



Quantitative Marine Ecology

—Theory, Method and Practice

· 生态学研究 ·

计量海洋生态学

——理论、方法与实践

王友绍 编著
By Youshao Wang



科学出版社

计量海洋生态学 ——理论、方法与实践

Quantitative Marine Ecology
— Theory, Method and Practice

王友绍 编著
By Youshao Wang

科学出版社
北 京



内 容 简 介

计量海洋生态学是海洋科学中一门全新的交叉学科,本书以计量海洋生态学的理论与方法贯穿始终,依据统计分析(SAS、MATLAB 和 SPSS)基础,采用计量生态学的研究方法,对我国热带(如西沙)、亚热带(如大亚湾、珠江口),以及大西洋(西北臂)典型海域环境与生态学变化特征进行了研究,并阐述了人类活动和自然变化的双重影响下我国典型区域和大西洋西北臂生态环境变化特征、驱动机制及其变化趋势。这将有助于了解我国热带、亚热带及大西洋典型海域生态系统动态变化过程与演变机制,将为我国海洋生态环境与资源的保护、开发和利用提供科学理论依据。全书图文并茂,内容深入浅出,丰富新颖,是一本主要全面了解我国典型海域生态与环境变化特征的教科书和参考书。

本书可供从事生态学、环境科学、海洋科学、生物学、经济学等诸多领域的科学工作者、高年级本科生和研究生学习或参考。

图书在版编目(CIP)数据

计量海洋生态学:理论、方法与实践/王友绍编著. —北京:科学出版社, 2013. 10

ISBN 978-7-03-038372-3

I. ①计… II. ①王… III. ①计量学-海洋生态学 IV. ①Q178.53

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 193259 号

责任编辑:王海光 张韶茹 / 责任校对:郑金红

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:北京铭轩堂广告设计有限公司

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>

双青印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013 年 10 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2013 年 10 月第一次印刷 印张: 24 1/4 插页: 10

字数: 562 000

定价: 118.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

作者简介



王友绍 博士,1963年生,教授、博士生导师,主要从事海洋生态环境与生物资源研究。1997年中国科学院上海原子核研究所无机化学专业毕业,获理学博士学位,同年破格晋升教授,2008年晋升二级教授;1998年于中国农业大学生物学院从事博士后研究,涉及微生物生理与生物化学、分子生物学等方面的研究;2006年和2009年两次作为高级访问学者于美国斯克里普斯海洋研究所学习;2000年至今于中国科学院南海海洋研究所工作,先后任责任研究员、博士生导师、海洋环境与生态研究室主任、大亚湾海洋生态系统国家科学野外观测研究站站长、热带海洋环境国家重点实验室副主任、国家自然科学基金委评审专家及广东省学位委员会和自然科学高级职称评委等职。为中国海洋与湖沼学会生态分会理事、中国生态学学会红树林学组执委会副主席;美国生态学学会、美国科学促进会、美国纽约科学院等会员。近年来,先后主持或参加国家自然科学基金项目、国家科技专项、“863”计划项目等课题。在国内外重要学术刊物上发表研究论文150余篇,其中SCI和EI收录论文100余篇;为 *Journal of Environmental Management*、*Chemosphere*、*Hydrobiologia*、*Journal of Pharmacy and Pharmacology*、*Marine Biotechnology*、*Environmental Monitoring and Assessment* 等20多种杂志审稿人。1997年获“中国科学院院长奖学金”优秀奖和“山东省高校中青年学术骨干和学科带头人培养对象”等荣誉称号;2007年、2002年和2001年分别获国家科学技术进步奖二等奖、山东省科学技术进步奖三等奖和山东高校优秀科研成果奖三等奖各一项;2011年、2012年两次获得国际埃尼奖(Eni Award)提名。提出了大亚湾生态环境动态变化模式、“大亚湾海域主要为受人类活动驱动的复合生态系统”的观点,以及“人类活动的增加打破了中国沿岸水体的营养盐平衡”的观点(*Nature China* 评述);揭示了珠江口酸性多糖(TEP)时空分布特征与形成机

制,建立了珠江口 TEP 分布的概念模式图;提出了物理过程与生物地球化学过程的相互作用是影响不同季风期 TEP 分布的新观点;首次利用硅指示南海北部上升流和中尺度涡存在,证实了吕宋海峡东侧细菌群落组成变化与温度显著相关和吕宋海峡西侧细菌群落组成变化与盐度和硝酸盐显著相关;从分子水平上揭示了重金属离子和有机污染物对红树植物的作用途径与调控机制等,在国际上率先开展了红树植物逆境分子生态学机制研究。

前 言

海洋生态学是研究海洋生物与海洋环境间相互关系的科学,它是生态学的一个分支,也是海洋生物学的主要组成部分。通过研究海洋生物在海洋环境中的繁殖、生长、分布和数量变化,以及生物与环境的相互作用,阐明海洋生物学的规律,为海洋生物资源的开发、利用、管理和增养殖,保护海洋环境和生态平衡等提供科学依据。

不同学科的交叉与融合是当今自然科学发展的趋势,海洋生态学也不例外,对其研究更需要多学科的交叉与融合。计量海洋生态学作为统计学、计算机科学和海洋生态学的多学科交叉研究产生的一门新兴学科,目前已成为当前国际生态学研究的前沿领域之一,特别是近年来伴随计算机技术的飞速发展和统计分析技术的日臻完善,使计量海洋生态学研究得到了迅速发展。

与陆地研究相比(计量生态于 20 世纪 60 年代末期诞生),计量海洋生态学的研究相对滞后,但我国与国际上的研究相比并不落后,尤其是近几年来得到了迅速发展。本书的雏形始于 2006 年作者初次去美国斯克里普斯海洋研究所(Scripps Institution of Oceanography)做访问学者时,受 Ray F. Weiss、B. Greg Mitchell、Farooq Azam 等教授的鼓励和支持,我们的研究团队开始拓展在计量海洋生态学和海洋分子生态学方面的工作。作者于 2009 年第二次去该研究所访问时完成了本书整体框架和部分书稿的编写工作。本书是在近 10 年南海海域野外考察与研究的基础上完成的,同时,书中部分工作也反映了姜治平、吴梅林、孙富林、凌娟、林立等多位同学在攻读博士学位期间的辛勤结晶,其中绝大部分工作已经以论文的形式在国际上公开发表。

考虑到本书是以学术研究为主的专著,我们在统计分析基础知识中仅介绍了 SAS、MATLAB 和 SPSS 的入门知识,涉及实际的科学研究中的汇编语言和程序还需要初学者自己努力和详细揣摩,并且需要具有较好的数理基础,尤其是对复杂的 SAS 和 MATLAB 程序汇编。SPSS 作为一个“傻瓜”式的软件,其计算过程对读者而言完全是一个“黑箱”,按照固定程序操作该软件,不需要多少数学知识就可以完成有关的统计运算,但如果不了解一种方法的计算过程,不知道这些方法的原理,即使 SPSS 输出了结果,读者也没有办法给出准确的解读,故在本书研究章节中很少使用 SPSS 软件。本书主要章节以使用 SAS 和 MATLAB 软件为主,并在有关典型海域物理—化学—微生物耦合章节中使用了 Canoco for Windows 4.5 软件,开展了细菌群落结构组成和环境因子相关性分析。在第二章“统计学分析基础”中借助一些简单的事例,完整地演示了各种数学方法的计算过程和分析思路,主要涉及主成分分析、因子分析、聚类分析、相关分析、神经网络分析等数学方法,读者可以循序渐进,通过典型实例、借助 SAS 和 MATLAB 来处理自己研究的现实问题。希望本书的出版对计量海洋生态学的发展能起到一定的推动作用。

本书自筹划到撰写完成之时,先后得到了国家自然科学基金(41176101、41076070)、

中国科学院知识创新工程重要方向性项目(KZSX2-SW-132、KSCX2-EW-G-12C、KZCX3-SW-214 和 KZCX2- YW-Q07-02)、中国科学院野外观测研究台站网络专项(KZCX2-EW-Y052)、热带海洋环境国家重点实验室自主研究项目等项目的资助。

特此,向所述的单位和个人表示最诚挚的谢意!

由于作者撰写时间和水平有限,书中难免存在不足或错漏之处,敬请读者指正!

王友绍

2013年2月18日于广州

目 录

前言	
第一章 计量海洋生态学	1
第一节 计量生态学的发展历程与计量海洋生态学的产生	1
第二节 计量生态学方法在海洋环境与生态学研究中的应用	3
第三节 计量海洋生态学 e-Science 研究与示范应用	5
参考文献	16
第二章 统计学分析基础	19
第一节 SAS 系统入门	20
第二节 MATLAB 系统入门	85
第三节 SPSS 系统入门	124
参考文献	169
第三章 南海北部和大西洋典型海湾环境变化特征	171
第一节 大亚湾海域营养盐及结构长期变化规律	171
第二节 大亚湾海水营养盐变化特征与限制因子研究	179
第三节 主成分分析研究大亚湾水质时空变化特征	189
第四节 稳健主成分分析研究大亚湾水质时空演替过程	195
第五节 模糊聚类分析识别大亚湾水质时空变化规律	202
第六节 非参数有监督的模式识别方法研究大亚湾水质季节变化	207
第七节 主成分回归研究大亚湾水质季节变化规律	217
第八节 偏最小二乘回归研究大亚湾水质季节变化特征	221
第九节 大西洋西北臂海表硝酸盐浓度和新生产力的估测	227
参考文献	234
第四章 大亚湾海域物理-化学-生物耦合机制	242
第一节 大亚湾物理-化学-浮游植物耦合特征	242
第二节 大亚湾物理-化学-浮游动物耦合特征	257
第三节 大亚湾物理-化学-底栖动物耦合	273
参考文献	289
第五章 珠江口水环境特征及其与微生物耦合机制	292
第一节 珠江口水环境特征	293
第二节 珠江口氧化亚氮分布与水环境特征	302
第三节 珠江口不同季节沉积物细菌种群结构及其与环境耦合特征	306
第四节 珠江口沉积物放线菌种群多样性的季节变化特征	316
参考文献	324

第六章 南海中、北部区域环境特征及其物理-化学-生物耦合机制	328
第一节 南海北部上层水体营养盐分布特征	328
第二节 南海北部上升流特征与佐证	334
第三节 吕宋海峡区域细菌群落结构及其与环境耦合特征	338
第四节 南海北部细菌群落空间分布及其与环境耦合特征	353
第五节 西沙海域细菌垂直分布及其与环境耦合特征	363
参考文献	373

图版

第一章 计量海洋生态学

科学计量学是应用数理统计和计算技术等方法对科学活动的产出进行定量分析,从中找出科学活动规律性的一门科学分支学科。

1961年美国科学史学家普赖斯发表《巴比伦以来的科学》,为科学计量学奠定了基础。他通过对科学杂志、文献等统计研究,论证了科学知识指数增长率。由此他被认为是“科学计量学之父”。1963年,美国费城科学情报研究所加菲尔德博士创立《科学引文索引》,为科学计量学研究提供了数据基础。苏联学者多勃罗夫和纳利莫夫在1969年提出科学计量学这一术语。1978年匈牙利科学计量学家布劳温等创办《科学计量学》杂志。1994年,国际科学计量学与情报计量学学会(ISSI)在荷兰正式成立,德国H. Kretschmer博士(女)为首任会长。1995年由印度学者Subirk Sen博士和出版商Pandey博士创办同上述学会同名的学会刊物,标志这门学科已得到国际认可。科学计量学是研究范围很广的一门学科,凡是科学学研究中的定量问题均是其研究内容,如一个国家科技实力、科技指标、科技力量分布、科研绩效、科学发现等定量研究均有成功之例。其定量研究的领域有:① 科学技术和其他重要学术情报的定量研究;② 科学学、技术学、社会科学、艺术学和人文科学的定量研究;③ 情报的产生、传播和使用的定量研究;④ 图书馆、档案和数据库等定量研究,以及情报方面的数学模型研究。

近年来,由于计算机和统计分析技术的突破,科学计量学得到了飞速发展,并渗透到化学、生物学和地学等领域(Dong et al., 2010; Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b; Trauth, 2007; Wu & Wang, 2007; Wu et al., 2009a, b, 2010, 2011, 2012a, b, c, d; Sun et al., 2012a)。例如,化学计量学是一门利用应用数学、统计学和计算机技术的原理和方法来处理化学数据的学科。

第一节 计量生态学的发展历程与计量海洋生态学的产生

一、计量生态学和计量海洋生态学定义

最早Scott于1969年提出了计量生态学的概念,认为像19世纪30年代细胞学(cytology)含义来自染色体研究一样,计量生态学(quantitative ecology)包含广义和狭义这两个方面:从狭义上,计量生态学就是对生物群落近乎完美的分析技术,也就主要是多重统计分析方法在生态学研究中的应用;从广义上,计量生态学包含了所有生态学概念范围的内容,也就是说,取代了随时可能基于客观量度的主观评估、基于事实的偏见和基于逻辑的判断。Schneider(2008)将计量生态学定义为在认识生态格局和过程中使用了大量数据。

随着科学与技术的发展,各学科的发展与交叉日趋完善,计量海洋生态学(quantitative marine ecology)的出现也是如此,计量生态学方法在海洋生态学研究中的应用与发

展,逐渐形成了一门交叉与新兴的学科,它是一门利用应用数学、统计学和计算机技术的原理和方法来处理 and 解决海洋生态领域一些问题的科学,揭示海洋生物在海洋环境中的繁殖、生长、分布和数量变化,以及生物与环境相互作用等(Wang et al., 2006, 2011, 2012a),阐明生物海洋学的规律,为海洋生物资源的开发、利用、管理和养殖、保护海洋环境和生态平衡等提供科学依据,即计量海洋生态学。

二、计量生态学的发展历程

自 Scott 于 1969 提出计量生态学概念以来,特别是 70 年代以后由于大型统计软件诞生,给计量生态学研究带来机遇与发展,为计量生态研究与进一步发展奠定了基础。进入 90 年代,计算机在世界范围内的普及使计量生态学发展与各学科交叉研究成为可能,如计量海洋生态学的诞生,计量海洋生态学的产生与发展只是近年来的事情(Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b; Wu & Wang, 2007; Wu et al., 2009a, b, 2010, 2011, 2012a, b, c, d; Sun et al., 2011a, b, 2012a, b; Dong et al., 2010; Lin et al., 2011; Ling et al., 2011, 2012; Sun et al., 2012a),我国计量海洋生态学研究与发展在国际海洋生态研究中处于重要位置,尤其在识别人类活动与自然变化方面的研究中(Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b; Wu et al., 2010, 2011, 2012a, b, c, d; Yung et al., 2001; Sun et al., 2011a, b, 2012a, b; Dong et al., 2010; Lin et al., 2011; Ling et al., 2011, 2012; Sun et al., 2012a)。计量生态学作为统计学、计算机科学和生态学等多学科交叉研究的一门新兴学科,已成为当前国际生态学研究的前沿领域之一,特别是近年来伴随计算机技术的飞速发展和统计分析技术的日益完善,使计量生态学研究得到了迅速发展。加拿大学者 Schneider 于 1994 年出版了 *Quantitative Ecology* 一书,并于 2008 年再版。进入 21 世纪,由于网络技术、通讯技术和计算机技术(如超级计算机)的迅猛发展,e-Science 在世界范围内受到重视(Schroeder, 2008; 张耀南等, 2006),尤其是在生态、环境和工程等领域中得到应用,为计量生态学的发展与腾飞插上了翅膀。

(一) 计量生态学兴起的背景

1. 计量经济学的产生

1920 年开始的大萧条时代对西方经济体系产生了严重的冲击,同时也冲击到了传统的经济学领域,一些经济学家试图引入数学和统计学的方法研究和分析经济现象,以期避免经济的剧烈周期性波动。他们引入了数学中的主成分分析、因子分析等方法,对经济走势、股票价位等海量信息进行处理,获得了空前的成功。

2. 仪器分析技术的发展

进入 20 世纪之后,随着物理学、工程技术和生物技术的发展,生命科学、化学、海洋等科学发生了质的变化,从早期的描述性的定性学科,逐渐转变为定量科学。例如,盐、温、深测量仪(STD 或 CTD)和磁力仪,微量连续分析仪,流式细胞仪,以及各种光谱、质谱、核磁共振谱、光度分析等技术的产生和分析仪器的出现更是将海洋科学、化学、物理等的定量程度和精确性带到了一个阶段;同时,也产生了大量的数据,如何处理和应用这些由仪器产生的海量数据成为海洋科学学家、生态学家、化学家等面临的一个难题。

(二) 计量生态学的产生

计量生态学的产生与化学计量学的产生一样,始于计量学与生态数据的结合。生态领域出现的海量数据与此前在经济学领域出现的海量数据具有相似性,这提示生态学家可应用计量学的方法来处理生态学问题,计量生态学也因此于 20 世纪 60 年代末期诞生了,化学计量学则产生于 70 年代(许禄,2004),计量海洋生态学产生的雏形最早来自于 1994 年出版的一部专著 *Quantitative Ecology: Spatial and Temporal Scaling*,作者 Schneider 为美国加州大学斯克里普斯海洋研究所访问学者。进入 21 世纪后,计量海洋生态学这一词汇才正式在国际网络上陆续出现(<http://www.utas.edu.au/>、<http://www.sciencemag.org/>等)。

(三) 计量生态学的发展

随着计算科学、分析技术与手段的发展,人们对物质世界的认识越来越深刻,各种测量手段层出不穷,人们面对的测量数据也越来越多,尤其海量数据,计算机的出现和迅速发展更是极大地刺激了计量生态学的发展。现在的计量生态学不仅仅应用于多维生态数据的处理,还与生态过程、生态工程相结合,为生态学、海洋生物资源合理开发与利用评估,海洋生物资源的可持续发展模式等提供依据。

(四) 计量生态学研究方法

早期的计量生态学处理数据应用的都是计量经济学的方法,如主成分分析法、因子分析、典型相关性方法等。

1970 年出现了线性学习机器、非线性映射等方法用于处理生态学数据;

1980 年微型计算机逐渐普及,出现了专家系统和数据库技术;

1990 年出现了人工神经网络、模拟退火算法、遗传算法等方法;

.....

第二节 计量生态学方法在海洋环境与生态学研究中的应用

一、引言

海洋生态环境是海洋生物生存和发展的基本条件,生态环境的微小变化都有可能导致生态系统和生物资源的变化。海洋生态环境平衡的打破,一般来自两方面的原因:一是自然本身的变化,如自然灾害(台风、大型风暴潮);二是来自人类的活动,首先是不合理的、超强度的开发利用海洋生物资源,如近海区域的滥捕行为,使海洋渔业资源严重衰退;其次是海洋环境空间的利用,致使海域污染的发生和生态环境的恶化,例如,对沿海湿地的围垦必然改变海岸形态,降低海岸线的曲折度,危及红树林等生物资源,造成对海洋生态环境的破坏(王友绍等,2004;Wang et al., 2008);还有一类就是沿岸经济的快速发展,向近海岸水体排放大量的工业、生活等废弃物和废水,造成沿岸海水生态环境的破坏。因

此,预防与控制海洋生态环境破坏,定期实行海洋生态环境监测将有助于掌握和了解海洋生态环境的时空变化。但是定期的监测,如一个月一次或一季度一次,每次监测项目包含物理、化学和生物指标,获得大量的样本数据,然而从这些样本数据获得其潜在的本质的规律是件非常艰巨且意义重大的工作。从监测样本数据中提取环境生态的时空变化规律,对研究海洋生态环境的演替过程具有重要的科学意义,为政府部门利用海洋资源提供了重要的科学依据,是保持海洋生态环境可持续发展必要的科学保障。

二、海洋环境生态数据的现状

为了对生态系统和环境的变化状况进行监测,进而寻求解决资源和环境问题的途径与方法,20世纪70年代末,一些国家、地区和国际组织,已建立了90多个以监测和解决资源和环境问题为目标的生态环境监测或研究网络。在国家尺度上有美国长期生态研究网络(US LTER network)、英国的环境变化监测网络(ECN)和中国生态系统研究网络(CERN)(图1.1,见图版);全球尺度上有全球陆地观测系统(GTOS)、国际长期生态研究网络(ILTER)、全球气候观测系统(GCOS)和全球海洋观测系统(GOOS)等。它们都已经在了解资源环境问题和促进生态学发展方面发挥了重要作用。

中国生态系统研究网络(CERN)于1988年正式成立,其中涉及海洋的有胶州湾、大亚湾和三亚湾三个海洋生态网络研究站,香港也已建立了环境生态监测项目。这些数据的获得给海洋环境生态学家提供了大量宝贵的反映海洋环境生态年际变化、空间变化的数据资料,但大量的历史资料与数据未得到充分发挥和利用(宁修仁等,2005)。

三、海洋环境与生态数据带来的机遇

数据挖掘(data mining)正是迎合这种需求而发展起来的,并已有一些商业软件,如Marksman、Think Machine、DataMind、Intelligent Miner 和 Knowledge Seeker。数据挖掘起源于20世纪80年代后期,90年代得到迅速发展,现在各个领域的应用研究也越来越活跃。数据挖掘是运用一系列技术从数据库或海量数据中提取潜在的有价值的具有规律性的信息,这些信息和知识是隐含的,事先未知而潜在的。数据挖掘的目的就是从数据库的海量数据中“掘金”,一般认为它是基于数据库知识发现中的一个关键步骤。数据挖掘涉及多学科技术集成,包括数据库技术、人工智能、机器学习、统计学、模式识别、知识库系统、知识的获取、信息检索及数据的可视化等。数据挖掘的任务有关联分析、聚类分析、分类分析、异常分析、特异群组分析和演变分析等(凌娟等,2012;林小苹等,2004,2005,2007;吴梅林等,2009;Dong et al., 2010; Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b; Trauth, 2007; Wu & Wang, 2007; Wu et al., 2009a, b, 2010, 2011, 2012a, b, c, d)。

数据挖掘方法包含计量生态学方法,在此以数据挖掘方法来进行综合研究(Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b)。

海洋环境与生态学家在整理大量的反映海洋环境与生态变化的数据时,认识到海量数据的利用十分困难,而且不充分。揭示其内在本质规律性的信息并没有被挖掘出来,还隐藏在数据内部。如何从这些海量数据中提取更多有价值的揭示其规律的信息正成为海洋环境与生态学家关注的热点。

四、海洋环境与生态数据挖掘研究内容

近年来海洋环境与生态数据信息处理方法成为海洋环境与生态研究的热点。海洋环境与生态数据信息处理是利用应用数学,尤其是统计学,对海洋环境与生态信息进行表示、管理、分析、模拟和传播,以实现海洋环境与生态时空变化规律的提取、转化和共享的一种方法,它揭示了海洋环境与生态本质的内在联系,促进了海洋环境与生态的知识创新,为充分合理利用海洋生物资源提供了科学的决策和依据,实现了海洋环境与生态的可持续发展。

实际运用中,海洋环境与生态数据挖掘主要有两个目标,一个是“预测”海洋生态与环境的变化趋势;另一个就是描述海洋环境与生态状态。预测主要根据已有的指标变量或现场实测数据来预测其他指标变量,有利于预防和控制有害事件的发生,减小经济损失。而描述性的数据挖掘则提取过去或现在环境与生态状态,为环境管理提供可靠的科学依据。一些数据挖掘方法主要为化学计量学法和多元统计法。无论数据挖掘或化学计量学,其大部分方法基本基础还是基于多元统计学(Dong et al., 2010; Wu & Wang, 2007; Wu et al., 2009, 2010, 2011, 2012a, b, c, d; Wang et al., 2006, 2011, 2012a, b)。

第三节 计量海洋生态学 e-Science 研究与示范应用

e-Science(科研信息化)是在 20 世纪末提出来的,e-Science 计划最初于 2000 年由英国开始实施。众所周知,传统的科学研究都是基于实验的,或者以理论分析为主,但是这种实验和理论分析存在很多问题,如比较封闭、没有模拟、无仿真的手段和方法等,因而造成科研周期较长,甚至成本过高,还有些预测性的实验根本无法开展,延长了重大科研成果产出的时间。人类进入 20 世纪末 21 世纪初,科学研究工作面临一些新的挑战,科研环境也发生了很大的变化:首先是科学研究的问题空前复杂化,科学研究的对象已经不再是一个简单的孤立系统,如以前化学就是化学,物理就是物理,而现在更多跨学科的、覆盖范围更大的科研问题摆在科学家面前;另外,科研过程中信息和数据的及时获取和处理显得越来越重要,仿真和大规模的计算也成为科学研究过程中分析、发现和预测的主要手段之一。这个时代也更加强调科学家之间更加密切的合作与交流,且这种合作与交流可能跨单位、跨地域,也可能跨国家、跨学科,在这种形势下,e-Science 应运而生(Schroeder, 2008; Butler, 2003, 2008)。

在当前知识经济时代,创新能力成为社会经济发展的主要原动力,而创新性成果多出在边缘学科和交叉领域。为促进学科间的交流,共享数据及设备资源,发达国家纷纷采用网络技术手段搭建科研支撑平台,如美国的 Cyberinfrastructure、欧洲的 e-Science(图 1.2)、日本的 ITBL、韩国国家 e-Science 等计划在合作研究中发挥了重要作用,并取得了显著成果,提高了国家科技竞争能力。

e-Science 意味着科学研究越来越多地通过因特网进行分布在全球的合作,充分利用了极大规模的数据、万亿次规模的计算资源和高性能的可视化设施。在下一代互联网基础上,e-Science 让科研世界变平。随着计算机、通信、信息技术的发展,用先进的信息化



图 1.2 英国 e-Science(计划)(<http://www.google.com.hk/>)

基础设施构建新型的信息化科学研究环境已经成为可能。一方面,e-Science 作为一种新的、开放的科学研究环境,在这种新的研究环境中研究人员能够通过高性能的网络进行先进计算、协同工作、实现数据获取和管理的服务,e-Science 的基本特点就是开放式的科学研究、大范围的资源共享和广泛的协同合作;另一方面,e-Science 正在对科学技术发展产生革命性的影响,科研活动信息化的水平正在成为国家核心竞争力和科学技术水平的重要标志之一,西方发达国家将信息化作为提高国家竞争力和科技水平的重要手段和保障。国际上在生命科学(基因组学、医药)、高能物理、纳米技术、化学、大气(气候变化)与教育等方面取得重要进展(Butler,2003,2008;Nishihara et al.,2008;Underwood et al.,2008;Flechais & Sasse,2009),这些方面英国和美国在网格计算技术方面处于世界领先水平(Schroeder, 2008;Butler,2003,2008)。

21 世纪是我国全面建设小康社会并进入创新型国家行列的战略机遇期,也是世界科技不断取得重大突破、孕育并可能产生新科技革命的时期,科研活动信息化将能促进信息、知识、人才等科技创新要素在全球范围内快速流动,促进科研人员进行广泛的、全球性的合作,支撑学科间交叉、融合、汇聚,提升重大科技问题的研究能力和水平,增强科技自主创新能力。



图 1.3 中国国家网格分布与运行管理中心揭牌
(<http://www.google.com.hk/>)

科研信息化已经引起了我国政府的重视(图 1.3),科技部、国家自然科学基金委员会、教育部都在积极跟进。2002 年至今,国家先后启动和建立了“中国国家网格”(CNGGrid-China National Grid)(科技部)(图 1.4)、“中国教育科研网格”(China Grid)(教育部)等。在“十一五”期间,中国科学院通过信息化的持续发展,进一步完善和提升信息化基础设施,建立了 e-Science 资源共享和协同工作环境。先后建设了气象、资源环境、航空制造、生物信息、新药研

发、科学数据、仿真应用、教育、城市交通信息、地质调查、森林资源与林业生态工程等多个应用网格,并在气候数值模拟示范应用、大规模电力系统示范应用、高能物理示范应用、生

物信息学示范应用、面向计算纳米电子学的示范应用、计算化学网格示范应用、协同制造网格示范应用取得重要进展(图 1.5)。

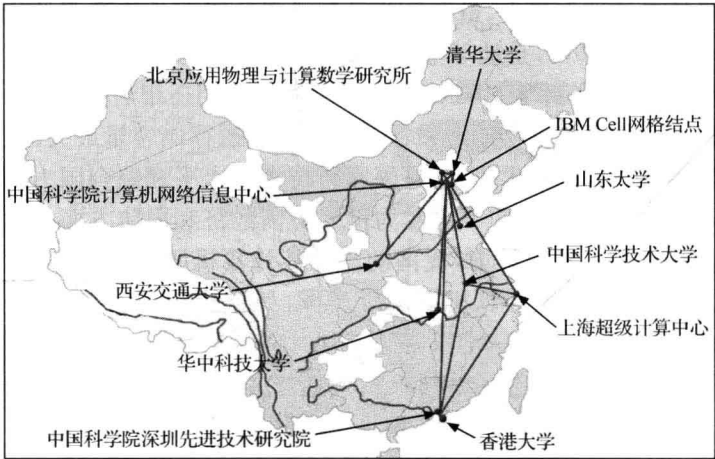


图 1.4 中国国家网格(CNGrid)项目(第二阶段)(<http://www.itservices.hku.hk/>)

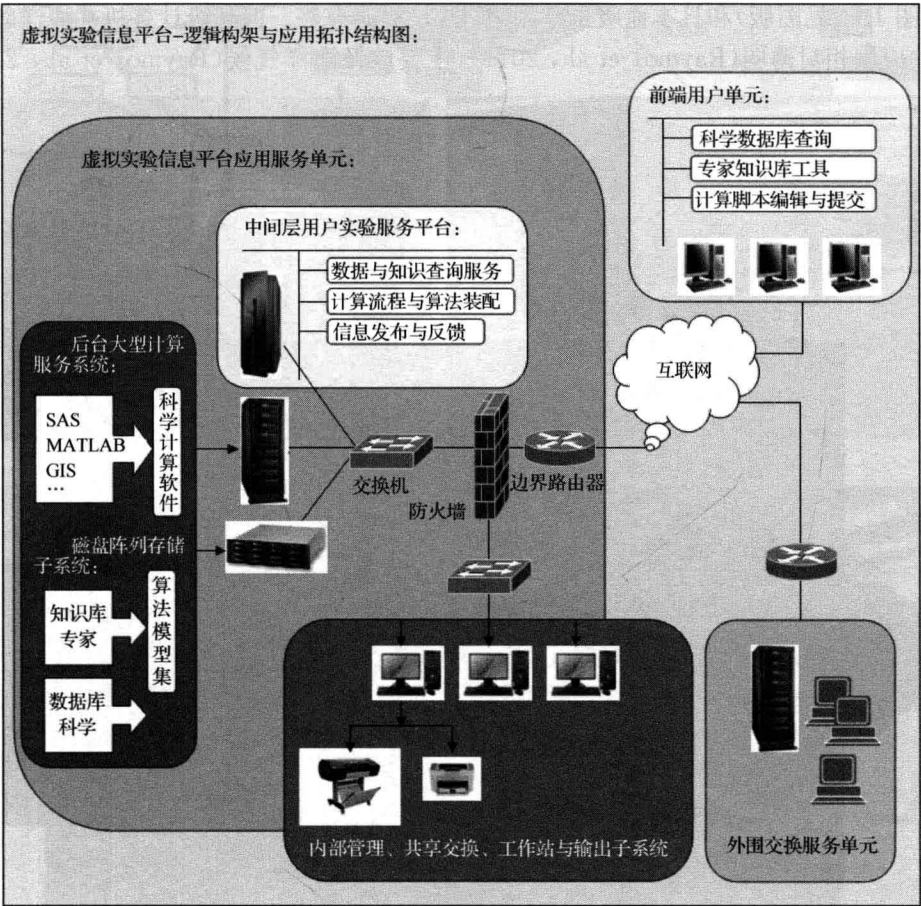


图 1.5 计量生态学虚拟实验室

尽管在我国已建立了 e-Science 资源共享和协同工作环境,但与国际上相比,有关学科和专业性 e-Science 研究与示范应用还比较薄弱,如海洋科学。

海洋生态系统是地球上最大、最有价值且又是最为脆弱的生态系统之一。全球海洋面积约占地球表面积的 70%,是地球上最大的资源库。与其他学科相比,海洋科研信息化建设相对薄弱,尤其海洋科学 e-Science 研究与示范应用还相当薄弱。

超级计算机作为计算机中功能最强、运算速度最快、存储容量最大的一类计算机,多用于国家高科技领域和尖端技术研究,是国家科技发展水平和综合国力的重要标志。作为高科技发展的要素,超级计算机早已成为世界各国经济和国防方面的竞争利器。经过我国科技工作者几十年不懈地努力,我国的高性能计算机研制水平显著提高,成为继美国、日本之后的第三大高性能计算机研制生产国,如中国“天河二号”、美国“克雷-2”和“IBM 蓝色基因”、日本 NEC“地球模拟器”等(图 1.6)。特别是近年来,随着超级计算机、通信、信息技术的迅速发展,促进了计算机在气象、资源环境(包括海洋)、航空制造、生物信息、新药研发、科学数据、仿真应用、教育、城市交通信息、地质调查、森林资源与林业生态工程等多个领域中的应用(Butler, 2003; Allen & Ingram, 2002; Clery & Voss, 2005; Abdulla et al., 2009; Raymol et al., 2011),如借助超级计算机开展亚洲人类遗传多样性图谱(图 1.7, 见图版)和日本血吸虫基因组(图 1.8)研究等。但超级计算机在海洋领域研究中的应用相对薄弱(Raymol et al., 2011),主要涉及海洋气候(Raymol et al., 2011)、

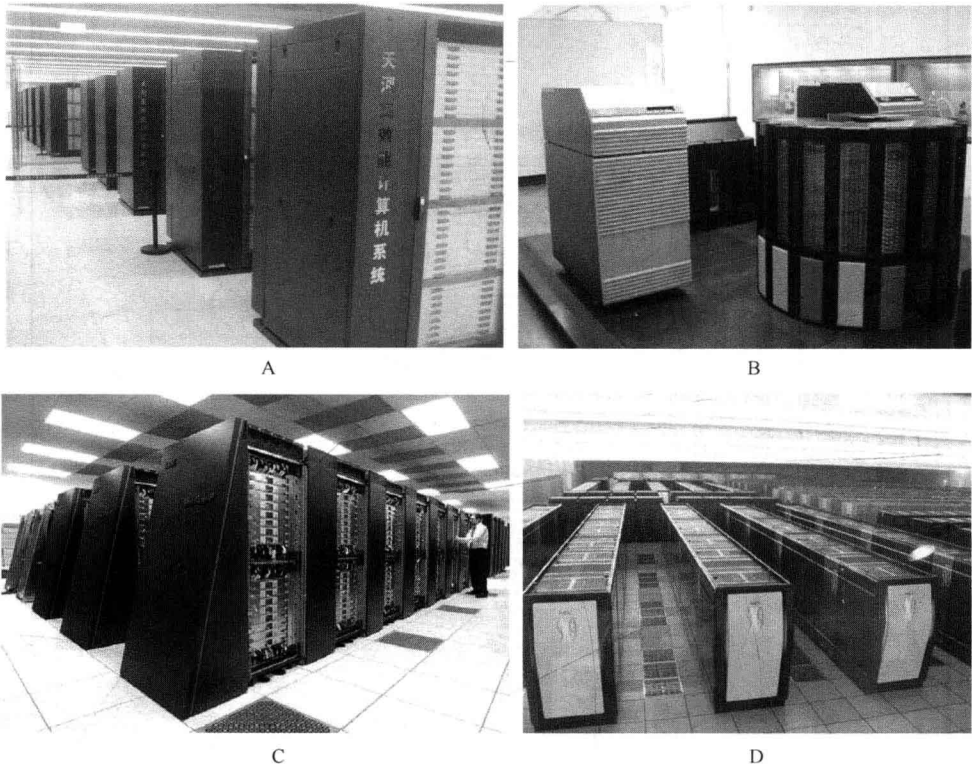


图 1.6 中国“天河二号”(A)、美国“克雷-2”(B)和“IBM 蓝色基因”(C)、日本 NEC“地球模拟器”(D)(<http://www.google.com.hk/>)