**高性能科学计算的基础算法与可计算建模重大研究计划2017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、2017年度重点资助研究方向**

　　2017年度是本重大研究计划实施的第7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，主要以集成项目予以资助。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。本年度计划资助的集成方向如下：

　　1.细胞异常增殖早期信号的可计算建模

　　集成细胞周期的分子调控网络构建、生物分子网络标记物识别、多细胞体系动力学可计算建模、细胞生长代谢与竞争调控机制的研究成果，以模型驱动和数据驱动的研究方式，开展基于细胞生长调控的分子机制与宏观动力学的多尺度计算建模的研究，揭示异常增长早期信号的量化特征，并通过实验数据等验证建模和算法的置信度。

　　2.非线性特征值计算的方法与应用

　　针对微观物质结构数值模拟中的非线性偏微分算子特征值问题，发展适应E级计算机的高可扩展自适应计算方法和高效非线性迭代法，研究其可靠性与有效性的数学理论，为微观物质结构模拟软件提供新型高效算法，并通过典型问题（如钚表面氧化老化问题）的求解验证算法的有效性。

　　3.致密油气储层地球物理表征与甜点检测

　　针对致密油气储层的地震波响应与甜点(sweet spot)检测等科学问题，建立具有强间断面、强空间非均质性等特点的致密油气储层中地震波的控制方程，并提出高效高精度数值求解方法，解决致密油气储层甜点的地球物理参数表征、储层空间展布与岩性物性反演、地震数据表示与特征提取、波场/地震数据的稀疏表示与重建等问题，选择我国典型目标区进行应用验证，使甜点预测的成功率显著提高。

　　4.高维数据中的非线性分类与降维

　　针对高维数据中线性不可分的分类问题及非线性降维问题，探索迹比率优化方法在分类问题中的应用，研究非线性低维流形的识别及建模方法，发展求解相关非线性特征值问题、谱聚类稀疏模型的高效算法，结合实际数据验证模型与算法的有效性。

　　5.大气科学中数据同化的数学理论与方法

　　针对大气预报微分方程模式（型）中给定测量数据不足和噪声扰动的困难，研究基于预测和分析的数据同化的数学理论与方法。围绕背景场协方差矩阵的构造与高效计算，解决变分资料同化中罚项权重的有效选取、多参数优化和非光滑参数重建等问题。结合观测偏差订正和观测误差优化等关键问题，验证算法的有效性，提高从卫星遥感数据中反演的温度和湿度参数精度，改进数值天气预报的准确性。

　　6.飞机优化设计的基础算法及其验证

　　针对飞机结构十万量级以上设计变量优化敏度分析中导致的大型稀疏代数系统，发展高效的并行求解方法，大幅提升敏度解析分析的计算效率；针对全机弹性气动力及平衡载荷的静气动弹性耦合系统，研究基于气动高阶面元法的三维气动/结构直接耦合的高效算法，显著提高弹性气动力和弹性载荷计算精度和效率；结合大展弦比飞机型架外形设计对上述算法进行应用验证。

　　**四、2017年度资助计划**

　　2017年度本重大研究计划拟安排资助直接费用约1400万元，直接费用平均资助强度为160万元/项，资助期限为2年。申请书中研究期限应填写“2018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。

　　具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请或参与申请本重大研究计划集成项目不计入限项范围。

　　（三）申请注意事项。

　　1.申请书报送日期为**2017年5月15日**。

　　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《2017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。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。

　　与公布的重点资助方向关系不紧密的项目申请将不予受理。

　　（3）申请人登录科学基金网络信息系统https://isisn.nsfc.gov.cn/（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），按照撰写提纲及相关要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“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。**

　　集成项目的合作研究单位不得超过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，明确对实现本重大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）申请人应当认真阅读《2017年度国家自然科学基金项目指南》中预算编报须知的内容，严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》、《关于国家自然科学基金资助项目资金管理有关问题的补充通知》（财科教〔2016〕19号）以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的要求，认真如实编报《国家自然科学基金项目资金预算表》。

　　（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，下载打印最终PDF版本申请书，并保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　（8）申请人应及时向依托单位提交签字后的纸质申请书原件以及其他特别说明要求提交的纸质材料原件等附件。

　　3. 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

　　4. 本重大研究计划咨询方式：

　　国家自然科学基金委员会数理科学部数学科学处

　　联系电话：010-62327191

　　（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，项目执行过程中应关注与本重大研究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。