AI智能体驱动的传统计算交叉学科的发展

谈攀

上海人工智能实验室

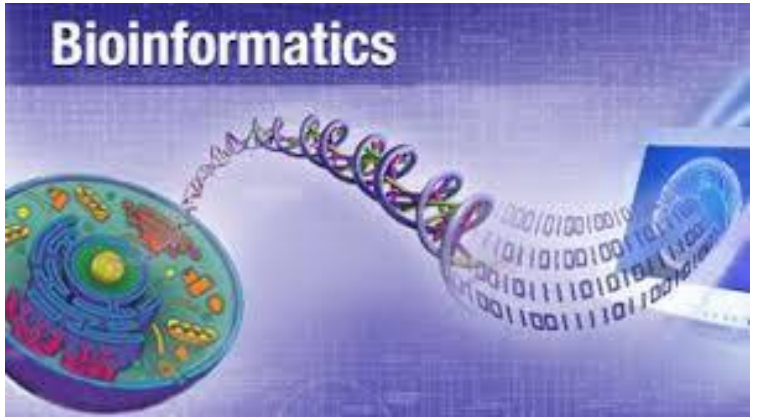
目录

- 背景
- 科学计算中的AI Agent
- 智能体驱动的分子动力学模拟
- 总结与展望

背景

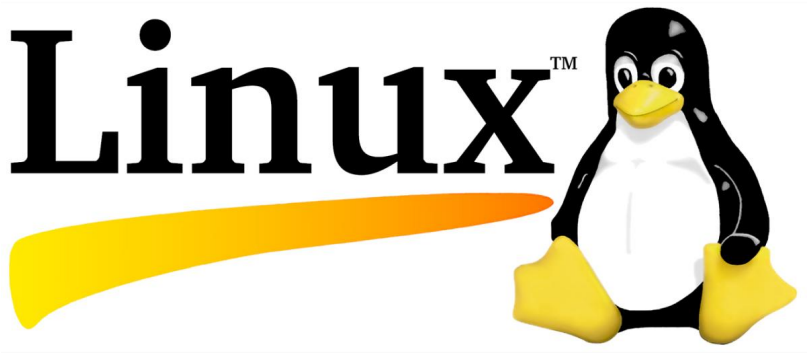
- 传统科学计算极度依赖专业工具

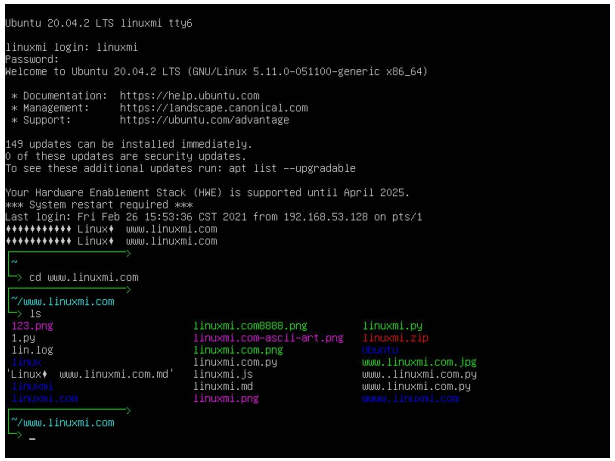




背景

- 学习成本很高：Linux，命令行操作，基本原理





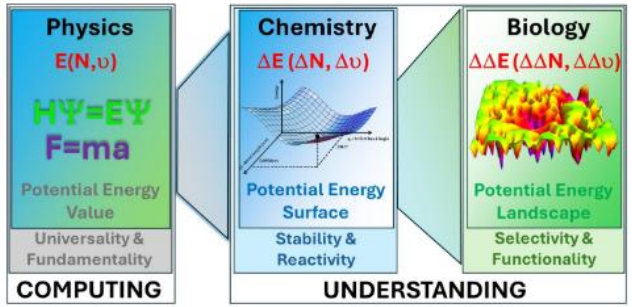
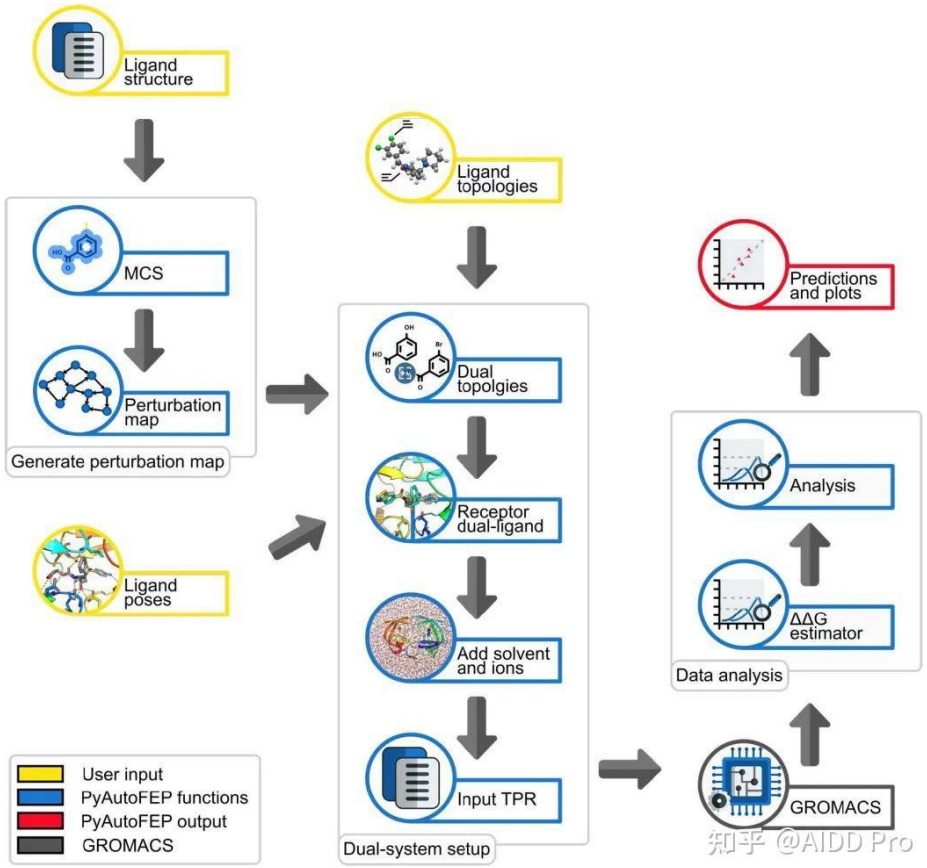


Figure 1. Ontological relations among physics, chemistry, and biology.

背景

- 碎片化的工作流



繁琐的流程

```
Fatal error:
There are inconsistent shifts over periodic boundaries in a molecule type
consisting of 1582 atoms. The longest distance involved in such interactions
is 13.184 nm which is above half the box length. Either you have excessively
large distances between atoms in bonded interactions or your system is
exploding.

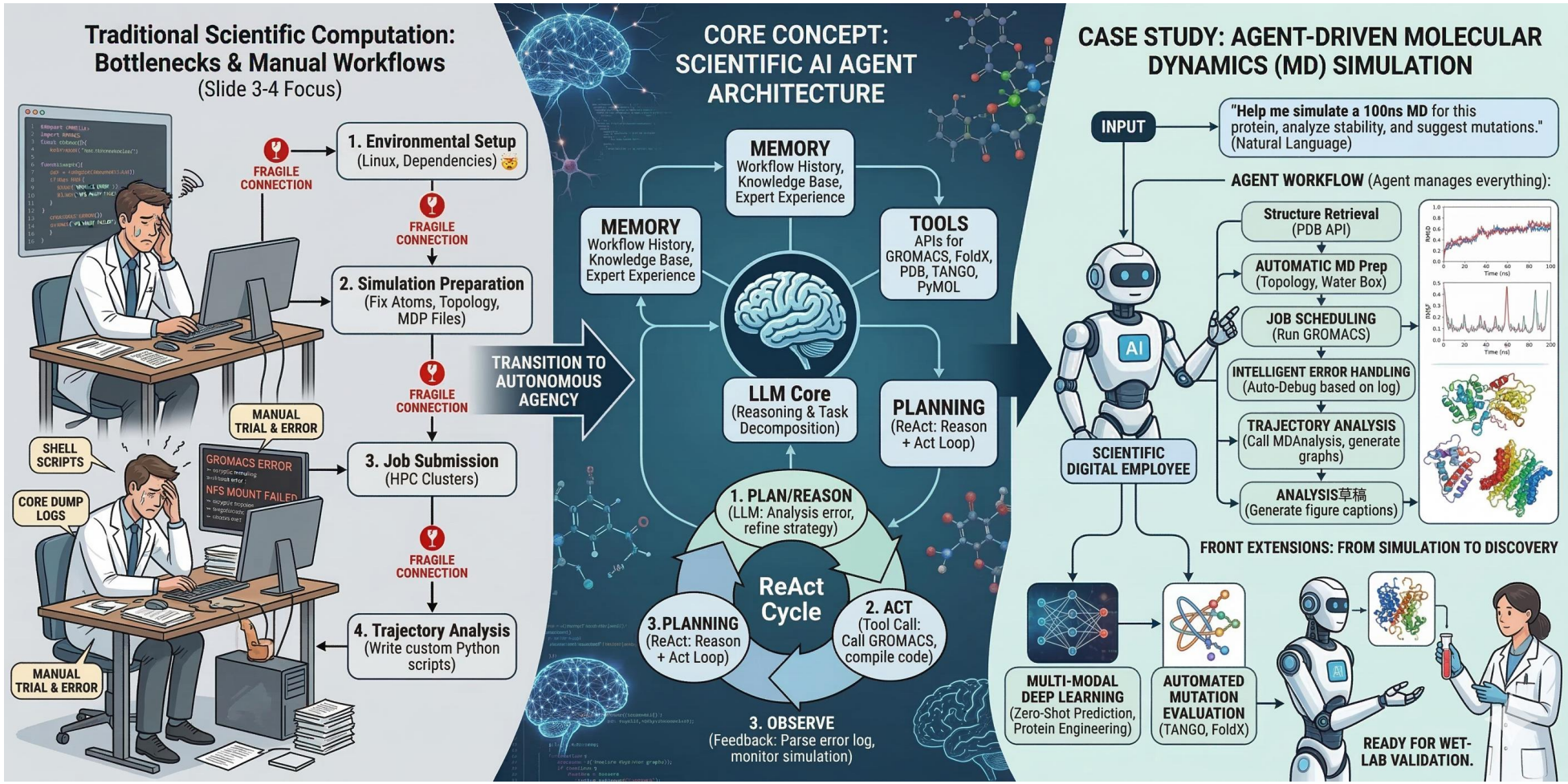
For more information and tips for troubleshooting, please check the GROMACS
website at http://www.gromacs.org/Documentation/Errors
```



目录

- 背景
- 科学计算中的AI Agent
- 智能体驱动的分子动力学模拟
- 总结与展望

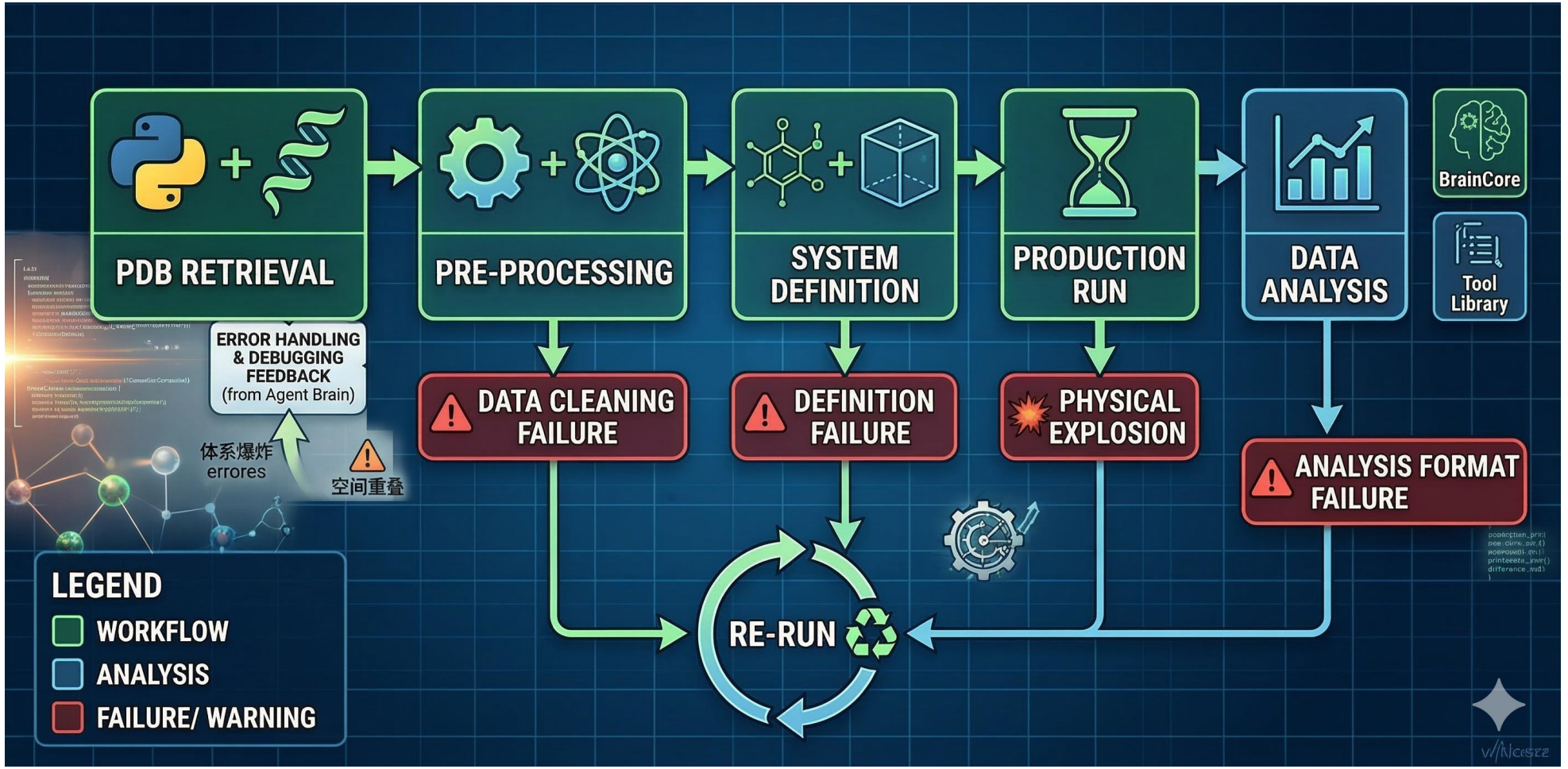
从“工具”到“智能体 (Agent)”



目录

- 背景
- 科学计算中的AI Agent
- 智能体驱动的分子动力学模拟
- 总结与展望

分子动力学 (MD) 工作流



Agent workflow

智能体驱动的分子动力学模拟

MD 算 法 流 程 概 览

1. 输入初始条件

作为原子位置函数的势能相互作用 V
体系中所有原子的位置 r
体系中所有原子的速度 v

⇓

对所需计算的步数**重复2,3,4步**

2. 计算力

任一原子的受力

$$\boldsymbol{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \boldsymbol{r}_i}$$

等于原子之间的非键相互作用力

$$\boldsymbol{F}_i = \sum_j \boldsymbol{F}_{ij}$$

加上原子之间的键合相互作用力(可能与1, 2, 3或4个原子相关), 再加上约束和/或外力
可能需要计算势能, 动能和压力张量

⇓

3. 更新构型

通过数值求解牛顿运动方程模拟原子的运动

$$\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\boldsymbol{F}_i}{m_i}$$

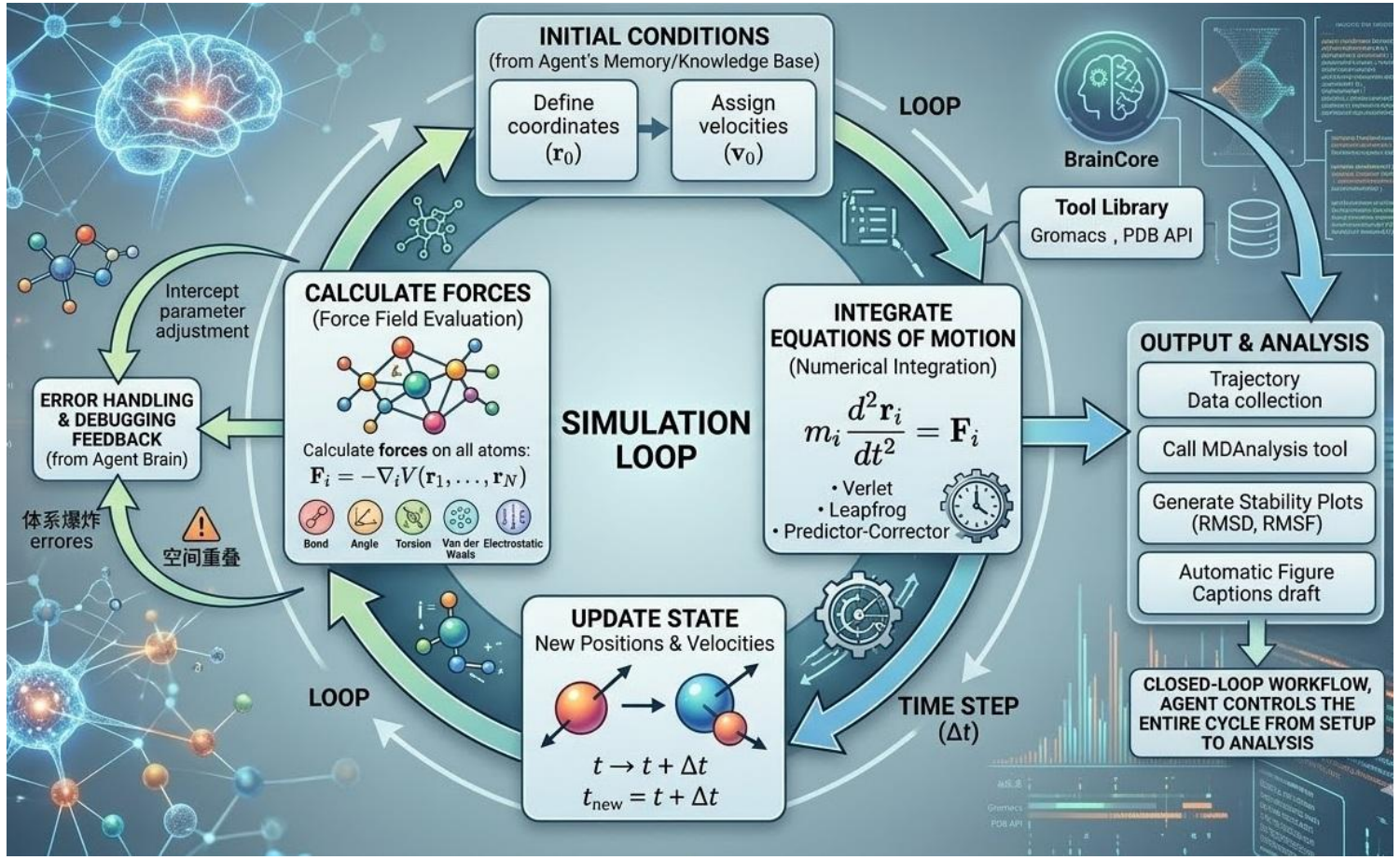
or

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}_i;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{F}_i}{m_i}$$

⇓

4. 如果需要, 输出单步结果

输出位置, 速度, 能量, 温度, 压力等



自动化构建与提交



1. 下载PDB结构，并调用GROMACS跑MD

智能捕获与自动 Debug

Venus 机器人 | OpenClaw on Venus

> 回复 李明辰：@Venus 自由调试吧

找到原因了（日志已写在 `/home/chengjiabei/results_118574.fs/run.log`）：

失败原因非常明确：

GROMACS 在 `grompp` 阶段报了 **1 个 warning**，默认不允许继续，所以直接退出：

> **Fatal error: Too many warnings (1).**
> 如果确认无害，需要加 `-maxwarn` 参数。

换句话说：

模拟没跑起来不是因为坏了，而是被"太谨慎的警告机制"拦住了。

✅ 目前的结果保存位置：

`/home/chengjiabei/results_118574.fs/`

下一步我可以这样处理（最简单的修复）：

在 `gmx grompp` 时加 `-maxwarn 1`，让它忽略这个小警告，然后继续做能量最小化/MD。

要我直接按这个方式重提作业吗？

2. 出BUG了，自动调试

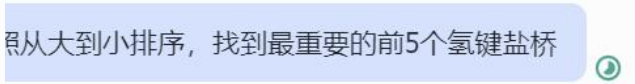
数据提取与初步分析

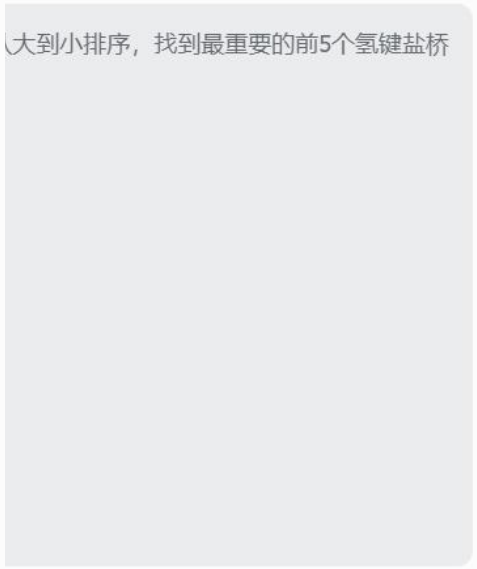


3. 简单分析结果

常规物理化学量的计算







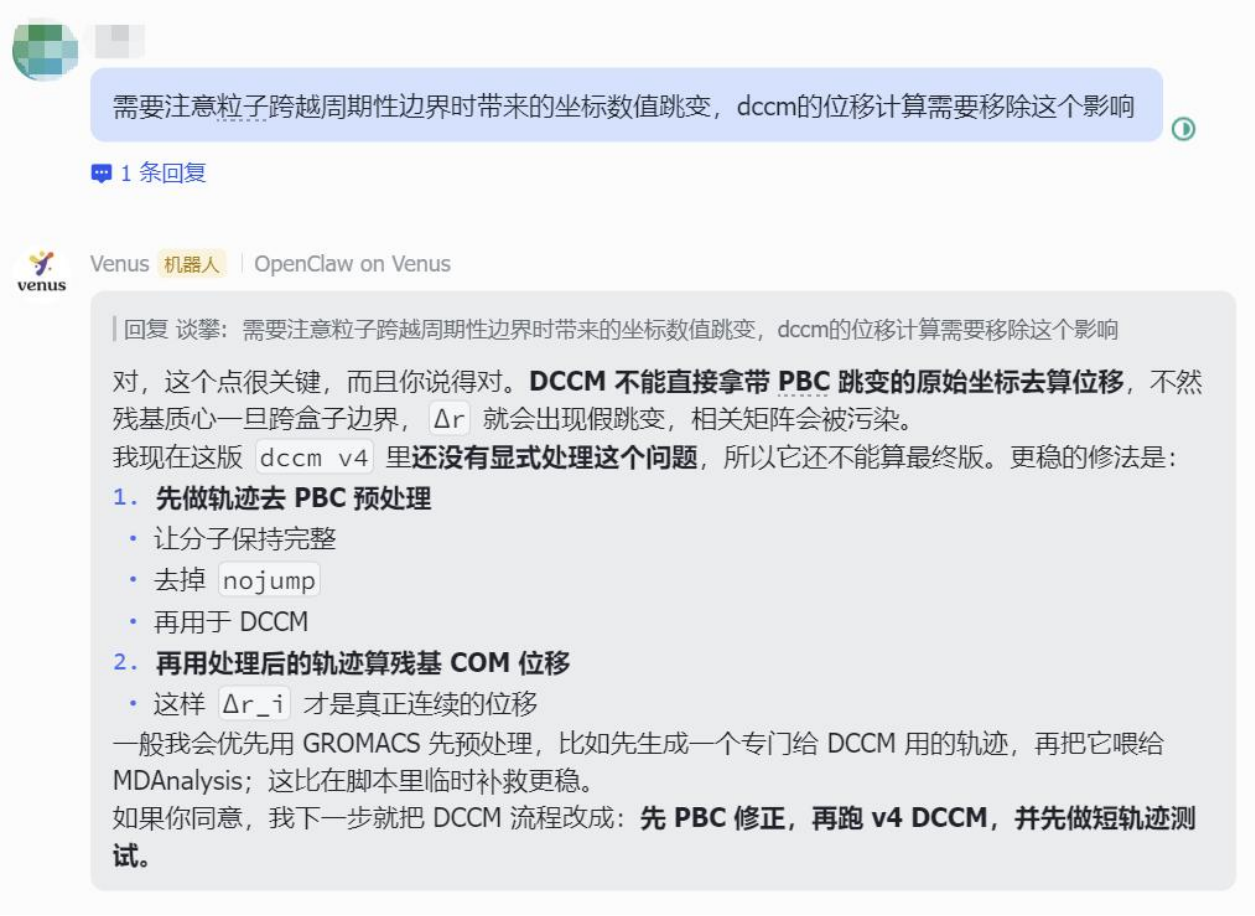
4. 更加专业的分析

复杂计算问题的分解



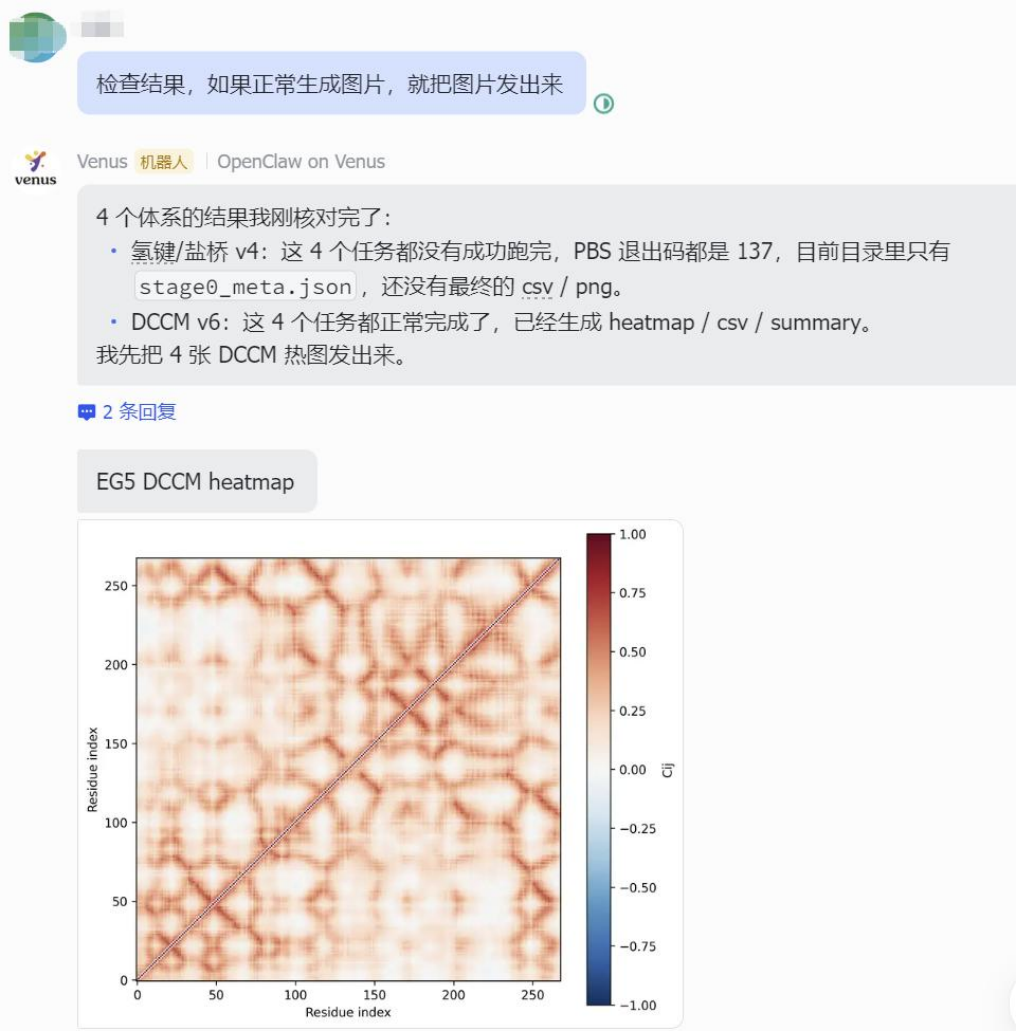
5. 更加复杂的多步分析

专家知识反馈



6. 技术上有些细节需要专家指引，不然其不会主动考虑问题。

结果与图表生成



7. 自动绘图

总结

- 目前以openclaw为代表的AI Agent可以通过对话式交互完成MD的全流程，甚至是复杂的数据分析过程。
- MD是由流水线式的软件工具链组成的套件，其适合AI Agent来做整合。
- 类似地，传统计算生物信息学或者其他以软件工具链集成来的物理化学计算，都可能被AI Agent接管。

FARS (Fully Automated Research System)



FARS（全自动研究系统）已运行417小时，累计生产研究论文166篇

展望

- 在OpenClaw这样的agent冲击下，很多经典领域里依赖熟练度，经验积累和流程训练建立起来的知识壁垒，正在失效。
- 越是标准化，成熟的领域，越容易最先被AI重构。
- 在计算机领域AI已经能完成从idea生成到撰写论文的全流程。
- 思考：在新技术条件下，自己的时间和精力应该更多投入哪里？