

国防基础科研核科学挑战专题

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域

第三批项目申报指南

国防基础科研核科学挑战专题（简称“挑战专题”）是由中央财政专门投入，围绕国家战略安全需求，以突破基础性前瞻性的科学挑战问题、培养高端基础科研人才队伍为核心任务的专项科研计划。

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域（简称“领域”）是挑战专题围绕高性能科学与工程计算设立的领域。领域总体目标是：面向百亿亿次计算，前瞻性凝练和解决当前数值模拟计算方法随网格分辨率的持续提升所呈现的计算精度下降和健壮性差、计算方法和高效能实现不适应于未来高性能计算机体系结构的基础科学问题和关键技术，形成重大基础创新研究成果，培养高水平基础研究人才队伍，为我国武器物理数值模拟软件平台与国产高性能计算机协同发展、最终具备科学预测能力奠定坚实基础。

领域由北京应用物理与计算数学研究所/中物院高性能数值模拟软件中心牵头组织实施，下设4个研究方向，分别为：高精度高分辨率计算方法体系研究方向（方向一）、百亿亿次高效能实现研究方向（方向二）、高性能并行计算方法体系研究方向（方向

三)、高性能多尺度计算方法研究方向(方向四),各方向下设若干课题。

领域第三批项目的申报指南共有 7 项,每项指南对应 1 个课题,每个课题由若干中国工程物理研究院(简称“院”)的团队和若干院外团队联合承担。方向一和方向二所属课题的执行周期为 2019 年-2020 年底;方向三和方向四所属课题的执行周期为 2019 年-2021 年底。

一、受理要求:

1.自指南发布之时至 2019 年 8 月 14 日(周三) 17:00 受理意向团队的《自荐表》;

2.请前往领域网站(<http://www.caep-scns.ac.cn/tzzt.php>),进入领域网络管理平台实名注册并登录后,在线填写并提交《自荐表》,已有账号的人员可以直接登录平台;

3.请下载系统生成的《自荐表》,打印纸制材料(一式三份),自荐团队负责人签字,所在单位盖章后,邮寄至:北京市海淀区花园路六号院中物院软件中心,挑战专题领域管理办公室收,联系电话为 010-61935799, 18910329399。

二、特别提示:

1.自荐团队如已承担中物院的其他项目,则本次申请领域资助的研究内容不得与前者重复。

2.自荐团队由 1-2 名在职人员(1 名团队负责人,可以增加 1 名青年骨干)和至少 1 名基础好的低年级研究生组成。

3.为了准确理解领域定位，请您前往领域网站，认真阅读《国防基础科研核科学挑战专题“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域实施管理细则》。

4.咨询热线：

赵 帅，18910329399，010-61935799

于翠影，010-61935588

5.技术支持：

方红杰，18811378436，010-61935700

国防基础科研核科学挑战专题

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域

第三批项目申报指南

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域管理办公室

2019年7月

目 录

方向一：高精度高分辨率计算方法体系研究方向.....	1
TZT2019-A1：面向界面破碎和弹塑性断裂精密建模的流体力学计算方法研究	1
TZT2019-A2：低计算复杂度的辐射和中子输运计算方法研究	1
TZT2019-A3：辐射流体力学保物理特性的计算方法研究	2
方向二：百亿亿次高效能实现研究方向.....	2
TZT2019-B1：适应精密建模与隐式离散的百亿自由度线性可扩展数值并行算法研究.....	2
TZT2019-B2：百万核数值模拟性能优化与预测方法研究.....	3
方向三：高性能并行计算方法体系研究方向.....	3
TZT2019-C1：复杂装备与工程问题多物理耦合精密建模的并行计算方法研究.....	3
方向四：高性能多尺度计算方法研究方向.....	4
TZT2019-D1：适应核相关材料辐照腐蚀效应和冲击损伤效应建模的多尺度高通量计算方法研究	4

方向一：高精度高分辨率计算方法体系研究方向

TZZT2019-A1：面向界面破碎和弹塑性断裂精密建模的流体力学计算方法研究

研究目标：

强冲击作用下的可压缩多介质流体发生大变形所导致的弹塑性断裂现象和轻重介质之间界面破碎现象普遍存在，将面向界面破碎和弹塑性断裂的全过程，发展三维高精度多介质 ALE 算法和欧拉算法，克服现有算法因健壮性较差而不能提高网格分辨率和精度的算法瓶颈，提升对典型模型界面破碎等多介质大变形问题的模拟能力。

研究内容：

(1) 三维高精度多介质 ALE 算法和欧拉算法；

(2) 可求解层裂、剪切断裂的弹塑性流体力学损伤断裂方法和相场断裂算法。

备注：本课题拟资助经费为 1000-1300 万元，拟支持院内团队和 3-6 个院外团队；选择“研究内容”中的一项撰写《自荐表》即可，下同。

TZZT2019-A2：低计算复杂度的辐射和中子输运计算方法研究

研究目标：

计算量大是辐射和中子输运方程计算的重要瓶颈问题。辐射和中子输运方程维数高自由度大，并且辐射输运和物质能量之间存在非线性强耦合过程，导致辐射和中子输运方程的计算复杂度极高。期望开展辐射或中子输运方程的高效迭代算法、自适应算法、渐近保持格式、模型约化方法等计算方法研究，给出能够有效降低辐射或中子输运方程计算复杂度，提高计算效率和并行效率的计算方法。

研究内容：

(1) 有效降低辐射或中子输运方程计算复杂度，提高计算效率的计算方法；

(2) 辐射或中子输运方程高可扩展并行计算方法。

备注：本课题拟资助经费为 600-900 万元，拟支持院内团队和 3-6 个院外团队。

TZZT2019-A3: 辐射流体力学保物理特性的计算方法研究

研究目标:

针对高温高压下多介质系统的数值模拟，现有的辐射流体力学和中子输运计算方法出现非物理数值现象，难以同时保持多个重要的物理特性并实现快速求解，预期将分析凝炼实际计算方法中存在的瓶颈问题，提出实用的保持较多物理特性的计算方法。

研究内容:

- (1) 保物理特性的高效的辐射计算方法及基础理论；
- (2) 减弱非物理数值振荡且减少计算量的粒子输运计算方法；
- (3) 保物理特性的流体力学计算方法。

备注: 本课题拟资助经费为 800-1100 万元，拟支持院内团队和 3-6 个院外团队。

方向二: 百亿亿次高效能实现研究方向

TZZT2019-B1: 适应精密建模与隐式离散的百亿自由度线性可扩展数值并行算法研究

研究目标:

针对精密化建模的复杂物理特征和数值离散隐式求解导致传统数值算法无法实现线性扩展的问题，发展适应精密建模和隐式离散的超大规模低计算复杂度数值并行算法，实现百亿自由度的高效网格生成和线性复杂度高效隐式求解，突破百亿自由度计算规模瓶颈。

研究内容:

- (1) 面向辐射流体力学计算长时间积分的新型并行数值算法；
- (2) 面向结构力学分析的热-力-接触耦合计算并行数值算法；
- (3) 面向半导体器件电磁效应分析的漂移扩散方程离散系统并行数值算法；
- (4) 面向系统级封装电磁效应分析的时谐 Maxwell 方程离散系统并行数值算法；
- (5) 面向复杂几何保持特征离散的大规模并行六面体网格生成算法。

备注: 本课题拟资助经费为 700-1000 万元，拟支持院内团队和 3-6 个院外团队。

TZZT2019-B2: 百万核数值模拟性能优化与预测方法研究

研究目标:

针对现有并行实现与性能优化方法在自主 CPU 百万核上的数值模拟应用浮点性能转化率低的问题, 发展百万核量级性能优化与预测方法, 提高目标应用数值模拟平台核心计算模块在自主 CPU 亿亿次计算机系统上的浮点效率, 支撑目标应用数值模拟的性能评估与预测。

研究内容:

- (1) 浮点运算模式驱动的自主 CPU 结点内性能优化方法;
- (2) 面向自主 CPU 百万核并行的应用特征驱动高效数据通信方法;
- (3) 面向自主 CPU 百万核并行的应用特征驱动网格剖分与负载均衡算法;
- (4) 面向超大规模时变数据集的交互可视化与质量评估方法;
- (5) 面向自主 CPU 亿亿次数值模拟的浮点字长理论与优化方法;
- (6) 复杂数值模拟应用程序性能评估与预测方法。

备注: 本课题拟资助经费为 900-1200 万元, 拟支持院内团队和 3-6 个院外团队。

方向三: 高性能并行计算方法体系研究方向

TZZT2019-C1: 复杂装备与工程问题多物理耦合精密建模的并行计算方法研究

研究目标:

围绕结构热力响应、冲击波毁伤、水下爆炸效应、电磁脉冲效应等的分析与等级评估中多物理耦合精密建模与模拟挑战性问题, 发展适应于复杂工程场景的高精度、高效多物理耦合并行计算方法。

研究内容:

- (1) 结构热力耦合响应(含断裂)分析高精度、高效并行算法;
- (2) 冲击波建筑结构毁伤等级评估流-固耦合并行算法;
- (3) 水下爆炸效应毁伤评估多相流-固强耦合并行算法;
- (4) 强电磁脉冲效应评估电磁-热-力耦合并行算法。

备注: 本课题拟资助经费为 1100-1400 万元, 拟支持院内团队和 3-6 个院外

团队。

方向四：高性能多尺度计算方法研究方向

TZZT2019-D1：适应核相关材料辐照腐蚀效应和冲击损伤效应建模的多尺度高通量计算方法研究

研究目标：

围绕辐照和腐蚀老化效应特征，建立从辐照缺陷（腐蚀产物）到微结构演化（产物生长）的多尺度计算方法，支撑机理认识和物理建模，同时建立材料冲击性质的高通量计算方法，支撑冲击损伤建模。

研究内容：

- （1）适用于金属的较低时间复杂度密度泛函理论计算方法；
- （2）材料体结构老化的长时间演化模拟方法；
- （3）表面腐蚀形貌演化中非均匀性的可计算方法；
- （4）强关联体系自由能的高效算法；
- （5）晶体结构弛豫的高效算法；
- （6）精细自由能面的高通量计算方法。

备注：本课题拟资助经费为 1100-1400 万元，拟支持院内团队和 3-6 个院外团队。