迈向自主科学发现：美国智能实验室建设情况和发展趋势

王兆然
（中国生态环境部，北京 100006）

摘 要：智能实验室以人工智能、大数据和实验室自动化为核心，在科学假设生成、实验路径优化和数据收集分析等环节实现闭环自动化，这种新兴的范式成为材料科学、化学、生物学等学科的前沿热点。美国在智能实验室领域布局积极，联邦政府多个科技管理部门正着手推动人工智能科学模型、智能实验室建设，OpenAI、谷歌等推出协作科学家平台。智能实验室为数据驱动的科学研究“第四范式”提供强劲动力，正朝通用机器人科学家、高通量自主（self-driving）科学设施和分布式云端实验室方向演进。

关键词：智能实验室；人工智能；自主实验；科学发现；实验室自动化
中图分类号：G323；TP399 **文献标识码**：A DOI：10.3772/j.issn.1009-8623.2025.07.005

人工智能正在全面重塑科学研究的各个领域。以人工智能为核心驱动力，以实验室自动化为技术支撑的智能实验室，正在深刻地变革传统实验研究模式，大幅提升研究效率，成为材料科学、化学和生物学等学科研究的前沿热点。智能实验室不仅能够显著提升实验的自动化水平，更有助于优化和扩充现有科学数据库。应用和推广智能实验室技术，还能为科技管理部门整合研究资源、构建大型综合性跨学科研究网络进一步提供支持。

1 研究背景

材料、化学和合成生物学等学科普遍采用试错法（trial-and-error approach）作为核心研究范式[1]。这种方法通过系统性调节材料组分比例、反应条件或生物路径参数，以寻求最优性能配置。然而，随着实验变量、维数的增加，可行域呈指数级增长，导致“组合爆炸”和“维数灾难”。以材料组分优化为例，如果考虑 5 种组分，每种组分设置 10 个浓度水平，则理论组合空间达 10^5；如果考虑 10 种组分，每种组分设置 20 个浓度水平，则理论组合空间高达 10^{20}，这种指数级增长使得高维度计算和实验复杂性急剧上升。据统计，一种新材料的发现需要 10 ～ 20 年的时间和 1 亿美元的投入[2-3]，药物发现需要 10 ～ 15 年的时间和高达 26 亿美元的投入[4]。

近年来，人工智能迅速渗透科学研究的方方面面，为解决上述挑战提供了新契机[5]。从推导数学猜想，到在化学、合成生物学等各领域提出科学假设，再到促进材料发现和材料结构优化等。实验室自动化正迅速由部分仪器、环节的自动化，向系统提出科学假设、优化实验方案、设计和执行实验、完成结果分析、规划后续实验的智能实验室方向发展。在理想的智能实验室中，研究人员扮演“指挥官”“设计师”的角色，完成如研究目标设定、标准评估和约束条件设定等目标性、框架性工作，在实验过程中可根据需要进行优化和介入。以人工智能为核心的智能实验室逐渐展现出以下 4 个方面的优势。

一是优化实验方法。在科学实践中，研究人员越来越多地运用强化学习等机器学习范式和贝叶斯优化等先进算法框架优化实验路径，减少实验次数。强化学习将实验流程建模为马尔可夫决策过

作者简介：王兆然（1986—），男，硕士，工程师，主要研究方向为科技政策。
收稿日期：2025-05-20

程，通过价值函数近似和经验回放机制实现自适应优化；贝叶斯优化[6]结合高斯过程代理模型和获取函数等进行全局优化，在数据稀缺场景可大幅减少实验次数。利物浦大学的移动机器人化学家在10维变量空间中执行688次自主实验，成功发现活性提升6倍的光催化剂配方[7]。

二是生成科学假设。得益于人工智能在自然语言处理方面的长足进步，通过深度学习和知识图谱等技术[8]，自动化数据采集系统能够分析海量的科学文献、实验数据和跨领域知识，识别隐藏的模式和关联性。例如，谷歌DeepMind实验室开发的人工智能蛋白质结构预测程序AlphaFold，已生成超过200万种蛋白质结构，准确率超过90%[9]。

三是数据收集自动化。与传统人工数据记录相比，智能实验室配备了传感器网络和自动化数据采集系统，能够以毫秒级精度捕获温度、压力、pH和光谱特征等多维参数的变化，在实验过程中收集大量标准化实验数据，以供系统分析实验结果、优化实验路径。同时，数据收集自动化能够极大地充实科学数据库，为科学研究其他要素的自动化提供支撑,并为人工智能驱动的科学研究提供重要的“数据原料”[10]。

四是实验步骤闭环。将实验室自动化设备、智能传感器、机器人和人工智能等技术进行创造性集成，实现研究任务中实验设计、数据收集和模型发现之间的自主闭环迭代。进一步地，在材料、化学等领域，研究团队将假设生成、分布式实验和云端决策相结合，构建基于算法和数据驱动的模块化机器人研究平台[11]。

2 重点领域智能实验室研究进展

智能实验室已在材料、化学和合成生物学等不同领域展示了加速科学发现的潜力，部分领先的人工智能企业和研究团队积极围绕人工智能打造“协作科学家”，美国家实验室等已开始探索应用智能实验室技术，从而实现大型装置的自主化升级。重点领域进展如下：

2.1 人工智能协作平台的研究进展

在人工智能大模型高速发展的推动下，美国产业界、学术界积极开发面向科学研究的协作平台，支持自然语言交互，具备文献检索、代码生成、实验设计和执行等功能。协作平台能够代替科学家完成大量文献阅读、代码编写和文本编辑等工作，并与科学家进行实时交互。谷歌、OpenAI等一批领先的科技企业，以及卡内基梅隆大学等院所已陆续探索相关平台和应用。

谷歌人工智能协作科学家[12]。2025年2月，谷歌公司发布的人工智能协作科学家，集成了多模态理解、科学推理和实验设计能力。系统具备：科学文献的智能检索与深度理解；跨学科知识图谱构建，自动识别不同研究领域间的潜在关联；实验方案的自动生成与优化；科学假设的逻辑验证与扩展等核心功能。帝国理工大学团队认为，该系统在处理复杂的耐药菌进化机制研究时，不仅在48 h内重现了团队数十年的核心发现，还提出了4种创新性理论假设[13]。

研究搜索引擎[14–15]。2025年2月，OpenAI和Perplexity分别推出名为“Deep Research”的人工智能研究助手，其能够实现自主收集网络文献、实时进行多源信息综合处理和生成结构化报告等功能。

部分领先的研究团队正在积极开发其他人工智能协作平台，例如，卡内基·梅隆大学研究团队基于GPT–4架构开发的科学协作平台[16]，专门针对计算机科学和工程领域进行优化；阿贡国家实验室专为科学计算和工程应用设计的大语言模型AuroraGPT[17]，预计参数的数量将达到1万亿个。

2.2 材料和化学领域的研究进展

材料和化学是智能实验室最热门的研究领域，很多研究团队在不同方向探索了小规模智能实验室建设。

美国能源部（Department of Energy，DOE）劳伦斯伯克利国家实验室的A–Lab[18]。A–Lab是劳伦斯伯克利实验室与谷歌DeepMind实验室深度合作的材料合成智能实验室，应用DeepMind开发的名为GNoME的人工智能材料生成应用，并配备17台精密机器人和自动化设备。A–Lab采用闭环自动化实验策略，由GNoME生成材料结构，由人工智能系统自动提出材料合成方案，机械臂自动执行实验并将数据反馈至系统进行分析优化。该实验室连续运行17 d即成功合成了41种新化合物，成功率达71%。

波士顿大学MAMA BEAR自主研究机器人[19]。

该系统是全球首个完全自主的结构优化平台，集成了计算设计、3D 打印和力学测试等模块。利用贝叶斯优化算法在高维空间搜索最优结构，3D 打印精度达 25 μm。发现的新型分级多孔结构能量吸收效率比传统设计提高了 40%，可以应用于汽车、航空等领域。

美国空军实验室 ARES 自主研究系统[20]。专门用于碳纳米管的化学气相沉积（Chemical Vapor Deposition，CVD）合成优化，配备 6 个并行反应器。针对六维参数（温度、压力、气体流量等）优化挑战，传统方法需要经过数万次的实验，ARES 用主动学习算法仅 600 次迭代就掌握了最优条件，效率提升了 50 倍。系统还配备在线拉曼光谱和电子显微镜，实现对生长过程的实时监控和质量评估。

除上述案例外，该领域的代表性成果还包括：北卡罗来纳州立大学“人工智能化学家”[21]，成功制备发光效率超 95% 的 $CsPbBr_3$ 量子点；国家标准与技术研究院（National Institute of Standards and Technology，NIST）CAMEO 系统[22]，发现新型存储材料 $Ge_4Sb_6Te_7$，数据保持时间比传统材料提高了 10 倍，擦写速度提升了 5 倍；橡树岭国家实验室自主化学实验室[23]，成功开发了硅纳米线电池材料，容量比传统石墨负极提高了 3 倍，配备完整的分析设备可以确保产品质量。

2.3 合成生物学领域的研究进展

生物医药是智能实验室另一个重要的发展领域，该领域实验更复杂、更精密、更难实现标准化，自主化面临更大的挑战[24]。生物医药领域的自动化主要集中在高通量筛选、微流控辅助化学合成和生物测试等方面，并通过人工智能系统改进设计假设。与材料化学领域相比，生物系统的复杂性、实验条件的多样性及严格的生物安全防护要求都使得完全闭环的自主化实验更加困难。

该领域早期的自主化探索如剑桥大学研发的 Adam 和 Eve 机器人科学家[25]，Adam 能够完成面包酵母菌基因功能的自主测试，是首个独立发现新科学知识的机器人，而 Eve 专门应用于疟疾、血吸虫病等疾病的药物筛选测试，每日可筛选超过 1 万种化合物。

该领域较有代表性的智能实验室包括：

Strateos 云实验室平台[26]。Strateos 与礼来制药合作建立的实验室，配备 100 余台仪器，可存储超过 500 万种化合物，形成闭环自动化药物发现平台。该平台的核心优势在于将传统需要现场操作的复杂生物实验转化为可远程控制的标准化流程，大幅提高了实验的可重现性和效率。该平台集成了从化合物合成、纯化、分析到样品管理的全流程自动化，使药物发现团队能够远程进行先导化合物生成的生物和药物化学实验。

银杏生物 Foundry 平台[27]。该平台配备了高度自动化实验室、高通量筛选系统和专门的软件，能够快速设计、构建和测试工程细胞，采用“设计—构建—测试—学习”的闭环模式，并通过人工智能算法优化微生物和细胞设计。该实验室首次将自动化高通量工程应用于哺乳动物细胞基因组工程，这对制药研究和生产至关重要，目前已成功开发出用于生产香料、药物前体和工业化学品的工程微生物。

除上述智能实验室外，该领域代表性成果还包括：英国 Arctoris 全自动研究平台[28]，通过大型机器人工作站在无菌环境中进行生化、细胞和分子生物学实验，专注于解决传统实验室数据质量低和可重现性差的问题；辉瑞公司自主药物发现平台[29]，使用超级计算和人工智能筛选了数百万种蛋白酶抑制剂化合物，将计算时间减少了 80% ～ 90%，整合了早期开发到临床试验流程，在化合物筛选、安全性评估和监管文档生成等方面取得了显著突破；Isomorphic Labs 是谷歌母公司 Alphabet 分拆的人工智能制药子公司[30]，其致力于使用人工智能将蛋白质结构预测能力应用于药物设计，从而加速药物的发现；安捷伦公司开发的 Bravo NGS 自动化液体处理平台[31]，支持精准医学和个性化治疗的发展；Monomer Bio 公司开发的实验室自动化和数据分析的平台[32]，利用深度学习分析显微镜图像以检测细胞形态变化，提高实验成功率。

2.4 大科学装置自主化改造的研究进展

在前期小规模智能实验室建设的基础上，DOE 国家实验室大型研究团队开始尝试对大科学装置进行自主化改造。

阿贡国家实验室先进光子源（Advanced Photon Source，APS）升级[33]。该项目不仅大幅提升了光束线强度，还包括接入纳米材料中心的 Polybot 自动化材料实验室的自主化改造。升级后，可利用机

器人样品处理器和强大的 X 射线束自动分析电子器件性能，实现自主运行实验、实时数据分析和机器学习决策等功能。

SLAC 国家加速器实验室 FACET-Ⅱ自主化改造[34]。SLAC 的先进加速器实验测试设施（Facility for Advanced Accelerator and Experimental Tests，FACET）及其升级版 FACET-Ⅱ正引领加速器自主化运行。科学家利用机器学习算法优化光束性能，实时对潜在问题进行高效检测，并实时生成所需的物理模拟。FACET-Ⅱ是世界上唯一能够提供高能电子和正电子束的设施，用于研究能够将未来加速器缩小 100 到 1 000 倍的革命性加速器技术。

3 美国联邦政府智能实验室政策部署重点

现阶段，美国联邦政府多个科技管理部门正着手推动智能实验室发展。

3.1 材料基因组计划

美国材料基因组计划（Materials Genome Initiative, MGI）是奥巴马政府时期启动的重大科技战略，旨在通过计算预测、先进表征和高通量实验相结合的方式，将新材料发现速度提升一倍，成本降低 50%[35-36]。该计划覆盖美国 DOE、国防部、国家科学基金会（National Science Foundation，NSF）、NIST 等 15 个主要联邦科技管理部门，体现了美国政府对材料科学基础设施建设的高度重视。MGI 在推进过程中不断适应技术的发展趋势。2021 年发布的《材料基因组计划战略计划》明确将人工智能、数据科学和实验室自主化确定为三大重点发展方向，这标志着该计划本身向智能化、自动化方向的战略转型。

2024 年 11 月，MGI 推出具有里程碑意义的“MGI 挑战”项目，聚焦 5 个具有重大应用前景的材料领域：面向生物医学应用的下一代柔性植入材料；满足极端环境应用需求的多功能复合材料；支撑新一代微型定位导航授时技术的关键材料；用于能源存储和生物医学的凝胶材料；面向下一代电子器件的新型半导体材料。MGI 挑战的核心目标是通过扩展和整合自动化、人工智能和机器人技术等先进能力，建设统一的材料创新基础设施，为国家重大需求提供解决方案。2025 年 1 月，MGI 发布信息请求（Request for Information，RFI），面向全社会征询对相关基础设施建设的意见建议，体现了开放创新的理念。

MGI 建立了有效的跨部门协调机制，通过国家科学技术委员会（National Science and Technology Council，NSTC）材料基因组分委员会统筹各部门资源配置。各参与部门根据自身优势承担不同职责：DOE 负责高性能计算和大型实验设施，NSF 专注于基础理论研究，NIST 制定技术标准等。这种分工协作模式确保了资源的高效利用和技术的协同发展。

3.2 美国能源部

美国 DOE 凭借在高性能计算、科学数据、顶尖人才和大型科研设施等方面的突出优势，成为美国智能实验室发展的主力军[37]。其下属的劳伦斯伯克利、阿贡、布鲁克海文和橡树岭等 17 个国家实验室构成了世界上最强大的科研创新网络，为智能实验室技术的研发和应用提供了有利的条件。

美国 DOE 与智能实验室有关的部署主要围绕以下 4 个方面展开：

一是计算基础设施建设。DOE 通过超级计算和先进科学计算研究（Advanced Scientific Computing Research，ASCR）项目持续引领全球超算发展，为大型、复杂和跨学科研究提供强大算力支撑。目前，正在建设的百亿亿次级（E 级）超级计算机将为人工智能驱动的科学发现提供强大的算力支撑。

二是跨实验室协同创新。2024 年 2 月，DOE 举办了“1 000 名科学家人工智能挑战”活动，动员 9 个国家实验室的 1 500 名科学家系统评估 OpenAI、Anthropic 等最新人工智能大模型在科学研究中的应用潜力。这项活动重点测试了人工智能在科学假设生成、实验过程自动化和计算建模等关键环节的能力，为后续技术发展提供了重要参考。

三是科研数据资源整合。2024 年 7 月，DOE 发布前沿人工智能科学、安全和技术（Frontiers in AI for Science, Security, and Technology，FASST）倡议路线图，计划整合 17 个国家实验室的海量科学数据，构建超大型、跨学科的综合智慧实验平台。该倡议将建立统一的数据标准、接口协议和共享机制，实现数据资源的最大化利用。

四是领域科学模型构建。DOE 在生物学、材料科学、基础物理、气候科学、地球系统科学、核不扩散和基础科学知识等重点领域打造大型基础科

学模型，为各学科的智能化研究提供强大的人工智能工具支撑。

此外，如2.4节所述，DOE正在对APS、Facet-Ⅱ等大科学装置进行系统性的智能化升级。

3.3 美国国家标准与技术研究院

作为MGI的参与部门之一，结合其在标准、制造、测量等领域的优势，NIST重点在以下3个方面进行部署[38]。

一是加速芯片制造中的材料发现。在《芯片与科学法》的支持下，NIST在智能实验室领域承担了重要使命。2024年10月，芯片与科学法项目办公室发布重大项目公告，提供1亿美元专项资金支持使用前沿人工智能和智慧实验技术，加速下一代半导体制造的长期可行性研究。该项目重点关注：新型半导体材料的高通量筛选与优化，制造工艺参数的智能化调控，器件性能的自主化测试与评估，制造缺陷的人工智能驱动检测与修复。

二是构建技术标准体系。NIST正在系统构建智能实验室的技术标准体系，涵盖4个核心环节：建立统一的样品标识、存储、传输和溯源标准，促进样品互操作性；制定设备接口、数据格式和通信协议标准，推动实验设备的集成；建立科学数据的采集、存储、共享和利用标准，推动科学数据管理；制定人工智能算法的验证、评估和部署标准，保证智能实验系统的可靠性和安全性。

三是先导项目与技术验证。NIST正在实施多个先导项目，重点开发超合金和先进复合材料的智能化研发技术。这些项目不仅验证了相关技术的可行性，还建立了材料数据和模型交换协议，为大规模推广应用奠定了基础。

3.4 美国国家科学基金会

NSF在智能实验室领域重点支持基础理论研究和概念验证，为技术发展提供科学基础[39]。其支持的研究领域涵盖：半导体和微电子材料的新理论与新方法，生物系统的智能化实验技术，复合材料的多尺度建模与优化，极端条件下结构材料的行为预测。

NSF推动多个智能研究平台建设，包括：材料研究科学与工程中心（Materials Research Science and Engineering Centers，MRSEC）网络。MRSEC网络已成为智能实验室技术发展的重要载体，多个MRSEC中心正开展智能实验室相关研究，其中最具代表性的是模块化机器人平台“ADA”的开发。该平台能够通过自主修改薄膜组成和处理条件优化材料的光学和电子性能，实现了从材料设计到性能验证的闭环自动化。

材料创新平台（Materials Innovation Platforms，MIP）。MIP为智能实验室技术的产业化转移提供了桥梁，通过与产业界的紧密合作，推动实验室技术向实际应用的转化。

除上述智能研究平台外，NSF建立了有效的跨学科合作机制，其数学和物理学理事会、材料研究部和工程理事会等多个部门协同支持智能实验室相关研究。跨学科合作模式促进了不同领域知识的融合创新，为智能实验室技术的突破提供了重要支撑。

4 美国智能实验室技术发展重点

在前期探索的基础上，美国NSTC、DOE等积极构想自主发现的科学研究新范式，展望未来10年自主实验的发展方向。

4.1 智能实验室技术的发展趋势

在试点研究基础上，美国DOE提出进一步整合庞大的科学知识和数据体系，构建大型、复杂、精密和跨学科的自主实验网络。重点包括以下3个方面。

一是向通用机器人科学家迈进。通过发展更先进的基础模型，通用机器人科学家能够处理庞大的科学知识和数据，形成内、外两层人工智能循环：内循环负责快速检索、分析并生成科学假设，外循环负责评估假设并筛选实验方案进行验证。理想的通用机器人科学家能够选择并优化不同的科学仪器组合，从结构化和非结构化数据中凝练知识。通用机器人科学家有望进一步减少实验过程中人的重复劳动，并为极综合、极交叉学科提供可行的解决方案。

二是构建高通量自主科学设施。构建大型、灵活且广泛适用的高通量自主科学设施，旨在支持不同领域和团队科学家同时开展多项实验协作。这将有效促进跨学科科学研究。但高通量自主科学设施要求系统能够灵活挑选、整合多个大科学设施和不同的科学仪器，需在控制和复杂工程系统方面取得重大进步，主要包括：开发先进的仿真工具包，模

拟不同仪器组合的实验操作；大力发展数字孪生、混合现实等技术，在仪器、实验建模、原型设计等环节实现实时交互。此外，大力发展自校准仪器、仪表和设施，使得环境、气候和地球科学等主要依赖现场传感器采集数据的学科实现自主化，未来可实现低分辨率扫描定位，自动切换到高分辨率现场实验站点完成数据收集分析的自主实验模式，有望将上述领域实验精度提升至少一个数量级。

三是分布式云端实验室。分布式云端实验室旨在将物理分散的实验设施通过云计算技术整合为统一的虚拟实验平台，其核心优势在于资源的弹性配置和协作能力。在技术层面，分布式云端实验室依托高速网络连接、边缘计算节点和统一的数据管理平台，实现实验资源的池化管理。通过数字孪生、虚拟现实等技术，科学家能够在虚拟环境中预演实验流程、优化参数设置。

四是实现智能集成的科学设施网络。智能化的科学设施有望打破大科学设施相对孤立的现状，在物理层面（数据传输）和功能层面（设施协同）实现互联。未来，边缘计算与智能传感网络将实现数据的实时采集与处理，高性能计算将提供模拟和分析支持，自主系统将协调资源分配和实验调度等，最终将形成真正的协同创新体系，大幅提升科学设施的整体效能。

4.2 智能实验室技术发展重点

为实现发展目标，需在自主化技术、跨领域研究、数据管理和工作流程等方面取得长足进步。

一是专项自主化能力建设。重点是构建开放协同的实验室机器人，包括针对微米 / 纳米尺度操作、远程和恶劣环境等专门开发的实验室机器人，推动开放标准、互操作性、面向跨实验和元数据交换开发协议和框架、仪器自主校准、计算机视觉和建模等软硬件能力的提升。全球已有多个开源自主实验室项目正在推进标准化和互操作性方面的工作，包括专门的实验编排软件、自适应实验平台和模块化自主反馈循环系统。

二是跨领域技术能力建设。实现自主实验系统需要一系列跨领域基础技术支撑，其中最关键的是数学和基础研究领域的突破，包括开发统一的计算接口、确保机器人可靠执行任务、构建物理约束条件等。DOE 国家实验室发布的报告中提出了 6 个主要人工智能应用领域：科学发现和综合的基础模型，科学计算的代理模型，属性推理和逆向设计，复杂工程系统的设计预测和控制，以及自主发现。此外，要将非结构化的实验背景知识、经验等转化为计算机可以理解的形式。现有技术在整合非结构化的实验背景知识、经验等方面仍存在一定的局限性，要进一步实现跨领域的智慧实验室技术，还有待神经符号模型、科学推理概率框架、实验设计有关的数学理论等基础研究的进步。

三是数据管理和工作流程建设。大型自主实验网络建设涉及艾字节级别的数据处理，需面向海量数据处理和交互开发下一代数据基础设施，要求原始数据筛选、信息提取和数据集整合等环节高度自动化，同时需要在实验设备、传感器网络等执行层打造边缘智能，涉及设备和传感器智能化升级和“中心 – 边缘”的新型计算网络建设，从而大幅减少数据传输和中央数据处理负担。■

参考文献：

[1] YOUNG P. Learning by trial and error[J]. Games and economic behavior, 2009, 65(2): 626-643.

[2] Synthace Team. Where is the return on investment (ROI) from lab automation[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.synthace.com/blog/where-is-the-return-on-investment-roi-from-lab-automation.

[3] MROZ A, POSLIGUA V, TARZIA A, et al. Into the unknown: How computation can help explore uncharted material space[J]. Journal of the American Chemical Society, 2022, 144(41): 18730-18743.

[4] PhRMA. Cost of developing a drug in the U.S. from the 1970s until today (in million U.S. dollars)[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.statista.com/statistics/265054/pharmaceuticals-cost-of-development-in-the-us/.

[5] MUSSLICK S, BARTLETT L, CHANDRAMOULI S, et al. Automating the practice of science: Opportunities, challenges, and implications[J]. Proceedings of the national academy of Sciences, 2025, 122(5): e2401238121.

[6] TRELOAR N, BRANIFF N, INGALLS B, et al. Deep reinforcement learning for optimal experimental design in biology[J]. PLoS computational biology, 2022, 18(11): e1010695.

[7] BURGER B, MAFFETTONE P, GUSEV V, et al. A mobile robotic chemist[J]. Nature, 2020, 583(7815): 237-241.

[8] BORREGO A, DESSI D, AYALA D, et al. Research hypothesis generation over scientific knowledge graphs[J]. Knowledge-based systems, 2025, 315: 113280.

[9] TONG S, MAO K, HUANG Z, et al. Automating psychological hypothesis generation with AI: when large language models meet causal graph[J]. Humanities and scial sciences communications, 2024, 11(1): 1-14.

[10] PETERSON J, BOURGIN D, AGRAWAL M, et al. Using large-scale experiments and machine learning to discover theories of human decision-making[J]. Science, 2021, 372(6547): 1209-1214.

[11] TAMASI M, PATEL R, BORCA C, et al. Machine learning on a robotic platform for the design of polymer-protein hybrids[J]. Advanced materials, 2022, 34(30): 2201809.

[12] GOTTWEIS J, NATARAJAN V. Accelerating scientific breakthroughs with an AI co-scientist[EB/OL]. [2025-05-08]. https://research.google/blog/accelerating-scientific-breakthroughs-with-an-ai-co-scientist/.

[13] LEVEY S. Google's AI co-scientist could enhance research, say imperial researchers[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.imperial.ac.uk/news/261293/googles-ai-co-scientist-could-enhance-research/.

[14] OpenAI. OpenAI deep research[EB/OL]. [2025-05-08]. https://openai.com/index/deep-research/.

[15] Perplexity AI. Introducing perplexity deep research[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.perplexity.ai/hub/blog/introducing-perplexity-deep-research.

[16] BOIKO D, MACKNIGHT R, KLINE B, et al. Autonomous chemical research with large language models[J]. Nature, 2023, 624: 570-578.

[17] BRKIC O. Training of 1-trillion parameter scientific AI begins[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.hpcwire.com/2023/11/13/training-of-1-trillion-parameter-scientific-ai-begins/.

[18] SZYMANSKI N, RENDY B, FEI Y, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials[J]. Nature, 2023, 624: 86-91.

[19] GONGORA A, XU B, PERRY W, et al. A Bayesian experimental autonomous researcher for mechanical design[J]. Science advances, 2020, 15(6): 1708.

[20] AFRL-ARES. ARES OS™: Autonomous research and experimentation system operating system[EB/OL]. [2025-05-08]. https://github.com/AFRL-ARES/ARES_OS.

[21] EPPS R, BOWEN M, VOLK A, et al. Artificial chemist: An autonomous quantum dot synthesis bot[J]. Advanced materials, 2020, 32: 2001626.

[22] JORESS H, TRAUTT Z, MCDANNALD A, et al. Driving U.S. innovation in materials and manufacturing using AI and autonomous labs: building a national center and testbed for autonomous materials science[R]. Gaithersburg: National institute of standards and technology, 2024.

[23] Oak Ridge National Laboratory. An autonomous chemistry lab for accelerated materials discovery and innovation[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.ornl.gov/project/autonomous-chemistry-lab-accelerated-materials-discovery-and-innovation.

[24] MARTIN H, RADIVOJEVIC T, ZUCKER J, et al. Perspectives for self-driving labs in synthetic biology[J]. Systems biology, 2023, 79: 102881.

[25] SPARKES A, ABUREY W, BYRNE E, et al. Towards robot scientists for autonomous scientific discovery[J]. Automated experimentation, 2010, 2: 1-11.

[26] ARNOLD C. Cloud labs: where robots do the research[J]. Nature, 2022, 606: 612-613.

[27] TANG T, FU L, GUO E, et al. Automation in synthetic biology using biological foundries[J]. Chinese science bulletin, 2021, 66(3): 300-309.

[28] PAULI M, IMMANUEL-BITTNER M. Humans of AI_3SD: Dr Martin immanuel-bittner[R]. Southampton: University of Southampton, 2021.

[29] 鞠华俊 , 王海名 , 周秋菊 , 等 . 化学自动合成机器态势分析及进展研究 [J]. 数据与计算发展前沿 , 2024, 6(4): 173-181.

[30] Google. How isomorphic labs uses machine learning models to explore new frontiers in drug discovery[EB/OL]. [2025-05-08]. https://cloud.google.com/transform/gen-ai-drug-discovery-isomorphic-labs-demis-hassabis.

[31] WAHBA A, HO T, JOHNS S, et al. Bravo automation of agilent avida targeted enrichment for high-throughput detection of genomic alteration and DNA methylation[J].

Cancer research, 2024, 84(suppl 6): 2291.

[32] Monomer. Autonomous optimization of iPSC staining[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.monomerbio.com/our-work.

[33] PARRAGA H, HAMMONDS J, HENKE S, et al. Empowering scientific discovery through computing at the advanced photon source[C]//Proceedings of the SC'23 Workshops of the International Conference on High Performance Computing, Network, Storage, and Analysis. New York: ACM, 2023: 2126-2132.

[34] SLAC. FACET-II upgrade[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www6.slac.stanford.edu/media/facet-ii-upgrade.

[35] Materials Genome Initiative. The 2024 Materials Genome Initiative (MGI) Challenges[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.mgi.gov/2024-materials-genome-initiative-mgi-challenges.

[36] Subcommittee on the Materials Genome Initiative, Committee on Technology, National Science and Technology Council. Materials genome initiative strategic plan[R]. Washington, D.C.: National Science and Technology Council, 2021.

[37] DANIEL C, GEHIN J, LAURIN-KOVITZ K, et al. AI for Energy[R]. Chicago: Argonne National Laboratory, 2024.

[38] National Institute of Standards and Technology. Development of standards to support a modular and autonomous laboratory ecosystem[EB/OL]. [2025-05-08]. https://www.nist.gov/programs-projects/development-standards-support-modular-and-autonomous-laboratory-ecosystem.

[39] MACLEOD B, PARLANE F, MORRISSEY T, et al. Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials[J]. Science Advances, 2020, 6(20): eaaz8867.

Towards Self-driving Scientific Discovery: The Current State and Development Trends of Intelligent Laboratory in the United States

WANG Zhaoran

(Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, Beijing 100006)

Abstract: Intelligent laboratories, integrating artificial intelligence, big data, and laboratory automation, enable closed-loop automation across key stages of scientific research, including hypothesis generation, experimental pathway optimization, and data collection and analysis. These systems have become an emerging research frontier in materials science, chemistry, and biology. In the United States, multiple federal science and technology agencies are advancing initiatives on AI-driven scientific models and intelligent laboratory development, while organizations such as OpenAI and Google have introduced collaborative scientist platforms. As a core enabler of the data-driven "fourth paradigm" of scientific discovery, intelligent laboratories are evolving toward general-purpose robotic scientists, high-throughput self-driving research facilities, and distributed cloud-based laboratories.

Keywords: intelligent laboratory; artificial intelligence; self-driving experimentation; scientific discovery; laboratory automation