
AI科学家主导的虚拟实验室加速生物医学研究

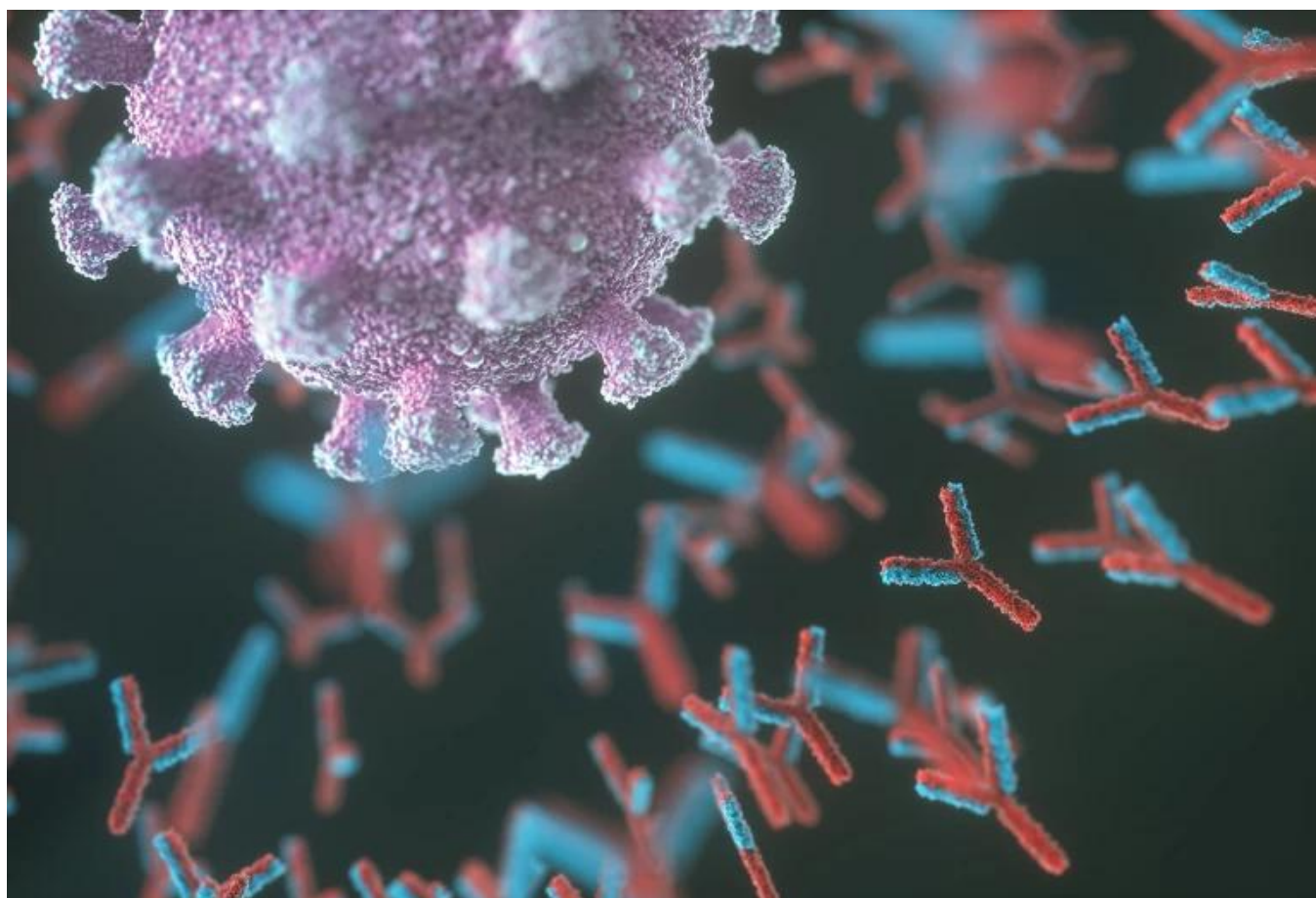
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30769.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

AI科学家主导的虚拟实验室加速生物医学研究

。为了利用人工智能（AI）实现科学发现的自动化，研究人员创建了一个虚拟实验室。该实验室通过几个“AI科学家”——具有明确科学角色的大型语言模型（LLMs），合作实现人类科学家设定的目标。



虚拟实验室使用几个LLMs来设计可以与新型冠状病毒结合的抗体片段。图片来源：KTSDESIGN/Science Photo Library via Getty

?

近日在bioRxiv公布的预印本中，研究人员对虚拟实验室进行了描述。该实验室能够设计出一种名为纳米体的抗体片段——可以与导致新冠肺炎的病毒结合，并在短时间内提出近100种这样的纳米结构。

“这些虚拟实验室的AI科学家已被证明能够完成很多任务。”美国斯坦福大学的计算生物学家James Zou说，“我们对探索虚拟实验室在不同科学领域的潜力感到非常兴奋。”

美国科罗拉多大学安舒茨医学院研究AI医疗应用的高彦君（音）表示，虚拟实验室“代表了一种将AI视为合作者，而不仅仅是工具的新范式”。但她补充说，人力投入和监督仍然至关重要。“现阶段还不能完全信任AI做出的决定。”

目前，世界各地的科学家已经开始探索LLMs在加快研究方面的潜力，包括培养一名“AI科学家”执行部分任务——从提出假设、设计实验到起草论文。但Zou说，LLMs的大多数研究都集中在狭窄范围内的实验应用上，而不是探索它们在跨学科研究中的潜力。

于是，他和同事建立了虚拟实验室，将不同领域的专业知识结合起来。

他们首先为虚拟实验室训练了两个AI科学家：一个是团队的首席研究员（PI），拥有AI研究方面的专业知识；另一个是“科学评论家”，负责在整个过程中发现LLMs的错误和疏忽。他们还还为这些AI科学家设定了一个目标——设计新的纳米体靶向新型冠状病毒，并开发其他可以实现这一目标的LLMs。

然后，PI进一步创建并培训了另外3名AI科学家，以支持其研究工作。这些“科学家”中的每一位都接受过特定学科的培训——免疫学、计算生物学或机器学习。Zou说：“这些不同的AI科学家会有不同的专业知识，它们会一起解决不同类型的科学问题。”

AI科学家独立处理虚拟PI分配的任务，例如计算参数或为新的机器学习模型编写代码。它们还会利用其他AI研究工具，如蛋白质设计工具AlphaFold和Rosetta。一位人类科学家会定期通过“团队会议”指导LLMs，并评估它们的进展。

“虚拟实验室的设计是自主的，因此AI科学家可以相互讨论。它们决定要解决什么问题，采取什么方法，以及如何实施这些方法。”Zou说，“人类科学家则专注于提供更高层次的反馈，以指导AI科学家的研究方向。”

这些AI科学家最终设计出92个纳米体，其中90%以上在验证研究中被证明可以与新型冠状病毒的原始变体结合。其中两个纳米体还显示出靶向病毒新变种的希望。

研究人员乐观地认为，虚拟实验室可以助力多个领域的科学研究。“我们把它设计成一个非常通用的平台，并利用这些虚拟实验室的AI科学家解决不同的科学问题。”Zou说。

但他强调，人工干预和反馈是虚拟实验室成功的关键。“我们仍然需要验证和确认AI科学家提出的这些假设，这是进行现实世界实验的重要之处。”

相关论文信息：<https://doi.org/10.1101/2024.11.11.623004>

作者：李惠钰 来源：中国科学报

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发