

人工智能驱动的科学研究的第五范式： 演进、机制与影响

周代数¹，魏杉汀²

(1. 中国科学技术发展战略研究院，北京 100038；2. 河南大学商学院，河南 开封 457004)

摘要：科学研究的发展历程见证了从经验科学、理论科学、计算科学到数据科学的演变，目前正迈入由人工智能技术引领的第五范式——AI for Science (AI4S)，这是科研范式的一次重大革新。本文深入探讨了科学研究从第一范式至第四范式的演进历程，并对第五范式的内涵、特点及其对科研领域的深远影响进行了分析。第五范式不是对以往范式的简单否定，而是与其相互补充、促进和融合，从而形成的一种迭代的新科研模式。同时，鉴于第五范式在科研伦理、数据安全和知识产权等方面可能会引发的一些新挑战，本文强调了加强跨学科合作、促进数据共享、推动算法创新和培养专业人才的重要性，旨在构建适应新时代科研伦理的框架，以确保第五范式科研的高质量与可持续性。

关键词：人工智能；科学研究；第五范式

中图分类号：F204 **文献标识码：**A

DOI:10.13580/j.cnki.fstc.2024.12.014

The Fifth Paradigm of Science Driven by Artificial Intelligence: Evolution, Mechanisms, and Implications

Zhou Daishu¹, Wei Shanting²

(1. China Academy of Science and Technology for Development, Beijing 100038, China;
2. BusinessSchool, Henan University, Kaifeng 475004, China)

Abstract: The evolution of scientific research has traversed from empirical science, theoretical science, computational science to data science, and is now entering the fifth paradigm — AI for Science (AI4S), marking a significant transformation in the methodology of scientific inquiry. This paper delves into the progression from the first to the fourth paradigms of scientific research and meticulously analyzes the essence, characteristics, and profound implications of the fifth paradigm. The fifth paradigm does not simply negate the previous ones but complements, enhances, and integrates with them, forming an iterative new model of scientific research. Given the potential new challenges posed by the fifth paradigm in areas such as research ethics, data security, and intellectual property rights, this paper underscores the importance of enhancing interdisciplinary collaboration, promoting data sharing, driving algorithmic innovation,

基金项目：国家语委“十四五”科研规划课题“ChatGPT背景下网络语言文字清洗与治理的关键技术布局研究”(WT145-34)，河南省社会科学规划年度项目“生态系统视角下河南省众创空间数字动态能力构建机制研究”(2022BJJ032)，科技部战略院卓越青年研究基金课题“金融科技缓解科技型企业融资约束的理论、机制与政策研究”(zkq202407)。

收稿日期：2023-10-09

作者简介：周代数(1985—)，男，湖北黄冈人，博士，副研究员，研究方向为创新发展和科技金融政策。

通信作者：魏杉汀

and cultivating specialized talent. The aim of this paper is to establish a framework that aligns with contemporary research ethics to ensure the high quality and sustainability of research under the fifth paradigm.

Key words: Artificial intelligence; Scientific research; The fifth paradigm

0 引言

新一代人工智能是对生物神经元模拟发展而来的一种数据分析技术^[1],正在成为科学研究的重要驱动力。人工智能作为一种“使能型”工具,可以提升科学研究突破“维度灾难”(Curse of Dimensionality)的能力^[2],其对高维问题的表达能力已超越了传统数学或物理学方法,赋能科学技术的重大发现,这种科学研究新范式称为第五范式,即人工智能驱动的科学(AI for Science, AI4S)。第五范式以虚实交互、平行驱动的人工智能技术为核心,以数据-知识双向驱动,通过深度神经网络等模型达到自主学习的类人类智能水平,利用海量数据和推理为科学研究提供帮助。2022年7月,微软设立了微软研究院科学智能中心(Microsoft Research AI4Science)^[3]。2023年,科技部会同自然科学基金委启动“AI4S”专项部署工作,重点攻关药物、基因、育种、新材料等领域科技问题^[4],促进人工智能与科学研究的深入融合。自OpenAI推出ChatGPT以来,这一趋势加速推进,在蛋白质结构预测、中长尺度气象预测、地球物理探测等多场景下广泛应用。从近期文献来看,人工智能在科学研究过程中的重要作用引起高度关注,相关学者分析了AI4S的基本内涵,并从“认知”“治理”和“趋势”等方面进行了研究,主要包括:①从哲学领域的意向性问题和知识问题出发,分析人工智能对科学认知方式的改变^[5];②从治理角度出发,提出形成完善人工智能参与各学科实验研究的伦理规范与运行机制^[6];③从人工智能与各领域融合的大趋势角度出发,提出“第五范式”及其发展前景^[7]。

然而,当前对科学研究第五范式这一新的概念理解还不够深入,也未明确指出第五范式的新特征,更少探究其机理和本质。对于一些关键性问题,学界尚未达成共识,比如第五范式产生的基本逻辑是什么?与第一范式到第四范式的差异在哪里?未来发展的趋势是什么?因此,本文对第五范式概念进行再界定,对其机理、特征进行辨析,并在清晰识别其对各领域科学研究影响的基础上,探究第五范式加速科研成果突破需要关

注的问题以及未来发展趋势。

1 既有科研范式演进脉络的简要回顾:从第一范式到第四范式

范式(paradigm)一词最初在亚里士多德的《修辞学》中提出,后经科学哲学家托马斯·库恩(Thomas Kuhn)的阐述发展成为具有较大影响的范式理论^[8-9]。该理论将范式理解为一种公认的模式或模式^[10],是开展科学研究的基本路线、观察视角、惯用思路和参照框架。从宏观视角看,范式表示科学共同体的组成成员在理念、价值和技术等层面形成的整体;从微观视角看,范式是指解决具体科学问题,也能为其他问题提供参考的范例或模型。从中短尺度看,范式具有较强的稳定性;从长尺度看,随着科学探索工具的不断进步和人类认识世界的方法论不断发展,范式也呈现出不断变迁和革新的趋势。

人类的科学研究范式大体上有两种类型,一种是牛顿模式,由基本原理驱动;一种是开普勒模式,由数据驱动。图灵奖获得者、前微软技术研究员吉姆·格雷认为科学研究范式是动态演变的,其中信息技术的出现在科学发现方法方面带来的颠覆性尤为显著^[11]。概括地说,人类的科学研究已经历过描述自然现象的经验科学、归纳与形成理论模型的理论科学、运用计算机仿真模拟复杂现象的计算科学,以及基于数据挖掘的数据科学四种范式。随着人工智能技术的迅猛发展,基于海量数据和超级计算机的智能科学第五范式正在兴起(见表1)。

表1 科学研究范式演化

研究范式	时间	科学阶段	研究方法
第一范式	16世纪之前	经验科学	观察、记录、描述、实验、归纳、总结
第二范式	16—19世纪	理论科学	假设检验、模型构建、演绎推理
第三范式	20世纪中期—21世纪初	计算科学	仿真模拟、量化分析
第四范式	21世纪以后	大数据科学	云计算、数据挖掘
第五范式	正在兴起	智能科学	机器学习、深度学习等

1.1 第一范式——经验科学(16 世纪之前)

第一范式通常称为经验范式,16 世纪之前是科学研究的萌芽阶段及漫长的早期积累时期。人们通过观察自然现象和进行实践探索来获取有关自然规律和技术知识^[12],基于不断的试错和实践,逐渐积累经验。例如,通过观察天空中的云彩、风向、气温等因素来预测天气,通过观察植物的生长周期、果实的成熟时间等因素来确定何时进行农业耕作,或根据太阳的位置、月相和气候等因素来计算最适合种植和收割庄稼的时间^[13]。公元前 600 年到公元 300 年(也称为“思想革命”时期^[14]),注重思辨的古代哲学飞速发展。中国的老子、孔子、孟子、曾子、墨子等哲学先贤和古希腊哲学家采用理性思考的方式,运用直觉经验和哲学思辨方法,对自然现象进行系统思考和理解,并提出了一些基本的科学概念和范畴^[15]。例如,老子以“阴阳”来说明宇宙万物的构成;孔子讲天道“为圆、为阳、为明”,地道“为方、为阴、为幽”;曾子提出“格物而后知至”。西方的泰勒斯通过观察、总结、分析和推理,预言了日食,创建了古希腊最早的学派“米利都学派”;苏格拉底及其思想继承人柏拉图开始强调知识的重要性,确立了一整套基于逻辑推理和思考的自然哲学体系;亚里士多德提出“物种”“实体”“形而上学”等概念,以及归纳和演绎的科学方法^[16]。到了中世纪,欧洲的知识生产发生质变,基督教神学成为主流思想^[17]。随着哲学逐步摆脱教会束缚,自然哲学开始独立发展,成为近代科学生成的直接土壤^[18]。中世纪盛期,部分学者采用自然哲学的方法认识客观物质世界,开启了近代科学的大门。例如,14 世纪的英国学者威廉·奥卡姆提出了奥卡姆剃刀原理,强调简单和直接的解释方式,直接影响了当代科学方法的形成^[19];中世纪晚期,罗吉尔·培根、格罗塞特、司各脱和奥康等人在亚里士多德“演绎和逻辑”思想的基础上提出了“实验科学”概念^[20]。到了文艺复兴时期,实验科学愈发得到重视,弗兰西斯·培根提出“知识就是力量”,指出科学的任务在于认识自然界及其规律^[21],并开创了以实验为手段研究感性自然的科学研究方法,被马克思评价为“英国唯物主义和整个现代实验科学的真正始祖”^[22]。伽利略、开普勒等科学家通过实验对物理学和天文学进行了深入探索,采用精

细的技术手段进行研究,揭示了许多自然现象的规律,取得了一系列科学研究成果。

总体来看,第一范式为经验范式,是以观察和实验为依据的研究,能够较为真实地反映实际的表征信息,并做出概率判断,追求“知其然”。

1.2 第二范式——理论科学(16 世纪到 19 世纪)

第二范式为理论科学范式,始于 16 世纪的科学革命,是以假设检验、建模和演绎推理为基础的分析范式。1543 年,哥白尼《天体运行论》发表和牛顿的经典力学体系建立是第一次科学革命的标志^[23],也意味着现代理论科学的诞生。16—17 世纪科学界井喷式出现了许多理论,如牛顿在其 1687 年发表的《自然哲学的数学原理》中提出万有引力定律以及牛顿运动定律,成为经典力学的基石;近代植物学奠基人卡尔·冯·林奈、“现代化学之父”安托万·洛朗·拉瓦锡、近代微生物学的奠基人路易·巴斯德等都提出了一些新的科学理论和实验方法^[24],基于实验测量和推理,建立了力学、光学等基本理论,开创了近现代科学的新时代。18 世纪 60 年代的第一次工业革命进一步推动了自然科学的发展,各种学科和分支科学逐渐出现,科学家采用更加精细的实验方法和技术手段进行研究。19 世纪自然科学界出现了三个重大发现,恩格斯评价说“这三个发现使自然界的主要过程得以说明”,即 1838 年德国植物学家施莱登提出的“细胞学说”、1847 年德国科学家亥姆霍兹证明的“能量守恒定律”,以及 1859 年达尔文在《物种起源》一书中系统阐释的“生物进化论”。这些理论基于前人研究成果和严密的推论与重复实验,有充分的科学事实作根据,至今对科学界都有深远的影响。

由上述可见,第二范式与第一范式不同,从追求“知其然”到“知其所以然”,能对自然界某些规律做出其背后原理性的解释。第二范式的知识实现过程注重使用理论对客观世界进行建模^[25],又称为理论范式。

1.3 第三范式——计算科学(20 世纪中期到 21 世纪初)

20 世纪 40 年代以前,计算主要依赖手动操作,如计数器和算盘等。1946 年第一台电子计算机问世,计算科学进入新的阶段,第三范式应运而生——即计算科学。计算科学是以数学方法、

计算机技术、统计科学、信息科学和控制技术等为基础,通过模型建构、定量分析和计算分析,提高实验效率和准确性,研究复杂系统和现象的科学研究范式。20世纪60年代结构化编程方法逐步发展,如模块化设计和控制流结构,使得程序更加清晰、可读性更强。20世纪90年代至21世纪初,逻辑编程和自动推理技术的发展使得程序可以更加精确地模拟和验证科学问题的解决方案。在这一时期,基于计算机技术可进行数值模拟和其他形式的计算,为实验科学提供了强有力的支持和工具。第三范式广泛用于高能物理、宇宙天体、工程科学等领域,典型场景如:基于飞行器的空气动力学性能模拟来优化设计和飞行控制策略^[26];通过原子尺度的仿真研究材料的微观结构和性能关系^[27],预测新材料的力学、热学和电学等性质;对芯片的电路性能和热分布进行模拟,确保芯片的可靠性和性能等。

与传统范式相比,第三范式突破了各学科之间的隔阂,实现了现实世界成本巨大或原本无法实现的研究与实验实施环境,不仅能解决现实中复杂的问题,还可以预测未来可能的变化趋势和情况,为科学研究和社会发展提供强有力的工具。

1.4 第四范式——数据科学(21世纪以后)

第四范式即数据科学,是以数据考察为基础,联合理论、实验和模拟于一体的数据密集计算范式。21世纪初,随着科学研究飞速发展,传统范式如实验科学和理论科学已经无法满足现代科学研究所面临的数据处理和分析需求,而计算模拟由于仿真结果难以完全重现实践现象的复杂性而“显得苍白”,引起一些科学家的质疑^[28]。互联网和物联网的普及使数据产生和收集的速度大大加快,数据科学的地位也逐渐得到重视,一种新的范式正在崭露头角,即数据科学。与面对系统进行数学建模的计算科学相比,数据科学关注的是如何处理大规模数据和提供分布式计算服务^[29]。云计算和大数据技术的发展,如分布式文件系统、MapReduce和Hadoop等,使得程序可以更加高效地处理大数据、管理分布式计算资源,在科学研究中的应用更加广泛。如在地理科学领域,数字技术改变了地理空间信息的处理和表达模式,典型场景基于卫星信号实时计算出位置坐标和时间信息,为研究者提供高精度的定位和计时服务^[30]。

数据科学还推动世界各国许多大型科学研究项目取得重大进展,如人类基因组计划的实施推动生物信息学快速发展等^[31]。近年来,数据科学的理论体系逐步完善。在数据采集方面,研究者探索新的数据来源和采集方法,以保证数据的多样性和准确性;在数据处理方面,各种算法和工具不断涌现,以提高数据处理的速度和效率;在数据分析方面,研究者通过深入挖掘数据的潜在价值,为各个领域提供有价值的洞见和预测。

在第四范式出现之前,假说驱动的科学模式占据主导地位^[32]。研究者通常基于已有的理论和经验,提出一个假设,然后设计实验或通过观察验证这个假设。第四范式给科学带来了两大变化,一是使得科学研究从追求因果性走向重视相关性^[33];二是使得科学研究从假说驱动转向数据驱动,科学家使用数据管理和统计学方法分析数据,以揭示事物内部的相关关系。

2 新兴的科学研究第五范式——智能科学

2.1 科学研究第五范式概念再定义

第一范式和第二范式为科学的传统范式,人类的知识体系由日积月累的先前经验和知识总结归纳并推理而来;第三范式和第四范式为计算科学与数据科学,开始运用计算机等工具,通过建模和仿真等方法对越来越多的数据进行分析处理。但是,直至人工智能技术出现之前,机器都没有实现自主思考和决策。第五范式与第四范式的证实规律不同,无需在考察数据之前进行某种理论预设,而是基于机器学习和深度学习算法进行规律挖掘和趋势模拟,在数据分析、实验规划、自动化实验、模型建立、预测和优化以及辅助决策等方面都有很大潜力,能够极大赋能科研实验设计,帮助科学家更快速、更准确地推进科学研究。第五范式不仅继承了前四个范式的优点,如原理驱动和数据驱动,而且还引入了跨学科知识的集成,利用机器学习技术弥补了数值计算的局限,有效解决了科研中的组合爆炸问题和非确定性计算挑战,实现了从追求绝对性向拥抱不确定性的转变^[34]。尤其在高维函数逼近方面,深度学习展现出强大的潜力,为解决维度灾难问题提供了新途径,这在材料科学^[35]、药物设计、内燃机

设计等多变量领域尤为关键。值得注意的是,第五范式并不是对前四个范式的否定和替代,而是呈现互相补充、互相促进的关系^[36],这种融合共存为科学研究的发展提供了更广阔的空间和更多的可能。例如,在数据挖掘方面,第五范式可以借助前四个范式中积累的数据和算法资源,提高数据挖掘的效率和精度;前四个范式也可以借鉴第五范式的智能化技术和方法,优化和完善现有的研究手段和流程。

基于上述认识,本文对第五范式的概念做出如下界定:科学研究第五范式即智能科学,是研究者在融合先验知识、多学科理论的基础上,利用海量的结构化与非结构化数据,通过机器学习、深度学习等人工智能技术进行模型构建与实验验证,实现规律发现与趋势预测,推动科研向更加高效、准确与可持续方向发展的新型科研模式。这一范式强调科研全过程的智能化,包括人机智能融合、解决高维度复杂问题、跨学科合作以及依托大模型科研平台,促进科研与工程的紧密结合,引领科研领域进入智能时代。

2.2 科学研究第五范式的典型事实

人工智能逐步成为科研过程中重要的科学发现工具,最具代表性的是预训练生成式智能工具和复杂科学数据集机器学习算法。在第五范式下,科研工作者可以多任务并行处理研究任务^[37],依托机器猜想构建知识网络,解决高维科学数据处理难题,构建数据-知识耦合驱动的算法模型,基于人机协作实现科学研究效率的提升。

在生物学领域,利用 AlphaFold 能够精准预测蛋白质三维结构,理解生物分子机制,提供高置信结论。AlphaFold 成功预测了超过 100 万个物种的 2.14 亿个蛋白质结构^[38],极大推进了生物学领域对蛋白质结构与功能关系的研究。预训练算法在基因表达和分子表示方面的应用也越来越多,包括从 DNA 序列中预测基因表达水平、学习跨多个物种或细胞类型的通用特征、捕获分子的结构并进一步用于下游任务等。

在药物发现领域,人工智能模型快速筛选和优化药物分子,助力科研人员更加深入解析生命原理和疾病机理。例如,华为自主研发的盘古大模型 3.0 在医疗领域取得了巨大突破,成功发现了新型超级抗生素 DrugX^[39-40]。此外,大模型可用

于药物分子建模和性质预测,如预测药物分子的水溶性、毒性、人体器官可吸收性等关键性质,为药物研发提供了重要的理论支持。

在天气预报领域,人工智能算法可以显著提升气象预报的精准性和时效性。通过对卫星图像、雷达数据、地面观测数据等数据的深度学习和模式识别,人工智能算法能够识别出天气系统中的复杂模式和趋势。通过对长期数据的分析和学习,人工智能算法能够揭示出天气系统的长期规律和趋势,为气候研究和政策制定提供有价值的参考。目前,深度学习模型 FourCastNet 能以 0.25° 的分辨率生成全球关键天气指标的预测^[41],计算速度实现指数级增长,预测精度亦快速提升。

在工业研发领域,大语言模型可以解析复杂的生产数据,充当“推理引擎”,为研发人员提供快速的“第二意见”。基于大量的实验数据和模拟数据,人工智能算法可以构建精确的预测模型,用于预测材料的机械性能、热学性质、电学性能等关键指标。通过分析大量的实验数据和模拟结果,可以构建材料的结构-性能关联模型,用于预测新材料的性能,快速找到潜在的新材料,或优化现有材料的配方和工艺参数,也可能发现具有更优异性能的新材料。

2.3 科学研究第五范式的主要特征

以大模型为代表的新一代人工智能技术逐步成为科学研究的重要助推器,有助于实现科学新发现、技术新发明、创新新方向从无到有的跨越。第五范式把深度学习作为效率、质量俱佳的工具,用科学基本方程的数值解(而非经验观察)来训练神经网络^[42],通过降低维度、近似求解,找到与科学问题关联度高的影响因子,成为解决科学问题的新模式,其主要特征如下。

一是研究对象为多模态数据。在数据分析的基本方法论方面,传统的统计学研究方法是“样本反映总体”(Sample reflects population),基本逻辑是依托“概率”;第五范式背景下“样本即总体”(Sample equals population),在拥有足够多、足够全面的数据时,可将样本视为总体的代表,从而无需再进行复杂的抽样和推断。在第五范式下,人工智能可以辅助科学数据收集和整理,从海量的科学数据中学习到有价值的信息和模式,帮助科研工作者更好地理解 and 解释数据,发现数

据中的隐藏模式和关系。在第五范式之前，科学家处理的数据主要是文本数据；在第五范式下，科学家集成语音、图像、视频等多模态数据，实现跨领域深度学习与推理，尤其是那些涉及复杂系统分析、认知科学和多媒体分析的领域，多模态信息处理的融合提升了科学研究的效率和精

度^[43]。例如，在认知科学领域，通过 AI 模型分析脑电图、功能性磁共振成像以及行为数据^[44]，可以更全面地理解人类大脑在执行复杂任务时的认知过程和神经机制。在多模态数据训练方面，“自监督学习”是人工智能科研应用的重要方式（见表 2）。

表 2 自监督学习与 AI4S

主要作用	主要方式	典型案例
数据增强与利用	科研数据不足时，自监督学习可从有限数据中挖掘更多信息，对原始数据进行不同的变换和处理后生成更多样化的训练样本，增强数据可用性	在医学影像研究中，对有限的病理切片图像进行旋转、翻转等操作，利用自监督学习模型进行训练，有助于提高模型的泛化能力
特征提取与表示学习	通过自动化数据采集系统，AI 能够实时、准确地收集实验数据，避免人为误差	对材料的微观结构图像进行自监督学习，可以提取反映材料性能的关键特征，为材料设计和优化提供依据
模型预训练	在大规模无标注数据上进行预训练，然后在特定的有标注小数据集上进行微调，显著提高模型在特定科学任务中的性能	在天体物理学中，先在大量的星空图像上进行自监督预训练，然后在特定星系分类任务上微调模型
隐藏关系挖掘	发现数据中隐藏的模式和关系	在基因研究中，通过对大量基因序列的自监督学习，可能揭示出基因之间潜在的关联和调控机制
降低标注成本	减少对大量人工标注数据的依赖，降低数据标注的时间和人力成本	在生态研究中，对大量的野生动物行为视频进行自动分析，无需繁琐的人工逐帧标注

二是研究形态强调人机互动。第五范式将人的部分思维和意识抽离出来并赋予机器，使机器也存在与人类大脑类似的功能，从而使机器能够接受模拟与拓展人类意识、知识、行为模式，从而提升计算的速度与准确度，帮助人类决策。这种情况下，智能体机器作为重要的科研辅助者，

全面融入科学、技术和工程研究，继而实现知识自动化和科研全过程的智能化。人机智能融合体现在科研人员与 AI 系统的紧密协作上，科研人员提供指导和判断，AI 系统则负责处理和分析大量数据，发现新的规律和趋势。第五范式背景下，人工智能参与科研的全过程如表 3 所示。

表 3 第五范式背景下人工智能参与科研全过程

科研过程	人工智能参与
实验设计	AI 可以辅助科研人员设计更加合理、高效的实验方案，减少实验成本和时间
数据采集	通过自动化数据采集系统，AI 能够实时、准确地收集实验数据，避免人为误差
数据分析	AI 擅长处理和分析海量数据，能够发现传统方法难以察觉的规律和趋势
模型构建	基于大数据和机器学习技术，AI 可以构建更加精确、可靠的预测模型，为科研提供有力支持
结果解释	AI 系统能够对分析结果进行可视化展示和解释，帮助科研人员更好地理解数据背后的含义

三是研究领域注重融合交叉。第三和第四范式实现了学科之间的协同，第五范式则实现了前所未有的跨学科交叉融合，不同学科的数据集和分析方法得以交叉应用，加速了科学发现的进程。第五范式需要跨学科团队的协作，例如，在构建针对特定科研问题的大模型时，可能需要计算机科学家、数据科学家、领域专家等多个角色的共同参与，这种团队协作促进了不同学科之间的交

流和知识共享。第五范式注重探索领域的革新，能够探索“不知道自己不知道”的现象和规律，如医学领域的人工智能能够调动生物学、化学、物理学等多个学科的知识理论，帮助医学研究人员取得意外发现。此外，随着人工智能技术的迅猛发展，科研合作的边界正在被重新定义^[45]，跨时空、跨专业的互动极大地丰富了科研灵感的源泉，加速了创新思维的碰撞与融合，促使关键科学洞

见的孕育与成熟周期大幅缩短。

四是研究方法实现智能化驱动。在第五范式背景下,通过机器学习和深度学习等算法进行数据挖掘和分析,从而实现自动化、智能化的数据处理和分析过程,以克服传统计算方法在生物、化学、材料科学等领域面对海量组合时束手无策的问题。例如,在药物研发中小分子候选药物的数量可能高达 10^{60} 种,逐一筛选显然不切实际,面对如此庞大的可能性空间,传统方法望而却步,但智能算法通过学习和优化,能够从海量数据中识别模式、预测结果,极大减少了需要探索的方案数目,使得原本不可能的问题变得可解。在处理复杂度极高的问题时,智能算法和模型优化展现出卓越效能,不仅能够应对高维空间的挑战,还能在非确定性环境中提供可靠的预测。通过概率统计模型,智能系统能在不完全理解问题的情况下进行建模和分析,实现跨尺度的模拟与计算,使得AI驱动的科学研究成果呈现前所未有的“涌现性”特征。

五是研究设施呈现平台化特征。以ChatGPT为代表的大模型凭借其巨大的参数量和出色的泛化能力,为科研注入了新的活力。第五范式下,未来科研活动可能愈发依赖以大模型驱动的科研大平台,这些平台聚合了丰富的科学数据与知识资源,配备了高性能计算资源和大数据分析工具,有望加速科研成果向工程应用的转化。通过优化模型、清理数据和微调算法,科研人员能更有效地检验假设,探索科学前沿;工程团队能依据科研成果快速开发出实用解决方案和技术产品,实现科研到应用的顺畅过渡。科研大平台的出现,标志着科研模式从个人创意驱动向平台资源驱动的转型。科研工作者能够便捷地获取和利用全球科研资源,促进跨学科合作,加速知识创新和迭代。科研大平台提供的虚拟实验室支持远程实验和数据共享,降低了科研门槛,促进了跨地域科研协作,加快了科研进度。然而,科研大平台的构建和应用也引发了对科研伦理和数据安全的关注。在追求科研创新的同时,有必要建立健全的监管体系,确保科研活动遵循伦理规范,防止数据滥用和科研成果的不正当商业化。科研大平台的持续健康发展,需要科研伦理的引导和法律法规的约束,科研人员在享受平台带来的便利时也

应担负起维护科研诚信与社会责任的使命。

3 第五范式变革给科学研究带来的影响预判

人工智能对科学研究的赋能作用已受到众多学者的关注,其在提高多学科研究中数据处理效率、协助模型构建和科学实验、增强实验方案可行性与科研质量等方面具有显著意义。然而,在人工智能应用于科学研究的过程中,也存在一些瓶颈或制约因素。既有研究指出的问题包括人机协同过程中的动态调整以及角色转换问题^[46],人工智能在科学研究方面可能产生的安全和隐私问题等^[47]。本文认为,第五范式为科学研究带来的新机遇和新挑战主要包括以下几个方面。

3.1 对科研工作者形态的影响

古希腊哲学家泰勒斯鼓励人们通过观察自然现象来探索宇宙奥秘,柏拉图在《蒂迈欧篇》中提出宇宙生成理论^[48],鼓励人们通过理性思考来探索宇宙的奥秘。千百年来,人类对自然、宇宙和科学的探索永无止境,铸就了无比璀璨的知识大厦。每一代科学家站在前人的肩膀上,前赴后继、躬亲力竭。许多哲学家和科学家感慨生命易逝,如古罗马斯多葛派的哲学家写下《论生命之短暂》,感叹被赋予的短暂人生竟是如此瞬间即逝^[49]。智慧、伟大如爱因斯坦,也只能在76年的有限生命中完成特定科学命题的探索。

随着第五范式的出现,有望出现两种新的科学家类型,即“机器人科学家”和“数字人科学家”^[50-51]。机器人科学家可以从事脑力或体力的科研活动,24小时不眠不休,替代人类进行枯燥、重复、高危、强度大的科学实验,从而延续科学家的科研寿命,或者通过独立推理探索科学知识,不仅具备处理复杂数据的能力,甚至能提出假说,即一些促进科学发展的可测试的问题,为人类科研事业带来新的可能性。例如,名为“亚当”和“夏娃”的机器人已经开始在微生物学和药物筛选方面进行研究。“亚当”已成功破解一种特殊酶^[52],并通过人工实验验证了结果的正确性,“夏娃”则能将计量经济学模型用于药物发现实验^[53]。数字人科学家是以数字化形式存在的科研伙伴,它们结合人工智能、深度学习与虚拟现实技术,具备处理大规模数据、模拟复杂情境和预测未知趋势的能

力。不同于实体机器人科学家，数字人科学家更侧重于理论研究、数据分析和决策支持，能够在虚拟空间中模拟实验、优化算法、分析模型，从而辅助科研人员做出更为精准的科学判断。数字人科学家的出现，不仅能够加速科学研究的进程，还能拓宽科研领域的边界，为人类开展自然与宇宙的科学研究提供前所未有的机遇。例如，中国科学技术大学信息处理中心与相关人工智能公司合作创建了“数字人钱学森”项目。

3.2 对科学研究过程的影响

新一代人工智能算法能够加速研发团队知识积累，激发研发灵感，同时也容易引发科研诚信等问题。一方面，人工智能算法可以为研发团队提供各种灵感和思路，激发创新意识和想象力，改进研发技术路线。例如，ChatGPT可以帮助研发人员更有效地利用信息和知识资源，将原本需要耗费大量时间和精力知识积累过程缩短，学习曲线更加陡峭，获得“知识代差”的领先优势(见图1)；同时，ChatGPT可以为研发人员提供快速的答案和建议，研发主体可在短时间内进行大量的数据和信息收集处理，从而获得更多的创新资源。另一方面，在数据采集和处理过程中，如果缺乏足够的监管和规范，可能会出现数据造假、篡改、泄露等问题。第五范式下的科研过程呈现技术“黑箱”的特征，推理过程不透明，底层逻辑不清晰。人工智能用于科学研究时需采集大量的数据进行

训练，目前尚存在虚假数据和数据质量不可控的问题，数据泛滥与高价值数据缺失的现象同时存在^[54]，加之人工智能算法若本身存在漏洞或缺陷，可能会导致错误的科研结论，冲击科学研究的可解释性、可重复性^[55]，导致科学研究结论缺乏可信用度。值得注意的是，部分研究人员基于生成式人工智能(AIGC)进行论文创作发表，也易引发科研诚信质疑。

3.3 对科研设施与环境的影响

新的研究方式能够创新科研工具方法，变革科研设施与环境，高效率处理研究数据，缩减研发周期，但是科研成本的提升也不可忽视。研发人员可以运用人工智能算法探索新的解决方案和方法，推动技术的不断突破和升级。同时，基于计算机的虚拟实验室，让科学家以更安全、更简单和更有效的方式进行实验，从而测试不同的假设，更好地理解原因和反应的机制。通过自动化、智能化的科研流程、实验设计以及数据分析，有效缩短研发周期。然而，使用人工智能模型进行科学计算需要耗费大量的数据和算力资源，可能需要花费大量的时间和金钱来收集、处理、标注和管理相关数据。科研大模型的计算和存储需求可能要消耗大量的计算资源和存储空间，包括高性能计算机、大规模存储系统等，使得传统形态下的科研基础设施面临重大挑战。

3.4 对研究成果应用与科学传播的影响

第五范式能够提高研究效率和准确性，同时加速科研成果转化，但在这一过程中易引发科研伦理和科研传播问题。新的研究范式强调数据驱动和跨学科合作，通过整合多源数据、构建模型和进行数据挖掘，为科学家提供更深入的洞察和新的科学发现。这种方法可以大幅提高研究效率和准确性，减少不必要的试错成本。第五范式强调开放共享的理念，通过与其他领域的研究人员和行业合作伙伴进行交流和合作，科学家可以将研究成果应用于实际问题中，推动技术创新。然而，人工智能运用于科学研究可能会带来新的科研伦理问题，例如，科学研究人机交互过程中涉及大量的数据交换和信息共享，可能会导致敏感信息泄露和信息安全风险。此外，大模型运用于科学研究时的算法偏见值得警惕，在相关模型未经无偏性评估的情况下，在科学计算、预测和分

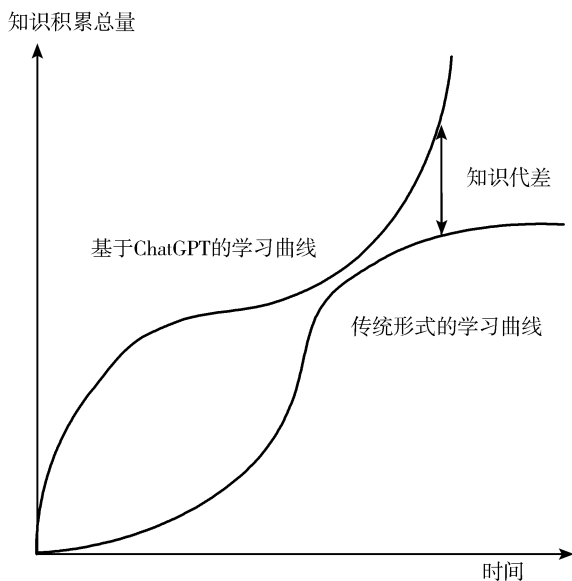


图1 传统形态与使用 ChatGPT 的学习曲线对比示意图

类等应用中容易存在算法歧视问题,使得研究结论有偏或者存在不正确的价值取向。在科学传播方面,大模型往往很复杂,其结果可能难以理解和解释,导致科学结果的传播受到限制,因为其他人可能无法理解或重复模型的结果。同时,智能机器具有二重性:工具性和类人性^[56]。类人性代表机器智能的主观能动性,例如,大模型智能体产出的“科研成果”是否具有知识产权,以及知识产权归属,目前仍是争议性问题。人工智能可以快速查阅、复制和传播科研产品,这些作品是否应该受到版权保护,以及如何进行版权保护,也是需要解决的问题。

4 推进第五范式可持续性的倡导与建议

一是提升人工智能科研应用,促进第五范式深化发展。通过设计和实施专门的培训计划,增强科研人员的计算技能与数学素养,使其能够熟练运用大模型进行科学研究。培养跨学科背景的复合型人才,兼具深厚的科学领域知识与娴熟的人工智能技术应用能力,这将极大地促进第五科研范式的进步和应用。同时,鼓励科研机构与企业构建人工智能科研团队,吸引并培养具备人工智能背景的科研人才,探索人工智能与科学研究的融合路径与方法,以提升科研效率与准确性。

二是加强前沿领域布局与基础研究,构建通用人工智能框架。支持具身智能、自主智能体等前沿领域的发展,规划通用人工智能底层架构,包括认知架构、核心算法、操作系统、编程语言与体系结构的设计。设立国家级大模型基金,以资助大模型的研发与训练。增加人工智能技术对基础研究的财政支持,通过深入探索算法、模型与技术,提升模型的泛化能力和鲁棒性。鼓励跨学科合作,促进科学家、工程师与计算机科学家之间的交流,深化人工智能与基础科学的融合。对模型内部工作机制进行深入研究,以提高人工智能大模型的透明度与可解释性。

三是大力发展公共科学数据库和科研工具链,

构建开放的科研生态环境。促进跨领域科学数据的共享与交流,强化数据收集、清洗、标注等关键环节的研究,以提升数据的质量与多样性,建立开放、透明的数据共享机制,打破数据孤岛,确保大模型训练所需专业数据的准确性与可靠性。为科研大平台构建统一的科研工具链,包括算法库、模型库和软件开发工具,减轻科研人员的技术压力。为数字化科研平台统一接口和标准,提高不同科研资源的兼容性,减少重复投资,降低科研成本。

四是构建伦理框架,确保价值观对齐。建立合理的大模型运用伦理框架,确保人工智能驱动的科学研究的符合伦理规范的框架下进行。在科研领域应用大模型前,必须对数据的公正性与无偏性进行严谨评估。加强对隐私保护、数据安全与算法公平性的考量,以规避潜在的伦理问题与风险。通过建立伦理审查机制,确保人工智能研究与应用的价值观与社会普遍认可的伦理原则相一致,促进科研活动的健康可持续发展。

5 结论

人工智能的快速发展正在深刻影响科学研究的方方面面,第五范式作为一种新兴的人工智能驱动的科学方法,逐渐成为关键的生产要素,引起了学者关注。但是,关于第五范式的一些关键性问题尚未达成共识。

本文对既有研究范式的演进脉络做了梳理,认为第一范式和第二范式属于传统范式,分别为实验科学和理论科学,第三范式与第四范式是在计算机发明后逐步出现的,作为跨学科研究新范式,能够为各领域科学研究提供有效的思考方法和实验工具以及强大的助力。在分析已有文献对第五范式研究的基础上,本文指出,现有研究尚未就这一概念形成共识。因此,通过对第五范式与传统研究范式在差异性和基础逻辑上的分析,重新界定了第五范式的概念,强调其具备跨时空、多模态、智能性、面向场景以及可持续性的特征。同时,本文还总结了人工智能推动科学研究的积极效应。

参考文献:

- [1] 苏明,陈·巴特尔. 数据驱动下的人工智能知识生产[J]. 中国科技论坛, 2021(11): 51-56.
- [2] 鄂维南. AI助力打造科学研究新范式[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 10-16.

- [3] 黄哲. 算力融合打造数智发展新引擎[N]. 中国计算机报, 2023-06-12(8).
- [4] 桑基韬, 于剑. 从 ChatGPT 看 AI 未来趋势和挑战[J]. 计算机研究与发展, 2023, 60(6): 1191-1201.
- [5] 杨青峰. 产用融合——智能技术群驱动的第五制造范式[J]. 中国科学院院刊, 2019, 34(1): 32-41.
- [6] 酃全民, 项锐. 机器学习与科学认知的新方式[J]. 社会科学, 2022(1): 130-135.
- [7] 王飞跃, 缪青海. 人工智能驱动的科学新范式: 从人工智能 4S 到智能科学[J]. 中国科学院院刊, 2023, 38(4): 536-540.
- [8] 瞿晶晶, 王迎春, 赵延东. 人工智能社会实验: 伦理规范与运行机制[J]. 中国软科学, 2022(11): 74-82.
- [9] 托马斯·库恩. 科学革命的结构[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1980年.
- [10] 杨伟国, 张成刚, 辛茜莉. 数字经济范式与工作关系变革[J]. 中国劳动关系学院学报, 2018, 32(5): 56-60.
- [11] HEY T, TANSLEY S, TOLLE K. Jim Grey on eScience: a transformed scientific method[C]//HEY T, TANSLEY S, TOLLE K. The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery. Redmond: Microsoft Research, 2009.
- [12] CULLINANE M J. Topological models for knowledge acquisition through observation[C]. Proceedings of the International Conference on Artificial Intelligence, Las Vegas, 2003.
- [13] MCCLUSKEY S. Essay review: lunar calendars, living the lunar calendar[J]. Journal for the History of Astronomy, 2013, 44(4): 485-487.
- [14] 刘仲林. 科学变革与文化新生的逻辑关联[J]. 今传媒, 2018, 26(2): 164-165.
- [15] HERNANDEZ D V. Reflections on tutoring ancient greek philosophy[J]. Studying Teacher Education, 2014, 10(2): 117-129.
- [16] 苗力田. 亚里士多德选集(形而上学卷)[M]. 北京: 中国人民大学出版社, 2000.
- [17] RACE A. Christians and religious pluralism: patterns in the Christian theology of religions[J]. Religious Studies, 1984, 20(3): f1-10.
- [18] 王静. 基督教与近代自然哲学的起源[J]. 求索, 2007(10): 3.
- [19] 梁爽. 论中世纪异端思想及其对近代科学产生的影响[D]. 哈尔滨: 哈尔滨师范大学, 2012.
- [20] 刘丽锋. 中世纪晚期西欧的实验科学思想[J]. 前沿, 2008(4): 43-45.
- [21] WHEELER H. The invention of modern empiricism: juridical foundations of Francis Bacon's philosophy of science[J]. Law Library Journal, 1983, 76(1): 78-120.
- [22] 刘则渊, 王海山. 近代世界哲学高潮和科学中心关系的历史考察[J]. 科研管理, 1981(1): 9-23.
- [23] 刘巍, 周琬. 马克思恩格斯科技创新思想及对中国的启示[J]. 科学社会主义, 2011(1): 125-127.
- [24] 杨沛霆, 徐纪敏. 关于普赖斯科学技术发展指数增长规律的探讨[J]. 科学学与科学技术管理, 1982(5): 2-5.
- [25] 苏玉娟. 大数据知识实现的维度分析[J]. 理论探索, 2017(2): 64-68.
- [26] 高世桥, 曲大成. 微机电系统(MEMS)技术的研究与应用[J]. 科技导报, 2004(4): 17-21.
- [27] 买买提明·艾尼, 热合买提江·依明. 现代数值模拟方法与工程实际应用[J]. 工程力学, 2014, 31(4): 11-18.
- [28] 孟小峰, 李勇, 祝建华. 社会计算: 大数据时代的机遇与挑战[J]. 计算机研究与发展, 2013, 50(12): 2483-2491.
- [29] 米加宁, 章昌平, 李大宇, 等. 第四研究范式: 大数据驱动的社会科学研究转型[J]. 学海, 2018(2): 11-27.
- [30] 刘经南, 方媛, 郭迟, 等. 位置大数据的分析处理研究进展[J]. 武汉大学学报(信息科学版), 2014, 39(4): 379-385.
- [31] 张春霆. 生物信息学的现状与展望[J]. 世界科技研究与发展, 2000(6): 17-20.
- [32] 张晓强, 蔡端懿. 大数据对于科学研究影响的哲学分析[J]. 自然辩证法研究, 2014, 30(11): 123-126.
- [33] 张峰, 张迪. 论大数据时代科研方法新特征及其影响[J]. 科学学研究, 2016, 34(2): 166-170, 202.
- [34] 李国杰. 智能化科研(AI4R): 第五科研范式[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 1-9.
- [35] MERCHANT A, BATZNER S, SCHOENHOLZ S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery[J]. Nature, 2023, 624: 80-85.
- [36] LENG C, TANG Z, ZHOU Y G, et al. Fifth paradigm in science: a case study of an intelligence-driven material design[J]. Engineering, 2023, 24: 126-137.
- [37] 李国杰, 程学旗. 大数据研究: 未来科技及经济社会发展的重大战略领域——大数据的研究现状与科学思考[J]. 中国科学院院刊, 2012, 27(6): 647-657.
- [38] 陈永伟. 超越 ChatGPT: 生成式 AI 的机遇、风险与挑战[J]. 山东大学学报(哲学社会科学版), 2023(3): 127-143.
- [39] 赵朝阳, 朱贵波, 王金桥. ChatGPT 给语言大模型带来的启示和多模态大模型新的发展思路[J]. 数据分析与知识发现, 2023, 7(3): 26-35.

- [40] 蒋元锐. 医疗器械产业向智能化进发[N]. 中华工商时报, 2023-12-05(4).
- [41] 吴文峻, 马宇晴, 高雅君, 等. 人工智能驱动科学研究新范式综述——模型、应用与案例[J]. 人工智能, 2023(3): 1-17.
- [42] 袁毓林. 人工智能大飞跃背景下的语言学理论思考[J]. 语言战略研究, 2023, 8(4): 7-18.
- [43] 曾毅, 刘成林, 谭铁牛. 类脑智能研究的回顾与展望[J]. 计算机学报, 2016, 39(1): 212-222.
- [44] 沈汪兵, 刘昌, 施春华, 等. 创造性思维的性别差异[J]. 心理科学进展, 2015, 23(8): 1380-1389.
- [45] 颜世健, 喻国明. 智能方法作为“第五范式”: 人工智能时代科研范式的“新物种”[J]. 学术探索, 2024(1): 34-43.
- [46] 王红卫, 李珏, 刘建国, 等. 人机融合复杂社会系统研究[J]. 中国管理科学, 2023, 31(7): 1-21.
- [47] ISMAIL K. AI-driven IoT for smart health care: security and privacy issues [J]. Informatics in Medicine Unlocked, 2022, 30:100903.
- [48] 王海琴. 《蒂迈欧篇》宇宙论及其对近代科学的影响[J]. 自然辩证法研究, 2006(7): 3-6, 15.
- [49] 塞内加. 论生命之短暂(英汉对照)[M]. 北京: 中国对外翻译出版公司, 2012.
- [50] 王飞跃, 王雨桐. 数字科学家与平行科学: AI4S 和 S4AI 的本源与目标[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 27-33.
- [51] YE P, WANG F Y. Parallel population and parallel human: a cyber-physical social approach [J]. IEEE Intelligent Systems, 2022, 37(5): 19-27.
- [52] 段伟文. 人工智能科学家对科学认识论的挑战[J]. 农业图书情报学报, 2023, 35(11): 4-12.
- [53] 苦山. 人工智能引领新的科学革命[J]. 世界科学, 2023(12): 4-6.
- [54] 程学旗, 刘盛华, 张儒清. 大数据分析处理技术新体系的思考[J]. 中国科学院院刊, 2022, 37(1): 60-67.
- [55] 王晨阳, 褚建勋. AI for science: 科研应用及其带来的革新与挑战[J]. 南京邮电大学学报(社会科学版), 2024, 26(4): 10-19.
- [56] 成素梅. 智能革命引发的伦理挑战与风险[J]. 道德和文明, 2022(5): 194-202.

(责任编辑 沈蓉)

(上接第76页)

- [13] 曹宇轩, 粟锋. 中国“卡脖子”技术研究述评[J]. 科技和产业, 2022, 22(11): 38-44.
- [14] CORLEY K G, GIOIA D A. Building theory about theory building: what constitutes a theoretical contribution [J]. Academy of Management Review, 2011, 36(1): 12-32.
- [15] WHETTEN D A. What constitutes a theoretical contribution [J]. Academy of Management Review, 1989, 14(4): 490-495.
- [16] MAHONEY J T, SANCHEZ R. Building new management theory by integrating processes and products of thought [J]. Journal of Management Inquiry, 2004, 13(1): 34-47.
- [17] 张庆芝, 雷家骥. 基于科学的创新——从诺贝尔奖成果到商业产品的过程研究[M]. 北京: 清华大学出版社, 2018.
- [18] DURAND T. Dual technological trees: assessing the intensity and strategic significance of technological Change [J]. Research Policy, 1992, 21: 361-380.
- [19] 徐文伟. 从追赶到领先——华为的创新之路[J]. 中国科学院院刊, 2019, 34(10): 1108-1111.
- [20] SCHOT J, GEELS F W. Strategic niche management and sustainable innovation journeys: theory, findings, research agenda and policy [J]. Technology Analysis & Strategic Management, 2008, 20(5): 537-554.
- [21] NARAYANAMURTI V, ODUMOSU T. Cycles of invention and discovery: rethinking the endless frontier [M]. Cambridge, MA: Harvard University Press, 2016.
- [22] CATARINA C, RUI O, CRISTINA F A, et al. An innovative maturity model to assess supply chain quality management [J]. International Journal of Quality & Reliability Management, 2023, 40(1): 103-123.
- [23] KEMP R, SCHOT J, HOOGMA R. Regime shifts to sustainability through processes of niche formation: the approach of strategic niche management [J]. Technology Analysis & Strategic Management, 1998, 10(2): 175-198.
- [24] HOMMELS A, PETERS P, BIJKER W E. Techno therapy or nurtured niches? Technology studies and the evaluation of radical innovations [J]. Research Policy, 2007, 36(7): 1088-1099.

(责任编辑 申秋红)