

FORTRAN

算法汇编

第一分册

刘德贵 费景高 编
于泳江 李广元

国防工业出版社出版

FORTRAN 算 法 汇 编

第 一 分 册

刘德贵 费景高 编
于泳江 李广元

国防工业出版社

内 容 简 介

FORTRAN 算法汇编共分三个分册。第一、二分册一般是供科学和工程计算的常用算法,也包括近年来出现的新算法;第三分册是一个求矩阵特征值和特征向量的程序包。

本书为第一分册,分六章。第一章,复数运算;第二章,插值和数值微商;第三章,数值积分;第四章,线性代数计算(1);第五章,代数方程与超越方程;第六章,常微分方程组的数值积分。书中编写的程序,均以过程(Procedure)的形式出现。这里的过程是子程序段和函数段的统称。

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

第一分册

刘德贵 费景高 于泳江 李广元 编

国防工业出版社出版

本书由北京发行所发行 各地新华书店经营
上海商务印刷厂排版 国防工业出版社印刷厂印装

787×1092 1/32 印张 15 3/8 337 千字

1980年3月第一版 1984年6月第二次印刷 印数: 20,001—33,000 册

统一书号: 15034·1851 定价: 1.60 元

序 言

电子计算机在科学研究、国民经济和国防建设等各个方面的应用越来越广，正引起这些方面革命性的变化。计算机的科学研究水平、生产规模、使用的广度和深度是当前一个国家现代化水平的显著标志。算法语言是计算机应用推广的有利工具。有了算法语言就不再需要经过专业程序人员编写机器语言程序，数值计算工作者、科学研究人员、工程技术人员和管理人员可以直接用算法语言编写程序，利用计算机解算自己在科学研究和工程设计中所遇到的问题。

在计算机问世以后的十年左右的时间中，出现了FORTRAN(FORMula TRANslator, 即公式翻译)语言，它和以后出现的其他语言使计算机的应用发展到了一个新的阶段。FORTRAN语言在科学和工程计算的应用过程中积累了许多算法，有通用的算法，也有针对解决某一类专门问题而编制的程序包。显然，把这样的算法和程序包选择最常用的汇编成册，不仅可以避免重复性劳动，提高计算机的使用效率，而且可以缩短计算工作的周期，有利于计算机的推广使用。

本算法汇编的第一、二分册，一般是供科学和工程计算的常用算法，也包括近年来出现的新算法；第三分册是一个求矩阵特征值和特征向量的程序包。

本算法汇编中编写的程序，均以过程(Procedure)的形式出现。这里的过程是子程序段和函数段的统称。编写过程所

HT 84/15 01

遵循的原则,可以概要地叙述如下:

1. 为了能在更多的计算机上使用本汇编中的过程,除了常数表多的过程使用了DATA语句外,均按基本FORTRAN语言编写。任何一台计算机只要配有基本FORTRAN语言或者标准FORTRAN语言的编译程序,均可使用。这就为充分使用本汇编诸过程提供了最大可能性。

DATA语句仅在个别过程中使用,它的形式是

DATA $K_1/d_1/$, $K_2/d_2/$, ..., $K_n/d_n/$

其中 $K_i (i=1, 2, \dots, n)$ 可以是变量名,也可以是数组名或数组元素名; $d_i (i=1, 2, \dots, n)$ 可以是常数,也可以是带符号的常数组成的表。

2. 输入、输出语句,由于它们依赖于计算机输入、输出设备,为了避免用这些语句带来对程序的改动,所以本汇编中的过程均不使用。

3. 凡是有精确度要求的过程,例如给定一定精确度求积分值、迭代法求根等,都有判定程序执行情况的哑元作为标志。从该过程返回后,检查标志可以判别是结果满足精度返回的,还是结果不满足精度而“强迫”返回的。

本汇编的过程的说明是按照统一格式编写的,但因第一、二分册主要是常用算法,第三分册是程序包,这两者特点不同,完全统一有困难。因此,第一、二分册和第三分册编写格式将分别予以说明。

第一、二分册的编写格式如下:

一、功能

简单地叙述该过程的用途和适用范围。

二、使用说明

这是过程说明的重点,力图对于如何使用该过程有一个

完整而准确的叙述,让使用者清楚怎样用。共分三项,分别介绍如下:

1. 子程序语句(或函数语句)

列出子程序语句(或函数语句)。由此可知该过程是子程序段还是函数段,从而确定调用形式。

2. 哑元说明

逐个对该过程的哑元作说明。说明的内容包括:

(1) 类型 指出是整型还是实型;是变量还是数组。若是数组,还需指出其体积的大小。

(2) 参数形式 是该过程的输入参数还是输出参数。输入参数是指调用前需对其相应的实元赋值的参数,输出参数是指调用该过程时给相应实元赋值的参数。

(3) 意义 指出在求解的数学问题中所代表的量值的意义或者在程序控制中所起的作用。例如变步长辛普生方法求积过程有关哑元的意义,是指积分下限、积分上限、积分精确度、满足精度与否的标志、控制程序走向的信息、积分结果等。

3. 所调用的过程

即调用该过程时,还需要那些过程,并指出它们是自带的还是由使用者自编的。对于要求使用者自编的过程,对其哑元均需加以说明。

三、方法简介

这一部分主要是简要叙述过程所使用的计算方法或者计算步骤以及过程中所做的某些处理,并列出有关的计算公式。我们的叙述力求简明,不去追求数学上的完整性。对于想进一步了解所用的计算方法的读者,可在给出的参考资料中找到它们的出处。

四、程序

给出用 FORTRAN 语言编写的, 以过程的形式出现的程序。为了方便读者阅读程序, 个别程序给出了汉语注释。在阅读程序时还会看到左方括号“[”和箭头号“↑”, 它们分别表示注解行号和续行号。由于考虑到纸带输入方式和穿孔设备所限, 在基本 FORTRAN 的字符集中增加了这两个字符。但这不影响本汇编中诸过程的通用性, 因为汉语注解行, 仅是帮助阅读程序之用, 穿孔时完全可以删除; 续行号“↑”, 则可根据各编译程序的规定很容易地做相应的修改。由于本汇编版面每行字符数的限制, 程序中有不少地方多用了续行, 读者引用时可按标准 FORTRAN 格式书写。

五、程序附注

指出编制程序和调用该过程时应注意的事项。诸如数据附表的给出, 某种使用范围的特殊说明等等。

六、例题

给出具体的求解例子、计算结果和计算程序, 说明怎样使用该过程。所选的例题不一定都具有典型性。编写例题的出发点是帮助读者理解该过程的使用方法。例题中的计算程序, 是根据内部资料“DJS-6, DJS-8 FORTRAN 语言介绍及操作说明”编写的。读者可以看到例题中的计算程序中有混合运算、变量和数组元素的多重赋值等。

参考资料一项, 不作一个统一的项目列出。因为许多过程中所用的方法均已为读者所熟知, 因而其相应的说明中则不列此项。

本汇编在各章的前面都有一段简要说明。它简短地介绍该章的算法, 并对它们做扼要的评述, 指出该章的算法在哪一类问题中具有主要的应用, 而在哪些情形(如果有的话)下最

好避免使用。如果读者注意这些,可以预料,为了求解某类问题寻找一个比较合适的方法,将会得到一些启发。应当指出,由于许多算法仍在发展中,无论是理论问题还是算法本身的问题都没有完全得到解决(例如刚性常微分方程初值问题的求解)。因此,各章对具体算法的评述也将随着该算法的发展而发展。

虽然所有程序都在 DJS-6/8 机上进行了验算。但由于水平所限,书中难免有错误和问题,请读者批评指正。

在本汇编的编写过程中,袁兆鼎同志具体地指导了我们的工作,提出了许多宝贵意见,王典翰同志,阅读了全书,提出了许多有益的意见,在此一并表示衷心感谢。

编 者

目 录

第一章 复数运算	1
1.1 复数的除法	1
1.2 e^z (z 为复数)	3
1.3 复变量自然对数	4
1.4 复数的模	7
1.5 复数的平方根	8
1.6 复变量的三角函数	11
1.7 复变量的幂指函数	15
第二章 插值和数值微商	18
2.1 一元全区间不等距插值	19
2.2 一元三点等距插值、微商	21
2.3 一元三点不等距插值	24
2.4 一元三点分段等距插值、微商	27
2.5 一元三点不等距分段插值	30
2.6 一元三点不等距成组插值	33
2.7 埃特金插值	36
2.8 埃尔密特插值	39
2.9 有理函数插值	41
2.10 分段有理插值	47
2.11 第一种边界条件三次样条函数插值、微商与积分	51
2.12 第二种边界条件三次样条函数插值、微商与积分	57
2.13 第三种边界条件三次样条函数插值、微商与积分	63
2.14 二元等距抛-线、抛-抛插值	68
2.15 二元不等距抛-线、抛-抛插值	71
2.16 二元分段等距抛-线插值	74
2.17 二元分段等距抛-抛插值	78

2.18	二元不等距分段线-线、抛-线和抛-抛插值	81
2.19	二元三点不等距成组插值	85
2.20	二维光滑插值	89
第三章	数值积分	99
3.1	定步长辛普生方法求积	100
3.2	变步长辛普生方法求积	103
3.3	辛普生方法成组求积	106
3.4	变步长辛普生方法求二重积分	110
3.5	龙贝格方法求积(1)	115
3.6	龙贝格方法求积(2)	119
3.7	改进的龙贝格方法求积	123
3.8	高斯方法求积(1)	128
3.9	高斯方法求积(2)	130
3.10	切比雪夫方法求积(1)	134
3.11	切比雪夫方法求积(2)	137
3.12	傅里叶积分的计算	141
3.13	自适应辛普生方法求积	152
3.14	高斯法求多重积分	157
第四章	线性代数计算(1)	163
4.1	高斯消去法	164
4.2	列主元高斯消去法	169
4.3	列主元高斯消去法(矩阵按行存放)	173
4.4	全主元高斯消去法	176
4.5	列主元高斯-约当消去法	179
4.6	克劳特分解法	183
4.7	求线性对称方程组解的分解法(1)	187
4.8	求线性对称方程组解的分解法(2)	192
4.9	正定对称方程组的平方根法(1)	196
4.10	正定对称方程组的平方根法(2)	200
4.11	对称带型方程组的解法	204
4.12	求解一般线性带型方程组	209

4.13	大型对称变带宽方程组的解法	214
4.14	大型稀疏方程组的解法	218
4.15	求复系数线性方程组的解	223
4.16	求病态线性方程组的解	226
4.17	共轭斜量法求线性代数方程组的解	232
4.18	赛德尔法求线性代数方程组的解	238
4.19	高斯消去法求行列式值	241
4.20	求对称正定矩阵行列式的值	244
4.21	行主元消去法求逆矩阵及行列式值	247
4.22	全主元高斯-约当消去法求逆矩阵	251
4.23	对称正定矩阵的求逆	255
4.24	高斯-约当消去法解线性代数方程组, 求系数矩阵的逆及 行列式值	260
4.25	全主元高斯-约当消去法解线性代数方程组, 求逆矩阵和 行列式值	265
4.26	西尔曼-莫里生公式矩阵求逆方法	270
4.27	叶尔绍夫法求逆矩阵	274
4.28	求对称带型矩阵逆的因子形式	277
4.29	求对称带型矩阵的逆与列向量的乘积	284
4.30	求行向量与对称带型矩阵的逆的乘积	287
第五章	代数方程与超越方程	291
5.1	直接公式解法	293
5.2	贝努利法	305
5.3	牛顿-麦奇利法	309
5.4	林士谔-赵访熊法	313
5.5	牛顿-下山法	320
5.6	插值法	326
5.7	牛顿-下山法(复系数)	334
5.8	插值法(复系数)	338
5.9	二分法	343
5.10	弦截法	347
5.11	优选法	350

5.12	插值法 I	354
5.13	插值法 II	358
5.14	梯度法	364
5.15	线性插值法	368
5.16	拟牛顿法	373
5.17	布罗伊登法	379
第六章	常微分方程组的数值积分	386
6.1	定步长龙格-库塔方法 (1)	388
6.2	定步长龙格-库塔方法 (2)	392
6.3	定步长龙格-库塔方法 (3)	396
6.4	变步长龙格-库塔方法	400
6.5	基尔方法	407
6.6	定步长五阶单步方法	414
6.7	默森单步方法	418
6.8	阿当姆斯预估-校正方法	425
6.9	定步长哈明方法	430
6.10	双边法	434
6.11	外插法	438
6.12	特雷纳方法	450
6.13	吉尔方法	457

第一章 复数运算[⊖]

本章包括一些常用的计算复变量初等函数的程序，可以作为不具有复数运算功能的编译系统的一种补充。

1.1 复数的除法

一 功能

本程序用以求两个复数 $a+ib$ 和 $c+id$ 的商。

二 使用说明

1 子程序语句

SUBROUTINE CDIV(A, B, C, D, E, F, G)

2 哑元说明

A、B 实变量，输入参数，被除数的实部和虚部。

C、D 实变量，输入参数，除数的实部和虚部。

E、F 实变量，输出参数，商的实部和虚部。

G 实变量，输出参数。当 $G \neq 0.0$ 时，表示除数的实部和虚部均为零，不进行运算。

三 方法简介

两复数的商

$$\frac{a+ib}{c+id} = \frac{(ac+bd) + i(bc-ad)}{c^2+d^2}$$

⊖ 本章内容均参考中国科学院沈阳计算技术研究所等合编的“电子计算机常用算法”，科学出版社，1976。

$$= \begin{cases} \frac{\left(a + b \cdot \frac{d}{c}\right) + i\left(b - a \cdot \frac{d}{c}\right)}{c + d \cdot \frac{d}{c}} & (\text{当 } |c| \geq |d|) \\ \frac{\left(a \cdot \frac{c}{d} + b\right) + i\left(b \cdot \frac{c}{d} - a\right)}{c \cdot \frac{c}{d} + d} & (\text{当 } |c| < |d|) \end{cases}$$

利用上述公式的目的是防止在直接求 c^2 或 d^2 时出现溢出。

四 程序

```
SUBROUTINE CDIV(A, B, C, D, E, F, G)
  G=0.0
  IF(C) 30, 10, 30
10 IF(D) 30, 20, 30
20 G=0.777777777E71
  GO TO 50
30 IF(ABS(C)·GE·ABS(D))GO TO 40
  R=C/D
  H=R·C+D
  E=(R·A+B)/H
  F=(R·B-A)/H
  GO TO 50
40 R=D/C
  H=R·D+C
  E=(A+R·B)/H
  F=(B-R·A)/H
50 RETURN
END
```

五 例题

计算

$$z = \frac{1.5 \times 10^{10} + 10^{20}i}{2 \times 10^{38} + 10^{30}i}$$

计算结果 $z = 0.2575 \times 10^{-28} + 0.5 \times 10^{-18}i$

程序

```

PAGE 101
SUBROUTINE CDIV(A, B, C, D, E, F, G)
    : 本子程序段体部分
END
MASTER AB
A=1.5E10
B=1.0E20
C=2.0E38
D=1.0E30
CALL CDIV(A, B, C, D, E, F, G)
WRITE(4, 10)A, B, C, D, E, F, G
10 FORMAT (3HAAA, 7E17.10)
STOP
END
FINISH

```

1.2 e^z (z 为复数)

一 功能

本程序用以计算 e^z , 其中 $z = a + ib$ 。

二 使用说明

1 子程序语句

```
SUBROUTINE EXPG(A, B, C, D)
```

2 哑元说明

A、B 实变量, 输入参数, 自变量的实部和虚部。

C、D 实变量, 输出参数, 函数值的实部和虚部。

三 方法简介

根据欧拉公式, $e^z = e^{a+ib} = e^a \cos b + ie^a \sin b$ 。

四 程序

```
SUBROUTINE EXPG(A, B, C, D)
```

```

C=EXP(A)
D=C*SIN(B)
C=C*COS(B)
RETURN
END

```

五 例题

计算 $z = e^{1+\frac{\pi}{4}i}$

计算结果 $z = 1.922115512 + 1.922115512i$

程序

```

PAGE 103
SUBROUTINE EXPC(A, B, C, D)
    : 本子程序段体部分
END
MASTER AE
A=1.0
B=0.7853981634
CALL EXPC(A, B, C, D)
WRITE (4, 20)A, B, C, D
20 FORMAT (2HEE, 4E17.10)
STOP
END
FINISH

```

1.3 复变量自然对数

一 功能

本程序用以计算复变量 $z = a + ib$ 的自然对数 $\ln z$, 其中 $z = a + ib \neq 0$ 。

二 使用说明

1 子程序语句

```
SUBROUTINE LNC(A, B, C, D, G)
```

2 哑元说明

A、B 实变量, 输入参数, 自变量 z 的实部及虚部。

C、D 实变量, 输出参数, 自然对数值的实部及虚部。

G 实变量, 输出参数, 标记。当 $G \neq 0.0$ 时, 表示自变量为 0, 不进行运算。

三 方法简介

$$\ln z = \ln |z| e^{i \arg z} = \ln |z| + i \arg z,$$

而

$$\ln |z| = \ln \sqrt{a^2 + b^2}$$

$$= \frac{1}{2} \ln(a^2 + b^2)$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\ln(|2a| + |2b|) \right. \\ \quad \left. + \ln \left(\frac{8a^2}{|2a| + |2b|} + \frac{8b^2}{|2a| + |2b|} \right) \right] \\ \quad - \ln \sqrt{8} \quad (|a| < 1, |b| < 1) \\ \\ \frac{1}{2} \left[\ln \left(\frac{|a| + |b|}{4} \right) \right. \\ \quad \left. + \ln \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{\left(\frac{a}{2}\right)^2}{\frac{|a|}{4} + \frac{|b|}{4}} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\left(\frac{b}{2}\right)^2}{\frac{|a|}{4} + \frac{|b|}{4}} \right) \right] \\ \quad + \ln \sqrt{8} \quad (|a| \geq 1, |b| \geq 1) \end{cases}$$

$$\arg z = \begin{cases} \arctan \frac{b}{a} + \begin{cases} 0 & (a > 0) \\ \pi & (a < 0, b \geq 0) \quad (|a| \geq |b|, a \neq 0) \\ -\pi & (a < 0, b < 0) \end{cases} \\ \\ -\arctan \frac{a}{b} + \operatorname{sign}(b) \cdot \frac{\pi}{2} \quad (|a| < |b| \text{ 或 } a = 0) \end{cases}$$