

常用数值算法丛书

# Visual Fortran 常用数值算法集

何光渝 高永利 编著



A0970594

科学出版社

2002

## 内 容 简 介

本书共有数值计算中常用的 Visual Fortran 子过程近 200 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、两点边值问题的解法和解偏微分方程组. 每一个子程序都包括功能、方法、使用说明、子程序和例子五部分. 本书的所有子过程都在 Visual Fortran 5.0 版本上进行过验证, 程序都能正确运行. 同时配书发行光盘, 包括所有子过程、验证过程及所有验证过程的 Visual Fortran 工程项目.

本书可供大专院校师生和科研院所、工矿企业的工程技术人员使用.

### 图书在版编目(CIP)数据

Visual Fortran 常用数值算法集/何光渝, 高永利编著. —北京: 科学出版社, 2002

(常用数值算法丛书)

ISBN 7-03-010217-7

I. V... II. ①何... ②高... III. 数值计算—应用软件, Visual Fortran IV. 0245

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 12623 号

**科 学 出 版 社 出 版**

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

**新 蕾 印 刷 厂 印 刷**

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2002 年 4 月 第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2002 年 4 月 第一次印刷 印张: 44

印数: 1—4 000 字数: 816 000

**定价: 65.00 元(含光盘)**

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈环伟〉)

## 序

在计算机技术迅猛发展的今天,面向对象技术日益成熟和完善,越来越多的非计算机专业的科研人员和工程技术人员,在各自的专业领域中采用各种类型的面向对象程序设计语言,设计出功能强大、实用的工程设计专业软件.由于采用了面向对象技术中的编程机制和新颖、易用的可视化工具,此类软件简便、实用,易于推广,因而在科研单位、厂矿企业的科研开发和生产管理中发挥了重要作用.

科学研究和工程技术中的应用软件的编制需要较深的专业知识和丰富的实践经验,一般情况下只能由专业技术人员自己动手研制开发.在科学研究和工程技术的专业应用软件的开发中,数值计算是必不可少的,数值计算中所使用的计算方法及其程序(简称算法)一方面以计算数学为理论依据,另一方面以计算机作计算工具.近些年来,计算机专业科研人员大力研究、发明了各种新的算法,并不断地完善和标准化.新的算法一经提出,并证明为有效后就被大量、广泛、重复地使用.为了缩短应用软件的编制周期,减少重复劳动,发展计算方法,我们组织编写了这套丛书.

编写本套丛书的指导思想是:以目前最常用的面向对象技术的各类软件程序语言为平台,简略介绍算法的数学理论,偏重于程序;尽量汇编新的算法,也选编了有效的经典算法;对每一个算法都必须编制验证程序,并建立工程.

“常用数值算法丛书”将为千千万万非计算机专业的工程技术人员架起一座方便快捷的桥梁,带领读者轻松而快速地步入计算机应用的最新领域.

“常用数值算法丛书”是独树一帜的,它几乎包括了当前流行的所有面向对象技术软件,从理论到编程,从说明到实际使用,都编入丛书.随着计算方法的不断发展,配合最新、最流行、最实用的软件,我们将不断推出新书以奉献给广大的读者.

“常用数值算法丛书”力求把最实用、最重要的知识讲清楚、讲透彻,引导读者轻松入门,迅速应用.丛书中所有的算法都在计算机上验证通过,并随书发行光盘,省去了读者录入程序的繁琐,达到事半功倍的效果.

愿“常用数值算法丛书”能成为广大读者的有力工具,并衷心地希望广大读者对本丛书的不足或缺点提出批评,对今后的发展提出宝贵意见.

# 前 言

Fortran 语言是第一个世界通用的计算机高级程序设计语言,由于它非常接近于自然语言(英语)和数学表达式,因而问世 40 余年来,一直被广泛应用,特别是在科学和工程计算领域,始终占据着主要地位.多年来,工程界各行业的技术人员编写出了大量实用的算法和工程应用软件.有的工程商业软件多达十多万行,至今仍在应用.随着计算机技术的迅速发展,Windows 已经逐渐取代了 DOS 而成为新一代操作系统.为了发挥 Fortran 在科学计算领域的优势,人们开发出像 Visual C++(以下简称 VC)甚至 Visual Basic(以下称简 VB)一样的基于 Windows 的应用程序.1997 年 Digital 公司正式推出 Digital Visual Fortran 5.0.显然,这为工程技术界进行科学计算和编写面向对象的工程实用软件的用户提供了极大的方便.熟悉 VB 或 VC 的读者可以很容易地掌握 Visual Fortran 的使用,进一步开发出自己专业领域的 Windows 下的界面友好的工程应用软件.

Visual Fortran 支持 Fortran 90(同时也支持 Fortran 77).Fortran 90 对以往的 Fortran 语言标准作了大量的改动,使之成为一种功能强大、具有现代语言特征的计算机语言,受到越来越多的程序开发人员的欢迎.本书所介绍的常用数值算法是利用 Fortran 90 语言编写的,可以使人们在制作应用程序中减少不必要的重复劳动,节约了时间,大大提高了计算机使用效率.

本书共有数值计算中常用的使用 Fortran 90 语言编写的子过程近 200 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、数据的统计描述、解常微分方程组、两点边值问题的解法和解偏微分方程组.每一个子过程都包括功能、方法、使用说明、子过程和例子五部分.每种算法都给出了例子和验证程序,帮助读者了解如何调用子过程,怎样输入数据,得到计算结果.本书的所有子过程都在 Visual Fortran 5.0 版本上进行了验证,准确无误.

本书配有光盘,内容包括书中全部子过程、验证程序及每种数值算法的 Visual Fortran 工程项目.一旦查阅书中的子过程,遇到困难,请直接调用光盘中的工程,仔细浏览即能解决问题,同时也省去读者敲击程序的繁琐.

由于编者水平有限,缺点错误在所难免,恳请广大读者批评指正.

# 目 录

## 序

## 前言

|                                     |            |
|-------------------------------------|------------|
| <b>第 1 章 线性代数方程组的解法</b> .....       | <b>1</b>   |
| 1.1 全主元高斯-约当(Gauss-Jordan)消去法 ..... | 2          |
| 1.2 $LU$ 分解法 .....                  | 7          |
| 1.3 追赶法.....                        | 13         |
| 1.4 五对角线性方程组解法.....                 | 16         |
| 1.5 线性方程组解的迭代改善.....                | 21         |
| 1.6 范德蒙(Vandermonde)方程组解法.....      | 24         |
| 1.7 托伯利兹(Toeplitz)方程组解法 .....       | 28         |
| 1.8 奇异值分解.....                      | 34         |
| 1.9 线性方程组的共轭梯度法.....                | 46         |
| 1.10 对称方程组的乔列斯基(Cholesky)分解法 .....  | 52         |
| 1.11 矩阵的 $QR$ 分解 .....              | 56         |
| 1.12 松弛迭代法 .....                    | 62         |
| <b>第 2 章 插值</b> .....               | <b>66</b>  |
| 2.1 拉格朗日插值.....                     | 67         |
| 2.2 有理函数插值.....                     | 71         |
| 2.3 三次样条插值.....                     | 75         |
| 2.4 有序表的检索法.....                    | 82         |
| 2.5 插值多项式.....                      | 90         |
| 2.6 二元拉格朗日插值.....                   | 98         |
| 2.7 双三次样条插值 .....                   | 101        |
| <b>第 3 章 数值积分</b> .....             | <b>107</b> |
| 3.1 梯形求积法 .....                     | 108        |
| 3.2 辛普森(Simpson)求积法 .....           | 112        |
| 3.3 龙贝格(Romberg)求积法 .....           | 115        |
| 3.4 反常积分 .....                      | 118        |
| 3.5 高斯(Gauss)求积法 .....              | 129        |

---

|            |                                       |            |
|------------|---------------------------------------|------------|
| 3.6        | 三重积分 .....                            | 134        |
| <b>第4章</b> | <b>特殊函数 .....</b>                     | <b>140</b> |
| 4.1        | $\Gamma$ 函数、贝塔函数、阶乘及二项式系数 .....       | 140        |
| 4.2        | 不完全 $\Gamma$ 函数、误差函数 .....            | 150        |
| 4.3        | 不完全贝塔函数 .....                         | 165        |
| 4.4        | 零阶、一阶和任意整数阶的第一、二类贝塞尔函数 .....          | 170        |
| 4.5        | 零阶、一阶和任意整数阶的第一、二类变形贝塞尔函数 .....        | 186        |
| 4.6        | 分数阶第一类贝塞尔函数和变形贝塞尔函数 .....             | 201        |
| 4.7        | 指数积分和定指数积分 .....                      | 211        |
| 4.8        | 连带勒让德函数 .....                         | 218        |
|            | 附录 .....                              | 222        |
| <b>第5章</b> | <b>函数逼近 .....</b>                     | <b>237</b> |
| 5.1        | 级数求和 .....                            | 237        |
| 5.2        | 多项式和有理函数 .....                        | 241        |
| 5.3        | 切比雪夫逼近 .....                          | 247        |
| 5.4        | 积分和导数的切比雪夫逼近 .....                    | 254        |
| 5.5        | 用切比雪夫逼近求函数的多项式逼近 .....                | 260        |
| <b>第6章</b> | <b>随机数 .....</b>                      | <b>267</b> |
| 6.1        | 均匀分布随机数 .....                         | 267        |
| 6.2        | 变换方法——指数分布和正态分布随机数 .....              | 279        |
| 6.3        | 舍选法—— $\Gamma$ 分布、泊松分布和二项式分布随机数 ..... | 285        |
| 6.4        | 随机位的产生 .....                          | 297        |
| 6.5        | 蒙特卡罗积分法 .....                         | 304        |
| <b>第7章</b> | <b>排序 .....</b>                       | <b>307</b> |
| 7.1        | 直接插入法和 Shell 方法 .....                 | 307        |
| 7.2        | 堆排序 .....                             | 315        |
| 7.3        | 索引表和等级表 .....                         | 322        |
| 7.4        | 快速排序 .....                            | 331        |
| 7.5        | 等价类的确定 .....                          | 335        |
|            | 附录 .....                              | 341        |
| <b>第8章</b> | <b>特征值问题 .....</b>                    | <b>342</b> |
| 8.1        | 对称矩阵的雅可比变换 .....                      | 343        |
| 8.2        | 变实对称矩阵为三对角对称矩阵 .....                  | 352        |
| 8.3        | 三对角矩阵的特征值和特征向量 .....                  | 357        |

|               |                                 |            |
|---------------|---------------------------------|------------|
| 8.4           | 变一般矩阵为赫申伯格矩阵 .....              | 363        |
| 8.5           | 实赫申伯格矩阵的 $QR$ 算法 .....          | 371        |
| <b>第 9 章</b>  | <b>数据拟合 .....</b>               | <b>379</b> |
| 9.1           | 直线拟合 .....                      | 379        |
| 9.2           | 线性最小二乘法 .....                   | 384        |
| 9.3           | 非线性最小二乘法 .....                  | 405        |
| 9.4           | 绝对值偏差最小的直线拟合 .....              | 417        |
| <b>第 10 章</b> | <b>方程求根和非线性方程组的解法 .....</b>     | <b>423</b> |
| 10.1          | 图解法 .....                       | 423        |
| 10.2          | 逐步扫描法和二分法 .....                 | 426        |
| 10.3          | 割线法和试位法 .....                   | 434        |
| 10.4          | 布伦特(Brent)方法 .....              | 440        |
| 10.5          | 牛顿-拉斐森(Newton-Raphson)法 .....   | 444        |
| 10.6          | 求复系数多项式根的拉盖尔(Laguerre)方法 .....  | 450        |
| 10.7          | 求实系数多项式根的贝尔斯托(Bairstou)方法 ..... | 458        |
| 10.8          | 非线性方程组的牛顿-拉斐森方法 .....           | 462        |
| <b>第 11 章</b> | <b>函数的极值和最优化 .....</b>          | <b>468</b> |
| 11.1          | 黄金分割搜索法 .....                   | 468        |
| 11.2          | 不用导数的布伦特(Brent)法 .....          | 476        |
| 11.3          | 用导数的布伦特(Brent)法 .....           | 482        |
| 11.4          | 多元函数的下山单纯形法 .....               | 489        |
| 11.5          | 多元函数的包维尔(Powell)法 .....         | 495        |
| 11.6          | 多元函数的共轭梯度法 .....                | 503        |
| 11.7          | 多元函数的变尺度法 .....                 | 508        |
| 11.8          | 线性规划的单纯形法 .....                 | 513        |
| <b>第 12 章</b> | <b>傅里叶变换谱方法 .....</b>           | <b>527</b> |
| 12.1          | 复数据快速傅里叶变换算法 .....              | 527        |
| 12.2          | 实数据快速傅里叶变换算法(一) .....           | 536        |
| 12.3          | 实数据快速傅里叶变换算法(二) .....           | 540        |
| 12.4          | 快速正弦变换和余弦变换 .....               | 547        |
| 12.5          | 卷积和逆卷积的快速算法 .....               | 557        |
| 12.6          | 离散相关和自相关的快速算法 .....             | 561        |
| 12.7          | 多维快速傅里叶变换算法 .....               | 565        |
| <b>第 13 章</b> | <b>数据的统计描述 .....</b>            | <b>571</b> |

---

|                   |                                |            |
|-------------------|--------------------------------|------------|
| 13.1              | 分布的矩——均值、平均差、标准差、方差、斜差和峰态····· | 571        |
| 13.2              | 中位数的搜索·····                    | 574        |
| 13.3              | 均值与方差的显著性检验·····               | 579        |
| 13.4              | 分布拟合的 $\chi^2$ 检验·····         | 591        |
| 13.5              | 分布拟合的 K-S 检验法·····             | 597        |
| <b>第 14 章</b>     | <b>解常微分方程组·····</b>            | <b>605</b> |
| 14.1              | 定步长四阶龙格-库塔(Runge-Kutta)法·····  | 605        |
| 14.2              | 自适应变步长的龙格-库塔法·····             | 612        |
| 14.3              | 改进的中点法·····                    | 621        |
| 14.4              | 外推法·····                       | 626        |
| <b>第 15 章</b>     | <b>两点边值问题的解法·····</b>          | <b>640</b> |
| 15.1              | 打靶法(一)·····                    | 640        |
| 15.2              | 打靶法(二)·····                    | 649        |
| 15.3              | 松弛法·····                       | 657        |
| <b>第 16 章</b>     | <b>偏微分方程的解法·····</b>           | <b>679</b> |
| 16.1              | 解边值问题的松弛法·····                 | 679        |
| 16.2              | 交替方向隐式方法(ADI)·····             | 684        |
| <b>参考文献</b> ····· |                                | <b>692</b> |
| <b>编后记</b> ·····  |                                | <b>693</b> |

# 第 1 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子过程,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

高斯-约当全主元消去法(见 1.1 节)具有数值稳定的特点,所给过程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  $n^3/3$ ,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 3 倍,即大约是  $n^3$ . 对于对称矩阵,特别是正定矩阵宜采用乔列斯基分解法(见 1.10 节),它的程序简单,计算量小. $QR$  分解法即正交三角分解法(见 1.11 节),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(见 1.5 节),它是成功地改进解的精度办法之一.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(见 1.8 和 1.9 节).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(见 1.3 节)和五对角矩阵(见 1.4 节)的追赶法、范德蒙矩阵的 G. Rybicki 方法和托伯利兹矩阵的 Rybicki 推广的 Levinson 方法(见 1.6 和 1.7 节). 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(见 1.9 和 1.12 节). 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 16 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效的方法, 它可以精确地诊断问题. 在某些情形下, 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过程 SVBKSB 之前要对奇异值进行剪辑, 请参考 SVBKSB 的验证程序 D1R8. SVD 的用法细节可参考第 9 章.

## 1.1 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  $A[XY]=[BI]$ , 其中  $A$  为  $n \times n$  非奇异矩阵,  $B$  为  $n \times m$  矩阵, 均已知;  $X_{n \times m}, Y_{n \times n}$  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  $A$  变为单位矩阵, 则

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

(2) 算法. 记

$$\mathbf{A}^{(0)} = (\mathbf{a}_{ij}^{(0)}) = \mathbf{A} = (\mathbf{a}_{ij}), \quad \mathbf{b}^{(0)} = \mathbf{b} = (\mathbf{b}_{ij}^{(0)})$$

第  $k$  步的矩阵为  $\mathbf{A}^{(k)} = (\mathbf{a}_{ij}^{(k)})_{n \times n}$ ,  $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_{ij}^{(k)})_{n \times m} (k=1, \dots, n)$ .

第  $k$  步的计算为

① 选主元, 设为  $\mathbf{a}_{i_0 j_0}^{(k-1)}$ .

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

③ 消元过程计算公式:

$$\begin{aligned} p_k &= 1/\mathbf{a}_{j_0 j_0}^{(k-1)} \\ \mathbf{a}_{j_0 j}^{(k)} &= \mathbf{a}_{j_0 j}^{(k-1)} \cdot p_k, & j &= 1, \dots, n \\ \mathbf{b}_{j_0 l}^{(k)} &= \mathbf{b}_{j_0 l}^{(k-1)} \cdot p_k, & l &= 1, \dots, m \\ \mathbf{a}_{ij}^{(k)} &= \mathbf{a}_{ij}^{(k-1)} - \mathbf{a}_{j_0 j}^{(k)} \cdot \mathbf{a}_{ij_0}^{(k-1)}, & j &= 1, \dots, n \\ \mathbf{b}_{il}^{(k)} &= \mathbf{b}_{il}^{(k-1)} - \mathbf{b}_{j_0 l}^{(k)} \cdot \mathbf{a}_{ij_0}^{(k-1)}, & l &= 1, \dots, m \\ i &= 1, \dots, n & i &\neq j_0 \end{aligned}$$

### 3. 使用说明

GAUSSJ (A, N, B)

N 整型变量, 输入参数, 矩阵  $\mathbf{A}$  的阶数

A 实型数组, 输入、输出参数, 输入时按列存放实方阵  $\mathbf{A}$ , 计算结束时输出逆矩阵  $\mathbf{A}^{-1}$

B 实型数组, 输入、输出参数, 输入时按列存放实方阵  $\mathbf{B}$ , 计算结束时输出解  $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$

### 4. 过程

子过程 GAUSSJ.

```
SUBROUTINE gaussj(a,n,b)
INTEGER n,NMAX
REAL a(n,n),b(n)
PARAMETER (NMAX=50)
INTEGER i,col,irow,j,k,l,ll,indx(NMAX),&
        indxr(NMAX),ipiv(NMAX)
REAL big,dum,pivinv
```

```
do j=1,n
  ipiv(j)=0
end do
do i=1,n
  big=0.
  do j=1,n
    if(ipiv(j)/=1) then
      do k=1,n
        if (ipiv(k)==0) then
          if (abs(a(j,k))>=big) then
            big=abs(a(j,k))
            irow=j
            icol=k
          endif
          else if (ipiv(k)>1) then
            pause 'singular matrix in gaussj'
          endif
        end do
      endif
    end do
    ipiv(icol)=ipiv(icol)+1
    if (irow/=icol) then
      do l=1,n
        dum=a(irow,l)
        a(irow,l)=a(icol,l)
        a(icol,l)=dum
      end do
      dum=b(irow)
      b(irow)=b(icol)
      b(icol)=dum
    endif
    indxr(i)=irow
    indxc(i)=icol
    if (a(icol,icol)==0.) pause 'singular matrix in gaussj'
    pivinv=1./a(icol,icol)
    a(icol,icol)=1.
    do l=1,n
```

```

      a(icol,l)=a(icol,l)*pivinv
    end do
    b(icol)=b(icol)*pivinv
    do ll=1,n
      if(ll/=icol) then
        dum=a(ll,icol)
        a(ll,icol)=0.
        do l=1,n
          a(ll,l)=a(ll,l)-a(icol,l)*dum
        end do
        b(ll)=b(ll)-b(icol)*dum
      endif
    end do
  end do
  do l=n,1,-1
    if(indxr(l)/=indxc(l)) then
      do k=1,n
        dum=a(k,indxr(l))
        a(k,indxr(l))=a(k,indxc(l))
        a(k,indxc(l))=dum
      end do
    endif
  end do
END SUBROUTINE gaussj

```

## 5. 例子

验证程序 D1R1 调用子过程 GAUSSJ 可以对例子中的矩阵求出其解,并将解乘以已知系数矩阵检查是否和方程右端的向量相等. 验证程序 D1R1 如下:

```

PROGRAM D1R1
! Driver program for routine GAUSSJ
PARAMETER(N=3)
DIMENSION A(3,3),B(3),A1(3,3),B1(3)
DATA A/2.,5.,1.,1.,-1.,-3.,2.,1.,-4./
DATA B/5.,8.,-4./
Print *, '已知的方程组的右端向量'
DO I=1,N

```

```

      WRITE(*,'(1X,3F12.6)') B(I)
    END DO
    DO I=1,N
      DO J=1,3
        A1(I,J)=A(I,J)
      END DO
    END DO
    Call GAUSSJ(A,N,B)
    WRITE(*,*)
    Print *, '计算出的方程组的解'
    DO I=1,N
      WRITE(*,'(1X,3F12.6)') B(I)
    END DO
    ! 将计算出的解 B 乘以系数矩阵,以验证计算结果正确
    DO L=1,N
      B1(L)=0.
      DO J=1,N
        B1(L)=B1(L)+A1(L,J)*B(J)
      END DO
    END DO
    WRITE(*,*)
    Print *, '计算出的解乘以系数矩阵的结果'
    DO I=1,N
      WRITE(*,'(1X,3F12.6)') B1(I)
    END DO
  END

```

计算结果如下:

已知的方程组的右端向量

5.000000

8.000000

-4.000000

计算出的方程组的解

1.000000

-1.000001

2.000000

计算出的解乘以系数矩阵的结果

5.000000  
8.000000  
-4.000000

## 1.2 LU 分解法

### 1. 功能

求解系数矩阵为非奇异的线性代数方程组  $Ax=b$ , 它能串联式地逐次解  $A$  相同  $b$  不同的方程组. 本方法也叫杜利特尔(Doolittle)方法, 它将高斯主元消去法中的中间结果的记录次数从约  $n^3/3$  次减少到约  $n^2$  次. 子过程 LUDCMP 将系数矩阵  $A$  分解为上三角矩阵和下三角矩阵. 子过程 LUBKSB 利用 LUDCMP 的分解结果求得线性方程组  $Ax=b$  的解.

### 2. 方法

(1) 采用隐式部分选主元的杜利特尔方法.

(2) 首先作  $A$  的  $LU$  分解:

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ & \cdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & \cdots & & \cdots & \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

考虑到数值稳定性, 其中  $l_{ij}, u_{ij}$  计算如下:

① 选取  $A$  中每行中的主元(绝对值最大元)  $\{a_{ij_i}\}$ ,  $i=1, \cdots, n$ .

② 取

$$|a_{i_1j}/a_{1j_1}| = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{ij}/a_{1j_1}|$$

若  $i_1 \neq 1$ , 则交换第 1 行与第  $i_1$  行得  $A=(a_{ij})$ .

$$u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

$$l_{i1} = a_{i1}/u_{11}, \quad i = 2, \cdots, n$$

③ 一般地, 令

$$S_i = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}u_{jk}, \quad i = k, \cdots, n$$

$$|S_{i_k/a_{i_k}/i_k}| = \max_{k \leq i \leq n} |S_i/a_{i_j}|$$

由于  $A$  非奇异, 所以  $S_{i_k} \neq 0$ . 若  $i_k \neq k$ , 则交换  $A$  与所得  $L$  的第  $k$  行与第  $i_k$  行, 于是  $u_{kk} = S_{i_k} \neq 0$ , 且  $|l_{ij}| \leq 1 (i > k)$ .

$$\begin{aligned} u_{kj} &= a_{kj} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km} u_{mj}, \quad k = 2, \dots, n; \quad j = k, \dots, n \\ l_{ik} &= \frac{a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk}}{u_{kk}}, \quad k = 2, \dots, n-1; \quad i = k+1, \dots, n \\ u_{kj} &= 0, \quad k > j, \quad l_{ik} = 0, \quad i < k \end{aligned}$$

(3) 解  $Ax=b$  等价于解

$$P_n \cdots P_1 Ax = P_n \cdots P_1 b$$

即

$$LUx = \tilde{b} = P_n \cdots P_1 b$$

此式等价于求解  $Ly = \tilde{b}, Ux = y$ . 计算公式为

$$\begin{aligned} y_1 &= \tilde{b}_1, \quad y_i = \tilde{b}_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j, \quad i = 2, \dots, n \\ x_n &= y_n / u_{nn} \\ x_i &= \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j}{u_{ii}}, \quad i = n-1, \dots, 1 \end{aligned}$$

(4) 一般地说, 优先推荐解线性方程组  $Ax=b$  的方法是:

CALL LUDCMP (A,N,NP,INDX,D)

CALL LUBKSB (A,N,NP,INDX,B)

解  $X$  将存储在  $B$  中. 原始矩阵  $A$  已经被存储.

如果要连续解具有相同  $A$  而不同  $b$  的线性方程组时, 只需重复

CALL LUBKSB (A,N,NP,INDX,B)

因为 LUBKSB 所需要的输入  $A$  和 INDX 可以从 LUDCMP 中得到.

### 3. 使用说明

LUDCMP (A,N,NP,INDX,D)

LUBKSB (A,N,NP,INDX,B)

N 整型变量, 输入参数,  $A$  的阶数

- NP 整型变量,输入参数, $A$  的物理维数
- A 实型数组,输入、输出参数. 在 LUDCMP 中,输入时按列存放实方阵  $A$ ,输出时,对角线以下部分存放单位下三角矩阵  $L$ ,对角线及其以上部分存放上三角矩阵  $U$ . 在 LUBKSB 中,将 LUDCMP 中输出结果  $A$  作为输入
- INDX 整型数组,在子过程 LUDCMP 中为输出参数,用于记录置换矩阵,称为置换向量,在子过程 LUBKSB 中为输入参数,输入子过程 LUDCMP 的输出结果
- D  $\pm 1$ ,输出参数,依赖于行交换次数为偶(+1)还是奇(-1)
- B 实型数组,输入、输出参数,输入实向量  $b$ . 输出时,方程组的解  $x$  存储在数组  $B$  中

#### 4. 过程

##### (1) 子过程 LUDCMP.

```

SUBROUTINE ludcmp(a,n,np,indx,d)
PARAMETER (nmax=100,tiny=1.0e-20)
DIMENSION a(np,np),indx(n),vv(nmax)
d=1.
do i=1,n
    aamax=0.
    do j=1,n
        if (abs(a(i,j))>aamax) aamax=abs(a(i,j))
    end do
    if (aamax==0.) pause 'singular matrix.'
    vv(i)=1./aamax
end do
do j=1,n
    if (j>1) then
        do i=1,j-1
            sum=a(i,j)
            if (i>1) then
                do k=1,i-1
                    sum=sum-a(i,k)*a(k,j)
                end do
            end if
        end do
    end if
end do

```