

FORTRAN 算法汇编

第三分册

郭富印 冯国环
石中岳 朱耀祖 编

国防工业出版社

内 容 简 介

本书是《FORTRAN算法汇编》的第三分册，其内容包括两个程序包：特征值系统程序包和结构分析有限元程序包。

第十三章介绍如何使用特征值系统程序包，第十四章提供特征值系统程序包包含的所有子程序，第十五章介绍以波阵和波阵迭代算法为基础，可以进行结构静力、稳定和振动特性分析的有限元程序包的功能与特点、算法以及编制程序的主要技巧，第十六章提供结构分析有限元程序包包含的所有子程序及函数段。

本书可供数值计算工作者、科研人员、工程技术人员和管理人员阅读，亦可供高等院校有关专业师生参考。

FORTRAN 算 法 汇 编

第 三 分 册

郭富印 冯国环 编
石中岳 朱耀祖

*

国防工业出版社 出版

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

廊坊日报印刷厂印刷

*

787×1092¹/₃₂ 印张 21¹/₄ 448 千字

1982年8月第一版 1982年8月第一次印刷 印数：0,001—7,500册

统一书号：15034·2288 定价：2.15元

目 录

第十三章 特征值系统程序包——EISPACK 1

13.1 在 EISPACK 中所建议的基本路径 2

13.1.1 复一般矩阵的全部特征值和对应的特征向量 7

13.1.2 复一般矩阵的全部特征值 9

13.1.3 复一般矩阵的全部特征值和选定的特征向量 10

13.1.4 复埃尔米特阵的全部特征值和对应的特征向量 12

13.1.5 复埃尔米特阵的全部特征值 14

13.1.6 复埃尔米特阵的部分特征值和对应的特征向量 15

13.1.7 复埃尔米特阵的部分特征值 17

13.1.8 实一般矩阵的全部特征值和对应的特征向量 18

13.1.9 实一般矩阵的全部特征值 20

13.1.10 实一般矩阵的全部特征值和选定的特征向量 21

13.1.11 实对称阵的全部特征值和对应的特征向量 23

13.1.12 实对称阵的全部特征值 25

13.1.13 实对称阵的部分特征值和对应的特征向量 26

13.1.14 实对称阵的部分特征值 28

13.1.15 实对称三对角阵的全部特征值和对应的特征向量 29

13.1.16 实对称三对角阵的全部特征值 31

13.1.17 实对称三对角阵的部分特征值和对应的特征向量 32

13.1.18 实对称三对角阵的部分特征值 33

13.1.19 特殊实三对角阵的全部特征值和对应的特征向量 35

13.1.20 特殊实三对角阵的全部特征值 37

13.1.21 特殊实三对角阵的部分特征值和对应的特征向量 38

13.1.22 特殊实三对角阵的部分特征值 39

13.1.23 实对称带型阵的全部特征值和对应的特征向量 40

13.1.24 实对称带型阵的全部特征值 43

13.1.25 实对称带型阵的部分特征值和对应的特征向量 44

13.1.26 实对称带型阵的部分特征值 46

13.1.27 广义对称特征值问题 $AX = \lambda BX$ 的全部特征值和对应的特征向量 47

13.1.28	广义对称特征值问题 $AX = \lambda BX$ 的全部特征值	49
13.1.29	广义对称特征值问题 $AX = \lambda BX$ 的部分特征值和对 应的特征向量	50
13.1.30	广义对称特征值问题 $AX = \lambda BX$ 的部分特征值	52
13.1.31	广义对称特征值问题 $ABX = \lambda X$ 的全部特征值和对 应的特征向量	53
13.1.32	广义对称特征值问题 $ABX = \lambda X$ 的全部特征值	54
13.1.33	广义对称特征值问题 $ABX = \lambda X$ 的部分特征值和对 应的特征向量	55
13.1.34	广义对称特征值问题 $ABX = \lambda X$ 的部分特征值	56
13.2	EISPACK 基本路径的变形	57
13.2.1	不平衡复和实一般矩阵	58
13.2.2	利用正交变换进行赫申伯格化简	60
13.2.3	隐式与显式 QL 算法	61
13.2.4	求几个极值特征值的有理 QR 算法	64
13.2.5	利用 TSTURM 代替 BISECT—TINVIT	66
13.2.6	对复一般矩阵的初等相似变换	68
13.2.7	在求部分特征值系统的路径中 IMTQLV 与 TINVIT 联用	69
13.2.8	对二分法过程的边界特征值下标的规定	71
13.2.9	实对称和复埃尔米特阵的压缩存储表示法	72
13.2.10	实对称带型阵的 QR 算法	73
13.3	其它的资料和例子	75
13.3.1	实和复一般矩阵特征向量的选择	76
13.3.2	实一般矩阵特征向量的非压缩存储	78
13.3.3	参数 EPS1	81
13.3.4	计算部分和全部特征值系统的相对效率	84
13.3.5	特征值符号的确定	86
13.3.6	实矩阵到拟三角形的正交相似化简	87
13.3.7	BANDV 在求解带型线性方程组中的应用	88
13.3.8	IERR 的非零值	89
13.3.9	使用 EISPACK 子程序的例子	92

第十四章 特征值系统程序包 (EISPACK) 的源

程序和编写说明 97

14.1	BAKVEC 对 FIGI 所确定的对称三对角阵的特 征向量的反变换	97
------	---------------------------------------	----

14.2	BALANC	实一般矩阵的平衡	100
14.3	BALBAK	对 BALANC 变换的实矩阵的特征向量的反变换	105
14.4	BANDR1	用正交变换将实对称带型阵化简为对称三对角阵	107
14.5	BANDR2	用正交变换将实对称带型阵化简为对称三对角阵并累积正交变换	113
14.6	BANDV	求实对称带型阵的部分特征向量或求解带型方程组	119
14.7	BISECT	求对称三对角阵的部分特征值	128
14.8	BQR	求实对称带型阵的部分特征值	137
14.9	CBABK2	对 CBAL 变换的复矩阵的特征向量的反变换	145
14.10	CBAL	复一般矩阵的平衡	147
14.11	CG	求复一般矩阵的特征值和特征向量的驱动子程序	151
14.12	CH	求复埃尔米特阵的特征值和特征向量的驱动子程序	155
14.13	CINVIT	求复上赫申伯格阵对应于所规定的特征值的特征向量	158
14.14	COMBAK	对 COMHES 所确定的上赫申伯格阵的特征向量的反变换	166
14.15	COMHES	用初等变换将复一般矩阵化简为复上赫申伯格型	169
14.16	COMLR	求复上赫申伯格阵的特征值	173
14.17	COMLR2	求复上赫申伯格阵的特征值和特征向量	180
14.18	COMQR	求复上赫申伯格阵的特征值	190
14.19	COMQR2	求复上赫申伯格阵的特征值和特征向量	196

14.20 CORTB	对CORTH所确定的上赫申伯格阵的特征向量的反变换	207
14.21 CORTH	用酉变换将复一般矩阵化简为上赫申伯格型	210
14.22 ELMLBAK	对 ELMHES 所确定的上赫申伯格阵的特征向量的反变换	213
14.23 ELMHES	用初等变换将实一般矩阵化简为上赫申伯格型	216
14.24 ELTRAN	累积 ELMHES 在化简实一般矩阵时所用到的变换	219
14.25 FIGL	将特殊实非对称三对角阵变换为对称三对角阵	222
14.26 FIGI2	将特殊实非对称三对角阵变换为对称三对角阵并累积诸对角变换	225
14.27 HQR	求实上赫申伯格阵的特征值	228
14.28 HQR2	求实上赫申伯格阵的特征值和特征向量	235
14.29 HTRIBK	对 HTRIDI 所确定的对称三对角阵的特征向量的反变换	240
14.30 HTRIB3	对 HTRID3 所确定的对称三对角阵的特征向量的反变换	248
14.31 HTRIDI	用酉变换将复埃尔米特阵化简为实对称三对角阵	251
14.32 HTRID3	用酉变换将存放在一个方形数组内的复埃尔米特阵化简为实对称三对角阵	256
14.33 IMTQLV	求对称三对角阵的特征值	260
14.34 IMTQL1	求对称三对角阵的特征值	265
14.35 IMTQL2	求对称三对角阵的特征值和特征向量	270
14.36 INVIT	求实上赫申伯格阵对应于所指定的特征值的特征向量	275

14.37 ORTBAK	对ORTHES所确定的上赫申伯 格阵的特征向量的反变换	286
14.38 ORTHES	用正交变换将实一般矩阵化简 为上赫申伯格型	288
14.39 ORTRAN	累积ORTHES化简实一般矩阵时的变换	293
14.40 RATQR	求对称三对角阵的部分极小或 极大特征值	295
14.41 REBAKA	对 REDUC1 和 REDUC2 所确 定的标准对称特征值问题的特 征向量的反变换	303
14.42 REBAKB	对 REDUC2 所确定的标准对称特征值 问题的特征向量的反变换	305
14.43 REDUC1	将广义对称特征值问题 $AX = \lambda BX$ 化 为标准型	307
14.44 REDUC2	将广义对称特征值问题 $ABX = \lambda X$ 等 化为标准型	311
14.45 RG	求实一般矩阵的特征值和特征向量 的驱动子程序	315
14.46 RS	求实对称阵的特征值和特征向量的 驱动子程序	318
14.47 RSB1	求实对称带型阵的特征值的驱动子程序	321
14.48 RSB2	求实对称带型阵的特征值和特征向 量的驱动子程序	323
14.49 RSP	求压缩存贮的实对称矩阵特征值的 驱动子程序	325
14.50 RSP2	求压缩存贮的实对称矩阵特征值和 特征向量的驱动子程序	327
14.51 RSSM	求广义特征值问题 $AX = \lambda BX$ 和 $ABX = \lambda X$ 的特征值和特征向量的驱动子程序	330

XIV

14.52 RST	求实对称三对角阵的特征值和特征向量的驱动子程序	334
14.53 RT	求特殊实三对角阵的特征值的驱动子程序	336
14.54 RT2	求特殊实三对角阵的特征值和特征向量的驱动子程序	338
14.55 TINVIT	求对称三对角阵的部分特征向量	340
14.56 TQLRAT	求对称三对角阵的特征值	349
14.57 TQL1	求对称三对角阵的特征值	352
14.58 TQL2	求对称三对角阵的特征值和特征向量	356
14.59 TRBAK1	对 TRED1 所确定的对称三对角阵的特征向量的反变换	361
14.60 TRBAK3	对 TRED3 所确定的对称三对角阵的特征向量的反变换	363
14.61 TRED1	用正交变换将实对称阵化简为对称三对角阵	365
14.62 TRED2	用正交变换将实对称阵化简为对称三对角阵并累积正交变换	370
14.63 TRED3	用正交变换将存贮为一维数组的实对称阵化简为对称三对角阵	373
14.64 TRIDIB	求对称三对角阵的部分特征值	377
14.65 TSTURM	求对称三对角阵的部分特征值和特征向量	386

第十五章 结构分析有限元程序包

15.1 PG101 通用程序	400
15.1.1 程序的功能	400
15.1.2 程序的数值方法	401
15.1.3 程序的结构特点	405
15.2 PG102 通用程序	409
15.2.1 程序的功能	409
15.2.2 程序的数值方法——波阵法与波阵迭代法	410

15.2.3	程序的结构特点	416
15.3	输入数据的准备	422
15.3.1	静力分析的数据准备	424
15.3.2	振动特性分析的数据准备	431
15.3.3	稳定性分析的数据准备	433
15.3.4	数据准备的例题	434
15.4	几个问题的计算结果	446
15.4.1	静力分析的计算结果	446
15.4.2	振动特性分析的计算结果	454
15.4.3	稳定性分析的计算结果	456
第十六章 结构分析有限元程序包的源程序与使用说明		459
16.1	PG101 源程序与使用说明	460
16.1.1	主程序流程图与主程序	460
16.1.2	INPUT 子程序	468
16.1.3	CHECK 子程序	470
16.1.4	OTPUT子程序	471
16.1.5	NUMB2子程序	473
16.1.6	ROWB子程序	475
16.1.7	ADDRES子程序	477
16.1.8	SELECT子程序	478
16.1.9	BCON37子程序	481
16.1.10	FCT31子程序	483
16.1.11	ADDP2子程序	486
16.1.12	ADDPM子程序	487
16.1.13	SLV31子程序	489
16.1.14	REOUT子程序	491
16.1.15	BISECT子程序	492
16.1.16	INPOW子程序	496
16.1.17	EIGEN子程序	499
16.1.18	INVIT子程序	502
16.1.19	CHOH子程序	505
16.1.20	II 函数段	506
16.1.21	ASSEM3子程序	507
16.1.22	XTRA2子程序	510

16.1.23	ELEMT1子程序	512
16.1.24	ELEMT2子程序	516
16.1.25	ELEMT3子程序	520
16.1.26	ELEMT4子程序	526
16.1.27	ELEMT5子程序	531
16.1.28	ELEMT6子程序	537
16.2	PG102 源程序与使用说明	544
16.2.1	主程序流程图与主程序	544
16.2.2	PREPAR子程序	553
16.2.3	GSTIF子程序	561
16.2.4	GMASS子程序	565
16.2.5	STRSS子程序	571
16.2.6	OTPUT子程序	574
16.2.7	INPUT子程序	576
16.2.8	CHECK子程序	578
16.2.9	JX 函数段	579
16.2.10	II 函数段	580
16.2.11	ASSEM子程序	581
16.2.12	WDNRD子程序	583
16.2.13	EKP子程序	586
16.2.14	EKS子程序	590
16.2.15	EKT子程序	594
16.2.16	CONW子程序	598
16.2.17	SLV子程序	601
16.2.18	OPTION子程序	604
16.2.19	MENMB1子程序	607
16.2.20	MENMB2子程序	610
16.2.21	MENMB3子程序	612
16.2.22	MENMB4子程序	619
16.2.23	MENMB5子程序	623
16.2.24	MENMB6子程序	628
16.2.25	MENMB7子程序	637

附录 结构分析有限元程序包主程序段主要标

识符说明	651
参考资料	661

第十三章 特征值系统程序包——EISPACK

为了正确地运用特征值系统程序包——EISPACK 的子程序求解特征值问题，本章将向用户介绍程序包的基本使用说明。使用说明的介绍方式与特征值程序包的设计密切相关，因此，我们首先需要概括地了解一下 EISPACK 的总体结构。

EISPACK 能够进行 34 种不同的基本运算和其它运算——若干基本运算的变形。每种运算如果完全在一个 EISPACK 子程序中完成，程序包将会变得不适用，并且由于在许多运算中会出现相同的计算步骤而显得十分累赘。为了避免这些问题，EISPACK 中所设计的每个子程序可以完成一种或多种运算中出现的基本计算步骤，从而使程序包的规模达到最小。

另一方面，要完成一个给定的运算，通常需要一个以上的 EISPACK 子程序。当然，这些子程序必须按正确的顺序和使用适当的参数进行调用。此外，有些运算还需要一定的辅助措施，例如将参数置初值和检查错误。我们把这样一个有序的子程序调用集以及与之相联系的辅助性措施，叫做一个“EISPACK 路径”，并简称为“路径”。

按照程序包的这种结构，EISPACK 的使用说明包括两个主要部分：基本路径及其变形的说明和 EISPACK 各个子

程序的编写说明。本章主要是关于 EISPACK 路径的说明, 各子程序的编写说明放在下一章阐述。

路径说明分为三节: 13.1 节叙述 34 条基本路径和便于查找它们的一个对照表; 13.2 节叙述这些路径的变形, 以及当可能使用这些变形时的一些建议; 13.3 节包括使用 EISPACK 的其它说明和例子。为了使基本路径和它们的变形叙述得简单明了, 略去了许多细节 (例如, 非零出错标志的意义和一些参数的说明), 而把它们放在 13.3 节加以叙述。各子程序的细节可在第十四章子程序的编写说明中找到。但是, 我们期望本章所介绍的使用说明对用户正确求解大部分特征值问题来说将是足够的。

对于求解某些基本的特征值问题, 用户所必须知道的路径详细信息还可以减少, 这只要使用适当的驱动子程序就行了。这些驱动子程序通过调用 EISPACK 中其它的子程序构成所需要的路径。驱动子程序的应用范围仅限于求全部特征值和特征向量或只求全部特征值的问题。本程序包所处理的每一类矩阵 (组) 都有一 (或两) 个驱动子程序, 在 34 条基本路径中有 16 条路径使用了它们。关于驱动子程序的调用, 在本章相应路径的讨论中介绍。

13.1 在 EISPACK 中所建议的基本路径

本节叙述如何使用 EISPACK 计算序言中提到的八类矩阵 (组) 的部分或全部特征值、部分或全部特征值与对应的特征向量。对于各类特征值问题, 这里所建议的路径能用最少的存贮提供精确解。在某些情况下, 基本路径的变形 (使用不同的子程序) 可以给出更精确的解, 或者求解更快

些，这些变形在 13.2 节讨论。

为了选择所推荐的路径求解具体特征值问题，可查阅本节末尾的表 1。在查表时，首先要确定所处理的矩阵（组）属于表中所列的八类矩阵（组）的哪一类。一般地说，应用矩阵的特殊性质，把它们划归针对性强的类型中时，计算会更精确和更有效。如果一个实矩阵具有对称性，将它划归实对称矩阵比划归实一般矩阵或复矩阵更好些。另一方面，某些特殊性质却不能利用。例如，一个复矩阵，即使是对称的（不是埃尔米特阵）也必须划归复一般矩阵。

其次，确定所求的特征值和特征向量的组合与表 1 左边列出的问题类别中哪一类最密切相符。表中所列的数字指出对用户问题建议的路径所在的那个小节（该路径有变形时，则在那一小节末尾指出应参考的 13.2 节的相应部分）。例如，有一个满（非三对角）实对称矩阵，要求其全部特征值和对应的特征向量时，表 1 便指出查阅 13.1.11 节。

表 1 所指出的每个小节，直接提供了正确使用路径所需要的说明。这些说明首先陈述问题并标识主要的输入和输出参数，然后给出组成路径的子程序调用语句和辅助语句。接着叙述出现在该路径中的其它参数（如果有的话），给出在该路径中出现的数组维数信息和所用的数组存贮总量。最后，列出所要参考的 13.2 节中相应的部分。

为了将使用说明介绍得更清楚，在这些小节中，我们使用了几个约定。第一个约定是关于参数的类型。除了整数组 SELECT（和 13.2.4 节中的 TYPE）外，所有的参数都具有 FORTRAN 隐含的类型说明：即以 I、J、K、L、M 或 N 开头的是整型，其它为实型。

第二个约定是关于那些仅将中间结果从一个子程序传递到另一个子程序时所用到的参数。这些参数的作用不在小节中叙述，因为，对于正确地执行一条路径而言，只要知道它们的类型和维数（包括数组元素数目）就够了。为了便于识别这些参数，我们使用系统的命名法，它们的名字由指出类型（实型用F，整型用I）、维数（变量用S，向量用V，矩阵用M）的字母和一个序号组成。例如，FV1就表示出现在给定路径中的第一个一维实数组中间工作单元。

第三个约定指出在一条路径中对数组参数如何进行维数说明。数组参数占用三个变量nm、mm和mb。在维数说明语句中，它们必须用FORTRAN整常数代替。参数NM、MM和MB将这些常数值传递到EISPACK子程序中的数组说明语句，因此，NM、MM和MB必须分别置为nm、mm和mb所用到的那个常数。极其重要的是，无论什么时候，只要一条路径被执行，N和M（如果用到的话）都要满足 $N \leq nm$ 和 $M \leq mm$ ，否则会出现意想不到的错误。

我们举例说明nm和mm的用途。假设所用的是13.1.13节中叙述的路径，仅仅考虑参数A、W和Z时，维数信息说明为A(nm, nm)、W(mm)和Z(nm, mm)。如果用这条路径求解的最大矩阵是50阶的，并且不希望计算多于10个数目的特征值和特征向量，则

$$NM=50$$

$$MM=10$$

数组说明语句为

```
DIMENSION A(50, 50), W(10), Z(50, 10)
```

当然，为了执行这条路径，应当把N置为真实的阶，并

且必须满足 $N \leq 50$ 。类似地，应当把 M 置为（通过本路径）所要求的特征值数目，并且必须满足 $M \leq 10$ 。

一条路径所用的数组存贮总量是按阶参数 N 和 M 而不是 nm 和 mm 计算的。这样，对于给定阶的矩阵， N 和 M 确定了求解相应特征值问题所需要的最小存贮。

第四个约定是关于只计算特征值时调用驱动子程序的问题。在这种情况下，对于特征向量矩阵 Z （或 ZR ， ZI ）的参数虽然要求，但在子程序中并不涉及。为了正确调用起见，在调用语句的对应位置，就用已有的其它体积相等的参数代替（不可能如此作的驱动子程序另当别论）。

最后一个约定是关于路径中出错的处理。EISPACK 某些子程序也许不能令人满意地完成它们的计算步骤，在这种情况下，出错参数（一般用 $IERR$ 表示）被置为表示出错类型的非零值。在许多情况下，一个错误出现之后，必须中断路径的继续执行。因此，在每条路径中对于每个可能置参数 $IERR$ 的子程序调用之后，要嵌入一个到语句标号为 99999 的条件转向语句。标号为 99999 语句的相应工作是打印 $IERR$ 和停机。在 EISPACK 中可能出现的各种错误，产生出 $IERR$ 的一个值。我们已经将 $IERR$ 的可能值和它们的含义，以及是否有部分结果已正确计算了的有关说明，摘录在 13.3.8 节。关于 $IERR$ 更详细的内容可以查阅各个子程序相应的编写说明。

综上所述，为了选择所建议的 EISPACK 路径求解用户的特征值问题，首先要查阅表 1，然后根据以上约定阅读表中所指出的那一小节。注意，为了保证正确地实现该路径，除提供输入数据和结果存贮的数组之外，用户必须做到：提

表 1 EISPACK 中所建议的基本路径索引

问题类别 矩阵类别	复 一般	复 埃尔蒙特	实 一	实 对	实 对	实 对称	实 对称三对角	实 特殊三对角	实 对称带型	实对称矩阵组①	
										$AX = \lambda BX$	$ABX = \lambda X$
全部特征值和对应的 特征向量	13.1.1	13.1.4	13.1.8	13.1.11	13.1.15	13.1.19	13.1.23	13.1.27	13.1.31		
	13.1.2	13.1.5	13.1.9	13.1.12	13.1.16	13.1.20	13.1.24	13.1.28	13.1.32		
全部特征值											
全部特征值和选定的 特征向量	13.1.3	—	13.1.10	—	—	—	—	—	—		
部分特征值和对应的 特征向量	—	13.1.6	—	13.1.13	13.1.17	13.1.21	13.1.25	13.1.29	13.1.33		
部分特征值	—	13.1.7	—	13.1.14	13.1.18	13.1.22	13.1.26	13.1.30	13.1.34		

● “实对称矩阵组一栏中, A 是对称阵, B 是对称正定阵, 它们所对应的两类广义特征值问题为 $AX = \lambda BX$ 和 $ABX = \lambda X$ 。”

供存贮中间结果和临时结果的数组；按正确的顺序调用该路径中的子程序；准确地将参数按规定从一个调用语句传送到下一个调用语句，并且完成一定的辅助性措施。此外，最好仔细阅读所用路径中包含的子程序编写说明，以便在使用一条路径之前，做到对该路径的子程序有一定的了解。

13.1.1 复一般矩阵的全部特征值和对应的特征向量

为了求 N 阶复一般矩阵 (AR, AI) 的全部特征值 (WR, WI) 和对应的特征向量 (ZR, ZI) ，所建议的 EISPACK 路径是

```
CALL CBAL(NM, N, AR, AI, IS1, IS2, FV1)
CALL CORTH(NM, N, IS1, IS2, AR, AI, FV2, FV3)
CALL COMQR2(NM, N, IS1, IS2, FV2, FV3, AR, AI, WR, WI, ZR,
↑ ZI, IERR)
IF(IERR·NE·0) GO TO 99999
CALL CBABK2(NM, N, IS1, IS2, FV1, N, ZR, ZI)
```

或者，使用驱动子程序 CG

```
CALL CG(NM, N, AR, AI, WR, WI, 1, ZR, ZI, FV1, FV2, FV3,
↑ IERR)
IF(IERR·NE·0) GO TO 99999
```

本路径破坏 AR 和 AI。

各个数组的相应维数是：AR(nm, nm), AI(nm, nm), WR(nm), WI(nm), ZR(nm, nm), ZI(nm, nm), FV1(nm), FV2(nm) 和 FV3(nm)。

实现本路径所需要的数组存贮为 $4N^2 + 5N$ 个全字长单元。

本路径的几个变形是：或者略去对输入矩阵的平衡；或