

引用格式: 余江, 张越, 周易. 人工智能驱动的科研新范式及学科应用研究. 中国科学院院刊, 2025, 40(2): 362-370, doi: 10.16418/j.issn.1000-3045.20230411001.

Yu J, Zhang Y, Zhou Y. A new scientific research paradigm driven by AI and its applications in academic disciplines. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2025, 40(2): 362-370, doi: 10.16418/j.issn.1000-3045.20230411001. (in Chinese)

# 人工智能驱动的科研新范式及 学科应用研究

余江<sup>1,2</sup> 张越<sup>1,2\*</sup> 周易<sup>1,3</sup>

1 中国科学院科技战略咨询研究院 北京 100190

2 中国科学院大学 公共政策与管理学院 北京 100049

3 英国曼彻斯特大学 全球发展研究院 曼彻斯特 M13 9PL

**摘要** 人工智能 (AI) 驱动的科研新范式通过数据、算力、算法的深度耦合深度嵌入科学研究的全过程, 引发科研流程、思考逻辑和组织模式的深刻变革。文章系统总结了AI驱动科研新范式的主要特征与形式, 提出AI驱动科研新范式的演化方向由“科研自动化”向“科研模型化”“科研智能化”发展。AI在科研中的应用深度与范围不断拓展, 并将推动科研组织治理模式等的重大变革。进一步, 文章围绕科研学科特征研究AI应用在各领域的适用条件, 分析AI驱动科研新范式在各学科领域的成功案例, 在此基础上解析科研资助机构、数据库建设运营方、科技领军企业、科研机构与科研人员等主体探索AI驱动的科研应用面临挑战, 并提出相关启示与建议。

**关键词** 人工智能, 科研新范式, 演化过程, 学科应用

DOI 10.16418/j.issn.1000-3045.20230411001

CSTR 32128.14.CASbulletin.20230411001

科研范式是科研人员进行科学观察、思考和操作的基本过程和逻辑, 是根本的科研世界观和对应方法论体系<sup>[1]</sup>。为了解决关键科研问题, 在科研新范式形

成过程中, 往往涉及过往范式的推进与提升, 以及科研路径的多元耦合。当前, 数据、算法与算力成为国家基础战略资源, 美国、英国等发达国家相继提出通

\*通信作者

资助项目: 中国科学院青年创新促进会会员项目 (2023165), 国家自然科学基金重点项目 (72334007、71834006)

修改稿收到日期: 2024年7月23日

过建立国家人工智能研究基础设施。例如，美国国家科学基金（NSF）会牵头启动“国家人工智能研究资源项目”（NAIRR）、英国政府发布《产业战略：人工智能领域行动》（*Industrial Strategy: Artificial Intelligence Sector Deal*）为人工智能发展提供算力、数据、模型、软件等关键资源，推动科研方式、生产方式和治理方式深刻变革，提升经济和社会效益。以ChatGPT大语言模型等为代表的革命性技术应用为人工智能（AI）赋能科研提供了新的方法和工具。2022年8月，我国科学技术部等6部门联合印发《关于加快场景创新以人工智能高水平应用促进经济高质量发展的指导意见》，将围绕高水平科研活动打造重大场景列为需要着力打造的AI重大场景之一<sup>[2]</sup>。在此背景下，将科学研究与AI相结合、把握AI驱动的科研新范式的发展规律、探索科研范式转型路径是我国面向科技强国建设，抢抓未来科技创新方向、形成国际科技竞争优势的重要抓手。

科研范式经历了从“经验科学”“理论科学”“计算科学”向“数据密集型科学”的演化，目前正在向“第五范式：人工智能+科学”发展。**第一范式：**经验科学以伽利略的物理学、动力学为代表，是通过描述记录自然现象、基于经验进行归纳的实用性科学。随着科研深入发展，经验科学由于受实验条件限制逐渐向理论科学范式演化。**第二范式：**理论科学以牛顿力学和相对论为典型代表，在自然现象的基础上进行了抽象简化，并通过构建数学模型进行归纳总结。**第三范式：**计算科学通过电子计算机对科学实验进行模拟仿真，如模拟核试验、天气预报等。**第四范式：**随着数据累积和运算量不断增加、计算设施不断升级迭代，由传统的假设驱动逐渐转向基于科学数据驱动的研究范式<sup>[3,4]</sup>。**第五范式：**随着AI模型的准确性与预测能

力获得革命性突破，科研范式进一步向通用模型驱动演化。“人工智能+科学”定位于依托海量大数据与大算力进行通用AI大模型训练与优化，发挥其在精度、效率、可迁移性、涌现性等方面的优势，进行多学科领域的多元化科研应用，对于科研组织模式产生了重大影响。本文首先探讨AI驱动的科研新范式的主要特征与演化方向，进一步探究科研学科特征对AI应用的要求，通过对AI驱动科研新范式的成功案例进行深入剖析，提出我国推动AI在科研应用的相关启示与建议。

## 1 人工智能驱动科研新范式的主要特征

科研范式是特定历史时期科学共同体进行科学研究的方式，与科技创新的内在规律要求相适应<sup>[5]</sup>。当前，AI驱动的科研新范式正在形成并且迅速发展，2016年，以蒙特卡洛树搜索算法为核心的AlphaGo在围棋上首次超越人类并取得一系列的突破性胜利之后，基因组学和物理学等领域的科学团队开始把深度神经网络和机器学习运用到相关研究当中。例如，美国芝加哥大学的团队开始尝试用深度神经网络预测蛋白质三维结构，日本东京大学与IBM公司合作建立医学诊疗的大数据神经网络用于临床研究。此后，AI的应用在学界的影响不断攀升。2020年，AlphaFold2在蛋白质结构预测大赛中达到人类的预测观察水平<sup>①</sup>。与此同时，我国也在积极部署与推动AI技术的突破与科研应用，在2017年启动“新一代人工智能重大科技项目”，布局重点领域的相关研究。2018年，鄂维南院士提出“AI for Science”概念，强调利用AI解决科研实际问题。2022年10月，中国科学技术大学建立数据驱动的AI化学家机器人“小来”。目前，AI驱动科研范式变革的主要特征体现在嵌入科研全流程、推动科研设施升级、重构科研人员与仪器设备定位及角色

① 李国杰. 国内AI研究“顶不了天、落不了地”——该想想了. (2021-08-05)[2024-07-18]. <https://mp.weixin.qq.com/s/uDyag12YVosLKLmBSGw9og>.

分工、促进科研组织治理模式变革4个部分。

### 1.1 人工智能深入嵌入研究问题形成、实验设计、实验操作、数据分析等科研全过程

科学研究包括研究问题形成、实验设计、实验操作、数据分析等主要环节。AI驱动的科研范式通过对海量数据的收集与处理并进行智能模型训练，赋能科研多场景，嵌入科研全过程。例如，通过深层神经网络计算与推导，模拟实验设计并自主生成研究问题；智能化大科学装置进行高精度高强度的实验操作并能够实现一定程度的自主决策等。相比之前几代科研范式的升级，“人工智能+科学”范式可以更直观、更彻底、更全面地作为科研突破的“加速器”与“倍增器”<sup>⑥</sup>。在微软公司官网的创新博客中，微软全球技术院士、微软研究院科学智能中心负责人Chris Bishop认为，AI深度学习可能会极大地提高人类在差异巨大的空间和时间尺度上对自然现象进行建模和预测的能力，并将这一能力视为科学新范式出现的曙光<sup>②</sup>。

### 1.2 人工智能推动科研设施升级

AI驱动的科研范式转变需要大型数据库、大型AI基础模型、大科学装置、智能设备的支撑，其中智能软硬件的协同和人机协同发挥关键作用。算法和算力的强耦合，是AI驱动科研的必要条件；在以AI计算中心为代表的计算基础设施支撑下，极大地提升了AI大模型的训练效率<sup>⑦</sup>。BP算法、分层训练等新的算法模型和训练模型，以及去中心化自治组织（DAO）等新的组织和运营方式<sup>③</sup>逐步被引入并推广至大范围使用。

### 1.3 人工智能重构科研人员与仪器设备定位及角色分工

基于AI算法的大模型训练将推动科研仪器设备自主推理决策能力不断增强，在人机交互中，科研人员

不断重新定位人机分工模式。在科研仪器智能化升级迭代的过程中，AI相关设备通过实验过程的自动控制与自主决策可以大幅减少原来需要科研人员大量精力与时间的重复性实验工作。在此基础上，科学家专注发挥其前沿研究思想的想象力和创造力，使其能够更有效地实现目标。例如，在生物信息学等领域，通过机器学习算法分析海量基因数据，可以高效进行基因模式和关系识别以预测特定基因的功能。这极大地降低了以往科研人员进行海量数据分析计算的工作量，使其能够专注于基因研究中的新创意的思考与实践。

### 1.4 人工智能推动科研组织治理模式变革

AI与各学科不断交叉融合，需要科研组织治理模式发生相应变革以适应交叉学科的发展。大量科学家团队基于AI通用基础模型开发平台进行科学研究，形成“大平台、小用户”组织模式，成为AI驱动的科研组织模式变革的重要方向<sup>⑦</sup>。在此过程中，科研基础设施更加注重开放和共享，科研人员跨学科、跨部门的开放协作，兼具AI及各科研领域知识和技术积累的复合型人才成为新型组织模式的关键支撑力量。人工智能在科研中的深度应用将推动数据与代码共享、文档信息交互、科研流程开放及合作研发，以虚拟实验室、开源平台等为代表的“大平台、小用户”新型科研组织模式将持续发展。

## 2 人工智能驱动科研新范式的演化方向

AI驱动科研新范式的演化方向由“科研自动化”向“科研模型化”“科研智能化”发展，其在科研中应用的深度与范围不断拓展（图1）。

### 2.1 科研自动化——实验过程模仿复制

随着科研任务量的不断提升，高重复性、高精度

② Bishop C. AI4Science to empower the fifth paradigm of scientific discovery. (2022-07-07)[2024-07-18]. <https://www.microsoft.com/en-us/research/blog/ai4science-to-empower-the-fifth-paradigm-of-scientific-discovery/>.

③ 丁文文, 王飞跃. 什么是分布式自主科学? 它将如何解决科学发展之困? . (2023-04-30)[2024-07-18]. <https://swarma.org/?p=42177>.

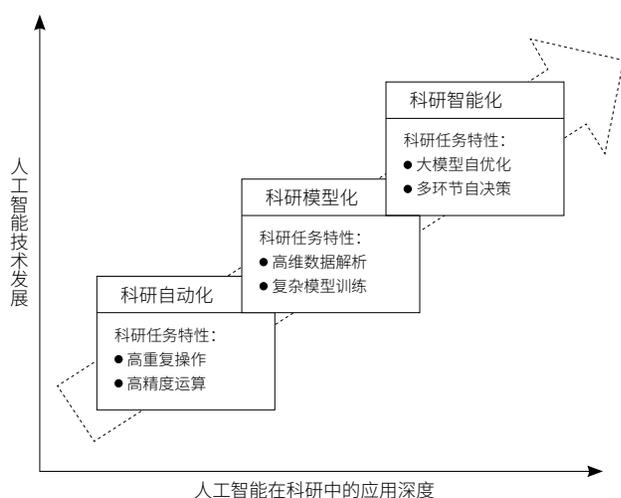


图1 人工智能驱动科研新范式的演化方向  
Figure 1 Evolution direction of AI-driven scientific research paradigm

的科研过程往往需要实验人员花费大量的时间，在重复进行实验的同时提升实验精度。科研自动化能够通过实验操作过程的模仿复制实现对科研人员一定程度的替代，解决高强度、高重复、高频率、高精度的科学实验与试错问题。目前，根据自动化的程度和规模，实验室自动化大致可分为单模块形式自动化、工作站形式自动化、流水线形式自动化、机器人形式自动化4种类型。实验室自动化程序可根据预定好的模型和程序辅助科研人员执行相应科研任务，让科研人员集中精力投入创造性的科研工作中。在实验操作中，科研自动化适合进行高危高频高强度实验，可实现在高温、剧毒、黑暗等恶劣实验环境下对人力的替代。在高精度实验试剂的操作中能够提升克级、毫克级高通量试剂筛选中的效率与准确性。科研自动化能够最大程度地降低科学家或实验操作人员身体疲惫或情绪变化等主观因素带来的负面影响。

## 2.2 科研模型化——大模型探索应用

随着数据海量扩张、计算模型升级，实验所需计算维度呈指数级增长，解析难度和运算维度不断增加。通过对AI大模型的探索应用，优化实验设计，使高维计算和高效解析得以在短时间内实现，实现科研

模型化。通过探索并依托特定领域模型训练，AI可以解决高维度科学问题，在短时间内推动生物学、物理学等领域的重要突破。已有科研范式往往以第一性原理理论为基础，从最基本的公理、命题或假设出发，逐步推导、演算出现实问题的一个或多个解决方法。测算化学结构、物化特性再到应用实践，要经过无数次结构、性能，以及应用维度的测算，这个过程往往面临极大的思考能力与计算能力的局限。AI在科研中的应用能够通过高维度的计算和高精度的自主实验控制打破原有的科研瓶颈。在生物学领域，生命系统的复杂性隐藏了背后的原理，AI的应用有助于理解生命涌现原理。在物理学领域，AI改变了以往物质标定、解析，以及底层图谱处理的方式。以反应气体测量为例，中国科学院工程热物理研究所基于AI模型提出等效特征图谱法（ECSA），通过智能仪器和程序实现了对气体图谱的精准识别<sup>[8]</sup>；通过多模态数据输入输出，以及多类型算法提升模型的有效性，实现高维度图谱矩阵的检测及解析，颠覆领域内原有的科研范式。

## 2.3 科研智能化——大模型深度应用

通过建立通用大模型训练平台并持续推动模型迭代与优化，“人工智能+科学”将实现高复杂度、高任务量科研的过程自主决策，推动科研范式的智能化发展。随着结构化科研数据库的不断完善，AI算法与算力的提升将支撑其实现更为复杂的分析能力与自主决策过程。深度学习、迁移学习、强化学习等算法与模型的不断改进和发展，在提升模型适用度的同时降低训练成本；科研数据、算法资源库的优化将提升AI计算精度与效率，实现高效高精度求解的复杂问题。AI的感知智能、认知智能和决策智能在基础设施层的提升和模型规律训练的基础上不断完善，从多方面、多角度与科研领域融合，推动实现科研智能化。在处理高任务量和高复杂度的科研工作中，通过智能大模型与科研设备的融合应用，促进复杂研究过程中智能决

策能力的持续提升,实现科研智能化。例如,中国科学技术大学研发出覆盖收集信息、提出假设、分析处理等科研全流程的智能科研设备——机器人化学家“小来”(图2)。“小来”能够在智能查找并阅读文献过程中,将前人的论文、专利等文本通过自然语言形成机器可以“理解”的结构化数据,并以此为基础提出科学假说、设计实验方案。在实验配方优化过程中,由于缺少通用可预测物理模型,科研人员需要较长时间才能够合成合格样品。然而,通过机器学习驱动的AI学机器人,可以在没有物理模型的前提下优化离散和连续目标,并通过2个配方机器人平台自主完成复杂的合成程序,在无需人工干预的情况下执行半自动样品制备和表征。该种由机器学习自动触发的实验可以实现在15个工作日内找到符合要求的实验配方<sup>[9]</sup>。

### 3 科研学科特征对人工智能应用的要求

AI驱动的科研新范式主要在物理学、化学、材料科学、生物学等基础科学领域,以及生物医药、天体物理、地球科学、能源化学等交叉学科进行应用<sup>[7,9]</sup>。随着AI模型的通用性不断加强,其对于各领域科研过程的嵌入程度持续加深。其在各学科中的应用需要充分考虑学科领域在数据获得积累、模型规律凝练、多维数据计算、实验过程试错等多方面面临的瓶颈问题,并对学科需求与适用条件进行深入分析。

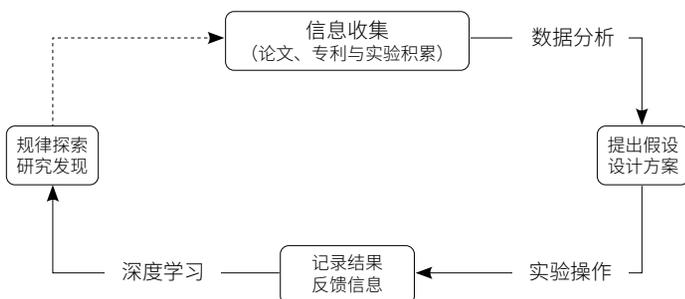


图2 机器化学家“小来”的工作流程

Figure 2 Workflow of chemist machine “Xiaolai”

#### 3.1 训练数据的可发现、可获取、可复用

AI模型训练过程中,科研领域数据需要具备可发现、可获取、可复用等特性以扩大AI模型训练的数据规模,提升数据质量<sup>[10]</sup>。海量数据的持续训练有力提升AI模型的通用性和有效性,从而准确把握问题需求与逻辑形成有价值的新发现。当前,随着材料、生物、化学等领域的数据库的积累建设不断完善,实验数据量呈现数据级增长,部分领域甚至实现从GB级别到PB级别的飞跃。例如,生物领域庞大的基因数据库、医学领域的诊断数据及案例图像、化学反应中数以万计的化合物和反应结构都为机器学习和训练提供了数据支持。

#### 3.2 科学规律的模型凝练

AI驱动的科研新范式在“复杂性高、变量因子多,依靠经验科学、理论科学等以往科学范式难以归纳总结”的领域具有重要应用价值,需要依靠AI模型在海量多维数据中找出科学规律。依托国内外已有海量科学数据的训练,AI模型能够通过对相关领域科学规律的系统凝练,突破科研人员或团队个体认知的局限并产生突破性进展。例如,在生物医药领域,利用AI技术建立虚拟药物筛选模型,实现更快检索、更广覆盖范围的化合物筛选及优化。在药物性质研究中,利用深度神经网络算法提取结构特征,提升性质预测的准确度。未来随着通用AI模型通用性、有效性的增强,其在海量多维数据中探寻科学规律的能力将不断增强。

#### 3.3 多维数据计算

在科学理论发展到一定程度后,多维数学计算问题成为研究人员的掣肘。英国理论物理学家、量子力学的奠基者之一狄拉克提出,对物理化学问题做数学求解的基本规则已完全清楚,困难在于基本规则应用于真实体系的方程过于复杂而无法求解<sup>[7]</sup>。生物学领域也存在同样的困难,描述生命系统复杂性的模型内部因素关系极其复杂,

理解生命功能涌现原理面临的核心难点是维数灾难。AI模型为破解科学研究中的多维计算问题提供了有效的路径。例如，在天体物理学领域，仅仅是可观测星系的天体样本数达到数十亿。运用AI方法进行星系形状分类和指定天体辨识、天体物理现象的快速自动化建模及仿真图像的生成，可大幅提升研究效率。

### 3.4 实验试错过程的数据模型迭代

在化学、生物制药等领域，实验试错是验证科研人员直觉的重要路径，是科研过程中高成本、耗时、费力的环节。当前，AI模型推动新物质的发现模式向可预测、可设计的方向转变，通过模型预测逐步替代耗时费力的实验过程。随着AI模型不断发展，未来可以在海量物质中预测相关“成分—结构—工艺—性质”之间的关系，并进一步得到所需物质，推动相关领域形成革命性突破。例如，在能源化学领域，AI能够加速锂离子电池电解液的设计开发与实践，通过预测溶剂分子和相应电解液的性质，为选择合适的电解液提供有效方法。在合成生物学领域，谷歌的AI团队DeepMind开发的AlphaFold2提出基于深度学习算法可以在原子精度上预测蛋白质结构，能够仅根据未知蛋白质所含氨基酸的DNA或RNA源序列，准确、有效预测其三维形状，彻底改变了蛋白质折叠的技术路线<sup>[11]</sup>。同样，在我国深圳合成生物研究重大科技基础设施中，通过AI学习7轮迭代，将400万种可能的组合收缩到714种组合，获得高于30倍的蛋白产量提升<sup>[12]</sup>。在生物医药领域，基于AI模型进行新药物在人体内代谢分布预测，可提升新药物对癌症细胞的作用与治疗效果，并在研究早期阶段评估药物的安全性和有效性。

## 4 对人工智能驱动科研范式的未来展望

AI驱动科研范式以大模型、大数据、大算力为支撑，深度嵌入科研全流程，将推动科研组织治理模式发生重大变革，使得整体科研能力与效率大幅提升。

ChatGPT大语言模型能够基于对海量文献与资料的训练学习快速掌握科研问题的研究进展，辅助进行代码编写、统计分析及论文撰写等各项工作。然而，目前ChatGPT等生成式AI技术在科研论文撰写中仍存在伦理等多方面风险争议。在科研组织治理模式方面，区块链智能合约的发展，以及与AI相结合的DAO基础设施的完善，为分布式自主科学(DeSci)的发展奠定了基础。由分布式网络构建的数据收集、模型构建和知识生成体系通过更加灵活、聚焦的方式将显著提高科研效率。

当然，要实现真正的AI科研范式对现有研究范式的替代还有很长的路要走。从技术层面来看，AI面临的关键技术挑战之一是数据的质量和数量。大模型训练需要依靠大量、优质的数据，以提升模型的准确性。当前，许多国际化的开源平台已经运行，并以可互相操作的形式支持AI模型的训练。以最典型的基因组学研究为例，国际上已有包括Gene Expression Omnibus(GEO)、ArrayExpress、Protein Data Bank(PDB)等多个开源基因数据库用于训练机器模型，以预测肿瘤的类型。同时，在数据隐私和安全方面，需要对数据收集、存储及处理方式进行加密和脱敏处理。除此之外，实现AI赋能科研，构建国际科技竞争新优势，还需要科研资助机构、数据库建设运营方、科技领军企业、科研机构与科研人员等打破壁垒、合作创新。

(1) 加强对“人工智能科研基础模型与应用”方向的部署。AI驱动的科研新范式建立需要科研资助部门有层次、分重点地推进“人工智能+学科”的相关项目，统筹布局 and 合理分配资源，加强跨学科项目支持力度。建议科研资助机构进一步强化对AI原创算法、原型系统等底层技术建立长期稳定支撑机制，培育科研领域原创性AI计算框架。对以生物制药等为代表的领域，打造专用于动态蛋白结构模拟的超算平台，布局生物制药底层算法和原型系统，促进相关

软件的开发与应用。同时,要重视对于科研项目成果的评估和问责机制,特别是在数据开源开放、DeSci持续发展的背景下,需要进一步评估参与者质量、建立网络环境信任、建立适应科研新范式的问责机制。

(2) 加强人工智能模型训练的科研数据库建设。当前,我国用于AI训练的数据仍面临质量良莠不齐、依赖国外数据库资源、不同部门/学科之间存在较高数据流动壁垒、数据标准不统一等问题。同时,各研究机构与大学对于科研数据库建设与运营的激励力度不足,研究人员缺乏投入数据库建设相关工作的动力。亟须建立并优化国家级科学计算与应用创新平台、国家级科学大数据应用服务环境、国家级知识服务平台,以更快、更好地实现数据读取、筛选、识别等跨平台、跨学科的数据应用。进一步提升相关数据库的数据质量,在数据安全的前提下建立跨平台的数据共享与交换机制,充分发挥数据可溯源、可编程、可感知、可交流和可关联等特性<sup>[13]</sup>;完善数据库建设、运营的激励机制,将科研数据库作为重要研究成果纳入人员考评、项目验收机制。

(3) 促进科技领军企业运用人工智能提升研发效能。近年来,AI开始在生命科学、新药研发、发动机设计等企业应用研究场景发挥重要作用<sup>④</sup>。AI大幅提升了工程研发智能模拟的精准度,通过把复杂应用场景情况纳入AI模型降低研发试错成本,缩短研发流程。在此过程中,亟须推动科技领军企业向创新链前端攀升,推动企业加强AI领域应用模型研发投入,加强AI软件应用生态建设布局,特别是加强探索AI平台方与领域应用方的合作模式。以制药产业为例,加强AI制药公司与传统药企的合作,通过传统药企为AI制药公司选定靶点,以及提供小分子化合物库、基因组学信息、化学、临床数据等信息作为输入数据或训练数据,AI制药公司基于模型从大量的输入数据中

识别或转化出有应用价值的输出结果,以优化靶点发现、化合物合成和筛选的精确性与效率。

(4) 建立跨学科复合型人才和管理人才培养体系。科研机构需要加强AI领域与物理学、化学、生物学等领域专家之间的跨学科合作<sup>[14]</sup>;高校应在国家重大战略需求的驱动下,打通学科群链条和科技创新链条,建立跨学科的人才培养与合作机制,并形成专业化的支撑团队<sup>[15]</sup>。2018年鄂维南院士提出“建立一个交叉学科项目,通过跨学科布局,探索机器学习在各个科学和工程领域的应用”,建议加强在AI交叉学科专业方向的布局,加强基础学科领域科研人员的跨学科研究能力。同时,培养复合型管理人才,以为AI平台的治理提供保障。加强管理人员在AI、区块链等智能加密新兴技术成果方向的学习与应用。

(5) 鼓励科研人员运用人工智能技术探索科技突破的新路径。在AI驱动的科研新范式背景下,DAO与DeSci等新技术新模式为科学的发展提供新的组织方式和科研生态,将改变现有科学体系的结构、规范、激励机制<sup>[16]</sup>。科研人员需要积极学习接纳AI带来的科研新范式,主动学习培养AI思维模式,掌握AI嵌入科学研究的流程,运用AI技术进行专业学科前沿技术探索。在DAO分布式决策技术特性的基础上,充分调动具有共同兴趣和愿景的科研人员积极性、激发研究人员潜力、提高研究人员权益。例如,通过去中心化交易、协作平台发布科研提案,在相关DAO组织中争取更大话语权。主动探索DeSci在科研资助与知识共享中的应用,积极应对其发展早期阶段面临的内外部治理困境和挑战。

## 参考文献

- 1 薛菁华,徐慧婷,陈广玉.全球科研范式数字化转型趋势研究.竞争情报,2022,18(6):54-63.  
Xue J H, Xu H T, Chen G Y. Study on the trend of digital

④ 勒川. AI for Science: 共创新未来—2022 中关村论坛系列活动“科学智能峰会”举行. 中关村, 2022, (9): 40-41.

- transformation of global scientific research paradigm. *Competitive Intelligence*, 2022, 18(6): 54-63. (in Chinese)
- 2 喻思南. 人工智能, 为科研注入智慧动能. 人民日报, 2022-10-20(14).  
Yu S N. Artificial intelligence, adding intelligent kinetic energy to research. *People's Daily*, 2022-10-20(14). (in Chinese)
  - 3 Tolle K M, Tansley D S W, Hey A J G. The fourth paradigm: Data-intensive scientific discovery. *Proceedings of the IEEE*, 2011, 99(8): 1334-1337.
  - 4 丁大尉. 大数据技术带来科学知识生产新模式. 中国社会科学报, 2022-07-26(A04).  
Ding D W. The "fourth paradigm" of scientific research: Big data technologies bring about a new paradigm of scientific knowledge production. *Chinese Social Sciences Today*, 2022-07-26 (A04). (in Chinese)
  - 5 陈套. 推动科研范式升级 强化国家战略科技力量. 中国科技奖励, 2020, (8): 67-68.  
Chen T. Promoting the upgrading of scientific research paradigms and strengthen the national strategic science and technology force. *China Awards for Science and Technology*, 2020, (8): 67-68. (in Chinese)
  - 6 汪洋, 周园春, 王彦桐, 等. 适度超前推动科研基础平台建设, 支撑我国高水平科技自立自强. 中国科学院院刊, 2022, 37(5): 652-660.  
Wang Y, Zhou Y C, Wang Y G, et al. Promoting infrastructure construction in advance to support sci-tech self-reliance and self-strengthening at higher level. *Bulletin of Chinese Academy of Sciences*, 2022, 37(5): 652-660. (in Chinese)
  - 7 北京科学智能研究院. 科学智能(AI4S)全球发展观察与展望. 北京: 北京科学智能研究院, 2022.  
Beijing Institute of Scientific Intelligence. *Artificial Intelligence for Sciences (AI4S)—A Global Outlook 2023 Edition*. Beijing: Beijing Institute of Scientific Intelligence, 2022. (in Chinese)
  - 8 Li R B, Xia H D, Huang Q, et al. Nonlinearity in mass spectrometry for quantitative multi-component gas analysis in reaction processes. *Analytica Chimica Acta*, 2022, 1194: 3394-3412.
  - 9 Xu Y J, Liu X, Cao X, et al. Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research. *The Innovation*, 2021, 2(4): 100179.
  - 10 孙建军, 李阳. 科学大数据: 范式重塑与价值实现. 图书与情报, 2017, (5): 20-26.  
Sun J J, Li Y. Science big data: Paradigm remodeling and value realization. *Library & Information*, 2017, (5): 20-26. (in Chinese)
  - 11 Jumper J, Evans R, Pritzel A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 2021, 596: 583-589.
  - 12 Araujo R P, Liotta L A. Universal structures for adaptation in biochemical reaction networks. *Nature Communications*, 2023, 14: 2251.
  - 13 余江, 孟庆时, 张越, 等. 数字创新: 创新研究新视角的探索及启示. 科学学研究, 2017, 35(7): 1103-1111.  
Yu J, Meng Q S, Zhang Y, et al. Digital innovation: Exploration and enlightenment of the new perspective of innovation research, *Studies in Science of Science*, 2017, 35 (7): 1103-1111. (in Chinese)
  - 14 鲁鸣鸣, 王建新. "人工智能+X"交叉学科科研创新能力培养模式探索. 工业和信息化教育, 2021, (10): 1-5.  
Lu M M, Wang J X. Exploration of "Artificial Intelligence + X" interdisciplinary research and innovation capacity cultivation model. *Industry and Information Technology Education*, 2021, (10): 1-5. (in Chinese)
  - 15 余江, 陈凤, 方元欣. 面向世界科技强国建设的科教融合新体系初探. 科教发展研究, 2022, 2(3): 55-78.  
Yu J, Chen F, Fang Y X. A preliminary exploration of the new system of research-education integration for the construction of a scientific and technological powerhouse. *Research on Science*, 2022, 2(3): 55-78. (in Chinese)
  - 16 王飞跃, 缪青海. 人工智能驱动的科学新范式: 从AI4S到智能科学. 中国科学院院刊, 2023, 38(4): 536-540.  
Wang F Y, Miao Q H. Novel paradigm for AI-driven scientific research: From AI4S to intelligent science. *Bulletin of Chinese Academy of Sciences*, 2023, 38(4): 536-540. (in Chinese)

## A new scientific research paradigm driven by AI and its applications in academic disciplines

YU Jiang<sup>1,2</sup> ZHANG Yue<sup>1,2\*</sup> ZHOU Yi<sup>1,3</sup>

(1 Institutes of Science and Development, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

2 School of Public Policy and Management, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3 Global Development Institute, the University of Manchester, Manchester M13 9PL, UK)

**Abstract** The artificial intelligence (AI)-driven paradigm of scientific research, deeply embedded through the integration of data, computing power, and algorithms, has triggered profound changes in the research process, thinking logic, and organizational patterns. This study systematically summarizes the main characteristics and forms of the AI-driven new scientific research paradigm. It proposes that the evolution of the AI-driven research paradigm is shifting from “automated research” to “model-based research” and “intelligent research.” The depth and scope of AI applications in scientific research continue to expand, and this will drive significant changes in research organization and governance models. In addition, this study discusses the applicability of AI in various fields based on the characteristics of scientific disciplines and analyzes successful cases of the AI-driven new paradigm in various academic fields. It also examines the challenges confronted by key players such as research funding agencies, database construction operators, science and technology leading enterprises, research institutions and researchers, as well as pointing out the implications and making suggestions to explore the AI-driven research applications.

**Keywords** artificial intelligence (AI), new paradigm of scientific research, evolutionary process, disciplinary applications

余江 中国科学院科技战略咨询研究院研究员,中国科学院大学公共政策与管理学院教授、博士生导师。主要研究领域:数字科技与产业创新战略等。E-mail: yujiang@casisd.cn

**YU Jiang** Professor of Institutes of Science and Development, Chinese Academy of Sciences (CAS), Professor at the School of Public Policy and Management, University of Chinese Academy of Sciences (UCAS). His research focuses on digital technology and industrial innovation strategy, etc. E-mail: yujiang@casisd.cn

张越 中国科学院科技战略咨询研究院副研究员。主要研究领域:产业创新管理与竞争战略等。E-mail: zhangyue@casisd.cn

**ZHANG Yue** Associate Professor of Institutes of Science and Development, Chinese Academy of Sciences (CAS). Her research focuses on industrial innovation management and competitive strategy, etc. E-mail: zhangyue@casisd.cn

■ 责任编辑:岳凌生

---

\*Corresponding author