
面向未来的精准创制：人工智能驱动精细化学品智能设计与合成

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40455.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

面向未来的精准创制：人工智能驱动精细化学品智能设计与合成。 研究背景

精细化学品是现代工业的重要基石，广泛服务于医药健康、材料科学、信息技术和可持续能源等关键领域，其研发水平直接关系到国家科技创新能力与产业竞争力，但传统精细化学品研发长期依赖研究者的经验和反复试错，普遍面临开发周期长、成本高、效率低等挑战。近年来，人工智能正在重塑化学研究范式，使得由目标功能出发、贯通分子结构设计与合成路径规划的端到端智能创制流程成为可能。

大连理工大学刘奇磊副教授、张磊教授团队在ENGINEERING Chemical Engineering期刊发表题为Future-oriented precision creation: recent advances in the intelligent design and synthesis of fine chemicals综述文章，系统梳理了人工智能在计算机辅助分子设计与精细化学品智能合成中的最新进展。文章围绕智能QSPR模型、高效分子设计方法和智能合成路线规划三条主线，展示了AI如何推动精细化学品研发从经验试错走向精准预测-主动设计-可行合成的新阶段。

综述亮点

智能QSPR模型：性质预测的基石

分子性质预测是智能分子设计的基础。文章首先梳理了智能QSPR（定量结构-性质关系）模型的发展脉络：高质量实验数据库、文献数据以及密度泛函理论（DFT）、分子动力学（MD）等计算数据，为性质预测模型提供了基础；分子指纹、拓扑描述符、量子化学描述符、分子图和化学预训练模型表征，则共同构成了机器学习可处理的分子表示体系。

在此基础上，人工智能既可以作为高精度量子化学计算的代理模型，大幅降低计算成本，也可以与物理先验和机理知识相结合，提高性质预测的准确性、效率和可解释性。化学预训练模型（Chemical Pre-trained Models, CPMs）的发展，则通过预训练-微调范式，为实验数据稀缺的精细化工任务提供了新的解决路径。

高效分子设计方法：从被动筛选到主动创制

在可靠性质预测的基础上，分子设计正在从在已知化合物库中筛选转向面向目标性质主动创制。文章指出，目前从头分子设计主要包括三类方法。

第一类是基于数学规划的分子设计方法，例如混合整数非线性规划（MINLP）。这类方法将分子发现形式化为可求解的优化问题，在明确的结构约束和性质目标下寻找候选分子，具有较强的严谨性和可解释性。

第二类是以遗传算法为代表的启发式搜索方法。该方法模拟自然进化过程，通过选择、交叉、突变等操作，在复杂化学空间中不断优化候选分子，适合处理非线性、多目标和难以显式建模的分子设计任务。

第三类是深度生成模型方法，包括变分自编码器（VAE）、生成对抗网络（GAN）和扩散模型等。这类方法通过学习大规模分子数据的内在分布，能够生成具有新骨架和新结构特征的候选分子，特别是三维等变扩散模型将分子的空间几何信息和物理对称性纳入生成过程，为更真实、更可控的三维分子创制提供了重要工具。

智能合成路线规划：打通设计到制备的最后一公里

即使AI能够设计出具有理想性质的虚拟分子，如何将其真正制备出来仍是精细化学品研发中的关键问题。为打通从数字分子蓝图到真实物质制备的最后一公里，文章重点讨论了智能合成路线规划。

自动逆合成技术通过学习已有反应知识，模拟化学家从目标分子反推原料和中间体的思维过程。文章比较了基于模板的方法、无模板方法以及集成式平台的优势与局限。基于模板的方法依赖已知反应规则，化学可解释性较强，但受模板库覆盖范围限制；无模板方法则利用Transformer、图神经网络等模型从数据中隐式学习反应规律，具有发现新反应和新路线的潜力，但仍面临黑箱性、路线多样性不足和幻觉风险；集成式平台则通过多模型协同和搜索算法，提高路线规划的实用性和灵活性。

文章同时强调，目前AI逆合成工具的输出仍更多是建议，而非完整实验方案。反应条件、催化剂、溶剂、温度、产物纯化以及副反应控制等因素，仍需要结合化学经验和实验验证进行综合判断。

未来展望

总体来看，人工智能与化学工程的融合正在进入更深、更广、更智能的新阶段。未来，精细化学品研发有望迈向全闭环AI化学家范式，将性质预测、从头分子设计、合成路线规划与自动化实验平台进一步打通，形成从理论预测、虚拟设计、机器人合成、高通量表征到数据反馈和模型迭代的自主学习闭环，同时化学基础模型将融合文献、结构、反应、光谱和实验记录等多源信息，形成更通用的化学认知能力。要实现这一目标，仍需重点突破模型可解释性、实验数据稀缺、多尺度建模和开放标准化数据生态等挑战，并推动人类化学家的经验判断与AI的计算探索形成更紧密的协同。

亮图解读

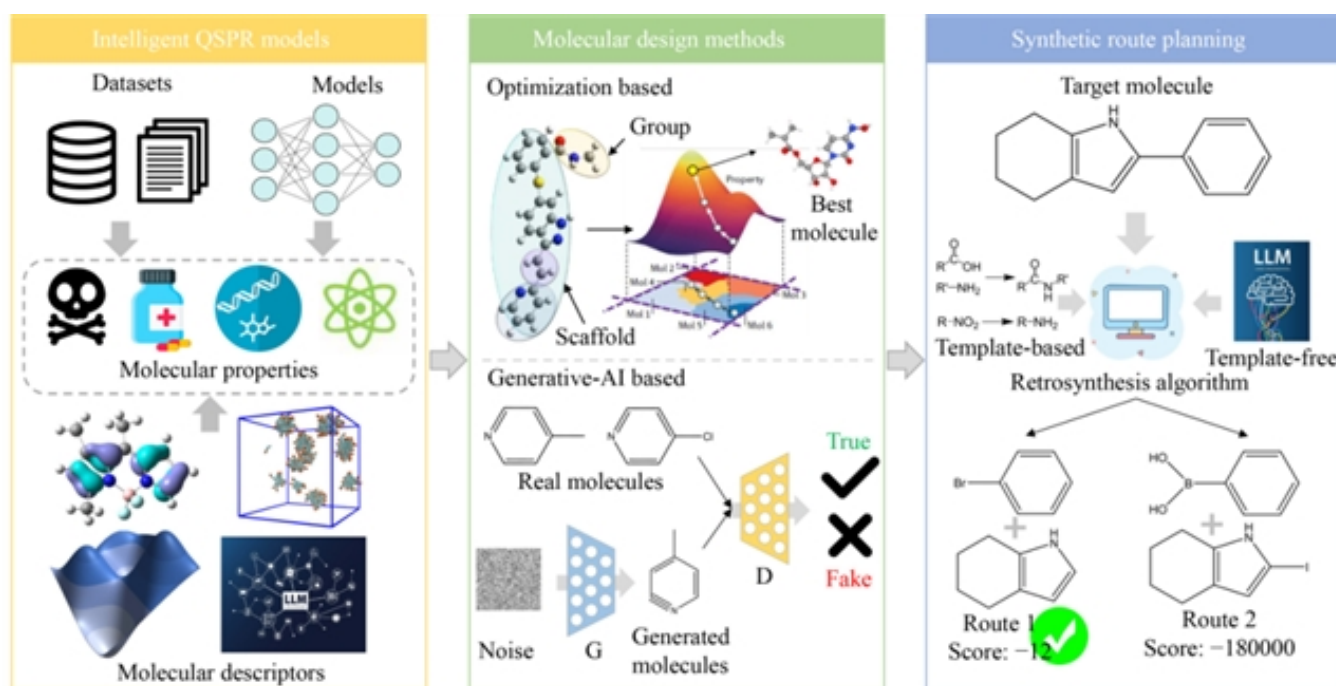


图1.展示了人工智能在计算机辅助分子设计中的关键模块及其逻辑关系。性质预测、分子设计和合成规划三个环节按照预测—设计—合成的顺序相互衔接，共同构成面向精细化学品研发的端到端智能闭环。该图概括了本文的核心结构，也体现了AI从单点工具走向系统性研发平台的发展趋势。

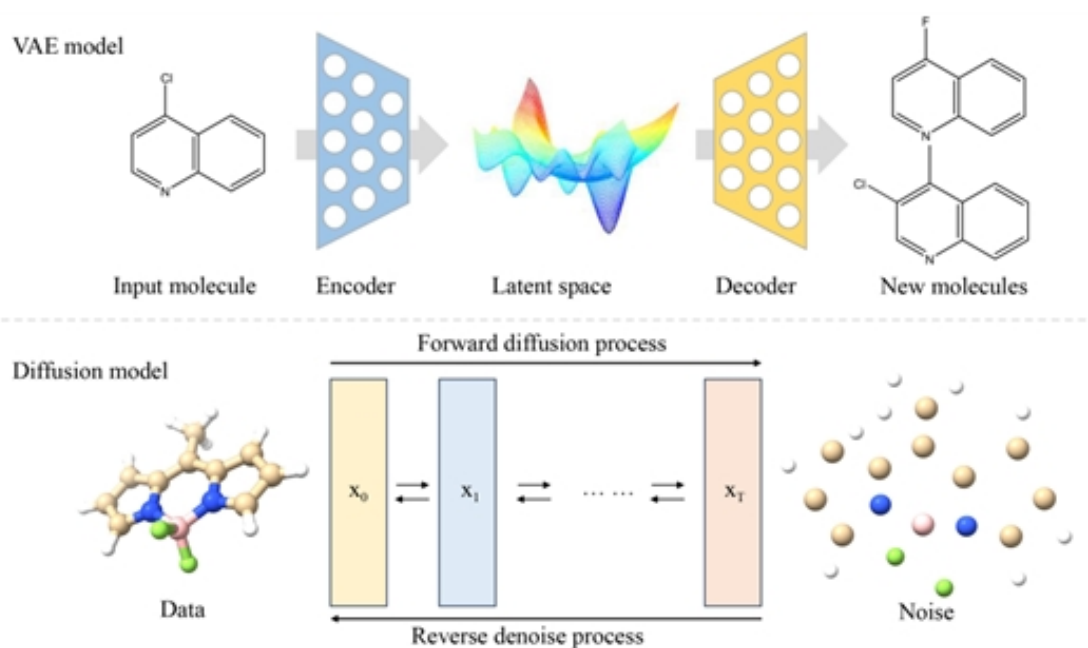
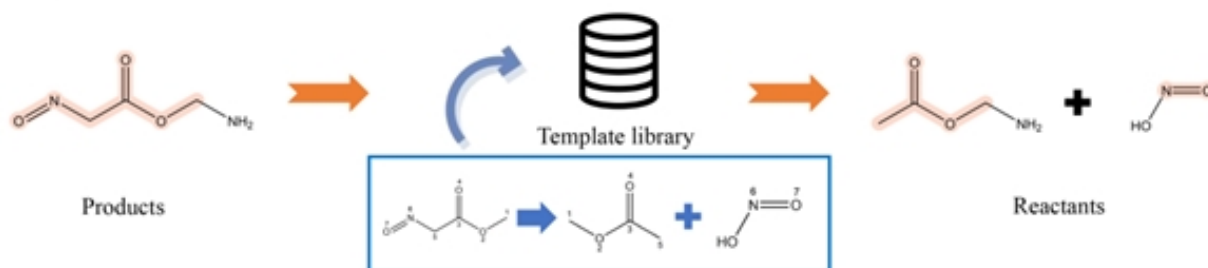


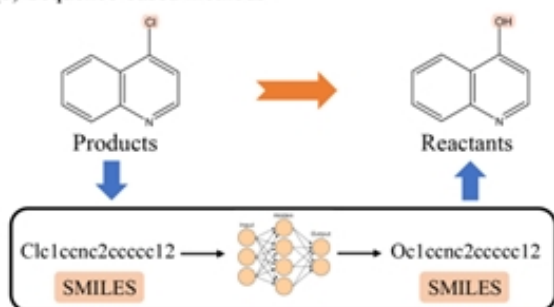
图6. 对比了VAE与扩散模型两类主流分子生成模型。VAE通过编码器-解码器结构，将分子压缩到连续潜在空间中，再从该空间重构或生成新分子；扩散模型则通过加噪-去噪过程，从随机噪声逐步生成高保真分子结构。该图体现了生成式分子设计从一维SMILES和二维分子图，进一步迈向三维几何结构和目标导向生成的重要趋势。

(a) Template-based methods



Template-free methods

(b) Sequence-based methods



(c) Graph-based methods

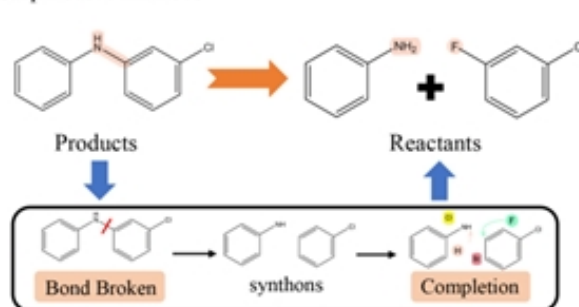


图7.展示了主流AI逆合成预测方法的分类。基于模板的方法通过匹配已知反应规则来寻找可能的前体分子，具有较强可解释性；无模板方法则将逆合成视为序列翻译或图结构变换任务，能够从数据中学习反应模式，为复杂分子的合成路线规划提供新的可能。该图直观呈现了智能合成规划从知识规则驱动走向数据智能驱动的技术演进。

(来源：EngineeringJournals微信公众号)

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2658-2>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：刘奇磊等 来源：《工程·化学工程》

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发