

## 2025 年度北京市自然科学基金 交叉融合重点项目指南

### 一、数学+

#### 1. 大规模人工智能模型机理解析与优化算法研究

大规模人工智能模型作为推动人工智能变革的重要支撑，在模型逼近、训练收敛和内在运行机制等方面仍面临诸多关键挑战。聚焦大规模人工智能模型机理的深度解析，围绕模型逼近、训练过程中的关键算法分析、模型和算法的内在运行机制开展交叉研究。重点关注算法优化与新型架构设计，聚焦提升大模型的透明性、鲁棒性与可靠性等，并在相关应用领域进行初步验证。

#### 2. 新能源材料中的数学模型与算法研究

针对新型电池、光伏电池等新能源功能材料与器件中的多场耦合效应、超快动力学的时空分辨表征、非线性光电转换过程物理机制等问题，围绕多场耦合下跨时空尺度动力学建模、高效算法及计算软件等开展深入系统的交叉研究，为新能源材料和器件的结构-性能关系预测及一体化设计提供理论、算法和计算软件的支持，并在相关应用领域进行初步验证。

#### 3. 生物医疗成像原理与关键算法研究

针对关键生物医疗成像模态(如光子计数 CT、冷冻电镜、超声、MRI、PET 等)在图像重建、数据融合及优化求解中存

在的技术瓶颈，围绕成像基本原理、数据驱动与机理解释相融合的数学模型及关键算法开展交叉研究，突破图像重建、数据融合与算法优化等关键科学问题，实现理论和算法层面的重要创新，为自主研制关键生物医疗设备提供算法与软件支撑，并推动其在相关应用领域的实际应用。

#### 4. 复杂疾病精准诊疗的数学统计方法、理论及应用研究

针对心脑血管疾病和神经退行性等疾病的遗传结构复杂、多源异质、风险因素繁多等挑战，围绕致病因素识别、疾病风险预测模型建立、治疗有效性的影响机制解析等，采取诸如高维显著性检验、低维因子分析、稳健统计分析、生存分析、个性化医疗分析和半参数建模等方法，开展交叉研究，发展精准识别心脑血管和神经退行性疾病风险因素的高维数据分析方法，建立具有可解释性的响应预测模型及理论，并在辅助临床诊疗中获得验证。

#### 5. 量子信息与量子计算的数学理论、计算及应用研究

针对量子计算中系统脆弱性、噪声干扰及算法效率瓶颈，围绕量子纠缠数学表征、容错计算架构与噪声自适应算法开展交叉研究，构建多体量子系统动力学模型，解析退相干机制与纠错边界。通过融合张量网络与机器学习方法，优化量子线路编译与资源分配策略，开发高效变分量子算法与近端梯度优化工具，实现含噪中等规模量子（NISQ）设备的高精度模拟与组合优化加速等，推动量子化学模拟、人工智能强化及新材料设计等领域的实用化突破。

## 二、物理+

### 1. 量子调控、探测以及模拟研究

针对当前量子信息技术面临的集成和实用化难题，围绕量子芯片比特集成、量子态精密探测与操控、含噪量子模拟与算法应用等关键问题开展交叉研究，构建可编程量子模拟机与面向云平台的量子编程框架，实现非平衡态动力学、拓扑物态等多体物理现象的量子模拟，致力实现超越主流经典算法的量子优势。

### 2. 数智驱动的量子材料研究

针对 AI+量子材料研究方向数据稀缺、应用场景受限等问题，围绕数据自动采集、多源异构数据融合与共享、高质量数据集构建等开展交叉研究，借助交叉研究平台的集成优势，面向超导、拓扑、能源等前沿领域，建立计算设计、实验验证与反馈优化的路径，发现若干新型量子材料，推动形成数智驱动的量子材料新研究范式。

### 3. 面向低温电子学和光电应用的高性能器件与效应研究

针对低温电子学和光电的实际应用难题，以及量子科技和人工智能对其的重大需求，围绕新奇量子效应和量子态精准测控、低温电子型纳米尺度材料架构设计、低温电子和光电子器件基本元件、低温忆阻器等开展交叉研究，实现低温低功耗低噪声高性能器件制备、集成及应用，助力低温电子学和光电应用的高性能器件及新技术的研发，推动量子科技与人工智能的融合发展。

#### 4. 面向信息技术和清洁能源应用等领域的功能氧化物材料研究

针对类脑计算、氢能转换等领域对具有高效离子输运性能材料的共性需求，围绕功能氧化物中离子输运特性及其对电、磁功能的调控作用等开展交叉研究，通过外延应力、晶格取向、化学掺杂等多参量调控策略，实现高可逆性、纳米精度、高速度的离子操控能力，发现超离子导体等一批高效功能氧化物材料，并探索其在新一代信息技术和清洁能源等领域的应用。

#### 5. 自旋玻璃多体多态精确求解的相干伊辛机计算方法研究

受限于现有算法效率与计算资源瓶颈，精确求解以自旋玻璃为代表的无序阻挫系统是统计物理和计算数学交叉领域亟待解决的核心难题之一。相干伊辛机在高效求解复杂问题和实现大规模应用方面潜力巨大，但尚需突破对多态和多体相互作用处理能力的限制，围绕相干伊辛机的特色算法和微波光子等新型硬件开展交叉研究，实现对万级变量规模的多体、多态自旋玻璃体系及相关组合优化问题的高效求解，促进国产特色算法与自主计算硬件技术的协同发展。

### 三、生命+

#### 1. 基因与细胞治疗的新策略及其临床应用研究

针对免疫细胞和干细胞在重大疾病模拟与治疗等方面面临的挑战，以临床需求为导向，围绕细胞命运和功能可塑性的新理论和新策略，开发更加安全有效的人源免疫细胞、



干细胞及其功能衍生物制备技术，并结合低氧适应、基因编辑、定向分化、细胞培养和类器官等技术，制备通用性更高、功能更强的人多能干细胞或分化细胞及类器官等，推动临床疾病治疗。

## **2. 面向医药健康的合成生物学新策略和新方法研究**

针对发展创新药物和精准医疗的需求，尤其是以生物大分子药物为代表的生物技术药物在应用中存在的有效性不足、副作用大等难题，以合成生物学创新技术为核心驱动力，通过人工智能驱动的序列功能关系解析、生物大分子智能设计与构建、合成基因回路设计、细胞工程改造等关键科学问题的突破，实现生物技术药物的定制化设计与创新，为疾病诊疗、健康干预和生命系统优化提供前沿支撑。

## **3. 面向临床诊疗的原创医疗器械的新技术研究**

针对高端医疗器械以及核心零部件自主可控的紧迫需求，以临床需求为导向，围绕先进增材制造器械、血管内介入靶向治疗器械、手术机器人、智能算法、核心部件创制等开展交叉研究。通过力学调控、材料创新、靶向介入、先进制造新技术或新方法等，完成原理样机、器械的研发及具体参数指标的优化等，形成具有完全自主知识产权且具有自主供应能力的原型产品，并通过动物实验及小样本的临床验证，推动我国医疗器械从国产替代向国际原创发展。

## **4. 面向临床的骨植入新材料与新技术研究**

针对感染性骨缺损治疗中，植入材料难兼顾抗感染与骨再生、术后复发率高等问题，围绕病原微生物-宿主免疫互

作、免疫微环境失衡及植入物力学/降解性能与组织再生进程失配等关键问题，通过融合多尺度自组装策略与 3D 打印技术，构建时空序贯功能型可降解骨植入材料等，实现“感染控制-免疫调节-骨再生”协同治疗，形成具有自主知识产权的原创新材料与新技术，推动感染性骨缺损治疗范式的革新。

## 5. 外周器官调控高级认知及病理干预研究

针对外周器官代谢产物、感觉信号在学习记忆等认知功能中的潜在调控作用。聚焦营养分子、微生物代谢物及外周器官感觉神经元互作机制，系统解析其在生理与病理状态下对脑功能的调控。结合多组学分析、神经活动监测和环路示踪技术，揭示外周器官-脑轴核心机制与关键通路。从临床需求出发，通过构建研究新范式，探索在神经退行性疾病和抑郁症等疾病中的应用潜力，为精准诊疗提供科学依据，推动相关领域的原创技术突破并实现临床转化。

## 6. 面向生殖健康的蛋白组新技术研究

针对生殖发育过程中细胞命运决定的蛋白时空解码不足等瓶颈，围绕组织微环境稳态与失衡、细胞内亚细胞器及蛋白间互作与功能障碍等关键问题，建立新型化学标记技术，结合人工智能新算法，绘制亚细胞器精度蛋白分子互作动态图谱等，阐明生殖障碍病理微环境多模态重塑机制，形成具有自主知识产权的化学标记技术及生殖障碍评估的检测体系，发现临床生殖障碍疾病诊疗新靶点，实现原创技术突破，为人类生殖健康提供理论依据及前沿技术支撑。

## 四、化学+

## 1. 新型光伏材料与器件研究

针对新型光伏器件应用进程中材料稳定性差和器件运行寿命短等挑战，围绕光电材料在水-氧-热-电等多场耦合下的降解机制、缺陷形成与离子迁移抑制策略、器件界面与功能层失效规律与抑制机理、新型高效光伏材料的大面积制备方法等开展交叉研究，实现新型光伏电池大面积制备和工作稳定性的协同提升，为新型光伏器件的应用推广奠定理论基础。

## 2. 面向智能感知系统的新型功能材料与器件研究

针对目前智能感知技术研究中理论研究系统性不足、材料性能提升不足、器件性能缺乏独特性等问题，围绕感知新原理和新机制、新型功能材料、高性能多功能感知器件与系统等开展交叉研究，旨在突破当前器件性能等技术瓶颈，开拓新的应用领域，推动新型智能感知器件的理论创新和应用推广。

## 3. 新型高效能源催化与环境催化材料研究

针对能源催化与环境催化的关键科学问题和重大需求，围绕新型纳米、原子尺度催化剂的创制，在化石能源催化、新能源催化、碳循环等领域开展交叉研究，实现高效催化剂的结构及功能创新，促进高附加值精细化学品、清洁燃料等生产工艺的绿色低碳转型升级，产出具有国际领先水平的原创性研究成果和关键技术。

## 4. 第三代半导体材料与器件研究

GaN、SiC、ZnO 等第三代半导体材料及器件是信息、能

源、国防等领域的关键。针对第三代半导体技术的理论体系不完备、材料性能遇到瓶颈和合成工艺不够优化等关键科学问题，研究多物理场协同作用新机制，开发新材料、新结构的制备工艺新路径，研发高性能、新功能的第三代半导体光电器件和智能感知系统，旨在突破当前合成工艺瓶颈，开拓全新的应用领域。

### 5. AI 驱动的高分子材料创制

针对极端环境高分子材料在耐高温、抗氧化、耐辐照等性能极限难以突破的难题，运用 AI 技术驱动，围绕数据结构标准化、结构-工艺-性能关系的智能预测、制备流程的标准化与自动化等，开展特种高分子材料智能创制，实现多变量耦合的跨尺度结构设计，发展新型合成路线和新型结构的高分子聚合物等，实现耐高温、抗氧化、耐辐照等性能领先国际，推动高性能极端环境高分子材料的自主可控制备与实际应用。