

# 2025年科学计算行业发展 研究报告



算力产业发展方阵  
中国信息通信研究院云计算与数字化研究所  
2026年5月

## 前 言

随着大模型与科学智能应用的加速渗透，决定模型能力上限的关键因素正从更大的参数规模转向更高质量的数据供给：一方面，大模型的训练、对齐与持续迭代对高质量、结构化、可追溯数据集的依赖显著增强，高质量数据已成为决定模型泛化能力与可靠性的关键生产要素。另一方面，在产业与科研场景中，受实验成本高昂、周期漫长、数据敏感性与合规约束严格，以及采集标注标准不一等多重现实因素制约，高质量数据集长期处于稀缺状态；加之真实数据往往难以覆盖长尾工况与复杂条件，致使“有效数据供给不足”成为科学智能规模化落地的核心瓶颈。在这种背景下，算力需求不再局限于通用训练，而是进一步扩展到高精度仿真、高质量数据生成，以及“仿真—训练—验证”协同迭代的全流程能力。在“数据生成—模型训练—生态反馈”的闭环中，科学计算主要承担数据生成与计算验证职责，是高质量科研数据的重要来源，也是科研算力体系的核心支撑。面向这一趋势，双精度与混合精度计算、超大规模并行与高效调度、高速互联与PB/EB级数据吞吐，以及在能效与可控性约束下的系统级协同优化，正在成为科学计算平台演进的共性门槛与重点布局方向。

本报告首先厘清科学计算的产业边界与研究口径，系统阐释其概念内涵，辨析其与传统超算、AI计算的融合演进与本质差异，并构建“技术类型×应用领域”的分类框架，全景映射从上游基础设施、中游平台服务到下游应用场景的产业链结构。

在此基础上，报告深入剖析关键技术趋势与核心门槛，量化测算

市场规模并进行前瞻性预测；同时，聚焦生物医药、高端装备、集成电路、新能源、新材料、合成生物、地球科学及低空经济等八大典型场景进行深度案例解析。最后，报告统筹研判全球与我国的政策布局及产业布局，旨在为产业各方提供一套可对标、可验证、可落地的决策参考依据。

# 目 录

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| 一、 科学计算研究框架与合规口径.....           | 1  |
| (一) 科学计算的概念 .....               | 1  |
| (二) 科学计算与传统超算、AI 计算的融合与差异 ..... | 4  |
| (三) 科学计算行业的分类框架 .....           | 6  |
| (四) 行业研究数据口径 .....              | 10 |
| 二、 科学计算产业链结构与生态体系.....          | 11 |
| (一) 上游：基础设施层 .....              | 13 |
| (二) 中游：计算平台与服务层 .....           | 14 |
| (三) 下游：应用场景层 .....              | 18 |
| 三、 科学计算关键技术趋势与门槛.....           | 20 |
| (一) 传统芯片架构的局限与科学计算挑战 .....      | 20 |
| (二) 科学计算算力、架构与生态的演进趋势 .....     | 21 |
| (三) 科学计算的技术门槛分析 .....           | 25 |
| 四、 市场规模与增速测算.....               | 30 |
| (一) 全球科学计算市场概览 .....            | 30 |
| (二) 中国科学计算市场规模拆分与预测 .....       | 30 |
| (三) 中国市场结构及增长趋势分析 .....         | 33 |
| (四) 中国科学计算市场前景展望 .....          | 36 |
| 五、 典型应用场景.....                  | 36 |
| (一) 生物医药 .....                  | 37 |
| (二) 高端装备 .....                  | 38 |
| (三) 集成电路 .....                  | 39 |
| (四) 新能源 .....                   | 40 |
| (五) 新材料 .....                   | 41 |
| (六) 合成生物 .....                  | 41 |
| (七) 地球科学 .....                  | 42 |
| (八) 低空经济 .....                  | 43 |

|                      |    |
|----------------------|----|
| 六、 全球科学计算产业布局.....   | 43 |
| （一） 国际科学计算政策布局 ..... | 43 |
| （二） 我国科学计算政策布局 ..... | 45 |
| （三） 全球主要企业布局 .....   | 47 |

图 目 录

图 1 科学计算产业链生态图 ..... 12

图 2 科学计算领域主要参与企业图 ..... 13

图 3 中国超算中心发展阶段与代表系统演进示意图 ..... 25

图 4 中国科学计算市场规模预测图 ..... 32

图 5 中国科学计算市场结构 ..... 34

图 6 2024 年中国科学计算各下游行业市场规模占比 ..... 35

图 7 中国科学计算市场分学科情况 2024-2029E ..... 36

图 8 主流处理器架构计算性能与灵活性对比示意图 ..... 52

表 目 录

表 1 智算与科学计算对比表 ..... 5

表 2 科学计算技术门槛分析表 ..... 29

## 一、科学计算研究框架与合规口径

### （一）科学计算的概念

科学智能是面向科学研究领域的新兴方向，可概括为“数据生成—模型训练—生态反馈”三个环节。其中，科学计算定位于数据生成阶段，是高质量科研数据的重要来源和科研算力的核心支撑。其通过高性能计算（HPC）提供强大的算力基础，并结合高精度数值仿真手段，在计算机中重建真实科学过程，从而为后续的智能模型训练提供可靠的数据输入。科学计算与模型训练和智能应用落地共同构成了科研范式的闭环，被广泛认为是继实验科学、理论科学、计算科学和数据密集型科学之后的人工智能驱动科研的“第五范式”。在这一范式中，模型驱动的仿真方法与数据驱动的学习方法双向融合：一方面，人工智能为科学研究提供了全新工具，加速知识发现；另一方面，科学研究提出的高复杂度任务与复杂的约束场景反向驱动 AI 技术演进，形成持续的创新牵引。当前的科学智能产业生态涵盖了底层超算/智算中心等算力基础设施、仿真软件与科研数据资源、智能算法模型，以及面向科研和工程的应用服务，形成了从算力供给到智能科研应用的完整体系。科学智能作为新兴产业具有广阔的发展空间，而科学计算正是这一体系中以数据产生与模型求解为特征的核心支柱。

#### 1.科学计算定位：数据生成环节的核心能力

科学计算在科学智能闭环中承担“数据生成”的核心职能，能力本质由高性能算力与高精度数值仿真共同构成。在算力侧，科学计算提供稳定可扩展的算力底座，重点解决“算力供给与算效提升”，典型能

力包括双精度（FP64）高精度计算、超大规模并行与调度，以及面向海量数据的高吞吐处理；在需求侧，随着效率、能耗比、可控性与交付效率约束增强，科学计算正由追求通用峰值转向面向特定负载的体系化优化，通过专用加速器、互联网络、并行软件栈与整机系统的协同创新提升任务算效。

高精度数值仿真是科学计算生成可靠数据的关键手段，其核心是以机理模型为驱动实现“可预测、可验证、可复现”的高保真模拟。数值仿真基于物理、化学与工程机理模型，通过将微分方程、守恒定律、传输方程等离散求解，在虚拟环境中重构复杂系统行为，关注“算什么、如何建模、是否符合真实机理”，从而批量生成贴近真实过程的高质量数据集，为后续数据驱动模型训练提供可控、可信的数据基础。

科学计算产业的核心价值，在于持续供给高可信数据，并提炼能够驱动科学理论优化与创新的关键洞见。依托“仿真+算力”的组合，科学计算为科研与工程提供可规模化的“虚拟实验”能力，科研人员可以通过虚拟实验实现模型理论验证、优化设计与探索创新，同时持续沉淀高质量数据集。

## 2.模型训练：高质量数据需求与反馈机制

科学智能模型是建立在科学计算长期积累之上的能力延伸层，其核心是在科学数据与机理模型基础上引入机器学习/深度学习。围绕科学问题，将 AI 方法嵌入模型构建、参数寻优、仿真加速、结果反演与不确定性分析等关键环节，贯穿科学发现、模型求解、仿真计算、实验验证与迭代优化全过程，从而系统性提升科研效率与问题求解能

力。

在这一机制中，科学计算提供“机理建模与高可信数据生成”的底座，而科学智能模型侧重于对计算过程与结果进行智能化利用并形成闭环反馈。通过联合学习仿真数据、实验数据与历史科研数据，科学计算从单一“模型驱动”演进为“模型—数据协同驱动”的新模式：AI 模型在物理一致性约束下可对复杂数值仿真进行近似替代或快速预测以降低成本、缩短周期；同时科学计算生成的高质量仿真数据为训练提供可信、可控来源，缓解科学问题中的数据稀缺与泛化风险。

### 3.全球趋势与产业动向：生态闭环加速与关键模型布局

从国家战略与全球科技演进趋势看，科学智能正在从“算法工具”走向“科研体系级能力”，成为各国推动科研范式升级与新型科研产业培育的关键抓手。其核心特征不在于简单叠加 AI 能力，而在于以科学计算为可信底座，将“高质量数据生成与验证（仿真/机理约束）—模型/智能体构建—实验与制造反馈”贯通起来，形成可持续迭代的生态闭环。换言之，科学智能的上限很大程度取决于科学计算能否提供稳定、可扩展、可验证的算力与数据生产能力，并支撑模型在科学问题上的可解释性与可靠性。

以美国为例，2025 年 11 月启动的“Genesis 创世纪计划”，由能源部牵头建设“美国科学与安全平台”，明确将国家级科学计算资源作为底座能力加以整合，并在此之上构建“算力—数据—模型/智能体—AI 增强的实验与制造”的一体化体系。在算力层面，该平台整合能源部下属 17 个国家实验室长期运行的超级计算系统，并与云端 AI 计算环

境协同部署，形成覆盖传统科学计算与智能计算的统一算力基础设施；在数据层面，依托联邦政府数十年科学计算与实验活动中积累的高质量科研数据集，夯实模型训练与验证的数据基础；在模型层面，重点发展面向特定科学领域的专用基础模型和智能体，实现对传统数值仿真与机理模型的加速、替代或协同增强；在应用生态层面，则进一步将科学计算与自动化实验、先进制造深度耦合，推动形成“计算—数据—模型—实验/制造”闭环演进的新型科研体系。该平台围绕先进制造、生物技术、关键材料、核能技术、量子信息、半导体等方向开展集中攻关，充分体现出以国家级科学计算基础设施为核心，对计算、数据与实验体系进行整体升级。这一举措表明，科学智能正从早期服务于局部算法或单点场景的工具性应用，逐步演进为以科学计算能力重构为核心支撑的国家级科研与智能实验/制造体系。

在全球范围内，科学智能的发展焦点已愈发清晰：这不仅是算力规模的比拼，更是以科学计算为底座的高可信数据供给能力、领域模型与智能体的协同求解能力，以及与实验制造环节的闭环集成能力的综合较量。未来科技竞争将聚焦于“高性能科学计算与可持续闭环的科学智能体系”；谁能率先构建起“计算生成数据—数据驱动模型—模型指导实验—实验反馈优化”的一体化闭环链路，谁就能在关键科学领域确立持续的创新迭代速度与产业转化效率优势。

## （二）科学计算与传统超算、AI 计算的融合与差异

科学计算与传统超算、AI 计算密切相关，但在驱动逻辑、技术特征和应用重点上存在明显差异。传统超算通常依托国家或区域超算中

心建设，以通用 CPU 和加速器构成大规模并行系统，侧重通用算力供给与任务调度管理，普适性较强，但在分子动力学、量子力学等高特化场景中算效有限，且大规模系统面临较高能耗与散热压力。AI 计算则面向模型训练与推理，典型载体为智算中心和大型 AI 集群，强调数据驱动、低精度计算和高吞吐，主要服务于互联网、自动驾驶、语音和图像识别等场景，对算力弹性和数据管道更为敏感。相比之下，科学计算以理论模型为驱动、以数值仿真为手段，通过求解科学原理方程重建真实世界过程，生成高质量仿真数据，为 AI 训练提供“数据工厂”。因此，科学计算既可视作为传统超算向特定科学负载深度优化的延伸，也可视为连接通用算力与智能计算的重要桥梁，其关键不在于通用性，而在于围绕科学研究和工程仿真需求，对架构、算法和算子进行针对性优化，以更高效地支撑复杂计算任务。

表 1 智算与科学计算对比表

|        | 智算                  | 科学计算                   |
|--------|---------------------|------------------------|
| 计算驱动模式 | 数据驱动（基于样本训练）        | 模型驱动（基于理论方程仿真）         |
| 核心目标   | 提升模型识别与预测能力         | 重建真实规律、生成高质量数据         |
| 典型任务类型 | 图像识别、语音识别、大语言模型训练   | CFD 流体仿真、MD 分子模拟、材料计算等 |
| 算力架构特点 | GPU/TPU 矩阵加速、低精度高吞吐 | 面向特定算法优化的异构架构          |
| 精度要求   | 低精度浮点（FP16/BF16）    | 高精度且可验证仿真              |
| 数据来源   | 互联网及现实世界数据          | 自主生成仿真数据（数据工厂）         |
| 核心价值   | 加速 AI 模型训练与推理       | 为 AI 提供高质量科学数据支撑       |
| 建设主体   | 互联网与 AI 企业主导        | 科研与产业结合企业主导            |

|      | 智算                                                                   | 科学计算                                                                |
|------|----------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|
| 代表形态 | 智算中心、AI 服务器集群                                                        | 科学计算一体机、仿真算力平台                                                      |
| 应用领域 | 互联网内容与 ToC 应用（搜索推荐、短视频与广告、智能客服等），以及自动驾驶、金融风控、智能制造质检等场景的 AI 模型训练与在线推理 | 科学研究与工程仿真领域，如航空航天与高端装备设计、半导体 EDA 与光刻、新能源与新材料研发、气象气候与地球科学、生物医药与合成生物等 |

来源：中国信息通信研究院

当前的 AI 模型训练高度依赖大规模高质量的数据，但在许多科研和工业场景中，受制于实验成本、周期或数据敏感性，真实数据往往匮乏，导致 AI 模型训练难以覆盖所有情况、泛化能力不足。科学计算正是解决这一问题的有效路径：它通过虚拟仿真批量生成符合物理规律、可控可验证的高质量合成数据，作为 AI 模型训练的可靠输入，从而弥补了真实数据的不足。在科学智能的发展逻辑中，已经形成一条较为清晰的链条：在科研数据稀缺的约束下，高质量数据需求持续上升，科学计算通过构建“数据工厂”批量生成高可信仿真数据，为科学智能模型训练提供关键支撑，并进一步带动科学智能产业发展。

### （三）科学计算行业的分类框架

为了更系统地刻画科学计算行业，本文采用技术类型和应用领域两个维度对行业进行分类。这种分类框架是交叉并行的结构，即技术类型和应用领域各自独立分类，但在实际中相互交织，每一类技术通常服务于多个应用场景，一个应用领域也往往综合运用多种计算技术：

#### 1.按技术类型分类

科学计算涉及众多细分技术方向，主要包括以下类别：

### （1）分子动力学（Molecular Dynamics,MD）

分子动力学是科学计算领域中规模最大、应用最广、发展最成熟的方向之一。其核心思想是基于牛顿力学或量子修正模型，模拟原子与分子在特定力场下的运动行为。MD 计算可用于研究蛋白质折叠、药物-靶标相互作用、新型材料的分子结构与力学性能等，是新药研发与材料科学的重要基础。近年来，随着 GPU 算力的提升与算法优化（如 LAMMPS、GROMACS、AMBER 等工具）的普及，分子动力学已成为生物医药与材料研究的“标配”计算手段。例如在抗病毒药物设计中，科学家可通过分子动力学仿真快速筛选潜在候选分子，实现从实验验证前移至计算预测的科研范式转变。

### （2）量子力学（Quantum Mechanics,QM）

量子力学计算包括第一性原理（DFT）与量子化学计算等方向，直接基于量子力学原理描述电子结构与原子相互作用。该类计算方法在新材料研发、催化反应机理、半导体器件设计等领域具有核心价值，可用于预测材料性能、优化化学反应路径、筛选高效催化剂。随着算力平台和算法并行化的发展，量子模拟已成为推动新材料发现和清洁能源技术突破的关键计算手段。

### （3）计算流体力学（Computational Fluid Dynamics,CFD）

CFD 通过数值求解纳维-斯托克斯（Navier-Stokes）方程来模拟流体流动、热传导与湍流过程，广泛应用于航空航天、能源动力、船舶、汽车工程等领域。在设计环节，CFD 仿真可取代部分风洞实验，通过虚拟环境评估空气动力学性能、燃烧效率及热负荷分布，显著降低研发周期与成本。随着高精度湍流模型（如 LES、DNS）与高性能并行计算的结合，CFD 正成为高端制造领域实现数字孪生与智能设计的重要支撑技术。

#### (4) 分子对接 (Docking) / 自由能微扰 (FEP)

Docking 分子对接是一种用于预测两个或多个分子之间相互作用模式，特别是受体与配体结合模式的计算方法，在药物研发、生物化学等领域有着重要应用。分子对接过程中常依据“锁钥模型”理解受体与配体结合关系。就像钥匙插入锁芯一样，配体需要找到受体上合适的结合位点，这要求配体与受体的空间结构高度互补，例如某些酶与底物的特异性结合。评分函数在 Docking 分子对接中至关重要，其综合考虑静电作用、范德华力等多种相互作用能，评估配体与受体结合的稳定性，打分越高通常意味着结合越稳定。自由能微扰 (Free Energy Perturbation, FEP) 是一种通过计算药物小分子与蛋白靶点结合自由能来评估亲和性的计算方法，也是目前公认精度较高、迁移性较好的亲和性评估方法之一。作为一种基于统计力学理论的精确自由能计算方法，FEP 已成为现代药物设计领域的重要工具，该方法通过构建热力学循环，在分子动力学模拟中实现对分子间能量变化的精确采样，从而计算配体与靶蛋白的结合自由能，为药物研发提供了前所未有的化学精度预测能力。

#### (5) 电子设计自动化与计算光刻 (EDA&Lithography Simulation)

电子设计自动化 (EDA) 和计算光刻 (OPC/ILT) 共同构成半导体制造领域的高性能科学计算体系。EDA 用于集成电路 (IC) 设计中的逻辑验证、电路仿真与布图优化，典型应用包括时序分析、寄生参数提取、热应力评估等；而 OPC (Optical Proximity Correction) 与 ILT (Inverse Lithography Technology) 用于在光刻过程中修正纳米级图形偏差，以突破光学分辨率极限。该方向计算复杂度高、任务量巨大，对并行计算和计算加速的依赖度极高，是先进制程 (7nm、5nm 及以

下) 芯片量产的关键支撑环节。

#### (6) 电磁仿真 (Electromagnetic Simulation)

电磁仿真以麦克斯韦方程组为核心, 广泛用于天线设计、电磁兼容 (EMC)、雷达散射、无线通信与芯片封装等领域。在 5G/6G 通信与射频设计中, 电磁仿真已成为标准化环节。典型软件包括 ANSYS HFSS、CST Microwave Studio 等, 可实现从纳米级射频芯片到城市级基站网络的多尺度电磁建模。该方向对计算精度和内存吞吐均有极高要求, 是高性能计算与科学计算结合的代表性场景。

#### (7) 大气与气象仿真 (Atmospheric and Climate Simulation)

大气与气象仿真通过数值求解非线性偏微分方程, 重建地球大气环流、天气变化与气候演化过程, 是典型的科学计算与公共科研结合领域。其核心任务包括天气预报、气候变化预测、极端事件模拟与环境监测。大气仿真不仅依赖大规模并行计算 (如全球气候模式 GCM), 还需要针对区域尺度的精细模拟 (如台风路径与污染扩散模拟)。随着算力提升与科学智能方法引入, 气象仿真正逐步迈向高分辨率、实时化与智能融合的方向。

#### (8) 基因测序与生物信息仿真 (Genomic Simulation & Bioinformatics)

基因测序仿真利用统计建模、分子动力学与并行算法对 DNA/RNA 结构及其功能进行计算重建, 主要应用于基因组比对、蛋白质结构预测、进化路径模拟与疾病标记识别。在科学智能应用领域里, 科学计算一体机可实现基因数据与分子仿真的耦合, 通过多尺度建模加速精准医疗与新药研发的进程。

#### (9) 其他工程仿真 (CAE 及跨领域计算)

计算机辅助工程 (CAE) 作为工程计算的广义统称, 涵盖有限元

分析（FEA）、多刚体动力学、电磁-结构耦合、热传导等多物理场模拟。CAE 广泛服务于航空航天、高端装备制造、汽车、能源等行业，其核心价值在于通过虚拟仿真进行结构优化、可靠性验证和性能预测，是工业数字化设计的关键支撑环节。

## 2.按应用领域分类

科学计算在下游应用上覆盖几乎所有研发密集型与高复杂度设计行业，按应用领域可概括划分为八类：生物医药、高端装备、新能源、新材料、集成电路、合成生物、地球科学与低空经济等。其在这些领域的共性作用主要体现在三方面：一是以机理模型与数值求解为基础，在虚拟环境中开展高保真“数字实验”，支撑关键过程的可验证预测与设计优化；二是通过仿真与高通量计算沉淀可追溯、可复现的数据资产，减少昂贵或不可重复的湿实验与试制迭代，提升研发效率并降低试错成本；三是面向科学智能闭环提供高质量合成数据与机理特征，使“仿真数据生成—模型训练—应用反馈/实验验证”形成协同迭代，从而推动从单点仿真工具向平台化、工程化研发能力演进。各行业的典型任务形态与代表性应用将在第五章“典型应用场景”中另行展开。

## （四）行业研究数据口径

本研究报告中所引用的市场数据、产业指标及相关统计信息，均严格遵循统一的数据口径和方法体系，以确保信息披露的规范性、可比性与可验证性。所有数据来源均来自权威机构统计数据或经多方交叉验证的企业调研结果。

为保证研究结果的真实性与一致性，报告在数据采集、处理及分析过程中遵循以下原则：

（1）数据原则性与逻辑性：所有数据均基于可靠样本，经过

系统验证与逻辑校对，确保测算口径统一、逻辑严密；

(2) 一致性与可比性：对同类指标采用相同的统计周期、计量单位与计算方法，避免口径偏差造成的结论误差；

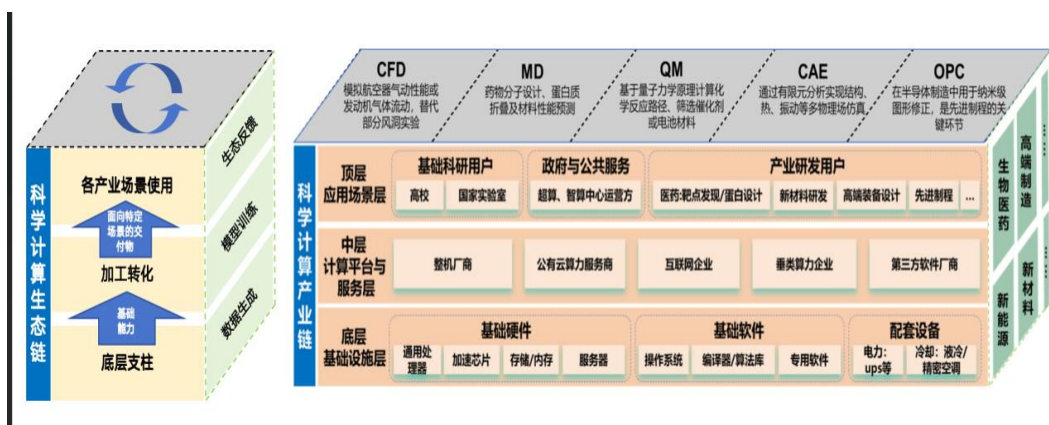
(3) 真实性与可靠性：引用的统计数据均来自国家统计局、行业协会、科研院所及上市公司公开披露信息，并通过交叉比对核实；

(4) 规范性与合规性：报告数据使用及披露符合国家统计标准和信息公开规范。

## 二、科学计算产业链结构与生态体系

科学计算产业链可划分为上游、中游和下游三个层次，其分层依据在于技术演进路径、供需耦合关系以及系统协同逻辑。**上游侧重提供基础性的算力硬件资源和工具**，是产业发展的技术源头。随着通用芯片性能提升放缓，行业出现算力瓶颈，催生出专用加速芯片等新趋势。上游技术的持续演进（如新型芯片架构、先进计算技术）为中下游提供源源不断的性能提升空间。**中游位于供需两端之间，承上启下，通过计算平台与服务将上游算力转化为面向不同行业场景的解决方案，满足下游多样化需求。**中游企业与机构根据下游应用需求对上游资源进行二次集成与优化，实现供需两端的紧密耦合。例如，不同行业的科研和工程问题各异，中游服务商需整合硬件、软件并针对特定算法和场景进行优化，以充分释放上游算力潜能，支撑下游应用。**下游则是科学计算的应用场景层，包括科研机构和各行业的企业用户，是算力需求的源头。**下游不断涌现的复杂科研和创新应用需求，反过来推动着上游技术迭代和中游服务创新，形成良性循环的供需闭环。科学计算产业链在经典“上游—中游—下游”分层之上，可进一步映射到科学智能“数据生成—模型训练—生态反馈”的全链路闭环：上游提

供可扩展的算力硬件与基础工具，中游将算力转化为面向特定负载的仿真数据生产与计算平台服务，并承载面向科学智能的模型训练与工程化交付能力，下游以科研与产业场景持续提出高复杂度需求并反馈真实约束，反向驱动上游架构迭代与中游系统优化，从而形成“供给演进—场景牵引—能力再增强”的正向循环。



来源：中国信息通信研究院

图1 科学计算产业链生态图



来源：中国信息通信研究院

图 2 科学计算领域主要参与企业图

## （一）上游：基础设施层

上游部分涵盖基础硬件（芯片）、基础软件和其他配套设备等类别，是支撑科学计算的根基。基础硬件方面，主要包括通用处理器（CPU）、加速器芯片（GPU、DCU、MaPU 等）、存储与内存、服务器整机等。当前全球高性能 CPU 领域，英特尔、AMD 等国际巨头依旧占据主导地位，国内厂商如龙芯、飞腾、鲲鹏、海光、兆芯、申威等正快速崛起。加速芯片领域亦类似，NVIDIA 的 GPU 在超算加速器中占据优势地位；国内则有华为昇腾、燧原、寒武纪等厂商积极布局。存储与内存芯片高度集中于三星、海力士、美光等少数企业，市占率前六合计约 99%。总体来看，上游核心硬件国外厂商较为领先，国产自主硬件在性能和成熟度上尚有提升空间。

基础软件方面，包括操作系统、编译器、算法库以及部分通用应用软件等。一方面，科学计算领域常用的操作系统以 Linux 为主流（如 CentOS、Ubuntu 等），国内也有基于开源的自主发行版（如银河麒麟、中标麒麟等）用于超算环境。另一方面，各类数值计算库（如 MPI 通信库、BLAS/LAPACK 算子库等）和编译工具大多由国际社区主导开发，专业仿真软件仍以国际成熟产品和开源生态为主要供给。科研计算类软件如分子动力学、量子化学工具较多为欧美开发（Amber、Gaussian 等），国内同类软件尚处于起步阶段。虽然我国已涌现盈建科、霍莱沃、安世亚太等工业仿真软件企业，但其商业化程度和生态完善度与国外巨头仍有差距。

其他配套设备方面，大型科学计算基础设施对机房环境要求苛刻，需要高效电力与冷却系统支持，例如不间断电源（UPS）、变压器、柴油发电机以及精密空调、水冷系统等。这些设施由专业厂商提供

（Vertiv、施耐德，国内有伊顿、依米康等），保障算力中心的稳定运行和能效管理。总体而言，上游产业链环节门槛高、投入大，我国在芯片和基础软件领域持续完善技术积累和工程化配套能力，推动产业链能力进一步提升。

## （二）中游：计算平台与服务层

### 1. 整机厂商

科学计算整机厂商是中游计算平台与服务层的核心供给方，负责将 CPU/GPU 等计算核心与高速互连网络、存储子系统、散热供电与机柜级工程等进行系统集成与工程化优化，形成可交付的超算整机或高性能服务器，并提供操作系统、编译器/驱动、并行计算环境、集群管理与运维服务等配套能力，从而在很大程度上决定科学计算基础设施的性能上限、稳定性边界与交付效率。按能力侧重看，其中一类是系统集成型整机厂商：其优势在于供应链整合、平台工程能力与规模化交付能力，商业模式通常以“硬件销售+解决方案交付”为主，可根据行业负载特性进行算力与存储配比、网络拓扑规划、机柜/供配电与液冷方案设计，并集成常用并行软件栈（如 MPI、作业调度、集群监控）及主流仿真应用的部署与调优，以较低的集成风险、较快的交付周期满足科研与工程用户的通用 HPC 需求。国际市场主要由 HPE（Cray）、戴尔（DellEMC）与富士通等厂商主导；国内中科曙光、浪潮、联想、中国长城、清华超算（THPC）等在超算与 HPC 服务器领域持续布局，并在面向特定行业场景的集成方案与交付服务上形成差异化能力。

另一类是软硬件一体化自研整机厂商，其核心特征是开展“处理器架构—芯片/板卡—整机系统—软件栈—应用调优”的全栈协同设计与持续迭代，通过更深的垂直整合把“算力供给”直接转化为面向科

学模拟与工程仿真的“可用能力”。相较于以集成为主的通用整机，该模式往往在三方面更具优势：一是算效与能效更可控，能够在微架构、指令/算子、互连与内存访问、I/O 路径、作业调度策略等层面做联合优化，减少“硬件峰值”到“应用实效”之间的损耗；二是稳定性与一致性更强，通过软硬件版本协同、驱动与编译链闭环、核心库与仿真软件的绑定调优，提升长周期、强耦合任务的可复现性与工程可靠性；三是面向特定负载的迭代效率更高，能够以应用需求牵引芯片与系统演进，形成“应用—平台—芯片”闭环，加快新架构落地与生态完善。国内在该路径上已有典型实践（如围绕重大任务形成的专用超算体系，以及依托软硬件生态延伸至科学计算场景的路线）。其中，思朗科技在“软硬件一体化自研整机”路径上的特征更为突出：其基于自主 MaPU 架构形成从架构到芯片、板卡、整机再到软件栈的全链条研发体系，推出“天穹”3D 科学计算机，并围绕 MD/QM/CFD 等仿真负载在硬件侧开展系统级优化（如面向负载的底层架构与散热供电设计），在软件侧配套关键仿真软件栈与并行运行环境，通过软硬协同释放特定科学计算任务的性能与能效潜力，从而在差异化交付与面向场景的持续优化能力上具备更强的竞争力。

## 2. 垂类算力企业

垂类算力企业面向特定学科或行业提供“专用硬件/算法软件/云服务”的一体化高性能计算能力，本质上反映了科学计算从通用算力供给走向面向负载深度优化的产业趋势。此类企业通常围绕某一类典型工作负载进行体系化设计与优化，以在目标领域显著提升算效与交付效率；当通用超算难以满足垂直场景日益精细化的需求时，专用算力便成为重要补位形态。国际上典型案例包括 D.E.Shaw 研究所开发的“Anton”系列专用超级计算机，聚焦分子动力学（MD）模拟，通过

专门架构在蛋白质动态模拟等任务上实现相对通用超算的数量级提升；类似地，部分气象气候机构会针对数值天气预报开发专用矢量机，粒子物理领域也存在面向特定计算任务的专用加速器路线。

同时，聚焦“AI+科学”的企业亦可纳入广义的垂类算力范畴，其通过人工智能与高性能计算的结合，围绕特定领域的数据与模型需求提供云端算力平台或定制算法服务。例如，深势科技面向分子模拟与新药研发构建科学智能算力框架；晶泰科技（XtalPi）融合量子物理与 AI 算法，形成面向药物发现与材料设计的计算平台。与上述模式相呼应，思朗科技等以软硬件一体化方式围绕科学负载进行垂直优化的厂商，也可被视作垂直专用算力的重要实践路径之一：其通过在架构、系统与软件栈层面的协同优化，将“通用算力”转化为更贴近特定科学计算任务的数据生成与求解能力。

### 3.公有云算力服务商

公有云算力服务商以商业化方式通过云平台提供按需租赁的弹性算力与配套服务，是连接中小用户与高性能科学计算资源的重要渠道，并与超算中心、专用算力平台形成互补。本分类以“对外提供云租赁与计费交付的云平台/云品牌”为统计口径，不区分其背后股东或母公司属性：既包括综合云厂商面向 HPC/科学计算的产品模块，也包括聚焦高性能计算云的独立服务商。相较超算中心的公益属性，公有云强调资源弹性、高可用与按量计费，通常以多租户隔离、统一镜像/环境、作业调度与运维托管等方式提升科研与工程计算的云端迁移与交付效率。综合云厂商方面，阿里云、腾讯云、华为云等依托既有云基础设施推出面向科学计算的实例与解决方案（如弹性 HPC 集群、并行文件存储、作业调度与应用镜像等）；独立 HPC 云服务商方面，国内可见并行科技、速石科技、北鲲云等提供多云算力运营与跨云资

源管理能力，并配套超算软件与系统集成服务，形成相对完整的 HPC 云交付体系；海外以 Rescale 等为代表，面向工程仿真、生命科学、油气勘探等场景提供云端 HPC 平台服务，并通过对接 AWS、Google Cloud、Azure 等主流云资源实现按需调度优化。

#### 4. 互联网企业

大型互联网企业依托自建数据中心与超大规模集群能力，长期支撑搜索、电商、社交、内容推荐等核心业务的并行计算与 AI 训练基础设施，在集群架构、调度管理、分布式存储与高性能网络等方面与科学计算平台存在技术共通性。本分类以“互联网平台型企业的自用算力体系与技术生态外溢”为口径，重点描述其内部规模化算力能力、软件工程化与自研芯片/工具链等核心能力；当其以云平台对外提供按量租赁与商业计费服务时，该部分业务在分类上统一归入上一节“公有云算力服务商”。国内代表包括阿里巴巴、腾讯、百度等：一方面通过长期运营超大规模集群沉淀调度编排、运维自动化与数据/AI 工程体系，另一方面逐步将部分能力对外输出，形成面向科研与工业的高性能计算服务与解决方案；海外代表包括 Amazon、Google、Microsoft 等，其在自研专用芯片（如 TPU、Inferentia 等）、数据中心网络与平台化工具链方面投入更早，相关能力既服务于内部高吞吐负载，也可延伸至科研计算等任务场景。

#### 5. 第三方软件厂商

第三方软件厂商是科学计算产业链中将“算力供给”转化为“可用科研与工程能力”的关键环节，主要提供仿真、建模与算法库等工具，其成熟度直接决定科学计算平台的应用效率与成果转化能力。该类别覆盖从工程 CAE 软件到分子模拟与材料计算软件的广泛谱系，是中游平台服务与下游行业应用之间最核心的软件支撑层。

长期以来，高端仿真软件市场以欧美厂商为主导：ANSYS 在有限元与 CFD 等领域占据领先地位，COMSOL 在多物理场仿真方面应用广泛，达索系统旗下 Simulia（含 ABAQUS）覆盖结构与工程仿真主流需求；MathWorks 的 MATLAB/Simulink 在数值计算与控制仿真中具有较强市场份额，西门子 Mentor Graphics 及相关 EDA 工具在半导体器件仿真等领域影响力突出。海外软件体系成熟稳定、生态完善，被全球科研与工业用户广泛采用，但也带来下游对进口软件依赖、成本与可控性压力上升等问题。

在政策推动与产业应用需求牵引下，国内逐步形成一批面向科学计算的软件供给力量，并呈现“垂直突破+算法创新+AI 融合”的发展路径。代表性企业包括：南京天洫（面向智能工业仿真，提供覆盖设计—仿真—优化—运维的平台化工具，并推出 AIFEM、AICFD、AITopo 等系列产品）、鸿之微（多尺度材料模拟）、深势科技（构建“深势·宇知”科学智能大模型体系，赋能分子动力学与药物设计等场景）、龙讯旷腾（PWmat 第一性原理计算软件，在 GPU 并行算法方面具备竞争力，并在微电子、新材料行业推广）、安世亚太与中望软件（在 CAE 与 CAD 软件领域长期深耕并积累工业用户）。

### （三）下游：应用场景层

下游应用层涵盖科学计算成果最终投入使用的各类主体，主要由政府与区域公共服务平台、基础科研机构以及产业研发企业三类用户构成，也是科学计算需求生成与场景牵引的源头。不同类型用户在算力获取方式、精度要求、数据安全与服务模式等方面存在显著差异，从而决定了中游平台的交付形态与上游技术迭代方向。

#### 1. 政府与区域公共服务主体：超算/智算中心运营方

政府及公共服务机构是区域算力资源的重要组织者，主要包括区

域超算/智算中心运营方、地方政府产业园区与科技创新平台等。此类主体一方面作为整机采购、系统集成与运维服务的关键客户，对稳定性、扩展性、安全性与能效提出较高要求；另一方面通过统一服务平台与资源共享机制，面向本地高校、科研机构与企业提供标准化、低门槛的算力服务，并逐步由“硬件运维”向“平台赋能+产业组织”延伸。

## 2.基础科研用户：高校、科研院所、国家实验室

高校科研团队、科研院所与国家实验室等基础科研用户以科学研究为主，通常对计算精度、结果可解释性、可复现性与平台可靠性要求更高，并对数据安全与保密性较为敏感。其算力获取方式主要包括申请使用国家/区域超算中心资源，以及自建或共建科研计算平台以满足长期、稳定的学科计算需求。

## 3.产业研发用户：医药、材料等行业的企业研发部门

产业用户覆盖医药、材料、化工、能源、高端制造、电子与半导体等重点行业的企业研发部门，核心诉求是通过仿真与计算分析提升研发效率、缩短周期并降低试错成本。企业侧通常更关注软硬件适配、接口兼容性、平台稳定性与服务响应效率，主流采用方式包括采购软硬件一体化整机系统、部署私有化平台或以“算力即服务”模式按需获取计算资源。

下游应用层是科学计算价值兑现与需求生成的核心环节，主要由政府/区域公共服务平台、基础科研机构、产业研发企业三类用户共同构成，并以“场景牵引”反向决定中游平台的交付形态与上游技术迭代方向。总体来看，政府与区域超算/智算中心运营方更强调资源组织与公共供给能力，在稳定性、扩展性、安全性与能效约束下，通过统一平台向高校与企业输出标准化算力服务，并由“硬件运维”向“平台赋能+产业组织”升级；高校、科研院所与国家实验室以基础科研为主，

突出高精度、可解释、可复现与可靠性要求，算力获取以国家/区域中心申请与自建共建并行；产业研发企业则以降本增效为目标，更关注软硬件适配、接口兼容、交付与响应效率，在一体机、私有化平台与算力服务化之间进行组合选择。三类主体在算力获取方式、精度与安全要求、服务模式上的差异，决定了科学计算从“资源供给”走向“平台化交付与行业化解决方案”的演进路径。

### 三、科学计算关键技术趋势与门槛

#### （一）传统芯片架构的局限与科学计算挑战

随着科学智能从科研辅助工具加速迈向产业核心引擎，模型训练与高保真仿真正呈现“工程化、场景化、规模化”的演进趋势。相较于实验室环境，产业端应用不仅强调真实场景的复杂耦合特征，更对超大规模、多物理场的仿真验证提出了刚性需求。因此，面向复杂环境与巨型任务的“大科学计算”能力——涵盖超大规模并行、高效资源调度及端到端工程化支撑，已成为产业赋能的关键技术门槛与发展主线。

然而，当前以通用 CPU/GPU 为主的计算架构，在面对高度特化的科学计算任务时，正遭遇“峰值算力增长”与“实际效能提升”严重脱节的结构性矛盾。具体表现为三大核心瓶颈：

算法适配性低，算力虚耗严重：通用架构为兼顾兼容性牺牲了专用效率。在执行快速傅里叶变换（FFT）、稀疏矩阵运算等典型科学算法时，因无法优化特定的内存访存模式，GPU 往往仅能发挥约 35% 的理论峰值算力，导致分子动力学等专项计算效率大幅受限。

“内存墙”与“功耗墙”双重夹击：处理器算力增速远超内存带宽，数据搬运成为吞吐率瓶颈；同时，E 级超算系统（如美国“Frontier”、日本“富岳”）功耗高达 20-30 兆瓦，巨大的能耗与散热开销严重制约了系统的广泛部署与持续扩展。

大规模并行通信效率递减：在跨尺度、多物理场仿真中（如核反应堆材料模拟，时空跨度分别达 15 个和 21 个数量级），节点间海量数据同步导致通信开销剧增。受限于网络拓扑，传统集群在规模扩展时并行加速比非线性下降，难以支撑极端复杂的计算需求。

上述瓶颈表明，在后摩尔时代，单纯依赖通用架构的节点堆叠与峰值算力提升，其边际效应已显著递减，甚至成为制约材料科学、气候模拟、生物医药等领域高精度应用及高质量数据集生成的掣肘。科学计算的核心矛盾已不再是单纯的“算力不足”，而是**理论算力向有效算力转化的效率缺失**。未来，性能突破的重点必须从“追求峰值”转向“提升算效”。这要求通过面向特定负载的体系结构创新（如 DSA、存算一体）、软硬件协同设计以及存储与互联能力的重构，打破冯·诺依曼架构的物理极限，将理论算力高效转化为真实的科研产出与产业竞争力，构建“高性能计算+可持续闭环”的科学智能新底座。

## （二）科学计算算力、架构与生态的演进趋势

随着上述结构性瓶颈与架构挑战的凸显，科学计算领域的算力基础设施正经历多阶段演进。

一方面是从单一架构向异构算法/硬件集群的过渡。由于通用架构无法充分发挥性能，科研机构和企业纷纷在集群中引入专用加速器、FPGA 和可编程器件，以异构方式组合多种计算单元。此类异构集群通过在节点内集成不同架构（如 CPU+GPU+FPGA），针对特定算法特征选择最适合的计算硬件，提高了整体吞吐和效率。这一演进体现了“算法先导硬件”的理念：例如在分子模拟和流体仿真中，将通用 CPU 用于控制和逻辑运算，将 GPU 或其他专用加速器用于并行算子，以期提高模拟性能。然而，异构集群模式也带来新的问题——异构组件间的软件适配和调度复杂性显著增加，且规模扩张时易遭遇互联瓶

颈。在计算规模扩展到数百乃至上千节点时，传统网络拓扑和通信协议成为性能制约：跨节点的数据同步和通信延迟消耗大幅增加，软件开发人员需要为不同硬件编写或优化多套代码，使得系统级软硬件协同高度复杂。

另一方面，**专用一体机架构成为另一条破局之路**，即针对某一科学领域或应用场景设计的一体化系统，将定制化处理器（ASIC）、存储体系和网络互连作为一个完整整体同步规划。专用一体机一般采用“算法—架构—系统”协同设计理念，对目标应用深度定制。在这种架构下，通信子系统也会做专门优化（如采用片上高速总线、二维/三维拓扑网络、低延迟协议等），以缓解大规模互联瓶颈。同时，系统软件全栈定制也是核心方向：从操作系统、编译器到算法库，研发团队配套优化，使硬件性能能够开箱即用，并在数百节点扩展时实现接近线性的性能提升。专用一体机在生物分子模拟、量子计算、气候建模等领域已经出现示范性成果：通过软硬协同创新，这些系统可以在特定任务上相比通用超算取得数量级的性能跃升。

尽管专用一体机在性能和能效上有一定的突出表现，但其领域适用范围较窄，难以覆盖诸多科学计算应用场景，于是部分架构的先行者们把目光聚焦到内核层面，**希望通过底层架构创新来保持较好的通用性**，同时确保极致的计算效率。一种典型思路是“软件定义硬件”

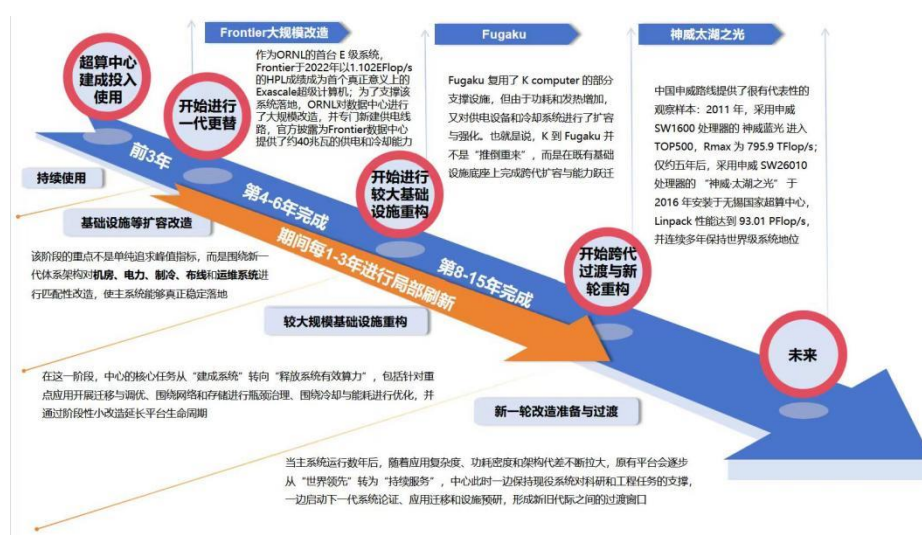
（Software-Defined Hardware）架构，其核心在于通过改进指令集和微架构设计，实现算法主导的硬件重构，使得同一套处理器架构可通过软件层配置应对不同计算需求。典型的 MaPU 架构就是面向“通用”科学计算的“软件定义硬件”芯片架构，表明在现有专用路径之外，全新的微架构创新已开始成为可行方案。这类新一代架构在硬件设计的根本层面融合先进的并行计算、内存体系和互连技术，并支持多种精度

和算法模式调配，从而为科学计算提供既高效又灵活的解决方案。

与此同时，面向科学智能闭环，科学计算平台正在承载“仿真+AI”的混合负载：数值求解与机理仿真往往依赖 FP64 等高精度计算以保证收敛稳定、结果可验证与可复现；而代理模型训练、参数反演、结果校准与不确定性量化等环节，则更倾向采用 FP16/BF16、FP8 等低精度张量计算以获得更高吞吐。由于两类负载在计算单元形态、内存/带宽诉求与通信模式上差异明显，产业侧常见的工程实现主要有两条路径：一是分区/分层协同（在同一集群内将 HPC 与 AI 负载分区部署，通过高速互联与统一工作流编排完成数据与模型流转）；二是融合节点/融合处理器（在单节点内同时配置高精度计算能力与张量加速能力，并配合统一的内存层级与调度策略实现就地协同，从而降低跨设备数据搬移与跨节点调用开销，提升“仿真—训练—验证”迭代效率）。国际主流厂商（如 NVIDIA、Intel 等）在处理器与加速器产品中持续强化混合精度与张量单元，使融合节点更易工程化落地；国内相关探索总体仍以分区/分层协同为主，但以 MaPU 等“软件定义硬件”路线为代表的尝试，正通过可编程内核与指令/微架构协同，探索在同一体系内覆盖不同精度与算子模式，为后续面向科学智能闭环的一体化平台提供可演进的实现路径。

而从工程化落地载体看，上述算力与架构演进并不会以“每年重建一套系统”的方式展开，而是通常依托超算中心及大型科学计算基础设施，以分层迭代的方式持续推进。综合国际头部超算中心的演进实践，这一过程可概括为较为典型的“三层节奏”：约 4–6 年完成一代主系统更替，约 8–15 年进入一轮基础设施重构，运行期间穿插约 1–3 年一次的局部刷新。其中，主系统迭代主要体现为处理器、加速器、互连和整机架构的换代；基础设施重构主要涉及楼宇机房、供配电、

制冷、网络主干等底座能力的扩容或重配；局部刷新则更多围绕存储、网络、冷却、软件栈、调度体系和安全运维展开。其根本原因在于，芯片、互连与整机架构的更新速度通常快于土建机房与能源冷却系统的更新速度，因此科学计算平台的升级往往不是“整体推倒重来”，而是呈现出“基础设施长周期、主系统中周期、局部能力短周期”的代际演进特征。换言之，科学计算的演进不只是芯片或节点形态的演进，更是中心级系统工程能力的演进；前文所讨论的大规模并行、高速互连、混合精度协同与能效优化等趋势，最终都需要在超算中心这一长期运行的工程载体上完成验证与落地。



来源：中国信息通信研究院

图3 中国超算中心发展阶段与代表系统演进示意图

从演进阶段看，超算中心通常经历“主系统导入与架构跨代升级期—稳定运行与局部刷新期—跨代过渡与基础设施重构准备期”三个阶段。第一阶段的核心并非单纯采购新设备，而是围绕新一代体系架构，对供电、冷却、布线、机房空间和运维体系进行系统适配，保障主系统稳定落地。Frontier是典型案例：2022年以1.102 EFlops的HPL成绩成为首个真正意义上的Exascale超级计算机，同时ORNL为其配套约40兆瓦供电与冷却能力，并新增机械冷却等设施，表明

从 P 级迈向 E 级时，主系统升级往往会同步牵引液冷、供电和机房能力的系统性改造。第二阶段是稳定运行与局部刷新期，重点在于应用迁移、软件优化、局部扩容和算效释放，通常通过 1 至 3 年一次的局部刷新持续优化网络、存储、冷却、调度和软件生态，以延长平台生命周期并提升有效算力释放效率。Fugaku 即为代表，其在复用 K computer 部分基础设施的同时，针对更高功耗与散热需求强化了冷却和供电系统，体现出国家级平台并非简单“旧系统退役—新系统重建”，而是在既有底座上实现跨代扩容与持续服务。第三阶段是跨代过渡与基础设施重构准备期，当主系统运行多年后，随着应用复杂度、功耗密度和架构差异扩大，平台会从“世界领先”逐步转向“持续服务”，并同步开展下一代系统论证、软件迁移和设施预研，基础设施重构周期通常长于主系统本身，往往需 8 至 15 年完成一轮较完整升级。中国申威路线较好体现了“主系统升级快于底座重构”的特征：2011 年 ShenWei BlueLight Linpack 性能为 795.9 TFlops，2016 年“神威·太湖之光”已达 93.01 PFlops，且截至 2025 年 11 月仍在 TOP500 榜单运行，说明超算中心的价值不仅在于首发性能，更在于能否依托处理器路线、系统集成和长期运维，将一代系统沉淀为可持续服务的国家级科研基础设施。总体来看，Frontier、Fugaku 及申威路线表明，超算中心并非一次性采购项目，而是按代际规律持续演进的复杂系统：短期看主系统升级，中期看算效释放，长期看基础设施与技术路线延续能力。其迭代周期本质上正是科学计算关键技术趋势在工程层面的集中体现。

### （三）科学计算的技术门槛分析

科学计算在软硬件各层面存在多重技术门槛，需要协同创新予以攻克方能支撑新一代科研需求。当前，从底层内核设计自主化到大规

模互联、高效能耗，再到软件生态和行业应用，每一环节都对技术能力提出了严峻挑战。只有通过硬件与软件的深度协同、产学研的紧密合作，以及长期持续的研发投入，才能全面突破这些瓶颈，推动我国科学计算生态跨越式发展。以下分五个方面分析当前亟待解决的关键技术门槛：

### 1.内核自主研发门槛

高性能处理器底层架构研发具有较高技术门槛。CPU/GPU 架构长期由国际巨头主导，从零开始设计一款完全自主的高性能处理器需要深厚的体系结构功底、巨大的前期投入和长期积累。新进入者如果过度依赖第三方 IP 授权，虽然开发周期可缩短，但关键技术将受制于人，难以实现真正的自主可控。自主研发内核意味着需自行设计指令集、流水线架构并打造配套的工具链，不仅成本高昂而且风险巨大。然而，一旦攻克这一门槛，收获的是底层技术完全可控以及针对应用进行深度优化的空间。近年来国内已有厂商在此方向取得突破：例如 MaPU 架构探索便完全不使用国外 IP，自主指令集和微架构设计使处理器能够贴合科学计算的特殊需求进行优化。该实践表明只要投入得当，国产自主内核同样有能力打造出性能优异的计算芯片，并为后续软硬协同优化奠定基础。尽管自主内核研发壁垒高企，但从长远看，这一能力将成为构筑国家科学计算竞争力的基石。

### 2.大规模互联体系门槛

构建成百上千乃至上万节点的高效并行计算集群，互连网络是一个必须突破的核心难点。传统超算集群多依赖 InfiniBand 等高端商用互连设备来降低节点间通信延迟、提高带宽，但要在关键技术上完全自主，研发此类高速网络本身难度极高。如果互连性能不足，再强大的单节点算力在大规模并行时也难以发挥整体效能。因此，在设计新

一代超算系统时，必须从体系结构阶段就统筹考虑互连方案，例如开发定制化高速接口、精简低延迟通信协议、优化网络拓扑结构等。以“天穹”3D 科学计算机为例，其研发团队在芯片开发中同步规划了芯片内和芯片间的高速通信机制，使多芯片组网即使扩展到上万个计算单元，仍能取得“1+1>2”的性能增益。该实践证明，通过紧密协同硬件架构与网络设计，通信瓶颈并非不可逾越；只要采用一体化的创新思路，完全可以为大规模科学计算集群构建高效互联支撑。

### 3.软件生态系统门槛

先进的硬件也需要完善的软件生态才能释放性能。一个全新的芯片架构如果缺乏操作系统移植、编译器和算法库支持，用户将难以上手，硬件优势也无从验证。在实践中，自主研发的新架构必须同步展开软件适配工作，如移植 Linux 内核、开发驱动和编译工具链，并对主流科学计算软件（典型如分子动力学模拟包、有限元仿真软件等）进行适配优化。这要求在硬件研制的同时同步构建配套的软件栈，并优化常用仿真程序，使新架构交付时具备即插即用能力，大幅降低了用户迁移门槛。反之，如果软件生态构建不力，即使硬件本身性能卓越也难以发挥作用，应用开发者缺乏动力支持，新硬件最终可能沦为“性能孤岛”。因此，完善的软件生态被视作我国发展自主科学计算平台所面临的首要挑战之一。

### 4.产业应用门槛

科学计算的价值最终要通过解决实际科研和工程问题来体现，新一代算力平台需要与具体行业场景深度融合。目前来看，国内外许多行业应用软件与新硬件平台的适配度不高，缺乏针对性的迭代优化机制，这成为技术落地的显著门槛。一方面，不同行业（航空航天、汽车制造、新材料等）所使用的仿真工具、数据格式各异，新架构要发

挥效能需对这些应用进行深入移植和优化；另一方面，产业界对算法改进和应用反馈往往响应较慢，缺少快速迭代与产学研共创机制。这导致即使拥有高性能硬件，如果缺乏相应的软件和模型优化支撑，也难以转化为生产力提升和商业价值。破解这一难题需要建立协同创新机制：科研机构与企业联合开发行业应用软件，制定标准化接口以方便新技术融入；同时构建应用反馈的闭环，将用户需求及时反馈到算法、软件和硬件的开发优化中。只有在应用生态上形成良性循环，科学计算平台才能真正解决行业痛点，提高各领域的研发效率。

## 5. 整机能耗门槛

随着算力规模迅速扩大，控制整机功耗已成为不容回避的挑战。在提升计算性能的同时必须兼顾绿色低碳目标，否则高昂的能源消耗和庞大的冷却需求将令超算中心难以持续运行。因此，“性能功耗比”已成为评价科学计算系统的重要指标之一。要跨越能耗门槛，需要从芯片到系统的全方位节能设计：在芯片层面，可针对常用的计算密集型算法引入专用加速单元，以提高每瓦性能；在系统层面，采用先进的液冷散热技术和智能电源管理，减少能源浪费。例如，MaPU 芯片面向双精度浮点计算负载进行了指令级和电路级优化，以更少的晶体管实现既定计算，从架构上提高了单位功耗下的运算效率；基于该芯片的原型整机系统采用高效液冷和优化的功率分配方案，确保高密度计算单元稳定运行的同时将散热能耗降至最低。实测结果表明，在提供同等算力情况下，该系统相比传统方案显著降低了总功耗。这不仅响应了“双碳”战略下对算力基础设施节能降耗的要求，也使大规模计算平台在经济成本上更加可行。

综上所述，科学计算想要支撑新一代科研范式，亟须攻克以上核心技术门槛。唯有在处理器设计、互联通信、软件生态、应用迭代及

能耗控制等方面取得全面突破，我国科学计算生态才能实现跨越发展，进一步成为科学智能时代科研创新的坚实底座和驱动力。

表 2 科学计算技术门槛分析表

|   | 技术门槛    | 核心挑战                              | 关键内容与难点                            | 突破路径                                   |
|---|---------|-----------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------|
| 1 | 内核自主研发  | 自主设计需深厚技术积累与巨额投入                  | 自主指令集、微架构、流水线设计、工具链开发              | 推进底层架构、指令集和工具链协同研发，聚焦特定领域（如科学计算）进行深度优化 |
| 2 | 大规模互联体系 | 节点间通信延迟与带宽限制制约集群整体性能，高端互连技术研发门槛较高 | 高速互连网络设计、低延迟协议、拓扑结构优化              | 一体化设计芯片内/间通信机制，定制高速接口与协议               |
| 3 | 软件生态    | 新硬件缺乏操作系统、编译器、算法库等支持，用户难以迁移和使用    | 移植 OS（如 Linux）、开发驱动/编译器、适配主流科学计算软件 | 软硬协同垂直整合：硬件研发同步构建软件栈，优化典型应用            |
| 4 | 产业应用    | 行业软件与新硬件适配度低，缺乏快速迭代与“产学研协同”机制     | 多行业仿真工具差异大、数据格式不统一；缺少应用反馈闭环        | 建立“科研—产业”联合开发机制，制定标准接口，构建“需求—优化—验证”闭环  |
| 5 | 整机能耗    | 算力提升伴随功耗激增，冷却与运营成本高，难以为继          | 提升性能功耗比；从芯片到系统全栈节能                 | 芯片级专用加速单元+系统级液冷与智能电源管理                 |

来源：中国信息通信研究院

## 四、市场规模与增速测算

### （一）全球科学计算市场概览

全球围绕科学研究流程的智能化工具、平台与服务投入持续增加，带动相关市场规模稳步扩张。2024 年全球科学计算市场规模约为 1893.4 亿美元，约占总体科学智能市场的 54%。从产业发展的现实阶段看，科学计算既是相关技术路线中更靠前的基础环节，也是现阶段投入强度、交付形态与生态成熟度相对更集中的部分；因此，全球主要经济体在相关领域的基础设施建设与能力补强，仍普遍以升级与扩建科学计算能力为重要着力点。

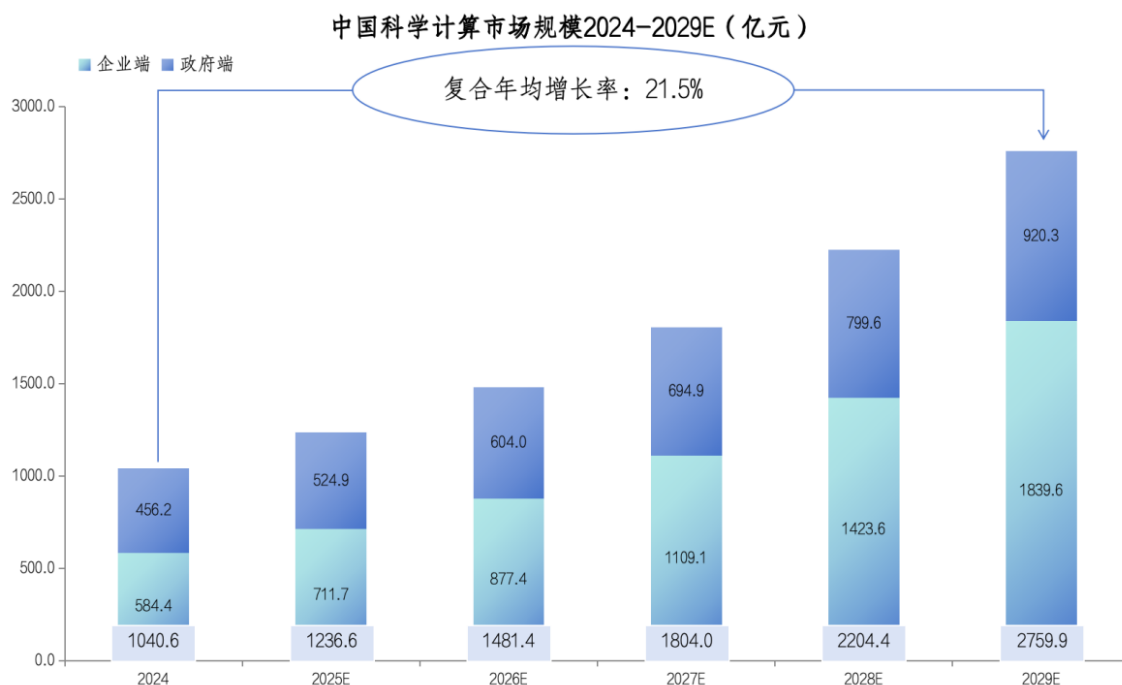
从海外成熟市场的需求侧看，科学计算增长主要由三股力量共同驱动，呈现“政府牵引—产业放量—云端扩展”的复合格局：一是政府、国家实验室与军工体系持续推进超算基础设施建设与迭代升级，形成稳定且具有战略导向的底层需求；二是航空航天、半导体、能源化工、医药与材料等研发密集行业将科学计算作为数字化研发与复杂仿真的关键底座，带动工程仿真、数字孪生及与 AI 相关的计算负载持续增长；三是科学计算上云与“算力即服务”模式逐步成熟，覆盖更多中小企业与科研团队的长尾需求。以美国国家实验室为例，其正推动建模仿真能力以服务化方式对外提供，并结合容器、K8s 等云原生技术提升可扩展性与可用性，反映出海外市场由“硬件集群交付”向“平台化、服务化供给”升级的趋势。

### （二）中国科学计算市场规模拆分与预测

中国科学计算市场可分为政府端与企业端两大需求主体，并在供给口径上覆盖硬件、软件与服务三类投入：政府端主要包括政府机关、科研院所与高校对科学计算基础设施及应用的建设投入；企业端主要体现为工业企业在研发设计、工程仿真与数据分析等场景中对相关软

硬件与服务的采购与使用投入。

在国家科技竞争与产业创新需求共同驱动下，科学计算正加速从“基础设施建设”走向“规模化应用”。2024 年中国科学智能市场规模约 3000 亿元，预计 2029 年增至约 9000 亿元；其中，2024 年中国科学计算市场规模约 1040.6 亿元，预计 2029 年增至约 2759.9 亿元，2024—2029 年 CAGR 约 21.5%<sup>1</sup>。增长动因主要来自两端：一是供给侧算力性能与能效持续演进，二是企业数字化研发与科研创新需求快速释放，推动科学计算逐步成为支撑科技进步与产业升级的关键底座。



来源：中国信息通信研究院

图 4 中国科学计算市场规模预测图

政府端方面，2024 年政府端科学计算市场规模基准约为 456.2 亿元<sup>2</sup>，预计到 2029 年可增长至 900 亿元以上。总体看，政府端科学计

<sup>1</sup> 科学计算市场由政府端与企业端两部分组成。

<sup>2</sup> 政府端科学计算市场涵盖硬性基建与软性服务两部分。硬件部分基于 IDC 预测的 41.5% 复合增长率进行推演；软件与服务部分则结合软硬件采购比例（19.54%）及科学计算大模型的算力租赁需求综合测

算市场增长由“政策牵引+科研需求”共同驱动。

一方面，国家级战略持续锚定新型基础设施的投资方向。2025 年 11 月《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十五个五年规划的建议》提出“适度超前建设新型基础设施，推进信息通信网络、全国一体化算力网、重大科技基础设施等建设和集约高效利用，推进传统基础设施更新和数智化改造”。在该顶层设计指引下，高性能算力设备与超大型算力中心作为新基建的重要组成部分，因其对前沿科技创新的支撑作用，将进一步吸引财政资金、社会资本与产业资源投入。另一方面，科研需求是市场扩容的核心动力：在高能物理、天文物理等对算力依赖度极高的领域，科学计算直接支撑重大科学发现与基础研究，未来高校与科研院所仍将是政府端科学计算的重要应用场景，并具备明确的扩展空间。

企业端：2024 年企业端科学计算市场规模为 584.4 亿元<sup>3</sup>。得益于高端制造业和新兴产业对数字仿真和数据分析需求的爆发式增长，企业端市场预计在未来五年高速扩张，到 2029 年增长至 1840 亿元左右的规模。企业端对科学计算的需求增长是我国企业对算力资源需求从“可选项”向“必选项”转变的结果。特别是汽车、航空、芯片设计、能源化工、生物医药等行业对 HPC 硬件采购、工程仿真软件和云上算力服务的投入将大幅增加。随着高性能算力资源从传统互联网、科研机构向高端制造、能源勘探、未来产业等实体经济领域深度渗透，越来越多的企业将科学计算用于自身产品研发以提升市场竞争力。在此背景下，特定行业的科学计算投入呈现高增长态势。汽车与航空航

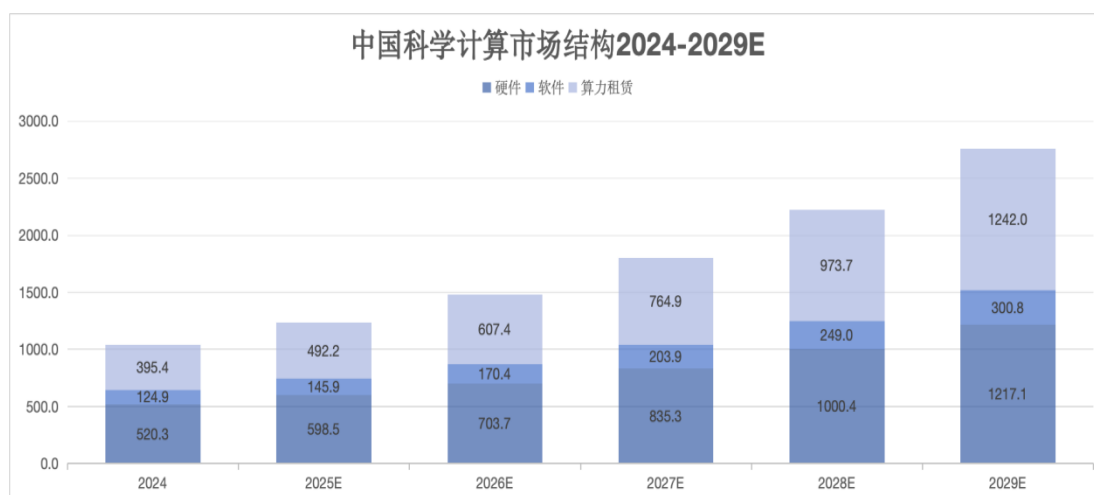
算。

<sup>3</sup> 企业端科学计算市场采用分行业核算模型计算。首先界定科学计算的主要应用行业，继而统计各行业的 R&D 投入，最终通过乘以相应的科学计算渗透率，得出各细分领域的市场规模。

天、芯片设计、能源化工、生物医药等领域因研发密集、流程复杂、合规要求高,对高性能硬件、专业工程仿真软件(如 ANSYS、COMSOL、STAR-CCM+等)的需求持续攀升。这些行业不仅采购规模大,且对算力稳定性、软件适配性和数据安全性提出更高要求,从而带动整个产业链向高附加值环节升级。

### (三) 中国市场结构及增长趋势分析

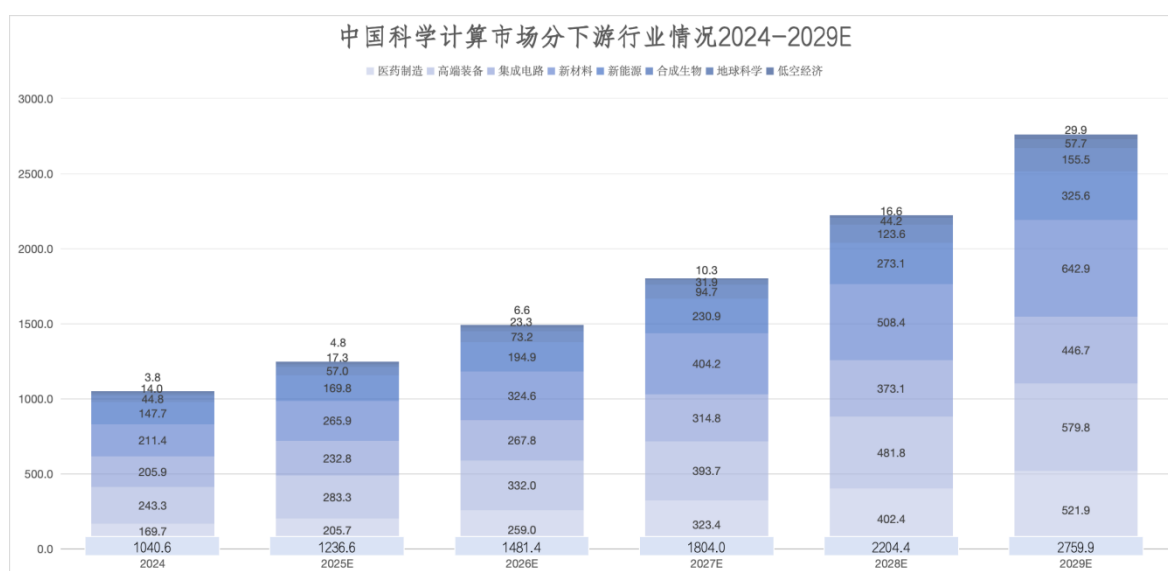
中国科学计算市场的结构性变化,正在从“硬件主导”转向“硬件+服务”双轮驱动。当前硬件投入仍是最大组成部分,2024 年硬件投入 520.3 亿元,约占市场规模的 50%;其次是服务部分(包括系统集成、运维支持及算力租赁等)规模为 395.4 亿元,占比约 38%,软件部分规模为 124.9 亿元,占比约 12%。预计未来随着算力租赁等服务模式普及,硬件占比将有所下降,而服务及运维市场占比将明显提升。其背后主要来自两类驱动:一是企业获取算力资源的方式由“自建”转向“按需使用”,云计算与智算中心等基础设施成熟后,更多企业通过算力租赁、混合调用实现“量需而用”,从而推动服务类支出增长;二是算力资源利用率与运营效率成为关键约束,高额的一次性硬件投入若缺乏专业运维与应用适配,容易造成资源闲置与能耗浪费,促使供给侧从“卖设备”转向“全生命周期交付”,带动服务占比提升。



来源：中国信息通信研究院

图 5 中国科学计算市场结构 2024-2029E

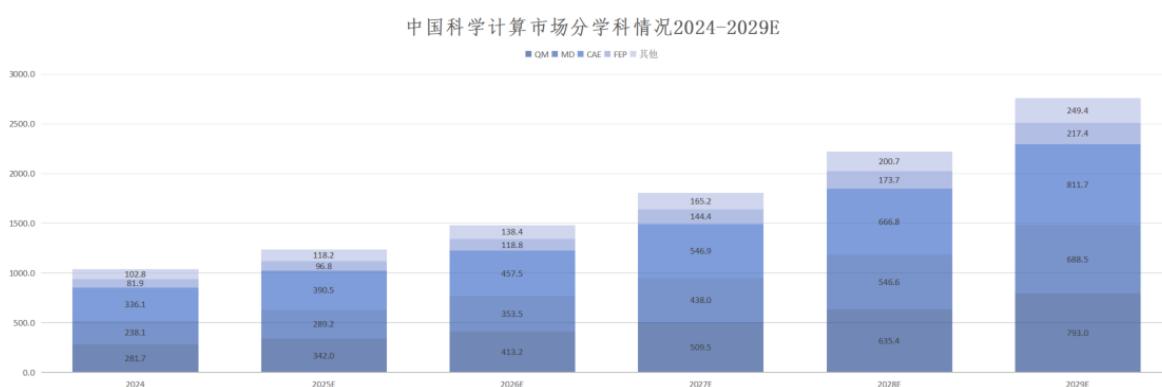
在投入结构变化之外，需求侧的行业分布进一步决定了市场增长的“主战场”。数据表明，2024 年中国科学计算下游需求呈现“多支柱并立、先进制造与硬科技牵引”的结构特征：高端装备 243.3 亿元约占 23.4%、新材料 211.4 亿元约占 20.3%，医药制造、集成电路、新能源分别为 169.7 亿元、205.9 亿元、147.7 亿元约占 16.3%、19.8%、14.2%，前五大领域合计约 94%，构成当前需求侧的核心增量来源；合成生物 44.7 亿元约占 4.3%、地球科学 14.0 亿元约占 1.3%，体现出以新兴交叉学科与国家重大科学问题为牵引的稳步扩张趋势；低空经济现阶段占比虽不足 1%，但已显现前瞻性需求萌芽。同时，考虑到行业数字化研发持续深化、应用边界不断外延，本文在分类框架上保持开放性：以“技术类型×应用领域”构建矩阵式图谱，用以解释不同领域对共性仿真计算能力的共享与交叉渗透。



来源：中国信息通信研究院

图 6 中国科学计算市场分下游行业情况 2024-2029E

进一步从“技术类型”维度拆分，可以更直接地解释科学计算如何作为底座支撑科学智能市场扩张，并形成工具侧的增长抓手。在全球科技竞争与产业升级背景下，科学计算正从“辅助验证”走向“主导设计”，其在研发全链条的渗透使得学科工具市场快速放大。按技术口径拆分，2024 年科学计算相关市场按 QM、MD、CAE 等学科工具分类的情况为 QM 约 281.7 亿元、MD 约 238.1 亿元、CAE 约 336.1 亿元<sup>4</sup>。其中，CAE 可视作工程仿真相关工具的统称，通常涵盖计算流体力学（CFD）、有限元分析（FEA/FEM）、多体动力学、热仿真以及电磁—结构等多物理场耦合仿真。其核心作用是在虚拟环境中完成结构设计、性能预测与可靠性验证，是航空航天、高端装备、汽车、能源等领域研发数字化的重要支撑。科学计算作为科学智能的“数据工厂”和“机理引擎”，通过 QM、MD、CAE 等工具在多尺度上开展高保真模拟，持续生成机理可信数据，并与 AI 方法结合推动仿真加速、参数寻优与设计迭代，由此形成“工具需求增长—算力投入提升—场景扩张”的正反馈。



来源：中国信息通信研究院

图 7 中国科学计算市场分技术类型情况 2024-2029E

<sup>4</sup> 各细分学科领域的科学计算市场占比，系基于多维市场调研数据及行业专家深度研判综合得出。

## （四）中国科学计算市场前景展望

中国科学计算市场正处于高速增长阶段，市场空间广阔。展望未来，在国家科技创新战略和数字经济政策的推动下，中国科学计算市场有望保持两位数的年复合增长率，成为全球增长最快的区域市场。预计到 2027 年，中国科学计算整体市场规模将接近 2000 亿元量级，在全球所占份额进一步提高。尤其是企业端需求的爆发式扩张，将成为市场增长的主要引擎：越来越多的制造业和新兴产业企业加大对超级计算和人工智能算力的投入，以支撑复杂模型仿真、海量数据分析和产品创新研发。政府端市场在“东数西算”等政策带动下也将稳步扩张，新一代国家超级计算中心布局和科研算力升级为市场提供长期动力。

总而言之，中国科学计算产业正迈入快速扩张的新征程。一方面，科学计算正加速赋能制造强国和科技强国建设，各行业对算力的渴求催生出巨大的市场增量；另一方面，政策扶持与自主创新为行业提供了有力支撑，预计未来中国科学计算市场将保持高速增长，在全球范围内实现份额提升和影响力跃升。中国市场的高速成长潜力，加之政策驱动下的算力基础设施投入，将持续推动科学计算产业在未来五年保持蓬勃发展。

## 五、典型应用场景

本章将基于前述分类框架，深入剖析科学计算在八大关键战略领域的应用场景与商业空间<sup>5</sup>。

---

<sup>5</sup> 本章各行业科学计算市场规模的测算采用分行业核算方法，具体计算逻辑如下：市场规模=该行业 R&D 投入×科学计算渗透率。各行业渗透率参数通过市场调研和专家访谈确定，R&D 投入数据来源于国家统计局公开数据。

## （一）生物医药

创新药研发的高成本与高风险，正推动药企加大对科学计算的投入，以模拟验证分子与工艺，缩短周期、降低失败率。医药领域科学计算市场规模从 2020 年的 77.6 亿元增长至 2024 年的 169.7 亿元，年复合增长率达 21.6%。预计到 2029 年整体商业空间将达 521.9 亿元。

在医药科学计算领域,MD 和 Docking/FEP 是两大核心技术方向。2024 年, Docking/FEP 和 MD 的市场规模分别为 81.9 亿元和 64.0 亿元, 分别占生物医药市场的 48.3%和 37.7%; 预计到 2029 年, Docking/FEP 和 MD 市场规模将分别增长至 217.4 亿元和 230.8 亿元。

特别需要说明的是,在生物领域,对于大体系和长时间尺度的分子动力学 (MD) 仿真模拟具有突出的科学意义。真实的生命功能往往由多个生物大分子构成的复合物(如核糖体、转运体、偶联受体等)来承载,这些体系的构建通常需要达到上百万个原子的量级。为了捕捉这些复合物关键的构象变化或重要的生理反应过程,模拟的时间尺度往往需要达到微秒乃至毫秒级别。因此,实现百万原子级大体系的长时间模拟是 MD 领域的一项核心挑战与追求。而针对这类大体系、长时长的仿真模拟计算对于算力需求具有极高的技术门槛,至少须达到微秒级以上(1 微秒/天)的仿真模拟计算性能才能满足产业及研发应用的实际需求。

在这一领域,美国的安腾(Anton)系列生物专用超算能够实现比通用超算快数个数量级的模拟速度,ANTON 2 计算效率可达 10 微秒/天,是全球范围内唯一实现百万原子级体系模拟超过 1 万微秒的技术平台,将 MD 模拟推入了“毫秒时代”。在全球范围内的新冠肺炎疫情暴发初期,美国的计算化学家们便借助 ANTON 2,对 COVID-19 病毒处于无配体结合、激活状态的主要蛋白酶(main protease)实现

了 100 微秒的分子动力学模拟，而这些关于 COVID-19 病毒蛋白的分子动力学模拟数据能够有效助力科学家们增进对病毒侵染分子机制更深刻的理解，为理解病毒的感染机制、揭示病毒的弱点，以及加快设计靶向药物提供了重要的信息。我国基于“天穹”超级计算机（计算效率 5 微秒/天）完成了超过 10000 微秒的同类模拟。除此之外，国内外其他单位目前尚难以完成超过 1 微秒的该类大体系计算任务。安腾系统的这一能力，使其成为观测蛋白质折叠、构象变化及药物结合过程的革命性工具，已被全球多家顶尖学术机构与制药企业用于重要靶点的机理研究与先导化合物优化，充分体现了专用计算硬件在攻克生物模拟关键瓶颈上的巨大价值。

## （二）高端装备

高端装备企业应用科学计算的主要场景为航空航天、汽车、船舶、半导体。为缩短周期、降低成本，企业正普遍采用仿真计算主导设计与验证。在航空航天与汽车领域，通过 CFD、FEM、碰撞模拟等手段，可大幅替代风洞、强度测试等物理试验，在虚拟空间中迭代优化设计。同样，高端装备制造涉及很多工艺密集制造环节（尤其是先进制程与先进封装），研发验证高度依赖 EDA（电子设计自动化）完成电路仿真、功能/时序验证与物理实现优化；同时，工艺开发与器件评估广泛使用 TCAD（技术计算机辅助设计）开展工艺—器件级多物理场仿真，以在试产前预测并优化关键指标（性能、良率与可靠性）。

高端装备科学计算市场规模从 2020 年的 119.3 亿元增长至 2024 年的 243.3 亿元，年复合增长率达 19.5%，预计到 2029 年整体商业空间将达 579.8 亿元。2024 年：CAE、QM、MD 市场规模分别为 146.2 亿元、43.5 亿元、32.4 亿元，分别占高端装备市场的 60.1%、17.9%、13.3%；预计到 2029 年，CAE、QM、MD 市场规模将分别增至 343.0

亿元、112.5 亿元和 79.5 亿元。

这一趋势已在航空航天领域得到典型体现。波音在 767 项目中进行了 77 种原型机翼的物理测试，而在 787 研制阶段，由于引入约 80 万小时的模拟仿真，仅进行了 11 种物理测试；对于下一代商用飞机，借助大量虚拟模拟，风洞实验次数有望进一步降至 3 至 4 次。波音 T-7A Red Hawk（喷气教练机）更是基于建模和 3D 设计工具完成虚拟设计，研发周期仅 36 个月，较传统模式缩短约 80%，体现出科学计算对高端装备研发提效和降本의显著支撑作用。

### （三）集成电路

随着摩尔定律演进放缓与工艺节点逼近极限，芯片设计—制造—封装的复杂度显著抬升，科学计算正成为集成电路产业不可替代的“验证与收敛引擎”。先进制程下晶体管数量剧增、时序窗口收窄，使电路验证、形式化核验、故障仿真回归与签核（Sign-off）计算量大幅上升；同时，功耗、热、应力等多物理场耦合问题在先进封装（2.5D/3D、SiP、天线封装一体化等）中更加突出，需要借助大规模并行仿真提前评估可靠性与良率。以 EUV 光刻为例，光学临近校正（OPC）等计算光刻任务依赖高并行算力实现高效版图优化；而面向 6G 的射频前端、基带 SoC 与大规模天线阵列设计，则进一步把验证范围从“芯片级电路”扩展到“芯片—封装—天线—链路/系统”的多尺度协同验证，对电路级验证与工程级仿真提出更高的算力与算效要求。与此同时，为降低对国外工具链的依赖、提升研发闭环可控性，国内晶圆厂与设计企业也在持续加大对本土科学计算与工程仿真解决方案的投入。

在此背景下，集成电路科学计算市场规模从 2020 年的 108.8 亿元增长至 2024 年的 205.9 亿元，年复合增长率达 17.3%。预计到 2029 年整体商业空间将达 446.7 亿元。从技术构成看，2024 年 CAE、QM、

MD 市场规模分别为 128.6 亿元、30.8 亿元、10.7 亿元，分别占集成电路市场的 62.4%、14.9%、5.2%；预计到 2029 年，CAE、QM、MD 市场规模将分别增至 279.0 亿元、73.7 亿元和 24.3 亿元。

这一趋势已在国际头部厂商合作中有所体现。新思科技与台积电合作，推动埃米级（Angstrom-Scale）设计在 TSMC A16 与 N2P 先进制程中导入通过认证的 EDA 流程，反映出在先进制程持续演进背景下，科学计算工具已从辅助设计工具进一步演进为支撑工艺落地和设计收敛的关键基础能力。

#### （四）新能源

“双碳”目标推动新能源产业蓬勃发展，新型电池、光伏材料、氢能燃料、电网优化等领域研发竞争日益加剧，科学计算正成为提升研发效率、降低试错成本的核心抓手。动力电池、光伏、风电等细分领域，分别依托分子模拟、量子化学、CAE 仿真等计算手段加速材料研发与产品设计，氢能储能、电网分析等环节也通过仿真预判性能、优化迭代。

受此驱动，新能源科学计算市场规模从 2020 年的 45.4 亿元增长至 2024 年的 147.7 亿元，年复合增长率达 34.3%。预计到 2029 年整体商业空间将达 325.6 亿元。从技术构成看，2024 年 QM、MD 和 CAE 市场规模分别为 69.3 亿元、59.1 亿元和 12.1 亿元，分别占新能源市场的 46.9%、40.0%和 8.2%；预计到 2029 年，QM、MD 和 CAE 市场规模将分别增至 158.7 亿元、128.4 亿元和 25.1 亿元。

这一趋势在动力电池领域已有代表性实践。宁德时代采用高通量元素模拟仿真技术，在原子级别对电池材料进行模拟计算和设计仿真，寻找不同电池材料基因的结合点，对电池材料体系进行系统创新并探索多元化技术路线。例如，宁德时代依托科学计算、先进算法和高性

能算力，结合微观机理认知设定科学筛选条件，从海量的分子基因数据库中筛选出理想的目标分子，并在实际产品中进行快速应用验证，获得了多个性能优势显著的新型添加剂分子。

## （五）新材料

新材料研发周期长、成本高，产业端迫切需要缩短周期、降低试错成本。为此，企业正将科学计算嵌入材料配方筛选、结构设计等关键环节，通过模拟技术前置验证材料性能，以提升研发效率与投入产出比，典型应用贯穿“量子化学—分子动力学—工程仿真”的多尺度链条。

在此背景下，新材料科学计算市场规模从 2020 年的 96.7 亿元增长至 2024 年的 211.4 亿元，年复合增长率达 21.6%。预计到 2029 年整体商业空间将达 642.9 亿元。从技术构成看，2024 年 QM、MD 和 CAE 市场规模分别为 116.1 亿元、50.9 亿元和 35.3 亿元，分别占新材料市场的 54.9%、24.1%和 16.7%；预计到 2029 年，QM、MD 和 CAE 市场规模将分别增至 366.2 亿元、152.3 亿元和 101.0 亿元。

这一趋势在化工和材料企业中已有较成熟应用。德国 BASF 于 2017 年自建企业级超算“Quriosity”，借助复杂模拟协助研究人员更精确地预测化妆品成分的优化组合，并通过分子建模在上万种可能方案中筛选具备特定功效的化合物。此外，BASF 还借助材料模拟计算支持 Tinuvin 系列稳定剂产品开发，并通过仿真反应器中的物质与温度分布实现反应过程优化，体现出科学计算在新材料研发与工艺改进中的双重价值。

## （六）合成生物

合成生物产业正加速商业化，对酶、生物基化学品等领域的研发效率提出更高要求。合成生物企业日益依赖科学计算辅助生物体系设

计，模拟预测酶催化反应能量变化，以更精准地设计高性能酶与代谢途径；借助计算筛选酶序列变体或通过代谢网络建模优化菌株，大幅减少实验试错成本，提升研发成功率。

在这一趋势带动下，合成生物科学计算市场规模从 2020 年的 18.9 亿元增长至 2024 年的 44.7 亿元，年复合增长率达 24.0%。预计到 2029 年整体商业空间将达 155.5 亿元。从技术构成看，2024 年 QM、MD 和 CAE 市场规模分别为 20.5 亿元、19.9 亿元和 2.5 亿元，分别占合成生物市场的 45.9%、44.7%和 5.5%；预计到 2029 年，QM、MD 和 CAE 市场规模将分别增至 73.8 亿元、68.0 亿元和 8.2 亿元。

这一趋势在国内企业研发实践中也有所体现。锦波生物积极应用前沿技术辅助研发预测蛋白结构，利用 AlphaFold 等工具快速获取预测结果，并通过同步辐射 X 线进行验证，以确保数据可靠性。这表明，科学计算正在从“辅助分析工具”进一步转化为合成生物研发流程中的关键支撑能力。

## （七）地球科学

地质、气候和环境领域对科学计算的应用需求较高。这些行业普遍需要对地球系统进行深入的多维度定量分析，这往往需要借助强大的计算能力来执行精细计算和未来趋势预测。

在此带动下，地球科学领域科学计算市场规模从 2020 年的 4.1 亿元增长至 2024 年的 14.0 亿元，年复合增长率达 35.7%。预计到 2029 年整体商业空间将达 57.7 亿元。从技术构成看，2024 年 CAE、QM 和 MD 市场规模分别为 9.3 亿元、1.4 亿元和 1.2 亿元，分别占地球科学市场的 66.4%、10.0%和 8.6%；预计到 2029 年，CAE、QM 和 MD 市场规模将分别增至 38.4 亿元、6.4 亿元和 5.2 亿元。

整体来看，地球科学对高分辨率建模、多物理场模拟和长期趋势

预测的持续需求，是该领域市场快速扩张的重要基础，也决定了 CAE 等工程仿真类工具在这一领域占据更高比重。

## （八）低空经济

低空经济中无人机物流、城市空中交通等新兴领域，因其对快速迭代设计和高水平安全的核心需求，正驱动科学计算成为支撑技术创新与运行管理的关键工具，从而拉动市场需求。

在这一背景下，低空经济科学计算市场规模从 2020 年的 1.1 亿元增长至 2024 年的 3.8 亿元，年复合增长率达 36.3%。预计到 2029 年整体商业空间将达 29.9 亿元。从技术构成看，2024 年 CAE 和 QM 市场规模分别为 2.1 亿元和 0.2 亿元，分别占低空经济市场的 55.3% 和 5.0%；预计到 2029 年，CAE 和 QM 市场规模将分别增至 17.0 亿元和 1.7 亿元。

可以看出，低空经济虽然当前市场规模尚小，但由于其对气动设计、结构安全、飞控优化和运行验证的依赖较强，科学计算已成为该领域从原型开发走向规模化应用的重要技术底座，因此未来增长弹性较为突出。

## 六、全球科学计算产业布局

### （一）国际科学计算政策布局

目前，全球大国之间的经济竞争已经转化为以高性能算力资源为核心的较量，为抢占经济发展制高点，各国纷纷加码相关政策布局。

一是推动 AI 与科学研究深度融合，打造“科学智能”新范式。2025 年 11 月，美国参议员提出“美国科学加速项目”（ASAP），旨在开发革命性 AI 工具以加速科研进程；特朗普政府启动“创世计划”（Genesis Mission），整合超级计算、安全云平台、高质量科学数据与先进 AI 系统，构建统一科研加速平台，覆盖先进制造、核能、生物技术、量

子信息、关键材料和半导体六大关键领域；同期，英国发布“科学智能战略 Strategy”，宣布五年内投入 1.37 亿英镑，支持 AI 在新药研发、清洁能源等科研领域的深度应用。

二是优化制度与基础设施支撑，为经济发展提供保障。2025 年 7 月，美国白宫发布“人工智能（AI）行动计划”，明确提出放松监管限制，并扩大数据中心能源供应，以支撑 AI 算力需求的快速增长。此类举措反映出各国正从“技术竞争”转向“生态竞争”，注重构建涵盖能源、法规、人才、基础设施在内的全链条支撑体系。

三是强化国家战略顶层设计，将高性能算力及相关前沿技术纳入国家核心竞争力范畴。日本发布《综合创新战略 2025》，将 AI、量子技术和核聚变能源列为国家战略重点；德国新联合政府在执政协议中确立 AI 与量子技术为研究与创新资助的优先方向；澳大利亚推出国家人工智能计划，旨在推动 AI 在各经济领域的深度应用与人才培养。

四是加大财政投入与专项资助，加速关键技术从研发到应用的转化。各国通过设立专项资金、项目和机构，系统性支持基础研究与产业落地。英国政府宣布投资 1.21 亿英镑发展量子技术，其中 4610 万英镑由“创新英国”用于推动量子计算与网络的实际应用；美国国家科学基金会（NSF）向“未来制造业计划”投入 2550 万美元，聚焦生物制造、网络制造、生态制造，并探索与量子制造的交叉融合；英国 DSIT 与 UKRI 联合发布《计算路线图》，致力于构建世界一流的多样化、韧性化计算基础设施体系。

五是深化国际科技合作，构建跨国产学研协同创新机制。2025 年 9 月，美英签署《科技繁荣协议》，在 AI、核能与量子计算领域建立两国顶尖研究机构与标准组织的联合倡议，旨在加速技术突破并惠及

公众，此类合作不仅强化技术标准协调，也为共同应对供应链安全、伦理治理等挑战奠定基础。

## （二）我国科学计算政策布局

截至 2025 年，我国在科学计算领域已形成“**顶层设计牵引、区域协同推进、数据要素支撑、重点赛道加速突破**”的系统性框架。

在顶层设计层面，科学计算作为支撑基础科研、工程仿真等关键领域的核心能力已被纳入国家重大科技基础设施体系。2025 年 8 月，国务院《关于深入实施“人工智能+”行动的意见》提出加快实施“人工智能+”科学技术的重点行动，推动基础科研平台和重大科技基础设施智能化升级，打造开放共享的高质量科学数据。加强人工智能与生物制造、量子科技、第六代移动通信（6G）等领域技术协同创新，以新的科研成果支撑场景应用落地。2025 年 10 月，党的二十届四中全会审议通过《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十五个五年规划的建议》，提出统筹国家战略科技力量建设，增强体系化攻关能力；加快人工智能等数智技术创新，强化算力、算法、数据等高效供给；全面实施“人工智能+”行动，全方位赋能千行百业。2025 年 11 月，国务院发布《关于加快场景培育和开放推动新场景大规模应用的实施意见》，支持重点制造业企业向自主基础软件、工业软件等产品开放应用场景，遴选培育工业领域垂直大模型典型应用场景。

在区域布局层面，一是科技部统筹部署建设国家超级计算中心，目前已建成广州、深圳、文昌、长沙、成都、重庆、乌镇、昆山、无锡、郑州、西安、济南、太原、天津 14 家超算中心，形成覆盖全国的高性能计算网络；二是我国地方根据产业禀赋提出众多推动科学计算产业发展的政策举措。2024 年 7 月，天津市发布《天津市算力产业发展实施方案（2024—2026 年）》，提出提升超级算力应用率，到 2026

年全市算力应用率达到 70% 以上。推动国家超级计算天津中心拓展高精度科学计算市场,服务重大科研任务,保障国家重大战略需求;2024 年 11 月,河南省发布《河南省算力基础设施发展规划(2024—2026 年)》,提出到 2026 年底全省高性能算力占比超 90% 的目标;2025 年 7 月,北京市发布《北京市加快人工智能赋能科学研究高质量发展行动计划(2025—2027 年)》,提出研发多学科通用的科学基础大模型和新一代科学计算智能模拟软件工具,推动科学智能在基础研究、新材料等领域深度应用。

在数据要素支撑方面,我国加快构建面向科学计算的高质量数据供给与流通机制。2024 年 1 月,国家数据局等 17 部门印发《“数据要素×”三年行动计划(2024—2026 年)》,提出支持培育具有国际影响力的科学数据库建设,聚焦生物育种、新材料创新、药物研发等领域,构建科学知识资源底座;2025 年 11 月,国家发展改革委、国家数据局、工业和信息化部联合印发《国家数据基础设施建设指引》,提出分阶段开展夯基架梁、互联互通的推进路径,推动国家数据基础设施形成横向联通、纵向贯通、协调有力的基本格局。数据要素领域的众多举措有利于破解制约科学计算发展的“数据孤岛”与“样本不足”瓶颈,为分子模拟、气候建模等依赖大规模高质量数据的计算任务提供源头活水。

在重点赛道突破方面,我国高度重视研发数字化与智能化转型,在材料、医药和高端装备等关键领域密集出台相关政策文件,明确发展方向与实施路径。2024 年 10 月,工信部、财政部与国家数据局发布《新材料大数据中心总体建设方案》,提出构建覆盖材料研发、中试、应用全链条的国家级数据基础设施,推动材料基因工程与人工智能深度融合,加速新材料“研发—验证—迭代”周期;2024 年 12 月,

《制造业企业数字化转型实施指南》强调以智能工厂为载体，打通设计、生产、运维数据流，提升高端装备自主可控与柔性制造能力；2025年4月，工信部等七部门印发《医药工业数智化转型实施方案（2025—2030年）》，聚焦AI辅助药物设计、数字孪生临床试验、智能生产与质量追溯等场景，推动医药研发从“经验驱动”向“数据+模型驱动”跃升；2025年12月，工信部等四部门印发《汽车行业数字化转型实施方案》，强调推动人工智能在企业研发设计、生产制造等环节的深度应用，打造汽车行业大模型和丰富智能体应用，探索在软件与智能化研发、智能工艺规划与虚拟调试等领域打造垂域大模型。

### （三）全球主要企业布局

全球高性能计算的布局正由少数巨头主导的局面，逐渐演进为围绕芯片企业（CPU 自主设计、GPU/专用加速器）—整机企业（板卡与系统集成、异构算法集群、科学计算专用一体机、软硬一体自研整机）—软件生态（算法与工具链、计算平台服务）—行业落地多层协同的多主体格局。

#### 1. 芯片企业

##### （1）CPU 设计企业

国外企业代表及特点：CPU 设计领域正呈现多指令集架构并行发展的趋势，x86、ARM 以及其他新型架构在不同应用场景中形成差异化布局。Intel 和 AMD 依托长期积累的 x86 软硬件生态，持续推进服务器和高性能通用处理器产品迭代，如 Intel Sapphire Rapids、AMD Zen 系列等，重点覆盖通用计算、高性能计算和数据中心等场景。与此同时，ARM 架构在服务器和高性能计算领域的应用不断拓展，Ampere 面向云计算场景推出 ARM 架构服务器芯片，富士通 A64FX 处理器支撑了“富岳”超级计算机，NVIDIA 也推出基于 ARM 架构的

Grace CPU，以增强 CPU 与 GPU 之间的协同计算能力。总体来看，国际 CPU 企业更多围绕成熟生态延展、云计算需求适配和异构融合能力提升展开布局。

国内代表及特点：中国 CPU 企业围绕高性能通用处理器、服务器处理器和科研计算应用需求，形成了多条并行发展的技术路线。一类企业基于国际主流指令集授权开展微架构设计与产品优化，例如飞腾、华为鲲鹏等，重点面向服务器、数据中心和高性能计算等场景，持续完善处理器产品、操作系统、编译器和基础软件生态。飞腾 CPU 在部分科研计算和服务器场景中开展应用，华为鲲鹏则围绕服务器 CPU、EulerOS 操作系统及相关工具链构建软硬件协同生态。另一类企业侧重指令集和架构体系探索，例如龙芯推出 LoongArch 架构，并持续推进配套软件生态建设。此外，申威、兆芯、海光等企业也结合自身技术积累，在通用 CPU、高性能计算和行业服务器等方向开展产品布局。总体来看，中国 CPU 企业正在围绕“主流指令集生态适配”和“新型架构体系探索”两类路径持续推进，逐步完善面向科学计算、数据中心和行业应用的基础算力供给能力。

当前，国际 CPU 企业布局更侧重成熟架构生态的持续扩展和面向云计算、异构计算的产品迭代；中国 CPU 企业则更多围绕服务器、高性能计算和行业应用场景，推进多技术路线并行发展和软硬件生态建设。

## （2）GPU 与专用加速器企业

国外企业代表及特点：GPU 及专用加速芯片已成为支撑科学计算与 AI 融合计算的关键增量。NVIDIA 依托“GPU 硬件+高速互连+CUDA 生态”形成主导优势，数据中心 GPU（A100、H100）在高性能计算与深度学习中占据主流，并通过收购 Mellanox 将 InfiniBand 等

互连纳入体系,构建“GPU+互连”全栈能力。AMD 以 Instinct 系列 GPU 并购 Xilinx 形成“GPU+FPGA”异构加速方案; Intel 推出 oneAPI, 推进 PonteVecchioGPU 与 HabanaGaudi 加速器,但生态仍在培育、影响力相对有限。针对 NVIDIA 的技术优势,欧美新创公司走差异化路线:英国 Graphcore(IPU)聚焦稀疏模型计算,美国 Cerebras(晶圆级 WSE)面向特大型神经网络训练发力, SambaNova、Groq 等围绕特定工作负载推出专用加速器,但总体仍未撼动 GPU 主导格局。

国内企业代表及特点:国内 GPU 及专用加速芯片企业围绕 AI 训练推理、高性能计算和行业应用需求,正在形成以 GPU、AI 加速器和通用计算芯片为代表的多元化布局。华为昇腾围绕 AI 训练、推理和行业智能化应用构建软硬件协同体系,并通过 MindSpore 等框架完善开发生态,在 AI 计算和部分科学计算加速场景中持续拓展应用。寒武纪以思元系列处理器和 NeuWare 软件栈为核心,面向云端训练、推理和边缘智能等场景开展布局。壁仞发布 BR 系列通用 GPU,重点面向数据中心、AI 训练推理及高性能计算等场景,强调在多精度计算和大规模并行任务中的适配能力。摩尔线程则推进全功能 GPU 路线,从图形渲染逐步拓展至通用计算、AI 计算和数字孪生等场景。

展望未来,国际企业更多围绕成熟 GPU 生态、高速互连和异构加速体系进行平台化布局;中国企业则主要围绕 AI 训练推理、高性能计算和行业应用场景,推进 GPU、AI 加速器及相关软件生态的多路线布局。

### (3) 内核创新架构企业

国外企业代表及特点:内核架构创新企业指那些从处理器指令集和微架构层面探索全新范式的公司,这被视为孕育下一代高性能科学计算平台的“根技术”。国际上,传统 CPU 厂商和 IP 供应商在架构层

面的持续投入同样值得关注。IBM 的 POWER 架构在高性能计算中占有一席之地，近年来通过引入矩阵运算等新指令扩展，以及提高内存带宽、支持更大向量寄存器等手段，不断提升对 AI 和科学模拟负载的适应能力。ARM 阵营除了发展通用 CPU，也在架构上增加对 HPC/AI 的支持（如 Scalable Vector Extension 向量扩展指令），以提高对科学计算的效率。欧洲主导的开放指令集 RISC-V 近年来也在高性能领域探索，例如欧洲处理器计划（EPI）开发基于 RISC-V 的加速器用于未来超算。这些趋势体现出：通过架构、编译器、算法库到应用的协同优化，挖掘计算潜力正成为各国关注的重点。

国内企业代表及特点：在国内，内核级创新呈现“企业化探索+重大工程牵引+可重构路线并进”的格局，代表性实践可概括为三类：一是思朗科技等面向科学计算负载进行底层革新的探索。其自研 MaPU 架构强调以自主指令集与微架构协同优化为基础，提出“软件定义硬件（Software-Defined Hardware, SDH）”理念，通过在指令/微架构层面增强对典型科学算子与并行模式的适配，使同一套架构可在软件配置下覆盖不同算法需求，从而在一定程度上兼顾通用性与效率；二是龙芯中科的 LoongArch 路线，侧重于在指令集层面实现自主可控，通过自定义 ISA 并推进操作系统、编译器与基础库等配套生态建设，为后续面向高性能负载的持续优化预留空间；三是以“神威·太湖之光”代表，其核心特征是围绕国产处理器内核与系统架构开展长期协同创新，并在编译器、并行运行时、通信与数学库等关键软件栈上形成体系化配套，以支撑超大规模并行科学应用的工程化落地。与此同时，可重构计算（如 FPGA/CGRA 等）在国内也被视为介于通用处理器与专用 ASIC 之间的重要补位路线：通过对关键算子进行可配置加速、与 CPU/GPU 形成异构协同，可在特定科学负载上获得更优能效比与

确定性性能，但其规模化应用通常依赖成熟的工具链、编程模型与软件生态支撑。

内核创新架构正在成为各国完善科学计算底层能力的重要布局方向。国际企业更多围绕既有 CPU/IP 生态开展指令扩展、向量计算、矩阵运算和编译工具链优化，推动传统架构更好适配 HPC 与 AI 融合负载；中国相关企业和科研力量则围绕自主指令集、软件定义硬件、专用处理器体系和可重构计算等方向开展多路径探索，并注重与编译器、算法库、运行时环境和应用软件形成协同布局。未来，内核架构创新将更多体现为“架构—软件—应用”的系统性协同，而非单一芯片或单点技术突破。

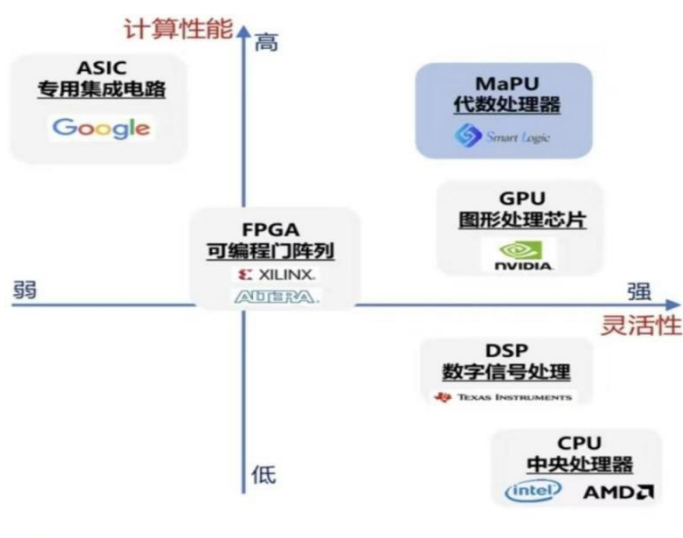


图 8 主流处理器架构计算性能与灵活性对比示意图

## 2. 整机企业

### （1）板卡与整机适配/系统集成商

国外企业代表及特点：板卡与整机系统集成商负责把 CPU/GPU 的“纸面性能”转化为系统可用的“实际算力”，是连接芯片与整机的关键枢纽，核心能力集中在高速互连、散热、供电与存储等工程集成。国际上，Mellanox 的 InfiniBand 已在超算互连方向取得了较大的成果，其显著提升大规模并行计算的节点通信效率；Vertiv、施耐德提供数

据中心级供电与液冷散热方案，保障超机房稳定运行与热管理；在主板与系统适配方面，Supermicro 以高密度、高可靠主板与机箱方案见长，可支持多路 CPU、多 GPU 复杂配置。总体上，国外厂商依托长期工程经验，形成从高速网络到电力制冷的完整配套体系。

国内企业代表及特点：国内板卡与系统配套企业主要围绕高速互连、整机适配、散热供电和系统工程优化等方向开展布局，逐步提升面向科学计算场景的系统集成能力。在高速互连方面，相关企业围绕高速通信背板、光互连、交换芯片和网络适配等环节开展产品研发与工程应用，以支撑大规模并行计算中的数据传输和节点协同需求。例如，矩阵元等企业布局高速光互连产品，服务于高性能计算系统内部的数据通信需求。在整机适配方面，浪潮信息、中科曙光、联想等整机厂商结合不同 CPU、GPU 及加速卡平台，在主板设计、处理器互连、刀片系统、BIOS 适配、液冷供电和系统调优等方面开展协同优化，提升整机系统的稳定性、兼容性和工程交付能力。总体来看，中国板卡与系统配套企业更加注重围绕本土算力平台、行业用户需求和数据中心建设场景，形成从部件适配到整机工程优化的配套布局。

随着科学计算系统规模和复杂度不断提高，板卡适配与系统集成能力对整机性能和能效的影响愈发突出。拥有高速互连、先进散热供电及软硬件协同优化能力的厂商，将在超算整机市场中扮演不可或缺的角色，成为提升算力供给上限的关键力量。

## （2）异构算法集群企业

国外企业代表及特点：异构算法集群集成 CPU/GPU/FPGA 等多种处理器，是高端超算与 AI 融合计算的竞争高地，系统扩展能力与互连效率往往决定算力上限。NVIDIA 依托 NVLink、NVSwitch 等高速互连在大规模 GPU 异构集群上占优，基于 NVIDIA GPU+InfiniBand

的超级计算机在 TOP500 长期占据主导。除加速器厂商外，戴尔、联想、HPE(收购 Cray 后)、IBM 等整机厂商也提供融合 CPU/GPU/FPGA 的异构超算方案，擅长将最新处理器与高速网络、并行文件系统集成，并配套成熟软件栈（如 MPI 通信库、调度系统），为科学计算应用提供开箱即用支撑，推动“多范式支持+深度优化”成为主流方向。

国内企业代表及特点：在 AI 与科学计算融合需求带动下，国内传统科学计算厂商与新兴芯片企业共同推进异构集群。中科曙光整合国产飞腾 CPU 与寒武纪、沐曦等加速卡推出全国产高性能计算机，并在整机层面深度优化（自主高速互连网络、国产交换设备与高效液冷散热方案）以适配复杂科学计算场景；浪潮与寒武纪、壁仞等合作，将加速卡适配进服务器平台，提供开放兼容的异构加速方案。兆芯、海光等也参与国产 x86/ARM 处理器与加速器组合的集群架构协同优化；在软件侧，清华大学、国家超算中心等推进适配异构系统的并行算法库与调度软件，提升多算力协同效率。

随着 AI 与科学计算深度融合，支持多种计算范式并进行全局优化的异构集群将成为主线方向。国内厂商通过掌握高速互连、自主交换和系统工程能力，在异构超算集群领域逐步建立竞争优势。

### （3）科学计算专用一体机企业

国外企业代表及特点：科学计算专用一体机通过端到端的深度定制，针对特定科学计算任务实现了性能的极致优化，被视为突破通用架构性能天花板的一条路径。国际上有若干典型案例：例如 D.E.Shaw 研究所开发的 Anton 系列专用超级计算机，聚焦于分子动力学(MD)模拟，在蛋白质折叠等特定任务上比传统通用超算提升了几个数量级的效率；又如谷歌开发的 TPUPod 集群，专用于大规模机器学习训练，在 AI 计算上取得远超通用 GPU 集群的能效优势。这些专用系统通过

牺牲通用性、专门优化某类算法内核，展现出定制架构在特定领域的非凡威力。

国内企业代表及特点：中国科学计算专用一体机相关布局主要围绕特定科学负载优化、软硬件协同设计和一体化交付能力展开。相关科研机构和企业正在探索多样化技术路径，包括基于 FPGA 阵列的可重构计算加速器、面向特定算法的专用处理器、专用矢量处理系统以及量子计算加速等方向，重点服务于分子模拟、材料计算、流体仿真、气象模拟等对算效和稳定性要求较高的场景。其中，思朗科技推出了定位于“通用”科学计算的天穹 3D 科学计算一体机。该系统从架构设计上兼顾通用性与专用优化：一方面采用通用可编程的体系架构，另一方面围绕科学模拟应用进行定制化协同优化，在分子动力学、量子化学、计算流体力学等方向引入特定加速机制，体现出“通用形态+专用优化”的产品思路。

专用一体机在特定任务上拥有无可比拟的性能和能效优势，但由于应用范围窄、研发投入高，它们能否大规模推广取决于特定场景需求的迫切程度和产品化能力。未来，随着材料模拟、气象预报等领域对极致算力的需求增长，专用一体机有望在这些领域取得突破，同时倒逼相关生态逐步健全。

#### （4）软硬件一体化自研整机企业

国外企业代表及特点：软硬件一体化自研整机以“芯片—系统—软件栈—应用”全链条协同，通过统一架构设计和生态建设提升计算平台的性能、能效与可用性。NVIDIA 从 GPU 延伸至 Grace CPU、BlueField DPU，并围绕 CUDA 生态构建端到端平台，推动计算、网络、存储与软件环境的一体化优化；富士通以自研 A64FX 处理器支撑“富岳”超级计算机，在高性能计算与能效表现方面形成典型实践；

谷歌则以自研 TPU 结合数据中心部署和 TensorFlow 生态,形成“定制芯片+软件框架+云端业务场景”的协同布局。

国内企业代表及特点:在中国,软硬件一体化整机主要围绕科学计算、AI 计算和行业应用场景开展系统级协同设计,重点提升芯片、板卡、整机、基础软件和应用适配之间的联动能力。其中思朗科技围绕科学计算场景,形成了“HPP 加速芯片—自研板卡—整机系统—基础软件”协同推进的技术路线,并以“算法级全局优化计算”为核心思路,从算法层面对计算、通信、存储等共性特征进行系统提炼,带动芯片架构、板卡设计、系统互联及软件栈的联合优化。该路径并非简单叠加通用算力,而是面向科学计算典型负载进行专用化、体系化设计,以提升双精度计算性能、并行效率与整体算效。同时,其在科学计算板卡、服务器主板、液冷散热等方面也进行了自主设计,体现出由芯片向系统延伸的一体化布局。此外,华为公司也采用软硬件协同思路:以自有鲲鹏 CPU 和昇腾 AI 加速器为核心,构建从处理器、主板、操作系统到开发套件的全栈国产方案,推出了如 Atlas900AI 集群、鹏城云脑等端到端计算解决方案,不断迭代完善其在 AI 与科学计算融合领域的布局。例如,Atlas900 集群集成了数千颗昇腾处理器并针对 AI 训练进行了优化,在科学计算方面也展现出潜力。

软硬件一体化自研整机能够将单点创新转化为系统级优势,在性能和可控性上具有独特价值。随着国内企业技术积累的加深,预计会有更多厂商尝试全栈自研模式,进一步推动科学计算平台“硬件+软件+应用”协同优化的发展范式。

### 3.软件生态

#### (1) 算法与软件工具企业

国外企业代表及特点:算法与软件工具位于科学计算价值链中游,

是连接算力平台与行业应用的关键环节。长期以来，高精度数值仿真与科学计算软件在欧美厂商和开源社区的持续推动下，形成了较为成熟的产品体系和应用生态。工程仿真领域，ANSYS、达索 SIMULIA、西门子 Simcenter 等围绕电磁、结构、流体等方向构建了较完整的软件产品线，广泛服务于航空航天、汽车、能源、电子等工业研发场景；基础科研领域，GROMACS、Amber、CHARMM、LAMMPS、Gaussian 等开源或商业软件在分子动力学、量子化学和材料计算等方向被科研机构和企业广泛采用。

国内企业代表及特点：国内科学计算软件企业主要围绕工程仿真、科研计算、工业建模和 AI 辅助仿真等方向开展产品布局，并结合本土科研与产业应用需求持续提升软件工具的适配能力和工程化水平。工程仿真领域，盈建科、霍莱沃、安世亚太等企业分别在结构仿真、电磁仿真、CAE 解决方案等方向形成产品和服务能力；科研计算与工业仿真方向，鸿之微、深势科技、龙讯旷腾等企业围绕微纳器件建模、分子模拟、材料计算、药物研发、集群管理和任务调度等环节开展工具研发与平台化探索。

总体而言，AI 正加速与科学计算软件融合，推动工具体系进入新一轮变革：DeepMind 的 AlphaFold 以深度学习实现蛋白质结构预测突破，显著超越传统方法；多家新创公司将机器学习引入 CAE 仿真以加速收敛或替代部分计算模块，提升仿真效率与智能化水平。ANSYS、达索等主流供应商也在产品中集成 AI 组件，如自适应网格、参数优化、故障预测等，作为传统数值方法的重要补充。整体来看，国际企业更多依托成熟软件生态推进 AI 功能集成与平台升级；中国企业则可围绕重点行业应用场景，推动 AI 算法、科学计算软件和算力平台协同布局，形成面向科研与工业研发的智能化工具体系。

## (2) 计算平台服务企业

国外企业代表及特点：科学计算平台服务正从传统超算中心集中供给，逐步向公有云、专业云和多云平台按需交付演进。AWS、Google Cloud、Microsoft Azure 等综合云厂商较早推出 HPC as a Service 服务，在云端提供高性能计算实例、低延迟网络、并行存储、作业调度和应用镜像等能力，支持弹性伸缩、按需调用和按量计费，使制药、生物信息、汽车设计、能源勘探等行业用户能够更灵活地开展仿真计算、工程分析和 AI 融合工作负载。除综合云厂商外，Rescale 等第三方 HPC 云平台通过对接 AWS、Google Cloud、Azure 等资源，为工程仿真、生命科学、油气勘探和 AI 研发等场景提供统一调度、 workflow 编排和多云资源管理服务。

国内企业代表及特点：国内科学计算平台服务也在向云化、平台化和行业化方向发展，服务模式从单一硬件交付逐步拓展至“算力资源+运维支持+软件环境+应用服务”的综合能力供给。阿里云、腾讯云、华为云等云厂商围绕科学计算与 AI 计算场景，推出高性能计算实例、弹性 HPC 集群和相关平台服务。例如，阿里云“超级计算集群”面向大规模并行计算和 AI 训练等任务提供弹性调度能力；腾讯云与国家超算天津中心合作探索“云上超算”服务模式，将超算资源以云服务方式面向产业用户开放。与此同时，“东数西算”等国家算力枢纽建设推动跨区域算力调度、云网协同和资源统一服务能力提升。行业专用平台方面，能源、制造、科研等领域也在建设面向特定业务场景的科学计算平台，如油藏仿真云平台、产业超算平台和区域公共算力服务平台等，推动科学计算能力更贴近行业研发流程和应用需求。

总体而言，科学计算平台服务将更加重视算力、软件、数据和应用 workflow 的一体化组织能力。国际平台服务更多依托公有云基础设施、

多云资源管理和成熟软件生态，提升科学计算任务的弹性供给与跨平台调度能力；中国平台服务则更多结合国家算力枢纽、区域超算中心、云服务厂商和行业用户需求，推进云网协同、行业平台建设和应用场景适配。未来，科学计算平台服务的重点将从单纯提供计算资源，进一步转向提供“算力调度—软件环境—应用迁移—结果交付”的全流程服务能力，并推动专用架构整机、科学计算软件和云端平台之间形成更紧密的协同布局。

## 4.行业落地

### （1）应用落地场景赋能

国外企业实践及特点：科学计算的价值在于把算力、仿真软件与行业知识“打包”成可落地的垂直方案，直接嵌入业务流程。油气能源领域，雪佛龙（Chevron）、斯伦贝谢（Schlumberger）依托地震勘探算法与超算集群开展油藏建模与资源评估；埃克森美孚（ExxonMobil）与 IBM 共建油气田高性能模拟系统，提升钻探决策效率与安全性。制造业中，航空航天与汽车高度依赖 CAE：西门子、ANSYS 提供结构、流体、碰撞与数字孪生等平台工具；波音自建超级计算中心，并与仿真软件供应商联合优化气动仿真流程，显著缩短新机型研发周期。金融领域，高盛等投行部署专用 HPC 集群用于 VaR、资产定价与高频交易，并将算力能力封装为云端服务获取增量收益。与此同时，Recursion、BenevolentAI 等“AI+科学”企业自建大规模 GPU 集群与深度学习平台，聚焦新药发现等生命科学场景，以工程化交付牵引更高的算力与系统能力要求。

国内企业实践及特点：我国科学计算应用正在围绕高端制造、集成电路、基础材料、新能源和生命科学等重点领域持续拓展，形成了以行业需求牵引、科研机构和企业协同推进的应用布局。在高端制造

与基础材料领域，呈现出显著的“产学研协同”特征，航天航空团队构建数字仿真云平台支撑飞行器虚拟测试，中科院软件所牵头研发光刻工艺仿真软件，并与晶圆厂开展联合验证，推动相关工具更好服务芯片制造工艺优化。宝武钢铁则通过建设超算应用中心并结合相关软件工具，加速新合金研发；与此同时，宁德时代 21C 创新实验室更是利用高通量材料计算平台重塑电池研发范式，不仅通过多尺度仿真精准调控高镍三元正极的表面氧缺陷形成能以解决寿命痛点，更快速锁定具备商业前景的钠离子电池配方。整体来看，国内头部企业正推动科学计算从边缘辅助工具向核心研发基础设施跃迁，在关键技术上实现自主可控的同时，通过“数据+机理”双轮驱动重构研发流程，大幅缩短创新周期并确立产业竞争优势。

总体而言，科学计算市场将持续扩容，并在“高保真数据生成—机理模型迭代—产业场景落地”的科学智能闭环中发挥决定性作用。一方面，先进制造与硬科技领域对极端工况下的高可信仿真、数字孪生试验及工程优化的刚性需求，确立了科学计算作为未来数年最确定增量来源的地位；另一方面，科学智能模型的泛化能力与可靠性高度依赖于“可验证、可复现、可迁移”的高质量数据集，而在诸多关键科学问题中，这类数据无法仅靠实验获取，必须由高性能算力与高精度数值仿真源源不断地“合成”与“标注”。

长期来看，科学智能发展的本质是“数据资产”与“机理模型”的双重博弈。能够在关键科学领域持续沉淀“物理机理约束+数据驱动优化”的模型库与高价值数据资产，将会显著提升科研创新效率和产业转化能力。而构建这一能力的基石，正是对新一代科学计算平台、自主算

法工具链及软硬协同应用体系的系统性掌控。夯实科学计算底座，方能贯通产研，引领科技变革。

