
FCS 中国科学技术大学丁虎等系统梳理AI在化学领域的最新研究进展与机遇

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41410.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！

FCS 中国科学技术大学丁虎等系统梳理AI在化学领域的最新研究进展与机遇。论文标题：Survey on recent progress of AI for chemistry: methods, applications, and opportunities

期刊：Frontiers of Computer Science

作者：Hu DING, Pengxiang HUA, Zhen HUANG

发表时间：21 Aug 2025

DOI：10.1007/s11704-025-50127-3

微信链接：点击此处阅读微信文章

Survey on recent progress of AI for chemistry: methods, applications, and opportunities

Hu DING✉, Pengxiang HUA, Zhen HUANG

School of Computer Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

Received February 9, 2025; accepted July 28, 2025

E-mail: huding@ustc.edu.cn

Authors are listed in alphabetical order by last name.

© Higher Education Press 2026

引用格式：

Hu DING, Pengxiang HUA, Zhen HUANG. Survey on recent progress of AI for chemistry: methods, applications, and opportunities. *Front. Comput. Sci.*, 2026, 20 (11) : 2011358

阅读原文：



摘要

中国科学技术大学丁虎等从计算化学的角度，系统性地综述了人工智能（AI）在化学领域的应用现状。文章涵盖了化学数据的多维表征、主流预测与生成模型，以及分子性质预测、新药发现等关键任务，并深入探讨了当前面临的数据质量与黑盒模型等挑战，为化学与AI的深度交叉研究提供了技术路线图。

内容精要

传统的化学研究长期以来依赖于试错法和密集的手工实验观测，这种范式不仅研发周期长、成本高昂，且随着化学探索空间（预计包含1060种潜在分子）的无限扩张，仅靠人力已难以在庞大的数据海洋中发现深层规律。近年来，数字化化学数据的积累为计算化学带来了契机，但如何将复杂的分子结构有效转化为机器可理解的语言，以及如何构建具备高通用性的预测模型，依然是制约AI + 化学迈向精准化与规模化的核心壁垒。

针对这些挑战，研究团队提出了一套完整的计算化学AI框架，从数据表征、模型构建到任务落地

进行了全链条梳理。在数据表征层面，文章系统对比了分子图、一维字符串（SMILES）以及三维体素网格等表征方式的优劣；在算法层面，则重点探讨了图神经网络（GNN）在捕获分子拓扑特征方面的优势，以及扩散模型（Diffusion Models）和大语言模型（LLM）在分子生成与化学反合成预测中的应用潜力。

文中进一步评估了AI技术在实际科研任务中的表现。在分子性质预测、分子结构生成以及复杂化学反应路径模拟等任务中，AI模型展现出了超越传统物理计算的高效性，能够显著提升催化剂研发和新药筛选的速度。同时，作者特别强调了这些模型在处理高维化学特征时的鲁棒性，以及其在多任务学习和跨领域知识迁移方面的独特优势，证明了AI在处理复杂生化关联时的强大能力。

该综述为跨学科研究者提供了宝贵的视角，明确了AI技术如何从底层逻辑改变化学发现的路径。尽管目前在数据的准确性、模型的可解释性以及实验验证的闭环方面仍存挑战，但随着算法的演进，AI有望成为未来化学实验室的基础设施，助力科研人员在未知的化学空间中实现更精准的导航。

期刊简介

Frontiers of Computer Science (FCS) 是由教育部主管、高等教育出版社和北京航空航天大学共同主办，南京大学支持，SpringerNature 公司海外发行的英文学术期刊。本刊于 2007 年创刊，月刊，全球发行。主要刊登计算机科学领域具有创新性的综述论文、研究论文等。本刊主编为周志华院士，执行主编为周昆教授。编委会及青年 AE 团队由国内外知名学者及优秀青年学者组成。本刊被 SCI、Ei、DBLP、INSPEC、SCOPUS 和中国科学引文数据库 (CSCD) 核心库等收录，为 CCF 推荐 B 类期刊；两次入选中国科技期刊国际影响力提升计划；入选第 4 届中国国际化精品科技期刊；两次入选中国科技期刊卓越行动计划（一期梯队、二期领军）。

来源：Frontiers of Computer Science

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