

奇效的计算

——大规模科学与工程
计算的理论和方法

THEORY AND METHOD FOR LARGE
SCALE SCIENTIFIC AND
ENGINEERING COMPUTING ■

国家科委基础研究高技术司 组织 ■

石钟慈 袁亚湘 主编 ■

湖南科学技术出版社 ■

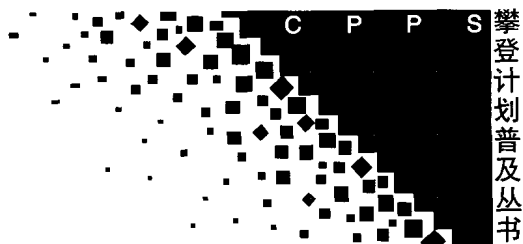
HUNAN SCIENCE &
TECHNOLOGY PRESS ■

THE CLIMBING PROGRAM POPULAR SERIES
HUNAN SCIENCE & TECHNOLOGY PRESS

2



LARGE SCALE
SCIENTIFIC AND
ENGINEERING
COMPUTING



奇效的计算

——大规模科学与工程
计算的理论和方法

国家科委基础研究高技术司 组织

主 编：石钟慈 袁亚湘

组 织：赵静芳

编著者：王兴华 秦孟兆 黄明游 丁培柱 刘 林

张关泉 张 宇 李开泰 李德元 季仲贞

傅德薰 周天孝 袁益让 蒋尔雄 袁亚湘

湖南科学技术出版社

攀登计划普及丛书

奇效的计算

——大规模科学与工程计算的理论和方法

组 织：国家科委基础研究高技术司

主 编：石钟慈 袁亚湘

责任编辑：陈一心

出版发行：湖南科学技术出版社

社 址：长沙市展览馆路 66 号

<http://www.hnstp.com>

邮购联系：本社服务部 0731-4441720

印 刷：湖南省新华印刷三厂

(印装质量问题请直接与本厂联系)

厂 址：长沙市韶山路 158 号

邮 编：410004

经 销：湖南省新华书店

出版日期：1998 年 12 月第 1 版第 1 次

开 本：850mm×1168mm 1/32

印 张：7.75

插 页：8

字 数：155000

印 数：1~3100

书 号：ISBN 7-5357-2346-2/O·163

定 价：16.50 元

(版权所有·翻印必究)

《攀登计划普及丛书》编辑委员会

主 任:冯思健

副 主 任:朱新民 丁乃刚 邵立勤 唐洪渭

编辑委员:李文范 白松乾 马宏建 李永平 王一方

策 划:朱新民 张碧金



图 2-1(a) 对 1 的三个三次根的牛顿迭代 (角上小图为无穷远点的邻域)



图 2-1(b) 对直线上三个等距根的牛顿迭代 (角上小图为无穷远点的邻域)

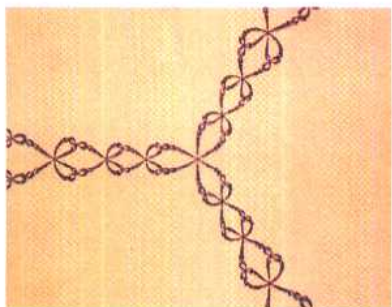


图 2-2(a) 图 2-1(a) 中三个吸引域的边界

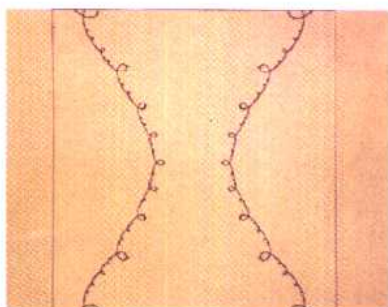


图 2-2(b) 图 2-1(b) 中三个吸引域的边界



图 2-3(a) 以北半球九大星座的 α 星的视位置为根的多项式的牛顿迭代的各个吸引域



图 2-3(b) 以北半球九大城市的地理位置为根的多项式的牛顿迭代的各个吸引域



图 2-3(b) 图 2-3(b) 中牛顿迭代的动态图



图 2-4 斯梅尔的多项式的牛顿迭代, 白色区域为不收敛初值

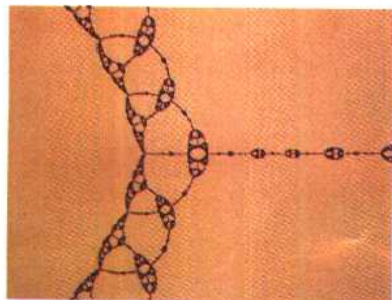


图 2-5(a) 图 2-4 中四个分支 (三个吸引域和一个不收敛区域) 的边界

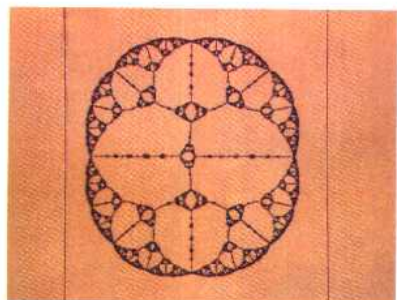


图 2-5(b) 同图 2-5(a), 无穷远点的邻域

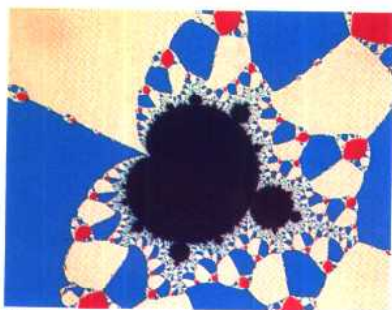


图 2-6(a) 参数平面图: 在牛顿迭代下, 临界点跑向哪里? 当参数在深蓝色区域时, 不跑向任何根

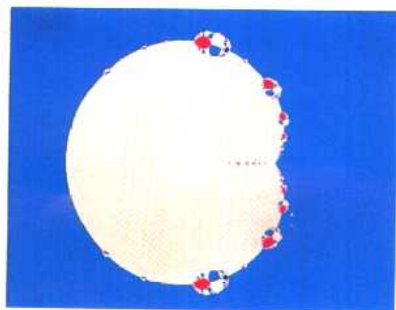


图 2-6(b) 把图 2-6(a) 的小蓝点放大

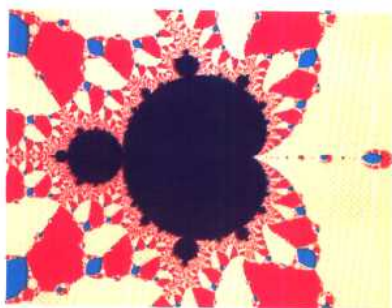


图 2-6(c) 把图 2-6(a)中轴的一点放大

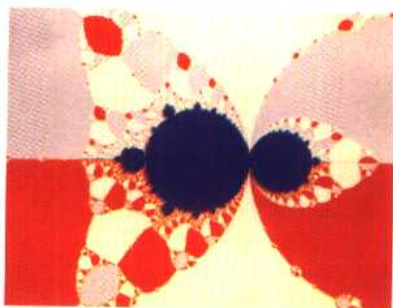


图 2-7(a) 新的参数平面图:深蓝色大圆对应的 λ 值 (模不大于 1) 对应一条 2 周期轨道的特征值

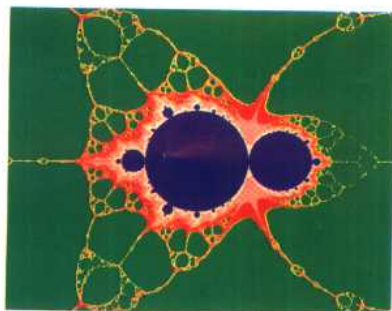


图 2-7(b) 图 2-7(a)的艺术加工:凸显深蓝色

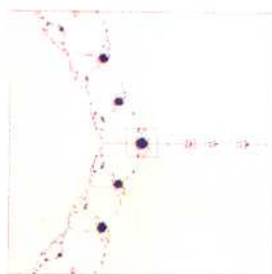


图 2-8(a) 不收敛的一种超吸性域

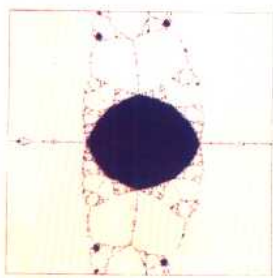


图 2-8(a)L 图 2-8(a)中较大方框的放大图

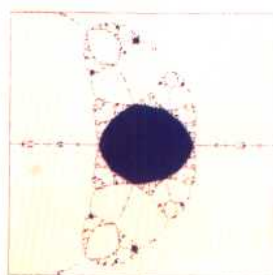


图 2-8(a)R 图 2-8(a)中较小方框的放大图

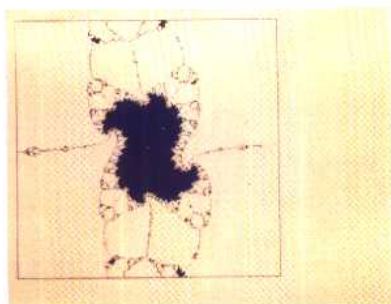


图 2-8(b)L 不收敛的一种吸性域 (在与图 2-8(a)L 相当的位置)

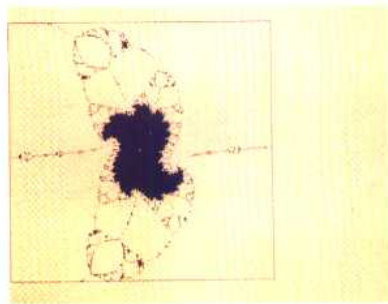


图 2-8(b)R 吸性域 (在与图 2-8(a)R 相当的位置)

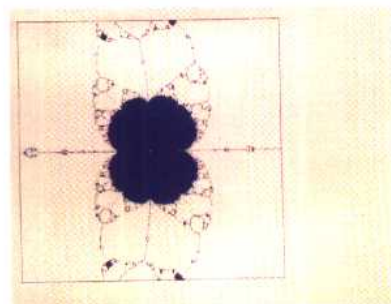


图 2-8(c)L 不收敛的一种 2 周期抛物型域

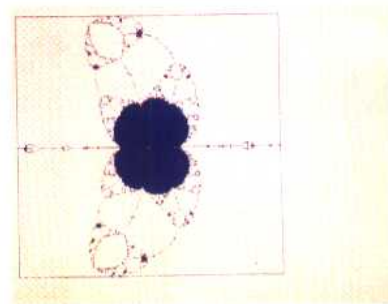


图 2-8(c)R 2 周期抛物型域

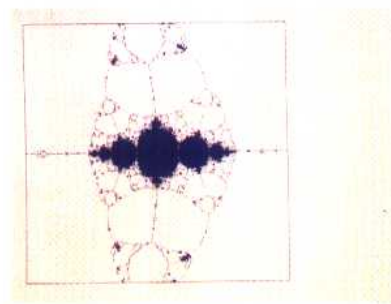


图 2-8(e)L 不收敛的一种 4 周期抛物型域

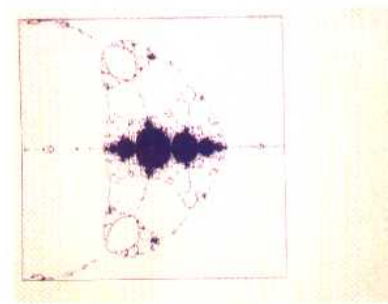


图 2-8(e)R 4 周期抛物型域

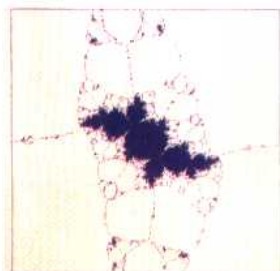


图 2-8(c)3L 不收敛的一种 6 周期抛物型域

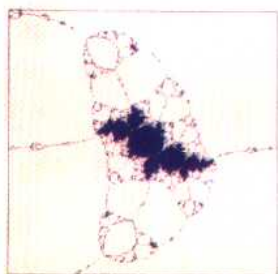


图 2-8(c)3R 6 周期抛物型域

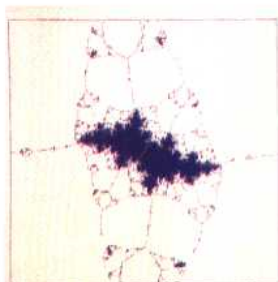


图 2-8(d)L 一种齐格尔盘

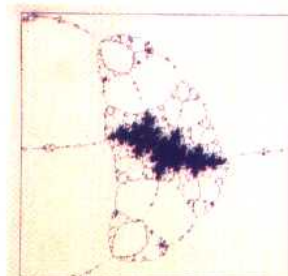


图 2-8(d)R 齐格尔盘



图 2-8(d)L1 动态图中的齐格尔盘(与图 2-8(d)L 相对应)

代 序

——在攀登计划实施大会上的讲话

国务委员、国家科委主任 宋 健

今天,“攀登计划实施大会”胜利召开,听了几位同志的发言我们大家都感到非常高兴。我们能够宣布攀登计划的启动和实施,清楚地说明,在科学技术的整体发展中,基础性研究工作受到党和国家的高度重视和关怀。

借此机会,我就当前科技工作的形势和进一步加强基础性研究工作的问題向大家作一简要说明。

自从小平同志视察南方的谈话发表以来,全国各族人民在党中央和国务院的领导下,进一步解放思想,加快改革开放的步伐,各条战线呈现出生机勃勃、欣欣向荣的景象。事实证明,经过几年治理整顿以后,我国已具备进一步加快发展的条件,正处在一个千载难逢的重要历史发展时期。我们面临的任务是:坚定不移地全面贯彻执行党的基本路线,牢牢把握经济建设这个中心,坚持四项基本原则,坚持深化改革和扩大开放,大力发展社会生产力。全体科技界的同志们将和全国人民一起,为实现这一战略方针做出历史性贡献。这是当代最高的战略目标,其他各方面工作都要服从这一目标。

党中央把发展科学技术列为我国经济和社会发展战略的重点,多次强调要把国民经济切实转移到依靠科技进步的轨道上来。

在当前全国加快改革开放,尽快地把经济建设搞上去的新形势下,国家对科学技术工作提出了更高的要求。科技战线已经积极行动起来,加快科技体制改革的步伐,动员广大科技工作者更好地面向经济建设主战场,引导经济和社会发展;与此同时,要努力稳住和加强基础性研究和大力发展高新技术,攀登科学技术高峰,提高科技创新和自主开发的水平,增强科技实力和后劲,使科技在我国经济建设和社会发展中发挥更大的作用。简单地说就是两句话:一是“面向、依靠、攀高峰”,二是“加强一头,放开一片”。

“面向、依靠”,就是坚决贯彻党中央“经济建设必须依靠科学技术,科学技术工作必须面向经济建设”的战略方针,加快科技体制改革的步伐,发展和提高全民族科学技术水平,促进科技与经济的紧密结合,鼓励广大科技工作者直接为推动企业科技进步,加快高技术产业开发区的建设、加强农业科技服务、合理开发资源、推动社会进步和保护生态环境等各方面贡献力量。

“攀高峰”,就是小平同志在视察南方的谈话中说的,“搞科技,越高越好,越新越好。越高越新,人民高兴,国家高兴。”

科学技术高峰,首先是我国社会主义现代化建设和社会进步的需要,只有创造出大量的、高水平的研究成果,才能更有力地推进国民经济发展和社会主义文明的建设。

攀登科学技术高峰也是科学技术自身发展的需要。近几十年来,科学技术以前所未有的速度向深度和广度迅猛发展,新思想、新概念、新发现层出不穷。加强知识产权保护和我国争取恢复在关贸总协定中的地位这种形势也对我国的科技工作的创新能力提出了更高的要求。只有树立雄心壮志,在各层次上勇攀科技高峰,才能不断提高科技工作水平,为中华民族在世界科技前沿领域占

有一席之地建功立业。

总之,“攀登科学技术高峰”是新形势下为更好地贯彻“面向、依靠”的战略方针的一部分,是国家对科技工作提出的要求。这是指科技工作的各个方面包括攻关、高技术、基础性研究三个层次,研究、开发、建立产业等各项工作、理论、实验、工程技术各类专家,各个学科都要有自己的目标。努力创新、提高研究开发工作的水平。

在我国科学技术工作中,基础性研究的发展具有十分重要的意义。它不仅为人类利用和改造自然提供必要的知识基础,是新技术、新发明的先导和源泉,而且是培养高水平科技人才的摇篮。因此,确保基础性研究持续稳定地发展应是我国长期坚持的一项基本方针。建国以来,在毛主席、周总理等老一辈无产阶级革命家的关怀下,我们建立了一大批研究机构,形成了多种学科的基础科学研究体系,为社会主义建设作出了历史性的贡献。党的十一届三中全会召开以后,我国采取了一系列重要措施推动基础性研究的发展。例如,

1980年,中国科学院学部恢复了活动。

1981年,国家恢复了博士研究生制度。1985年7月,经国务院批准,我国开始办博士后科研流动站,试行博士后研究制度。

1986年2月,国务院决定成立国家自然科学基金委员会。

1987年,国家科委组织了对全国基础研究和应用基础研究现状及发展情况的调查研究。

1989年2月,经国务院批准,国家科委召开了全国基础研究和应用基础研究工作会议,会议明确指出,基础性研究是我国科技发展战略部署中的三个层次之一,对促进国民经济、社会发展和国

防建设等具有重大意义。

近十年来我国先后建立的北京正负电子对撞机、兰州重离子加速器、合肥同步辐射加速器、高功率激光实验装置、受控热核反应 HT-6H 实验装置、长基线干涉仪、大型光学望远镜和毫米波射电望远镜、太阳磁场望远镜、中国环流器一号、低温核供热实验堆、串列静电加速器等十多项大型科学工程；建立了 77 个国家重点实验室和近 100 个部门开放实验室。增拨了实验室运行补助经费，为这些实验室更好地发挥作用和改善基础性研究的学术环境创造了条件。

今年，国家进一步增加对基础性研究的投入，国家自然科学基金有了较大幅度的增加，又拨出专款支持“攀登计划”的实施。这对于加强基础性研究，攀登科学技术高峰，具有重要的支撑意义。

随着对基础性研究重要性认识的提高，国家对基础性研究更加重视和支持，工作条件还将逐步得到改善。十多年来，我国科学家奋战在基础科学研究各前沿领域，学术水平不断提高，国际地位逐渐上升。如高临界温度超导体的研究，计算机科学的理论研究，若干人工功能晶体的理论和实验发现，微分动力系统等数学理论研究，分子轨道图形理论方法，以酵母丙氨酸转移核糖核酸的人工全合成，蛋白质功能基因的修饰与其生物活性之间的定量关系等为代表的生物科学方面的新成就都处于世界先进行列；我国科学家对东亚大气环流、大地构造、成矿（成油）理论的研究，对新疆、青藏高原的考察，以及对雄性不育杂种优势、固氮基因的结构与调节，中国植物和动物分类编目等研究都取得了世界瞩目的成就。为我国资源勘探开发、自然灾害防治、环境保护提供了科学依据，为我国面临的与人口问题相关的农业、医药、卫生等重大社会问题

的解决开辟了道路,也为世界科学技术的繁荣作出了贡献。“七五”期间,我国共有 238 项成果荣获国家自然科学奖,其中有一批荣获国际高层次科学奖。与此同时,基础性研究的成果应用于社会和生产的速度大大加快。

事实表明,我国基础性研究工作已经进入了一个持续稳定发展的新阶段。

但是我们也要看到当前我国基础性研究与国际前沿水平相比还有较大差距和面临着许多困难。例如,首创性不够,经费不足,仪器设备陈旧,课题分散,新秀培养不够等。还要预计到在加快改革开放的过程中,由于社会主义市场经济的发展和各方面的新变化,基础性研究还可能受到一定的冲击。因此,我们要采取果断措施,加强对基础性研究的指导,决心投入必要的人力物力,以求在力所能及的范围内,对重要的科学前沿和保证中华民族持续发展的最重要的基础科学方面,造就和保持一支有战斗力的精干队伍,务求取得第一流成就,为中国的发展和社会进步提供支撑,为世界科学事业作出我们应有的贡献。在增加基础性研究经费,逐步改变目前投资偏低的同时,要采取强有力的措施,发挥各方面的积极性,开创基础性研究的新局面。

在新的形势下加强基础性研究,我们特别要注意以下四个方面的问题:

第一,基础性研究要强调创新,强调高水平。基础性科学研究的主要目的是探索自然界的本质,发现自然界变化、发展的规律,提高我们对自然界的理性认识水平和深度。因此,对基础性研究的要求是要创新,要创造新思想、新方法,要争世界先进水平。有的科学家讲,基础研究只有第一,没有第二。事实证明,在当代科

技发展中谁有更多的创新,有更高的水平,有更大的突破,谁就处于主动地位,就掌握了后来居上的机遇。基础性研究工作一定要坚持高标准,出突破性的成果,出高水平的人才,才能攀上新的高峰。这对提高一个国家科技创新和自主开发的能力是非常关键的。

第二,基础性研究项目要精选。在现代社会中,基础性研究已不仅仅是科学家的个人兴趣和行为问题,已成为一个有一定社会规模的科学事业。由政府或科学机构直接组织和推动基础性研究重大项目是当前世界科学技术发展的趋势。因此,国家在通过科学基金等方式支持科学家根据自己的特长和意向提出的自选课题和从学科发展的优先领域中选取的重点课题的同时,还要组织实施一些对国家的发展和科学技术的进步具有全局性和带动性、为我国科技界所公认的基础性研究重大关键课题。

根据这样的考虑,从1989年开始到现在,经科学界的认真讨论研究后遴选了30个国家基础性研究重大关键课题,构成了“攀登计划”的首批项目,受到科技界广泛关注和欢迎。攀登计划的制订和实施,有利于完善我国科技工作的纵深部署;有利于吸引、培养和造就新的学术带头人,形成高水平的科学家队伍;有利于集中力量,提高投资强度,在一些有优势和对国家长远发展有重大意义的重要领域取得突破,在世界科技发展的竞争中树立起中国的旗帜。对我国科技事业和国民经济的长远发展具有十分重大的意义。

第三,队伍要精干。中国是发展中国家,财力有限,不可能全面出击,要选择重点,组织一支精干的基础性研究队伍,集中兵力打歼灭战。我们衷心希望老科学家们的作用得到更多更好的发

挥,更希望年轻一代科学家迅速成长。青年人思想活跃,精力充沛,容易冲破旧思想的束缚,始终是推动基础研究不断发展的生力军。要创造条件,让年轻的学术带头人在国际科学前沿拼搏;同时也要注意根据实际需要和个人特长,使优秀的人才及时开辟新的研究领域。要鼓励研究人员带着已经取得的成果参与应用研究和科技开发方面的工作。只有这样,才能使基础研究队伍始终充满活力,使基础性研究的成果和人才不断推向应用技术领域,为经济建设和社会进步服务。

第四,基础性研究工作要创造一个宽松、民主、有利于新思想产生和优秀人才脱颖而出的环境和条件。首先,我们要加强从事基础性研究的科研机构,建设和运行好已建成的各种大型科学工程、国家重点实验室和部门开放实验室,使它们在向国内外开放的大环境中,逐步形成具有自己特色的、在国际学术前沿努力拼搏的基础性研究的科学基地。我们还要加强科学数据积累工作,建立科学数据库,促进国际国内数据交换。为科学研究、经济建设和社会发展提供确切、快速、方便的信息服务。

我们要继续大力倡导尊重科学、尊重人才的社会风尚,要求科学界遵守科学道德规范。基础性研究是艰苦的探索性劳动,具有较大的不确定性。它需要科学家们数年、数十年、甚至毕生的探索,经过无数次失败后,才有可能取得进展。在少数成功者的后面,有很多科学家默默无闻的奉献。他们的工作应该得到人们的理解和支持,他们的成就应该得到政府和社会的鼓励和尊敬,这是尊重科学、尊重人才的社会风尚的一个重要组成部分。要尽可能为科学工作者创造较好的工作和生活条件,以利于更好地发挥他们的聪明才智。

随着改革开放的深入进行,我国的基础性研究已经步入持续稳定发展的新阶段,展现出更加美好的前景。攀登计划的出台,在我国科学界受到了广泛重视和热情支持。这对稳定基础性研究队伍,落实“加强一头,放开一片”的方针,为基础性研究多出成果,多出人才,攀登科学高峰,必将产生深远的影响。我们希望有幸从事基础性研究的科学工作者,能密切关注我国经济建设和社会发展,从中抽象出新问题、新学科并组织力量加以研究。我们还希望从事基础性研究的同志们,能够尽力支持战斗在经济第一线的同行们,热诚地帮助他们,鼓励他们,分享他们的成就和喜悦。为了国家的未来,为了中华民族的前途,让我们一切从事基础性研究、技术开发和向产业转化的科技工作者,团结一致,相互支持,共同努力,为把我国科技工作提高到世界先进水平而努力奋斗。

(1992年7月22日)