

人工智能赋能科学研究的机制与模式分析 ——基于知识生产模式视角

李拓宇¹, 吴佳一²

(1. 浙江大学中国科教战略研究院, 浙江杭州 310058; 2. 浙江大学公共管理学院, 浙江杭州 310058)

摘要:人工智能(AI)在科学领域展现出巨大潜力,人工智能赋能科学研究(AI for Science,以下简称 AI4S)正快速发展与普及并推动科学研究范式全面变革,但当前 AI4S 赋能科研创新的特征与机制依然不明晰, AI4S 布局方向仍未形成系统谋划。聚焦 2024 年获得诺贝尔化学奖的 AlphaFold 与 Rosetta 项目,本研究采取对比案例研究方法,分析 AI 赋能科学研究的不同特征与机制,提出“AI+”与“+AI”两种 AI4S 赋能模式。基于知识生产模式视角,本研究进一步分析两种模式的知识生产特征,提出在“AI+”模式中存在“智”第五大主体,其知识生产具有成长性、独立性、协同性、平台性特征,且“AI+”与“+AI”模式各自具有适配场景与应用模型。最后,本文提出 AI+ 与 +AI 差异化战略、重视小模型开发与推动基础设施建设等政策建议。以上结论对 AI4S 相关研究及知识生产模式理论均有一定贡献,也对我国发展 AI 产业、挖掘 AI 场景、开发 AI 模型具有启示意义。

关键词:AI4S; 知识生产; 赋能机制; AI 模型

中图分类号:G301

文献标识码:A

自人工智能(AI)技术快速发展与普及以来,其在科学研究领域展现出巨大的潜力, AI 越来越多地帮助科学家增强和加速研究,提出假设、设计实验、收集和解释大型数据集,并获得仅使用传统科学方法无法获得的见解^[1]。当前, AI 已与生命科学、材料研发、环境科学、能源科学等领域深度融合交叉,解决若干关键问题,产出一系列前沿知识创新与研发应用成果。2024 年诺贝尔化学奖一半授予 David Baker,以表彰他在“计算蛋白质设计”方面的贡献,另一半颁发给 DeepMind 公司的 Demis Hassabis 和 John M. Jumper,以表彰他们在“蛋白质结构预测”方面的成就^[2]。Demis Hassabis 于 2010 年创立人工智能公司 DeepMind,他们研发出 AlphaFold,至今已成功预测 98.5% 的人类蛋白质结构,其准确性和实验结果相差无几,真正解决了困扰生物学界多年的蛋白质预测难题,这充分说明了 AI 对于科学研究与知识生产的重要性与时代意义。与此同时,2023 年 3 月,我国科技部会同国家自然科学基金委启动了“人工智能驱动的科学” (AI for Science, 以下

简称 AI4S) 专项部署工作,同时加快推动公共算力开放创新平台建设,为 AI4S 发展打造智能算力底座。2024 年 3 月,政府工作报告中首次提出“人工智能+”,并上升到战略行动。AI 正与科学研究与产业领域深度融合,全面加速科学研究范式与创新发展。然而,当前产业界过度强调 AI 大模型落地,开启“百模大战”的价格战、速度战等竞争,导致大量行业内卷、资源浪费、技术泡沫等乱象,多数企业跟风引进 AI 模型,忽视了 AI 赋能行业的适配场景和具体机制,没有真正发挥 AI 赋能关键作用。

在理论层面, AI4S 目前已成为 AI 研究领域的热点话题之一,其主要指通过人工智能、机器学习、推理等方法处理和分析大量数据,高效发现数据之间的关联,更快、更准地理解复杂的自然现象和社会现象^[3]。当前相关研究大多聚焦于 AI 学习的特点及 AI 对于科研范式、研究方法、知识生产的影响。通用 AI 大模型具有跨学科知识基础、通用性和可迁移性等,对传统科研过程具有替代效应、增强效应和自主效应^[4]。还有学者认为 AI 引发了第五种科研

范式,即以数据驱动和人机协同为特征的智能化科研范式,旨在有效应对组合爆炸问题^[5, 6]。尽管 AI 在科研领域的应用前景广阔,但也伴随着较多争议和问题。首先,因 AI 运行过程不透明、运算逻辑难以理解等特性存在“黑箱”,导致科学研究结果存在真实性和可解释性争议。其次, AI4S 中缺乏标准化的实践和评估指标,标准化对于科学研究中基准测试与评估模型十分重要,可能导致比较和重复研究结果的困难^[7]。AI4S 还存在复杂的数据质量问题、算法适配问题与算力模型建设问题等,导致 AI4S 实践与研究发展受到不同程度阻碍。

上述实践与理论中产生的问题,归根到底,是没有理清 AI 赋能科学研究的底层逻辑。因此,本文采用对比案例分析方法,聚焦于解答“知识生产理论框架下 AI 赋能科学研究的具体特征与机制”这一核心研究问题。通过对 2024 年获得诺贝尔化学奖的 AlphaFold 与 Rosetta 项目的比较,本研究尝试探讨人工智能赋能科学研究的过程和模式,剖析其适用场景,以期基于知识生产模式视角厘清 AI 赋能科学研究的底层逻辑。

1 知识生产模式演进的简要综述

传统知识生产是指“通过一系列科学研究活动,生成新的理论、模型、假设或技术解决方案,以应对复杂问题”。知识通过在组织中进行社会化、外化、组合和内化不同阶段的动态迭代不断生产与创造新的知识^[8]。深度学习算法等人工智能技术是知识生产变革的强大催化剂,其通常采用监督方法,

其中使用大量标记数据来训练大规模分层计算网络中节点之间的连接强度,以便使用训练数据中的模式对未来看不见的数据进行准确预测。首先, AI 尤其生成式 AI 因其强大的知识创造能力,扩展了知识生产中技术的角色和代理, AI 不仅仅是作为一个组织内有限的、预先的知识被动提供者,而是通过利用看似无限的内存和信息处理能力进行数据分析和预测,充当主动的知识共同创造者^[9]。其次, AI 能够提供个性化的回答和例子,人工智能可以通过用户与 AI 分析和预测能力之间的交互式对话参与来促进和丰富知识的内化和组合等流程,激发了知识生产与创新的主要内在传递动力,从而进一步增强学习体验并促进新知识的保留^[8]。然而,在知识生产中 AI 也存在较多潜在的风险,如 AI 会降低组织对于内部知识的控制权限^[10],降低组织成员与他人进行知识咨询、知识共享和知识协作,还存在由数据和算法等导致的“技术 - 伦理”困境^[11]等。

知识生产模式是关于知识如何被创造、传播和应用的理论框架。Gibbons、Carayannis 和 Campbell 等学者提出知识生产模式 1、2 与 3^[12, 13],用于描述传统型学术知识生产模式、应用型知识生产模式和社会型网络知识生产模式,以适应知识异质性与社会需求的驱动、创新模式的多元化及知识生产的全球化与复杂化倾向。这三种模式具体特征对比如表 1 所示,这三种模式并非彼此替代,而是互为补充,有各自特点与优势,适用于不同的创新环境和需求。AI 的出现会改变现有知识生产模式的主体与其关系。

表 1 三类知识生产模式对比分析
Table 1 Comparative analysis of three knowledge production modes

维度	知识生产 1.0	知识生产 2.0	知识生产 3.0
驱动力	学术理论驱动	问题需求驱动	社会需求和多方合作驱动
生产特点	封闭单一、学科驱动式生产	跨学科、应用导向式生产	跨领域、动态开放、创新网络协同式生产
生产主体	大学内部	多主体协同	多主体合作网络
依赖的知识	传统科学知识 with 理论	跨学科知识 with 理论	跨领域知识、系统理论
结果产出	基础学科知识	应用性、跨学科知识	综合性知识
创新性	线性创新	横向协同创新	非线性网络协同创新

科学研究范式决定了知识生产的方向和理论框架等,知识生产方式变化推动了科学研究范式变革。美国计算机科学家、图灵奖得主 Jim Gray 总结了科

学研究的 4 个范式:实验科学范式、理论科学范式、计算仿真模拟范式和数据密集型科学范式。随着人工智能的快速发展与普及,依靠 AI 自主开展科学研

究、解决科研难题已逐步走向成熟,并展现出巨大的生命力与创造力,我们称之为 AI For Science。对于实验科学范式与计算仿真模拟范式, AI 通过高效评估科学假设、加速和优化科学计算、利用模拟推断假设的可观测结果、在组合假设空间中导航等方式驱动实验与模拟;对于理论科学范式, AI 通过进化算法与强化学习等算法基于数据生成假设、优化假设形成理论。来高效驱动科学假设生成;对于数据密集型科学范式, AI 通过几何先验、自监督学习和语言建模等技术进行数据选择、数据标注、数据生成、数据精炼等,从大规模的无标签数据中学习有意义的数据表示^[1]。 AI 已嵌入科研全流程,对 4 种科研范式都有不同程度的增强与加速。甚至很多学者认为 AI 已经打开了第五种科研范式,即以 AI 与数据驱动为核心的人机共融智能范式^[5]。第五范式以解决系统性复杂问题、人机协同、跨学科知识为特征, AI 驱动科学研究的三条实现路径分别为模型驱动、数据驱动、数据 + 模型驱动。

根据知识生产理论与知识管理理论^[14], 本文将 AI 参与的知识生产过程解构为获取知识、学习知识和创造知识三个阶段。获取知识 (knowledge acquisition) 是知识生产的第一步,指的是从组织外部和内部来源收集知识的过程。学习知识 (knowledge learning) 是指将获取到的信息转化为组织或个人能够理解并使用的知识^[8]。创造知识 (knowledge creation) 指的是在现有知识基础上,通过创新思维或跨学科合作等方式,产生新的知识。通过知识生产过程三阶段发展,促进了知识积累与创新,形成新的竞争优势与创新能力。

2 研究方法

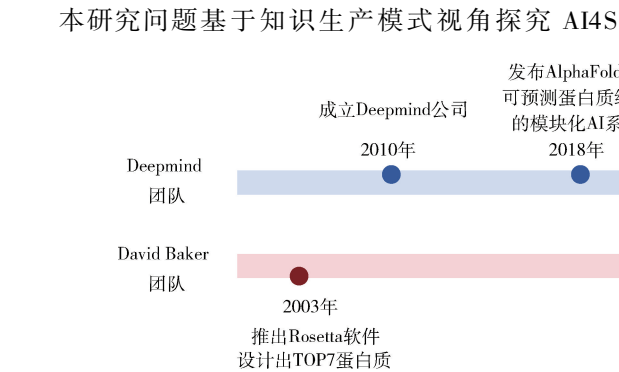


图 1 DeepMind 团队和 David Baker 团队发展历程

Figure 1 Development History of DeepMind Team and David Baker Team

的具体机制,选择案例比较研究方法,具体原因如下。首先,上述问题需要对知识生产模式进行深入解构,厘清 AI 赋能科学研究的特征、场景与过程,进一步解析其内在机制,符合案例研究分析挖掘事物内在逻辑的特点。其次,本文遵循“典型性”“真实性”等原则选取两个人工智能赋能的研究案例,对比分析两种 AI 赋能模式的知识生产逻辑框架,洞见其进行知识生产的共性和差异,双案例对比的设计更有利于把握主体作用关系和影响机制。

2.1 案例背景

本文选择蛋白质研究领域 AlphaFold 项目和 Rosetta 项目作为双案例,具体有如下理由。首先,本文选择蛋白质研究领域,具有高度代表性。蛋白质是一切生命活动的基础,研究蛋白质能够帮助我们理解生命活动的分子基础,包括细胞如何工作、组织如何形成以及生物体如何维持稳态,对于疾病研究、药物开发和生物技术研究都具有重要意义,且蛋白质研究推动了分子生物学等基础应用科学突破和合成生物学、精准医学等新兴领域的发展。因此,蛋白质预测和蛋白质设计问题是学术界公认的研究难题。

其次,本文通过双案例对比分析的方式,选取获取 2024 年诺贝尔化学奖的两个团队及其创新行为为研究对象,具有高度典型性。首先,这两个案例都利用人工智能解决了重大科学研究问题,且都获得了诺贝尔化学奖,得到学界的普遍认可。其次,这两个案例均涉及人工智能赋能科研创新,创新主体与创新行为高度相关却有显著区别,具有较大对比研究意义,本文试图分析两者在知识生产方式与场景应用上的共性和差异,总结出 AI 赋能知识生产的特征与机制。

如图 1 所示,DeepMind 公司于 2010 年成立,其战略愿景为“负责任地构建 AI 以造福人类”,在 AlphaGo 战胜围棋世界冠军后,Demis Hassabis 想利用 AI 来攻克蛋白质折叠的难题。自 2018 年起至 2024 年,DeepMind 发布 AlphaFold1.0、一个基于人工智能技术的预测蛋白质三维结构的系统,基于大量蛋白质结构数据利用深度学习算法完成蛋白质从序列到三维结构的预测。并借助 Transformer 架构的 Evoformer 模块,实现了端到端的模型重构,迭代至 AlphaFold2.0 和 3.0,蛋白质结构预测精确度达 92.4%,以前所未有的精确度成功预测了所有生命分子(蛋白质、DNA、RNA、配体等)的结构和相互作用。

David Baker 团队是华盛顿大学蛋白质实验室的研究团队,其团队致力于从头设计蛋白质,实现自然界未见过的功能,甚至进行可控制、可调节、模块

化的设计,使得各种蛋白元件组合在一起实现各种各样的输出。在 2003 年他运用自主研发的 Rosetta 软件,基于物理学模拟和能量函数模型,模拟复杂生物分子配合,并成功设计非自然界来源的全新蛋白质 TOP7,被生物学界尊称为“上帝之手”。在 AlphaFold 等 AI 技术的影响下,David Baker 也引入了人工智能、深度学习等算法至生物领域,研究结构更复杂与功能更多元的蛋白质设计问题。

2.2 数据收集

本研究采用多种来源收集数据,如表 2 所示。一是专家访谈数据等一手数据,包括与 AI 研发专家与药物研发专家的访谈资料、和 AI 与物理、AI 与医学、AI 与药学、AI 与能源等学生访谈、AI4S 相关会议资料,共计约 5 万字资料。二是案例企业官网、新闻媒体报道、第三方研究报告、组织年度报告、公开访谈信息等二手数据,共计约 7 万字资料。

表 2 数据分类与来源
Table 2 Data classification and sources

数据来源	数据分类
一手数据	AI for 药物研究领域专家访谈,包括 AI 研发专家与药物研发专家
	AI 与物理、AI 与医学、AI 与药学、AI 与能源等学生访谈
	AI4S 相关会议资料
二手数据	通过案例企业网站、公共媒介获取的资料
	通过权威媒体、专业媒体人报道获取的资料
	通过案例企业内部文件获得的资料
	通过热门网络论坛获取的评价信息

3 案例分析

3.1 AlphaFold 项目:AI 赋能蛋白质结构预测

DeepMind 是一家人工智能的原生企业,其团队一起开发了 AlphaFold,一种基于深度学习的 AI 系统,并不断优化算法与功能,最终准确预测蛋白质的三维结构。AlphaFold 完全基于 AI 深度学习技术,直接从数据中发现规律,预测蛋白质的三维结构。这一过程不是基于传统的生物化学理论推导,而是 AI 通过分析海量数据,自主生成新知识,构建了 AI 独有的从端到端的知识生成方式。本文将 AlphaFold 进行知识生产分为获取知识、学习知识、创造知识三个阶段(图 2)。第一阶段是获取知识,AI 获取蛋白质序列相关数据和结构数据库的知识。第二阶段是

基于已有数据,AI 以计算机语言形式提取将蛋白质特征进行特征编码,并从中学习规律。AI 进一步基于这些编码知识,利用深度学习模型直接预测蛋白质的三维结构,并不断迭代更新以提高精度。第三阶段是创造知识,将预测完成的结构进行解码,输出全新的预测三维模型,目前结果精度已接近实验结果。

3.2 Rosetta 项目:AI 赋能蛋白质设计

David Baker 团队在蛋白质设计研究领域深耕已久,其长期以来基于蛋白质理论知识与物理动力学模型等,开发了著名的 Rosetta 软件,一个计算蛋白质结构和设计的工具,广泛应用于结构生物学领域。在 AlphaFold 引起关注后,他们开始引入 AI 和机器学习算法来增强 Rosetta 系统的能力,巧妙结合传统理论和 AI 算法,改进蛋白质设计计算预测模

型,优化蛋白质设计的准确性和效率。本文剖析了 Rosetta 进行知识生产的全过程(图 3)。第一阶段主要是获取 2 个维度的知识,一个是蛋白质结构数据与实验数据等,另一个是传统物理学模型、理论等知识。第二阶段是学习这些知识,学习蛋白质领域的理论框架和语言模型。主要分为结构生成和序列设计两个阶段,这两个阶段原先基于能量函数等理

论,采用碎片组装、原子建模方法存在计算时间长、计算能力不足、陷入局部困境等挑战。引入 AI 相关算法之后,一方面利用扩散模型、遗传算法等先进算法找到最佳序列,另一方面改进优化现有的能量函数加强蛋白质结构稳定性。第三阶段是创造知识,在 AI 参与知识生产过程后最终生成具有全新功能的蛋白质序列与结构。

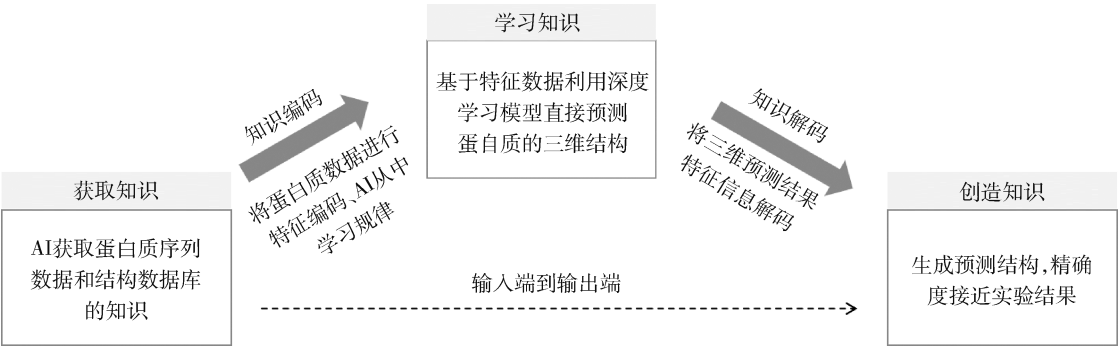


图 2 AlphaFold 项目知识生产过程分析

Figure 2 Analysis of the knowledge production process in the AlphaFold Project

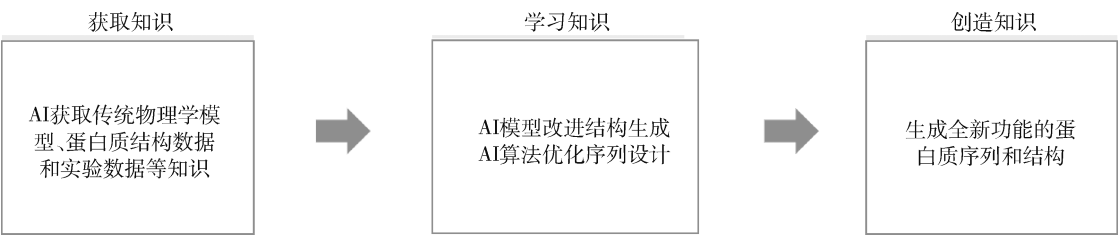


图 3 Rosetta 项目知识生产过程分析

Figure 3 Analysis of the knowledge production process in the Rosetta Project

3.3 跨案例比较:AI4S 赋能机制与模式

基于上述两个案例的对比,我们发现 AI 赋能其科研创新的特征与过程存在明显区别, AI 赋能蛋白质结构预测案例中, AI 已经主导知识生产的整个过

程,包括获取知识、学习知识与生产知识。在 AI 赋能蛋白质设计案例中, AI 对于现有知识生产过程起到提效、优化和迭代作用。基于案例分析,本研究总结了两种 AI 赋能机制的差异点和共同点,如表 3 所示。

表 3 AlphaFold 与 Rosetta 项目的 AI 赋能机制对比

Table 3 Comparison of AI empowerment mechanisms between AlphaFold and Rosetta Projects

共同点		差异点	
		AlphaFold	Rosetta
主导者	AI 与传统领域的融合与协作	AI 主导	行业或领域主导
驱动力	AI 技术的实际落地与行业应用	AI 技术(数据与算法)驱动	行业需求驱动
赋能特点	提高效率或解决问题	强调跨界融合和系统性重塑。	强调具体环节优化或提升效率
适用范围	跨领域实践	广泛,通常涵盖多个领域、系统或行业之间的融合	具体,通常限定在某一行业或特定环节的优化中
赋能目标	提升生产力和创新能力	打造一个以 AI 为核心的新生态系统	提升现有行业的效率与效果,逐步优化产业运作
AI 赋能机制		AI +	+ AI

(1) 主导者。两个案例都强调了 AI 和传统领域的融合与协作。在 AlphaFold 案例中, AI 参与问题发现与知识生产, 通过数据挖掘自主发现新问题, 驱动蛋白质结构预测领域的转型与创新; 而在 Rosetta 案例中, 人类科学家依然是问题定义与验证的主导力量, AI 作为辅助技术提供部分环节的优化和支持, 没有脱离人类认知框架和逻辑。

(2) 驱动力。两个案例都涉及 AI 技术的实际落地与行业应用。AlphaFold 案例是基于数据中隐藏的未知规律与 AI 技术, 探索如何赋能和重塑多个行业或领域, 推动行业寻找新的场景和模式; Rosetta 案例是基于行业需求提出明确问题, 利用 AI 优化现有业务流程和架构, 解决行业痛点或特定问题。

(3) 赋能特点。两个案例中 AI 均旨在提高科学研究效率或解决问题。AlphaFold 案例更强调 AI 的跨界融合, 以人工智能数据驱动的特点进行系统性重塑, 有可能生成突破人类认知框架的新知识体系; 而 Rosetta 案例中 AI 是对具体环节进行局部优化, 是对人类知识体系内的补充。

(4) 适用范围。两个案例都是跨领域实践。DeepMind 团队利用 AI 进行科研创新的适用范围十分广泛, AI 技术可以用以解决高维度、非线性的复杂问题。David Baker 团队利用 AI 优化的适用范围仅限在蛋白质生物领域等规则明确、目标清晰的领域。

(5) 赋能目标。DeepMind 的愿景是利用 AI 解决一切问题, 致力于打造一个以 AI 为核心的新生态系统, 构建人机协同的新科学范式。David Baker 团队则希望利用 AI 提高蛋白质设计的效率和精度, 降低科研成本、缩短实验周期, 从而推动蛋白质生物领域的发展。

综上, 本文认为 AlphaFold 项目中以 AI 主导的机制可概括为“AI + ”模式。AI + 模式是指在任务或应用中, 人工智能作为核心技术手段与驱动力, 依赖大规模数据集进行训练和优化, 直接主导与优化决策、预测、推理等过程, 且 AI 通过自动学习和推理不断迭代改进以提升效果。DeepMind 团队把 AI 技术作为核心驱动力, 通过 AlphaFold 推动了蛋白质结构研究的跨越式进展, 直接创造了新的知识生产链, 甚至倒逼实验科学重新定义研究价值。这代表了 AI + 模式, AI 不仅是工具, 更是引领学科变革的核心技术和协同主体, 主导了研究方向和知识创新。

Rosetta 项目中行业和领域需求主导, AI 辅助的

模式可概括为“+ AI”模式。+ AI 模式是指基于传统技术框架与传统行业背景下, 在复杂任务的特定环节中, 人工智能作为辅助技术, 与其他传统方法或领域知识结合, 优化、提升或加速现有科研流程与效果。David Baker 团队展示了在传统生物化学研究中如何引入 AI 技术优化现有 Rosetta 软件系统, 提升研究效率和精准度。这代表了 + AI 模式, AI 作为工具嵌入并增强了已有的科学研究方法或工具。

4 研究结论与讨论

4.1 知识生产模式下的“AI + ”与“+ AI”

基于知识生产模式的视角, 本研究进一步将 AI + 模式与 + AI 模式进行分析, 如表 4 所示。我们发现 + AI 模式与知识生产 2.0 模式十分相似, 是传统领域主导, 以人工智能为辅助工具的知识生产。+ AI 模式的驱动力、生产主体与依赖的知识, 都是以行业或领域为主的需求、行业主体与传统行业结构化知识。它的生产特点与结果产出都是基于传统行业知识的增量式知识补充、改进与优化。本文认为 + AI 模式的创新模式是一种渐进式创新, AI 技术增强与补充了行业现有的知识体系。

然而, AI + 模式是以人工智能(数据、算法)为核心驱动力的知识生产, 与三种知识生产模式有本质区别。在驱动力和生产主体上, AI + 模式已完全脱离原有的学术理论、产业与社会需求等, 而是由 AI 技术主导的知识生产模式系统性重塑与变革。在生产特点上, AI + 模式是基于数据学习涌现全新的知识, 依赖 AI 的算法、多模态关联数据与算力进行范式级知识重构, 生成从未出现的全新知识或知识体系。本研究认为 + AI 模式的创新模式是一种颠覆性创新, AI 技术重构了传统领域的知识生产模式。

本研究认为 AI + 模式在驱动力、生产特点、生产主体等方面都无法再延用传统 3 种知识生产模式解释, AI 已可以成为知识生产主体之一^[15]。AI 在知识生产中具有主导性, 它已不再是被动工具, 而是主动生成知识的核心力量; 具有自主性, AI 能够自主学习与发现知识^[16], 分析大规模数据生成新的知识框架并不断迭代更新; 具有扩展性和泛化性, AI 可以整合跨领域数据与知识, 消除学科边界, 解决复杂的多维问题。

因此, 本研究尝试提出知识生产模式的第五大

主体,如图 4 所示,即在学术界、产业、政府和公众四大主体之外,加入“智”主体。“智”指的是通过人工智能技术增强的智能系统,例如深度学习模型、自然

语言处理系统等(后续简称智能系统),知识生产模式营造出 4 种人类主体和非人类——“智”主体齐头并进的新格局^[17]。

表 4 “AI + 模式”与“+ AI 模式”知识生产模式特征对比

Table 4 Comparison of knowledge production mode characteristics Between "AI + Mode" and "+ AI Mode"					
维度	知识生产模式 1.0	知识生产模式 2.0	知识生产模式 3.0	AI + 模式	+ AI 模式
驱动力	学术理论驱动	问题需求驱动	社会需求和多方合作驱动	AI 技术(数据与算法)驱动	行业需求驱动
生产特点	封闭单一、学科驱动式生产	跨学科、应用导向式生产	跨领域、动态开放、创 新网络协同式生产	基于数据学习发现全 新的知识	对现有知识的应用与 优化
生产主体	大学内部	多主体协同	多主体合作网络	AI 主导	行业主体
依赖的知识	传统科学知识 with 理论	跨学科知识 with 理论	跨领域知识、系统理论	主要依赖 AI 的算法、 大规模数据与算力	基于传统理论
结果产出	基础学科知识	应用性、跨学科知识	综合性知识	生成前所未有的知识	改进现有知识或方法

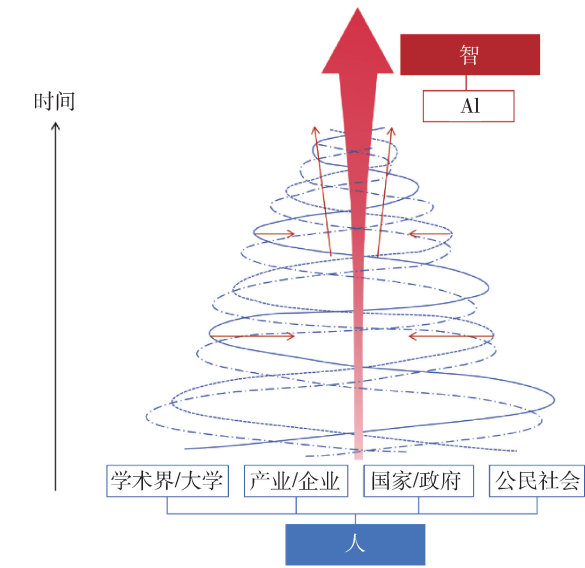


图 4 引入“智”主体的新知识生产模式
Figure 4 New knowledge production mode incorporating "intelligence" as a Fifth Actor

(1)“智”主体的成长性。智能系统会随着时间的累积更多数据,集成为更大规模和更高质量的数据集,通过不断训练和学习变得越来越智能,使得其能识别复杂情境、实现创新推理,在不确定性和复杂性越来越强的知识生产中发挥关键作用。

(2)“智”主体的独立性。智能系统不完全依赖于人类的输入、干预与监督,其具备了自主决策与执行能力,根据输入指令和环境信息自主做出决策与判断并执行。自我学习与适应能力,智能系统能够根据实际反馈调整其行为和决策策略,并使其在没

有外部干预情况下不断提高性能。

(3)“智”主体的协同性。在传统的知识生产模式中,研究者和工具设备之间的协同往往是线性或分散的,但智能系统能够与人类专家、设备、其他 AI 系统以及社会各方进行高度协作,形成更加紧密的工作关系。“智”主体能够动态地调整策略,根据实时数据与其他主体进行深度协作^[18]。

(4)“智”主体的平台性(中介性)。智能系统能够高效处理和分析大量异构数据(来自不同领域、不同来源的数据),并且能够共享信息、实时处理、智能调度等。不同主体依赖相同的数据集与智能系统平台进行知识互动、跨界合作、协同创新等,不同主体间的协同与耦合更加紧密与深入,形成更强大、更多元、更稳定的知识生产网络。

4.2 AI + 与 + AI 适用场景

场景是人工智能发挥作用与融合系统的重要载体^[19]。本研究进一步根据 AlphaFold 项目和 Rosetta 项目的任务场景进行对比分析,如表 5 所示,AlphaFold 项目具有明确指标,需要大量有效数据支撑的任务场景,且其无明确传统理论或模型指导。不同的是,Rosetta 项目无大量有效数据,且其领域应用理论较为成熟,有许多专家知识引导,存在很多需优化和改进的拆解任务。

可以发现,AI + 依赖的是强大的数据处理能力和复杂的模型,这种模型通常需要处理海量数据,并从中学习出规律,生成新的知识。+ AI 模式强调人工智能作为辅助工具,它是在人类主导的框架内帮助优化和加速现有知识生产过程。这意味着 AI 的

角色是增强现有系统的能力,而不是主导或替代人类的工作。这与 AI 模型的构建特征具有一定的对应关系。本文基于不同文献,将 AI 大模型和 AI 小模型的基本特点进行总结,如表 6 所示, AI 大模型具有海量数据训练、通用性和多任务学习、复杂性和计算能力三个特点^[20],能够从大规模的数据集中发

现规律和模式,可以应用于多个领域的任务,具备跨学科的知识处理能力。AI 小模型具有专用性和高效性、低资源需求、快速迭代三个特点,通常针对特定任务进行优化,计算量较小,训练效率更高,适用于特定领域的应用。

表 5 AlphaFold 与 Rosetta 项目的任务场景特征对比
Table 5 Comparison of task scenario characteristics between AlphaFold and Rosetta Projects

	AlphaFold 项目 (AI +)	Rosetta 项目 (+ AI)
1	需要数据驱动发现新规律的任务 (有大量有效数据)	无大量有效数据,需要专家知识和引导的任务
2	无明确理论指导,或过于复杂无法由传统理论解决的任务	应用理论已较为成熟,需优化和应用的任務
3	有明确指标或搜索空间的任务	不确定性较高的任务

可以发现, AI + 模式与 AI 大模型具有良好的适配性,因为 AI + 模式本身代表了 AI 在知识生产中的主导地位,通过大规模数据处理和深度学习模型生成新知识。而大模型的特点很符合 AI + 模式的需求,它能够处理更复杂、更广泛的任务,推动知识生产的突破性发展。因此, AI 大模型是实现 AI + 模式的良好载体与工具。

+ AI 模式则偏向于匹配 AI 小模型,因为 AI 的角色是辅助和优化传统研究,而不需要处理超大规模的数据。小模型的“专用型与高效性”有助于在在特定领域内高效地完成任务,如自然语言处理中的文本分类、图像识别中的物体检测等任务^[21]。小模型能以较低的计算成本以及规模不大的数据帮助科研人员和工程师提高工作效率,优化已有的工作流程,同时也降低了传统领域科研人员使用模型的难度。但是, + AI 模型也可以使用 AI 大模型来满足更高的精度与更复杂的使用需求。

4.3 贡献与启示

本文的理论贡献主要体现在两方面。一是从 AI 赋能到 AI + 与 + AI 的分类拓展。在 AI4S 及产业领域,学者专家强调人工智能 + ,但是并未关注过 AI 赋能的分类分层,忽视了不同目的、动机和机制下 AI 赋能的多元逻辑。因此,本文从 AI 赋能的根本逻辑出发,提出了“ AI + 模式”与“ + AI 模式”两种赋能机制,前者指以人工智能作为核心技术手段与驱动力主导科学研究的整体框架与迭代发展,后者指人工智能作为辅助技术,与其他传统方法或领域知识结合对科学研究优化、提升或加速。这一研究发现推进了 AI4S 赋能机制的深化理解与科学分

类,为这个新兴领域的发展具有一定贡献。

二是知识生产模式创新。本文基于传统三类知识生产模式和对“ AI + 模式”的深入理解,创新引入“智”主体。与传统的企业、大学、政府和社会不同,本文提出的“智”主体指人工智能集成的智能系统,是一类完全与人类无关的主体。它在知识生产上具有成长性、独立性、协同性与平台性四个特征,重塑了知识生产的过程机制、生产成果与知识网络等体系,形成对知识生产模式的主体创新与理论拓展。

本研究主要形成了三个方面的实践启示。第一,实施 AI + 与 + AI 差异化战略。从 AlphaFold 和 Rosetta 项目中我们发现了 AI + 和 + AI 赋能模式的本质差别,如 AI + 医疗和医疗 + AI,前者指全面推进智慧医疗体系,后者指在现有医疗体系中引入 AI 诊断辅助工具等。因此本文建议从两者的动机与特点出发,实施差异化和个性化的发展战略。对于技术驱动的 AI + 模式而言,我们应聚焦 AI 技术的研发与突破,为科研提供颠覆性工具和解决方案。一是确立核心技术优势,科学选择科学研究中最具挑战的问题(如药物发现、气候建模、宇宙探索等),投入资源开发具有独创性的 AI 技术,持续改进核心算法,提升模型在特定领域的适用性和效率。二是建立数据驱动的科研平台,致力于构建高质量、开放性的数据集(如生物结构数据库)与开发高智能化工具等。三是强化多领域跨界合作,支持企业、科研机构、大学等多主体共同开展关键领域 AI 技术研发与试验。

对于行业驱动的 + AI 模式而言,我们应聚焦 AI 技术到具体科学中的嵌入与融合。一是深度挖掘领

域需求,深入分析特定领域的科研瓶颈和痛点,找到AI可以高效介入的点。二是聚焦解决问题的定制化方案,一方面要开发模块化的AI工具,适应多样化的科研需求;另一方面要根据具体应用场景优化AI技术提升结果可靠性。三是提供教育和技术支持。积极培训科研人员,帮助领域专家快速理解与使用AI工具,降低其使用门槛。

第二,重视“小模型”开发。前文提到大模型和小模型在科研中的具体差异,相比于大模型对于算力、数据和算法的极高要求,小模型开发具有针对性强、计算成本低、可解释性高等优势,在行业领域发展中可实现性与实用性更强。首先要强化小模型的领域适配性。基于小规模、高质量的数据集进行模型训练,通过数据定制提高模型适配性,还可以通过科学规律和先验知识的嵌入提高小模型的可解释性。其次构建小模型开发的生态体系,通过小模型开放平台共享开放源码与数据集等,制定小模型标准化开发流程、评价指标等,系统构建小模型开发的生态体系。

第三,推动基础设施建设。基础设施建设是加速发展与深化融合“AI+模式”与“+AI模式”的关键措施。本文提出2点启示。一是加快算力基础设施完善。通过推进云计算、AI硬件设施等高性能计算平台建设,推动绿色计算、模型轻量化等能效优化设施建设形成强大的计算资源支持。二是推进算法与模型基础设施建设。通过建立模型和算法共享平台、开发通过AI模块等扩充与优化现有模型库和算法库,加强跨领域算法共用、迁移学习等,加强算法和模型对于AI赋能的核心驱动力。

参考文献:

[1] Wang H, Fu T, Du Y, et al. Scientific discovery in the age of artificial intelligence [J]. Nature, 2023, 620 (7972): 47-60.

[2] The Nobel Prize in Chemistry 2024 - Award ceremony speech - NobelPrize.org[Z]. 2025; 2025.

[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 F Y, Miao Q H, Zhang J P, et al. Exploring the impact and significance of AI for Science: Current status and prospects [J]. Chinese Journal of Intelligent Science and Technology, 2023, 5 (1): 1-6.

[4] 张越, 郭玥, 余江. 通用人工智能驱动的科研新范式:

理论与实践[J]. 科学学研究, 2025, 43(4): 673-682. Zhang Y, Guo Y, Yu J. A New AI-driven research paradigm: Theory and practice [J]. Studies in Science of Science, 2025, 43(4): 673-682.

[5] 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 G J. Intelligentized scientific research (AI4R): The fifth research paradigm [J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2024, 39(1): 1-9.

[6] 孙坦, 张智雄, 周力虹, 等. 人工智能驱动的第五科研范式(AI4S)变革与观察[J]. 农业图书情报学报, 2023, 35(10): 4-32. Sun T, Zhang Z X, Zhou L H, et al. The transformation and observation of AI-Driven fifth research paradigm (AI4S) [J]. Journal of Library and Information Science in Agriculture, 2023, 35(10): 4-32.

[7] 王飞跃, 缪青海. 平行科学: 大模型时代 AI4S 的前沿技术与框架体系[J]. 人民论坛·学术前沿, 2024 (14): 64-79. Wang F Y, Miao Q H. Parallel science: Frontier technologies and framework systems of AI4S in the Era of Large Models [J]. Frontiers, 2024 (14): 64-79.

[8] Nonaka I. A dynamic theory of organizational knowledge creation[J]. Organization Science, 1994, 5(1): 14-37.

[9] Alavi M, Leidner D E, Mousavi R. A knowledge management perspective of Generative Artificial Intelligence [J]. Journal of the Association for Information Systems, 2024, 25(1): 1-12.

[10] Jarrahi M H, Askay D, Eshraghi A, et al. Artificial intelligence and knowledge management: A partnership between human and AI[J]. Business Horizons, 2023, 66(1): 87-99.

[11] 程鹏, 童松, 崔鹤, 等. AI 时代下科学知识生产的伦理困境与策略[J]. 科学学研究, 2024, 42(11): 2254-2261. Cheng P, Tong S, Cui H, et al. Ethical dilemmas and strategies in scientific knowledge production in the AI Era [J]. Studies in Science of Science, 2024, 42(11): 2254-2261.

[12] Carayannis E G, Campbell D F J. Open innovation diplomacy and a 21st Century fractal research, education and innovation (FREIE) Ecosystem: Building on the quadruple and quintuple Helix innovation concepts and the “Mode 3” knowledge production system[J]. Journal of the Knowledge Economy, 2011, 2(3): 327-372.

[13] Gibbons C L P S. The New Production of Knowledge: The Dynamics of Science and Research in Contemporary

- Societies[M]. Sage Pub., 1994.
- [14] Alavi M, Leidner D E. Review: Knowledge management and knowledge management systems: Conceptual foundations and research issues[J]. MIS Quarterly, 2001, 25(1): 107 – 136.
- [15] 肖峰. 生成式人工智能与知识生产新形态——关于三阶知识生产的探析[J]. 学术研究, 2023(10): 50 – 57. Xiao F. Generative Artificial Intelligence and the new form of knowledge production—An analysis of three – order knowledge production [J]. Academic Research, 2023(10): 50 – 57.
- [16] Lu C. Rethinking artificial intelligence from the perspective of interdisciplinary knowledge production[J]. AI & Society, 2024, 39(6): 3059 – 3060.
- [17] 姜华. 从辛弃疾到 GPT: 人工智能对人类知识生产格局的重塑及其效应[J]. 南京社会科学, 2023(4): 135 – 145. Jiang H. From Xin Qiji to GPT: The reshaping of human knowledge production by Artificial Intelligence and its effects [J]. Social Sciences in Nanjing, 2023(4): 135 – 145.
- [18] 喻国明, 苏芳. 范式重构、人机共融与技术伴随: 智能传播时代理解人机关系的路径[J]. 湖南师范大学社会科学学报, 2023, 52(4): 119 – 125. Yu G M, Su F. Paradigm reconstruction, human – machine integration, and technology companionship: Pathways to understanding Human – Machine relationships in the Era of intelligent communication [J]. Journal of Social Science of Hunan Normal University, 2023, 52(4): 119 – 125.
- [19] 李梦薇, 徐峰, 高芳. 人工智能应用场景的界定与开发[J]. 中国科技论坛, 2021(6): 171 – 179. Li M W, Xu F, Gao F. Definition and development of AI application scenarios [J]. Forum on Science and Technology in China, 2021(6): 171 – 179.
- [20] Treviso M, Ji T, Lee J, et al. Efficient methods for natural language processing: A survey[J]. Transactions of the Association for Computational Linguistics, 2023, 11: 826 – 860.
- [21] Wang Q, Cardiff B, Frappe A, et al. Tiny models are the computational saver for Large Models[J]. Computer Vision – ECCV 2024, PT LVI, 2025, 15114: 163 – 182.

Mechanisms and modes in AI for Science(AI4S) research: A perspective from knowledge production modes

LI Tuo – yu¹, WU Jia – yi²

(1. Institute of China's Science, Technology and Education Policy, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China;

2. School of Public Affairs, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China)

Abstract: Artificial Intelligence (AI) has demonstrated immense potential in the scientific domain. AI for Science (AI4S) is rapidly advancing and gaining widespread adoption, driving a comprehensive transformation in scientific research paradigms. However, the characteristics and mechanisms of AI4S in empowering scientific innovation remain unclear, and its strategic direction has yet to be systematically planned. Focusing on the 2024 Nobel Prize in Chemistry – winning projects, AlphaFold and Rosetta, this study employs a comparative case analysis to examine the distinct features and mechanisms of AI – enabled scientific research. It proposes two AI4S empowering models: "AI + " and " + AI. " From the perspective of knowledge production modes, the study further analyzes the knowledge production characteristics of these two models. It identifies the emergence of "intelligence" as a fifth major actor in the "AI + " model, with knowledge production exhibiting traits of growth, independence, collaboration, and platformization. Additionally, the "AI + " and " + AI" models each have their own suitable application scenarios and frameworks. Finally, this paper offers policy recommendations, including differentiated strategies for AI + and + AI, prioritizing small – model development, and advancing infrastructure construction. These findings contribute to both AI4S – related research and knowledge production mode theory, while also providing insights for China's development of the AI industry, exploration of AI applications, and advancement of AI models.

Key words: AI for Science; knowledge production; empowerment mechanism; AI Model