

附件 3

“高性能计算”重点专项 2023 年度项目申报指南

(征求意见稿)

为落实“十四五”期间国家科技创新有关部署安排，国家重点研发计划启动实施“高性能计算”重点专项。根据本重点专项实施方案的部署，现发布 2023 年度项目申报指南。

本重点专项总体目标是：在 10EF 级高性能计算机的体系结构、新型处理器结构、高速互连网络、整机基础架构、软件环境、面向应用的协同设计、大规模系统管控与容错等核心技术方面取得突破，依托自主可控技术，研制适应应用需求的 10EF 级（千亿亿次）高性能计算机系统，使我国高性能计算机的性能在“十四五”末期保持世界领先水平。研发 10EF 级计算机的基础算法库、编译器及性能优化等支撑软件，研发一批重大关键领域/行业的高性能计算应用软件，构建可持续发展的国产高性能计算应用生态环境。探索新型高性能计算服务机制，建立具有金字塔层次结构和全局调度能力的国家超级计算基础设施，依托该设施，研发重点行业 and 关键领域的应用平台，提高国家超级计算基础设施的应用服务能力。

2023 年度指南部署坚持问题导向、分步实施、重点突出的原则，围绕高性能计算应用技术方向，启动 7 项指南任务。

1. 高性能计算应用

1.1 面向新一代国产超算系统的高分辨率气候系统模式软件（应用示范类）

研究内容：围绕精准气候预测在我国防灾减灾中的重大需求，研制中国区域 1km 高分辨率海-陆-气多圈层耦合区域气候模式与区域气候预测系统。充分利用新一代国产超算系统算力，提升我国气候预测的精准度，支撑我国防灾减灾和极端气候事件应对。主要研究：适合中国复杂地形和极端气候的 1km 分辨率级别区域气候模式、耦合人类活动的精细化陆面模式和适合河口海岸精细化模拟的非结构化网格海洋模式；区域 1km 分辨率海-陆-气耦合的资料同化系统；区域 1km 分辨率海-陆-气耦合的气候模拟系统；区域气候模拟系统在国产高性能计算机上的大规模并行计算技术；精细化气候预测业务示范应用。

考核指标：研发高分辨率全球模式驱动的中国区域 1km 高分辨率海-陆-气耦合区域气候模式和气候预测系统，软件部署于国产高性能计算机系统，并对外开放使用；对标国际同类系统，功能和预测精度相当且性能超越，在项目结束时最高水平国产超算系统上实现全机规模高分辨率气候模式并行计算，并可扩展至新一代国产高性能计算机；以百万核为基准，并行规模扩展 10 倍时并行效率不低于 30%；混合精度版本的模拟结果满足工程精度要求，性能提升超过 10%；基于高分辨率耦合区域气候模式的中国区域集合气候预测系统，千万核以上规模下可在 24 小时内完成全国 1km 分辨率、20~30 个集合成员，未来 6 个月的气候

预测；项目须将研制软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；软件在行业/领域取得实际应用，渗透率不低于 10%，并为不少于 5 家重要单位/机构提供气候预测服务，取得有影响力的研究/应用成果。

关键词：高性能计算，高性能应用软件，气候模式，气候预测

1.2 面向新一代国产超算系统的量子电路模拟软件系统（应用示范类）

研究内容：围绕量子计算的研发需求，研制面向新一代国产超算系统的量子电路模拟软件和量子计算云平台，提供功能验证、性能分析及保真度验算等功能，为研究人员提供量子计算机设计、量子算法开发和量子容错机制研究的模拟验证平台。具体包括：面向大规模量子电路模拟的张量网络路径搜索优化方法和高效张量网络模拟方法，有效降低量子计算模拟复杂度，满足 1000 比特规模量子算法设计和量子计算机验证的计算需求；带噪声量子电路模型的高效张量网络模拟方法，实现 1000 量子比特规模的带噪声量子线路模拟，有效支持基于中等规模带噪声量子计算机进行容错量子计算的高效仿真；研究面向千万核以上高性能计算机体系结构的量子电路模拟极大规模多级并行算法、众核并行优化方法和自动混合精度算法，支持超大规模并行和混合精度模拟。

考核指标：研发面向新一代国产超算系统的量子电路模拟器软件，部署于国产高性能计算机系统，并对外开放使用；软件支

持 100~1000 量子比特规模的量子应用开发和带噪声低深度的量子线路模拟，在项目结束时最高水平的国产超算系统上实现全机规模并行计算，并可扩展至新一代国产高性能计算机；在 4000 万核规模下的并行效率不低于 80%；实现国际主流量子电路的 100 万无关构型采样的模拟，保真度高于实际量子电路，模拟时间小于 10 小时；实现不少于 2 种噪声模型，为国产量子计算机硬件设计提供依据；项目须将研制软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；构建于国产高性能计算机系统的量子计算云平台，培育不少于 2 个量子优势应用，协助 5 个以上国产量子计算机完成软硬件协同设计。

关键词：高性能计算，高性能应用软件，量子计算，量子计算模拟。

1.3 面向新一代国产超算系统的宇宙学高性能模拟软件（应用示范类）

研究内容：围绕天文学发展对宇宙学模拟规模和精度的迫切需求，研制面向新一代国产超算系统的宇宙学高性能模拟软件，实现宇宙学星系形成的流体力学模拟，显著提升宇宙学模拟的预测能力。重点研究高可扩展、高并行加速的宇宙学数值模拟技术，主要包括：研究前沿的星系形成物理过程的模拟方法，超大规模的 N 体和流体力学问题求解算法；研究宇宙引力场的超大规模偏微分方程高效并行求解方法，利用多尺度模型和观测结果研究基于物理的初值和预条件子构造算法，研究区域分解和处理器分组算法，解决全局通信和负载均衡瓶颈；针对新一代超算系统架

构，研究多尺度物理模型间的交叉融合，研究物理模型与超算异构节点之间的映射与实现，进而实现高可扩展、高并行加速的宇宙学数值模拟软件。

考核指标：研发面向新一代国产超算系统的宇宙学高性能模拟软件，物理学功能、模拟算法先进性与国际主流软件（如GreeM、Gadget-4等）相当，并行加速能力不低于国际主流软件，部署于国产高性能计算机系统，并对外开放使用；暗物质模拟的目标粒子数超过6万亿，能够处理原位数据；N体和流体力学模块在项目结束时最高水平的国产超算系统上实现全机规模并行，并可扩展至新一代国产高性能计算机；以百万核为基准，并行规模扩展十倍时的并行效率不低于30%，核心模块的并行加速能力不低于硬件峰值性能的20%；项目须将研制软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；形成有影响力的研究成果，在行业或领域内取得实际应用，渗透率不低于30%；支撑空间站望远镜、SKA等重大科学工程。

关键词：高性能计算，高性能应用软件，宇宙学模拟，多尺度物理模型的耦合。

1.4 面向新一代国产超算系统的电磁计算软件系统及应用（应用示范类）

研究内容：围绕重大工业装备对高精度、大规模和高效率电磁仿真技术的迫切需求，开展频域、时域全波电磁算法的高可扩展并行策略研究，突破大型稠密与稀疏电磁矩阵方程直接求解、负载均衡控制、数据高效通信、异构加速等高性能电磁计算中的

共性关键技术，构建涵盖高/低阶矩量法、有限元法、时域间断伽略金法等算法的千万核级并行全波电磁算法体系，研制适配新一代国产计算机的大规模并行电磁仿真软件，实现带罩阵列天线辐射、载体平台天线布局、复杂微波器件网络参数等的高精度电磁模拟，显著提升飞行器等重大装备的电磁设计能力。

考核指标：研发面向新一代国产超算系统的大规模并行电磁仿真软件，部署于项目结束时最高水平的国产高性能计算机系统，并对外开放使用；软件功能与国际主流同类软件相当，具有完善的前后处理功能；软件具备包括有限元法、高阶矩量法、低阶矩量法、多层快速多极子法、时域有限差分法、时域间断伽略金法等多种算法在内的全波算法求解器，至少 2 种全波算法求解器实现数千万处理器核以上规模运行；至少 1 种全波算法支持项目结束时最高水平的国产高性能计算机系统全机规模并行，且扩展至新一代国产高性能计算机时强可扩展性并行效率不低于 50%，其他全波算法从百万核扩展至千万核时并行效率不低于 30%；项目须将研制软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；软件在行业/领域取得实际应用，独立法人单位用户不少于 50 个，形成飞机、舰船等载体平台中的复杂阵列天线全波仿真应用示范，在至少 2 个行业取得重要研究/应用成果。

关键词：高性能计算，高性能应用软件，电磁计算，电磁仿真。

1.5 面向新一代国产超算系统的飞行器多学科联合设计优

化软件系统 (应用示范类)

研究内容：围绕飞行器设计中多学科联合优化的迫切需求，研究基于高性能计算的飞行器空气动力、飞行力学、载荷、结构强度和气动弹性等多学科综合优化技术；研究面向国产超算架构的多学科多变量优化求解方法及大规模并行优化技术，突破六自由度状态飞行器的全机千万量级设计变量多学科优化带来的算法和并行计算瓶颈；研究用于加速飞行器数值仿真计算的人工智能代理模型，以及训练数据快速生成技术；研究在国产超算系统上的飞行器多学科、大变量综合优化 workflow 构建方法和高效实现技术；研制面向国产超算架构的飞行器多学科联合优化设计软件系统，支撑基于新一代国产超算系统的飞行器多学科联合优化设计应用，显著提升飞行器精细化设计水平和设计效率。

考核指标：研发面向新一代国产超算系统的飞行器多学科联合设计优化软件，部署于项目结束时最高水平的国产高性能计算机系统，并对外开放使用；软件功能与国际主流同类软件相当且性能超越，支持飞行器空气动力、飞行力学、载荷、结构强度和气动弹性的多学科综合优化，支持六自由度状态飞行器的全机千万量级设计变量多学科优化，具备气动力、结构、载荷、气动弹性不同网格的协同计算能力；基于人工智能的代理模型可用于飞行器空气动力学和结构强度求解，相比于传统数值方法，求解速度提升不低于 10 倍，求解精度相当；多学科联合设计优化可实现千万处理器核以上规模运行，以百万核为基准，并行规模扩展 10 倍时的并行效率不低于 30%；项目须将研制软件的可开放版

本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；软件在行业/领域取得实际应用，渗透率不低于 30%，在飞行器重大装备研发设计领域形成应用示范，取得不少于 2 项具有重大影响力的成果。

关键词：高性能计算，航空，飞行器设计，多学科优化。

1.6 面向新一代国产超算系统的油气藏精细模拟软件系统（应用示范类）

研究内容：围绕油气藏开发中的渗流力学问题，研发面向新一代国产超算系统的油气藏精细模拟软件与计算云平台，提供黑油模拟、组分模拟、热采模拟、反应模拟、非常规油气藏模拟等功能，形成产量预测、生产方案优化、剩余油分布研究的模拟验证平台。具体包括：面向国产超算架构的物质守恒方程和多相平衡方程的高效并行求解技术，支持超大规模并行和混合精度计算；针对强耦合非线性渗流力学方程的可扩展稳健数值计算方法；面向油气资源开发的大规模离散方程组快速求解方法及其异构并行加速技术。

考核指标：研发面向新一代国产超算系统且具有完全自主知识产权的油气多组分渗流模拟软件，部署于项目结束时最高水平的国产高性能计算机系统，并可扩展至新一代国产高性能计算机，对外开放使用，实现在油气开发领域的工业验证；软件开放源代码；支持十亿以上网格规模多相（相数 >2 ）、多组分（组分数 >3 ）渗流数值模拟；适用于黑油、组分、化学驱、热采、非常规油藏开发等模型；建立符合观测数据和地质认识的数值模型，

构建数据驱动的历史拟合方法；核心计算模块实现千万核级并行计算，以百万核为基准，并行规模扩展十倍时的并行效率不低于30%；项目须将研制软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；软件系统在油气开发行业获得应用，行业渗透率达到15%以上，在不少于3个大型油气田增产增效中取得应用验证。

关键词：高性能计算，高性能应用软件，油气勘探，渗流力学。

1.7 面向新一代国产超算系统的高性能材料模拟软件（应用示范类）

研究内容：围绕关键领域新材料研发需求，通过人工智能技术与基础科学研究深度结合的研究方法，突破传统材料研发中微观计算模拟尺度小、精度低、速度慢的关键科学问题，面向新一代国产超算系统，研发满足材料电子、原子尺度计算仿真需求的高性能材料模拟软件，提升材料电子、原子尺度计算模拟的精度、速度和应用范围。主要研究：利用人工智能技术有效降低极高温条件下密度泛函计算复杂度的方法和量子化学精度分子动力学势函数模型的自动化构建方法；利用人工智能预训练模型构建具有密度泛函精度、多元素适用的分子动力学势函数模型；支持10亿原子以上规模且具有密度泛函精度的分子动力学模拟方法及大规模并行实现技术；基于人工智能的材料热力学和动力学性质预测技术及其在多种国产超算架构上的软件实现技术；在航空材料、新能源材料、半导体材料等领域取得示范应用。

考核指标: 研发面向新一代国产超算系统的高性能材料模拟软件，部署于新一代国产超算系统，并对外开放使用；软件面向材料电子、原子尺度计算仿真需求，对标国际同类软件，功能和精度相当且性能超越；在材料电子尺度模拟方面，支持 2000 个原子以上杂化泛函精度的结构优化模拟，支持 1000 eV 的超高温模拟；在分子动力学模拟方面，所构建势函数的精度与量子化学精度相比，R2 不低于 95%；基于人工智能技术构建不少于 5 种元素混合的、能量预测精度 $RMSE < 0.008\text{eV/atom}$ 的分子动力学模拟势函数，支持不少于 10 亿原子规模的分子动力学模拟；核心计算模块以百万核为基准，并行规模扩展十倍时的并行效率不低于 30%；软件基于自主提出的高性能电子结构算法和分子动力学算法，可预测不少于 10 种材料的热力学和动力学性质；软件的可开放版本提交到本专项指定的社区，供开放或开源使用；软件在材料研发行业/领域取得实际应用，行业渗透率达到 5% 以上，并为不少于 5 家重要单位/机构提供材料性质预测服务，取得有影响力的研究/应用成果。

关键词: 高性能计算，高性能应用软件，材料电子，材料数值模拟。