



# 国际 科学技术前沿 报告 *2018*

张志强 主编

非外借

 科学出版社



国际  
科学技术前沿  
报告2018

张志强 主编

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书从重要科技领域中选择科学与工程计算、引力波研究、虚拟现实研究、石墨烯防腐涂料、磁约束核聚变、生物成像技术、人类微生物组、作物病虫害导向性防控、地球深部金属矿产资源探测、第三极环境研究 10 个科技前沿领域或热点问题,逐一对其进行国际研究发展态势的全面系统分析,剖析其国际整体进展状况、研究动态与发展趋势、国际竞争发展态势,并提出我国开展这些科技前沿领域或热点问题研究的对策建议,为我国这些领域科技创新发展的科技布局和研究决策等提供重要的咨询依据,为有关科研机构开展这些科技前沿领域或热点问题的研究部署提供国际相关领域科技发展的重要参考背景。

本书所阐述的科技前沿领域或热点问题,选题新颖,具有前瞻性,资料数据翔实,分析全面透彻,采取了领域战略研究专家和科技战略情报研究人员的合作研究模式,研发对策建议可操作性强,适合政府科技管理部门和科研机构的科研管理人员、科技战略研究人员和相关科技领域的研究人员等阅读参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

国际科学技术前沿报告. 2018 / 张志强主编. —北京: 科学出版社, 2018.11

ISBN 978-7-03-058834-0

I. ①国… II. ①张… III. ①科技发展—研究报告—世界—2018 IV. ①N11

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 213614 号

责任编辑: 邹 聪 赵丹丹 / 责任校对: 王晓茜

责任印制: 张克忠 / 封面设计: 黄华斌

编辑部电话: 010-64035853

E-mail: houjunlin@mail.sciencep.com

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京画中画印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2018 年 11 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2018 年 11 月第一次印刷 印张: 22 插页: 8

字数: 520 000

定价: 198.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 《国际科学技术前沿报告 2018》

## 研 究 组

组 长 张志强

成 员 (按照报告作者顺序排列)

|     |     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|-----|
| 刘小平 | 吕凤先 | 魏 韧 | 郭世杰 | 董 璐 |
| 李宜展 | 李泽霞 | 王立娜 | 房俊民 | 徐 婧 |
| 田倩飞 | 唐 川 | 张 娟 | 姜 山 | 万 勇 |
| 冯瑞华 | 吴 勘 | 郭楷模 | 赵晏强 | 陈 伟 |
| 丁陈君 | 吴晓燕 | 陈 方 | 郑 颖 | 陈云伟 |
| 施慧琳 | 王 玥 | 李禎祺 | 苏 燕 | 许 丽 |
| 徐 萍 | 于建荣 | 王保成 | 李东巧 | 谢华玲 |
| 杨艳萍 | 刘 学 | 赵纪东 | 王立伟 | 刘文浩 |
| 吴秀平 | 刘燕飞 | 曲建升 | 曾静静 | 裴惠娟 |

# 前 言

中国科学院文献情报系统作为国家级科技信息与决策咨询知识服务骨干引领机构，以服务国家科技发展决策、科技研究创新、区域与产业创新发展的科技战略情报需求为己任，在全面建设支撑科技创新的系统性、综合性、权威性科技信息知识资源体系的同时，全面建立起科技发展全领域、多层次、专业化、集成化、协同化、及时性的支持科技战略研究、科技发展规划和科技发展决策、科技创新与产业化发展应用的科技战略情报研究与决策咨询知识服务体系，全面监测国际科技领域发展态势与趋势，系统分析判断科技领域前沿热点方向与突破趋向，深度关注国际重大科技规划布局和研发计划，全面分析国际科技战略与科技政策最新变革及调整动态，重点评价国际重要科技领域与科技发达国家科技发展竞争态势，建立起系统的国际科技发展态势与趋势监测分析及科技战略研究的决策咨询知识服务机制，系统性、长期性、机制化开展基础与前沿交叉、空间光电、信息、材料、能源、生物、人口健康、农业、海洋和生态环境等重要科技领域的科技发展战略、科技政策及科技发展重要重大信息等方面的科技战略情报与咨询服务。

中国科学院文献情报系统根据国家及中国科学院科技研发创新的战略布局，发挥其系统性整体化优势，按照“统筹规划、系统布局、协同服务、整体集成”的发展原则，构建“领域分工负责、长期研究积累、深度专业分析、支撑科技决策”的科技领域战略情报研究服务体系，面向国家和中国科学院科技创新的宏观科技战略决策、面向中国科学院科技创新领域和前沿方向的科技创新发展决策，开展深层次专业化战略情报研究与咨询服务：中国科学院文献情报中心负责基础科学与交叉重大前沿领域、空间光电与大科学装置及现代农业科技等领域的战略情报研究；中国科学院成都文献情报中心负责信息科技和生物科技等领域的战略情报研究；中国科学院武汉文献情报中心负责能源和材料制造等领域的战略情报研究；中国科学院兰州文献情报中心负责生态环境资源和海洋等领域的战略情报研究；中国科学院上海生命科学信息中心负责人口健康等领域的战略情报研究。基于上述统筹规划，形成了覆盖主要科技创新领域的学科领域科技战略情报研究团队体系。科技决策问题与需求导向、研究与咨询服务体系建设、科技前沿与重大问题聚焦、科技领域发展态势趋势专业化战略分析、科技战略与政策咨询研究的发展机制和措施，促进了这些学科领域科

技战略情报研究与决策咨询的专业化知识服务中心、专业化科技智库的快速建设成长和发展。

从 2006 年起, 研究组部署这些学科领域科技战略情报研究团队, 围绕各自分工关注的科技创新领域的科技发展态势, 结合国家和中国科学院科技创新的决策需求, 每年选择相应科技创新领域的重大前沿科技问题或热点科技方向, 开展国际科技发展态势的系统性战略分析研究, 汇编形成年度《国际科学技术前沿报告》, 呈交国家相关科技管理部门及中国科学院有关部门和研究所, 以供科技发展相关决策参考。从 2010 年起, 完成的各年度《国际科学技术前沿报告》公开出版发行, 供更大范围、更广泛的科研人员和科技管理人员参考。《国际科学技术前沿报告》的逻辑框架特色鲜明, 不同于现有的其他相关的类似科技前沿发展报告, 其中收录的专题领域科技发展态势分析报告, 从相应领域的科技战略与规划计划、研究前沿热点与进展、发展态势与趋势及发展启示与对策建议等方面予以系统分析, 定性与定量相结合、战略与政策相结合、启示与建议相结合。在研究模式上, 更是采取了情报分析人员与科技领域战略专家相结合的研究方式, 针对性地咨询相关领域的战略专家。多个年度的《国际科学技术前沿报告》汇集在一起, 形成了观察各相关科技领域重大科技问题与前沿方向发展的“小型百科全书”, 可以系统性、历史性地观察主要科技领域的重大发展变化情况。因此, 《国际科学技术前沿报告》的研究与编制是一项系统性、战略性、基础性和前瞻性相贯通的工作, 对相关科技领域的发展战略研究、科技前沿分析和科技发展决策等具有重要的参考咨询价值。

2017 年, 我们继续部署这些学科领域战略情报研究团队, 选择相应科技创新领域的前沿学科、热点问题或重点技术领域, 开展国际发展态势分析研究, 完成这些研究领域的分析研究报告 10 份。中国科学院文献情报中心完成《科学与工程计算国际发展态势分析》《引力波研究国际发展态势分析》和《作物病虫害导向性防控国际发展态势分析》; 中国科学院成都文献情报中心完成《虚拟现实研究国际发展态势分析》和《生物成像技术国际发展态势分析》; 中国科学院武汉文献情报中心完成《石墨烯防腐涂料国际发展态势分析》和《磁约束核聚变国际发展态势分析》; 中国科学院兰州文献情报中心完成《地球深部金属矿资源探测国际发展态势分析》和《第三极环境研究国际发展态势分析》; 中国科学院上海生命科学信息中心完成《人类微生物组国际发展态势分析》。本书将这 10 份前沿学科、热点问题或技术领域的国际发展态势分析研究报告汇编为《国际科学技术前沿报告 2018》正式出版, 以供科技创新决策部门和科研管理部门、相关领域的科研人员和科技战略研究人员参考。

面对国家深入实施创新驱动发展战略、建设创新型国家乃至世界科技强国、深化科技体制改革、建设具有全球影响力的科创中心和国家综合性科学中心、强化国家战略性

科技力量、加快中国特色新型智库建设、全面推进科技咨询服务业发展的新形势，以及大数据信息环境和知识服务环境持续快速调整变化的新挑战，围绕有效支撑和服务国家与中国科学院的科技战略研究、科技发展规划与科技战略决策的新需求，适应数字信息环境和数据密集型科研新范式的新趋势，中国科学院文献情报系统的科技战略研究与决策咨询工作，将进一步面向前沿、面向需求、面向决策，着力推动建设科技战略情报研究的新型决策咨询知识服务发展模式——高端科技智库发展模式，着力推动开展专业型、计算型、战略型、政策型和方法型“五型融合”的科技战略情报分析和科技战略决策咨询研究，实时持续监测和系统分析国际最新科技进展与态势、重要国家及国际组织关注的重要科技问题与相关科技新思想，系统开展科技热点和前沿进展、科技发展战略与规划及科技政策与科技评价等方面的研究和分析，及时把握科技发展新趋势、新方向、新变革和新突破，及时揭示国际科技政策、科技管理发展的新动态与新举措，为重大咨询研究、学科战略研究、科技领域战略研究及科技政策研究等提供战略情报分析和决策咨询服务，围绕高水平专业科技智库建设和发展的大方向，在中国科学院国家高端科技智库的建设和发展中发挥不可替代的作用。

中国科学院文献情报系统的战略情报研究服务工作，一直得到中国科学院领导和院有关部门的指导与支持，得到院属有关研究所科技战略专家的指导和帮助，以及国家有关科技部委领导和专家的大力支持与指导，得到相关科技领域的专家学者的指导和帮助，在此特别表示诚挚感谢！衷心希望我们的工作能够继续得到中国科学院和国家有关部门领导与战略研究专家的大力指导、支持和帮助。

《国际科学技术前沿报告》研究组

2018年2月28日

# 目 录

|     |                   |     |
|-----|-------------------|-----|
| 1   | 科学与工程计算国际发展态势分析   | 1   |
| 1.1 | 引言                | 1   |
| 1.2 | 战略计划和项目部署         | 3   |
| 1.3 | 文献计量分析            | 30  |
| 1.4 | 科学与工程计算重要的国际国内会议  | 36  |
| 1.5 | 科学与工程计算的国际前沿与发展趋势 | 39  |
| 1.6 | 总结与建议             | 41  |
|     | 参考文献              | 42  |
| 2   | 引力波研究国际发展态势分析     | 45  |
| 2.1 | 引言                | 45  |
| 2.2 | 主要国家引力波探测和研究项目    | 46  |
| 2.3 | 从论文看引力波研究的现状和趋势   | 54  |
| 2.4 | 引力波研究发展趋势         | 65  |
| 2.5 | 总结与建议             | 67  |
|     | 附表 1              | 68  |
|     | 参考文献              | 69  |
| 3   | 虚拟现实研究国际发展态势分析    | 71  |
| 3.1 | 引言                | 72  |
| 3.2 | 研发计划与发展策略         | 73  |
| 3.3 | 关键技术发展现状与趋势       | 82  |
| 3.4 | 虚拟现实研究文献计量分析      | 93  |
| 3.5 | 总结与建议             | 99  |
|     | 参考文献              | 100 |
| 4   | 石墨烯防腐涂料国际发展态势分析   | 103 |
| 4.1 | 引言                | 103 |
| 4.2 | 石墨烯研究应用的配套条件      | 105 |
| 4.3 | 石墨烯重防腐涂料研究进展      | 107 |
| 4.4 | 石墨烯防腐技术专利分析       | 112 |
| 4.5 | 石墨烯防腐论文计量分析       | 118 |
| 4.6 | 总结与建议             | 123 |
|     | 参考文献              | 125 |

|     |                     |     |
|-----|---------------------|-----|
| 5   | 磁约束核聚变国际发展态势分析      | 128 |
| 5.1 | 引言                  | 129 |
| 5.2 | 磁约束核聚变领域发展历程和现状     | 130 |
| 5.3 | 磁约束核聚变关键前沿技术分析      | 133 |
| 5.4 | 磁约束核聚变领域主要国家发展态势    | 138 |
| 5.5 | 各国参与 ITER 计划情况      | 150 |
| 5.6 | 研发创新能力定量分析          | 155 |
| 5.7 | 总结与建议               | 161 |
|     | 参考文献                | 162 |
| 6   | 生物成像技术国际发展态势分析      | 166 |
| 6.1 | 引言                  | 167 |
| 6.2 | 国际发展规划与举措           | 168 |
| 6.3 | 技术发展现状与趋势           | 174 |
| 6.4 | 国际设施建设现状            | 188 |
| 6.5 | 总结与建议               | 196 |
|     | 参考文献                | 198 |
| 7   | 人类微生物组国际发展态势分析      | 200 |
| 7.1 | 引言                  | 202 |
| 7.2 | 国际政策规划与举措           | 203 |
| 7.3 | 人类微生物组研究发展态势        | 213 |
| 7.4 | 产业发展态势              | 224 |
| 7.5 | 总结与建议               | 229 |
|     | 参考文献                | 230 |
| 8   | 作物病虫害导向性防控国际发展态势分析  | 233 |
| 8.1 | 引言                  | 234 |
| 8.2 | 主要国家相关战略规划与举措       | 236 |
| 8.3 | 研究论文分析              | 246 |
| 8.4 | 专利分析                | 255 |
| 8.5 | 企业研发动向              | 265 |
| 8.6 | 总结与建议               | 267 |
|     | 参考文献                | 268 |
| 9   | 地球深部金属矿资源探测国际发展态势分析 | 270 |
| 9.1 | 引言                  | 271 |
| 9.2 | 国际矿产资源勘探态势          | 272 |
| 9.3 | 深部金属矿探测典型案例         | 278 |
| 9.4 | 深部金属矿探测的科技战略与动向     | 283 |
| 9.5 | 深部金属矿探测的文献计量分析      | 294 |
| 9.6 | 地球深部金属矿资源探测的专利分析    | 300 |

|                                 |            |
|---------------------------------|------------|
| 9.7 我国深部金属矿资源探测发展现状与未来需求 .....  | 303        |
| 9.8 总结与建议 .....                 | 304        |
| 参考文献 .....                      | 305        |
| <b>10 第三极环境研究国际发展态势分析 .....</b> | <b>308</b> |
| 10.1 引言 .....                   | 309        |
| 10.2 第三极环境研究国际发展态势 .....        | 310        |
| 10.3 第三极环境研究文献计量分析 .....        | 323        |
| 10.4 第三极环境研究趋势与热点分析 .....       | 335        |
| 10.5 总结与建议 .....                | 336        |
| 参考文献 .....                      | 337        |

彩图

# 1 科学与工程计算国际发展态势分析

刘小平 吕凤先

(中国科学院文献情报中心)

**摘 要** 科学与工程计算利用高级计算能力理解和解决复杂的科学与工程问题,是计算机实现在高科技领域应用的纽带和工具。进入 21 世纪以来,高性能计算机迅速发展,已经进入千万亿次时代。2010 年,美国能源部(Department of Energy, DOE)提出了百亿亿次系统的设计方案,预计 2020 年建成百亿亿次超级计算机。千万亿次、百亿亿次科学与工程计算将显著提升各国在国家安全、航空航天、生命科学、材料科学及气候与生态环境等领域中的科技创新能力,产生重大科学理论和应用突破。2014 年,DOE 报告《百亿亿次计算的十大挑战》明确指出,百亿亿次计算将改变全球经济(葛蔚等, 2016)。为了抢占先机,欧洲各国、美国和日本等相继制定了符合自己国情的科学与工程计算路线图、战略与规划。中国的科学与工程计算在世界上占有重要位置,但还没有公布详细的路线图和发展规划。

本报告对欧盟、美国、英国、日本和中国在科学与工程计算领域的发展路线图、重大研究计划、重要研究机构、相关国际会议进行了调研和分析,同时对 2007~2016 年科学与工程计算领域的科学论文进行了定量分析。

综合定性调研和文献计量学定量分析,建议中国应该面向世界科学前沿,结合中国国情,加强整体规划,加强科学与工程计算的算法研究,加强科学与工程计算软件研制,加强面向国家重要需求的科学与工程计算应用领域研究,培养多学科交叉型人才。

**关键词** 科学与工程计算 发展态势 战略计划 研发重点与热点

## 1.1 引言

美国总统信息技术咨询委员会为计算科学提供了一个定义(PITAC, 2005),计算科学是计算数学、应用数学、统计学、计算机科学及科学与工程核心学科结合产生的交叉学科,利用高级计算能力来理解和解决复杂的科学与工程问题,致力于开发适用于所有领域的科学发现的计算方法。计算科学主要包括 3 个部分:①运算法则(数值的和非数值的)、建模和模拟软件,用以解决科学(如生物学、物理学和社会学等)、工程及人文学科中的各种问题。②计算机与信息科学,开发和优化各种系统硬件、软件、网络和数据分析技术,解决

计算中需要解决的各种问题。③计算基础设施,支持解决科学和工程问题,支持计算机与信息科学自身的发展。计算科学的外围很广,包括计算力学、计算物理学、计算材料科学、计算化学、计算生物学、计算医学,也包括系统科学、经济科学、社会科学中发展起来的计算理论。

科学与工程计算能力包括计算机硬件、应用软件及支撑软件的计算方法和算法的能力(陈志明,2012)。2005年,美国《计算科学:确保美国的竞争力》报告指出,虽然计算机处理器性能的显著提升广为人知,但是改进算法和程序库对提高计算模拟能力的贡献与对计算机硬件性能提升的贡献是一样的。以在科学与工程计算应用中的三维拉普拉斯方程计算求解为例,从20世纪50年代的高斯消元法到80年代的多重网格法,算法的改进使计算量从正比于网格数 $N$ 的 $7/3$ 次方下降至最优的计算量正比于 $N$ ,如果 $N=100$ 万,计算效率就提升1亿倍。2009年,美国世界技术评估中心对1998~2006年获超级计算戈登·贝尔奖(Gordon Bell Prize)的应用程序进行评估的结果表明,获戈登·贝尔奖的应用程序的算法(线性代数、图剖分、区域分裂、高阶离散)的进步使应用程序对计算能力提高的贡献超过摩尔定律(陈志明,2012)。

1944年,美国在核武器开发中产生的“人工黏性法”,可以用来求解可压缩无粘流动方程(一种非线性双曲型方程),成功地用于冲击波的计算,这一成果导致了计算流体力学的诞生。1948年,冯·诺伊曼(John von Neumann)等提出的蒙特·卡罗方法(Monte Carlo method),一种求解复杂系统的通用随机模拟方法,曾用于求解中子输运的玻尔兹曼方程,现在广泛用于计算力学、计算物理学、计算化学。1964年,库利(J. W. Cooley)和图基(T. W. Turker)提出的快速傅里叶变换,是解决一切涉及谐波分析领域问题的通用工具,广泛用于光、电、声学技术,天气预报,地震波分析,地球物理勘探和晶体分析等。20世纪50年代末60年代初,西欧、美国、中国独立提出和发展的有限元方法,是求解椭圆型偏微分方程的基础算法,特别适用于复杂的几何问题。有限元方法的出现导致了计算结构力学的诞生与发展。现在,有限元方法几乎用于一切工程设计行业,成为设计分析的日常工具(石钟慈和桂文庄,1990)。

2005年,美国《计算科学:确保美国的竞争力》报告多次强调,计算科学是继理论方法和实验方法之后的第三科学支柱(陈志明,2012)。现代用计算科学取得重大科学发现的事例很多。1965年,美国科学家克鲁斯卡尔(Joseph Kruskal)和扎布斯基(Norman Zabusky)用计算的科学方法在计算机上发现了“孤立子”,他们在用数值方法解典型的非线性色散波方程时,通过计算机的动画显示看到了这种具有独特性状的粒子——“孤立子”。“孤立子”的发现是计算科学在非线性分析中的一项重大成就。计算科学在决定性的混沌现象的发现中也起了很大作用。1963年,洛伦兹(Hendrik Lorentz)发现了奇异吸引子。1964年,埃农(Henon)和海尔斯(Heils)发现了守恒系统的混沌现象。1978年,费根鲍姆(Edward Albert Feigenbaum)和利比查伯(Albert J. Libchaber)发现了分岔现象与湍流模型的普适性。美国的科马克(Allan Macleod Cormack)和豪斯费尔尔德(Godfrey Newbold Hounsfield)由于对计算机X射线体层摄影(computer tomography, CT)所做的贡献而获得1979年诺贝尔生理学或医学奖,X射线扫描成像是应用radon变换原理进行数值计算。美国的威尔逊(Kenneth G. Wilson)在重正化群理论的基础上进行了实质性修改后建立的方法,解决了与

相转变有关的临界现象理论而获得 1982 年诺贝尔物理学奖。英国化学家克卢格 (Aaron Klug) 由于发展了晶体电子显微术, 并且研究了具有重要生物学意义的核酸-蛋白质复合物的结构而获得 1982 年诺贝尔化学奖。美国数学家和结晶学家豪普特曼 (Herbert A. Hauptman) 与卡尔 (Jerome Karle) 共同研究出一套数学方法, 可从化合物结晶体的 X 射线衍射图像, 推断出其分子结构, 因而获得 1985 年诺贝尔化学奖 (石钟慈和桂文庄, 1990)。

《计算科学: 确保美国的竞争力》报告指出, 21 世纪最伟大的科学突破将从计算科学中获得。高性能科学与工程计算已经成为科学技术发展和重大工程设计中革命性的研发手段。21 世纪第一个重大科学突破——2001 年宣布的人类基因组的解码, 归功于大规模的计算科学。在科学研究中, 有些现象不适合做实验, 因为太复杂、太昂贵、太危险、太庞大或太微小, 计算科学使研究人员能得到这些现象的理论模型。例如, 计算宇宙学, 通过计算获得宇宙模型, 检测关于宇宙起源的不同理论。人们无法创造宇宙的变体, 也无法观察其未来的演化, 因此, 计算科学的建模和数值模拟是进行实验的唯一可行的方法。再如, 禁止核试验后计算模拟的核爆炸完全代替了核试验。各国大飞机的研制也都依赖计算力学与计算数学完成气动与结构设计。同样, 从新药研制到精准医学, 从催化机理的分析到反应器放大与优化, 从建筑与桥梁设计到地质灾害防治, 科学与工程计算几乎在现代科技的所有领域中突破了理论和实验研究的极限, 加快了研发进程, 显著降低了费用。美国科学家卡普拉斯 (M. Karplus)、莱维特 (M. Levitt) 和瓦谢勒 (A. Warshel), 由于在开发多尺度复杂化学系统模型方面所作的贡献而获得了 2013 年诺贝尔化学奖。诺贝尔化学奖评选委员会认为, 多尺度复杂化学系统模型的出现, 翻开了化学史的新篇章, 化学反应发生的速度堪比光速, 刹那间电子就从一个原子核跳到另一个原子核, 以前, 对化学反应的每个步骤进行追踪几乎是不可能完成的任务, 而在由这 3 位科学家研发的多尺度复杂化学系统模型的辅助下, 化学家让计算机来揭示化学过程。现在, 对化学家来说, 计算机是同试管一样重要的工具, 计算机对真实生命的模拟已经为化学领域大部分研究成果的取得立下了功劳。通过数值模拟, 化学家能更快地获得比传统实验更精准的预测结果。2013 年诺贝尔化学奖的颁发表明, 计算科学是任何一个学科领域翻开新篇章的有力工具, 是引领学科发展的前沿 (周宏仁, 2016)。

发达国家认为, 发展高性能科学与工程计算关系国家的命脉, 是保持科学领先、经济竞争能力和国家安全的重要支撑, 将其作为国家战略给予高度重视, 发布相关战略研究报告, 资助相关的研究计划。

## 1.2 战略计划和项目部署

### 1.2.1 美国

#### 1.2.1.1 美国国家科学基金会资助的国家战略计算计划

美国国家科学基金会 (National Science Foundation, United States, NSF) 通过两种方式为国家战略计算计划 (National Strategic Computing Initiative, NSCI) 提供资金支持:

①2017 财年预算 3000 万美元用于支持 NSCI。②通过现有资助计划（包括核心研究计划）支持 NSCI。

NSF 现有的资助 NSCI 的计划有 5 个：①计算及数据支撑的科学与工程。②NSF 和半导体研究公司合作研究项目，协同解决能源受限计算性能挑战。③NSF/美国国立卫生研究院（National Institutes of Health, NIH）生物医学大数据量化方法联合计划，支持生物医学和数据科学重要的交叉应用领域的合作。④工业-大学合作研究中心计划。⑤可持续创新的软件基础。其中，计划①已经有 2 个主要项目正在运行（表 1-1）。

表 1-1 NSF 计算及数据支撑的科学与工程计划的 2 个主要项目

| 时段          | 资助经费/<br>万美元 | 项目名称                      | 研究内容                                                                                   |
|-------------|--------------|---------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| 2016~2020 年 | 193.7        | 具有统计学和计算先进程序包络的喷注能量损失层析成像 | 开发可扩展的便携式开源软件包来替代现有的各种代码。模块化集成软件框架将由相互作用的发生器组成，以模拟进入核的波函数；模拟等离子体的黏性流体动力演化；模拟等离子体中喷注的运输 |
| 2016~2021 年 | 100          | 核酸二级结构模型的计算参数化            | 建立一个计算参数化框架，使用最先进的计算化学方法，对小模型问题进行原子模拟，实现新的核酸二级结构模型的计算参数化                               |

同 NSCI 战略目标相一致的其他计划主要包含 2 个研究所与 1 个项目。

2016 年 7 月，NSF 宣布 5 年内拨款 3500 万美元资助 2 个研究所，即科学网关社区研究所和分子科学软件研究所（表 1-2）。

表 1-2 科学软件创新研究所两大资助项目

| 时段          | 项目名称      | 研究内容                                                             |
|-------------|-----------|------------------------------------------------------------------|
| 2016~2021 年 | 科学网关社区研究所 | 将增加科学网关的能力、数量和可持续性                                               |
| 2016~2021 年 | 分子科学软件研究所 | 将资助一个跨学科的软件科学家团队，他们将开发软件框架，与代码开发人员和网络基础设施中心合作，并与企业界合作，支持计算分子科学领域 |

NSF 还资助了“极限环境中的可扩展并行性”项目，共有 7 个子项目，目前资助总经费为 502.8 万美元（表 1-3），涵盖全部 NSCI 战略目标，旨在应对当今并行计算时代提高性能的挑战。

表 1-3 NSF 资助的“极限环境中的可扩展并行性”项目的 7 个子项目

| 时段          | 资助经费/<br>万美元 | 项目名称               | 研究内容                                                                          |
|-------------|--------------|--------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| 2017~2020 年 | 80           | 跨层应用感知在极限尺度的恢复能力   | 探讨单个并行应用环境中使用的多个软件库（和应用程序组件）如何进行交互，以提供并行应用程序定向计算所需的整体故障管理支持。该项研究将扩展到多种编程范例相结合 |
| 2017~2020 年 | 80           | 数据流的多核到广域分析        | 开发用于分析计算系统上大量流数据的方法，计算系统包括从多个共享存储器的内核到通过广域网络通信的地理分布式数据中心                      |
| 2017~2020 年 | 80           | 可扩展不规则数值应用的依赖编程与优化 | 使用新颖的编译器和运行技术来统一并扩展并发集合依赖关系编程模型，并将其应用于动态的、不规则的数值计算                            |

续表

| 时段          | 资助经费/<br>万美元 | 项目名称                      | 研究内容                                                                                                                               |
|-------------|--------------|---------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 2017~2021 年 | 80           | 各种尺度并行构建的 multi-grain 编译器 | 开发新技术, 加快汇编过程。设计新的编译器算法和调度器, 以使编译器能够与硬件功能匹配。加快编译, 更快地开发任何类型的软件, 为用户提供新功能, 更快地压缩潜在的灾难性错误                                            |
| 2017~2020 年 | 22.8         | 基于稀疏化的方法分析网络动力学           | 开发一套可扩展的并行算法, 用于更新可在各种高性能计算平台上执行的面向不同问题的动态网络。动态网络分析将能够研究生物信息学、社会科学和流行病学等不同学科复杂系统的演变。预计项目将启动并行动态网络算法的新研究方向                          |
| 2017~2020 年 | 80           | 使用自旋电子学的可扩展内存处理           | 开发计算工作存储器的概念来构建内存处理解决方案, 以使用自旋电子技术解决数据密集型计算问题                                                                                      |
| 2017~2021 年 | 80           | 具有增强的无监督学习能力的综合深度神经网络加速框架 | 在软件层面, 设计一个广义层次决策系统; 在计算层面, 设计具有增强的无监督学习支持的深度神经网络计算范例; 在应用层面, 将在受益于无人监督学习和强化学习的场景中开发其应用。也将在图形处理器、现场可编程门阵列和新兴纳米级计算系统中对所开发的技术进行演示和评估 |

### 1.2.1.2 DOE 和科学与工程计算相关的战略规划及项目

#### (1) 先进科学计算研究计划

先进科学计算研究 (Advanced Scientific Computing Research, ASCR) 计划的主要任务是为能源安全、核安全、科学发现和创新及环境等科学领域的研究人员开发计算与网络工具, 使其能对复杂现象进行分析、建模和预测, 对原本因危险和成本过高而无法进行的实验进行验证。ASCR 计划包含应用数学项目和先进计算科学发现 (Scientific Discovery through Advanced Computing, SciDAC) 项目等。

ASCR 应用数学项目具有悠久的历史, 专注于高性能计算的数学研究和软件研究开发。2014 年 3 月, DOE 发布了《百亿亿次计算的应用数学研究》报告, 建议其 ASCR 计划优先采取行动, 开展针对百亿亿次计算的应用数学研究计划, 重点内容包括: ① ASCR 计划优先开展一项针对百亿亿次计算的应用数学研究计划, 使 DOE 保持在先进计算方面的优势。② 加大对建立新数学模型、数学模拟、数学模型离散化、数据分析和数学算法等的研发经费投入, 促进应用数学的发展, 从而促进百亿亿次计算性能的巨大提高。③ DOE 应该针对应用数学研究找到一个平衡点, 同时为百亿亿次计算和其他一些基础研究计划提供足够支持。④ 计算机科学家、应用数学家、应用科学家要加强紧密合作, 这是百亿亿次计算取得成功的必要条件。⑤ ASCR 计划必须投入经费, 支持计算机科学家参加应用数学的培训, 支持应用数学家参加高性能计算方面的培训, 使计算机科学家和应用数学家同时具备高性能计算和应用数学两方面的知识, 促进百亿亿次计算的发展。

SciDAC 于 2001 年发起, 通过应用数学家和计算机科学家的合作, 为气候科学、高能物理学、核物理学、材料科学、化学与生物学等领域提供计算解决方案。SciDAC 项目资助了 4 个 SciDAC 研究所和 3 个百亿亿次协同设计中心。

2012~2016 年, SciDAC 项目资助了 4 个研究所: ①FASTMath SciDAC 研究所, 开发用于可靠地模拟复杂物理并且可扩展的数学算法和软件工具。与 DOE 的各领域科学家合作, 确保 FASTMath 技术的实用性和适用性。②QUEST SciDAC 研究所, 开发用于极端规模计算的不确定性量化工具, 并在科学领域应用。③SciDAC SDAV 研究所, 与应用团队合作, 协助其实现科学突破, 并为计算科学领域的管理、分析和可视化提供解决方案。④SUPER 可持续性能、能源和弹性研究所, 研究领域包含性能工程 (包括建模和自动调整)、能源效率、弹性和优化。

2011 年起, SciDAC 资助了 3 个协同设计中心: ①极端环境中材料百亿亿次协同设计中心 (Exascale Co-Design Center for Materials in Extreme Environments, ExMatEX), 建立算法、系统软件和硬件之间的相互关系, 开发多物理场百亿亿次模拟框架, 对极端机械和辐射环境的材料进行建模。②先进反应堆百亿亿次模拟中心 (Center for Exascale Simulation of Advanced Reactors, CESAR), 开发具有百亿亿次能力的综合仿真工具, 用于模拟新一代先进核反应堆的设计。③湍流中的燃烧模拟中心 (Center for Exascale Simulation of Combustion in Turbulence), 执行多学科研究, 从算法、编程模型到硬件架构重新设计模拟过程, 使百亿亿次燃烧模拟成为现实。

DOE “先进科学计算研究” 计划推动百亿亿次计算研发。DOE 科学办公室在 2016 财年为百亿亿次计算研发提供 2.08 亿美元, 这在 2015 财年相关预算 (0.99 亿美元) 的基础上实现了大幅增长。其中, DOE 通过 ASCR 计划投入约 1.78 亿美元, 从 5 个方面推动百亿亿次计算研发, 包括: ①从硬件、软件与数学方面开展技术研发, 构建百亿亿次计算系统。②利用新兴技术, 协调科学计算应用和数据密集型应用的研发工作, 使其能够充分利用百亿亿次计算系统的性能。③联合高性能计算制造商, 加速百亿亿次计算技术的研发与实施。④采购和运行使用了新兴技术的千万亿次级别的计算系统, 为利用这些新兴技术研制百亿亿次计算系统奠定基础。⑤与其他政府机构合作, 确保百亿亿次计算能在其他政府部门获得应用。ASCR 计划认为, 百亿亿次计算研发面临许多技术挑战, 需要从 10 个方面应对挑战: ①提高芯片、供电及冷却技术的能效。②开发新的互联技术, 提高数据移动的性能与能效。③集成先进的内存技术, 提高内存容量与带宽。④开发可伸缩的系统软件, 实现对能耗的感知。⑤开发新的编程环境, 实现大规模并行性、数据局部性和系统弹性。⑥开发管理软件, 未来能处理大容量的数据。⑦用百亿亿次计算分析科学问题, 重新设计、开发适用于百亿亿次计算的算法。⑧针对基于百亿亿次计算的科学发现, 设计和开发数学优化方法与不确定量化方法。⑨克服系统误差、可重复性与验证的挑战, 确保科学计算的准确性。⑩开发新的软件, 提高科学计算的生产力。

## (2) 先进模拟与计算计划

先进模拟与计算 (Advanced Simulation Computing, ASC) 计划负责提供模拟工具和计算环境, 以在不进行真实核武器试验的情况下对美国的核武器储备的安全性与可靠性进行鉴定和认证。ASC 的前身为加速战略计算创新 (Accelerated Strategic Computing Initiative, ASCI) 计划。ASCI 成立于 1995 年, 用于保证核库存的性能、安全性、可靠性和更新的需要, 2004 年, ASCI 正式改为 ASC。ASC 计划的目标是: ①通过模拟提高预测的精度; ②可

量化计算结果不确定性界限；③通过更紧密地整合模拟和实验活动，提高预测能力；④与企业、研究机构、大学和政府机构合作，为用户提供必要的计算能力。

### (3) 百亿亿次计算项目

百亿亿次计算项目(Exascale Computing Project, ECP)是 DOE 针对奥巴马提出的 NSCI 推出的主要研究项目，旨在开发强大的百亿亿次计算生态系统，部署至关重要的应用程序、系统软件、硬件技术和架构及人才发展需求，使高性能计算为美国经济竞争力、国家安全和科学发现带来最大限度的利益。

2016 年 9 月，ECP 发布首轮资助的 22 个应用开发项目，资助金额为 3980 万美元(表 1-4)，涵盖 45 家研究和学术机构。此首轮应用开发项目旨在开发侧重于可移植性、可用性和可扩展性的先进建模与模拟解决方案，应对 DOE 在科学发现、清洁能源、国家安全和与 NIH 的美国国家癌症研究所(National Cancer Institute, NCI)合作的精准医疗计划等方面所面临的具体挑战。

表 1-4 ECP 所资助的 22 个应用开发项目

| 序号 | 项目名称                                   |
|----|----------------------------------------|
| 1  | 在极限尺度上计算                               |
| 2  | 百亿亿次深度学习和模拟，启用癌症精准医疗                   |
| 3  | 百亿亿次格点规范理论，核能和高能物理学的机会和要求              |
| 4  | 百亿亿次分子动力学：跨越材料科学关键问题的准确性、长度和时间尺度       |
| 5  | 先进粒子加速器的百亿亿次建模                         |
| 6  | 耦合流动、运输、反应和力学的百亿亿次地下模拟器                |
| 7  | 百亿亿次预测风电厂流体物理建模                        |
| 8  | QMCPACK：一种用于预测和系统改进的以量子力学为基础的材料模拟的框架   |
| 9  | 耦合蒙特卡罗中子和小型模块化反应堆的流体流动模拟               |
| 10 | TrAMEx：通过百亿亿次模拟变革增材制造技术(3D 打印)         |
| 11 | NWChemEx：迎接百亿亿次时代的化学、材料和生物分子挑战         |
| 12 | 磁约束聚变等离子体的高保真整机建模                      |
| 13 | 自由电子激光百亿亿次数据分析                         |
| 14 | 百亿亿次模拟变革燃烧科学与技术                        |
| 15 | 云方案——地球水循环的气候模拟                        |
| 16 | 为化学与材料中的百亿亿次计算启用 GAMESS                |
| 17 | 多尺度耦合城市系统                              |
| 18 | 恒星爆炸的百亿亿次模型：精密多物理场模拟                   |
| 19 | 用于微生物分析的百亿亿次计算方案                       |
| 20 | 区域尺度地震危害和风险评估的高性能、多学科模拟                |
| 21 | MFIX-Exa：具有离散元件、粒子和双流体模型的多相能量转换器件的性能预测 |
| 22 | 优化百亿亿次计算的随机网格动力学                       |

注：表中项目时间为 2016 年 9 月，资助经费为 3980 万美元，研究方向为建模和模拟解决方案