



农用化工行业研究

买入（首次评级）

行业深度研究

证券研究报告

基础化工组

分析师：王明辉（执业 S1130521080003） 分析师：陈屹（执业 S1130521050001）

wangmh@gjzq.com.cn

chenyi3@gjzq.com.cn

AI 助力农药创新药研发

投资逻辑

农药分为创新药和仿制药，少数拥有创新能力的跨国巨头掌握着产业链高附加值环节。农药是用于防治农林业病虫害以及调节植物生长的各种物质，按照防治对象的不同，主要分为除草剂、杀虫剂、杀菌剂、植物生长调节剂等。农药原药分为创制药和仿制药两类，少数拥有创制能力的跨国巨头掌握关键专利及产业链高附加值环节，技术壁垒在短期内难以被完全跨越；新兴市场企业则正通过“联合创制”、并购技术平台等方式逐步切入这一高端领域。2024 年富美实、CORTEVA、拜尔、巴斯夫研发投入合计 99.5 亿元，较 2016 年上涨 21.67%，平均研发费用增速为 3.13%。

医药与农药具有相似的研发逻辑，农药创新药的研发可以借助医药行业的经验。农药和医药尽管应用领域有所不同，但其底层逻辑与技术框架具有高度相似性，二者均包括仿制药与创制药的开发路径，其核心流程均涉及活性分子的筛选、靶点识别、结构优化与安全性评价等关键技术环节。从产业规模来看，中国医药行业年研发投入已达约 1300 亿元，反映出医药行业在研发体系构建、平台搭建、产业协同等方面更为成熟。因此，农药行业可以借鉴医药行业从仿制向创制转型的成功经验，特别是在 AI 辅助分子设计、高通量筛选等方面，通过引入先进理念和成熟机制，加速农药研发的效率与创新水平。

搭建 AI 创新药研发平台的案例研究。搭建农药创新药研发平台的底层逻辑在于构建一个以数据为驱动、模型为支撑、算法为引擎的系统，实现从靶标发现到候选分子筛选、优化与评估的全流程智能化。在构建模型方面，Kruger 等人（2023）提出了一个基于机器学习判断化合物是否具有杀虫活性的典型数据筛选案例，其通过构建杀虫剂与非杀虫剂样本的数据集，训练机器学习模型以识别潜在杀虫剂分子，并依据特征数据进行性能评估。在优化模型方面，Chen 等（2023）提出 Pesti-DGI-Net 深度学习结构，该架构通过多模态机器学习手段优化农药识别模型。考虑到当前许多成熟的机器学习模型辅助药物研发工具主要针对药品单一属性，构建综合性工具平台是 AI 辅助农药创新药研发较为实用的解决方案。例如，PDAI 平台（Pesticide Design based on Artificial Intelligence）就是一个专门为农药分子设计量身打造的综合性开发平台，通过整合多种技术模块，覆盖从靶点识别到候选物筛选等多个关键研发阶段，为农药研发提供一站式服务。

风险提示

农药需求下滑；农药价格下跌；转基因推广不及预期；安全环保检查



内容目录

一、农药行业概况.....	4
1.1、农药产业链分为五大环节.....	4
1.2、近年来国内外创制药和靶标的研发进展.....	5
1.3 创新药研发成本增长，研发周期变长.....	7
2、AI 可以助力创新药的研发.....	7
2.1、农药创新药研发可以借鉴医药创新药研发的经验.....	7
2.2、农药可以借鉴医药在研发经验.....	9
2.3 借鉴日本农药企业的研发经验.....	11
3、搭建农药创新药研发平台.....	12
3.1、基于机器学习进行创新药研发的底层逻辑.....	12
3.2 、当前面临的主要问题：模型优化困难，输出结果准确性较差.....	13
4、建议关注.....	14
4.1、利民股份.....	14
4.2、扬农化工.....	15
4.3、江山股份.....	15
5、风险提示.....	16

图表目录

图表 1： 农药行业产业链.....	4
图表 2： 农药原药分为创制药和仿制药两类.....	4
图表 3： 2026 年全球农药市场规模预计 734 亿美元.....	5
图表 4： 2026 年中国农药市场规模预计 628 亿元.....	5
图表 5： 全球农药市场创制药与仿制药占比（%）.....	5
图表 6： 国外的原创性靶标（不完全统计）.....	6
图表 7： 国内的原创性靶标（不完全统计）.....	6
图表 8： 1990 年以来上市的新有效成分数量下降.....	7
图表 9： 农药全流程研发成本持续上涨.....	7
图表 10： 全球主要创制药企业研发成本自 2016 年平均增速为 3.13%.....	7
图表 11： 药物研发流程.....	8
图表 12： 生物医药行业产业链.....	8
图表 13： 氟虫酰胺作用于鱼尼丁受体的过程示意图.....	9
图表 14： 新烟碱类农药作用机制.....	9



图表 15: 医药研发成本持续上升	9
图表 16: 学者使用 AI 平台 PandaOmics 和 Chemistry42 研究肝细胞癌的药物	10
图表 17: 晶泰科技 AI 技术平台展示	11
图表 18: 2003-2023 年农药行业 PCT 申请来源国分布, 日本排第三	11
图表 19: AI 研发平台搭建的底层逻辑	12
图表 20: 通过 PaDEL descriptors 得到炔丙菊酯和氯炔丙菊酯的特征分布	12
图表 21: 采用六种机器学习模型输出结果后, 通过硬投票机制得到最终结果	12
图表 22: 基于机器学习识别杀虫剂活性全流程	13
图表 23: Pesti-DGI-Net 深度学习结构	13
图表 24: DGI 模型结构显著优于其他模型	13
图表 25: PDAI 官方网站	14
图表 26: PDAI 平台整合了许多已有成熟技术	14
图表 27: 利民股份营业收入及净利润	14
图表 28: 利民股份产品结构	14
图表 29: 扬农化工营业收入及净利润	15
图表 30: 扬农化工产品结构	15
图表 31: 江山股份营业收入及净利润	15
图表 32: 江山股份收入结构	15

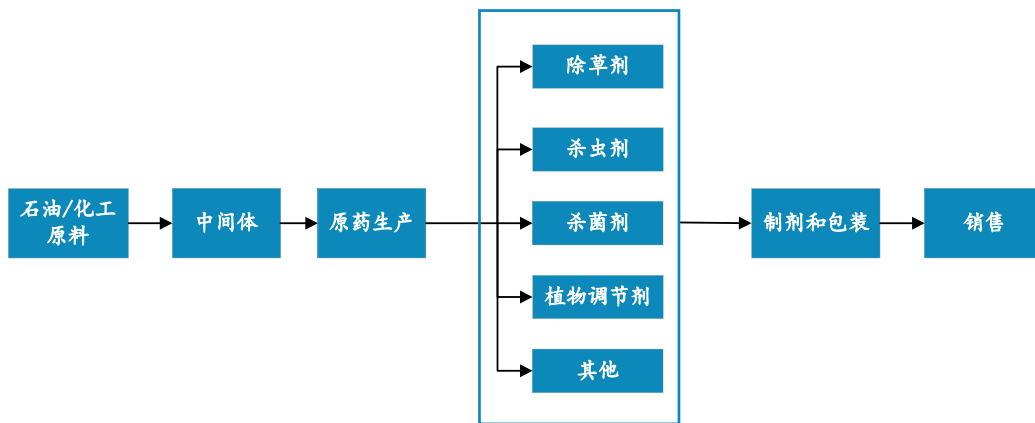


一、农药行业概况

1.1、农药产业链分为五大环节

农药是用于防治农林业病虫害以及调节植物生长的各种物质，按照防治对象的不同，主要分为除草剂、杀虫剂、杀菌剂、植物生长调节剂等。除草剂通过干扰光合作用、激素调控等生理途径，选择性或非选择性防除靶标杂草，从而减少杂草与作物争夺养分。杀虫剂作用于害虫神经系统、能量代谢或生长发育过程，以控制其种群、减轻危害。杀菌剂用于抑制或杀灭引起植物病害的真菌、细菌等病原微生物，阻断其侵染循环。植物生长调节剂则通过模拟或拮抗植物内源激素，定向调控其生长发育进程。从产业链视角看，农药行业产业链可分为“原材料-中间体-原药生产（AI Synthesis）-制剂和包装-销售”五大环节。

图表1：农药行业产业链



来源：先正达招股说明书，国金证券研究所

农药原药分为创制药和仿制药两类。创制药是指具备自主知识产权的新型活性成分，其研发过程复杂，需经历大量化合物筛选和严谨的毒理、药效、安全性试验，研发成本高昂，技术壁垒显著。凭借专利保护，创制药企业在市场上享有较高的独占性和溢价能力，并获得高商业回报，代表性生产企业如先正达、拜耳、巴斯夫和科迪华。仿制药则是在创制药专利到期后，其他企业依据其公开的分子结构和合成路线进行仿制生产的产品，其研发周期与投入成本显著较低，技术门槛也相对有限。仿制药企业凭借成本控制、产能优势与渠道能力进行市场竞争，利润空间受行业竞争程度影响较大，代表性生产企业如 UPL、安道麦、润丰股份。

图表2：农药原药分为创制药和仿制药两类

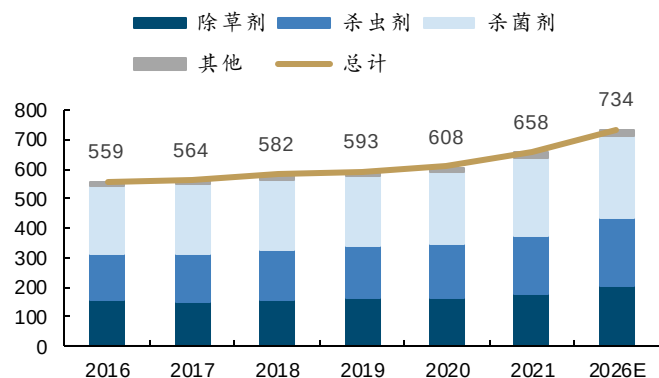
	创制药	仿制药
知识产权	具有自主知识产权	等待原研药专利过期后进行仿制
研发	经过严格筛选和长期安全性评价，通常需要进过完整的临床试验	仅对比生物等效性，不需要大规模临床试验
申报和评价标准	完整的新药申报和严格的国际标准	简略新药申请依据和相对宽松标准
定价	结合疗效和竞争格局，根据药物经济学定价	通常为原研药价格的10%-40%

来源：前瞻产业研究院，国金证券研究所



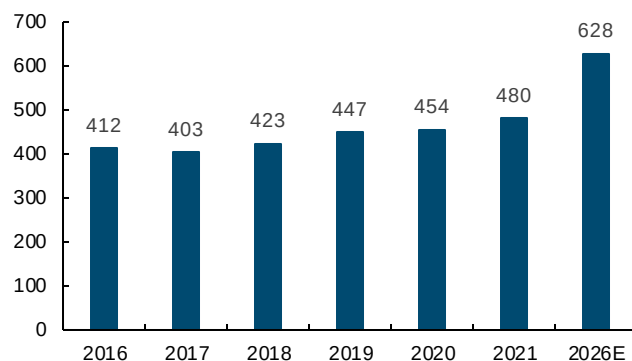
根据先正达招股说明书，2021 年全球农药市场规模达 658 亿美元，自 2016 年来年均复合增长率为 3.3%，预计到 2026 年农药全球市场规模可以达到 734 亿美元。此外，从产品结构来看，低端产品用量已呈现出逐步减少的趋势。2021 年我国植物保护产品行业市场规模 480 亿元，同比保持稳定，自 2016 年来年均复合增长率为 3.1%。预计 2026 年整体市场规模将达到 628 亿元，年均复合增长率 5.5%，增长主要得益于逐步采用更为先进且更具可持续性的植物保护产品技术。

图表3：2026 年全球农药市场规模预计 734 亿美元



来源：先正达招股说明书、国金证券研究所

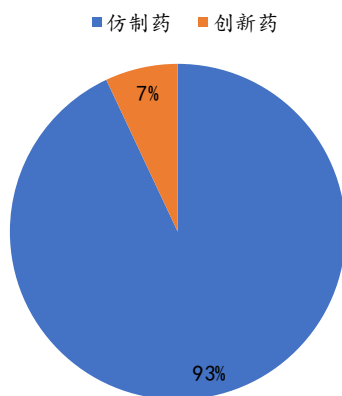
图表4：2026 年中国农药市场规模预计 628 亿元



来源：先正达招股说明书、国金证券研究所

目前全球农药市场已由仿制药占据绝对主导：最新数据显示，仿制农药的市场份额约 93%，而仍在专利期内的创制农药仅约 7%。尽管份额有限，少数拥有创制能力的跨国巨头依旧掌握关键专利及产业链高附加值环节，技术壁垒在短期内难以被完全跨越；新兴市场企业则正通过“联合创制”、并购技术平台等方式逐步切入这一高端领域。仿制药广泛分布于中低端市场，由中国、印度等国家的农化企业主导。随着大量专利陆续到期、环保监管趋严以及全球对低毒高效产品的需求提升，仿制农药市场仍具有可观的发展空间。

图表5：全球农药市场创制药与仿制药占比 (%)



来源：印度作物联合会 (CCFI)，国金证券研究所

1.2、近年来国内外创制药和靶标的研发进展

在创新药研发领域，欧美等发达国家的大型跨国公司凭借技术积累和研发实力持续领先。国外研发的代表性原创农药有 2017 年上市的环境虫酰胺 (日本石原产业株式会社研发)、2018 年上市的双丙环虫酯 (巴斯夫研发)、2023 年推出的核酸农药 Calantha (美国 GreenLight Biosciences 公司研发)、2024 年推出的 Booster 抗性治理增效剂 (英国 Pangaea Biosciences 研发) 等，各有其独特的作用机制与应用场景。目前全球农药市场正逐步向创制药为主导的方向发展，国内农药行业也逐渐将发展重心转向创制药，并取得了显著进展。近年来，清原作物科学自主研发了氟溴草醚、氟砒草胺、溴噁草松等十余种除草剂，先达股份研发了吡唑啉草酯、喹草酮、苯丙草酮等除草剂。



靶标是农药在生物体内的作用位点（特定酶或受体），创新药的关键就在于发现并验证具有临床价值的原创性靶标。国外在靶标发现方面一直处于领先地位，近十年发现的原创性靶标数量较多，如环溴虫酰胺的靶标鱼尼丁受体变构体、双丙环虫酯的靶标香草酸瞬时受体通道复合物、氟噻唑吡乙酮的靶标 OSBP、双氢茉莉酮酸丙酯的靶标茉莉酸信号受体。国内虽然在分子靶标发现技术上与发达国家存在差距，但近年来也取得了显著进步。国内研发人员已经发现 UspA、Myosin-5、Ap0R5-0rco、HPPD、OfHex1 等多个农药的潜在作用靶标，以农药喹草酮的作用靶标 HPPD 为例，喹草酮的作用机制是抑制杂草体内 HPPD 酶的活性，阻止类胡萝卜素的合成，导致植物叶片发黄、发白，影响光合作用最终使其死亡。这些原创性靶标的发现推动了国内外原药创新药的研发进程。

图表6：国外的原创性靶标（不完全统计）

原创农药	原创靶标	作用机理	类型
双丙环虫酯	香草酸瞬时受体通道复合物	与通道复合物结合，过度刺激并最终使该通道沉默，引起昆虫神经系统紊乱，影响其取食行为和运动能力，最终导致昆虫饥饿和失水而死亡	杀虫剂
环溴虫酰胺	鱼尼丁受体变构体	与线粒体膜内鱼尼丁受体上的特定位点相结合，打使细胞内的钙离子持续释放，并与肌浆中的基质蛋白结合，迅速引起靶标害虫肌肉持续收缩和萎缩，表现出抽搐、麻痹、拒食，最终导致死亡	杀虫剂
氟噻唑吡乙酮	氧化固醇结合蛋白 OSBP	OSBP 在真核细胞内参与脂质代谢的非囊泡运输，对病原菌维持细胞功能至关重要，氟噻唑吡乙酮通过抑制 OSBP 来影响病原菌的生命周期	杀菌剂
双氢茉莉酮酸丙酯	茉莉酸信号受体	双氢茉莉酸丙酯通过激活能诱导植物产生抗虫和抗病相关蛋白的茉莉酸信号受体，增强植物自身的防御机制	生长调节剂

来源：知网，中国科学院文献情报中心，国金证券研究所

图表7：国内的原创性靶标（不完全统计）

原创农药	原创靶标	作用机理	类型
香草硫缩病醚	抗胁迫蛋白 UspA	通过激活植物免疫系统、调控激素相关基因表达、利用内吸传导特性在植物体内分布，从而增强植物对病毒病的抗性	植物免疫激活剂
氟烯菌酯	肌球蛋白 Myosin-5	抑制病原菌 Myosin-5 的 ATP 酶活性，从而抑制病原菌的生长和繁殖	杀菌剂
乙酸香叶酯	报警信息素受体 Ap0R5-0rco	乙酸香叶酯通过作用于报警信息素受体 Ap0R5-0rco，触发昆虫的防御行为，使昆虫产生逃避反应或减少取食。	昆虫行为调控剂
喹草酮	对羟基苯基丙酮酸双加氧酶 HPPD	抑制对羟基苯基丙酮酸双加氧酶 HPPD 的活性，阻止类胡萝卜素的合成，导致植物叶片发黄、发白，影响光合作用最终使植物死亡	除草剂
TMG	昆虫己糖胺酶 OfHex1	TMG 通过抑制昆虫己糖胺酶 OfHex1 的活性，干扰昆虫的几丁质代谢和外骨骼形成，阻碍昆虫的生长和发育。	杀虫剂
烯炔菌酯	细胞色素 bc1 复合物	农药通过抑制细胞色素 bc1 复合物的活性，阻断线粒体呼吸链电子传递，导致昆虫细胞能量代谢障碍，最终使昆虫死亡。	杀虫剂

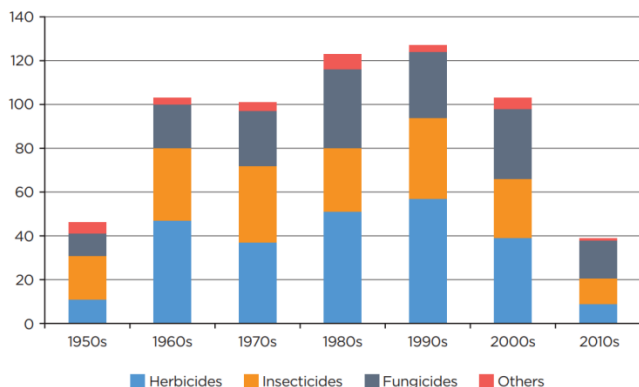
来源：科学网，农博生物，中国农业科学院，中国科学院文献情报中心，国家知识产权局，国金证券研究所



1.3 创新药研发成本增长，研发周期变长

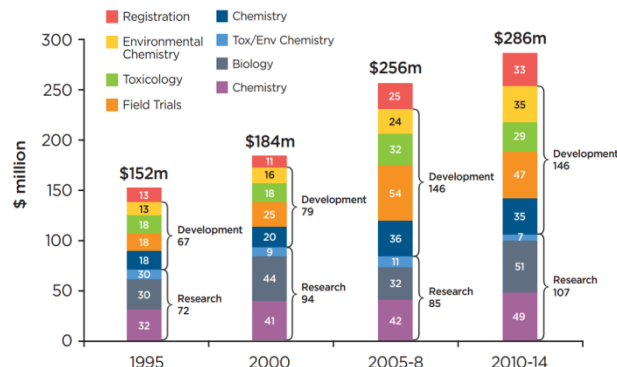
原药创新药作为农药产品的核心，开发成本巨大、周期较长。根据 Crop Life International 的统计，2014-2019 年间新农药研发平均需要近 12.3 年时间，成本超过 3 亿美元。随着农药研发难度加大，研发成本和研发周期不断攀升。根据 Phillips McDougall AgriService 的统计，1995 年、2000 年、2005—2008 年、2010—2014 年等 4 个时间段的农药研发成本分别约为 1.52 亿美元、1.84 亿美元、2.56 亿美元、2.86 亿美元，较上一个样本段增长 21%、39%、11.7%，同时研发周期也不断延长，依次为 8.3 年、9.1 年、9.8 年、11.3 年。与其他领域相比，植保工业持续高水平研发投入。尽管如此，近年来，全球农药市场新产品登记速度下降，植保工业创制并上市的新产品处于低位水平。

图表8：1990 年以来上市的新有效成分数量下降



来源：Phillips McDougall Database、国金证券研究所

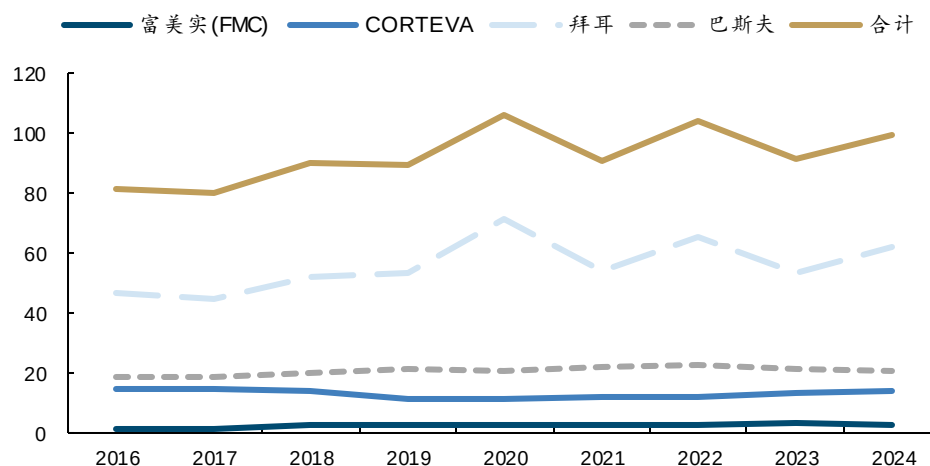
图表9：农药全流程研发成本持续上涨



来源：Phillips McDougall Database、国金证券研究所

全球主要创制药企业研发成本自 2016 年平均增速为 3.13%。2024 年富美实、CORTEVA、拜耳、巴斯夫研发费用合计 99.5 亿元，较 2016 年上涨 21.67%，平均研发费用增速为 3.13%。根据 Phillips McDougall AgriService 公司的统计，在过去 50 年里，全球主要研发型公司的总体研发投入一直保持较高水平，占这些公司年销售额的 7%~10%。

图表10：全球主要创制药企业研发成本自 2016 年平均增速为 3.13%



来源：wind、国金证券研究所

2、AI 可以助力创新药的研发

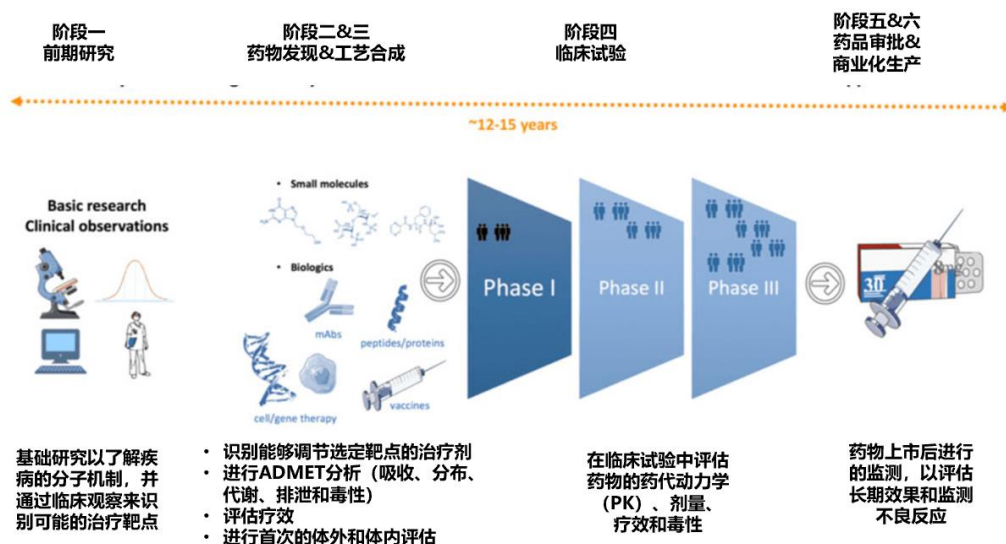
2.1、农药创新药研发可以借鉴医药创新药研发的经验

医药与农药具有相似的研发逻辑。二者均包括仿制药与创制药的开发路径，其核心流程均涉及活性分子的筛选、靶点识别、结构优化与安全性评价等关键技术环节。尽管应用领域有所不同，但其底层逻辑与技术框架具有高度相似性。从产业规模来看，中国医药行业年研发投入已达约 1300 亿元，反映出医药行业在研发体系构建、平台搭建、产业协同等方



面更为成熟。因此，农药行业可以借鉴医药行业从仿制向创制转型的成功经验，特别是在 AI 辅助分子设计、高通量筛选等方面，通过引入先进理念和成熟机制，加速农药研发的效率与创新水平。

图表11：药物研发流程



来源：Atlantis Bioscience、国金证券研究所

医药行业和农药行业具有相似的产业链结构与商业模式。二者都具有“原料-中间体-原药-制剂-销售”的产业链结构，均呈现典型的“微笑曲线”特征，价值集中于研发创新和终端服务。从研发端看，医药行业与农药行业以小分子设计为核心，依赖靶点识别、构效关系建模、毒性预测等关键技术环节推动产品开发，均涉及复杂的生物作用机制验证与安全性评估，存在技术壁垒高、研发周期长、成本投入大的共性，形成了严密而系统的研发闭环。从终端看，医药行业与农药行业均具有 CRO 与 CDMO 的商业模式。

图表12：生物医药行业产业链



来源：智研咨询、国金证券研究所

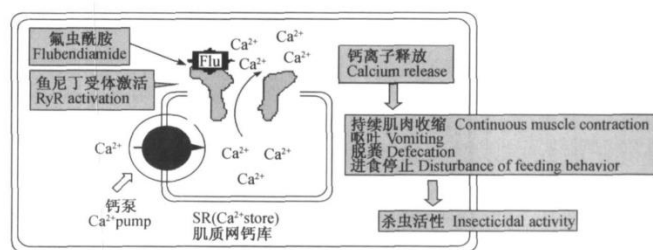
医药行业和农药行业具有相似的作物机制。医药与农药在作用靶点层面存在高度同源性，这是因为二者均干预生物体的基本生命活动，如神经传导、细胞分裂与代谢调控等，从而许多分子靶点在结构和功能上具有一致性。例如，鱼尼丁受体 (RyR) 是调控细胞钙离子通道的关键蛋白，医药领域通过兰尼碱类药物作用于心肌细胞的 RyR 治疗心律失常，羧基酰胺等农药则通过激活昆虫 RyR 诱导钙流失致死；乙酰胆碱受体 (nAChR) 是神经信号传导的重要靶点，加兰他敏通过调节 nAChR 治疗阿尔茨海默病，吡虫啉等新烟碱类农药则靶



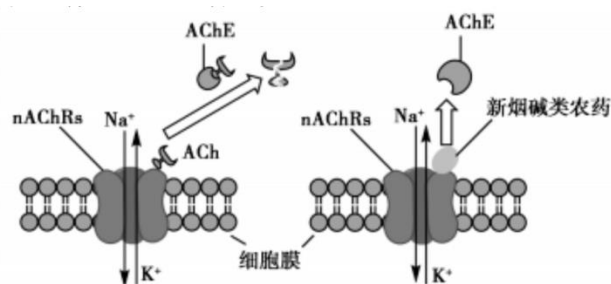
向昆虫 nAChR 致其麻痹；微管蛋白 (Tubulin) 作为细胞骨架核心，是抗癌药物紫杉醇的靶点，也是苯并咪唑类杀菌剂的主要作用位点；HMG-CoA 还原酶既是降脂药物他汀类的靶点，也是三唑类农药干预真菌麦角甾醇合成的重要节点。靶标的相似性推动了两行业研发策略的相似性。

医药行业和农药行业具有相似的方法学。二者均依赖于化学合成、生物技术、化工工程以及计算科学等交叉学科的支撑，这些共同的技术基础贯穿于新分子的设计、筛选、优化和制备全过程，形成了系统化、模块化的研发范式。在化学方面，两者都重视合成路线的效率与绿色工艺的可持续性；在生物学层面，基因工程、微生物技术与分子机制研究为活性物质的开发提供理论依据；计算科学的应用则体现在分子模拟、结构预测与人工智能辅助设计等关键环节。随着信息化程度的不断提升，农药和医药研发均朝着高通量、自动化和智能化方向演进，提升了研发效率并降低了试错成本。方法论的相似性使得医药行业中成熟的工具体系和研发流程对农药行业具有直接的借鉴价值，为推动农药研发模式的升级提供了可行路径。

图表13：氟虫酰胺作用于鱼尼丁受体的过程示意图



图表14：新烟碱类农药作用机制



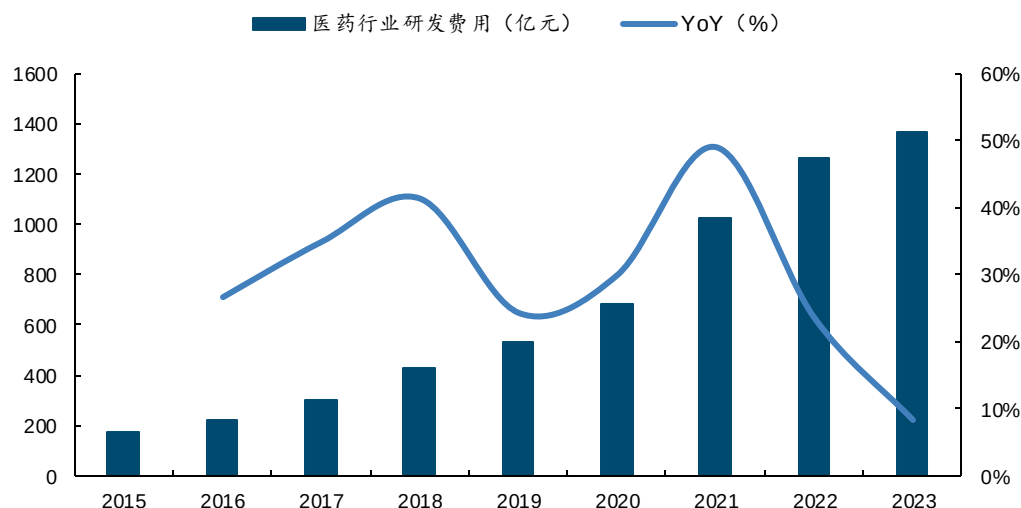
来源：《昆虫鱼尼丁受体及其为靶标的杀虫剂的研究进展》、国金证券研究所

来源：《新烟碱类杀虫剂的研究与开发进展》、国金证券研究所

2.2、农药可以借鉴医药在研发经验

医药研发费用高昂且持续上升。根据 TechTarget 的行业分析数据以及中国生物医药行业专家尹正的介绍，将一种新药推向市场的平均成本为 26 亿美元，其中临床试验占了很大一部分费用。高昂费用主要源于两大瓶颈环节：一是靶点筛选与化合物验证阶段需进行数万次实验，二是临床前毒理与药效测试依赖大量动物实验和复杂体外模型，而监管标准的不断提高也进一步加剧了成本压力。近十年来，医药行业研发费用以平均每年 30% 的增速攀升，2015 年行业研发费用 176.19 亿元，而 2022 年已达 1261.51 亿元，2023 年以来增速有放缓趋势。

图表15：医药研发成本持续上升

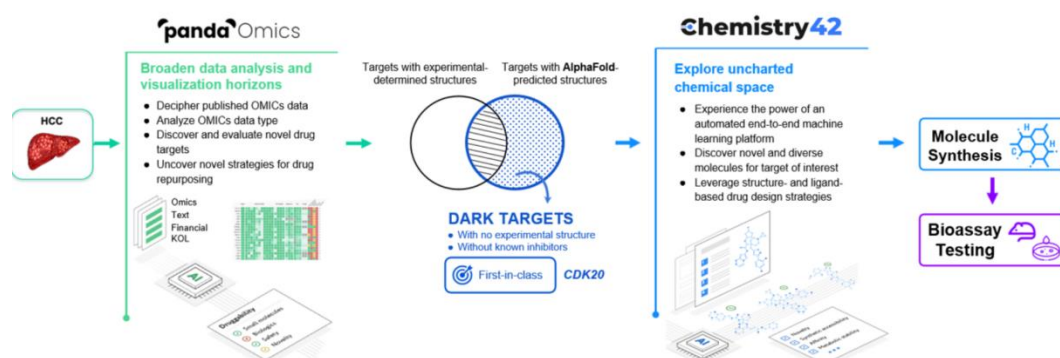




来源：wind，国金证券研究所

AI 可以提升创制药研发的效率，降低研发成本。在靶点发现与验证阶段，AI 模型通过整合多组学数据与文献知识库，可将靶点筛选时间缩短 90%。英矽智能通过其人工智能驱动的 PandaOmics 平台高效识别潜在药物靶点，使得从靶点发现到临床候选化合物提名的新药研发周期缩短至传统方法的 1/3。以其两个具有全球首创 (First-in-Class) 潜力的项目为例：抗纤维化项目周期约 18 个月，DGKA 项目约 15 个月，远低于传统药物研发中平均约 4.5 年的时间周期。在分子设计与优化阶段，生成式 AI 在生成新分子结构与提升命中率方面展现出更强突破性：Chemistry42 引擎基于 AlphaFold 预测的蛋白结构，仅用 30 天便设计出靶向 CDK20 的肝癌苗头化合物，而传统方法需 6-12 个月；Model Medicines 公司的 ChemPrint 模型针对 AXL 靶点实现 45.5% 的体外命中率；先正达应用最先进的数字化和物理技术加速化学设计与合成技术创新过程，例如机器人高速合成、流体化学、计算机辅助分子设计和人工智能引导的化学合成等技术，每年内部合成超过 10000 种化合物。

图表16：学者使用 AI 平台 PandaOmics 和 Chemistry42 研究肝细胞癌的药物



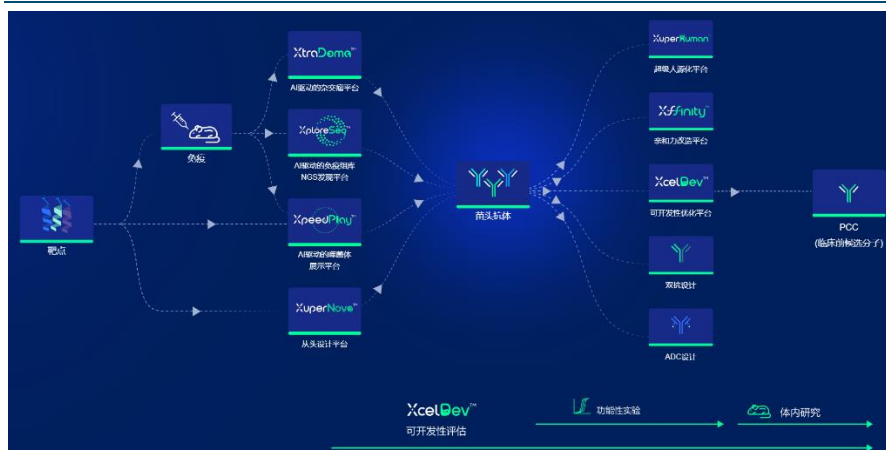
来源：《AlphaFold Accelerates Artificial Intelligence Powered Drug Discovery: Efficient Discovery of a Novel Cyclin-dependent Kinase 20 (CDK20) Small Molecule Inhibitor》、国金证券研究所

晶泰科技提供了 AI 辅助医药研发的范式创新实践。据其在官网上的公开信息，晶泰控股正依托其自主开发的 AI 驱动分子模拟平台，通过融合量子物理、高性能计算与机器学习技术，突破传统药物研发模式，在靶点识别、分子筛选与结构优化等关键环节实现提效降本。该平台能够在数周内完成亿级化合物的虚拟筛选，显著压缩研发周期并提升命中率。目前，晶泰在多项对外合作中已将先导化合物的筛选周期从传统的 18 个月缩短至不足 6 个月。公司协同多家全球领先药企推进多个管线项目，持续推动 AI 从药物研发辅助工具向决策引擎转变，在与辉瑞合作研发新冠药 Paxlovid 中，仅用 6 周时间就确认了药物优势晶型，显著缩短研发周期；在与正大天晴合作开发抗肿瘤小分子新药时，仅用原计划 50% 的时间即达成重要里程碑，极大缩短了研发时间。

农药行业亦面临原药创新药研发费用高昂的难题。由于医药行业与农药行业的诸多相似性，医药行业在运用 AI 辅助研发、降本增效方面积累的经验，可为农药研发提供借鉴路径。农药行业也可利用人工智能和大数据等新兴技术，降低原药的研发成本。例如，AI 模型可辅助企业从海量化合物数据库中筛选潜力农药分子，预测其生物活性、环境安全性及对目标作物的适用性，从而减少冗余试验、提高研发成功率。此外，AI 还能帮助企业设计更加智能的田间试验方案，优化剂量和使用场景。未来，拥有先进的人工智能辅助研发能力和庞大化合物数据库的公司，在新型原药研发的成功率上将具备显著的差异化优势。通过技术协同，农药行业有望步入一个更加高效、绿色和经济的创新周期，满足农民、市场与环境三方的共同需求。



图表17: 晶泰科技 AI 技术平台展示



来源: 晶泰科技官网, 国金证券研究所

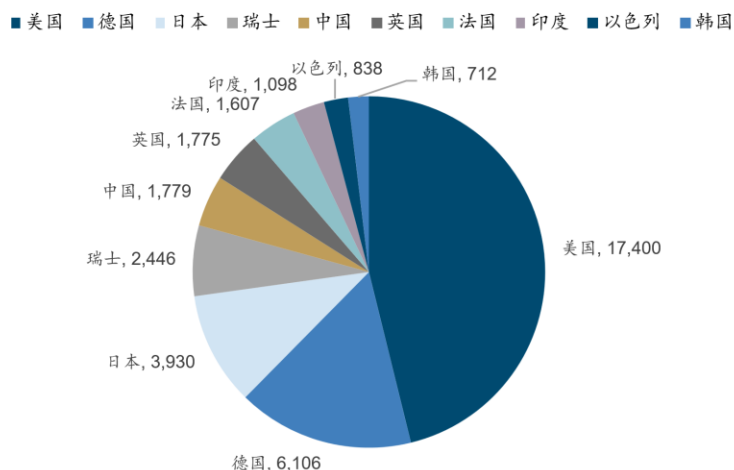
2.3 借鉴日本农药企业的研发经验

日本农药企业在创新征程中, 仅投入了跨国公司约十分之一的研发费用, 却收获了与之不相上下的创新成果, 其背后独特且高效的创新体系非常具备参考意义。

合作开发模式, 日企在化合物完成实验室小试实验后, 部分产品便转让给其他跨国农药公司。这种模式使得日本农药企业能够在早期阶段就获得收益, 同时将后续中试、田间试验以及市场推广等环节的风险和成本转嫁给合作伙伴。例如, 在 20 世纪 80 年代, 日本的农药公司成功开发出一种全新结构的化合物 1-(6-氯-3-吡啶基甲基)-N-硝基咪唑烷-2-亚胺, 该化合物在实验室小试阶段表现出优异的活性。随后, 日本农药公司将其转让给拜耳公司。拜耳公司接手后, 负责完成了中试、田间试验以及市场推广等一系列工作, 最终使该化合物成功推向市场。

基于作用机理的创新策略。 日企早期的利用电子模拟技术以及如今利用 AI 大模型模拟技术, 对化合物的结构进行模拟和优化。通过活性基团的取代替换, 合成出一系列类似化合物, 再进行定向筛选, 最终确定具有潜力的新化合物。以吡虫啉为例, 其研发过程正是基于这种策略。研究人员以一种优良的农药品种为先导物, 通过深入研究其结构和作用机理, 利用 AI 模型进行模拟和预测, 合成了大量类似化合物, 并通过实验筛选, 最终发现了吡虫啉这种高效防治害虫的新化合物。

图表18: 2003-2023 年农药行业 PCT 申请来源国分布, 日本排第三



来源: 世界农化网、国金证券研究所



3、搭建农药创新药研发平台

搭建农药创新药研发平台的底层逻辑在于构建一个以数据为驱动、模型为支撑、算法为引擎的系统，实现从靶标发现到候选分子筛选、优化与评估的全流程智能化。

图表19: AI 研发平台搭建的底层逻辑

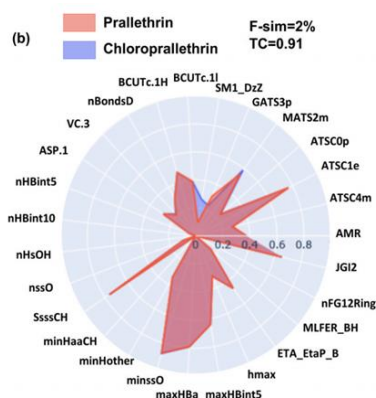


来源：国金证券研究所绘制

3.1、基于机器学习进行创新药研发的底层逻辑

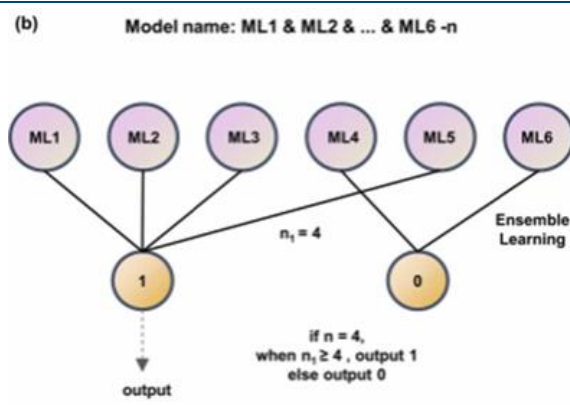
Kruger 等人 (2023) 提出了一个基于机器学习判断化合物是否具有杀虫活性的典型数据筛选案例，其通过构建杀虫剂与非杀虫剂样本的数据集，训练机器学习模型以识别潜在杀虫剂分子，并依据特征数据进行性能评估。研究者采用 BCPC 数据集，用非农药数据构建负数据集，利用公开工具如 PaDEL 和 MOE 构建高质量输入特征，并使用 SVM、LDA、DT、RF、ANN、SOM 六种主流的机器学习模型进行训练与预测。最终训练完成的模型能够判断新输入品种的性能是否为合格杀虫剂。例如，当机器输出 0 时，说明机器基于其特征数据认为不是杀虫剂，性能较差。

图表20: 通过 PaDEL descriptors 得到呋丙菊酯和氯呋丙菊酯的特征分布



来源：《Integrating classic AI and agriculture: A novel model for predicting insecticide-likeness to enhance efficiency in insecticide development》、国金证券研究所

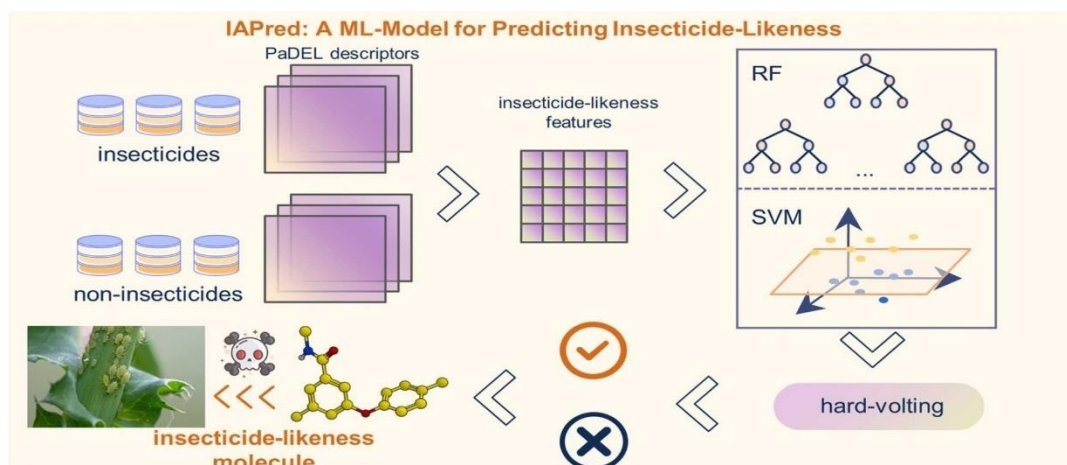
图表21: 采用六种机器学习模型输出结果后,通过硬投票机制得到最终结果



来源：《Integrating classic AI and agriculture: A novel model for predicting insecticide-likeness to enhance efficiency in insecticide development》、国金证券研究所



图表22：基于机器学习识别杀虫剂活性全流程



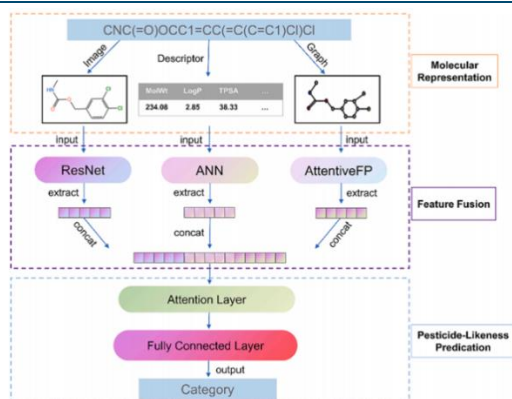
来源：《Integrating classic AI and agriculture: A novel model for predicting insecticide-likeness to enhance efficiency in insecticide development》、国金证券研究所

3.2、当前面临的主要问题：模型优化困难，输出结果准确性较差

需要注意的是，利用机器学习辅助药品研发早在 2000 年左右就有学者提出，但由于数据质量参差不齐以及机器学习内部机制通常被视为“黑箱”，预测结果难以被完全信任，尤其是在涉及患者安全和药物疗效的关键决策中，因此没有得到有效普及和使用。当前学界重点工作之一便是优化模型，得到更加准确的结果。Chen 等（2023）提出 Pesti-DGI-Net 深度学习结构，该架构通过多模态机器学习手段优化农药识别模型。

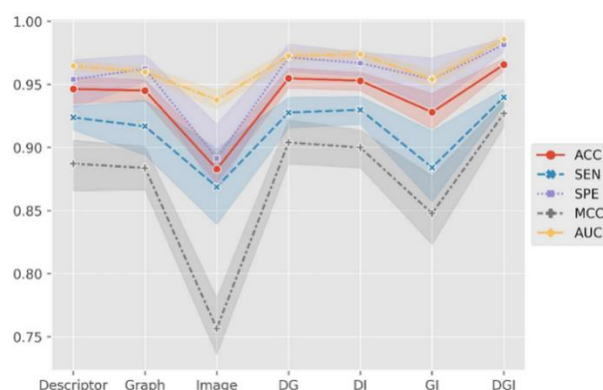
数据方面，研究人员首先构建了涵盖 1220 个市场已销售的农药分子（包括杀虫剂、杀菌剂和除草剂）与 1986 个非农药分子的高质量数据集，作为正负样本用于训练模型。为表征分子结构的不同特性，采用了三种主流表示方式：一是基于 RDKit 软件包提取的分子描述符，输入至人工神经网络（ANN）；二是利用 DGL-LifeSci 工具构建分子图结构，输入图神经网络（GNN）；三是将分子结构可视化为图像，输入卷积神经网络（CNN）进行识别。在模型融合方面，团队创新性地引入了缩放点积注意力机制为输入信息分配权重，从而提升模型对关键结构特征的识别能力。通过对多种组合模型的性能评估，结果显示融合分子描述符、图结构与图像特征的 DGI 模型表现最优，在准确率与鲁棒性上均优于单一模型，这为农药分子的理性设计提供了可复制的技术路径。

图表23：Pesti-DGI-Net 深度学习结构



来源：《Pesti-DGI-Net: A multi-modal deep learning architecture based on dual interpretability for pesticide-likeness prediction》、国金证券研究所

图表24：DGI 模型结构显著优于其他模型



来源：《Pesti-DGI-Net: A multi-modal deep learning architecture based on dual interpretability for pesticide-likeness prediction》、国金证券研究所

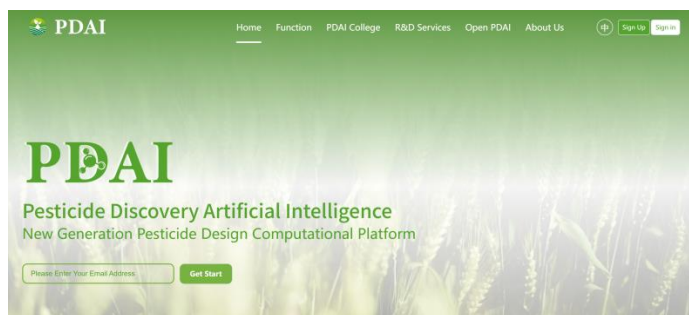
3.3、当前实用解决方案：基于现有技术搭建综合平台

考虑到当前许多成熟的机器学习模型辅助药物研发工具主要针对药品单一属性，构建综合性工具平台是 AI 辅助农药创新药研发较为实用的解决方案。例如，PDAI 平台（Pesticide



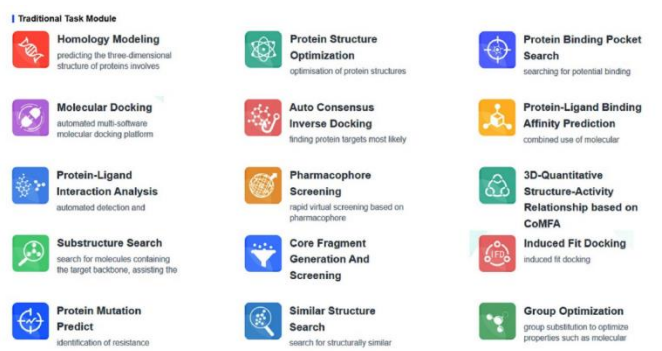
Designbasedon Artificial Intelligence) 就是一个专门为农药分子设计量身打造的综合性开发平台,通过整合多种技术模块,覆盖从靶点识别到候选物筛选等多个关键研发阶段,为农药研发提供一站式服务。其显著优势一是操作界面简洁直观,使农药设计过程更具可访问性和成本效益;二是通过模块化集成实现多功能贯通,与传统软件聚焦单一功能形成差异;三是数据资源涵盖全面,平台构建了包括农药数据库、分子筛选库、药物片段库、用户私有分子库及靶点数据库等在内的专业数据库体系,其中数据来源涵盖 PPDB、PubChem、DrugBank、Uniprot、PDB 等权威资源。以靶点识别模块为例,PDAI 可调用 AutoDock、Vina 等分子对接工具进行自动化分析,并通过算法评估得出最优结合位点和潜在靶点,辅助科学决策。PDAI 已在多个实际案例中展示其应用价值,如 HPPD 靶点预测、细胞色素 bc1 复合物抑制剂发现、以及新型蜜蜂友好型肽类杀虫剂的 3D-QSAR 建模等,显著提升了农药研发过程的效率。

图表25: PDAI 官方网站



来源: PDAI、国金证券研究所

图表26: PDAI 平台整合了许多已有成熟技术



来源:《PDAI: A green pesticide molecule design technology platform driven by high-performance computing and artificial intelligence》、国金证券研究所

4、建议关注

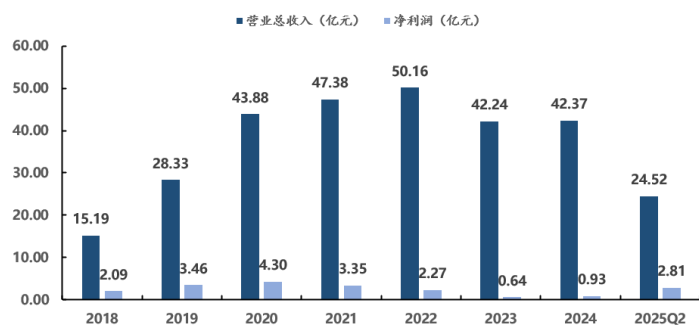
4.1、利民股份

利民股份的主营业务涵盖农药杀菌剂、杀虫剂、除草剂三大品类及兽药。公司通过并购河北双吉、威远生化等,构建起覆盖农药原药、制剂及兽药的全产业链体系,公司核心产品包括代森锰锌、百菌清等农用杀菌剂,阿维菌素、甲维盐等杀虫剂,以及草铵膦等除草剂。

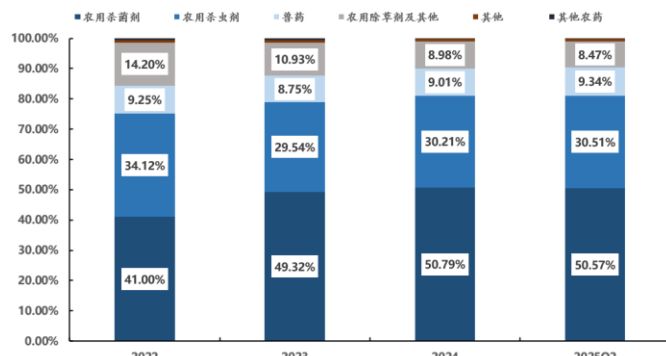
现阶段,子公司德彦智创智能农药活性分子设计平台已借助 AI 工具,布局了算力平台、数据平台、靶标数据库及靶标资源平台,这三个平台有助于全面提高创制化合物开发效率。当前,德彦智创对于 AI 的应用处于工具及模型阶段,德彦智创通过 AI 技术将推动农药创制过程变得更加高效、精准。此外,公司还积极探索 AI+农药创制研发的新思路,与巴斯夫达成战略合作框架协议,共同推进新农药在中国的开发、登记及商业化进程。

据披露的 2025 年半年度报告显示,利民股份 2025 年上半年实现营业收入 24.52 亿元,同比增长 6.69%;归属于母公司股东的净利润 2.69 亿元,同比增长 747.13%。

图表27: 利民股份营业收入及净利润



图表28: 利民股份产品结构





来源：iFinD、国金证券研究所

来源：iFinD、国金证券研究所

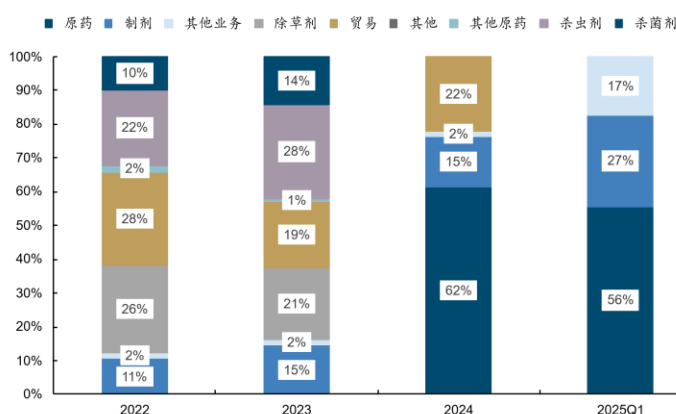
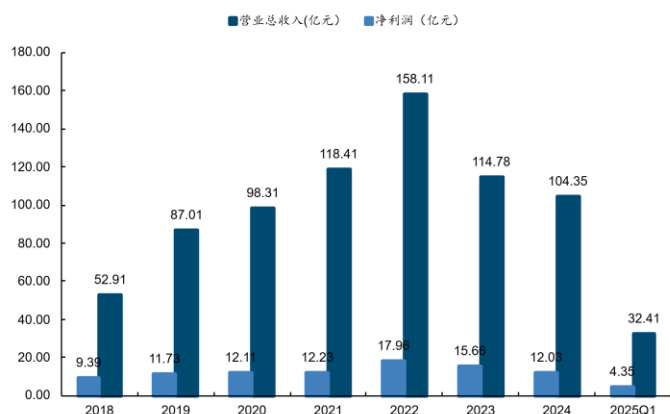
4.2、扬农化工

扬农化工成立于1999年，2002年在上海证券交易所上市，是中国中化控股有限责任公司旗下成员企业，国内农化上市企业，全球拟除虫菊酯原药核心供应商。公司产品涵盖杀虫剂、除草剂、杀菌剂和植物生长调节剂等各大类农药，种类丰富，能够满足不同市场需求。

研发创新方面，扬农化工拥有扬州植保研究院和沈阳中化农药化工研发公司南北两个研发中心，在新农药产品创制及次新药产品创新上具有显著优势。公司先后开发了多个农药创制新品种，如氯氟醚菊酯、氟吗啉、乙唑螨腈、四氯虫酰胺等，这些产品均成为国内市场的主导产品。其中，杀菌剂氟吗啉是中国第一个获准正式登记的具有自主知识产权的农药产品，杀虫剂氯氟醚菊酯是国内第一个销售额超过3亿元的农药创制品种，乙唑螨腈是中国第一大杀螨剂单品。

图表29：扬农化工营业收入及净利润

图表30：扬农化工产品结构



来源：iFinD、国金证券研究所

来源：iFinD、国金证券研究所

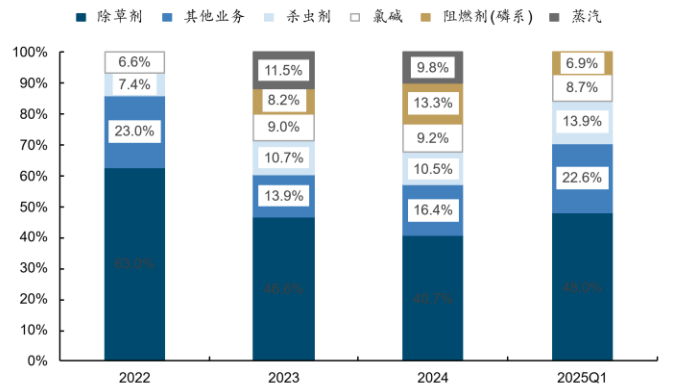
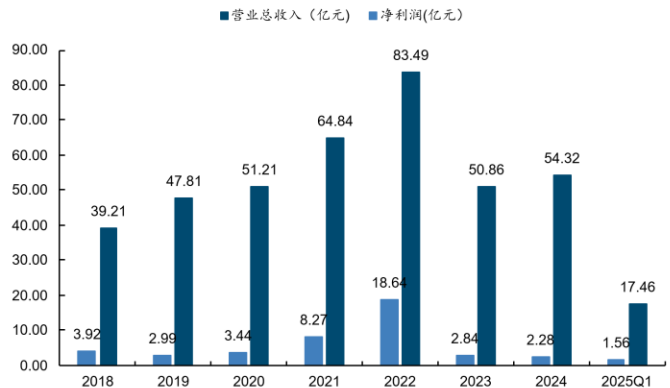
4.3、江山股份

江山股份主要从事以除草剂、杀虫剂为主的农药产品，以特种化学品、化工中间体、氯碱、新材料为主的化工产品，以及热电联产蒸汽等产品的研发、生产和销售。

研发方面，根据年报披露，2024年公司研发共计投入20705.77万元，新增项目11个，合计在研项目17个，全年完成11个研发项目的输出，有6个项目结转至2025年持续研发，开发农药高端制剂产品17个，获批新增登记6个，扩作登记6个，目前已全部实现销售。全年共申请专利63项，其中发明专利49项（含PCT专利2项），获得专利授权18项，其中发明专利14项（含国外授权7项）。2024年公司全力以赴推动创制产品JS-T205落地转化，目前该项目已处于试生产阶段。

图表31：江山股份营业收入及净利润

图表32：江山股份收入结构



来源：iFinD、国金证券研究所

来源：iFinD、国金证券研究所



5、风险提示

全球农化需求下滑风险：中国农药产品销往全球，若全球农化需求不及预期，企业销量下滑拖累业绩增长。

农药价格下跌风险：目前我国农化行业处于供需再平衡阶段，农化行业需求较稳定，部分原药品种存在供给端的增加而导致价格下跌风险。

转基因作物推广进度不及预期：转基因的推广将带动部分农药产品需求的增长，若转基因推广进度不及预期，将对部分农药品种的需求造成影响。

安全环保政策风险：安全检查影响农药企业的开工率，从而影响企业正常的生产和经营。



行业投资评级的说明：

买入：预期未来 3—6 个月内该行业上涨幅度超过大盘在 15%以上；

增持：预期未来 3—6 个月内该行业上涨幅度超过大盘在 5%—15%；

中性：预期未来 3—6 个月内该行业变动幅度相对大盘在 -5%—5%；

减持：预期未来 3—6 个月内该行业下跌幅度超过大盘在 5%以上。



特别声明：

国金证券股份有限公司经中国证券监督管理委员会批准，已具备证券投资咨询业务资格。

任何形式的复制、转发、转载、引用、修改、仿制、刊发，或以任何侵犯本公司版权的其他方式使用。经过书面授权的引用、刊发，需注明出处为“国金证券股份有限公司”，且不得对本报告进行任何有悖原意的删节和修改。

本报告的产生基于国金证券及其研究人员认为可信的公开资料或实地调研资料，但国金证券及其研究人员对这些信息的准确性和完整性不作任何保证。本报告反映撰写研究人员的不同设想、见解及分析方法，故本报告所载观点可能与其他类似研究报告的观点及市场实际情况不一致，国金证券不对使用本报告所包含的材料产生的任何直接或间接损失或与此有关的其他任何损失承担任何责任。且本报告中的资料、意见、预测均反映报告初次公开发布时的判断，在不作事先通知的情况下，可能会随时调整，亦可因使用不同假设和标准、采用不同观点和分析方法而与国金证券其它业务部门、单位或附属机构在制作类似的其他材料时所给出的意见不同或者相反。

本报告仅为参考之用，在任何地区均不应被视为买卖任何证券、金融工具的要约或要约邀请。本报告提及的任何证券或金融工具均可能含有重大的风险，可能不易变卖以及不适合所有投资者。本报告所提及的证券或金融工具的价格、价值及收益可能会受汇率影响而波动。过往的业绩并不能代表未来的表现。

客户应当考虑到国金证券存在可能影响本报告客观性的利益冲突，而不应视本报告为作出投资决策的唯一因素。证券研究报告是用于服务具备专业知识的投资者和投资顾问的专业产品，使用时必须经专业人士进行解读。国金证券建议获取报告人员应考虑本报告的任何意见或建议是否符合其特定状况，以及（若有必要）咨询独立投资顾问。报告本身、报告中的信息或所表达意见也不构成投资、法律、会计或税务的最终操作建议，国金证券不就报告中的内容对最终操作建议做出任何担保，在任何时候均不构成对任何人的个人推荐。

在法律允许的情况下，国金证券的关联机构可能会持有报告中涉及的公司所发行的证券并进行交易，并可能为这些公司正在提供或争取提供多种金融服务。

本报告并非意图发送、发布给在当地法律或监管规则下不允许向其发送、发布该研究报告的人员。国金证券并不因收件人收到本报告而视其为国金证券的客户。本报告对于收件人而言属高度机密，只有符合条件的收件人才能使用。根据《证券期货投资者适当性管理办法》，本报告仅供国金证券股份有限公司客户中风险评级高于 C3 级（含 C3 级）的投资者使用；本报告所包含的观点及建议并未考虑个别客户的特殊状况、目标或需要，不应被视为对特定客户关于特定证券或金融工具的建议或策略。对于本报告中提及的任何证券或金融工具，本报告的收件人须保持自身的独立判断。使用国金证券研究报告进行投资，遭受任何损失，国金证券不承担相关法律责任。

若国金证券以外的任何机构或个人发送本报告，则由该机构或个人为此发送行为承担全部责任。本报告不构成国金证券向发送本报告机构或个人的收件人提供投资建议，国金证券不为此承担任何责任。

此报告仅限于中国境内使用。国金证券版权所有，保留一切权利。

上海
电话：021-80234211
邮箱：researchsh@gjzq.com.cn
邮编：201204
地址：上海浦东新区芳甸路 1088 号
紫竹国际大厦 5 楼

北京
电话：010-85950438
邮箱：researchbj@gjzq.com.cn
邮编：100005
地址：北京市东城区建内大街 26 号
新闻大厦 8 层南侧

深圳
电话：0755-86695353
邮箱：researchsz@gjzq.com.cn
邮编：518000
地址：深圳市福田区金田路 2028 号皇岗商务中心
18 楼 1806



【小程序】
国金证券研究服务



【公众号】
国金证券研究