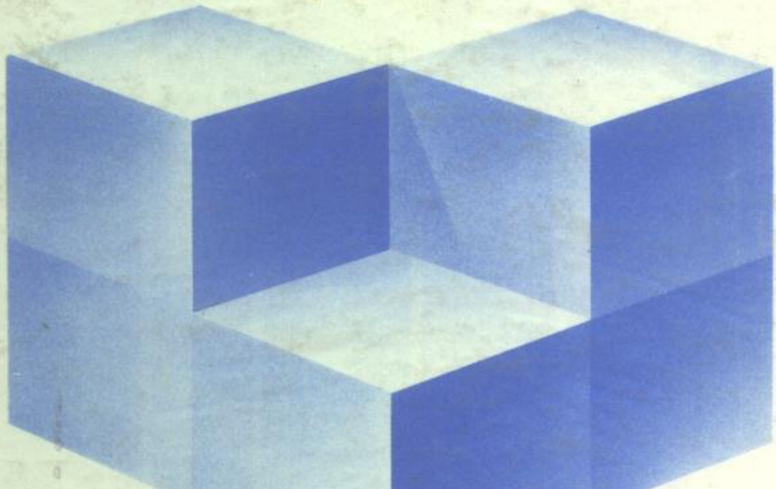
FORTRAN 77
算法手册

何光渝 主编

科学出版社



FORTRAN 77 算法手册

何光渝 主编

何光渝　周宇斌　张国凤 编

科 学 出 版 社

1 9 9 3

（京）新登字 092 号

内 容 简 介

本书共有科学计算中常用的子程序222个，内容包括：解线性代数方程组，插值，数值积分，特殊函数，函数逼近，随机数，排序，特征值问题，数据拟合，方程求根和非线性方程组求解，函数的极值和最优化，傅里叶变换谱方法，数据的统计描述，解常微分方程组，解两点边值问题，解偏微分方程．每一子程序都包括功能、方法、使用说明、子程序、例子和参考文献六部分．本书的子程序都在 IBM PC/XT 机上进行了验证，准确无误，配书同时发行子程序软盘和验证程序软盘．

本书可供力学、物理、石油、气象、工程技术各专业人员及大专院校师生使用．

FORTRAN 77算法手册

何光渝 主编

何光渝　周宇斌　张国凤 编

责任编辑　刘晓融　唐兆亮

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100707

北京市华星计算机公司激光照排

国防科工委印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售

*

1993年1月第 一 版　开本：850×1168　1/32

1993年1月第一次印刷　印张：25 3/4

印 数：1 — 7 200　字数：683 000

ISBN　7-03-003096-6/TP·228

定价：15.90元

前　言

近几年来，微型计算机的应用已经遍及我国的各行各业，特别是在大专院校、科研机构中，其应用更为广泛．在微型机应用过程中，人们迫切希望有一本准确无误的算法手册，以减少重复劳动，缩短解题周期，提高计算机的使用效率．

本书收集了222个子程序，主要参考剑桥大学出版社出版、W. H. Press 等编著的“Numerical Recipes—The Art of Scientific Computing”一书．该书不仅收集了一些常见的算法，而且描述了近年来有效而优秀的算法，从而进一步提醒大家有一些众所周知的方法并不理想．可以说，该书反映了目前国际上公认的算法．本书中的子程序在收入之前，我们已将它们在IBM-PC/XT机上进行了验证．为了适应我国科技人员的需要，我们还参阅了国内外多种书籍和文献，收集了一些相关的子程序．

在一般情况下，当采用别人的子程序时，总是要用一个简单的例子来验证一下．为了方便读者，本书对每个子程序都给出了验证程序，指出怎样输入数据，怎样调用子程序，最后如何输出计算结果，有些验证程序还将计算结果与精确解进行了比较．

采用本书中的子程序时要注意：

(1)本书大部分验证程序是采用 MS-FORTRAN3. 30版本编译软件进行编译的，但也有一些是采用 MS-FORTRAN4. 00版本编译软件进行编译的．

(2) 在本书的某些子程序中，对一些数组采用了物理维数，这是当同一子程序被同时调用解不同维数数组的问题时，为了避免在程序单位间的数据通信出现问题而设置的．

(3) 本书中子程序的特点是前后连贯，互相呼应，为解某一问题所编写的子程序可能调用其他章节中的子程序．为了方便起

见，在本书末附有子程序调用索引表，读者可以很方便地查到所需调用的子程序.

配合本书的出版，将同时发行书中全部子程序和验证程序的软盘（共2张）供读者选用（需要者可与科学出版社联系）.

兰州大学俞焕然教授审阅了全书，提出了宝贵的意见；欧阳克智副教授、管会生工程师审阅了部分章节，在此一并致谢. 另外，作者还特别感谢西安石油学院、甘肃省科学技术委员会、兰州大学对出版本书所给予的关心和资助.

由于编著者水平有限，缺点错误在所难免，恳切希望广大读者批评指正.

何 光 渝

1992年3月

目　录

第一章　线性代数方程组的解法

本章包括线性代数方程组的求解、矩阵求逆、行列式计算、奇异值分解和线性最小二乘问题等的算法和程序，所给算法具有广泛的适用性和很强的通用性.

1. 一般实矩阵

列主元高斯消去法（§1.1）的运算量小、速度快，且一般是数值稳定的，因此它是求解线性代数方程组的常用方法；高斯-约当全主元消去法（§1.2）具有数值稳定的特点，所给子程序在得到解的同时还得到系数矩阵的逆，但计算量大，对于方程组阶数不高而要求精度较高时，可采用此方法；LU 分解法采用隐式的部分选主元方法，数值稳定性好，存储量小，特别对于要解系数矩阵相同的多个方程组时最为适用，它还可用于求矩阵的逆和行列式. LU 分解法的计算量大约是$\frac{1}{3}n^3$，与列主元消去法相当，而高斯-约当消去法的计算量大约是它们的三倍，即大约是 n^3. 对于对称矩阵，特别是正定矩阵宜采用乔累斯基分解法（§1.11），它的程序简单、计算量小. QR 分解法即正交三角分解法（§1.12），由于其数值稳定性非常好，因此现在已越来越多地应用于各种数值求解中，现常用 QR 分解代替 LU 分解. 缺点是计算量和存储量均较大，计算速度亦较慢.

2. 病态矩阵

病态矩阵即条件数很大的矩阵. 对于病态矩阵，高斯消去法和 LU 分解法都不能给出满意的结果，QR 方法有时也同样不能给出满意的解，通常采用以下的处理办法：

(1) 增加计算的有效位数. 如采用双精度(双倍字长)计算, 这是一个比较有效的措施. 但这样做会使计算时间增加, 且所需存储单元也会增到近两倍.

(2) 采用迭代改善的办法(§1.6). 它是成功地改进解的精度的办法之一. 该方法的基本思想是在消去法的基础上利用迭代逐步改善方程组的解(关键在于在迭代过程中有些运算必须用双精度).

(3) 采用奇异值分解(*SVD*)法或共轭斜量法(§1.9和§1.10). 实验表明, 共轭斜量法对病态矩阵常常是一种有效的方法.

3. 特殊形式的矩阵

这里包括三对角矩阵(§1.4)和五对角矩阵(§1.5)的追赶法、范德蒙矩阵的G. Rybicki方法和陶普立兹矩阵的Rybicki推广的Levinson方法(§1.7和§1.8). 对于以这些特殊矩阵为系数矩阵的方程组, 若用一般矩阵的方法, 效率太低, 时间和空间的浪费也很大, 因此对它们有专门有效的方法.

4. 稀疏矩阵

对于大稀疏矩阵的方程组, 常用迭代法求解, 这里我们给出两种迭代法: 共轭斜量法和松弛迭代法(§1.10, §1.13). 它们均不要求矩阵具有任何特殊结构, 因此可用于一般稀疏矩阵方程组的求解. 其中松弛迭代法当取松弛因子为1.0时, 即为高斯-塞德尔迭代法. 当然要注意迭代可能不收敛. 具体应用可参考第十六章.

5. 奇异值分解(*SVD*)和最小二乘问题

*SVD*对于奇异矩阵或数值上很接近奇异的矩阵是一个非常有力的技巧, 它可以精确地诊断问题. 在某些情形, *SVD*将不仅诊断问题, 而且也解决问题.

对于最小二乘问题，SVD 也是一个常选用的方法.

对于解方程组，LU 分解法和 SVD 都是先对系数矩阵作分解，然后再用分解矩阵求解. 它们的重大差别是用 SVD 解方程组之前即调用子程序 SVBKSB 之前要对奇异值进行剪辑，请参考 SVBKSB 的验证程序 DIR8. SVD 的用法细节可参考第九章.

§1.1 列主元高斯消去法

1. 功能

用列主元高斯消去法解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{b}$ 为 n 维列向量. 本方法是求解线性方程组的最通用方法.

2. 方法

（1）对 $k=1,2,\cdots,n-1$ 进行如下：设

$$\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}=(a_{ij}),\ \boldsymbol{A}^{(k)}=(a_{ij}^{(k)}), b^{(k)}=(b_i^{(k)})$$

$$i,j=1,2,\cdots,n$$

1）选主元. 确定 r，使 $|a_{rk}^{(k)}|=\max\limits_{k\leqslant i\leqslant n}|a_{ik}^{(k)}|$.

2）换行. 如果 $r\neq k$，则交换 $\boldsymbol{b}_r$ 与 $\boldsymbol{b}_k$ 且交换 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 r 行与第 k 行，得到的向量和矩阵仍记为 $\boldsymbol{b}^{(k)}$ 与 $\boldsymbol{A}^{(k)}$.

3）消元.

$$b_k^{(k+1)}=b_k^{(k)}/a_{kk}^{(k)},\ a_{kj}^{(k+1)}=a_{kj}^{(k)}/a_{kk}^{(k)},\ j=k,\cdots,n$$

$$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-a_{ik}^{(k)}\cdot a_{kj}^{(k+1)},\ j=k,\cdots,n$$

$$b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-b_k^{(k+1)}\cdot a_{ik}^{(k)},\ i=k+1,\cdots,n$$

（2）回代.

$$x_n=b_n^{(n)}/a_{nn}^{(n)}$$

$$x_i=b_i^{(n)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(n)}x_j,\ i=n-1,n-2,\cdots,1$$

3. 使用说明

GASCOL（A，N，NP，B）

N　　整型变量，输入参数，方程阶数；

NP　　整型变量，输入参数，存储矩阵 A 及向量 B 的物理维数；

A　　$N \times N$ 个元素的二维实型数组，输入参数，存放方程组的系数矩阵 A；

B　　N 个元素的一维实型数组，输入、输出参数，输入时存放右端向量 b，输出时存放解向量.

4. 子程序

子程序 GASCOL.

```
      SUBROUTINE GASCOL (A, N, NP, B)
      DIMENSION A (NP, NP), B (N)
      DO 15 K=1, N-1
C     pivoting
         IR=K
         DO 10 I=K, N
            IF (ABS (A (IR, K)). LT. ABS (A (I, K))) IR=1
10       CONTINUE
         IF (A (IR, K). E0. 0.) FAUSE ' singular matrix'
         IF (IR. NE. K) THEN
            P=B (K)
            B (K) =B (IR)
            B (IR) =P
            DO 11 j=k, N
               P=A (K, J)
               A (K, J) =A (IR, J)
               A (IR, J) =P
11          CONTINUE
         ENDIF
C     elimination
         P=1. /A (K, K)
         B (K) =B (K) *P
         DO 12 J=K, N
            A (K, J) =A (K, J) *P
12       CONTINUE
         DO 14 I=K+1, N
            B (I) =B (I) -B (K) *A (I, K)
         DO 13 J=K+1, N
               A (I, J) =A (I, J) -A (K, J) *A (I, K)
13          CONTINUE
```

```
      A (I, K) =0.
14       CONTINUE
15    CONTINUE
C     backsubstitution
      B (N) =B (N) /A (N, N)
      DO 17 I=N-1, 1, -1
         DO 16 J=I+1, N
            B (I) =B (I) -A (I, J) *B (J)
16       CONTINUE
17    CONTINUE
      RETURN
      END
```

5. 例子

验证子程序 GASCOL 的例子中的数据全部记录在本章末附录中的 MATRX1. DAT 中. 在验证程序 D1R1A 中，把用 GASCOL 求得的数值解与系数矩阵相乘后和方程组的右端向量相比较. 验证程序 D1R1A 如下：

```
      PROGRAM D1R1A
C     Driver program for routine GASCOL
      PARAMETER (NP=20)
      DIMENSION A (NP, NP), B (NP, NP), INDX (NP)
      DIMENSION C (NP, NP), X (NP)
      CHARACTER TXT * 3
      OPEN (5, FILE='MATRX1. DAT', STATUS='OLD')
      READ (5, * )
10    READ (5, * )
      READ (5, * ) N, M
      READ (5, * )
      READ (5, * ) ((A (K, L). L=1, N), K=1, N)
      READ (5, * )
      READ (5, * ) ( (B (K, L), K=1, N), L=1, M)
C     Save matrix a for later testing
      DO 16 K=1, M
         DO 12 L=1, N
            DO 11 I=1, N
               C (I, L) =A (I, L)
11          CONTINUE
12       CONTINUE
         DO 13 L=1, N
            X (L) =B (L, K)
13       CONTINUE
         CALL GASCOL (C, N, NP, X)
```

```
C       Test results with original matrix
            WRITE (*, *)'Right—hand side vector'
            WRITE (*,' (1X, 6F12. 6)') (B (L, K), L=1, N)
            WRITE (*, *)'Result of matrix applied to sol"n vector'
            DO 15 L=1, N
                B (L, K) =0, 0
                DO 14 J=1, N
                    B (L, K) =B (L, K) +A (L, J) *X (J)
14              CONTINUE
15          CONTINUE
            WRITE (*,' (IX, 6F12. 6)') (B (L, K), L=1, N)
            WRITE (*, *)'****************'
16      CONTINUE
        WRITE (*, *)'Press RETURN for next problem:'
        READ (*, *)
        READ (5,' (A3)') TXT
        IF (TXT. NE.'END') GOTO 10
        CLOSE (5)
        END
```

计算结果如下：

```
Right—hand side vector
1.000000   .000000   .000000
Result of matrix applied to sol'n vector
1.000000   .000000   .000000
****************
Press RETURN for next problem:
Right—hand side vector
1.000000   1.000000   1.000000
Result of matrix applied to sol'n vector
1.000000   1.000000   1.000000
****************
   ⋮          ⋮          ⋮
****************
Press RETURN for next problem:
Right—hand side vector
1.100000   1.600000   4.700000   9.100000   .100000
Result of matrix applied to sol'n vector
1.100001   1.599999   4.699997   9.099997   .099999
****************
Right—hand side vector
4.000000   9.300000   8.400000   .400000   4.100000
Result of matrix applied to sol'n vector
3.999997   9.299995   8.399997   .399996   4.099998
****************
Press RETURN for next problem:
```

§ 1.2 全主元高斯-约当（Gauss-Jordan）消去法

1. 功能

用高斯-约当消去法求解 $\boldsymbol{A}[\boldsymbol{X}\ \boldsymbol{Y}]=[\boldsymbol{B}\ \boldsymbol{I}]$，其中 $\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 非奇异矩阵，$\boldsymbol{B}$ 为 $n\times m$ 矩阵，均已知；$\boldsymbol{X}_{n\times m}$，$\boldsymbol{Y}_{n\times n}$未知. 由于消去过程是在全矩阵中选主元（绝对值最大的元素）来进行的，故可使舍入误差对结果的影响减到最小.

2. 方法

（1）施行初等变换把 $\boldsymbol{A}$ 变为单位矩阵，则

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B},\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{A}^{-1}$$

（2）算法. 记

$$\boldsymbol{A}^{(0)}=(a_{ij}^{(0)})=\boldsymbol{A}=(a_{ij}),\boldsymbol{b}^{(0)}=\boldsymbol{b}=(b_{ij}^{(0)})$$

第 k 步的矩阵为 $\boldsymbol{A}^{(k)}=(a_{ij}^{(k)})_{n\times n}$，$\boldsymbol{b}=(b_{ij}^{(k)})_{n\times m}$，$(k=1,\cdots,n)$.

第 k 步的计算为

1）选主元，设为 $a_{i_0j_0}^{(k-1)}$.

2）若 $i_0=j_0$，则转 3)，否则交换矩阵 $[A^{(k-1)}B^{(k-1)}]$ 的第 i_0 行与第 j_0 行，则 $a_{i_0j_0}^{(k-1)}$移至矩阵 $A^{(k-1)}$的对角线上，得到的矩阵仍记为 $[A^{(k-1)}B^{(k-1)}]=[(a_{ij}^{(k-1)})\ (b_{ij}^{(k-1)})]$，主元为 $a_{i_0j_0}^{(k-1)}$.

3）消元过程计算公式：

$$\begin{array}{lll}
p_k & =1/a_{i_0i_0}^{(k-1)} & \\
a_{i_0j}^{(k)} & =a_{i_0j}^{(k-1)}\cdot p_k, & j=1,\cdots,n \\
b_{i_0l}^{(k-1)} & =b_{i_0l}^{(k-1)}\cdot p_k, & l=1,\cdots,m \\
a_{ij}^{(k)} & =a_{ij}^{(k-1)}-a_{i_0j}^{(k)}\cdot a_{ij_0}^{(k-1)}, & j=1,\cdots,n \\
b_{il}^{(k)} & =b_{ij}^{(k-1)}-b_{i_0l}^{(k)}\cdot a_{ij_0}^{(k-1)}, & l=1,\cdots,m \\
i & =1,\cdots,n; & i\neq i_0
\end{array}$$