后可以数日甚至几小时内完成。例如，AlphaFold用几天计算预测一个蛋白结构，而传统结构生物学实验可能需要多年努力。Insilico的AI新药发现将临床前研发周期从数年缩短到不到30个月 ([From Start to Phase 1 in 30 Months | Insilico Medicine](https://insilico.com/phase1#:~:text=We%20are%20thrilled%20to%20announce,speed%20for%20the%20pharmaceutical%20industry))。这种加速效应意味着科学家可以更快地验证假设、迭代实验，从而整体上提升科研产出。其次，**AI与传统计算方法结合能够取长补短**。物理驱动的模型提供可靠性和可解释性，而数据驱动的AI模型提供灵活性和精确拟合复杂现象的能力。将二者结合的“混合模型”已在诸多领域显现威力，例如在气候建模中，用机器学习校正物理模型的偏差，在化学中将量子力学约束融入神经网络以提高分子模拟精度等。这种融合有望成为未来科学计算的重要趋势。第三，AI大模型可以担当“智能助手”，**从繁琐的数据处理中解放科研人员**，让他们将精力更多投入创造性思考。AI善于识别模式、归纳规律，这恰为人类提供了发现新现象的线索。例如，AI在数据库中发现某种隐藏的关联关系，提示科学家去验证新的理论假说。第四，AI还可以**探索人类未及的庞大搜索空间**。在组合爆炸的问题上（如高维优化、天文搜索），AI能够有效地在巨大的参数空间中寻找高质量解，比如AlphaTensor在茫茫算法空间中找到更优方案 ([Discovering novel algorithms with AlphaTensor - Google DeepMind](https://deepmind.google/discover/blog/discovering-novel-algorithms-with-alphatensor/#:~:text=In%20our%20paper%2C%20published%20today,way%20to%20multiply%20two%20matrices))。这种能力有望应用到诸如基因组合功能研究、新材料配方发现等需要从海量组合中找答案的领域。最后，**未来AI在科学中的应用边界不断拓展**。随着多模态和更通用的基础模型出现，AI或许可以同时处理文字、图像、表格等各种科学信息，充当跨领域的“数字科学家”。例如，有朝一日一个AI系统可以阅读所有相关文献、分析实验数据并提出有意义的研究假说。这种场景已经在部分简单案例中初现端倪。总体而言，AI大模型被寄予厚望：它不仅是工具，更可能引发科研范式的转变，让数据密集型的基础科学进入一个**人机协同、高速迭代**的新阶段。

**AI大模型的局限性与挑战**

尽管AI在基础科学中前景光明，但也存在诸多局限和挑战，需要理性审视和积极应对：

* **计算成本与能源消耗**：训练和运行大型AI模型往往需要巨大的算力和电力。例如训练GPT-3这类1750亿参数模型一次就消耗约1287 MWh电能，足以供一个美国家庭用电120年 ([Optimization could cut the carbon footprint of AI training by up to 75% | University of Michigan News](https://news.umich.edu/optimization-could-cut-the-carbon-footprint-of-ai-training-by-up-to-75/#:~:text=%E2%80%9CAt%20extreme%20scales%2C%20training%20the,electrical%20engineering%20and%20computer%20science))。科学领域的专用模型（如AlphaFold、气候基础模型等）也需要大量GPU计算才能达到高精度。这带来了高昂的成本和碳足迹，不利于可持续科研。如何提高模型效率、利用更节能的硬件或算法，是AI大模型广泛应用必须解决的问题。
* **结果的可解释性与可靠性**：许多深度学习模型本质上是“黑箱”，缺乏明确的物理或生物含义。这在科学研究中引发对结果可靠性的担忧。科研人员需要理解模型给出预测背后的原因，以便对其进行信任和采用。例如，AlphaFold虽然准确，但我们尚难直接从其深度网络权重中提炼出明确的折叠规则。同样，AI预测到的新材料或新药物，需要通过实验验证才能被接受。这种**可解释性欠缺**和**结果可验证性**的挑战，要求发展更透明的模型架构和不确定性量化方法，以及建立AI预测与实验之间的良性互动循环。
* **数据质量与偏差**：AI模型的性能高度依赖训练数据。如果数据集中存在系统偏差或错误，模型可能学到有偏见的规律并给出误导性结果 ([Never Assume That the Accuracy of Artificial Intelligence Information ...](https://unu.edu/article/never-assume-accuracy-artificial-intelligence-information-equals-truth#:~:text=,data%20will%20produce%20biased))。在科学中，这可能导致错误的发现宣称。例如，训练数据主要来自已知理论的结果，AI可能会倾向于重复已有知识而难以外推发现新现象；又或者医学AI由于训练集缺乏多样性而对某些人群预测不准。因此，确保训练数据的多样、可靠以及对模型偏差进行检测和纠正，是AI在科学应用中必须重视的问题。跨领域的数据融合也可能遇到尺度不一致、测量误差不同的问题，需要精心处理。
* **跨学科应用的难点**：虽然AI有望联通不同学科知识，但各领域的数据格式、术语体系和问题表述差异巨大，给统一的模型带来挑战。一方面，大模型需要足够大的跨学科训练语料或数据，这本身就难以获取或清理；另一方面，不同学科对结果的验证标准不同，AI需要满足不同领域的严格性，这增加了应用难度。例如，一个在物理上有效的模型，如何兼顾生物学数据的噪声特点？此外，学科间合作需要科研人员本身具有跨领域素养，能够正确解读AI给出的跨学科建议。培养既懂AI又深谙领域科学的复合型人才、建立良好的跨学科交流平台，都是需要长期努力的方向。

**总结与展望**

总而言之，人工智能大模型正深刻影响着基础科学研究的方式。在物理、化学、生命科学、天文学、地球科学、数学等众多领域，AI已经展示了**加速计算、发现模式、处理大数据**的非凡能力，从AlphaFold破解蛋白质结构，到GAN加速宇宙学模拟，再到深度网络助力新药创制，诸多实例证明了AI可以成为拓展人类科学版图的有力工具。可以预见，随着算法的进步和计算资源的普及，AI在科学中的应用将更加深入：未来可能出现融合多学科知识的通用科学AI助理，为研究者提供从灵感产生到实验设计的一体化支持；自动化实验室与AI结合将实现科学研究的高通量和智能化；以前被视为不可能的问题（如复杂系统的全面预测）在AI的帮助下有望取得突破。当然，我们也必须清醒地认识到AI大模型不是万能的“科学魔杖”，它需要在人类专家的指导下使用，并通过严格的实验和理论校验来确保可靠性。为此，在展望未来时，我们需要建立起**负责任的AI科研范式**：包括改进模型能耗表现、提高模型透明度、加强对AI结论的独立验证，以及制定科研伦理规范等。展望未来，人工智能大模型与基础科学的融合将不断深化。人类将和智能机器一起，探索自然界更深层的奥秘。可以期待，一个**人机协同创新**的科研新时代正渐行渐近，在这个时代中，AI将作为强大的工具和伙伴，帮助我们更快更好地理解宇宙万物、推动科学前沿的发展。

本报告内容采用 CC BY-NC-SA 4.0 国际协议授权发布。

仅供非商业用途使用，欢迎自由传播、修改、整理；

请保留作者署名 Raelon Veritas Lee 并附上原始仓库链接：

https://github.com/roclee2692/deep-research-openai-gpt

This work is licensed under the

Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International License (CC BY-NC-SA 4.0).

You may share and adapt it for non-commercial purposes, but please credit the author and link back.

License link: https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/