

引用格式: 杨光, 李晓轩, 肖小溪. AI 赋能科学研究的基本特征及政策与管理趋势研究[J]. 世界科技研究与发展, 2024(4): 483–496.

# AI 赋能科学研究的基本特征及政策与管理趋势研究<sup>\*</sup>

杨光<sup>1,2</sup> 李晓轩<sup>1,2</sup> 肖小溪<sup>\*,1,2</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)

**摘要:** 近年来, 人工智能(AI)对科学研究的传统范式带来冲击, 并产生了诸多现有范式难以企及的耀眼成果。推动 AI 在科学研究中应用是当前科技管理的重要课题。本文从两个维度分析 AI 赋能科学研究的基本特征, 从科研范式维度发现 AI 提高数据利用效率赋能经验范式、AI 增强理论模型构建赋能理论范式、AI 更好地拟合复杂系统参数赋能模拟范式、AI 具有海量数据的处理能力赋能数据驱动范式; 从科学研究过程维度发现, AI 对科学研究各个环节都进行赋能, 并且每个环节因 AI 能力进步而自身在迭代与进步。在此基础上, 本文进一步总结国际上推动智能化科研(AI4S)发展的政策与管理趋势, 以及中国在 AI4S 发展方面所面临的挑战。最后给出对我国的启示: 中国需要加强 AI4S 相关的战略研究和宏观规划、加大政策和资金支持、推动 AI4S 领域的国际交流与合作, 以期为中国 AI4S 的有序发展提供研究支撑。

**关键词:** 人工智能; AI; 科学研究; 赋能; 政策与管理趋势

**DOI:** 10. 16507/j. issn. 1006-6055. 2024. 07. 008

## Characteristics of AI Empowering Scientific Research and Study on Trends in Policy and Management<sup>\*</sup>

YANG Guang<sup>1,2</sup> LI Xiaoxuan<sup>1,2</sup> XIAO Xiaoxi<sup>\*,1,2</sup>

(1. Institutes of Science and Development, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;  
2. School of Public Policy and Management, UCAS, Beijing 100049, China)

**Abstract:** In recent years, AI has impacted the traditional scientific research paradigm and produced dazzling achievements that the existing paradigms could not reach. Promoting the application of AI in scientific research is an important topic in current science and technology management. This paper analyzes the basic characteristics of AI empowerment in scientific research from two dimensions. From the dimension of the research paradigm, it is found that AI improves the efficiency of data utilization, empowering the empirical paradigm; AI enhances the construction of theoretical models, empowering the theoretical paradigm; AI better fits the parameters of complex systems, empowering the simulation paradigm; and AI has

\* 中国科学院战略研究专项“重点实验室建制化科研组织模式及其评价机制研究”(GHJ-ZLZX-2023-05-4)

\* \* E-mail: xiaoxiaoxi@casisd.cn

the capability to process massive data, empowering the data-driven paradigm. From the dimension of the scientific research process, it is discovered that AI empowers every link of scientific research and each link iterates and progresses due to the advancement of AI capabilities. Based on this, the paper further summarizes the international trends in policies and management to promote the development of AI4S, the challenges faced by China in the development of AI4S, and provides insights for our country. China needs to strengthen strategic research and macro-planning related to AI4S, increase policy and financial support, promote international exchange and cooperation in the AI4S field, and provide research support for the orderly development of AI4S in China.

**Keywords:** Artificial Intelligence; AI; Scientific Research; Empowerment; Policy and Management Trends

近年来,人工智能技术(Artificial Intelligence, AI)蓬勃发展,渗透到人类社会的方方面面,引发人类思考该技术带来的机遇与挑战。在科学领域, AI 对科学研究的传统范式带来冲击,并产生了诸多现有范式难以企及的耀眼成果。例如,2021 年 Alphafold2 对蛋白质三维结构的预测达到了实验精度,并且只需几小时就可以预测过去需要数月才能破解的蛋白质结构。2023 年,科学家运用 AI 发现了质子中存在粲夸克,解决了困扰科研界 40 年的问题。同年,Deepmind 团队通过机器学习发现 38 万种具有稳定结构的材料,是过去所有已发现稳定材料数量的 8 倍,有可能通过实验合成并投入使用。*Nature* 发布的 2023 年度十大人物,有史以来首次包括了一款计算机程序——ChatGPT,此举标志 ChatGPT 在科学研究领域的创造性和影响力得到了认可。当前,智能化科研(AI for Science, AI4S)被认为是科学研究的一种新范式<sup>[1-3]</sup>,有望成为中国新质生产力发展的强大动力。

那么, AI4S 能为科学研究带来哪些赋能? 如何通过政策和管理举措促进这些赋能的实现? 部分研究从化学<sup>[4]</sup>、模拟<sup>[5]</sup>、生命科学<sup>[6]</sup>、数学<sup>[1]</sup>、技术<sup>[7]</sup>等不同学科领域分析 AI 的应用现状;部分研究对未来的科研组织形式进行预判,跨学科合作将成为主流科研方式,科研更加依赖以大模型为主的科研大平台<sup>[1,2]</sup>;部分研究从科学计量学的视

角发现 AI 在科学研究中应用广泛<sup>[8]</sup>, AI 将成为科学研究中非常重要的工具<sup>[8,9]</sup>。这些研究分析了 AI4S 的应用现状与机遇,但是缺乏对 AI 如何赋能科学研究的一般性归纳以及具体如何推动 AI4S 发展的管理与政策分析。当前,在大国科技与经济竞争日趋激烈的时代背景下,深刻认识和理解上述问题将有助于 AI4S 发展并助力实现科技领先,进而转化为国家安全与经济竞争优势。本文主要从科学研究的范式演变和科学研究的主要环节这两个维度分析 AI 对科学研究的赋能特征,并结合 AI4S 所面临的挑战,分析总结国际上推动 AI4S 发展的政策与管理趋势,以期为中国 AI4S 的有序发展提供研究支撑。

## 1 AI 赋能科学研究范式

科学范式的演进本质上是一个不断增强和赋能的过程。“范式”这一概念最初由美国科学哲学家托马斯·库恩(Thomas Samuel Kuhn)于 1962 年在《科学革命的结构》中提出,指的是常规科学所赖以运作的理论基础和实践规范。2007 年,吉姆·格雷(Jim Gray)曾总结经验范式、理论范式、计算范式和数据密集型范式这四种范式来描述科学发现的历史演变<sup>[10]</sup>。从本质上看,从旧范式到新范式的更迭是一个增强和赋能的过程(图 1)。例如,经验范式早期主要通过对自然现象进行直接观察,后来科学家在观察与实验的基础上加入

逻辑推理构建理论模型,实现了先理论构建后实验验证,由此形成了科学研究的理论范式。相比于前两个范式中的观察和实验,仿真和模拟是对复杂现象更近似的表达,但往往面临计算量庞大的问题,因此直到计算机诞生之后,由于计算机为科学模拟带来利器,科学研究才真正进入计算范式(又称为“第三范式”)。随着大数据时代的到来,科学研究的计算科学范式中那些依靠信息设备收集或模拟产生数据、依靠软件处理数据、依靠计算机存储数据并依靠专业的数据管理和统计软件分析数据的研究活动,被单独分离出来成为一种新的科学范式——e-Science(一般译为“数据密集型研究”“数据驱动的研究”“第四范式”)。当前,这四种范式都不同程度地应用于不同学科领域的科学研究中,共同推动科学研究的进步。

AI 擅长克服“维数灾难”并在复杂数据中建立相关性,对原有的四种科学范式进行不同程度和方向的赋能。当前, AI 技术(以机器学习技术为主)和海量数据相结合,可实现对原有科学范式的增强。具体来看,1) AI 赋能经验范式主要体现在提高对观测数据的利用效率。AI 加入后,能够更好地利用当前及历史的实验数据(包括结构化

数据与非结构化数据、新数据与旧数据、甚至是曾经报废的数据),实现对复杂系统更全面的理解。2) AI 赋能理论范式主要体现为增强理论模型构建和提高实验效率。一方面, AI 在数据处理以及知识汇聚方面能够跨越学科壁垒,既能整合和分析来自不同学科的数据,也能吸收不同学科的逻辑和架构,从而有助于构建跨领域的理论模型,指导后续的实验检验。另一方面,过去理论范式下科学家以控制变量法进行科学实验,从特定尺度对有限数量的样本进行分析。AI 与机器人自动化相结合,改变了过去由于低通量的实验方法导致科学实验依赖于穷举与试错的局面<sup>[4]</sup>,通过高通量实验极大地提高了实验效率。3) 对计算范式而言, AI 赋能主要体现为更好地拟合复杂系统的关键参数、求解控制复杂系统的微分方程以及对复杂系统中的状态进行建模,实现对科学模拟的增强。现有的模拟技术严重依赖于人类对所研究系统的底层机制的理解和认识,而系统通常比较复杂,很难进行准确高效的模拟<sup>[5]</sup>。AI 引入计算范式后,科学模拟从传统的数值计算逐步转向与 AI 相融合的模拟方式,从而解决更加复杂的现实世界的科学挑战。例如,中国“风乌 GHR”大模型 30 秒

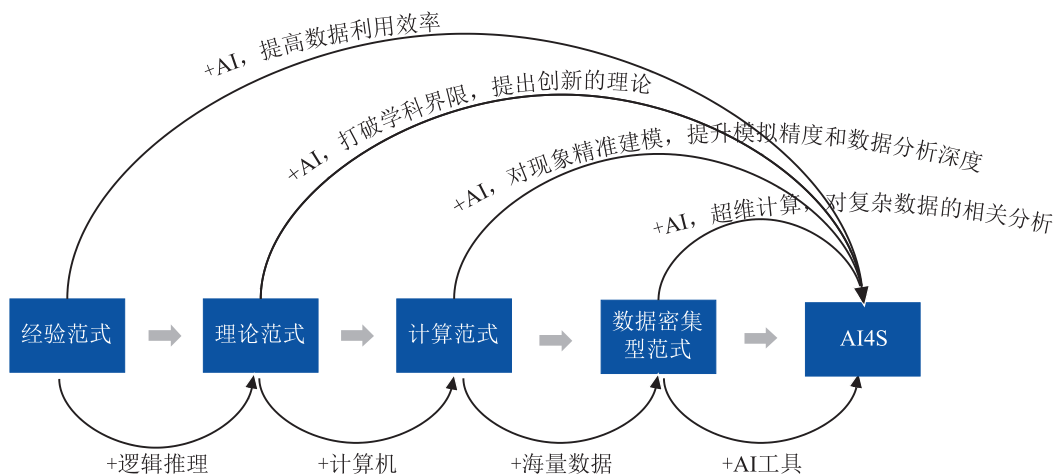


图 1 科学研究新范式对旧范式的赋能和增强

Fig.1 Empowerment and Enhancement of the Old Paradigm by the New Paradigm in Scientific Research

即可生成未来 10 天全球高精度预报结果,显著优于传统气象预报方法。4)对数据驱动范式而言, AI 赋能主要是因其具有海量数据的处理能力而成为真正实现数据驱动的关键技术工具。随着科学观测装置、观测技术的发展,大数据学科(如天文学、高能物理、地球空间信息学等)科学数据规模与复杂度不断增加,但是数据存储和分析的需求在过去的计算机时代还未得到充分满足<sup>[11, 12]</sup>,直至 AI 技术的出现和引入。例如,天文学中的大视场短时标巡天每天都以 TB 量级的速度形成大规模数据流,依赖 AI 技术可实现实时选择性地存储和分析。

2 AI 赋能科学研究各个环节

从微观层面来看,科学研究的过程是一个螺旋上升的过程。本文借鉴美国教育心理学家和教育研究者约瑟夫·诺瓦克(Joseph D. Novak)提出的科学探究螺旋模型(Spiral Model of Inquiry)来描述科学研究过程,即科学研究的螺旋模型(Spiral

Model of Research, SMR)(图 2)。该模型最初是作为教育领域中概念图(Concept Mapping)的一部分,用于帮助学生通过循环和迭代的过程来构建和组织知识。后来,这个模型被朱迪·哈尔伯特(Judy Halbert),琳达·凯泽(Linda Kaser)和海伦·蒂姆珀利(Helen Timperley)等人应用于更广泛的科学探究过程,强调了科学探究是一个不断深入和扩展的循环过程<sup>[13-15]</sup>。从横断面来看,科学研究主要包含提出科学问题、确定科学假设、设计与操作实验、数据收集与分析、得出研究结论这五个环节;在 AI 赋能与时间因素的影响下,上述科学研究的五个环节呈螺旋上升形态,诸多重大科学问题尤其是复杂科学问题的解决往往需要这五个环节循环往复方能得到真正解决。具体来看, AI 对科学研究的赋能体现在两个方面。一方面, AI 对科学研究各个环节都进行赋能。另一方面, 由于 AI 的能力变强,科学研究每一个环节自身在迭代与进步;随着科学研究的进行, AI 学习了越来越多的数据与科学知识,模型精度与预测精

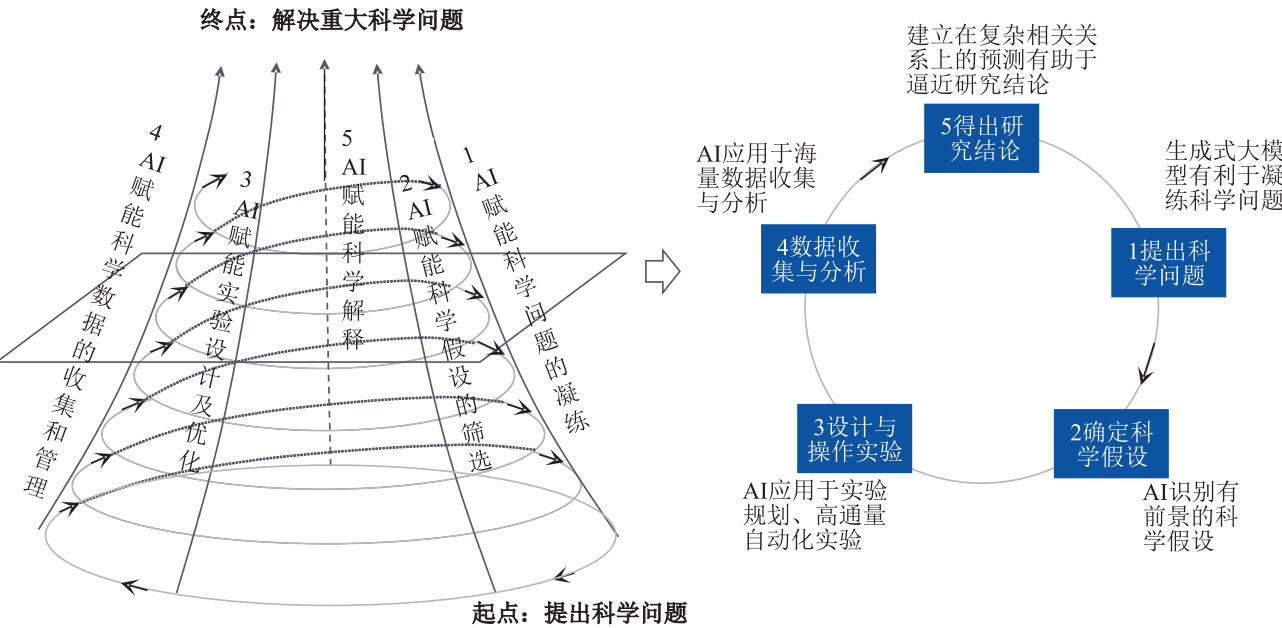


图 2 科学研究螺旋模型  
Fig.2 Spiral Model of Scientific Research



度都在不断进步,使得 AI 在假设验证上越来越准确,在实验控制上越来越强,在数据收集和管理上的准确度越来越高。

AI4S 范式的核心在于利用 AI 技术,特别是机器学习、深度学习等方法,来加速科学发现的过程,解决传统方法难以处理的复杂科学问题。通过对当前 AI4S 典型案例的分析,可以看到, AI 已经深度赋能上述科学研究螺旋模型,在科学研究的主要阶段表现出不同于传统科研范式的特征<sup>[16]</sup>。

**特征 1 (AI 赋能科学问题的凝练):生成式语言大模型等 AI 技术应用于信息挖掘、头脑风暴和文献综述,有利于科学问题的凝练与形成。**

科学研究的问题凝练主要有需求拉动和学科驱动两大模式,前者主要依赖于对需求信息的深度挖掘以及与需求方的头脑风暴,后者主要依赖于文献综述及与同行学者及跨领域专家的思想碰撞。2023 年, *Nature* 的调查显示,当前研究人员主要采用生成式 AI (如 ChatGPT、Elicit) 用于辅助科学研究中的头脑风暴、写作手稿和进行文献综述<sup>[9]</sup>。在头脑风暴方面,生成式 AI 具有创造和解释内容的能力,能够跨越思维界限提供跨学科知识与意想不到的联系,辅助科学家提出创造性想法。在文献综述方面,生成式 AI 快速筛选和总结大量科学文献<sup>[17]</sup>,助力研究人员全面了解研究背景和把握当前学术前沿。此外, AI 在信息检索的准确性和覆盖面上远优于现有的检索工具,且具有强大的数据深度挖掘和生成能力,科研人员可借助 AI 分析产业和社会需求,有利于科研人员更好地把握经济社会发展中的主要问题,辅助需求拉动的科学问题凝练。

**特征 2 (AI 赋能科学假设的筛选): AI 基于海量数据的相关性分析,帮助科学家快速筛选和识**

**别有前景的科学假设,指导后续的实验验证。**

可检验的假设是科学发现的核心,但是提出有意义、可检验的科学假设并非易事, AI 能够基于海量数据的相关性分析,快速处理大量的候选假设,筛选出有潜力的假设进行后续验证。以新无机晶体材料的发现与合成研究为例,合成具有稳定结构的无机晶体材料对芯片、新能源电池等产品具有重要意义,但传统上发现这类新材料主要依赖于试错。 AI 可以快速筛选理论上具有稳定性的材料结构,为进一步的实验验证与合成提供假设基础。2023 年, Deepmind 团队建立了用于发现新材料的深度学习模型 (GNoME)。具体来看,首先在对一系列已知稳定材料数据集进行训练的基础上生成稳定晶体结构,随后利用密度泛函理论预测晶体的稳定性,预测结果会返回 GNoME 用来进一步训练该模型。运用该方法, Deepmind 团队发现了 220 万种材料,其中 38 万种理论上具有稳定性的结构,是过去所有已发现稳定材料数量的 8 倍,有可能通过实验合成并投入使用。再如,在医药研发领域, AI 可以筛选大规模分子库,识别出可能具有治疗潜力的分子用于后续实验研究<sup>[18]</sup>;在材料学领域, AI 从 160 万种候选分子库中筛选出数千种最适合用于 OLED 的蓝光材料<sup>[19]</sup>。

**特征 3 (AI 赋能实验设计及优化):强化学习算法等 AI 技术可优化实验方案,并结合机器人自动化平台开展高通量科学实验。**

一方面,在实验方案的选择和优化方面, AI 技术可以协助科研人员选择实验路径、设置实验参数、减少所需的试错成本。例如,在化学领域, AI 系统可以设计出合成目标化合物的合成路径,提出从起始化学物质到目标化合物的多个可能步骤和方法。再如,在有关托卡马克控制策略的研究中,强化学习算法提供了对核聚变实验进行实

时控制的实验参数<sup>[20]</sup>。氢核聚变会产生巨大能量,是缓解能源危机的一个潜在路径;托卡马克是一种实现核聚变的容器,其通过提供极高温高压环境将氢变成等离子状态来产生核聚变,由于等离子体不稳定,因此设计托卡马克的控制系统是一个复杂的过程。为此,2022 年,DeepMind 和瑞士等离子体中心合作,构建了一个使用强化学习算法设计托卡马克控制器的方案;该强化学习算法将等离子体的电流、位置和伸长率等状态数据确定为奖励函数的控制目标,对等离子体状态与托卡马克控制策略相关性进行暴力求解,以找到接近最优的控制策略。

另一方面,在科学实验的操作平台方面,科学家将 AI 技术和机器人技术结合,建设自动化的科学实验平台,通过高通量科学实验快速产生实验数据,并反馈 AI 系统用于校准训练模型。例如,中国科学技术大学研制的机器化学家智能系统主要包含三部分:机器阅读系统(能够总结前人的知识与智慧)、机器计算系统(能够计算物理模型,实现智能预测)、机器实验系统(进行高通量实验);该智能系统将高通量实验产生的数据用于进一步校准预训练模型,目前已成功应用于火星产氧催化剂的无人筛选与创制、燃料电池催化剂筛选、高分子材料逆向创制等科研工作。此外,英国格拉斯哥大学开发了名为 Chemputer 自动化机器人系统,同样集成了文献阅读、实验方案提出、自动化实验等功能,英国利物浦大学、美国伯克利国家实验室也都建立了能够高效执行实验的机器化学家平台。

**特征 4 (AI 赋能科学数据的收集和管理):**自动编码器等 AI 技术可增强微弱数据信号和罕见事件的捕获能力,辅助实现科学大数据的收集和管理。

随着科学观测技术的发展,科学数据已进入信息丰富的大数据时代<sup>[21]</sup>。特别是天文学、高能物理学等领域都面临着科学数据的爆炸增长,亟需高效方法应对大规模科学数据。AI 技术(如自动编码器)可以实时处理数据,检测罕见事件<sup>[22]</sup>,已广泛应用于物理学、海洋学、天文学等领域。例如,在天文学中,“中性碳”指的是宇宙中的冷气体云块,是研究星系形成和演化的重要探针。由于中性碳的信号非常微弱且稀少,通常需要在海量的类星体光谱数据中才能找到。使用传统的搜寻方法非常耗时,并且容易遗漏一些微弱信号。中国科学院上海天文台的研究团队利用深度学习方法<sup>[23]</sup>,在国际斯隆数字巡天项目第三期释放的类星体光谱数据中,成功发现了 107 例宇宙早期星系内的冷气体云块含有中性碳吸收体,获得的样本数几乎是此前获得最大样本数的两倍,并且成功探测到了更多比以前更微弱的信号。此外,随着实验平台收集的数据集的规模和复杂性增加,科学研究越来越依赖实时处理和高性能计算来选择性地存储和分析高速生成的数据<sup>[24]</sup>,如粒子碰撞实验每秒生成的超过 100 TB 的数据。

**特征 5 (AI 赋能科学解释):**AI 擅长处理超维的相关关系,有助于科学家在面对复杂问题时得出更加逼近现实的研究结论。

在小数据时代,由于计算机能力不足,大部分的相关性仅限于寻求线性关系,但是随着数据爆炸式的增加与计算机计算能力的提升,机器学习等算法提高了对超维复杂系统的相关性分析能力,通过自动识别“关联物”,建立起事物之间的相关性,对事物或现象进行预测。例如,在蛋白质预测中,AlphaFold 的建立起氨基酸序列与蛋白质结构之间复杂的相关性来对蛋白质结构空间进行原

子精度的预测<sup>[25]</sup>。再如,在粒子物理学中, AI 基于海量历史数据分析,自动提取特征进行建模,给出最可能的质子结构模型。自从上世纪 70 年代粲夸克被发现以来,通过粒子对撞实验证明质子的结构中精确含有粲夸克是过去 40 年来物理学家的一个重要课题。但是由于粲夸克质量大容易衰变在实验中难以收集到有效的数据精确证明其存在。米兰大学的物理学家提出了一种机器学习方法,科学家基于过去 35 年的 50 万次粒子对撞实验生成最可能的质子的结构模型,结果发现了粲夸克的存在及其对质子质量和动量的贡献,结果可能性高达 99.7%<sup>[26]</sup>。

AI 之所以能够赋能上述科学研究的各个环节,推动科学研究的螺旋上升,是由于 AI 具有强大模式识别(Pattern Recognition)能力,即 AI 能够处理海量的超维数据,并对数据之间的相关性进行暴力求解,以通过学习持续性优化模型的预测精度。但由于 AI 技术本身还处于发展的初步阶段, AI4S 目前还存在一些不足。1) 数据质量和偏差。将 AI 应用于科学研究依赖高质量的科学数据,但科学研究中的数据可能不完整、有噪声或存在偏差。这些问题会影响 AI 模型的准确性和可靠性。2) 可解释性问题。许多 AI 模型,尤其是深度学习模型,通常被视为“黑箱”,难以解释其内部工作原理而科学发现需要透明和可验证的过程。3) 领域知识不足。科学研究需要深厚的专业知识,尽管 AI 在数据处理和模式识别方面非常强大,但它缺乏人类专家的领域知识,导致提出的假设或结论不够准确或有意义。4) 过拟合和泛化问题。AI 模型有时会在训练数据上表现良好,但在处理新数据时表现不佳。这种过拟合问题在科学研究中可能导致误导性的结果和结论。上述不足有待于未来 AI 技术的发展,以及 AI 技术与科学研究

之间的相互启发和促进,来加以改善和解决。

### 3 国际 AI4S 政策与管理趋势

国际上关于 AI4S 的政策和管理措施正在形成一些主要趋势或方向。这些趋势体现了各国政府和相关机构如何制定和实施政策,以促进和管理 AI 技术在科学研究中的应用。本文从 AI4S 战略规划、科研资助、基础设施建设等方面,分析和总结国际上 AI4S 相关政策与管理举措的主要趋势。

#### 3.1 战略规划

近年来,主要国家和国际组织为推动 AI4S 采取了一系列政策与管理举措,并通过发布专门的战略报告,加强对 AI4S 的顶层设计和宏观指导。1) 美国。在国家战略层面,2018 年美国成立国家人工智能安全委员会(National AI Security Commission, NSCAI)并于 2021 年发布重要报告,评估 AI 技术的发展及其对国家安全和竞争力的影响;2021 年,美国政府成立国家人工智能研究资源(National AI Research Resource, NAIRR)任务组,旨在制定和实施一个共享的研究基础设施,以支持 AI 辅助的研究和创新,2023 年发布 NAIRR 特别工作组报告。目前,上述两份报告中的部分建议已经得到了进一步落实。在政策层面,2022 年美国白宫科技政策办公室(Office of Science and Technology Policy, OSTP)发布《AI 权利法案蓝图》,2023 年美国标准技术研究院(National Institute of Standards and Technology, NIST)发布《AI 风险管理框架》。在具体举措方面,2019 年能源部(Department of Energy, DOE)发布 AI4S 的发展路线图,该路线图详细介绍了 AI 在 DOE 科学领域的进展和潜力,涵盖 16 个应用领域,包括科学、能源、安全等方面;在此基础上,2023 年 5 月美国



DOE 发布题为《面向科学、能源和安全的人工智能》的报告<sup>[32]</sup>,提出了在科学研究中利用 AI 的一个全面愿景,以及需要重点关注的 4 大方面:1)六种具有广泛应用潜力的 AI 构建模块方法;2)AI 在科学、能源和安全重大挑战中的机遇;3)必须调整或创建的跨领域技术及挑战;4)劳动力、数据、基础设施及规模的当前准备状态。2021 年以来美国国家科学基金会(National Science Foundation, NSF)遴选和资助若干个国家人工智能研究所(National Artificial Intelligence Research Institutes, NAIRI)。2021 年美国航空航天局(National Aeronautics and Space Administration, NASA)科学任务部组织来自学术界、政府部门、产业界超过 100 位专家召开 AI 研讨会,重点探讨推动 AI4S 需要着力解决的九个关键问题。2023 年美国 OSTP 和 NSF 联合启动国家人工智能研究资源计划试点项目。2)欧洲。欧盟提出了有关 AI4S 的宏观战略和规划指导政策,2023 年 12 月欧盟发布《AI 在科学中应用:利用 AI 的力量加速发现并促进创新》政策文件,强调了 AI 在科学发现中的重要性,提出制定专门的欧洲研究区政策,利用 AI 加速科研、促进创新、提升竞争力,详细讨论了 AI 在科学各研究阶段的应用,如处理大规模数据、自动化任务等,并指出了 AI 在医学、先进材料等领域的潜力<sup>[31]</sup>。2024 年 5 月,欧盟理事会正式批准《人工智能法案》,该法案成为世界上首部对 AI 进行全面监管的法案。随后,欧盟宣布成立 AI 办公室,依法对 AI 发展进行监管。此外,多个欧洲国家已经成立了开展 AI4S 的机构,如法国政府于 2021 年启动 AI 科学中心和 AI 多学科研究中心。3)日本。2024 年日本文部科学省编制的 2024 年版《科学技术创新白皮书》指出,AI 的发展将助推现行的第 6 期科学技术与创新基本计划,通过创新实现人人都能舒适

地发挥积极作用的社会。日本科学技术振兴机构与美国相关机构合作,支持使用量子计算机的研究,并推动大规模语言模型在生命科学中的应用。

### 3.2 科研资助

从科研资助来看,重视通过资助非法人机构建设以及多学科交叉融合研究等多种途径,开展对 AI 技术本身以及 AI4S 优先领域的资助。

1)资助建立开展 AI 技术以及 AI4S 研究的专门机构。2021 年,NSF 一份公告显示,推进 AI 发展需要的不仅仅是研究资金的投入,还需要建立强大的、可持续的 AI 研究和创新生态系统。由此,2021 年 NSF 开始启动人工智能研究机构计划,投资 2.2 亿美元建立 11 个由 NSF 领导的 NAIRI;2023 年,NSF 宣布继续投资 1.4 亿美元建立 7 个新的 NAIRI;从这些研究所覆盖的研究主题来看,既有开展 AI 技术本身研究的研究所,也有借助 AI 技术以 AI4S 方式推动领域研究(如 AI 驱动的农业和食品系统创新,气候智能型农林 AI 的神经和认知基础等)的研究所,一般属于依托高校建立的非法人机构,由 NSF 联合美国国防部(Department of Defense, DOD)、NIST 等联邦机构,以及英特尔公司、私人基金会和金融投资公司等共同提供经费支持,支持期限为连续五年,每年每个研究所的资助金额大约为 400 万美元。2015 年,英国成立艾伦图灵研究所(The Alan Turing Institute),是英国的国家数据科学和人工智能研究院,由剑桥大学、爱丁堡大学、牛津大学、伦敦大学学院和华威大学五所大学创始。该所最初获得了 4200 万英镑的启动资金,用于其前五年的运作。随后,英国政府、研究委员会及其他合作伙伴继续为其提供资金支持。例如,2021 年英国工程与物理科学研究委员会为研究所提供了 1000 万英镑的年度资助。2024 年春季预算中,英国政府宣布了额外的



5000 万英镑五年计划资金,以加强该研究所的研究能力,特别是在健康、环境、可持续性和国防安全领域。

2) 加强对 AI 技术关键问题的凝练,持续围绕关键问题资助 AI 能力提升,为发展 AI4S 夯实根基。国际上各国对于那些明确用于科学研究的 AI 技术给予优先的资助。美国总统科学技术顾问委员会在 2020 年发布的一份报告中指出,为了推动科学和技术进步,需要对 AI 技术开展更深入的持续研究。为此,2021 年 5 月 NASA 科学任务部组织召开 AI 研讨会,来自学术界、政府部门、产业界超过 100 位专家参与研讨并共同提出推动 AI4S 需要着力解决的九个关键问题<sup>[33]</sup>: AI 成熟度标准、数据稀疏性和异构性的处理方式、量化数据和模型的不确定性和偏差、结果不可重复性、有效的模型编目和分享、计算平台及数据存档方式、跨部门的数据和技术分享、工具和方法的跨领域迁移、AI 应用于科研的相关伦理。同样,DOE 2023 年的报告中也指出了需要取得研究突破的三大主题,主要涉及:将领域知识融入 AI 模型的质量和可解释性;运用 AI 技术大规模自动创建符合 FAIR 原则的数据集;AI 技术自身的基础性主题,如评估 AI 技术有效性和稳健性的框架、解释 AI 模型行为的技术、能够识别因果变量的 AI 模型等<sup>[32]</sup>。欧盟委员会计划加大对 AI 基础开发的投资以解决 AI4S 当前基础模型的一些局限性,例如,自动化、隐私增强技术以及可重复性和稳健性等方面。

3) 支持多学科交叉研究是推动 AI 与科学研究融合的重要途径。国际上的资助机构正在积极推动与 AI 相关的研究工作,并且在分配研究资金时,明确表示支持那些跨越多个学科领域的研究项目。AI4S 是智能科学技术与科学研究的融合,是典型的多学科研究,需要制定多学科合作计划,

让科学家、工程师和工业界能够与计算机科学家、应用数学家和统计学家合作,共同应对科学挑战。目前美国 NSF 中涉及 AI4S 研究的计划大多为多学科交叉研究计划,如 2019 年,NSF 启动“融合加速器”(Convergence Accelerator)计划,以及 2024 年新启动的“加速计算支持的科学发现”计划都明确要求研究团队是多学科的。法国人工智能科学中心和人工智能多学科研究中心于 2021 年启动,也采取多种举措支持跨学科交流合作,如设立客座科学家奖学金、开办 AI 技术专题培训课程和暑期学校、资助多学科 AI 驱动的研究项目等。

### 3.3 基础数据和平台设施建设

从基础能力建设来看,政府与学术界共同协调 AI4S 的基础设施建设,促进资源可获得性以及结果可检验性等关键问题的解决。

1) 建立开放共享的计算资源、高质量科研数据和工具平台,促进资源的公平分配和高效利用。例如,美国 OSTP 和 NSF 于 2023 年启动 NAIRR,部署一个包含算力、数据、AI 工具等在内的基础设施网络,为科研人员提供计算资源和高质量数据的访问权限。研究机构与私营部门的计算资源可在这样的平台中得到协调、汇聚与管理,以最大化计算资源的利用效益,解决数据碎片化、缺乏统一标准等治理难题。此外,2022 年,美国 NSF 联合 NASA、国立卫生研究院、国家司法研究所、国家海洋和大气管理局和美国地质调查局,启动建设“构建原型开放知识网络”(Proto-OKN)计划,预计投入 2000 万美元用于建立综合数据和知识基础设施原型,使来自医疗保健、太空、刑事司法、气候变化以及其他许多领域的驱动解决方案成为可能。欧盟正致力于建立数据空间,促进数据的共享和利用。目前,欧盟提供了多种平台,让研究人员能够访问数据和软件。作为数据空间

计划的一部分,欧盟正在投资开发欧洲开放科学云(European Open Science Cloud, EOSC)。EOSC是一个专为科学研究而设计的数据空间,目标是为研究人员提供更容易的研究数据访问和共享环境。欧盟的超级计算机占全球现有超级计算机的21%,这些超级计算机可以通过欧洲高性能计算联合计划访问。该计划是一个由欧盟及其成员国共同设立的合作框架,目标是通过协调和整合资源,建设世界一流的超级计算基础设施。

2) 资助机构和出版商联合推动原始科研数据的公开访问,推动解决 AI 研究以及 AI4S 研究中面临的结果难重复检验的问题。2021 年 5 月,美国 NASA 科学任务部提出 AI4S 研究的结果可重复性标准:如果研究结果可以由一个独立的新研究团队以类似的精度重现时,机器学习辅助的科学研究就被认为是可重复的。因此,检验 AI4S 研究结果是否可重复,需要独立的研究团队能够访问原始数据和代码。这意味着科研人员在发布 AI4S 研究结果的同时,提供原始文档、注释和完全开放的代码和数据,使其他人能够独立地复制研

究结果并扩展它们。为此,政府资助机构可要求其资助的研究发表在开放获取的期刊或会议上,并且要求研究者与第三方共享代码和数据。期刊出版商在组织对 AI4S 产生的论文进行同行评审时,可要求评审专家对该研究结果的可重复性进行评估,并鼓励科研人员在科学论文中发布代码和数据。期刊 *The Journal of Artificial Intelligence* 已开始使用可重复性检查表作为同行评议的一部分。

### 4 启示与展望

近年来,中国 AI 技术发展迅速,并在多个领域得到快速应用。但中国 AI4S 发展仍面临诸多挑战。

一些挑战是全球面临的共性问题,例如 AI4S 的构成要素包括算力资源、高质量科研数据、AI 工具(算法模型)、训练有素的科研人员等(图 3),但是目前这些方面都面临不同程度的障碍。其一,在基础设施方面,数据、AI 工具和计算资源是 AI4S 的“战略资产”,是 AI 在科学领域应用的关

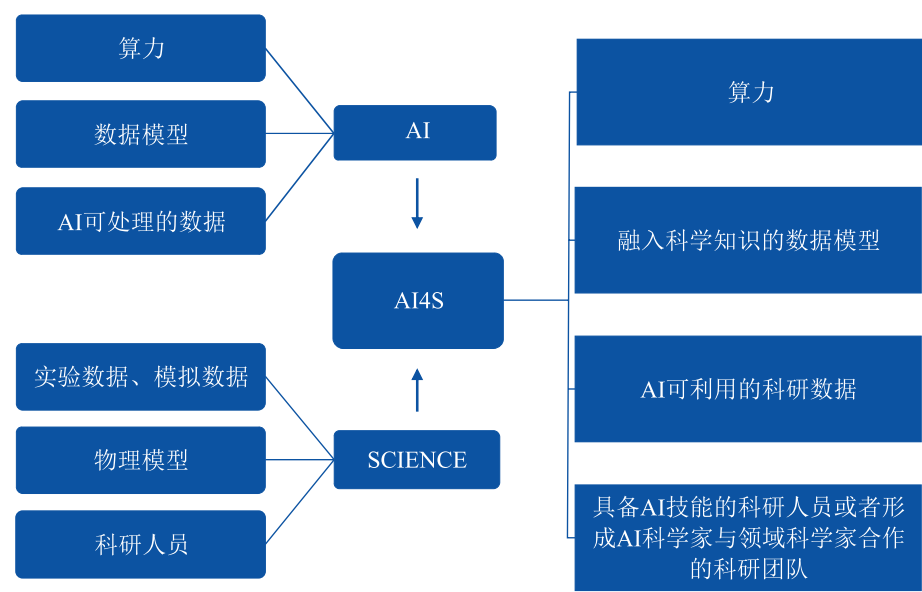


图 3 AI4S 的构成要素

Fig.3 Components of AI4S

键推动因素<sup>[9]</sup>,这也导致了科研人员在获取计算资源与高质量的科学数据方面存在障碍<sup>[27]</sup>。其二,在 AI 工具方面,虽然目前 AI 技术已经在很多科学研究领域展现出超越传统数学或物理学方法的强大能力,但是 AI 技术本身仍然存在着明显的不足,如生成式 AI 模型出现偏见、幻觉的情况<sup>[28]</sup>,训练模型内部工作缺乏透明度(“黑匣子”)<sup>[29]</sup>,AI 技术研究的可重复性检验程度不高等<sup>[30]</sup>。其三,在研究人员方面,大部分研究人员缺乏必要的计算和数据处理技能而无法将 AI 充分应用到研究中,部分研究人员甚至缺乏对 AI 潜力的正确认识。

此外,对于中国而言 AI4S 的发展还面临若干特殊挑战,例如,中国缺乏有影响力的 AI 开源开放平台,且在高端 AI 领域的人才储备相对不足;中国在基础理论和原创算法研究方面的自主创新能力仍较弱;中国在算力总规模上与美国相比差距不大,但在高端芯片等关键器件研发能力方面存在明显不足;中文科研数据标注和标准化布局不足;中国在制定 AI 相应的法律和伦理框架方面相对滞后。

上述挑战的存在,不利于 AI4S 在中国的有序发展,亟需科技界与政府科技管理部门共同采取针对性政策与管理措施加以应对。AI 技术引入科学研究中为科技发展带来全新的图景。当前,AI 技术仍持续蓬勃发展,新算法不断涌现、强算力不断提升。随着未来 AI 能力不断提升,AI 将进一步赋能科学研究的各类范式和主要环节,推动 AI4S 不断革新发展,为科学研究带来新的发展动力。因此,中国应重视 AI4S 的发展以及国际上推动 AI4S 的政策和管理实践动态,发挥 AI4S 支撑形成新质生产力的强大动能,助力中国实现高水平科技自立自强和世界科技强国目标。对此,本文对中国未来建设和完善 AI4S 发展的相关体制

机制提出 3 点建议。

**其一,加强 AI4S 相关的战略研究和宏观规划,提出中国推动 AI4S 的总体纲要。**中国作为全球科技创新的重要参与者,加强 AI4S 的战略研究和宏观规划显得尤为关键。科技界及政府科技部门应通过制定长远规划,明确中国推动 AI4S 的发展目标和路径,制定具体的实施计划和时间表,并重视战略规划连续性和稳定性。具体可从技术创新、人才培养、基础设施、伦理法规、国际合作等多个维度进行综合考虑,以实现科学研究的长远发展和科技竞争力的提升。例如,在技术创新方面,要制定 AI 技术可持续发展的路线图,重点支持符合科学研究特点的基础算法的研究;基础设施方面,通过增加政府资金投入、促进科研界与产业界的合作以及合理引导企业发展,来改善和提升 AI 相关基础设施的建设和应用;在伦理法规方面,在制定战略规划时应考虑到法律法规的建设,以确保在实际操作过程中有明确的法律依据和规范,增强战略实施的有效性和合规性,确保 AI 技术的应用符合伦理标准,保护个人隐私和数据安全。

**其二,加大政策和资金支持,为 AI4S 的人才培养创造良好的环境。**在当今快速发展的科技时代,在科学研究领域应用 AI 技术的能力和素养培养十分关键。为此,需要建立与 AI4S 相适应的培养体系。1)在现有资助体系中增加对于 AI4S 的项目支持,并优先支持不同学科领域专家和 AI 学者之间的交流与合作,促使其共同探索 AI 在科学领域的应用;2)改革高等教育课程和职业教育课程,将 AI 技术与科学教育相结合,培养学生的跨学科思维和解决问题的能力;3)鼓励学生参与实际的科研项目,通过实践来深化对 AI 技术在科学领域应用的理解;4)建立有效的培训和学习



机制,以帮助科研人员在 AI 技术迅速发展的环境中保持更新和进步。5) 加强高层次 AI 人才引进,通过提供有竞争力的税收优惠、科研资助和生活补贴,吸引国际顶尖 AI 专家和研究人員。通过上述措施,培养更多具备 AI 技术背景和科学素养的复合型人才,为科学研究的未来发展贡献力量。

**其三,推动 AI4S 领域的国际交流与合作,提升中国在 AI4S 国际标准和规范中的话语权。**国际合作可以促进研究数据和计算资源的共享,为 AI4S 提供更丰富的训练数据和更强大的计算支持,交流研究经验、探讨技术难题,加速科学问题的解决。中国应积极参与不同国家和地区在 AI4S 方面的国际交流和国际项目,与其他国家相互学习先进的技术和方法,在共同感兴趣的领域进行深入合作,共同解决重大科学问题,提高研究效率和质量。此外,中国应发挥在 AI 方面的已有优势,倡导在国际合作中如何协调各国科技管理和政策,形成统一的国际标准和规范,为 AI4S 的健康发展提供更好的数据和政策支持。

## 参考文献

- [1] 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. (E Weinan. AI Helps to Establish a New Paradigm for Scientific Research [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 10-16.)
- [2] 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. (LI Guojie. AI4R: The Fifth Scientific Research Paradigm [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 1-9.)
- [3] 王飞跃, 缪青海, 张军平, 等. 探讨 AI for Science 的影响与意义: 现状与展望[J]. 智能科学与技术学报, 2023, 5(1): 1-6. (WANG Feiyue, MIAO Qinghai, ZHANG Junping, et al. The DAOs to AI for Science by DeSci: the State of the Art and Perspective [J]. Chinese Journal of Intelligent Science and Technology, 2023, 5(1): 1-6)
- [4] 崇媛媛, 冯硕, 王嵩, 等. 大模型驱动、人机协同的机器化学家云设施[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 41-49. (CHONG Yuanyuan, FENG Shuo, WANG Song, et al. Large Model-Driven, Human-computer Collaborative Robotic AI-chemist Cloud Facility [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 41-49)
- [5] 谭光明, 贾伟乐, 王展, 等. 面向模拟智能的计算系统[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 17-26. (TAN Guangming, JIA Weile, WANG Zhan, et al. Computing Systems for Simulation Intelligence [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 17-26.)
- [6] 李鑫, 于汉超. 人工智能驱动的生命科学研究新范式[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 50-58. (LI Xin, YU Hanchao. A New Paradigm for Life Science Research Driven by Artificial Intelligence [Journal]. Bulletin of the Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 50-58.)
- [7] 陈云霁, 郭崎. AI for Technology: 技术智能在高技术领域的应用实践与未来展望[J]. 中国科学院院刊, 2024, 39(1): 34-40. (CHEN Yunji, GUO Qi. AI for Technology: Application Practice and Future Prospects of Technology Intelligence in the High-tech Field [J]. Bulletin of the Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 34-40.)
- [8] GAO J, WANG D. Quantifying the Benefit of Artificial Intelligence for Scientific Research [Z]. (2024-06-01). arXiv: 2304.10578. 2023.
- [9] VAN NOORDEN R, PERKEL J M. AI and Science: What 1,600 Researchers Think [J]. Nature, 2023, 621(7980): 672-675.
- [10] HANSEN C, JOHNSON C, PASCUCCI V, et al. The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery

- [M]. Washington,DC.: Microsoft Research, 2009: 153-163.
- [11] 孟小峰. 科学数据智能: 人工智能在科学发现中的机遇与挑战[J]. 中国科学基金, 2021, 35(3): 419-425. (MENG Xiaofeng. Scientific Data Intelligence: AI for Scientific Discovery [J]. Bulletin of National Natural Science Foundation of China, 2021, 35(3): 419-425.)
- [12] 王彦雨, 雍熙, 高芳. 人工智能的学科汇聚现象及其对科研范式的影响研究[J]. 社会科学战线, 2024(3): 26-40. (WANG Yanyu, YONG Xi, GAO Fang. A Research on the Convergence of Artificial Intelligence Disciplines and its Impact on Scientific Research Paradigm [J]. Social Science Front, 2024(3): 26-40.)
- [13] HALBERT J, KASER L. Leading Through Spirals of Inquiry: For Equity and Quality [M]. Winnipeg: Portage & Main Press, 2022.
- [14] KASER L, HALBERT J. Leadership Mindsets: Innovation and Learning in the Transformation of Schools [M]. London: Routledge, 2009.
- [15] TIMPERLEY H, KASER L, HALBERT J, et al. A Framework for Transforming Learning in Schools: Innovation and the Spiral of Inquiry [M]. Melbourne: Centre for Strategic Education Melbourne, 2014.
- [16] WANG H C, FU T F, DU Y Q, et al. Scientific Discovery in the Age of Artificial Intelligence [J]. Nature, 2023, 620: 47-62.
- [17] TEIXEIRA DA SILVA J A, TSIGARIS P, Tsigaris P, et al. Publishing Volumes in Major Databases Related to Covid-19 [J]. Scientometrics, 2021, 126(1): 831-842.
- [18] LIU G, CATACUTAN D B, RATHOD K, et al. Deep Learning-guided Discovery of an Antibiotic Targeting *Acinetobacter Baumannii* [J]. Nature Chemical Biology, 2023, 19: 1342-1350.
- [19] GOMEZ-BOMBARELLI R, AGUILERA-IPARRAGUIRRE J, HIRZEL T D, et al. Design of Efficient Molecular Organic Light-emitting Diodes by a High-throughput Virtual Screening and Experimental Approach [J]. Nature Materials, 2016, 15: 1120-1127.
- [20] DEGRAVE J, FELICI F, BUCHLI J, et al. Magnetic Control of Tokamak Plasmas through Deep Reinforcement Learning [J]. Nature, 2022, 602: 414-419.
- [21] 黎建辉, 沈志宏, 孟小峰. 科学大数据管理: 概念、技术与系统[J]. 计算机研究与发展, 2017, 54(2): 235-247. (LI Jianhui, SHEN Zhihong, MENG Xiaofeng. Scientific Big Data Management: Concepts, Technologies and System [J]. Journal of Computer Research and Development, 2017, 54 (2): 235-247.)
- [22] HINTON G E, SALAKHUTDINOV R R. Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks [J]. Science, 2006, 313(5786): 504-507.
- [23] GE J, WILLIS K, CHAO K, et al. Detecting Rare Neutral Atomic-carbon Absorbers with a Deep Neural Network [J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2024, 531(1): 387-402.
- [24] DEIANA A M, TRAN N, AGAR J, et al. Applications and Techniques for Fast Machine Learning in Science [J]. Frontiers in Big Data, 2022, 5: 787421.
- [25] JUMPER J, EVANS R, PRITZEL A, et al. Highly Accurate Protein Structure Prediction with AlphaFold [J]. Nature, 2021, 596: 583-589.
- [26] BALL R D, CANDIDO A, CRUZ-MARTINEZ J, et al. Evidence for Intrinsic Charm Quarks in the Proton [J]. Nature, 2022, 608: 483-487.
- [27] OECD, Artificial Intelligence in Science: Challenges, Opportunities and the Future of Research [R]. Paris: OECD Publishing, 2023.
- [28] SANDERSON K. AI Science Search Engines are Exploding in Number-Are They Any Good? [J]. Nature, 2023, 616: 639-640.

- [29] TJOA E, GUAN C. A Survey on Explainable Artificial Intelligence (XAI): Toward Medical XAI [J]. Ieee Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2021, 32(11): 4793-4813.
- [30] IOANNIDIS J P A. Correction: Why Most Published Research Findings Are False [J]. PLOS Medicine, 2022, 19(8): e1004085.
- [31] European Commission, Directorate-General for Research and Innovation, PETKOV D, ROMAN L. AI in Science-Harnessing the Power of AI to Accelerate Discovery and Foster Onnovation-Policy Brief [R]. Brussels: Publications Office of the European Union, 2023.
- [32] CARTER J, FEDDEMA J, KOTHE D, et al. Advanced Research Directions on AI for Science, Energy, and Security: Report on Summer 2022 Workshops [R]. Washington, DC: the U.S. Department of Energy, 2023.
- [33] IMPACT. NASA SMD AI WORKSHOP REPORT [R]. Washington, DC: National Aeronautics and Space Administration, 2021.

### 作者贡献说明

杨 光:收集、整理资料,撰写文章初稿;

李晓轩:研究思路指导,参与主要观点讨论,指导文章修改;

肖小溪:文章思路构建,设计文章框架,指导文章撰写,修改全文。