

附件 1

“重大需求导向的数学理论及应用”重点专项 2026 年度项目申报指南 (征求意见稿)

为深入贯彻落实“十五五”科技创新战略部署，国家重点研发计划启动实施“重大需求导向的数学理论及应用”重点专项。按照专项实施方案总体安排，现发布 2026 年度项目申报指南。

“重大需求导向的数学理论及应用”重点专项总体目标是：面向国家重大需求，聚焦重点领域发展中的关键数学问题，推动数学与相关学科及重点产业深度交叉融合，突破一批制约未来发展的重大数学理论与应用问题，形成具有自主知识产权的算法、模型与方法体系，提升数学支撑国家重大需求和科技自主创新的能力。

2026 年分重点研究方向、“揭榜挂帅”项目和青年科学家项目三类指南，拟支持 58 个项目，国拨经费总概算 3.5 亿元。

一、重点研究方向

2026 年度围绕“机理驱动的算法研究”“数据驱动的算法研究”“机理与数据的融合计算”“应用数学关键共性方法的底层数学基础”4 个重点研究方向进行部署（任务 1-4），拟支

持 25 个项目，国拨经费总概算 2.21 亿元。

项目统一按指南二级标题（如 1.1）的指南方向申报。同一指南方向下，原则上只支持 1 项，仅在申报项目评审结果相近、技术路线明显不同时，可同时支持 2 项，并建立动态调整机制，根据中期评估结果，再择优继续支持。

申报单位根据指南支持方向，面向解决重大科学问题和突破关键技术进行设计。特别应将数学理论和方法研究作为重点，带动解决重大需求中的应用问题。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部研究内容。项目执行期一般为 5 年。一般项目下设课题数原则上不超过 4 个，每个项目所包含单位数不超过 5 家。申请“任务 4. 应用数学关键共性方法的底层数学基础”的项目课题数原则上不超过 3 个，参与单位数不超过 3 家。项目设 1 名负责人，每个课题设 1 名负责人。

任务 1. 机理驱动的算法研究

1.1 面向集成电路光学量检测的数学建模与高效算法

研究内容：面向集成电路复杂微纳结构光学量检测需求，重点聚焦以纳米级关键尺寸和复杂三维形貌参数为核心对象的光学量检测问题，从数学原理出发，发展光场模式本征值问题以及 quad-curl 耦合系统的大规模计算理论与高效并行求解方法；研究融合物理约束、正则化与优化方法的逆向反演理论和算法，提升关键尺寸、三维形貌及多参数联合反演的稳定性、精度和抗噪能力；构建覆盖光源、光路、微纳结构

及探测系统的全链路仿真架构，研制光学量检测并行加速算法与仿真软件；创建符合实际工艺条件的集成电路测试结构与多维度验证体系，开展实际量检测环境下量检测精度、计算效率和运行鲁棒性的综合评估与验证。

考核指标：建立集成电路微纳结构光学量检测中光场模式本征值问题以及 quad-curl 耦合系统的数学模型，研制面向千万级自由度稀疏矩阵的并行本征值求解器，特征值问题求解规模达到千万级自由度；形成适用于复杂微纳结构光学量检测的逆向反演算法，在仿真闭环条件下，反演参数相对于模型设定值的相对误差不超过 1%，并具备反演偏差智能诊断与溯源能力；研制光学量检测并行加速算法与仿真软件，典型微纳结构关键光学响应仿真结果与国际主流商业软件（如 Lumerical）计算结果的相对偏差不超过 1%，在相同问题规模和计算精度下，实际量检测环境中计算速度提升 5 倍以上，连续稳定处理任务时长 ≥ 24 h；在 3 类典型实测应用工况下完成算法计算效率与运行鲁棒性的综合评估与验证，关键尺寸测量结果与设计标称值的线性相关系数 R 不低于 0.95。

关键词：集成电路光学量检测，光场模式本征值问题，quad-curl 耦合系统，逆问题反演，光场仿真软件。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，社会资金 300 万元。

1.2 极地水下声场逆散射数学建模与动态网络数学规划

研究内容：面向极地海底资源勘探及水下安全防御等需求，围绕极地水下信息反演中的微分方程反问题，研究在极地复杂环境下，声波在水下跨介质边界的传播规律，建立逆散射数学模型，研究正则化反演方法，解决极地环境信息重构的“多解性”等不适定问题；在水下节点间高保真传输的技术保障下，针对极地冰下时变洋流中布置的极地水下通信节点，建立能量与位置双重约束下的数学规划模型，研究高效率求解算法，给出动态漂移水下通信网络生存期极大化的鲁棒演化路径；研发极地水下信息处理与组网仿真软件，开展软件应用及实海验证。

考核指标：给出极地“冰-水-气”跨介质复杂边界条件与波场耦合机理的数学刻画；反演算法对极地冰层厚度的绝对重构误差不超过冰层厚度 $\times 10\% \pm 0.1\text{m}$ ，对冰下特征声速剖面的相对误差控制在2%以内，对目标信号的相对恢复误差控制在15%以内；在洋流导致高频漂移的环境下，动静态优化组网支持节点数 ≥ 20 ，单步迭代收敛时间需小于1s，网络连通率较基于静态拓扑假设的经典网络规划方法提高10%；极地水下信息处理与组网仿真软件需在不少于1批次极地或高寒海域实测数据集中完成验证。

关键词：微分方程反问题，计算数学，数学规划，极地水下信息感知，水下声波反演。

经费说明：国拨经费概算约1300万元，单位自筹资金200

万元，社会资金 100 万元。

1.3 面向深空探测的类地行星空间环境模拟数学理论与计算

研究内容：面向深空探测中火星、金星等类地行星空间环境，研究电离层-磁层耦合模拟理论与计算方法。建立包含电离层光化学过程的多离子反应-输运-电磁耦合模型，发展高阶保结构算法，研究稳定性、误差估计、正性保持、磁场无散约束和球坐标退化网格处理方法。自洽求解多离子成分方程组与电子热力学状态方程，发展强刚性光化学源项的高效数值推进和保平衡态技术。模拟太阳风与类地行星电离层-磁层的相互作用，重点刻画电离层不均匀体、电离层极化电场、磁层边界不稳定性物理过程。开展类地行星电离层-磁层建模、高精度保结构格式研究，为深空探测提供数学模型和计算工具。

考核指标：开发类地行星电离层-磁层高精度数值模拟程序 1 套，支持太阳风质子、电子热力学闭合及金星、火星中 3 种电离层离子的自洽求解。建立高阶保结构算法，给出典型模型问题的稳定性分析和误差估计，在标准算例中达到 3 阶及以上精度，保持密度/压力正性和机器精度的磁场无散控制。针对强刚性光化学源项，发展保平衡态并实现对流时间步长稳定推进的数值算法；在典型类地行星电离层光化学反应测试中，主要离子组分密度相对于收敛参考解的误差 $\leq 5\%$ ；在

相同误差水平下，相比传统显式小步长推进方法，总计算耗时降低 10 倍以上。数值模型能够捕捉电离层不均匀体、电离层极化电场、边界层不稳定性的非线性演化结构。

关键词：应用数学，计算数学，保结构算法，类地行星，空间环境模拟，深空探测。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，社会资金 300 万元。

1.4 极紫外光源锡液滴靶精准生成的高精度仿真与控制

研究内容：针对极紫外（EUV）光源所需高频、小直径、长间距锡液滴靶的精准生成需求，研究液态锡射流在周期及复合扰动作用下的界面失稳、颈缩破裂、卫星液滴形成和多液滴聚并等多尺度拓扑非线性动力学问题。建立适用于极端高密度比、强毛细效应、热辐射效应和宽幅温度（覆盖室温到锡熔点宽温度范围）相关物性的流体-热-界面强耦合非线性数学模型；研究模型的自由能耗散结构、守恒性、解的适定性及界面表征方法的适用性。发展质量守恒、能量耗散结构保持和界面形貌物理真实的高阶时空离散方法，建立算法稳定性、收敛性和误差估计理论，以及计算精度与算法时间步长之间的定量关系。突破极端物性差异界面动量振荡及拓扑断裂奇异性导致的高精度计算困难；研究面向移动界面的时空自适应方法、鲁棒代数求解器和可扩展并行算法，形成具备自主知识产权的锡液滴靶生成高精度计算软件；构建以三

维精细模拟为主要手段，并与二维及降阶代理模型相协同的分层计算体系；建立面向工程应用的计算精度和计算成本综合评价体系，研究不同模型设定、时空分辨率和自适应准则对关键液滴动力学现象预测精度和代价的影响，形成适用于不同建模目标的多保真度分级建模策略。利用上述高效仿真算法揭示复合扰动对射流失稳模态选择、液滴聚并融合和间距调控的机制，并开展相关实验验证，为 EUV 光源锡液滴发生器的设计与实时精准调控提供数学理论和算法支撑。

考核指标：建立描述锡射流失稳、断裂、卫星液滴和液滴聚并的流体-热-界面相场三维耦合模型，给出模型自由能耗散律以及解的适定性结果。构造空间与时间均具备高阶（不低于 3 阶）精度且能无条件保持自由能稳定的高效保结构数值算法，算法能够稳定处理不低于 5000:1 的高密度比、强表面张力和尖锐界面演化带来的数值振荡问题。研制一套具备自主知识产权的仿真软件，需集成匹配移动边界的动网格技术、可扩展的预处理求解技术、界面拓扑变化的自适应自动捕捉算法，支持不低于 10 亿自由度的超大规模并行计算，在万核 CPU 级（或同等算力 GPU）并行规模下，大规模并行效率不低于 70%。针对直径 3 至 10 微米的液态锡射流开展高保真仿真与实验验证，在射流初始分裂频率 1 MHz – 5 MHz 最终靶液滴频率 50 kHz 的工况下，仿真获得射流夹断位置、主液滴直径、速度等关键参数；仿真对应的真实物理过程不短

于 100 毫秒，实现不少于 30 个子液滴融合生成主液滴，主液滴直径标准差 $< 2\%$ ；仿真结果与实验数据偏差 $< 10\%$ 。

关键词：计算数学，锡液滴靶，界面拓扑动力学，保结构数值算法，高性能并行计算。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 200 万元，社会资金 100 万元。

任务 2. 数据驱动算法研究

2.1 面向卵巢癌精准诊疗的大规模网络统计学习与推断

研究内容：针对卵巢癌病变过程具有空间局部化、多状态混合及高度异质性等特征，利用卵巢癌不同演进阶段的单细胞与空间多组学数据，构建由疾病阶段和空间位置共同索引的多层网络模型，研究大规模细胞或空间点网络中的弱信号识别与疾病相关子网络的筛选策略，由此建立早期病变特异性细胞群体及分子关联模式，并形成患者级风险表征。针对不同分子特征网络的层内维度高、层间差异弱、网络对象难以直接比较等问题，提出具有弱层间关联结构的高维网络无监督聚类方法，识别具有稳定网络模式的分子模块，突破卵巢癌高度异质性导致传统分型稳定性和临床可迁移性不足的瓶颈，完善卵巢癌分子分型体系。建立多层高维网络弱信号检测统计量的收敛性，给出收敛速度与网络稀疏度和信噪比的关系。进一步融合结构化临床检测指标、非结构化临床文本和组学分子特征，研究异构数据统一表示、跨模态对齐、

以及数据融合和模型平均预测方法，建立网络模态和文本模态对齐的统计准则和不确定性刻画，解决弱配对、模态缺失和观测信息不完整条件下的患者疾病状态表征和风险预测的统计推断问题，支撑可信的精准诊疗。整体形成贯通早期风险识别、分子分型、精准诊疗的统计方法体系，推动卵巢癌诊疗模式由经验驱动向可信、可验证数据驱动转变，为我国重大疾病早筛、风险分层和精准诊疗提供具有自主知识产权的统计核心算法和评价体系。

考核指标：建立融合时空坐标、基因/蛋白质两类节点的度异质性修正多层二部网络概率模型，以及基于谱方法低秩分解的统计推断基础框架；建立二部稀疏网络下环与模体计数的高阶矩展开技术与统计分布，解决弱信号下极大似然方法的不可辨识性；提出融合空间平滑的特异性子网络识别框架、无监督聚类方法以及最小最大风险意义下的最优类别数估计准则，并建立统计推断理论。与不考虑时空索引和二部结构的经典谱方法相比，特殊子图识别的统计功效相对提升 1 个数量级以上，网络聚类和社区发现的准确率相对提升 20% 以上。在独立验证或多中心的千例级卵巢癌基准队列上（覆盖 NCI-GDC、NCI-PDC 和 NCBI-GEO 平台），跨模态对齐与融合模型的相对预测误差较最优单模态基线下降不低于 20%；早诊以 CA125 在 95% 特异度下约 56% 的灵敏度为基线，相对提升 10% 以上；分型以 PrOTYPE 独立验证中的分型一致性指

标 Cohen's $\kappa/(1-\text{Cohen's } \kappa)$ 值(约 11.5)为基线, 相对提升 15% 以上, 形成卵巢癌精准诊疗统计决策模型 1 套。

关键词: 卵巢癌精准诊疗, 时空多组学数据, 多层网络模型, 弱信号识别, 子网络选择。

经费说明: 国拨经费概算约 1300 万元, 单位自筹资金 200 万元, 社会资金 100 万元。

2.2 国产 AI 芯片静默数据损坏不确定性理论与误差抑制统计方法

研究内容: 围绕国产 AI 芯片静默数据损坏 (SDC) 发生源头隐蔽、跨层演化复杂、在线检测极难的行业痛点, 研究 AI 芯片训练和推理中 SDC 传播机制与模型误差不确定性机理, 发展 AI 芯片可靠计算的误差抑制统计方法。重点阐明随机位翻转等 SDC 误差在算子层、模型层、传输层及多卡通信层的误差扩散机制, 分析其所引发的 AI 模型误差传播不确定性机理; 发展低精度或混合精度计算环境下可区分正常量化误差与 SDC 异常, 并实现受影响节点、算子或数据块定位的高置信度 SDC 统计检测方法。研究跨层多节点消除 SDC 影响的风险可控统计理论与误差抑制方法。最终形成专用算法库并嵌入国产 AI 芯片大规模计算流程, 显著增强国产 AI 芯片大模型训练与推理的 SDC 容错性, 保障其高可靠计算与稳定运行。

考核指标: 阐明 AI 芯片静默数据损坏下模型误差传播机

理，提出低精度或混合精度下区分正常数值与 SDC 异常、并支持受影响范围定位的高置信度统计检测方法，构建抑制 SDC 影响的跨层分布式误差抑制统计理论与算法；形成一套专用算法库并嵌入至少两种不同计算架构的国产 AI 芯片计算平台。在不少于三类代表性训练与推理任务及可验证数据集上进行实测验证，实现以 SDC 发生总次数为总体，SDC 检出率高于 95%；以非 SDC 运行次数为总体，SDC 误报率低于 $10^{-6}\%$ ；各项验证任务的性能指标相对于无 SDC 情况下性能指标的下降比率不超过 1%，无故障稳态运行时额外引入的计算开销增加不超过 2%。

关键词：静默数据损坏，误差传播机理分析，误差抑制统计方法，国产 AI 芯片高可靠计算。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 200 万元，社会资金 100 万元。

2.3 面向空地一体交通体系的鲁棒协同优化理论及算法

研究内容：对标“十五五”交通强国建设战略部署，面向链星成网、无人驾驶飞行、低空智联网等新兴空地一体交通场景，针对空地多域协同过程中极端环境异变、复杂地形遮蔽、反馈延迟、黑飞干扰等引发的强不确定性，以及超大规模低空机群与地面自动驾驶分布式协同中强噪声干扰、局部信息缺失导致的决策稳定性瓶颈，构建适配超大规模复杂约束与极端不确定性的鲁棒优化理论体系，建立适配复杂约束

几何特性的鲁棒分布式优化模型等标准化描述体系，攻克多物理场耦合下跨域协同优化解集刻画、误差界推导等底层数学理论，为空域分配、航迹优化、多机与地空协同作业调度等决策算法设计提供数理基础。融合随机优化、量子计算与分布式异步机制构建鲁棒优化算法框架，突破收敛速度与鲁棒性的理论制衡，实现空地协同路径规划、流量调度、资源分配和编队跟踪等场景的高效求解；针对全域运行数据敏感问题，嵌入轻量化差分隐私、安全聚合等隐私保护机制，研究隐私预算与算法精度的协同优化策略，在保障数据安全的前提下最小化算法性能损失。融合前沿人工智能技术，研发机载与卫星终端侧轻量级行业大模型架构，突破模型高效压缩、小样本增量学习技术，支撑低算力终端实时自适应决策。研发面向多机协同场景下的非独立同分布异构数据条件下的联邦学习机制，保障多终端联合训练模型精度与泛化能力。搭建面向城市物流、低空智联网的开源算法平台，统一开发规范与调用接口，支持链星成网、空地协同路径规划、任务分配与动态资源调度等核心功能。以城市立体物流配送、链星成网为典型验证场景，开展空地一体交通系统级综合验证。为空地一体交通试点城市政府平台及头部科技企业提供可复制推广的技术解决方案。

考核指标：在空地一体交通中大规模复杂约束问题上，提出不少于三类非理想约束下典型模型，并给出解集性状刻

画（稳定性、临近行为、几何结构等），结合隐凸性、误差界与约束规范条件，形成基础理论体系。研发定制化算法，在同等软硬件环境下较 Gurobi 等国际主流通用求解器效率提升 10%及以上；分布式场景包括空地协同路径规划、流量调度、资源分配、编队跟踪等场景下较 DADMM、DMPC、DiLQR、DCBS 等传统算法在参与空地设备达到千数量级时实现通信需求量减少 10%及以上（或精度提升 10%及以上）；融入隐私保护机制后，在相同隐私预算下，相比融入隐私保护机制的传统核心算法提升至少 5%的精度。实现大模型参数量压缩至通用模型的十分之一以下，终端推理内存不超过 100MB，训练大模型的联邦学习在非独立同分布数据下精度损失对比现有算法如 FedAvg 减小 10%。发布一套面向城市物流、低空智联网开源算法平台，支持链星成网、空地协同路径规划、任务分配与动态资源调度等核心功能，并完成典型场景下的业务闭环验证。

关键词：空地一体交通，复杂约束，协同优化，鲁棒分布式优化，低空智联网。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 200 万元，社会资金 100 万元。

2.4 高动态强耦合低空无人机飞行系统的组合优化与博弈理论及算法

研究内容：面向高动态强耦合低空无人机飞行系统中的

资源分配、航线规划、任务协同和冲突消解等多主体实时决策问题，研究高维时变组合优化与博弈模型、理论和数据双驱动的学习算法。构建保持物理与结构约束的可微分、多尺度时空网络表征模型。研究信息几何与随机动力学融合的统一状态表征方法，实现系统状态的高维流形嵌入，形成时变超网络，刻画异构节点与超边的高阶高频交互关系。研究和构建资源竞争、任务协同和风险共担的博弈优化理论与数据驱动的均衡决策算法。建立动态约束下竞合博弈与高维组合优化相统一的数学模型框架；研究优质均衡解的存在性、稳定性、收敛性及可计算性理论，设计超网络上的自主决策与协同演化机制，揭示组合优化与博弈均衡的内在耦合机理；提出约束解耦的模型分解和策略集生成方法，形成可扩展的实时算法并形成算法软件包。构建低空异构数据集、仿真平台和原型系统。验证模型与算法在低空物流、应急救援、城市治理和农林作业四个场景下的实时可用性和可扩展性，形成自主可控的低空智能运筹优化算法底座。

考核指标：给出高阶高频时空网络表征模型、联盟竞合博弈优化理论与数据驱动的均衡决策算法。针对强耦合变量不低于 1000 个、约束种类不少于 10 种的复杂场景（如洪涝中的应急、海岛与近海海洋牧场的低空物流），在同等软硬件环境下，相较 Gurobi、CPLEX、OR-Tools 等通用求解器或代表性学习算法，所提算法在相同计算时间下求解精度提升

10%以上，或者在相同求解精度下计算时间缩短 30%以上。构建低空异构数据集，覆盖空域结构、飞行轨迹、气象扰动、任务需求、通信状态和风险事件等关键数据类型，数据集总样本量不少于 10 万条。研发仿真平台，可支撑不少于 100 万架无人机的同时实时决策优化与安全运行。形成一套具有自主知识产权的原型系统，在低空物流、应急救援、城市低空治理、农林作业四个典型场景完成示范验证，资源利用率提升不少于 30%，在至少一个场景下可支撑不少于 100 架无人机同时作业。

关键词：学习优化算法，组合优化，博弈决策。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 200 万元，社会资金 100 万元。

任务 3. 机理与数据的融合计算

3.1 面向高效稳健通信的非线性控制和博弈的数学理论与算法

研究内容：针对通信信号传输，建立基于非线性期望、正倒向随机微分方程的前瞻随机最优控制框架，提出基站端全局最优调度算法；研究非线性期望框架下控制与平均场博弈的数学理论及其高效算法。面向含公共噪声、退化扩散及非马氏结构的大规模通信网络干扰博弈与功率控制问题，构建倒向随机偏微分方程（BSPDE）的正则性理论；发展在无线信道快衰落、突发噪声以及非完全信道状态信息下的高效

数值求解方法。建立基于模型预测控制的随机分布参数系统鲁棒控制理论与算法；构建平均场随机分布参数博弈理论。针对非高斯信道、非平稳网络等复杂通信随机环境下的控制问题，发展面向分数阶偏微分方程与非线性 BSPDE 的深度求解理论，重点攻克突发流量管理、大规模网络节点拥塞缓冲中的非马尔可夫控制与博弈计算难点。

考核指标：提出基站端全局最优调度算法，相较于比例公平算法效果提升 20% 以上。提出适用于一般非线性 BSPDE 的分裂格式与间断有限元高阶算法至少 2 套，在典型通信信道动态风险度量及抗干扰对冲模型上实现高精度求解。提出物理信息嵌入的深度强化学习架构，在稀疏执行器（ ≤ 5 个）与有限通信频率（ $\leq 50\text{Hz}$ ）下实现稳定控制，其中均方误差收敛速率较纯数据驱动方法提升 50% 以上。建立无穷维多主体非合作博弈均衡求解框架，开发基于算子分裂与深度算子学习的数值算法，有效求解 100 个以上通信节点大规模分布式网络拓扑博弈问题。

关键词：非线性期望，平均场博弈，随机分布参数，强化学习，通信信道。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 300 万元。

3.2 数据与机理双驱动的极端环境生态系统数学建模、先进算法与数字推演

研究内容：围绕典型极端环境与地外长期生存保障中的生态系统构建重大需求，针对寒、旱及寒旱交错等极端环境生态系统中关键物种种群动态演变规律、生物地理环境波动关键特征、复杂生态系统运行机理不清、系统性原位数据与推演算法缺失，以及地外极端环境生态系统构建缺乏可预测的数学模型、数字推演工具和理论体系等瓶颈问题，开展数据与机理双驱动的极端环境生态系统数学建模、先进数值计算方法与数字推演研究。建立寒、旱与寒旱交错典型极端环境下生态系统原位观测与控制实验综合数据集体系；融合原位观测、控制实验数据和寒旱交替波动条件下的生物个体、种群响应过程与机理，建立数据与机理双驱动相结合的极端环境生态系统动力学数学模型；研究关键物种性状响应、种群动态、群落结构变化、资源循环与生态系统功能之间的耦合机理，构建覆盖生物个体-种群-群落-生态系统功能的数学模型；发展融合早期地球与现代地球生态系统跨多尺度演化规律的先进计算方法，研究从低维到高维非线性、多环境因子胁迫、快速演化和临界转变条件下的高效模拟、参数反演估计、稳定性判别和配置方案的优化比较算法；开发极端环境生态系统数字推演软件平台，实现构建不同环境胁迫、机理约束条件下生态系统演化状态及趋势的实时可视化、稳定性预测评估，并提出优化改进建议，为极端环境生态系统构建方案设计、关键物种性状筛选、环境参数适应性调控和生

态系统稳定性识别提供理论与技术支撑。

考核指标：建立极端寒旱环境下寒、旱及寒旱交错典型生态系统中种群、群落动态变化与环境理化参数标准数据集 ≥ 3 套（含对照数据集），数据时间分辨率 ≤ 30 min，时间连续跨度覆盖 ≥ 2 自然生命周期；针对典型极端环境生态系统，构建数据与机理双驱动融合的极端环境生态系统数学模型 ≥ 3 套；提出融合早期地球与现代地球生态系统跨尺度演化规律的先进计算方法 1 套，模拟时间效率 ≥ 1 年/1 min，胁迫环境因子 ≥ 3 个；开发极端环境生态系统数字推演软件 1 套，实现极端环境多情景下生态系统演化状态及演化趋势的实时可视化，集成 2 套以上极端环境生态系统的理论模型方案，并支持原始观测数据与模型模拟结果同步对比与统计学分析。

关键词：应用数学，计算数学，极端环境生态系统，数据-机理融合数学建模，先进计算，数字推演。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，单位自筹资金 100 万元，社会资金 200 万元。

3.3 急性心血管事件临界预警的数学理论及动态网络标志物应用

研究内容：依托高通量、多模态心血管数据，针对急性心血管事件发生前心血管系统由相对稳定状态向急性事件状态跃迁的复杂血流及心电动态过程，开展应用数学、数据科学和生物医学交叉研究。重点解析心血管系统在发病前的动

力学特征 (Hallmarks), 构建急性心血管事件临界状态的低维流形表征。研究基于延迟嵌入的时空信息转换框架, 攻克目前急性心血管事件发病前仅有短时序、小样本数据的预警难题。研究识别心血管系统失稳的动态网络标志物, 突破急性心血管事件临界态难识别、难量化的瓶颈。发展适用于真实临床场景的轻量化临界智能预警模型, 开展人群队列验证, 建立急性心血管事件“临界状态表征-时空信息转换-动力学因果推断-动态网络标志物预警-临床验证”的全链条方法体系, 服务于个体化急性心血管事件预警的临床辅助决策。

考核指标: 形成急性心血管事件临界状态 Hallmarks 数学表征理论 1 套, 建立覆盖临界慢化、分岔失稳、网络熵升高和系统韧性下降的动态网络标志物定量指标体系; 提出不少于 2 类符合延迟嵌入理论的时空信息转换方法和跨尺度动力学因果推断方法; 构建急性心血管事件动态网络标志物和相对应的轻量化临界智能预警模型各 1 套, 模型应具备临界事件预警、关键变量筛选与解释的能力, 在高维时间序列预测与临界预警方面性能不低于现有主流时间序列预测大模型 (如 Time-MoE、Time-LLM 等), 且参数量减少 50% 以上; 建立急性心血管事件人群多源动态数据库 1 套 (人群队列数 ≥ 5 万), 数据应包括事件发生前 0.5 - 24 小时或以上时间窗的连续心电等短时序动态信息, 以及长程随访基线信息等; 形成一套实时监测的智能化预警系统, 在不少于 2 家医疗机

构或真实应用场景开展前瞻性验证和多中心临床研究；相较于已有的临界预警方法（如 CSD、stPCA）临界状态识别性能提升 10%以上。

关键词：数学生命科学，急性心血管事件，临界预警，时空信息转换，动态网络标志物。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，社会资金 300 万元。

3.4 新一代抗量子攻击的置换类密码算法分析

研究内容：针对抗量子密码普遍采用的基于置换大状态设计，发展不依赖马尔可夫假设的精确密码学性质分析理论。建立基于置换的哈希函数与认证加密的“几何方法”理论，统一刻画差分、飞去来器、线性、差分-线性等攻击在固定输入下对密钥与数据的依赖关系，精确刻画模加、大型 Chi 函数等复杂非线性部件性质；研究固定密钥下分组密码的几何分析理论，刻画弱密钥代数结构并纳入密钥扩展算法；建立基于输入/密钥概率分布的弱输入/弱密钥结构统一搜索模型，形成自动化分析工具，实现弱结构自动发现；面向新一代抗量子标准征集候选算法，系统开展弱输入/弱密钥安全性分析，评估其抵抗差分、飞去来器、线性、差分-线性等攻击的能力，为算法设计与标准化提供理论依据与技术支撑。

考核指标：建立哈希函数、认证加密和分组密码统一精细分析理论与广义 Mealy 机的密码学性质精确传播理论；构

建哈希函数、认证加密和分组密码弱输入/弱密钥结构探测模型与广义 Mealy 机的密码学性质精确刻画模型；完成不少于 3 个标准哈希函数、认证加密与分组密码算法的精细安全评估，针对不少于 3 个采用 ARX 或复杂结构的标准算法给出当前最优弱密钥区分攻击；提供分析工具 1 套，入选国家新一代密码算法标准征集工程核心分析工具。

关键词：对称密码分析，抗量子密码，基于置换的密码，几何方法，广义 Mealy 机。

经费说明：国拨经费概算约 1300 万元，社会资金 300 万元。

任务 4. 应用数学关键共性方法的底层数学基础

为支撑我国航空航天、高超声速装备等重大战略领域发展，构建自主可控的多尺度流动数学理论与工程应用支撑体系，亟须突破湍流、介观多尺度流动及非平衡涨落建模等瓶颈。2026 年度设立重点项目群，聚焦流体动力学方程奇性形成、Boltzmann 方程渐近行为、调和分析、概率论与随机分析、动力系统核心科学问题，旨在通过（随机）偏微分方程、调和分析、随机分析与动力系统的深度交叉研究，建立宏观流体动力学方程奇性形成、介观 Boltzmann 方程多尺度渐近极限与长时间渐近行为、流形上的傅里叶限制性问题、马氏过程极限定理与算子半群的正则性、一阶切触 Hamilton-Jacobi 方程与平均场博弈系统的动力学等数学理论，

为高雷诺数湍流模拟、介观多尺度流动建模等关键场景提供基础科学支撑。项目群下设 5 个相互关联的研究方向，鼓励申请团队围绕总体目标提出系统性研究方案。

4.1 流体动力学方程的奇性形成

研究 Navier-Stokes 方程、Euler 方程及相关流体动力学方程的奇性形成，主要研究内容包括：聚焦 Boussinesq 方程、Quasi-Geostrophic 方程等低维不可压缩模型，探究其奇性形成的内在机制以及 Navier-Stokes 方程奇性解；基于可压缩 Euler 方程的内爆解形成机制，研究可压缩 Navier-Stokes 方程等相关物理方程的有限时间奇性形成等问题。

关键词：Navier-Stokes 方程，Euler 方程，奇性形成机制。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.2 Boltzmann 方程的多尺度渐近极限和长时间渐近行为

聚焦 Boltzmann 方程的多尺度渐近极限和长时间渐近行为，主要研究内容包括：Boltzmann 方程收敛到 Euler 方程和 Navier-Stokes 方程的多尺度渐近极限；Boltzmann 方程及相关动理学方程的扩散极限等渐近行为；Boltzmann 方程及其耦合模型的谱结构、解的长时间渐近行为及时空逐点估计；Boltzmann 方程及相关动理学方程的 Landau 阻尼现象。

关键词：Boltzmann 方程，多尺度渐近极限，长时间渐近行为，谱结构，Landau 阻尼现象。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.3 流形上的傅里叶限制性问题及相关

围绕调和分析中的傅里叶限制性猜想、**Takeya** 猜想等核心问题开展研究。研究内容包括：流形上的振荡积分以及相关的振荡积分估计所决定的三维黎曼流形的分类、各类黎曼流形上的 **Takeya** 集的维数估计；弯曲 **Takeya** 问题及其诱导的路径几何、不同路径几何上 **Takeya** 集的维数刻画；带位势的薛定谔方程的点态收敛、由 **Newton** 方程产生的经典轨道族的压缩现象及其在弯曲 **Takeya** 问题下的表述。

关键词：振荡积分，弯曲 **Takeya** 集，黎曼流形的分类，路径几何，薛定谔方程。

经费说明：国拨经费概算约为 500 万元。

4.4 非线性随机系统的渐近行为

基于随机分析与极限理论，系统研究非线性随机系统的渐近行为理论及其应用。研究内容包括：奇异 **McKean-Vlasov** 随机方程及平均场交互粒子系统的适定性、泛函不等式、遍历性、长时间行为与定量混沌传播规律，自交互系统经验分布渐近性质及其在高效算法中的应用；含跳跃噪声、公共噪声及惯性效应的非线性随机系统的小质量极限、大偏差与中偏差原理，以及相应平均场博弈与随机偏微分方程的渐近行为。

关键词：非线性随机系统，**McKean-Vlasov** 方程，平均

场交互粒子系统，渐近行为，平均场博弈。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.5 一阶切触 Hamilton-Jacobi 方程与平均场博弈系统的动力学

围绕一阶切触 Hamilton-Jacobi 方程与一阶平均场博弈系统，系统研究其动力学问题。研究内容包括：切触 Hamilton-Jacobi 方程的周期解、概周期解及具有更一般回复性行为的解的产生机制，周期集合和极限集的结构，稳态解的稳定性、渐近稳定性与不稳定性判据，以及切触 Lax-Oleinik 半流产生混沌的条件；具有变分结构的一阶平均场博弈系统的周期解、异宿解，有限时域解趋向遍历均衡的条件、收敛速率对初始分布的依赖，以及低正则性框架下选择性问题的—般性理论。

关键词：切触 Hamilton-Jacobi 方程，平均场博弈系统，动力学复杂性。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

为攻克复几何与低维拓扑中的重大前沿难题，构建面向国家重大需求的现代几何与拓扑理论新格局，亟须突破非代数极小模型纲领、低维流形不变量与辛几何分类、特征簇随机动力学等理论瓶颈。2026 年度设立重点项目群，聚焦非代数极小模型纲领与（对数）多亏格形变不变性、低维流形数值不变量与辛几何/拓扑量子场论分类、低维流形特征簇上随

机群作用及动力学等核心科学问题，旨在通过多学科分支的交叉研究，建立融通双有理几何、辛拓扑与几何动力系统的统一理论，为攻克国际数学前沿重大猜想、推动几何拓扑与动力系统深度互动提供基础科学支撑。项目群下设 3 个相互关联的研究方向，鼓励申请团队围绕总体目标提出系统性研究方案。

4.6 极小模型纲领及其在形变理论中的应用

研究非代数设定下的极小模型纲领，克服缺乏丰沛除子的困难，建立锥定理、收缩映射定理及极小模型的存在性与终止性。探索不依赖于丰沛除子的新延拓技术，结合极小模型纲领与广义 Bergman 度量，证明 Kähler 族和 Moishezon 族中（对数）多亏格的形变不变性。研究 Moishezon 簇与 Kähler 簇的形变极限问题，进一步拓展非代数设定下极小模型纲领在形变中的应用。

关键词：多亏格形变不变性猜想，Moishezon 簇，Kähler 簇，极小模型纲领，形变极限问题。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.7 低维流形的不变量问题

研究纽结的数值不变量以准确刻画纽结的空间复杂度，主要探究纽结数值不变量在纽结连通和运算下的可加性，特别是纽结交叉点数猜想等重要问题。研究丛簇结构等新结构和勒让德纽结手术公式等函子性质，解决切触结构及勒让德

子流形的分类等问题。研究各种辛几何对象在配边意义下的分类问题。利用拓扑量子场论（规范场论、量子不变量理论等），研究纽结的几何与拓扑性质，以及四维流形上不同光滑结构的存在性问题。

关键词：纽结交叉点数，辛场论，规范场论，量子不变量。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.8 低维流形特征簇上的随机群作用及动力学

围绕低维流形特征簇上自然群作用的轨道分布与无穷远退化现象，研究曲面映射类群、低维流形基本群的外自同构群及相关离散群在特征簇上的随机动力学。研究内容包括：平稳测度和极小集的动力学及拓扑特征刻画，轨道闭包分类、遍历性、谱间隙与有效等分布理论、Lyapunov 指数、熵、维数与轨道增长之间的内在关系；研究平稳测度及不变集的 Hausdorff 维数；随机轨道在特征簇紧化中的极限行为；退化表示、实树作用和可测叶状结构等边界对象与动力学不变量之间的联系。

关键词：特征簇，映射类群，随机游走，平稳测度，有效等分布，边界动力学，维数理论。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

为国家安全，构建相关关键领域的安全性分析和方案构造的理论框架，亟需突破代数、数论以及组合相关基础理论。

2026 年度设立重点项目群，聚焦以 p 进 Hodge 理论（包括 Bhatt-Hansen 猜想等）、 p 进伽罗瓦表示（包括 Fontaine-Mazur 猜想等）、素数分布（Schinzel 假设、Sarnak 猜想、Dirichlet 多项式的 Harper 猜想）、以 Yang-Baxter 方程为核心的代数结构及其量子化以及图论与组合中的代数方法等核心科学问题，旨在通过多学科交叉研究，发展 p 进 Hodge、 p 进伽罗瓦表示、（随机）可乘函数、代数化数学物理以及离散数学代数方法等理论，为密码学、数字安全、通信系统等国家安全关键领域提供基础数学理论支撑。项目群下设 5 个相互关联的研究方向，鼓励申请团队围绕总体目标提出系统性研究方案。

4.9 p 进算术几何

研究 p 进几何中的上同调、局部系与系数理论，发展 p 进 Hodge 理论、平展系数理论及其与代数拓扑的联系。围绕 Bhatt-Hansen 猜想，研究刚性解析簇之间代数紧映射的分解定理、紧刚性解析空间 p 进相交上同调的 de Rham 性质，完善 p 进平展上同调的系数理论框架；建立一般 $\mathbb{Q}_p$ 局部系的 p 进 Riemann-Hilbert 对应，刻画 $\mathbb{Q}_p$ 局部系与 Galois 等变收敛可积联络之间的关系，并研究 de Rham $\mathbb{Q}_p$ 局部系的单值化、延拓与纯性问题；进一步关注高秩点邻域中的单值与纯性现象，探索其与有理 F-规范理论的联系；研究拓扑 Hochschild 同调、拓扑循环同调、 $B_d\mathbb{R}^+$ 上同调与棱镜上同调之间的结构关系，通过具体几何例子比较不同 p 进上同调理论中的病态

现象及其代数拓扑来源，为 p 进几何中的系数理论和有理 p 进 Hodge 理论提供新的基础工具。

关键词：Bhatt-Hansen 猜想， p 进 Riemann-Hilbert 对应， Q_p 局部系的单值化猜想。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.10 p 进伽罗瓦表示的若干前沿问题

围绕 p 进伽罗瓦表示的几何来源及其与自守形式的关系，研究 Fontaine-Mazur 猜想、 p 进朗兰兹对应和局部整体相容性问题；利用 Fargues-Fontaine 曲线、Emerton-Gee 叠等工具研究伽罗瓦表示的形变、局部解析表示及 p 进朗兰兹对应的范畴化；研究仿射 Deligne-Lusztig 簇、Rapoport-Zink 空间和志村簇的几何与上同调，结合 perfectoid 空间理论和 p 进表示论工具探讨其在朗兰兹对应等数论问题中的应用。

关键词：伽罗瓦表示， p 进朗兰兹对应，Fontaine-Mazur 猜想，志村簇。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.11 素数分布、可乘函数与自守 L 函数

研究大模算术级数中及小区间上的素数分布、多项式表素数的 Schinzel 假设、Sarnak 猜想等；发展可乘函数及随机可乘函数的一般性理论；研究 Dirichlet 多项式的 Harper 猜想，探究随机可乘函数在高秩群上的模拟；研究高秩群上自守表示并建立谱互反律，在稀疏族上研究高秩群 L 函数均值及亚

凸界；发展代数迹函数的解析理论。

关键词：素数，可乘函数，自守表示，L 函数，代数迹函数。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.12 数学物理中的代数结构

围绕与 Yang-Baxter 方程关联的代数结构及其应用展开研究，发展代数化数学物理方法。研究内容包括：无穷维李代数的仿射化构造方法及其表示理论；超 Poisson 结构与 Lax 代数的代数几何性质；新型形变量子化与类 Poisson 代数量子化；李超代数及其量子化的表示、典范基、整体基，量子超群的范畴化与 Gaiotto 猜想；Rota-Baxter 代数等代数—算子对的诱导结构、双代数、量子化及其在可积系统和量子场论的应用；Novikov 代数等代数结构的形变理论、上同调与同伦理论及其在正则性结构和几何数值积分中的应用。

关键词：Yang-Baxter 方程，李代数，量子化，量子群。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

4.13 图论与组合中的代数方法

发展和完善图论与组合中的代数方法，探索多项式方法、谱方法、代数构造法和代数拓扑方法等在图论与组合前沿核心问题的应用。研究组合零点定理、洛伦兹多项式、对称函数理论等多项式方法的理论与工具，包括矩阵积和式秩、组合序列单峰性问题以及 Schubert 演算正性问题等，并发展其

在图染色、加性组合、离散概率等方向的应用；结合谱方法与代数构造，研究 Ramsey 类、Turán 类等极值图论核心问题；研究由图构建复形的拓扑不变量、同调群与图的结构、染色数等参量的关系。

关键词：代数方法，组合零点定理，极值图论，图染色。

经费说明：国拨经费概算约 500 万元。

二、“揭榜挂帅”项目

为深入贯彻落实党的二十大和二十届历次全会精神，依据“十五五”规划，加强创新资源统筹和力量组织，推动科技创新和产业创新融合发展，“重大需求导向的数学理论及应用”重点专项聚焦国家高质量发展急需、应用导向鲜明、最终用户明确的重大攻关需求，凝练形成 2026 年度“揭榜挂帅”榜单（任务 5），力争在解决制约技术发展的数学问题方面实现突破。

项目统一按指南二级标题（如 5.1）的指南方向申报。项目应整体申报，须覆盖相应指南方向的全部研究内容。每个榜单任务拟支持项目数为 1 项。项目下设课题数不超过 5（不含用户单位）个，每个项目参与单位总数不超过 6 家（不含用户单位）。项目设 1 名负责人，每个课题设 1 名负责人。项目牵头申报单位应为高校或科研院所。项目牵头申报和参与单位无注册时间要求，项目与课题负责人无年龄、学历和职称要求。申报团队数量为 1 个时，仍按程序进行项目评审立

项。

揭榜立项后，揭榜团队须签署“军令状”，对“里程碑”考核要求、经费拨付方式、奖惩措施和成果归属等进行具体约定，并将榜单任务目标摆在突出位置，集中优势资源，全力开展限时攻关。项目与课题负责人在揭榜攻关期间，原则上不得变更依托单位。

项目实施过程中，将需求提出方的意见作为重要考量，通过实地勘察、仿真评测、应用环境检测等方式开展“里程碑”考核，并视考核情况分阶段拨付经费，实施不力的将及时叫停。

项目验收将通过现场验收、需求提出方和第三方测评等方式，在真实应用场景下开展，并充分发挥需求提出方作用。由于主观不努力等因素导致攻关失败的，将按照有关规定严肃追责，并依规纳入诚信记录。

需求提出方（即配套经费出资方），参与项目立项和实施的全过程，配套经费与国拨经费比例不低于 1:1。项目申请阶段，需求提出方不参与项目申请，获批后，可作为课题承担单位加入项目组；评审阶段，可列席评审会议并就相关问题进行质询，但不参加投票评审；实施阶段，不得使用国拨经费，配套经费的 50%及以上须外拨至项目组其他课题承担单位以及课题参与单位；结题验收阶段，应出具项目成果的应用验证报告。

任务 5. “揭榜挂帅” 榜单

5.1 大型变压器设备局部放电精确寻源的数学理论与高效求解算法研究

研究内容：研究大型变压器设备局部放电的适用数学模型，包括电磁脉冲源的数学刻画，油、纸和金属材料等形成的电磁传播边界条件等；研究复杂边界下大型变压器设备局部放电问题的高效求解方法，包括基于有限元离散和基于深度神经网络的机理与数据的融合计算方法等；发展基于多物理场探测信号的快速反演电磁脉冲源位置定位方法；建立局部放电故障定位及预警平台，在典型大型变压器设备上完成系统部署。

考核指标：开发基于大型变压器设备局部放电精确数学模型的仿真软件，形成局部放电故障定位及预警平台一套；要求千万级网格求解仿真时间不超过 60 分钟，在相同配置和精度要求下相比 COMSOL 缩短 50%以上；在多物理场信号快速反演中，仿真数据的定位误差控制在 5 厘米内；在真型试验变压器上，针对至少三处模拟局部放电测试数据，多物理场快速反演的定位误差控制在 10 厘米内。在至少三例内置特高频布点不少于 3 个的 220kV 及以上运行变压器或电抗器(其中特高压不少于一例)上完成系统部署和定位精度考核验证。

关键词：大型变压器设备局部放电数学模型，高效求解方法，电磁脉冲源位置定位方法，故障定位及预警平台。

执行年限：3 年。

经费说明：国拨经费概算 1000 万元，需求提出方匹配经费不低于 1500 万元。

5.2 直接空气碳捕集系统多物理场耦合建模、参数反演与优化决策

研究内容：针对空气碳捕集（DAC）系统运行中的传热、流动、协同优化与控制等关键问题，研究多物理场智能计算、反演与优化决策的理论与算法，构建机理与数据融合驱动的 DAC 数字孪生系统。围绕吸附床内多物理场过程，融合奇异摄动理论建立高保真数学模型与高效数值方法；针对高保真模型计算代价高、难以满足实时控制需求的瓶颈，研究融合物理机理与数据驱动的神算子代理模型及快速反演方法；针对电价波动、碳捕集量约束和电网稳定性，建立碳电协同运行的多时间尺度多目标优化与预测控制方法；发展融合物理模型、代理模型与实时数据的数字孪生理论与方法，开发面向千吨级 DAC 工程平台的智能计算与数字孪生仿真软件，支撑碳捕集系统设计优化与智能运行。

考核指标：建立 DAC 系统多物理场数学模型与高效数值方法；构建神算子代理模型，推理速度相比高保真全阶模型提升 100 倍以上，预测精度 $\geq 90\%$ ；建立多时间尺度多目标优化与预测控制的两阶段调度框架，关键操作参数控制误差 $\leq \pm 5\%$ （对标行业标杆 Climeworks Gen 3 真实工况验证基

准); 在千吨级 DAC 工程平台上完成验证, 系统运行能耗降低不低于 10%, 捕集成本降低不低于 15% (优于 Climeworks 2030 年目标 250–350 美元/tCO₂), 多时间尺度 (日前小时级调度计划与日内秒级实时) 决策时间不超过 500 毫秒, 实现“感知-决策-执行-反馈”的闭环控制。

关键词: 多物理场数值算法, 神经算子, 反问题, 碳电协同优化, DAC 数字孪生。

执行年限: 3 年。

经费说明: 国拨经费 1500 万元, 需求提出方匹配经费 1500 万元。

5.3 面向国产大飞机结构设计的超大规模屈曲特征值高效计算方法研究与软件开发

研究内容: 针对国产大飞机研制中面临的超大规模结构屈曲特征值计算瓶颈, 研究稀疏矩阵特征值问题的新型高效算法及其数学理论, 研发相应解法器软件, 为国产大飞机结构设计提供支撑。研究超大规模屈曲特征值求解的新一代算法, 包括区间内特征值数目高效估计方法、稳定正交化技术、特征值求解加速算法, 以及相应的超大规模线性代数方程组快速求解技术; 突破分布式环境下稀疏矩阵存储、运算及分解等核心技术, 构建支持千万级至十亿级自由度的屈曲特征值高效求解架构; 研发面向国产大飞机结构设计的超大规模屈曲特征值解法器软件; 在国产大飞机型号上完成工程验证

与应用示范，推动国产大飞机结构设计的自主创新能力提升。

考核指标：研发区间内特征值数目高效估计方法、稳定正交化技术及特征值求解加速算法等核心算法不少于 3 种，超大规模线性代数方程组快速求解技术不少于 3 种；研发面向国产大飞机的超大规模结构屈曲特征值解法器软件 1 款；支持单节点下百万级壳单元、万级连接关系（种类不少于 3 种）、两千万以上自由度的大飞机部段模型，完成不少于 1000 阶的屈曲特征值求解，在同等软硬件条件下，相较于 Nastran 底层解法器，计算精度偏差不超过 5%，计算效率不低于 Nastran；支持 20 节点以内的集群下亿级壳单元、十万级连接关系（种类不少于 3 种）、十亿级自由度的整机模型，完成不少于 1000 阶的屈曲特征值求解，并行效率不低于 50%，计算时间不超过一周；支持不少于 3 款国产 CAE 软件研发；在国产大飞机型号上完成工程验证与应用示范。

关键词：国产大飞机，屈曲分析，特征值解法器，国产 CAE 软件。

执行年限：3 年。

经费说明：国拨经费 1200 万元，需求提出方匹配经费 1200 万元。

5.4 核药分子生成及多尺度剂量计算研究

研究内容：面向核药分子设计，构建基于蛋白、配体界面微分几何的变分模型、数值方法以及等变图神经网络算法，

实现结合口袋预测与亲和力评估；基于结合口袋的界面几何、局部静电等特征，构建多目标性质优化的三维条件扩散生成模型，实现小分子核药和螯合剂偶联结构的生成；依托 EARL L2 国际定量标准，结合多模态与全身动态 4D PET 分子影像综合平台，构建数字类器官对候选核药体内行为的高通量筛选；设计器官体素多尺度 Monte Carlo、确定性输运求解方法与数据驱动的代理建模方法，实现从药代参数到器官与病灶吸收剂量的快速预测；联合生物医药企业开展对候选核药分子性质的验证，依托医院临床场景完成剂量计算的可行性验证。

考核指标：构建核药分子数据库，在基准测试集 HOLO4k 上，Top-5 结合位点预测成功率 $> 80\%$ ，分子亲和力预测误差 $< 1.0 \text{ kcal/mol}$ ；在基准测试集 PDBbind 上，分子平均归一化可合成性评分 > 0.70 、类药性 QED > 0.70 ，化学空间多样性指数 > 0.85 ；基于生成模型构建候选核药分子库，覆盖临床已验证有效靶点 > 50 个，累计形成 $> 50,000$ 个高潜力候选核药分子，包含分子结构、理化性质、成药性质及逆合成路线等，形成 1–2 个先导化合物；基于 EARL L2 绝对定量约束构建融合多细胞微环境的数字类器官，实现药代动力学参数预测绝对误差 $< 25\%$ ，经动物实验验证，在典型器官及病灶区域实现平均剂量误差在 10% 以内；联合 1–2 家医院开展研究，建立适配中国人群的剂量计算标准模体。

关键词：核药分子设计，剂量计算，类器官仿真模拟。

执行年限：3 年。

经费说明：国拨经费概算 500 万元，单位自筹资金 500 万元，需求提出方匹配经费 500 万元。

三、青年科学家项目

青年科学家项目（任务 6、7）支持青年科研人员针对数学重大前沿问题潜心研究，鼓励开展另辟蹊径的前沿探索。2026 年拟支持 29 项青年科学家项目，国拨经费总概算 8700 万元。

项目统一按指南二级标题（如 6.1）的指南方向申报。项目执行期一般为 5 年。青年科学家项目不再下设课题，项目参与单位总数不超过 3 家。项目设 1 名项目负责人，青年科学家项目负责人年龄要求，男性应为 1991 年 1 月 1 日以后出生，女性应为 1988 年 1 月 1 日以后出生，原则上团队其他参与人员年龄要求同上。正在承担国家自然科学基金青年科学基金项目（A 类、B 类）及同层次国家科技人才类计划项目的负责人不能作为项目负责人或参与人申请青年科学家项目。项目申报书的附件应提交承诺书，承诺项目负责人及参与人均无正在主持的上述国家科技人才类计划项目；承诺书须由相关人员签字并加盖单位公章。

任务 6. 基础数学青年科学家项目

围绕代数与数论、几何与拓扑、分析与方程、概率论、

组合与图论等领域的基础数学重大前沿问题开展研究。

6.1 分析、概率论、微分方程与动力系统

6.2 几何和拓扑

6.3 代数和数论、组合与图论

有关说明：本指南任务共支持 20 项青年科学家项目，每项国拨经费概算 300 万元，单位配套经费不少于 60 万元。

任务 7. 应用数学青年科学家项目

针对机理驱动算法研究、数据驱动算法研究、机理与数据的融合计算三个领域的前沿问题开展研究。聚焦重大需求、国家安全、生命医学、经济与控制等领域中具有挑战性的关键科学问题，发展高效高精度计算方法及相关数学理论、构建面向复杂数据环境的统计方法与优化方法、研究机理与数据融合的建模理论和方法。

7.1 机理驱动的算法研究

7.2 数据驱动的算法研究

7.3 机理与数据的融合计算

有关说明：本指南任务共支持 9 项青年科学家项目，每项国拨经费概算 300 万元，单位配套经费不少于 60 万元。