

FORTRAN

科学计算与 管理程序汇编

车克健 黄佩璋 编
中国铁道出版社

FORTRAN科学计算与管理 程序汇编

车克健 黄佩璋 编

中 国 铁 道 出 版 社

1987年·北京

内 容 简 介

本书是普及计算方法与程序设计的工具书，内容主要介绍科学计算与科学管理的常用算法及程序。

全书共87个算法，按性质分为十二章。其内容包括：插值、拟合、平滑、特殊函数、数值积分、超越方程、线性代数、常微分方程、观测数据的预处理和常用分布函数、统计分析、线性规划、非线性规划、最优化计算等。

本书可供工程技术人员、计划管理人员作为手册查阅，也可供高等院校有关专业师生学习参考。

FORTRAN科学计算与管理程序汇编

车克健 黄佩璋 编

中国铁道出版社出版

责任编辑 郭宇 封面设计 王毓平

新华书店北京发行所发行

各地新华书店经售

中国铁道出版社印刷厂印

开本：850×1168毫米 1/32 印张：20.375 字数：521千

1987年2月 第1版 第1次印刷

印数：0001—5,700册 定价：4.40元

前 言

科学计算与科学管理是计算机应用的两大领域。随着我国科学技术的发展和科学管理的实施,计算机的应用改变了过去侧重于科学计算的状况,开始向科学管理这一广阔领域进军。为了适应这种新形势,我们编写了这本科学计算与科学管理程序汇编。

本汇编的程序是由FORTRAN语言编写而成的。我们编制标准程序的目的是为了避免重复劳动,让用户象使用其他工具一样,方便地使用这些程序,节省编程时间,提高计算机的使用效率。为此,我们在程序的设计、调试,书稿的加工整理等过程中,始终注意到方便性、科学性和准确性。在算法的选择上,我们考虑的原则是适应性强、使用面广、少而精。

为了使汇编的程序具有较强的通用性和易变通性,我们在编写中尽量采用FORTRAN语言最基本的语句功能,即采用同一种语言的不同文本(如FORTRAN I 和FORTRAN IV 等)和不同的语言(如BASIC、ALGOL60和FORTRAN等)所共有的语句功能。当然,不同的文本,不同的语言,其各种语句的定义形式,可能有所不同。书后的附录,对本书所用FORTRAN语言,作了简要说明,以便于读者更好地阅读和使用本书。对于无条件使用FORTRAN语言程序的用户,可根据附录的说明,很容易移植为其他语言的程序。

书中每一节的子程序前面都有该子程序所用数学方法简述、流程图及使用说明,后面均有例题和相应的主程序及计算结果。对如何调用该子程序算题,作了具体示范。使用者只要给出输入参数的实在值,按照例题的式样写出主程序,即可上机算题。

由于受版面的限制,我们在程序中多使用了一些继续行。使用者上机算题时,可将某些继续行改写在其前一行的后面。

书后列出了部分有关的参考资料,以便读者进一步了解有关

的计算方法。

本书所编程序均在 Z80、HP-3000 和 FELIXC-512 机上实算通过，并按计算机打印的源程序及结果排印。

参加本书编写的有：中国科学院数学研究所车克健（第一、三、四、六、九、十章和第五章的第一至七节）和中国社会科学院工业经济研究所黄佩璋（第二、七、八章和第五章的第八至十二节）。全书由车克健整理。

在程序的调试过程中，中国科学院数学研究所计算站，中国社会科学院工业经济研究所计算站等单位的同志，给了我们大力支持，在此表示衷心的感谢。

书中不当之处，欢迎读者批评指正。

编 者

一九八五年四月

目 录

第一章 插值、拟合及平滑	1
第一节 拉格郎日插值	1
第二节 埃特金插值	3
第三节 二元三点插值	6
第四节 三次自然样条函数插值、微商及积分	10
第五节 最小二乘曲线拟合	16
第六节 参数表达的曲线用周期样条函数拟合	21
第七节 五点三次平滑	27
第八节 最小二乘多项式逼近	30
第二章 特殊函数	34
第一节 求复自变量的三角函数值	34
第二节 整数阶贝塞尔函数	38
第三节 Γ 函数	40
第四节 Γ 函数的对数	43
第五节 用多项式逼近误差函数	45
第六节 第一类完全椭圆积分	48
第七节 第二类完全椭圆积分	49
第三章 数值积分	52
第一节 变步长辛普生求积	52
第二节 龙贝格求积	55
第三节 高斯法求多重积分	60
第四章 超越方程	66
第一节 下降法解非线性方程组	66
第二节 对分区间套法	69
第三节 拟牛顿法解非线性方程组	73

第五章 线性代数	79
第一节 列主元素消去法.....	79
第二节 全主元素消去法.....	82
第三节 高斯赛德尔迭代法.....	86
第四节 求解大型稀疏方程组.....	88
第五节 线性对称方程组的分解法.....	93
第六节 病态方程组的迭代方法.....	98
第七节 超松弛法.....	105
第八节 行主元素法求逆矩阵和行列式值.....	111
第九节 求对称矩阵的特征值和特征向量的雅可比法.....	118
第十节 求广义实对称特征值和特征向量.....	125
第十一节 求一般实矩阵的特征值和特征向量的QR法.....	143
第十二节 求复矩阵全部特征值和特征向量的LR法.....	167
第六章 常微分方程	182
第一节 折线法及改进的折线法.....	182
第二节 变步长定点输出龙格-库塔法.....	186
第三节 变步长定点输出单步法.....	192
第四节 病态常微分方程组的数值积分.....	197
第七章 观测数据的预处理和常用分布函数	204
第一节 观测数据的预处理及其数字特征计算.....	204
第二节 时间序列的移动平均法.....	211
第三节 时间序列的一、二、三次指数平滑法.....	216
第四节 正态分布的分布函数.....	223
第五节 正态分布的分位数.....	227
第六节 t 分布的分布函数.....	229
第七节 t 分布的分位数.....	236
第八节 F 分布的分布函数.....	241

第九节 F 分布的分位数	247
第八章 统计分析	252
第一节 单因素方差分析	252
第二节 一元回归	257
第三节 多因素方差分析	279
第四节 多元线性回归	288
第五节 逐步回归	301
第六节 多元三角回归	318
第七节 多项式回归	330
第八节 非线性参数估算	338
第九节 逐步判别法	350
第九章 线性规划	372
第一节 解线性规划问题的单纯形法	372
第二节 求初始允许基	378
第三节 求解变量带上界的线性规划问题	385
第四节 求解对偶线性规划问题	401
第五节 改进的单纯形法	407
第六节 求解全整数线性规划问题	419
第十章 非线性规划	426
第一节 成功-失败法	426
第二节 序贯试验法	428
第三节 坐标轮换法	432
第四节 方向加速法	437
第五节 梯度-牛顿法	442
第六节 可变多面体法	451
第七节 解非线性规划的可行方向法	460
第八节 罚函数法	468
第九节 可变容差法	483
第十一章 最优化计算	505
第一节 设备更新问题	505

IV

第二节	资源的最优分配问题	510
第三节	最优完全分配问题	514
第四节	最优巡回路线问题	521
第五节	最优排序问题	528
第六节	排队问题	533
第七节	决策问题	542
第八节	计划评审问题	547
第九节	求最短路问题	555
第十节	求网络的最大流问题	561
第十一节	求无向图的最优树问题	567
第十二章	其 他	572
第一节	多重快速富氏变换	572
第二节	单重快速富氏变换	590
第三节	数据的分类	595
第四节	数据的检索	602
第五节	随机数与蒙特卡洛法	607
第六节	计算机模拟一个公共车站乘客到达人数	617
附 录	本书所用FORTRAN语言简介	622
参考资料		641

第一章 插值、拟合及平滑

第一节 拉格朗日插值

一、数学方法简述

1. 设已知函数 $y(x)$ 的结点值为 $x_i (i=1, 2, \dots, n)$, 其对应的函数值为 y_i ; 对于给定的不是结点的 x , 用一元拉格朗日插值公式计算其对应的函数值 $y(x)$ 。

2. 插值公式

$$y(x) = \sum_{j=1}^n \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \left(\frac{x - x_i}{x_j - x_i} \right) y_j$$

3. 本节子程序是对 m 个不是结点的 $x_k (k=1, 2, \dots, m)$ 进行成组插值, 求出其对应的函数值 $y_k = y(x_k)$ 。

二、子程序流程图 (见图 1-1)

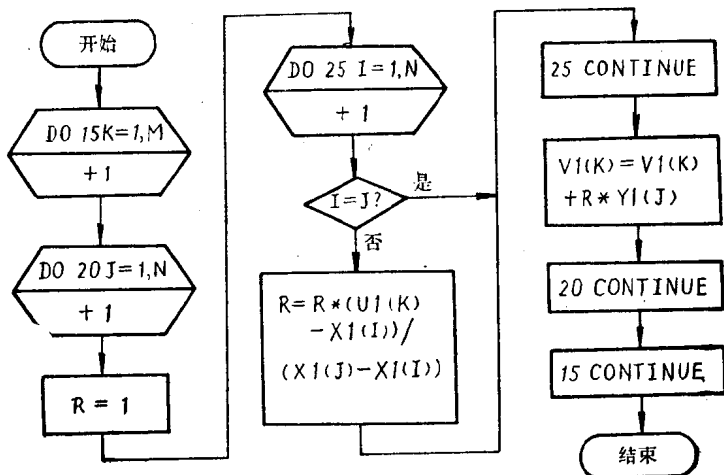


图 1-1 拉格朗日插值流程图

三、子程序使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE SUB 0101(M,N,X1,Y1,U1,V1)

2. 形式参数 (也称哑元或虚拟变元)

N——整型输入参数, 为给定的插值结点数;

M——整型输入参数, 为给定的要插值的结点数;

X1——实数组 $X1(N)$, 为输入参数, 存放给定的插值结点值;

Y1——实数组 $Y1(N)$, 为输入参数, 存放给定的插值结点上的函数值;

U1——实数组 $U1(M)$, 输入参数, 存放给定的要插值的结点值;

V1——实数组 $V1(M)$, 输出参数, 存放求得的要插值结点上的函数值。

四、子 程 序

SUBROUTINE SUB0101 (M,N,X1,Y1,U1,V1)

REAL X1(N), Y1(N), U1(M), V1(M)

DO 15 K=1, M

DO 20 J=1, N

R=1.

DO 25 I=1, N

IF(I.EQ.J) GOTO 25

$R = R * (U1(K) - X1(I)) / (X1(J) - X1(I))$

25 CONTINUE

$V1(K) = V1(K) + R * Y1(J)$

20 CONTINUE

15 CONTINUE

RETURN

END

五、例 题

1. 已知 $x_i = -2, -0.4, 0.2, 1, 4$; $y_i = 24, -0.2688, -0.0768, 0, 480$ 。求当 $x_j = -1.5, -1, -0.2, 0, 0.4, 0.8, 1.5, 2$ 时的函数值 y_j 。

2. 主程序

```
REAL X0(5), Y0(5), U(8), V(8)
DATA X0/-2., -.4, .2, 1., 4./
DATA Y0/24., -.2688, -.0768, 0., 480./
DATA U/-1.5, -1., -.2, 0., .4, .8, 1.5, 2 /
CALL SUB0101 (8, 5, X0, Y0, U, V)
WRITE (108, 10) (U(I), V(I), I=1, 8)
10 FORMAT(1X, 1H(, F10.5, 1H, F10.5, 1H))
STOP
END
```

3. 计算结果

```
(-1.50000, 5.62500)
(-1.00000, 0.00000)
(-0.20000, -0.07680)
(0.00000, 0.00000)
(0.40000, -0.26880)
(0.80000, -0.46080)
(1.50000, 5.62500)
(2.00000, 23.99998)
```

第二节 埃特金插值

一、数学方法简述

已知函数 $f(x)$ 的 $n+1$ 个结点 $a_i (i=0, 1, \dots, n)$ 及其对应的 $n+1$ 个函数值 $y_i (i=0, 1, \dots, n)$ 。

设 $I_0(x) = y_0, I_1(x) = y_1, \dots, I_n(x) = y_n$ 。

令 $I_{0,1}(x)$ 为用 a_0, a_1 作插值点的一次插值多项式;

$I_{0,2}(x)$ 为用 a_0, a_2 作插值点的一次插值多项式;

$I_{1,2}(x)$ 为用 a_1, a_2 作插值点的一次插值多项式;

.....

$I_{0,1,2}(x)$ 为用 a_0, a_1, a_2 作插值点的二次插值多项式;

$I_{0,1,3}(x)$ 为用 a_0, a_1, a_3 作插值点的二次插值多项式;

$I_{0,1,\dots,k}(x)$ 为用 $a_0, a_1, \dots, a_k$ 作插值点的 k 值插值多项式。

有下列关系式成立

$$I_{0,1}(x) = \frac{1}{a_0 - a_1} \begin{vmatrix} I_0(x) & x - a_0 \\ I_1(x) & x - a_1 \end{vmatrix} = \frac{(x - a_0)y_1 - (x - a_1)y_0}{a_1 - a_0}$$

$$I_{0,1,2}(x) = \frac{1}{a_1 - a_2} \begin{vmatrix} I_{0,1}(x) & x - a_1 \\ I_{0,2}(x) & x - a_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{a_0 - a_1} \begin{vmatrix} I_{0,2}(x) & x - a_0 \\ I_{1,2}(x) & x - a_1 \end{vmatrix}$$

.....

$$I_{0,1,\dots,k}(x) = \frac{1}{a_q - a_p} \begin{vmatrix} I_{0,1,\dots,p-1,p+1,\dots,k}(x) & x - a_q \\ I_{0,1,\dots,q-1,q+1,\dots,k}(x) & x - a_p \end{vmatrix}$$

这样, 可从 $I_0, I_1, \dots$ 出发, 逐步求出 $I_{0,1}(x), I_{0,2}(x), I_{1,2}(x), \dots, I_{0,1,\dots,k}(x)$, 成为一系列线性插值问题。

二、子程序流程图 (见图1-2)

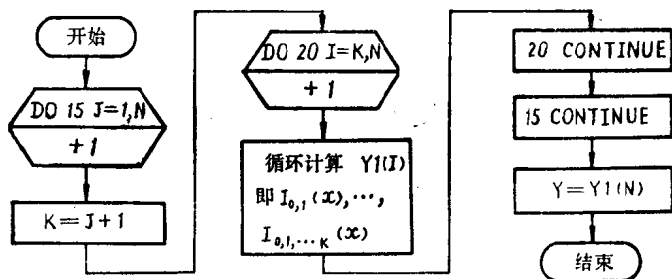


图 1-2 埃特金插值流程图

三、子程序使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE SUB0102(N,X,X1,Y1,Y)

2. 形式参数

N——整型输入参数，为给定的插值结点数；

X——实型输入参数，为要插值的结点值；

Y——实型输出参数，为求得的 X 点上的函数值；

X1——实数组 X1(N)，输入参数，存放给定的插值结点值；

Y1——实数组 Y1(N)，输入参数，存放给定的插值结点上的函数值。

四、子 程 序

SUBROUTINE SUB0102 (N, X, X1, Y1, Y)

REAL X1(N), Y1(N)

DO 15 J=1, N

K=J+1

DO 20 I=K, N

$Y1(I) = ((X - X1(J)) * Y1(I) - (X - X1(I)) * Y1(J)) / (X1(I) - X1(J))$

20 CONTINUE

15 CONTINUE

Y=Y1(N)

RETURN

END

五、例 题

1. 已知 $x_i = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$; $y_i = 0.29850, 0.39646, 0.49311, 0.58813, 0.68122$ 。

求当 $x = 0.462$ 时的函数值。

2. 主程序

```

REAL X0(5), Y0(5)
X=0.462
DATA X0/.3,.4,.5,.6,.7/
DATA Y0/.29850,.39646,.49311,.58813,.68122/
CALL SUB0102(5, X, X0, Y0, Y)
WRITE (108, 10) Y
10 FORMAT(1X, 2HY=, F10.5)
STOP
END
3. 计算结果
Y=0.45656

```

第三节 二元三点插值

一、数学方法简述

1. 已知函数 $f(x, y)$ 的第一变量 (x) 的结点值为 x_i (不一定等距, $i=0, 1, \dots, n$); 第二变量 (y) 的结点值为 y_j (不一定等距, $j=0, 1, \dots, m$)。其对应结点上的函数值为 f_{ij} ($i=0, 1, \dots, n; j=0, 1, \dots, m$)。对于给定的不是结点的值 (x, y), 分别选取最靠近 x 的三个点 (x_q, x_{q+1}, x_{q+2}) 和最靠近 y 的三个点 (y_p, y_{p+1}, y_{p+2}), 用二元拉格朗日插值公式计算出对应的函数值 $f(x, y)$ 。

显然, 插值结点分布越均匀越密, 其对应的函数值相差越小, 插值结果越精确。

2. 插值公式

$$f(x, y) = \sum_{i=q}^{q+2} \sum_{j=p}^{p+2} \left(\prod_{\substack{s=q \\ s \neq i}}^{q+2} \frac{x - x_s}{x_i - x_s} \right) \left(\prod_{\substack{l=p \\ l \neq j}}^{p+2} \frac{y - y_l}{y_j - y_l} \right) f_{ij}$$

本节介绍的二元三点插值方法可对 $l+1$ 个不是结点的变元值 (x_k, y_k) ($k=0, 1, \dots, l$) 进行成组插值, 求出对应的函数值。

二、子程序流程图（见图 1-3）

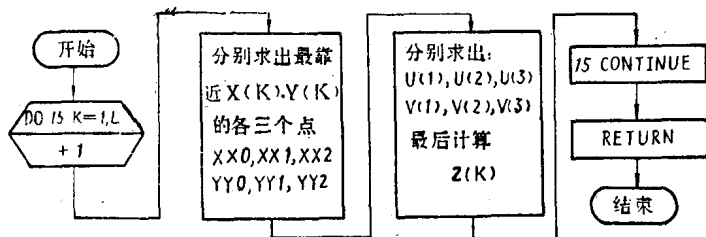


图 1-3 二元三点插值流程图

三、子程序使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE SUB0103(M, N, L, X1, Y1, Z1, X, Y, Z)

2. 形式参数

M—— y 方向给定的插值结点数；

N—— x 方向给定的插值结点数；

L——要插值的结点数；

X1——实数组 X1(N)，输入参数，存放 x 方向给定的插值结点值；

Y1——实数组 Y1(M)，输入参数，存放 y 方向给定的插值结点值；

Z1——实数组 Z1(N, M)，输入参数，存放给定结点上的函数值；

X——实数组 X(L)，输入参数，存放给定的 x 方向的要插值的结点值；

Y——实数组 Y(L)，输入参数，存放给定的 y 方向的要插值

的结点值;

Z ——实数组 Z(L), 输出参数, 存放插值结果。

四、子 程 序

```

SUBROUTINE SUB0103 (M, N, L, X1, Y1, Z1, X, Y, Z)
  REAL X1(N), Y1(M), Z1(N, M), X(L), Y(L), Z(L)
  REAL U(3), V(3)
  N3=N-3
  M3=M-3
  DO 15 K=1, L
    DO 20 I=1, N3
      IF(X(K).LE.X1(I+1)) GOTO 25
20  CONTINUE
      I=N-2
25  DO 30 J=1, M3
        IF(Y(K).LE.Y1(J+1)) GOTO 35
30  CONTINUE
        J=M-2
35  IF(I.EQ.1) GOTO 40
        IF(X(K)-X1(I).GE.X1(I+1)-X(K)) GOTO 40
        I=I-1
40  IF(J.EQ.1) GOTO 45
        IF(Y(K)-Y1(J).GE.Y1(J+1)-Y(K)) GOTO 45
        J=J-1
45  XX0=X1(I)
      XX1=X1(I+1)
      XX2=X1(I+2)
      YY0=Y1(J)
      YY1=Y1(J+1)
      YY2=Y1(J+2)
      U(1)=(X(K)-XX1)*(X(K)-XX2)/((XX0-XX1)*(XX0-
      XX2))

```