

FORTRAN

应用程序库

上海机械学院 编写
安徽省计算中心

FORTRAN 应用程序库

上海机械学院
安徽省计算中心 编写

上海科学技术文献出版社

FORTRAN 应用程序库

上海机械学院
安徽省计算中心 编写

上海科学技术文献出版社出版
(上海市武康路2号)

新华书店上海发行所发行
上海市印刷十二厂印刷

开本 787×1092 1/32 印张 9.5 字数 220,000

1984年8月第1版 1984年8月第1次印刷

印数: 1—33,500

书号: 15192 317 定价: 1.17元

《科技新书目》75-200

序 言

随着我国国民经济和科学技术的发展,电子计算机的使用日益广泛。科技计算、企业管理和数据统计分析是电子计算机应用的几个重要方面。为了普及与推广计算机的应用,提高计算机的使用率,缩短解题周期,尤其是编写和调试程序的周期,我们编写了 FORTRAN 应用程序库。

FORTRAN 语言是当今世界上最流行的高级程序设计语言之一,它特别适合解决各类计算问题。凡配有通用的 FORTRAN IV 的各种计算机都可以使用本书的应用程序。

本书共有 54 个程序,分为九章,依次为插值与逼近(6 个程序)、方程求根(3 个)、数值积分(4 个)、线性代数计算(8 个)、常微分方程的数值解法(6 个)、图论(5 个)、最优化方法(5 个)、多元统计分析(7 个)、线性规划(10 个)。

每个程序包括功能、方法简介、使用说明、程序与例题等五个部分。全部程序不但在 CJ-709 机上调试通过,而且在 CROMEMCO 微型计算机上进行了验算。本书参考 CROMEMCO 微机有关输入、输出的规定,其设备号取为 5,对于其它型号的计算机,仅在这一点上可能不同。

参加本书编写工作的主要人员有上海机械学院王家源、朱自强、林建浩同志;周静芳、王仰一同志也参加了编写工作;安徽省计算中心竺祖勤、程少春、颜锦纯、陈琪霞、李本超同志编写了第一章中第五、六两节及第八章。上海科技大学黄育仁、董炳华、叶秀明、张荣欣等同志通读了原稿,并提出了许多有益的意见,

在编写过程中黄育仁同志和复旦大学许自省同志给予热情指导,在此表示衷心感谢。

由于我们水平有限,文中错误与不妥之处,请读者批评指正。

编 者

一九八三年九月

目 录

第一章	插值与逼近	1
1.1	拉格朗日插值	1
1.2	分段抛物插值	3
1.3	埃特金插值	5
1.4	三次自然样条函数插值、微商与积分	8
1.5	线性拟合	14
1.6	非线性拟合	19
第二章	方程求根	29
2.1	二分法求方程的根	29
2.2	求高次代数方程的全部根	32
2.3	下降法求非线性方程组的根	38
第三章	数值积分	42
3.1	变步长辛普生求积	42
3.2	龙贝格求积	44
3.3	高斯法求积	48
3.4	高斯法求多重积分	50
第四章	线性代数计算	57
4.1	列主元高斯消去法	57
4.2	对称正定方程组的平方根法	60
4.3	对称正定方程组的乔累斯基法	64
4.4	行主元消去法求逆阵及行列式值	68
4.5	共轭斜量法求线性代数方程组的解	73

4.6	高阶稀疏对称正定方程组的变带宽法	78
4.7	求实对称矩阵特征值和特征向量的 雅可比方法	83
4.8	求实矩阵全部特征值和特征向量的 QR 方法	89
第五章	常微分方程的数值解法	114
5.1	定步长龙格-库塔方法	114
5.2	变步长龙格-库塔方法	118
5.3	定步长基尔方法	122
5.4	定步长五阶单步方法	127
5.5	定步长哈明方法	131
5.6	病态方程组的数值解法	136
第六章	图论	142
6.1	赋权图中各顶点间最短通路值的计算	142
6.2	赋权图中计算两顶点间最短通路值的 Dijkstra 标号法	148
6.3	最大可靠路的计算	153
6.4	求最小支撑树的 Kruskal 算法	157
6.5	最短树问题的逐步生长法	162
第七章	最优化方法	167
7.1	用进退法确定寻查区间	167
7.2	用三次插值法求函数的极小值	170
7.3	0.618 法	173
7.4	模式搜索法	177
7.5	变尺度法(DFP 法)	182
第八章	多元统计分析	190
8.1	一元线性或非线性回归分析	190

8.2	逐步回归分析	195
8.3	单因素方差分析	202
8.4	二组判别分析	206
8.5	对应分析	213
8.6	E_{ij} 型数量化方法	220
8.7	伪随机数的产生	226
第九章	线性规划	233
9.1	单纯形法	233
9.2	对偶单纯形法	241
9.3	修正单纯形法	245
9.4	运输问题——表上作业法	250
9.5	分配问题——匈牙利法	260
9.6	有界变量的线性规划问题	268
9.7	多目标线性规划问题	278
9.8	行囊问题的动态规划解法(I)	284
9.9	行囊问题的动态规划解法(II)	288
9.10	排序问题	292

第一章 插值与逼近

1.1 拉格朗日插值

一、功能

用拉格朗日插值公式对给定的 n 个插值结点进行插值。

二、方法简介

对给定的 n 个插值结点 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 及对应的函数值 $y_1, y_2, \dots, y_n$, 应用拉格朗日插值公式, 计算在 x 点处的函数值 $y(x)$:

$$y(x) = \sum_{k=1}^n \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) y_k$$

三、使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE LAGR(X0, Y0, N, X, Y)

2. 哑元说明

输入参数:

N 整变量, 插值结点个数。

X0 N 个元素的一维实数组, 存放给定的插值结点。

Y0 N 个元素的一维实数组, 存放插值结点上相应的函数值。

X 实变量, 插值点。

输出参数:

Y 实变量, 插值结果。

四、程序

```
SUBROUTINE LAGR(X0, Y0, N, X, Y)
DIMENSION X0(N), Y0(N)
```

```

Y=0.0
DO 30 I=1, N
P=1.0
DO 20 J=1, N
IF (I-J) 10, 20, 10
10 P=P*(X-X0(J))/(X0(I)-X0(J))
20 CONTINUE
30 Y=Y+P*Y0(I)
RETURN
END

```

五、例题

已知如表 1-1 所示的列表函数, 求 $x=0.472$ 处的函数值。

表 1-1

x	0.46	0.47	0.48	0.49
y	0.484655	0.493745	0.502750	0.511668

用数组 X0 的元素顺序存放 0.46, 0.47, 0.48, 0.49; 数组 Y0 的元素顺序存放 0.484655, 0.493745, 0.502750, 0.511668。

程序如下:

```

SUBROUTINE LAGR(X0, Y0, N, X, Y)
: 本子程序段体部分
END

DIMENSION X0(4), Y0(4)
READ(5, 1)X0, Y0
1 FORMAT(4F8.3/4F10.6)
X=0.472
CALL LAGR(X0, Y0, 4, X, Y)
WRITE(5, 20)X, Y
20 FORMAT(4X, 'X=', F6.3, 6X, 'Y=', F8.5)
STOP
END

```

计算结果: $y(0.472) = 0.49555$

1.2 分段抛物插值

一、功能

用拉格朗日三点插值公式对一元插值表中选取最靠近插值点 x 的相邻三点进行插值。

二、方法简介

设给定的 n 个插值结点 $x_1 < x_2 < \dots < x_n$ 及对应的函数值 $y_1, y_2, \dots, y_n$, 取三点 x_{i-1}, x_i 和 x_{i+1} 按下列公式进行插值:

$$\begin{aligned} y = & \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} y_{i-1} \\ & + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} y_i \\ & + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} y_{i+1} \end{aligned}$$

对于给定的插值点 x 选择三个插值结点的方法归纳如下:

$$i = \begin{cases} 2 & \text{当 } x \leq x_2 \\ k-1 & \text{当 } x_{k-1} < x \leq x_k \text{ 且 } |x-x_{k-1}| \leq |x-x_k| \\ & (k=3, 4, \dots, n-1) \\ k & \text{当 } x_{k-1} < x \leq x_k \text{ 且 } |x-x_{k-1}| > |x-x_k| \\ & (k=3, 4, \dots, n-1) \\ n-1 & \text{当 } x > x_{n-1} \end{cases}$$

三、使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE LAQ(N, T, X, Y, A)

2. 哑元说明

输入参数:

N 整变量, 结点个数, 且 $N \geq 3$ 。

T 实变量, 插值点。

X N个元素的一维实数组, 存放给定的插值结点, 要求 $X(I) < X(I+1)$ ($I=1, 2, \dots, N-1$)。

Y N个元素的一维实数组, 存放插值结点上相应的函数值。
输出参数:

A 实变量, 插值结果。

四、程序

```
SUBROUTINE LAQ(N, T, X, Y, A)
  DIMENSION X(N), Y(N)
  M=N-1
  DO 10 I=3, M
    IF(T.GT.X(I)) GOTO 10
    IF(ABS(T-X(I-1)).LE.ABS(T-X(I))) I=I-1
    GOTO 20
  10 CONTINUE
  I=N-1
  20 U=(T-X(I))*(T-X(I+1))/(X(I-1)-X(I))/(X(I-1)-X(I+1))
  V=(T-X(I-1))*(T-X(I+1))/(X(I)-X(I-1))/(X(I)-X(I+1))
  W=(T-X(I-1))*(T-X(I))/(X(I+1)-X(I-1))/(X(I+1)-X(I))
  A=U*Y(I-1)+V*Y(I)+W*Y(I+1)
  RETURN
END
```

五、例题

已知如表 1-2 所示的列表函数, 求 $x=0.57891$ 处的函数值。

表 1-2

x	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
y	0.38942	0.47943	0.56464	0.64422	0.71736

用数组 X 的元素顺序存放 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8; 数组 Y 的元素顺序存放 0.38942, 0.47943, 0.56464, 0.64422,

0.71736。

程序如下:

```
SUBROUTINE LAQ(N, T, X, Y, A)
: 本子程序段体部分
END

DIMENSION X(5), Y(5)
READ(5, 10)X, Y
10 FORMAT(5F,6.3/5F8.6)
T=0.57891
CALL LAQ(5, T, X, Y, A)
WRITE(5, 20)A
20 FORMAT(20X, 'A=', F8.5)
STOP
END
```

计算结果: $y(0.57891) = 0.54714$

1.3 埃特金插值

一、功能

从给定的 n 个插值结点中选取最靠近插值点 x 的相邻的 $m(m \leq n)$ 个插值结点, 用埃特金反复线性插值公式对一元函数进行插值。

二、方法简介

设给定的 n 个插值结点 $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ 及其对应的函数值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 。从 n 个插值结点中选取最靠近插值点 x 且尽量使 x 位于其中心的 m 个结点, 通过反复线性插值逐步产生一次、二次直至 $m-1$ 次拉格朗日插值多项式, 具体方法如下:

先利用线性插值公式:

$$y_1^{(k)}(x) = y_i + \frac{x - x_i}{x_{i+k} - x_i} (y_{i+k} - y_i) \quad (k=1, 2, \cdots, m-1) \quad (1)$$

计算 $m-1$ 个一次多项式 $y_1^{(1)}(x), y_1^{(2)}(x), \dots, y_1^{(m-1)}(x)$ 。然后, 再利用递推的线性插值公式:

$$y_i^{(k)}(x) = y_{i-1}^{(1)}(x) + \frac{x-x_j}{x_{j+k}-x_j} [y_{i-1}^{(k+1)}(x) - y_{i-1}^{(1)}(x)] \quad (2)$$

$$(l=2, 3, \dots, m-1; k=1, 2, \dots, m-l; j=i+l-1)$$

依次计算 $y_2^{(1)}(x), y_2^{(2)}(x), \dots, y_2^{(m-2)}(x); y_3^{(1)}(x), y_3^{(2)}(x), \dots, y_3^{(m-3)}(x); \dots, y_{m-1}^{(1)}(x)$ 。则 $y_{m-1}^{(1)}(x)$ 就是 $m-1$ 次拉格朗日插值多项式 $y(x)$, 公式 (1), (2) 称为埃特金插值公式。

三、使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE ATK(X, Y, T, N, M, Z, F, A)

2. 哑元说明

输入参数:

- N 整变量, 插值结点个数。
- M 整变量, 选用的插值结点个数, 且 $M \leq N$ 。
- X N 个元素的一维实数组, 存放给定的插值结点, 要求 $X(I) < X(I+1) (I=1, 2, \dots, N-1)$ 。
- Y N 个元素的一维实数组, 存放插值结点上相应的函数值。
- T 实变量, 插值点。

输出参数:

- A 实变量, 插值结果。

工作单元:

Z, F 都是 M 个元素的一维实数组。

四、程序

```
SUBROUTINE ATK(X, Y, T, N, M, Z, F, A)
  DIMENSION F(M), X(N), Y(N), Z(M)
  IF (M.GT.N) M=N
```

```

      DO 1 I=1, N
      IF (T.LE.X(I)) GOTO 2
1  CONTINUE
      I=N
2  IF (T.NE.X(I)) GOTO 3
      F(M)=Y(I)
      GOTO 9
3  IF (MOD(M, 2).EQ.0) GOTO 4
      IF (I.EQ.1) GOTO 4
      IF ((T-X(I-1)).GE.(X(I)-T)) GOTO 4
      I=I-1
4  I=I-M/2
      IF(I.GT.0) GOTO 5
      I=1
      GOTO 6
5  IF ((I+M).GT.N) I=N-M+1
6  DO 7 J=1, M
      Z(J)=T-X(I)
      F(J)=Y(I)
7  I=I+1
      M1=M-1
      DO 8 I=1, M1
      FI=F(I)
      ZI=Z(I)
      I1=I+1
      DO 8 J=I1, M
8  F(J)=FI+ZI*(F(J)-FI)/(ZI-Z(J))
9  A=F(M)
      RETURN
      END

```

五、例题

已知如表 1-3 所示的列表函数, 求 $x=0.462, 0.6$ 处的函数值。

表 1-3

x	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
y	0.29850	0.39646	0.49311	0.58813	0.68122

用数组 X 的元素顺序存放 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7; 数组 Y 的元素顺序存放 0.29850, 0.39646, 0.49311, 0.58813, 0.68122; 取 $M=4$ 。

程序如下:

```

SUBROUTINE ATK(X, Y, T, N, M, Z, F, A)
: 本子程序段体部分
END

DIMENSION X(5), Y(5), T(2), Z(4), F(4)
READ (5, 5) X, Y
5  FORMAT (5F5.2/5F8.6)
T(1)=0.462
T(2)=0.6
DO 10 I=1, 2
CALL ATK(X, Y, T(I), 5, 4, Z, F, A)
10 WRITE (4, 20) T(I), A
20 FORMAT (6X, 2HX=, F6.3, 5X, 2HY=, F8.5)
STOP
END

```

计算结果:

$$y(0.462)=0.45656, \quad y(0.6)=0.58813$$

1.4 三次自然样条函数插值、微商与积分

一、功能

给定 n 个插值结点 $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$ 及对应的函数值 $y_1, y_2, \cdots, y_n$, 用三次自然样条函数 $S(x)$, 求一组插值点上的函数值、一阶导数值、二阶导数值和定积分 $\int_{x_1}^{x_n} S(x) dx$ 的值。

二、方法简介

三次自然样条函数 $S(x)$ 在每个分段 (x_{i-1}, x_i) 上都是三次多项式, 且满足下列条件:

1. 插值条件: $S(x_i) = y_i (i=1, 2, \dots, n)$

2. 连接条件: 在分点 x_i 处具有连续的一阶和二阶导数, 即

$$\left. \begin{aligned} S'(x_i-0) &= S'(x_i+0) \\ S''(x_i-0) &= S''(x_i+0) \end{aligned} \right\} \quad (i=2, 3, \dots, n-1)$$

3. 自然边界条件: $S''(x_1) = S''(x_n) = 0$

在每个子区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上, 由牛顿插值公式有

$$\begin{aligned} S(x) &= S(x_i) + (x-x_i)S(x_i, x_{i+1}) \\ &\quad + (x-x_i)(x-x_{i+1})S(x, x_i, x_{i+1}) \end{aligned} \quad (1)$$

这里
$$S(x, x_i, x_{i+1}) = \frac{S(x_{i+1}) - S(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

$$S(x, x_i, x_{i+1}) = \frac{1}{6} [S'''(x) + S''(x_i) + S''(x_{i+1})]$$

因 $S(x)$ 是三次多项式, $S'''(x)$ 在 $[x_i, x_{i+1}]$ 上是一次多项式, 故

$$S'''(x) = S''(x_i) + (x-x_i)S''(x_i, x_{i+1}) \quad (2)$$

对(1)求导, 则有

$$\begin{aligned} S'(x) &= S(x_i, x_{i+1}) + (2x-x_i-x_{i+1})S(x, x_i, x_{i+1}) \\ &\quad + \frac{1}{6}(x-x_i)(x-x_{i+1})S''(x_i, x_{i+1}) \end{aligned} \quad (3)$$

利用连接条件, 由此可得 $S''(x_i) (i=2, 3, \dots, n-1)$ 满足三对角线性方程组

$$\begin{aligned} &(x_i - x_{i-1})S''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1}) \\ &\quad \cdot S''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)S''(x_{i+1}) \\ &= 6[S(x_i, x_{i+1}) - S(x_{i-1}, x_i)] \end{aligned} \quad (4)$$

($i=2, 3, \dots, n-1$)