附件1

2025年度广西自然科学基金

“人工智能驱动科研发展”方向项目申报指南

**1. 基于多模态预训练模型的药物分子合成产率智能预测方法研究**

以合成药物中化学反应产率预测为研究对象，针对传统量子化学计算效率低、计算模型泛化性不足等问题，通过融合分子结构、反应条件等多源数据，突破跨反应类型预测瓶颈，构建多模态化学数据的预训练框架，开发面向产率预测的轻量化微调模型，结合实验验证优化算法，为药物合成提供高精度、高效率、低成本的智能预测方法，推动广西医药研发智能化。

**2. 人工智能驱动广西特色作物重大病害致病机制解析**

聚焦甘蔗、香蕉、柑橘、芒果、林木等广西特色农林作物重大病害致病机制不清的难题，整合人工智能与多组学技术，建立病害致病因子预测大模型，构建致病基因高效挖掘与精准鉴定技术体系，挖掘关键致病基因，解析宿主关键效应因子的分子调控网络，阐明病害致病分子机理，为靶向生物制剂研发和抗病种质创制提供分子靶标与理论依据，助力广西现代农林业绿色高质量发展。

**3. 人工智能驱动农林作物智能育种方法研究**

针对农林作物育种存在周期长、效率低、品种预测精度不高等问题，开展人工智能大模型预测农林作物性状关键基因靶点，构建多模态数据融合分析框架，实现育种数据的高效整合与挖掘。开发基于强化学习的育种优化模型，研发边缘计算驱动的轻量级人工智能模型，实现农林作物表型数据的实时、高精度获取和分析，开拓智能育种研究的新范式。

**4. 蛋白质人工智能设计与优化**

针对广西高性能工业酶及其他蛋白质研究需求，聚焦人工智能在蛋白质设计中的创新应用，提升结构预测、功能优化及工程设计效率，开发人工智能驱动的蛋白质理性设计算法，基于深度学习的蛋白质折叠与稳定性预测，构建“序列—结构—功能”智能预测模型。通过实验与人工智能协同优化，设计高催化效率、高稳定性工业酶及其他蛋白质，构建“设计—表达—验证”技术体系，创制高性能工业酶及其他蛋白质，为广西生物智造产业发展提供技术支撑。

**5. 基于人工智能与多组学技术融合的多模态肿瘤/慢性病诊疗基因智能体系构建**

以广西常见肿瘤/慢性病为研究对象，开展建立本地人群临床表型—基因型多模态数据集、筛选致病基因和干预靶点等方面的基础研究，解决广西缺少肿瘤/慢性病诊疗本土基因数据库的问题，采用人工智能动态优化诊疗模型，突破传统方法假阳性率高、区域适应性不足的临床瓶颈。

**6. 基于人工智能的广西人群罕见病表型—基因型数据库建设与开发应用**

基于广西多民族优势，建立广西人群罕见病临床表型—基因型多模态数据集，利用人工智能算法对数据进行深度挖掘，高效筛选可能的致病基因及干预靶点，通过多组学方法进行验证，推动罕见病研究，形成数据建模—机制解析—临床转化的全链条科研赋能体系。

**7. 基于人工智能的污染物传输预测研究**

针对可解释的人工智能方法在大气和水体等重要生态环境领域的落地应用等问题，基于环境、气象监测等实况数据，以污染物传输物理机理与深度学习相融合的人工智能可解释方法为研究对象，开展解析和构建传输过程模拟网络研究，揭示污染物输移复杂系统的物化机理。

**8. 深度强化学习驱动下多模态地质数据融合的矿产资源预测与评价**

采用深度强化学习和数据挖掘等人工智能技术，基于地球化学、地球物理、地质矿产、遥感影像等多源信息数据，建立矿产资源预测模型，分析矿床成矿机制和规律，对成矿靶区进行成矿预测与评价，识别出可能存在矿（化）体的地质区域，提高矿床预测的准确性和可靠性。

**9. 人工智能驱动海洋工程用钢疲劳寿命评估方法与理论**

围绕海洋工程用钢腐蚀疲劳行为，融合机器学习与物理建模方法，开展海水环境下电化学反应产物对海洋工程用钢环境疲劳裂纹萌生—跨尺度扩展行为的影响规律研究，阐明微尺度材料疲劳损伤特征、位错结构演化与疲劳裂纹萌生扩展间的关联机制，建立物理驱动下的数学描述和损失函数项，提出可靠的寿命预测模型。

**10. 人工智能驱动的大型机械零部件自动堆焊与修复应用基础研究**

针对大型机械零部件服役过程中易磨损、腐蚀等缺陷以及传统修复效率低、精度差等问题，研究高精度轮廓获取与机器人堆焊路径规划算法，自动生成堆焊路径；优化焊接参数算法，开发适用大型零部件的机器人自动堆焊控制管理系统；集成堆焊轮廓获取和机器人路径规划等功能，为推动大型机械零部件制造与修复的智能化升级提供理论支撑。

**11. 北部湾海域基于视听具身的“生物友好”认知频谱网络研究**

以广西北部湾海域人工与海洋哺乳动物声学网络为研究对象，开展基于视听多模态融合的海洋生物—人工声学协同表征机制、“生物友好”约束下的动态频谱认知接入优化方法、去中心化多智能体协同博弈与资源均衡分配机理等研究，解决海洋通信频谱利用率低下、噪声污染大等关键科学问题。

**12. 人工智能赋能宇宙大尺度结构数值模拟**

以宇宙大尺度结构演化为研究对象，应用人工智能技术开展精确宇宙学应用基础研究，针对暗物质晕的空间分布及大尺度运动规律、宇宙高精度大动态范围模拟等问题开展研究，实现对宇宙结构演化的理论预言，在精度和速度上取得突破。