**高性能科学计算的基础算法与可计算建模重大研究计划**

**2016年度项目指南**

本重大研究计划以实际需求为牵引，从基础研究入手，加强科学计算领域的重要基础科学问题研究，设计高效基础算法，建立满足实际精度要求的可计算模型，提高利用计算机解决科学与工程问题的能力，为前沿科学研究和重大需求提供进一步的科学计算支撑，有力地促进科学计算硬件、软件协调发展，促进数学与其他学科的交叉融合，推动科学计算乃至科学技术的跨越发展。

**一、科学目标**

　　本重大研究计划围绕基础算法与可计算建模这一主线，开展科学计算的共性高效算法、基于机理与数据的可计算建模和问题驱动的高性能计算与算法评价研究，推动我国高性能科学计算的发展，为解决科学前沿和国家需求中的瓶颈问题提供关键的数值模拟技术和方法支撑。

**二、 核心科学问题**

　　（一） 数值计算的共性高效算法。

　　1. 微分方程高效高精度的格式构造与分析；

　 2. 复杂数据处理的快速方法；

　　3. 不确定与复杂目标函数的优化方法。

　　（二）基于机理与数据的可计算建模。

　　1. 典型物理模型的耦合与分析；

　　2. 超高维数据的稀疏表达；

　　3. 机理与数据的混合建模。

　　（三）问题驱动的高性能计算与算法评价。

　　1. 多物理过程耦合条件下的数值模拟与算法评价；

　　2. 基于数据提取和分析的计算与算法评价；

　　3. 模型和数据互补的计算与算法评价。

**三、2016年度拟资助研究方向**

　　2016年度是本重大研究计划实施的第6年，根据前期资助布局和整体发展的需要进入集成升华阶段，主要以集成项目和重点支持项目予以资助。与下面公布的重点资助方向关系不紧密的项目申请将不予受理。

**（一）集成方向。**

　　集成项目将在前期资助的培育项目和重点支持项目中，从有突破苗头的研究方向中遴选出优秀项目进行整合，为重大研究计划后期的总体集成服务。本次征集的集成方向：

　　1．随机哈密尔顿偏微分方程高效数值方法。

　　针对具有辛、多辛几何结构和统计物理特性的随机哈密尔顿偏微分方程，研究保持原模型结构和特性的高效数值方法的构造、分析与实现，特别是研究计算效率、计算准确性以及计算复杂性等关键科学问题，提高对源于物理和经济金融等领域的随机问题的长期跟踪、预测和模拟能力，为上述领域中与随机算法相关的算法难题的解决提供有效工具。

　2.医学影像配准与融合的建模和算法。

　　针对医学图像对比度低、边界模糊、异质性、伪影和组织器官重叠等特点，研究各种医学图像的非刚性配准问题和融合问题的可计算建模方法，构造基于几何、变分和深度学习的特征提取算法，发展相关的异构数据配准与融合问题的数学理论，建立高质量的图像三维重建模型和算法，提高医学图像分析与处理的质量，为精准诊断和治疗提供技术支撑。

　　3.重金属材料复杂结构及相变的多尺度算法与验证。

　　针对镍、铊、钨钼合金等重金属材料的复杂结构及其相变问题，研究在磁驱动强荷载条件下的可计算建模方法，揭示其内在机理，建立多物理场相互作用的强耦合模型，探索模型中参数的选取方法，发展高效算法开展模拟研究，结合实验数据验证模型和算法的有效性。

　　4.辐射输运过程的模型约化与快速算法。

　　针对高能量密度物理研究中辐射输运过程的数值模拟，发展新的约化模型和新型算法，解决离散纵标方法所固有的射线效应和球谐函数方法的出负等问题。以惯性约束聚变（ICF）中的输运过程为例，通过与已有数值模拟结果和物理分析结果以及实验数据的比较，验证新约化模型和新型算法的有效性和高效性，解决ICF数值模拟中若干瓶颈难题。

　　5.重大脑精神疾病的遗传影像学分析理论与计算方法。

　　利用国际遗传影像学数据库，收集国内重大脑疾病的数据，发展现代统计学和机器学习的理论和方法，解决目前不同尺度海量动态数据的大规模统计计算中的若干瓶颈问题，如多中心、多尺度、多模态、多属性动态数据统计模型的建立和验证，发展相关的有效计算方法和统计理论基础，并应用于挖掘几类重大脑精神疾病（如精神分裂症、自闭症、抑郁症）在分子、中间表型和表型之间的关联和因果关系，为临床诊疗服务。

　　6.反问题算法及其在多频声波测井中的验证。

　　结合基于光学、电磁场、声波数据的偏微分方程反问题的最新研究成果，发展偏微分方程反问题快速有效算法，并应用于石油勘探中的多频率声波测井，给出储层参数在周向、纵向以及径向上的精确反演结果。结合多频率声波测井实验数据，验证算法的正确性与有效性，进一步提高声波测井法提取地球物理储层参数的精度。

**（二）重点支持项目。**

　　根据前期资助布局和整体发展的需要，2016年度重点支持如下研究方向。特别鼓励青年人申请重点支持项目。

　　1．偏微分方程特征值问题的数值方法与理论。

　　针对量子化学、材料科学等领域中的偏微分方程特征值问题，发展快速稳定的（弱）有限元算法、高效实用的迭代方法、网格自适应方法等，研究相关的数学理论，构造适应高性能计算机的可扩展并行算法，实现逾万处理器核上的高效数值模拟。

　　2．稀疏信号恢复的理论与快速算法。

　　结合压缩感知、低秩矩阵恢复、逼近论的研究成果，开展基于不完全观测下的稀疏信号恢复研究，特别是针对相位缺失观测情形，研究最小观测次数问题；结合物理动态模型与稀疏低秩模型，研究正问题与反问题的快速算法，提高基于不完全观测下图像重建的质量与速度，建立不完全观测下信号及矩阵恢复的理论基础并提出相应的有效算法。

　　3．油气领域中的大规模非凸优化问题的高效算法。

　　针对页岩油/气勘探中的大规模非凸优化共性问题（例如带约束的分式优化和非线性最小二乘问题），建立非凸、非二次优化数学模型，研究具有共性的高效优化方法，对油气领域中的大规模大数据页岩微纳米孔隙结构的三维重构等典型优化问题开展实证分析。

　　4．相场模型的高精度算法及其应用。

　　针对先进复合材料合成、反常扩散现象等研究领域中的复杂多相问题，侧重采用并行和自适应算法等现代计算工具，提出与物理定律相容的新相场模型，构造保持模型固有特性的高精度算法。分析算法的稳定性，建立相关的收敛性理论。

　　5．磁流体波传播的高阶算法与验证。

　　针对磁流体中波传播所产生的复杂现象，通过数值模拟研究电磁波与材料电子之间的相互作用，特别是不同尺度下电子流体对电磁波传播模式的影响，建立基于多物理场耦合的可计算模型，设计相关模型的高阶算法，并通过典型现象和实验数据验证建模的正确性和算法的有效性。

　　6．大型客机降噪的可扩展并行算法及软件实现。

　　针对商用客机降噪的数值模拟难点，发展气动噪声的直接求解数学方法及优化策略。基于P级以上国产超级计算机系统，发展适应其体系结构的高精度高效并行算法和完成算法的软件化，实现大规模、高精度、高效的大型商用客机气动噪声数值计算（并行度达十万核以上量级），通过实验数据验证算法和软件实现的正确性，并将软件应用于商用客机的优化设计。

　　7．血管流及其异常现象的建模和算法。

　　针对人体全身或局部血液流动异常，研究问题导向的可计算建模方法，建立包含三维血流和血管壁相互作用、脉搏波传播、血流自调节和血管适应性生长的耦合模型，利用医学影像技术和稀疏优化方法等手段提取模型中的主要参数，发展快速算法，开展血管流及局部异常现象模拟研究，并通过实际医学影像验证模型和算法的有效性。

　　8．复杂系统的资料同化理论和方法。

　　针对复杂系统的资料同化问题，基于物理模式（预报系统）和观测方程（观测算子），结合背景先验讯息，研究其数学理论与高效算法，建立新型混合滤波同化方法。分析非线性模式和观测算子及其误差、非高斯误差分布对同化系统性能的影响，提出有效应对方法，并应用于大气、海洋、生物等领域的大规模、非直接观察资料的同化问题。

**四、2016年度资助计划**

　　本重大研究计划2016年度计划资助直接费用3300万元。集成项目的直接费用平均资助强度为250万元/项，重点支持项目的直接费用平均资助强度为200万元/项。项目资助期限均为3年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2019年12月31日”。资助项目数将根据申请情况和项目布局的实际需要而定。

**五、申报要求及注意事项**

　　（一）申请条件。

　　本重大研究计划项目申请人应当具备以下条件：

　　1.具有承担基础研究课题的经历；

　　2.具有高级专业技术职务（职称）。

　　在站博士后研究人员以及正在攻读研究生学位的人员不得申请。

　　（二）限项规定。

　　1. 具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请（包括申请人和主要参与者）和正在承担（包括负责人和主要参与者）以下类型项目总数合计限为3项：面上项目、重点项目、重大项目、重大研究计划项目（不包括集成项目和战略研究项目）、联合基金项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目、优秀青年科学基金项目、国家杰出青年科学基金项目、重点国际（地区）合作研究项目、直接费用大于200万元/项的组织间国际（地区）合作研究项目（仅限作为申请人申请和作为负责人承担，作为参与者不限）、国家重大科研仪器研制项目（含承担科学仪器基础研究专款项目和国家重大科研仪器设备研制专项项目）、优秀国家重点实验室研究项目，以及资助期限超过1年的应急管理项目。

　　2.申请人（不含参与者）同年只能申请1项重大研究计划项目。上一年度获得重大研究计划项目资助的项目负责人（不包括集成项目和战略研究项目），本年度不得再申请重大研究计划项目。

　　（三）申请注意事项。

　　1.申请书报送日期为2016年7月25日至29日16时。

　　2.本重大研究计划项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

　　（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本项目指南和《2016年度国家自然科学基金项目指南》中申请须知和限项申请规定的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

　　（2）本重大研究计划旨在紧密围绕核心科学问题，将对多学科相关研究进行战略性的方向引导和优势整合，成为一个项目集群。重点支持项目要求不同研究领域的人员（鼓励由从事算法、问题、软件3个领域研究的人员结合）组织队伍进行项目申请。申请人应根据本重大研究计划拟解决的具体科学问题和项目指南公布的拟资助研究方向，自行拟定项目名称、科学目标、研究内容、技术路线和相应的研究经费等。

　　（3）申请人登录科学基金网络信息系统（以下简称信息系统，没有系统账号的申请人请向依托单位基金管理联系人申请开户），按照撰写提纲要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“重点支持项目”或“集成项目”，附注说明选择“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

　　重点支持项目的合作研究单位的数量不得超过2个，集成项目的合作研究单位数不得超过4个；集成项目的参与者必须是重大研究计划的实际贡献者，不得超过9人。

　　（5）申请人应当按照重大研究计划申请书的撰写提纲撰写申请书，应突出有限目标和重点突破，明确对实现研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。

　　如果申请人已经承担与本重大研究计划相关的其他科技计划项目，应当在报告正文的“研究基础”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

　　（6）申请人应根据《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》的有关规定，以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目资金预算表》。项目资金分为直接费用和间接费用，申请人仅需填写直接费用部分，间接费用由系统自动生成。多个单位共同承担一个项目的，项目申请人和合作研究单位的参与者应当分别编制项目资金预算，经所在单位审核后，由申请人汇总编制。

　　（7）申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料，下载并打印最终PDF版本申请书，向依托单位提交签字后的纸质申请书原件。

　　（8）申请人应保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　3. 依托单位应对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行审核，并在规定时间内将申请材料报送国家自然科学基金委员会。具体要求如下：

　　（1）应在规定的项目申请截止日期（2016年7月29日16时）前提交本单位电子版申请书及附件材料，并统一报送经单位签字盖章后的纸质申请书原件（一式一份）及要求报送的纸质附件材料。

　　（2）提交电子版申请书时，应通过信息系统逐项确认。

　　（3）报送纸质申请材料时，还应包括本单位公函和申请项目清单，材料不完整不予接收。

　　（4）可将纸质申请书直接送达或者邮寄至国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组。采用邮寄方式的，请在项目申请截止日期前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”， 请勿使用邮政包裹，以免延误申请。

　　4. 申请书由国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组负责接收，材料接收工作组联系方式如下：

　　通讯地址：北京市海淀区双清路83号国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组（行政楼101房间）

　　邮　　编：100085

　　联系电话：010-62328591

　　（四）其他注意事项。

　　1.为实现重大研究计划总体科学目标和多学科集成，获得资助的项目负责人应当承诺遵守相关数据和资料管理与共享的规定，项目执行过程中须关注与本计划其他项目之间的相互支撑关系。

　　2.为加强项目的学术交流，促进项目群的形成和多学科交叉与集成，本重大研究计划将每年举办一次资助项目的年度学术交流会，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人有义务参加本重大研究计划指导专家组和管理工作组所组织的上述学术交流活动。