

FORTRAN

常用算法程序库

中科院物理研究所二室



30250164

— 1 —

出版说明

为了使科研人员更好地使用计算机解决各种问题，建立常用算法程序库是十分必要的。只要把各类问题的“原料”拿来，编写一些最必要的模块，大量利用现成的程序，就可尽快得到计算结果，而不必过多纠缠“加工”的过程。这将有助于避免重复性劳动，缩短编制程序的周期，提高程序质量，简化算题人员的工作，普及计算机的使用和提高计算机的使用效率。为此，我们在1976年9月为用户提供了一个小程序库，现在再把这个扩充的FORTRAN常用算法程序库交付使用。本程序库分两册出版，第一册是使用说明，第二册是程序清单，两册排列顺序一致。

这个程序库是在物理所许多同志多年来使用FORTRAN语言的实践基础上形成的。我们蒐集了一些常用的程序，自己编制了一批程序，从国外书刊中引进了一些成型的程序（凡不是我们自己编写的程序，均注明了出处）。全部程序都曾在物理所的NOVA计算机上调试通过，但并没有细致地检验一切可能遇到的特殊情况，因此尚有待于在实际使用中继续修改完善。我们衷心希望用户提出批评和建议。

这个程序库是在郝柏林同志指导下，由卢瑛同志编制和调试的。物理所NOVA计算机房全体同志始终支持了这项工作。声学所宋知用同志提供了快速富里叶变换的一整套程序。

中国科学院物理研究所

二室 201组

1978年7月15日

358309



目 录

程序库中的所有程序按其内容共分为九类，分别用字母 A, B, C, D, E, F, G, H, I 表示。每一类中的程序，用代表这类的字母后面加上顺序排列的数字表示。如拉格朗日值子程序，属于 E 类（极值，拟合与曲线平滑）的第一个程序用 E1 表示其在程序库中的位置。

A 矩阵运算和矩阵特征值

A1 矩阵传递子程序 MXFER (DMXFER) -----

A2 矩阵转置子程序 MTRA (DMTRA)

A3 矩阵加减子程序 MTADD (DMTADD)

A4 矩阵乘子程序 MTMPL (DMTMPL)

A5 对称矩阵(存下三角)乘向量子程序 SMTMV (DSMTM)

A6 实矩阵平衡变换子程序 BALANC

A7 化一般实矩阵为上 Hessenberg 形式子程序 ELMHE

A8 累积 ELMHES 简化一般实矩阵为上 Hessenberg 形式所用的基本相似变换子程序 ELTRAN

A9 求实上 Hessenberg 矩阵特征值子程序 HQR



30250164

— 1 —

出版说明

为了使科研人员更好地使用计算机解决各种问题，建立常用算法程序库是十分必要的。只要把各类问题的“原料”拿来，编写一些最必要的模块，大量利用现成的程序，就可尽快得到计算结果，而不必过多纠缠“加工”的过程。这将有助于避免重复性劳动，缩短编制程序的周期，提高程序质量，简化算题人员的工作，普及计算机的使用和提高计算机的使用效率。为此，我们在1976年9月为用户提供了一个小程序库，现在再把这个扩充的FORTRAN常用算法程序库交付使用。本程序库分两册出版，第一册是使用说明，第二册是程序清单，两册排列顺序一致。

这个程序库是在物理所许多同志多年来使用FORTRAN语言的实践基础上形成的。我们蒐集了一些常用的程序，自己编制了一批程序，从国外书刊中引进了一些成型的程序（凡不是我们自己编写的程序，均注明了出处）。全部程序都曾在物理所的NOVA计算机上调试通过，但并没有细致地检验一切可能遇到的特殊情况，因此尚有待于在实际使用中继续修改完善。我们衷心希望用户提出批评和建议。

这个程序库是在郝柏林同志指导下，由卢瑛同志编制和调试的。物理所NOVA计算机房全体同志始终支持了这项工作。声学所宋知用同志提供了快速富里叶变换的一整套程序。

中国科学院物理研究所

二室 201组

1978年7月15日

358309



目 录

程序库中的所有程序按其内容共分为九类，分别用字母 A, B, C, D, E, F, G, H, I 表示。每一类中的程序，用代表这类的字母后面加上顺序排列的数字表示。如拉格朗日值子程序，属于 E 类（极值，拟合与曲线平滑）的第一个程序用 E1 表示其在程序库中的位置。

A 矩阵运算和矩阵特征值

- A1 矩阵传递子程序 MXFER (DMXFER) -----
- A2 矩阵转置子程序 MTRA (DMTRA)
- A3 矩阵加减子程序 MTADD (DMTADD)
- A4 矩阵乘子程序 MTMPL (DMTMPL)
- A5 对称矩阵(存下三角)乘向量子程序 SMTMV (DSMTMV)
- A6 实矩阵平衡变换子程序 BALANC
- A7 化一般实矩阵为上 Hessenberg 形式子程序 ELMHE
- A8 累积 ELMHE 简化一般实矩阵为上 Hessenberg 形式所用的基本相似变换子程序 ELTRAN
- A9 求实上 Hessenberg 矩阵特征值子程序 HQR

- A10 求对称三对角矩阵的特征值子程序 TQL1
- A11 用正交变换把实对称矩阵简化为对称三对角矩阵子程序
TRIDI
- A12 求一般实矩阵特征值子程序 EIHQR
- A13 求实对称矩阵特征值子程序 TRETQL
- B 线性方程组求解与矩阵求逆及行列式值
- B1 主元消去法解线性方程组子程序 PIVOT(DPIVOT)
- B2 共轭斜量法子程序 CJGGDI(DCJGGDI)
- B3 解对称正定线性方程组的改进平方根法子程序 SPDLSR
- B4 追赶法解三对角矩阵的线性方程组子程序 TRID(DTRID)
- B5 行主元消去法求逆矩阵和行列式子程序 INVERS(DINVERS)
- B6 实矩阵求逆子程序 MINVRT(DMINVR)
- B7 一般实矩阵奇异值分解子程序 SVD
- C 特殊函数和多项式的值
- C1 计算阶乘函数子程序 FAC(DFAC)
- C2 切比雪夫多项式函数子程序 CHE(DCHE)
- C3 贝塞尔函数子程序 BESSEL

- 4 -

- C4 雅可比多项式子程序 JACOBI
- C5 复Gamma函数子程序 CGAMMA
- D 方程求根和函数的零点
- D1 求实多项式全部实根子程序 RPOZY, FXSHFR, REALIT, QUADIT, CALCSC, NEXIK, NEWEST, QUADSD, QUADI
- D2 求多项式全部实根子程序 ROOTPI, BAIR, NEWT
- D3 切线法解超越方程子程序 TNGNT(DTNGNT)
- D4 割线法解超越方程子程序 CHORD(DCHORD)
- D5 超越方程求根子程序 ROTTRAN
- D6 抛物线法求实函数实根子程序 ZEROS
- D7 求实函数的实实根子程序 ZEROIN
- D8 求复函数的实根子程序 CRF
- D9 解非线性方程组的拟牛顿法子程序 NLES
- E 插值、拟合和曲线平滑
- E1 拉格朗日插值多项式子程序 LAGINT
- E2 牛顿插值多项式子程序 NEWINT
- E3 三次样条函数插值子程序 SPZ3
- E4 计算三次样条插值系数子程序 SPLINE
- E5 计算三次样条函数值子程序 SEVAZ

- E 6 最小二乘法子程序 LIESQR(DLIESQR)
- E 7 切比雪夫多项式作平方逼近子程序 CHESQR
- E 8 二元线性极值子程序 INTZD
- E 9 曲线平滑子程序 SMOOTH
- E 10 线性回归分析子程序 SQRT
- E 11 多元线性回归分析子程序 MDQRT
- F 数值积分
- F 1 一重积分函数子程序 QUAD(DQUAD)
- F 2 不等距数值点使用二次插值法积分子程序 AVINT
- F 3 不等距数值点使用三次插值作逼近积分子程序 CUBINT
- F 4 三维对称立方体域上积分的函数子程序 SK
- F 5 计算三维球体域上积分的函数子程序 APPROX
- F 6 多重积分子程序 NDIRI
- F 7 对称三维立方体域上的高斯积分子程序 GAUSS
- F 8 三维高斯积分子程序 GAUINT
- G 解常微分方程初值问题
- G 1 用龙格库塔法解常微分方程组子程序 RKKT(DRKKT)
- G 2 变步长单步法解一阶常微分方程组初值问题子程序 KUMEI

H 快速富里叶变换

H 1 快速富里叶变换子程序 RAFFTS

H 2 快速富里叶变换子程序 CFFTS

H 3 实数序列的快速富里叶正变换子程序 RFFTA

H 4 快速富里叶变换子程序 XFFT

H 5 实数序列的快速富里叶逆变换子程序 RFFTS

H 6 实数序列裁减运算后的快速富里叶变换子程序 PRFFTA

H 7 裁减运算后的快速富里叶变换子程序 PCFFTS

H 8 快速富里叶变换子程序 (复数运算) TFFT 和 SPECT

I 其它

I 1 定时子程序 TIMER

I 2 曲线显示子程序 PAGE, GMODE, CMODE, DSPLY
DLIVE, TETRAG

I 3 打印曲线子程序 SPLOT, BPLOT, OPLOT

I 4 八位到十六位整数转换子程序 I8B

I 5 十六位到八位整数转换子程序 I8P

I 6 一维优化函数子程序 FMIN

I 7 求勒让德系数子程序 LEGSER

A 矩阵运算和矩阵特征值

A 1 矩阵传送子程序

MXFER (DMXFER)

1. 功能

把 $N \times M$ 阶矩阵 A 复制到 $N \times M$ 阶矩阵 B 中。

2. 用法

CALL MXFER (A, B, N, M) (单精度)

或 CALL DMXFER (A, B, N, M) (双精度)

3. 参数

N 整型变量, 矩阵 A, B 的行数。

M 整型变量, 矩阵 A, B 的列数。

A 实型数组 $A(N, M)$ 。

B 实型数组 $B(N, M)$ 。

4. 说明与限制

双精度情况下调用 DMXFER。不能用来复制整型矩阵。

A2 矩阵转置子程序

MTRA(DMTRA)

1. 功能

把 $N \times M$ 阶矩阵 A 的转置送入 $M \times N$ 阶矩阵 B 中。

2. 用法

CALL MTRA(A, B, N, M) (单精度)

或 CALL DMTRA(A, B, N, M) (双精度)

3. 参数

N 整型变量，置矩阵 A 的行数（即矩阵 B 的列数）

M 整型变量，置矩阵 A 的列数（即矩阵 B 的行数）

A 实型数组 $A(N, M)$ 。

B 实型数组 $B(M, N)$ 。

4. 说明与限制

矩阵 A 和 B 不可同名。

双精度情况下调用 DMTRA。

不可用于整型矩阵。

A 3 矩阵加减子程序

MTADD (DMTADD)

1. 功能

将 $N \times M$ 阶矩阵 A 与 B 的和或差送入 $N \times M$ 阶矩阵 C 中。

2. 用法

CALL MTADD (A, B, C, N, M, K) (单精度)

或者 CALL DMTADD (A, B, C, N, M, K) (双精度)

3. 参数

N 整型变量, 矩阵 A, B, C 的行数。

M 整型变量, 矩阵 A, B, C 的列数。

K 整型变量或整数, $K=1$ 时做矩阵加运算, $K=-1$ 时做矩阵减运算。

A 实型数组 $A(N, M)$ 。

B 实型数组 $B(N, M)$ 。

C 实型数组 $C(N, M)$ 。

4. 算法讨论

本子程序实现矩阵加减运算 $A + K * B \Rightarrow C$ 。

5. 说明与限制

数组 A, B, C 允许有同名者。

不能用于整型矩阵

A4 矩阵乘子程序

MTMPI (DMTMPI)

1. 功能

$N \times M$ 阶矩阵 A 乘以 $M \times L$ 阶矩阵 B 的结果送入 $N \times L$ 阶矩阵 C 中。

2. 用法

CALL MPI (N, M, L, A, B, C) (单精度)

或 CALL DMTMPI (N, M, L, A, B, C) (双精度)

3. 参数

N 整型变量，置矩阵 A 和 C 的行数。

M 整型变量，置矩阵 A 的列数和矩阵 B 的行数。

L 整型变量，置矩阵 B 和 C 的列数。

A 实型数组 $A(N, M)$ 。置矩阵 A 。

B 实型数组 $B(M, L)$ 。置矩阵 B 。

C 实型数组 $C(N, L)$ 。返回时置矩阵 A 和 B 的乘积。

4. 说明与限制

C 必须使用与 A, B 不同的名字，但允许 $A=B$ 。

双精度情况下调用 DMTMPI。

不可用于整型矩阵相乘。

A 5 对称矩阵(下三角)乘向量子程序

SMTMV(DSMTMV)

1. 功能

N阶对称矩阵A按列序 下三角部分乘以向量P。结果送入向量B中。

2. 用法

CALL SMTMV(N, M, C, P, B) (单精度)

或 CALL DSMTMV(N, M, C, P, B) (双精度)

3. 参数

N 整型变量, 矩阵A的阶。

M 整型变量, 矩阵A的下三角部分元素个数, $M = (N^2 + N) / 2$

C 实型数组 C(M), 输入时按列序存入A的下三角部分。

P 实型数组 P(N), 输入时置向量P。

B 实型数组 B(N), 置 $A * P$ 的结果。

4. 算法讨论

对称矩阵 A_{NN} 仅将下三角部分(包括对角线元素)的元素 a_{ij} ($i \geq j$) 按列序存入M维向量C中 ($M = (N^2 + N) / 2$)。它们之间的对应关系为:

$$\begin{cases} C_k = a_{ij} & (i \geq j) \\ k = [2i + (j-1)(2N-j)] / 2 \end{cases}$$

因此, 向量 $B = A * P$ 可记为

$$B_i = \sum_{j=1}^i a_{ij} p_j + \sum_{j=i+1}^N a_{ji} p_j$$

$$= \sum_{j=1}^i C_{(2i+(j-1)(2N-j))/2} \cdot p_j$$

$$+ \sum_{j=i+1}^N C_{(2j+(i-1)(2N-i))/2} \cdot p_j$$

其中 $i = 1, \dots, N$.

5. 说明与限制

本程序主要用于解约内存的转义。

A 6 实矩阵平衡变换子程序BALANC

1. 功能

对给定实矩阵A进行平衡变换,使得该矩阵对各行和列元素的和因经过适当的相似变换而变得近似相等,这是为了此后继续求特征值时节省时间,本子程序同时分离出该矩阵孤立的特征值。

2. 用法

本子程序通常不单独使用,只是在调用后面的ELMHES, HQR之前作准备工作。

CALL BALANC (NM, N, A, LOW, IGH, SCALE)

3. 参数

NM 整型变量, 置主调程序中说明的A矩阵的行数。

N 整型变量, 置矩阵A的阶, $N \leq NM$

A 实型数组A (NM, N), 输入时置给是N阶矩阵A, 输出时置给输出的变换矩阵。

LOW 整型变量, 输出时给出平衡矩阵的行边界指标。

IGH 整型变量, 输出时给出平衡矩阵的列边界指标。

SCALE 实型数组SCALE(N), 输出时置相似变换的信息。

4. 算法讨论

子程序首先确定排列矩阵的乘积P, 使得

-14-

$$PAP^T = \begin{pmatrix} T & X & Y \\ 0 & B & Z \\ 0 & 0 & R \end{pmatrix}$$

其中 T 和 R 是上三角矩阵， B 是从 LOW 到 IGH 行和列的方阵。 X 、 Y 和 Z 可是长方矩阵。 T 和 R 的对角元素是 A 分离时的特征值。当 $LOW=1$ ， $IGH=0$ 时， B 是空的。返回时 IGH 取 1。

接着，子程序用迭代法找到一个 $IGH-LOW+1$ 阶的非奇异对角矩阵 D ，使得 $D^{-1}BD$ 在对应行列元素的绝对值的和几乎相等的前提下，是一个平衡矩阵。 D 的对角元素是机选游奥运算基数的幂。

向量 $SCALE$ 包含变换的信息 P 和 D ，可用于恢复原矩阵，信息按如下存放：

- 1) 原矩阵的第 J 行和列，第 $SCALE(J)$ 行和列排为：
 $J = 1, 2, \dots, LOW-1, IGH+1, IGH+2, \dots, N$ 。
- 2) $SCALE(J)$ 是 D 的第 $(J-LOW+1)$ 条对角线元素，其中
 $J = LOW, LOW+1, \dots, IGH$ 。

最后输出的矩阵为：

$$\begin{pmatrix} TXD & Y \\ 0 D^{-1}BD & D^{-1}Z \\ 0 & 0 & R \end{pmatrix}。$$

5. 说明与限制

求某些行和对列的元素之和差别很大的矩阵的特征值时，先使用本程序平衡矩阵是很有好处的。执行时间能比直接求特征值减少。

本子程序引自 B. T. Smith 等的 "Matrix Eigensystem Routines - EISPACK Guide" 一书。