Fortran 95/2003

科学计算与工程

- 附书光盘包括12章93个范例代码
- 范例代码简明易懂
- 计算方法和数值分析的参考书

宋叶志　茅永兴　编著

清华大学出版社

Fotran95/2003 科学计算与工程

宋叶志　编著

清华大学出版社

北京

该电子稿为作者编写的手稿，排版亦不同于正式出版物，仅供参考，请勿传播。

内 容 简 介

科学计算方法是许多科研工作得以展开的前提。本书较为详细地介绍了科学计算与工程中的常用数值方法。全书以 Fortran95/2003 语言编写而成，全部程序在 Visual Studio 2008 集成 Intel 编译器环境下调试通过。

全书包括 12 章和 3 个附录。主要内容包括矩阵分解与线性方程组的直接方法、线性方程组的迭代方法、最小二乘法与数据拟合、特征值及特征向量、非线性方程求根、非线性方程组数值解法、插值法、数值微分、数值积分、常见的特殊函数计算、常微分方程（组）的数值方法及应用范例。

本书适合作为大学理工科非数学专业本科生或研究生计算方法、数值分析课程的教材或参考书。因为提供了全部的源代码，对于从事数值分析教学的教师也是一份难得的工具书。本书还可作为科研与工程技术人员的参考工具书。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签，无标签者不得销售
版权所有，侵权必究　侵权举报电话：010-62782989　13701121933

图书在版编目（CIP）数据

Fotran95/2003 科学计算与工程/宋叶志编著.－北京：清华大学出版社，2010.09

ISBN 978-7-302-0

I. ①F… II. ①宋…②… III. ①－－－IV.①TP00

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2010）第 000000 号

责任编辑：夏非彼　夏毓彦
责任校对：闫秀华
责任印制：
出版发行：清华大学出版社　　**地　址：**北京清华大学学研大厦 A 座
http://www.tup.com.cn　　**邮　编：**100084
社 总 机：010-62770175　　**邮　购：**010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质量反馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 刷 者：
装 订 者：
经　销：全国新华书店
开　本：190×260　　**印　张：**33.75　　**字　数：**864 千字
版　次：　　**印　次：**
印　数：1～4000
定　价：

产品编号：

前　言

科学计算是现代自然科学研究与工程技术的一个基石。可以认为科学计算方法属应用数学的一个分支，然而又不限于数学本身，其内容具有广泛性和一般性，在众多科学中都需要有科学计算方法的支持，而现代科学技术的进步及应用需求又反过来促进科学计算理论与方法的发展。可以这样说，就现今而言，科学计算能力的水平在一定程度上反应了一个国家或地区科学技术的发展水平。

抛开计算机硬件技术的发展不谈，就科学计算领域而言，曾经出现了较多计算机语言如 Fortran、Pascal、C、C++、Basic，及专门的数学软件 MATLAB、Mathimatica、Maple、SciLab 等。对于科学计算而言，建议读者优先学习 Fortran 及 MATLAB 语言，Fortran 在科学计算领域庞大的用户基础是其他语言所无法比拟的，尤其是对于老一辈科学家，对他们而言 Fortran 更是犹如母语一般。就作者经历而言，MATLAB 数值功能虽强大，但一般多用来仿真、模拟与快速分析。对于大型程序，主要是以 Fortran 居多，如数值气象预报程序、航天器轨道计算、许多有限元软件的编写程序等，这些大型程序一般都涉及非常复杂的科学计算方法。近些年，我国大范围普及 C、C++、Java、C# 等语言，造成介绍 Fortran 及其科学计算方面的书籍较少。

目前，我国大学理工科本科生、研究生及博士生普遍开设数值分析、计算方法或科学计算与工程等课程（计算数学系一般代之以函数逼近、数值代数等课程）。而这些教材中，往往没有提供让学生可以参考的程序，这对刚学习完高等数学与线性代数的同学学习科学计算方法造成了一定的困难。对于刚学习完高等数学与代数同学，往往一开始学习科学计算方法是较为困难的，这困难主要来源于两个方面，一是使用数学工具的手段还不是很成熟，二是刚开始面对数值问题编程时感到不习惯。鉴于此，本书提供了常用数值方法的算法及完整代码。

当然本书并不是仅仅为初学者准备的，有经验的编程用户，对于某些问题也可以直接使用书中的程序或者稍作改动即可使用书中的程序。

内容安排

数值分析本身的内容，如果广义地讲，可以包含很多内容，如偏微分方程、数值最优化等，而这些内容往往都可以单独成为一门学科或专题。通常的共识是数值算法所涉及的范围是直至偏微分方程但不包含偏微分方程的内容，而本书即主要介绍这部分内容。除了本书引子之外，全书共 12 章，其中前 11 章介绍计算方法的一般性内容，最后一章作为范例，仅仅起到示范性作用。

关于章节的安排，我们做了仔细的考虑，按照现在的顺序，保证了阅读时章节之间的依赖性不会对读者造成障碍，又使本书主要按照数值代数和函数逼近的两大知识块的顺序讲解。而如果先讲函数逼近的话，里面部分内容（如样条插值等），需要用到数值代数的知识。

在前 3 章分别介绍了线性方程组的直接方法、迭代方法、最小二次与数据拟合，其中最小二乘部分有些内容很自然地需要线性方程组的知识做基础。第四章特征值问题，不需要依赖于其他章节，因为其正交变换部分也可以放在该章单独讲解，因此可以放在全书的任何地方，但考虑到数值代数部分的整体性，把它放在了第 4 章。

第 5 章非线性方程的解法不需要依赖其他章节的内容，而第 6 章的非线性方程组的数值方法

则需要读者最好理解第五章的内容，同时计算非线性方程组必须具备线性方程组的知识，因此我们把第六章安排在线性方程组与非线性方程之后介绍。因为非线性方程组的应用非常广泛（如非线性回归等领域），我们介绍了较多的并且实用的数值方法，尤其是给出了多种变形的拟牛顿方法，如Broyden、DFP、BFS 等，还介绍了拓展收敛域的数值延拓法及参数微分法，这些算法涉及一定的编程技巧，在同类的书籍中较少有如此详细介绍的。我们把非线性最小二乘问题，放到应用范例一章以卫星导航原理为实例介绍。

接下来分别介绍了插值法（第 7 章）、数值微分（第 8 章）、数值积分（第 9 章）、常见的特殊函数计算（第 10 章）及常微分方程数值方法（第 11 章）。其中插值法介绍了最重要及最基础的 Lagrange、Newton、Hermite 插值方法，并把重点放到了样条插值方法。其中 B 样条因其理论优美、实用性强应该得到重视，而国内许多教材中较少有介绍，给出程序的则更少。关于特殊函数的计算，我们介绍了几种典型的特殊函数，并未求全而罗列更多的计算方法。常微分方程问题介绍了单步法、一般多步法及预测校正方法（PECE），作为基础，我们认为够了，当然在实践中，可能根据具体的工作需求而需要构造更复杂的算法，但基本原理大抵如此。

根据以往读者的需求，他们希望安排一章内容列举一些范例，以说明科学计算方法是有“用武之地”的，实际上我认为这个艰巨的任务，应该交给读者自己。作者知识面有限，只能举一两例做示范性的说明。

为了给编程经验不是很丰富的初学者提供更多的有效帮助，我们特地安排了附录部分讲解了，集成开发环境下编程的最基础知识及程序调试方法。

致谢：

本书的编写得到了单位领导及动力中心各位老师的帮助和支持，尤其感谢空间飞行器精密定轨课题组首席科学家胡小工研究员对我的帮助。在书的早期编写中，还得到了总参某部陈国平同志及北京航天飞控中心曹建峰博士的帮助。在编写过程中好友徐导，杨建平夫妇、复旦大学数学学院杨卫红副教授及陈清女士、王婷婷夫妇、Tiffany、Phebe Gray 博士等也给予作者许多鼓励。北京图格新知公司夏非彼老师为本书的出版付出了辛勤的劳动，作者致以诚挚的谢意。

囿于作者水平有限，加上时间仓促，书中肯定有不少疏漏，甚至谬误之处，还望读者不吝指教。作者的电子邮箱为：song.yz@163.com，也可以通过 QQ：1556207030 进行答疑。

如果有院校教师愿意采用本书作为教材或指定参考书的，可以和清华大学出版社联系或直接与作者联系，编者愿意提供 Fortran 程序设计或计算方法一定的技术支持。

宋叶志　中国科学院

茅永兴　中国卫星海上测控部

引　子

1. 科学计算方法有何应用？

至于科学计算法有何应用，这显然不是三言两语可以回答的。这里先对科学计算方法做一通俗介绍。在不严格的情况下，有时我们不去区分计算方法、科学计算、数值分析几个名词的差别。目前，我国理工科院校的计算数学、计算机等专业在本科生就开设了数值分析课程。而绝大部分院校理工科研究生和博士生都开设了计算方法的课程。科学计算对于个人而言，也是从事科研工作或工程技术的一项基本技能。

可以说从现在的航天器飞行、自动控制、大型桥梁设计等都离不开科学计算技术的支持。如果没有卫星飞行我们又如何能看上卫星电视？如何能使用卫星定位？可以说身边的许多事物都在直接或者间接的与科学计算有联系。现在许多社会学领域也离不开科学计算，比如医学统计方法、传染病动力学、证券金融时间序列分析等都需要依赖一定的数值方法实现。

当今社会科技日益发展，而许多高新技术都离不开科学计算的支持。上世纪中叶以来，计算机软硬件的发展为科学计算提供了有利条件。目前，各国科技领域都普遍非常重视科学计算理论与技术的发展。

科学计算具有一般性的理论意义，并不局限于某具体工程技术，而许多具体的科学实践领域反过来对进科学计算的发展提出了新的课题和需求，从而两者互相促进。

2. 该选择哪种编程语言？

现今，在使用的计算机高级语言种类繁多。对于编程经验不是很多的人而言，一个很自然的问题是：“我该学习哪种编程语言?”

我们给出直接的回答是，没有统一的答案。具体选择哪种语言是因人而异，因需求而异同，没必要厚此薄彼。

一般而言每种语言都有某一些领域比较突出。比如 C 语言编写操作系统很出名，现在的 C#编写界面非常方便，SQL 语言编写数据库程序，R 语言、SAS 编写统计程序等。

对于有意从事科研或工程技术的的读者，建议优先学习 Fortran 和 MATLAB，最好两种语言都能比较熟练的掌握。

Fortran 从诞生就一直是科学计算领域最重要的语言之一，拥有庞大的用户群体。第一版的 Fortran 是由 IBM 在上世纪 50 年代为自己的 704 计算机开发的。在那之前，基本所有的计算机程序都是通过手工编写的机器语言，非常容易出错。Fortran 的出现可以说是科学计算领域的一次革命，从此程序员能像写数学公式似的编写程序。

到目前为止 Fotran 已经经过数次较大的修改，不过由于良好的兼容性，一般不太会给程序员带来较大的麻烦。现在使用较多的是 Fortran90 之后的版本，包括 95 版和 2003 版。但是 Fortran77 依然有相当多的人在使用。目前，国内外众多科研机构的许多大型程序都是用 Fortran 编写的。

3.计算方法是否局限于编程实现？

一个简洁的回答：当然不是。

计算方法更重要之处，在于提供一整套能够武装人的大脑思维的分析理论与方法，使之可以灵活运用于实践问题。而如果购买计算方法的书籍，仅仅是为了获得一套可执行的代码，这只实现了作者编写本书目的的一部分价值。为了表明算法的重要性，下面举一个简单的例子。

【问题】仅仅给你一张纸和笔，让你计算 $\sqrt{447}$，要求精确到小数点后 4 位有效数字。当然，如果你需要还可以提供给你只具有加、减、乘、除功能的小计算器。读者可以先不看解答，考虑一下这个问题，如果你仅仅有笔和纸，不一定要求你算出来，但是你要给出一个方法，要求是按照这个方法原则上是你可以算出来。

【解答】这是作者以前在某高校 BBS 上看到的一个问题，然后我给了提问者一个公式，即

$$x_1 = \frac{1}{2}\left(x_0 + \frac{447}{x_0} \right)$$

并给他介绍了公式使用方法，方法如下：

给定一个初始的你认为最接近的“猜想”值 x_0，然后把这个猜想的值带入等式右边，算出来 x_1。然后再把 x_1 当作 x_0，带入等式右边，算出新的 x_1，如此反复循环。可以把最后一次的 x_1，当作最终结果，即可以得到很高的精度。上面的公式加使用方法，已经构成了完整的计算方法。

实际上，可以把上述公式等价于下述迭代格式，即

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{447}{x_n} \right), n = 1, 2, ...$$

下面演示一下以上公式的使用过程。

步骤一：$\sqrt{447}$ 等于多少，你不清楚。但是 21^2=441 你应该知道。这样你就令 x_1=21。

步骤二：由上面的公式，可以算出

$$x_2 = \frac{1}{2}\left(21 + \frac{441}{21} \right) = 21.142857142857142$$

步骤三：再把 $x_2 = 21.142857142857142$，带入到公式中，可以求得

$$x_3 = \frac{1}{2}\left(x_2 + \frac{441}{x_2} \right) = 21.142374517374517$$

这时，可以就把 x_3 作为最后结果。$\sqrt{447}$ 的准确结果 21.142374511865974…。我们才作 2 次复合的四则运算，精度已经达到小数点后 8 位有效数字。

在以上计算过程中，仅仅是利用了加、减、乘、除法运算，并未采用更“高级”的运算方法。

有人疑问说：“我没想起来 21^2=221”。如此的话，20^2=400，这个总应该清楚的吧。在上面的公式中，就令 x_1=20。

$$x_2 = \left(20 + \frac{447}{20} \right) = 21.175$$

$$x_3 = \frac{1}{2}\left(x_2 + \frac{447}{x_2} \right) = 21.142399645808737$$

$$x_4 = \frac{1}{2}\left(x_3 + \frac{447}{x_3} \right) = 21.142374511880917$$

$$x_5 = \frac{1}{2}\left(x_4 + \frac{447}{x_4} \right) = 21.142374511865974$$

$$\vdots$$

可见，我们做了几次复合四则运算之后，精度已经达到 10 几位有效数字，远远超过我们的预期精度需求。

至于以上公式是怎么来的，这正是学习数值方法之后应该具备的最基本能力，说出来最简单不过了。既然是求 447 开根号的问题，就可以建立 x^2=447，这样一个方程（负根舍弃），剩下的工作，就是非线性方程一章中的内容了。

以上只是一个简单的范例，事实上关于数值算法的很多内容，早在计算机发明之前就已经被科学家所发现并运用了，从许多算法的名字也可以看出，牛顿迭代法、拉格朗日插值法、高斯积分法等等。高斯在曾就用手算实现最小二乘法而达到参数估计的目的。这些先贤，即便是没有数字计算机，依然是第一流的数值分析专家。

在数字计算机发明之前对于非线性微分方程有摄动分析解法，同样也有人用手工的方法进行微分方程的数值计算，当然这样的代价是相当高昂的。总之，算法是数值方法的灵魂，而编程仅是一个实现算法的过程。

这里没有意图要说明计算机编程不重要，而是同时强调编程方法和算法理论都是很重要的。

4. 学习计算方法需要准备哪些基础知识？

本书读者的起点是具备微积分（数学分析）、线性代数、矩阵论和概率统计部分知识、泛函分析少量知识。泛函分析的知识不是必须的，适当的时候我们会交代一下，当然如果是用泛函分析的语言去叙述，很多问题会更简洁明了，并更具备概括性。总之，要想学习好科学计算方法，需要对微积分、矩阵等知识比较熟悉。另外一点是，假定读者已经掌握了编程方法。

编写本书目的之一，是考虑到许多初学者，因为没有足够的数值程序范例，入门就很困难，更无从谈提高了。对于没有入门的读者，可以先拷贝光盘上的程序，在自己计算机上试运行，然后修改相关参数等看计算结果，逐步入门。当然这并不是建议大家都不需要编写程序，而直接拿书中的程序去应付自己的工作需求。要想真正学好科学计算方法，还是需要自己动手编写一定量的代码。这样才能对数学原理又更深刻的认识和体会。

5.书中程序是否有 Bug？

当然有 Bug，这是毫无疑问的。

Bug 本意是臭虫、缺陷、损坏等意思。现在在较大的计算机程序中，经常会隐藏着的一些可能是未被发现的缺陷、问题或漏洞统称为 Bug。早期的计算机是由许多庞大且昂贵的真空管组成，并利用大量的电力来使真空管发光。一次科研试验中，一只小虫子 Bug 钻进了一支真空管内，导致整个计算机无法工作。研究人员费了相当长时间，总算发现原因所在，把这只小虫子从真空管中取出后，计算机又恢复正常。后来，Bug 这个名词就沿用下来，表示电脑系统或程序中隐藏的错误、缺陷、漏洞或问题。

与之相对应，人们将发现 Bug 并加以纠正的过程叫做 Debug，有时候我们就称为调试，意思

是捉虫子、杀虫子。

一般而言，程序员并不试图一次性把程序写的完全正确，而是通过反复的“Debug”排除错误。关于如何 Debug 是一个技巧性很强的工作，也是编程所应该必须具备的技能，在附录部分，我们介绍了常见的 Debug 方法。

回到本段的问题，虽然我们对代码做了多次编译、测试，但是我相信里面一定还有不少 Bug。即便是目前世界上最优秀的数值方法库，他们也不敢说自己的程序没有 Bug。像 MATLAB 这样专业成熟的商业软件，现在每年发布两次软件中存在的 Bug。所以，虽然我们的程序读者可以直接使用，但是我们仍然希望读者了解计算方法。

在这一点上，许多人喜欢以“黑箱子”来形容这件事，即用户并不需要知道“黑箱子”是如何实现的，仅仅想知道进去什么，可以出来什么。我们的观点是，我们提供一套我们自己编写的“黑箱子”，声明一点，我们做的可能不一定太好，但是我们试图把“黑箱子”打开，让读者自己从中寻找需要的东西。

鉴于以上的考虑，在编程时，我们对代码的注释是比较详细的，这为读者理解程序提供了方便。

6. 什么是面向对象？如何使用书中的程序？

我们的程序主要以 Fortran90/95/2003（以下简称 F90/95/2003）编写，对于 F2003 我们持保留的态度，不过多的涉及其中的语法，因为其中的一些语法在部分编译器上还不支持。

如果是 Fortran 77（以下简称 F77）的用户，使用部分程序可能需要做较大的改动。F90/95 在 F77 一些容易犯错的地方，虽然允许使用，但是不建议使用，而我们编写时则回避了新版本建议舍弃的语法。另外新版本有一些新的语法，在老版本上是不支持的，如新版大大加强了数组（某种意义下相当于矩阵）的处理方式。

全书采用模块化方法编写，这里的模块化不仅仅是一种语法功能，且可以认为是一种面向对象的思想。F2003 则支持了更为丰富的面向对象功能，如前面所言，我们对这些语法持保留态度，不一味的求新。

面向对象的好处之一是可以进行数据封装，我们考虑到大部分用户编程习惯仍然是结构化程序设计方法，所以我们尽量只是采用面向对象的形式，而实际上我们的过程都是可以单独拿出来使用。当然，少部分程序，我们作为范例把变量放在模块中，如果有必要的话只需要把这些变量复制到对应的函数中即可。有些章节的程序，可能需要依赖其他章节的介绍的程序，我们把所依赖的函数拷贝到当前章节的程序中，这样做的一个坏处是增加了少量的篇幅，好处是保证每一章节的独立性与完整性。

因为目前国内大部分用户使用的系统依然是 Windows，我们主要的编程环境是采用 Visual studio2008+Intel 11 编译器。目前 Visual Studio 2010 还不支持 Intel 编译器的集成。当然我们的大部分程序在 Compaq Fortran 6.6 这个经典 IDE 上也能编译通过，只是有些少量语法 Compaq Fortran 还不支持，需要略做修改，在适当的地方我们做了介绍。部分程序在 Sun 公司的 Solaris Unix F90 编译器编译测试过。需要说明的是集成开发环境本身对 Fortran 语言是没有影响的，但是一个好的集成开发环境为程序员提供非常高效的工程条件。

目　录

第 1 章

◂矩阵分解与线性方程组的直接方法▸

自然现象大部分表现为非线性，而很多情况下，我们对于非线性问题是通过线性化来处理，故而在众多学科中，线性问题依然是最基础最重要的内容之一。本章将介绍线性方程组的数值方法，线性方程组的数值方法是数值计算的一个基础内容，在非线性方程组、微分方程边值问题、样条逼近等许多领域中，都需要用到线性方程组的处理方法。

线性方程组主要分为直接方法与迭代方法。本章介绍直接方法，同时介绍与之相应的常见的矩阵分解方法，关于迭代法将在下一章中介绍。

1.1 三角方程组

1. 实验基本原理

线性方程组的计算方法有多种，针对不同特点的方程采用不同的方法计算效率往往是不同的。线性方程组中最简单的是对角形方程与三角形方程，其中对角形方程几乎都不需要计算机，只要拿笔和纸进行简单的四则运算，就可以得出结果。三角形方程也比较简单，仅仅是一个回带的过程，即便是没有学过数值分析的读者，只要略具备代数知识即可自行给出算法。

然而很多解方程的方法都是先把一般性方程化成三角形方程，这样便可以方便地处理。因此，计算三角形方程便是数值线性代数的一个较简单而又基础的问题。

三角形方程分为上三角形和下三角形两种，其计算方法基本相同，仅仅是次序不同而已。

对于上三角形方程，计算步骤为：

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i = \dfrac{b_i - \sum\limits_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k}{a_{ii}}, i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

对于下三角形方程，计算步骤为：

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{b_1}{a_{11}} \\ x_k = \dfrac{b_k - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ki} x_i}{a_{ii}}, \quad k = 2, \cdots, N \end{cases}$$

下面通过实验介绍上、下三角形矩阵的计算。

2. 实验目的与要求

- 理解上、下三角形方程组的计算流程。
- 能够编程实现三角形方程组的计算。

3. 实验内容与数据来源

计算上三角方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 & 4 \\ 0 & 3 & 2 & 5 \\ 0 & 0 & 7 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 50 \\ 49 \\ 53 \\ 12 \end{pmatrix}$$

计算下三角方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 10 \\ 23 \\ 39 \\ 43 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

uptri

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	上三角方程的解
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(N,N)	上三角系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程组的维数

downtri

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	下三角方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	下三角系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程的维数

5. 程序代码

```
module tri_eq
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 用于解上、下三角形线性方程组的回带方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   solve  方法函数
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
```

```
    x(i)=x(i)/A(i,i)
  end do
  end subroutine uptri
  subroutine downtri(A,b,x,N)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010-4-9
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose   :  下三角方程组的回带方法
  !               Ax=b
  !-----------------------------------------------------
  !  Input  parameters  :
  !       1.   A(N,N)系数矩阵
  !       2.   b(N)右向量
  !       3.   N方程维数
  !  Output parameters  :
  !       1.  x  方程的根
  !       2.
  !  Common parameters  :
  !
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer::i,j,N
  real*8::A(N,N),b(N),x(N)
  x(1)=b(1)/a(1,1)
  do k=2,N
     x(k)=b(k)
     do i=1,k-1
        x(k)=x(k)-a(k,i)*x(i)
     end do
     x(k)=x(k)/a(k,k)
  end do
  end subroutine downtri
  end module tri eq
  !#################################################################
  module driver
  !--------------------------------------module coment
  !  Version    :  V1.0
  !  Coded by   :  syz
  !  Date       :
  !-----------------------------------------------------
  !  Description :  驱动函数模块
  !
  !-----------------------------------------------------
  !  Parameters  :
  !     1.
  !     2.
  !  Contains    :
  !     1.      dir main  驱动函数入口
  !     2.      dri_up    当读到关键字 uptri 时启动该函数
  !     3.      dri_down  当读到关键字 downtri 时启动该函数
  !-----------------------------------------------------
  !  Post Script :
  !     1.
```

```
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine dri_main()
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  驱动程序入口函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  files  :
!      1.   fin.txt  准备数据
!      2.
!  Output files  :
!      1.  fout.txt 输出结果文件
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::ioerr
character(20)::upordown
open(unit=11,file='fin.txt',iostat=ioerr)
open(unit=12,file='fout.txt')
do
  read(11,*)upordown
  !  读输入文件
  !  当读到关键字 uptri 时启动上三角矩阵计算
  !  当读到关键字 downtri 时候启动下三角矩阵计算

  if ( upordown(1:5) == 'uptri' ) then
    call dri up()
  else if (upordown(1:)=='downtri')then
    call dri_down()
  end if

  if (ioerr/=0) exit
  !读到文件结束时，退出读文件
end do
end subroutine dri_main
subroutine dri up()
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 启动上三角阵的计算
!
!-------------------------------------------------------
use tri eq
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=4
integer::i,j
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
```

```
!读入 B 向量
read(11,*) b
call uptri(A,b,x,N)
write(12,101)x
101 format(T5,'上三角形方程组的解',/,T4,'x=',4(/F12.8))
end subroutine dri_up
subroutine dri_down()
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  启动下三角阵的计算
!
!-----------------------------------------------------
use tri_eq
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=4
integer::i,j
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
!读入 B 向量
read(11,*) b
call downtri(A,b,x,N)
write(12,101)x
101 format(/,T5,'下三角形方程组的解',/,T4,'x=',4(/F12.8))
end subroutine dri down
end module driver
!-----------------------------------------------------
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算上、下三角形方程组
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.  fin.txt  输入方程系数
!      2.
!  Output data files  :
!      1. fout.txt  计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    需要准备输入数据
!
!      2.    由主函数启动驱动程序进行计算
!-----------------------------------------------------
!use tri_eq
use driver
!调用驱动函数
call dri_main()
end program main
```

6. 实验结论

要使用该程序先要准备输入数据，输入数据格式如图 1-1 所示。

该文件需要以文件名 fin.txt 保存在可执行文件的当前目录下，执行程序后，输出结果以文件名 fout.txt 保存，如图 1-2 所示。

```
uptri

     2  1  4  3
     0  3  2  5
     0  0  7  3
     0  0  0  2  :END OF MATRIX A

     50
     49
     53
     12   :END OF VECTOR b


downtri

      2  0  0  0
      1  3  0  0
      1  5  1  0
      3  2  1  4    :END OF MATRIX A

      10
      23
      39
      43      :END OF VECTOR b
```

图 1-1　输入数据准备

```
   上三角形方程组的解
 x=
 4.50000000
 3.00000000
 5.00000000
 6.00000000

   下三角形方程组的解
 x=
 5.00000000
 6.00000000
 4.00000000
 3.00000000
```

图 1-2　三角形方程组计算结果

把计算结果回带到方程中，可以发现满足原方程。

为了方便读取文件，我们在文件中编写了驱动程序，虽然在小型的计算中似乎没有太大必要，但是建议读者养成用文件输入代替键盘屏幕输入的习惯，因为在大型的程序中，需要输入的量可能成百上千，如果使用键盘屏幕输入不仅效率低下，而且容易出错，使用文件输入只要把输入量按照一定的格式保存在文件中，然后由计算机读取效率会非常高。

1.2　高斯消去法

1. 实验基本原理

高斯消去法的思想很朴素，方法是通过对增广矩阵实施消元变换，而在变换的过程中与原方程保持等价，直到矩阵变为上三角矩阵，这时候可以采用上一节介绍的方法进行回代，便得到方程的解。

对于方程组 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，增广矩阵为$[\mathbf{A}\quad\mathbf{b}]$。第一次消元，使方矩阵变为：

$$\left[\mathbf{A}^{(2)} \quad \mathbf{b}^{(2)}\right]=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

在第 k 次消元过程中，令 $l_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$，则第 i 行的消去公式为“

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-l_{ik}a_{ij}^{(k)} & i,j=k+1,k+2,...,n \\ b_i^{k+1}=b_i^{(k)}-l_{ik}b_i^{(k)} & i=k+1,k+2,...,n \end{cases}$$

如此循环，直到矩阵变为：

$$\left[\mathbf{A}^{(n)} \quad \mathbf{b}^{(n)}\right]=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

当变为上三角阵之后，可以采用回代公式：

$$\begin{cases} x_n=\dfrac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i=\dfrac{b_i-\sum\limits_{k=i+1}^{n}a_{ik}x_k}{a_{ii}}, i=n-1,n-2,\cdots,1 \end{cases}$$

就可以给出方程的解。

2. 实验目的与要求

- 了解高斯消去法的大致思路。
- 明白算法的计算步骤。
- 能编程实现高斯消去法。
- 知道高斯消去法的不足之处。

3. 实验内容与数据来源

计算线性方程组 **Ax = b**，其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} -13.9211 & 21.7540 & -14.8743 & -7.9025 \\ 18.3862 & -26.0893 & -5.6866 & 4.4451 \\ -4.1683 & 3.9325 & -33.3169 & 41.7098 \\ -6.0438 & 6.7018 & -32.9591 & -23.3378 \end{pmatrix}, \mathbf{b}=\begin{pmatrix} 136.8721 \\ -126.8849 \\ 100.4524 \\ 95.7019 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程的维数

5. 程序代码

```
module gauss
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 高斯消去法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   solve  方法函数
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯消去法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
```

```
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!-------------------------------
!  这段是高斯消去法的核心部分
do k=1,N-1
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine solve
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module gauss
```

```
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯消去法
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.  fin.txt  输入方程系数
!      2.
!  Output data files  :
!      1. fout.txt  计算结果
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    需要准备输入数据
!
!-------------------------------------------------------
use gauss
implicit real*8(a-z)
integer,parameter:: N=4
integer::i,j
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读入 A 矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
!读入 B 向量
read(11,*) b
call solve(A,b,x,N)
write(12,101)x
101 format(T5,'高斯消去法计算结果',/,T4,'x=',4(/F12.8))
end program main
```

6. 实验结论

要执行程序，需要准备数据文件，其文件名为 fin.txt。输入格式如图 1-3 所示。

```
1   高斯消去法输入数据
2
3    -13.9211   21.7540  -14.8743   -7.9025
4     18.3862  -26.0893   -5.6866    4.4451
5     -4.1683    3.9325  -33.3169   41.7098
6     -6.0438    6.7018  -32.9591  -23.3378  :End of matrix A
7
8    136.8721
9   -126.8849
10   100.4524
11    95.7019                    :End of matrix B
12
```

图 1-3　输入数据文件

执行程序后计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 1-4 所示。

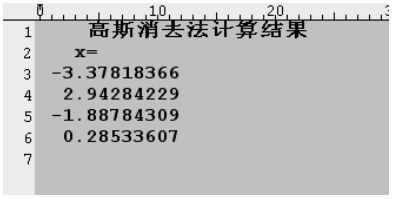


图 1-4 高斯消去法计算结果

把计算结果回代到原方程，可以验证计算结果是可靠的。

1.3 选主元消去法

1. 实验基本原理

上一节介绍的高斯消去法较为简单，然而如果在消去过程中出现 0 主元或者是主元非常小的话，消去法将失败或者数值不稳定。这时可以采用选主元的方法，进行处理。

下面给出列主元消去法的算法：

01 设置增广矩阵 $\mathbf{A}_p = [\mathbf{A},\mathbf{b}]$。

02 对 k=1，N-1，做03~06处理。

03 设置一个元素 $a_{\max} = \left|\mathbf{A}_p(k,k)\right|$，及标号 $ID_{\max} = k$。

04 查找当列的最大元素，然后用标号 $ID_{\max}$ 记录下这个元素所在的行数。

05 交换第 k 行与第 $ID_{\max}$ 行的所有数据。注意其他元素不变。

06 完成05时已经完成了主元的选取，这时候可以按照上一节的消去法进行消去计算。

07 完成以上步骤之后，已经形成上三角矩阵。

08 对上三角矩阵进行回代，即可得到方程的解。

2. 实验目的与要求

- 复习高斯消去法。
- 了解选主元消去法的优点。
- 能够编程实现选主元消去法。

3. 实验内容与数据来源

用列主元消去法计算方程 **Ax = b**，其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} -3.3435 & -0.4946 & 0.3834 & -4.9537 & -2.4013 & -3.5446 \\ 1.0198 & -4.1618 & 4.9613 & 2.7491 & 3.0007 & -3.6393 \\ -2.3703 & -2.7102 & -4.2182 & 3.1730 & -0.6859 & 3.6929 \\ 1.5408 & 4.1334 & -0.5732 & 3.6869 & 4.1065 & 0.7970 \\ 1.8921 & -3.4762 & -3.9335 & -4.1556 & -3.1815 & 0.4986 \\ 2.4815 & 3.2582 & 4.6190 & -1.0022 & -2.3620 & -3.5505 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}=\begin{pmatrix} 9.0537 \\ 0.0228 \\ -8.4177 \\ -4.6380 \\ 10.5575 \\ 9.8252 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程维数

5. 程序代码

```
  module m_gauss
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 高斯列主元消去法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   solve  方法函数
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
```

```
subroutine solve(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id_max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第k行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
```

```
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine solve
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1

   x(i)=b(i)
  do j=i+1,N
   x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
  end do
   x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module m gauss
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.  fin.txt  输入方程系数
!       2.
!  Output data files  :
!       1. fout.txt  计算结果
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.    需要准备输入数据
!
!-----------------------------------------------------
use m_gauss
implicit real*8(a-z)
integer,parameter:: N=4
integer::i,j
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读入 A 矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
!读入 B 向量
read(11,*) b
call solve(A,b,x,N)
write(12,101)x
101 format(T5,'高斯列主元消去法计算结果',/,T4,'x=',4(/F12.8))
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备文件名为 fin.txt 的输入文件，输入格式如图 1-5 所示。

```
1   列主元消去法
2
3    -3.3435   -0.4946    0.3834   -4.9537   -2.4013   -3.5446
4     1.0198   -4.1618    4.9613    2.7491    3.0007   -3.6393
5    -2.3703   -2.7102   -4.2182    3.1730   -0.6859    3.6929
6     1.5408    4.1334   -0.5732    3.6869    4.1065    0.7970
7     1.8921   -3.4762   -3.9335   -4.1556   -3.1815    0.4986
8     2.4815    3.2582    4.6190   -1.0022   -2.3620   -3.5505
9
10    9.0537
11    0.0228
12   -8.4177
13   -4.6380
14   10.5575
15    9.8252
```

图 1-5　数据输入文件

运行结果保存在文件 fout.txt 文件中，结果如图 1-6 所示。

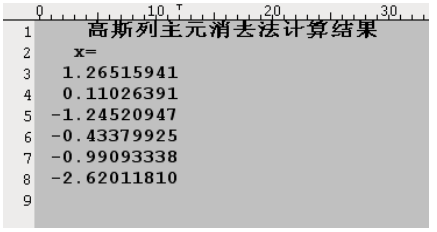


图 1-6　列主元消去法计算结果

同样可以把计算结果带入原方程进行检验。

1.4　Crout分解

1. 实验基本原理

如果一个方阵 **A** 可以分解为一个下三角矩阵 **L** 与一个上三角矩阵 **U** 的乘积，这种分解称为方阵 **A** 的三角分解或 LU 分解。特别的情况是，如果 **U** 为单位上三角矩阵时，称为 Crout 分解，如果 **L** 为单位下三角矩阵时称为 Doolittle 分解，Doolittle 分解将在下一节介绍。

下面给出 Crout 分解的算法：

01 计算 LU 分解中的 L 的第一列和 U 的第一行元素

$$\begin{cases} l_{i1} = a_{i1}, i = 1,2,...,n \\ u_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{l_{11}}, j = 2,...,n \quad (u_{11} = 1) \end{cases}$$

02 对 $k = 2,...,n$ 计算 L 的第 k 列元素

$$l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk}, i = k,...,n$$

以及 U 的第 k 行元素

$$u_{kj} = \frac{a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr} u_{rj}}{l_{kk}}, i = k+1,...,n$$

如此便完成了矩阵的 Crout 分解。

2. 实验目的与要求

- 了解 LU 分解的基本思想。

- 熟悉 Crout 分解的计算流程。
- 知道 Crout 分解与消去法的联系。
- 能编程实现对矩阵的 Crout 分解。

3. 实验内容与数据来源

已知矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

求矩阵 **A** 的 Crout 分解。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
L	REAL*8(N,N)	下三角矩阵
U	REAL*8(N,N)	单位上三角矩阵
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	输入矩阵
N	INTEGER	矩阵维数

5. 程序代码

```
module crout
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-------------------------------------------------------
!  Description :  LU 分解模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,L,U,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :  LU之Crout分解
!             A=LU
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A  方阵
!      2.    N  阶数
!  Output parameters  :
!      1.   L
!      2.   U
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i,k,r
real*8::A(N,N),L(N,N),U(N,N)
!L 第一列
L(:,1)=a(:,1)
!U 第一行
U(1,:)=a(1,:)/L(1,1)
do k=2,N
   do i=k,n
      s=0
      do r=1,k-1
       s=s+l(i,r)*u(r,k)
      end do
      l(i,k)=a(i,k)-s
   end do
   do j=k+1,n
     s=0
     do r=1,k-1
      s=s+l(k,r)*u(r,j)
     end do
     u(k,j)=(a(k,j)-s)/l(k,k)

   end do
    u(k,k)=1
end do
end subroutine solve
end module crout
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   Crot 分解
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.    A,N
!      2.
```

```
!  Output data files  :
!       1.    L,U
!       2.
!-------------------------------------------------------
use crout
integer,parameter::N=4
real*8::A(n,n),L(N,N),U(N,N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
call solve(A,L,U,N)
write(12,21)
21 format(T10,'LU 之 Crout 分解',/)
!输出 L 矩阵
write(12,*)'L='
do i=1,N
 write(12,22)L(i,:)
end do
22 format(4F10.6)
!输出 U 矩阵
write(12,*)'U='
do i=1,N
 write(12,22)U(i,:)
end do
23 format(4F10.6)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备数据文件 fin.txt，输入格式如图 1-7 所示。

程序运行后，计算结果保存在文件 fout.txt 文件中，如图 1-8 所示。

```
      Crout 分解

   6   2   1   -1
   2   4   1    0
   1   1   4   -1
  -1   0  -1    3
```

图 1-7　Crout 分解的矩阵系数

```
          LU之Crout分解

L=
  6.000000  0.000000  0.000000  0.000000
  2.000000  3.333333  0.000000  0.000000
  1.000000  0.666667  3.700000  0.000000
 -1.000000  0.333333 -0.900000  2.581081
U=
  1.000000  0.333333  0.166667 -0.166667
  0.000000  1.000000  0.200000  0.100000
  0.000000  0.000000  1.000000 -0.243243
  0.000000  0.000000  0.000000  1.000000
```

图 1-8　Crout 分解

对计算结果可以进行矩阵相乘，看是否得到原先矩阵以检验结果是否有效。

1.5　Doolittle分解

1. 实验基本原理

另一种 LU 分解称为 Doolittle 分解，其 L、U 分解后的形式如下：

$$\mathbf{L}=\begin{pmatrix}1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \cdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1\end{pmatrix},\mathbf{U}=\begin{pmatrix}u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn}\end{pmatrix}$$

计算步骤如下：

$$u_{1i}=a_{1i},i=1,\cdots,n$$

$$l_{j1}=\frac{a_{j1}}{u_{11}},j=1,\cdots,n$$

$$u_{kj}=a_{kj}-\sum_{m=1}^{k-1}l_{km}u_{mj},\quad j=k,k+1,\cdots,n$$

$$l_{ik}=\frac{a_{ik}-\sum_{m=1}^{k-1}l_{im}u_{mk}}{u_{kk}},\quad i=k+1,\cdots,n$$

通过 Doolittle 分解后也即把线性方程分为上三角与下三角型线性方程问题。

2. 实验目的与要求

- 知道 Doolittle 分解的基本思路。
- 熟悉计算流程。
- 能够编程实现矩阵的 Doolittle 分解。

3. 实验内容与数据来源

已知

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}6 & 3 & -8 \\ 15 & 5 & 2 \\ 2 & 2 & 7\end{pmatrix}$$

要求对 **A** 矩阵进行 Doolittle 分解。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
L	REAL*8(N,N)	单位下三角矩阵
U	REAL*8(N,N)	上三角矩阵
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	输入矩阵
N	INTEGER	矩阵维数

5. 程序代码

```
module doolittle
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :  LU 分解之 doolittle 模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,L,U,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  LU 分解之 Doolittle 函数
!               A=LU
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.    A  方阵
!       2.    N  阶数
!  Output parameters  :
!       1.   L
!       2.   U
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i,k,r
real*8::A(N,N),L(N,N),U(N,N)
!U 的第一行
U(1,:)=A(1,:)
!L 的第一列
```

```
L(:,1)=a(:,1)/U(1,1)
do k=2,N
    l(k,k)=1
   do j=k,n
       s=0
       do m=1,k-1
        s=s+l(k,m)*u(m,j)
       end do
       u(k,j)=a(k,j)-s
   end do
   do i=k+1,n
     s=0
     do m=1,k-1
      s=s+l(i,m)*u(m,k)
     end do
     l(i,k)=(a(i,k)-s)/u(k,k)
   end do
end do
end subroutine solve
end module doolittle
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   Doolittle 分解
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.    A,N
!       2.
!  Output data files  :
!       1.    L,U
!       2.
!-------------------------------------------------------
use doolittle
integer,parameter::N=3
real*8::A(n,n),L(N,N),U(N,N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
call solve(A,L,U,N)
write(12,21)
21 format(T10,'LU 之 Doolittle 分解',/)
!输出 L 矩阵
write(12,*)'L='
do i=1,N
 write(12,22)L(i,:)
end do
22 format(3F10.6)
!输出 U 矩阵
write(12,*)'U='
do i=1,N
```

```
 write(12,22)U(i,:)
end do
23 format(3F10.6)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备数据文件让计算机读取，矩阵存放在文件 fin.txt 中，输入格式如图 1-9 所示。

计算结果存放在文件 fout.txt 文件中，如图 1-10 所示。

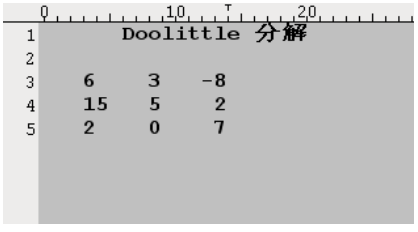


图 1-9 Doolittel 分解的输入数据

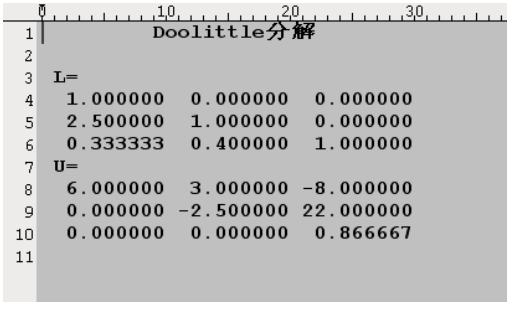


图 1-10 Doolittle 分解结果

可以看到分解后的矩阵满足 Doolittle 的形式要求，编程时可以通过两矩阵相乘验证程序是否正确。

1.6 LU分解法计算线性方程组

1. 实验基本原理

有了矩阵的 LU 分解继而求解方程是为水到渠成，这一小节即利用 Doolittle 分解计算线性方程组 **Ax = b** 。对于 **Ax = b** ，由 LU 分解有

$$\mathbf{LUx = b}$$

进而求解方程分为两步：

$$\mathbf{Ly = b}$$

$$\mathbf{Ux = y}$$

其中这两个方程系数分别为下三角矩阵和上三角矩阵，可以由第一节介绍的方法进行回代计算。

2. 实验目的与要求

- 复习矩阵的 Doolittle 分解。
- 知道 LU 分解计算线性方程组的思路。
- 知道 LU 分解与消去法计算线性方程组的联系。
- 能够编程实现 LU 分解计算线性方程组。

3. 实验内容与数据来源

用 LU 分解方法计算线性方程组 **Ax = b**，其中：

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 6.5574 & 6.7874 & 6.5548 & 2.7692 \\ 0.3571 & 7.5774 & 1.7119 & 0.4617 \\ 8.4913 & 7.4313 & 7.0605 & 0.9713 \\ 9.3399 & 3.9223 & 0.3183 & 8.2346 \end{pmatrix},\mathbf{b}=\begin{pmatrix} 130.3242 \\ 42.9348 \\ 149.9893 \\ 83.1953 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程维数

5. 程序代码

```
module LU
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :  LU 分解解方程
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,b,x,N)
```

```
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::L(N,N),U(N,N)
real*8::y(N)
 call doolittle(A,L,U,N)
call  downtri(L,b,y,N)
call uptri(U,y,x,N)
end subroutine solve
subroutine doolittle(A,L,U,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  LU 分解之 Doolittle 函数
!            A=LU
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A  方阵
!      2.    N  阶数
!  Output parameters  :
!      1.   L
!      2.   U
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i,k,r
real*8::A(N,N),L(N,N),U(N,N)
!U 的第一行
U(1,:)=A(1,:)
!L 的第一列
L(:,1)=a(:,1)/U(1,1)
do k=2,N
    l(k,k)=1
   do j=k,n
       s=0
       do m=1,k-1
        s=s+l(k,m)*u(m,j)
       end do
       u(k,j)=a(k,j)-s
   end do
   do i=k+1,n
     s=0
     do m=1,k-1
      s=s+l(i,m)*u(m,k)
     end do
     l(i,k)=(a(i,k)-s)/u(k,k)

   end do
```

```
end do
end subroutine doolittle
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
subroutine downtri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  下三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
```

```
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(1)=b(1)/a(1,1)
do k=2,N
   x(k)=b(k)
   do i=1,k-1
      x(k)=x(k)-a(k,i)*x(i)
   end do
   x(k)=x(k)/a(k,k)
end do
end subroutine downtri
end module LU
program main
!----------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   LU 分解计算线性方程组
!             Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.    A,b
!      2.
!  Output data files  :
!      1.    x
!      2.
!-------------------------------------------------------
use LU
integer,parameter::N=4
real*8::A(n,n),L(N,N),U(N,N)
real*8::b(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
read(11,*)b
call solve(A,b,x,N)
write(12,101)x
101 format(T5,'LU 分解计算线性方程组计算结果',//,4(/,F10.6))
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要读取数据文件，文件格式如图 1-11 所示。

程序运行后计算结果保存在文件 fout.txt 文件中，如图 1-12 所示。

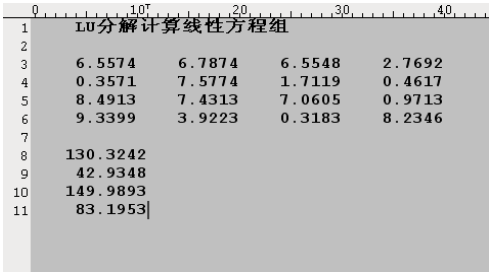


图 1-11　输入数据格式

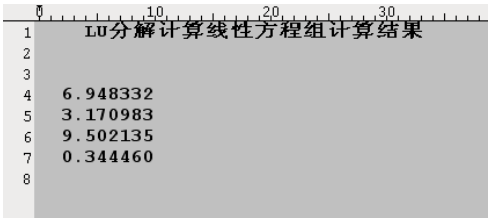


图 1-12　方程的解

可以验证计算结果是方程的解。

1.7　追赶法计算三对角方程

1. 实验基本原理

在三次样条插值以及差分方法计算常微分方程边值问题，以及热传导定界问题等计算中，都会遇到如下形式的方程组 **Ax = f**，其中系数矩阵呈三对角形

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ e_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & e_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & e_n & b_n \end{pmatrix}$$

往往这样的方程组都比较大，上千甚至上万个未知量。

如果系数矩阵满足消去法的条件，固然可以采用 Doolittle 分解法将系数矩阵分解为如下形式的三角阵的乘积，其中

$$\mathbf{L}=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix},\mathbf{U}=\begin{pmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

不过 L 和 U 矩阵非零元素相当稀疏，这种情况如果按照 Doolittle 分解将会照成严重的计算浪费，可以采用一种节省计算量的方法，公式如下：

$$d_i = c_i, i = 1,2,\cdots,n-1$$
$$u_1 = b_1$$

$$\left.\begin{aligned} l_i &= \frac{e_i}{u_{i-1}} \\ u_i &= b_i - l_i c_{i-1} \end{aligned}\right\} i = 2,3,\cdots,n$$

如此原方程变为下面两个方程

$$\begin{cases} \mathbf{Ly = f} \\ \mathbf{Ux = y} \end{cases}$$

进而

$$\begin{cases} y_1 = f_1 \\ y_i = f_i - l_i y_{i-1}, i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{y_n}{u_n} \\ x_i = \dfrac{(y_i - c_i x_{i+1})}{u_i}, i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

便得到原方程的解。

2. 实验目的与要求

- 了解三对角方程的适用范围。
- 理解计算基本原理。
- 熟悉计算流程。
- 能够编程实现该算法。

3. 实验内容与数据来源

编程计算三对角方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	三对角方程系数矩阵
F	REAL*8(N)	方程右向量
N	INTEGER	方程维数

5. 程序代码

```
module chase
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
!  Description :  三对角线方程组方法模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
 subroutine solve(A,f,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程组
!               Ax=f
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A 系数矩阵
!       2. f 右向量
!  Output parameters  :
!       1.  x 方程的解
!       2.  N 维数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   注意：该方法仅适用于三对角方程组
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 integer::N
 real*8::A(N,N),f(N),x(N)
 real*8::L(2:N),u(N),d(1:N-1)
real*8::c(1:N-1),b(N),e(2:N)
 integer::i
real*8::y(N)
!---------------把 A 矩阵复制给向量 e,b,c
```

```
do i=1,N
    b(i)=a(i,i)
end do
do i=1,N-1
   c(i)=a(i,i+1)
end do
do i=2,N
  e(i)=a(i,i-1)
end do
!------------------------
do i=1,N-1
 d(i)=c(i)
end do
u(1)=b(1)
do i=2,N
  L(i)=e(i)/u(i-1)
  u(i)=b(i)-L(i)*c(i-1)
end do
!------开始回带,求得 y
y(1)=f(1)
do i=2,N
  y(i)=f(i)-L(i)*y(i-1)
end do
!-----开始回带，求得 x
x(n)=y(n)/u(n)
do i=n-1,1,-1
x(i)=(y(i)-c(i)*x(i+1))/u(i)
end do
end subroutine solve
end module chase
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.   fin.txt 输入数据
!       2.   fout.txt 输出数据
!  Output data files  :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
use chase
integer,parameter::N=4
real*8::A(N,N),f(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
read(11,*)f
call solve(A,f,x,N)
```

```
    write(12,101)x
    101 format(T5,'追赶法计算结果',/,T4,'x=',4(/F12.8))
    end program main
```

6. 实验结论

程序的运行需要准备输入数据文件 fin.txt，输入格式如图 1-13 所示。
计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 1-14 所示。

```
追赶法计算三对角形方程组

     2  -1   0   0
    -1   2  -1   0
     0  -1   2  -1
     0   0  -1   2     : END OF A

     1
     0
     0
     1   : Vector of f
```

图 1-13　追赶法输入数据

```
  追赶法计算结果
 x=
 1.00000000
 1.00000000
 1.00000000
 1.00000000
```

图 1-14　追赶法计算结果

很容易验证，计算结果是原方程的解。

1.8　对称正定阵的Cholesky分解

1. 实验基本原理

由矩阵论可以知，如果矩阵 **A** 对称正定，则存在一个实的下三角矩阵 **L**，使 $\mathbf{A}=\mathbf{L}\mathbf{L}^T$。若限定 **L** 的对角元素为正时，则这种分解是唯一的，这就是著名的 Cholesky 分解，即

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \cdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \\ & & & l_{nn} \end{pmatrix}$$

计算时先令 $\mathbf{L}=\mathbf{0}$，然后按一下步骤计算：

01　$l_{11}=\sqrt{a_{11}}$，

02　$l_{i1}=\dfrac{a_{i1}}{l_{11}}, i=2,N$

03　对 $j=2,N$，做 A~B 处理。

A：$l_{jj}=\sqrt{a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}$

$$\text{B}: \ l_{ij}=\frac{\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)}{l_{jj}}, \quad i=j+1,N$$

由以上几部就已经算出了**L**矩阵，Cholesky 分解经常用于对称正定方程的求解（将在下一节介绍），不过分解本身也比较重要，这里单独列出来满足需要对对称正定矩阵分解读者的需求。实际上，许多软件包如 MATLAB 等矩阵分析软件都提供了 Cholesky 分解的函数。

2. 实验目的与要求

- 了解 Cholesky 分解的适用范围。
- 熟悉分解的计算流程。
- 能够编程实现对对称正定矩阵的 Cholesky 分解。

3. 实验内容与数据来源

对矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 233.4615 & 113.8423 & 256.0623 & 145.0697 \\ 113.8423 & 78.6033 & 127.4298 & 95.3089 \\ 256.0623 & 127.4298 & 281.4721 & 164.8676 \\ 145.0697 & 95.3089 & 164.8676 & 181.2339 \end{pmatrix}$$

进行 Cholesky 分解。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
L	REAL*8(N,N)	输出矩阵，其中 A=L*L’
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要分解的对称正定矩阵
N	INTEGER	矩阵维数

5. 程序代码

```
module cholesky
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
```

```
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Cholesky 分解模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(A,L,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Cholesky 分解子程序
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A 对称正定矩阵
!       2.  N 矩阵阶数
!  Output parameters  :
!       1.  L 输出矩阵  A=L*L'
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.  Cholesky 分解只适用于对称正定矩阵
!       2.
!-------------------------------------------------------
integer::N
real*8::A(N,N),L(N,N)
integer::i,j,k
L=0
L(1,1)=dsqrt(a(1,1))
L(2:,1)=a(2:,1)/L(1,1)
do j=2,N
   s=0
   do k=1,j-1
   s=s+L(j,k)**2
   end do
   L(j,j)=dsqrt(a(j,j)-s)
   !注意 i 范围
   do i=j+1,N
      s=0
      do k=1,j-1
        s=s+L(i,k)*L(j,k)
      end do
      L(i,j)=(a(i,j)-s)/L(j,j)
   end do
end do
end subroutine
end module cholesky
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :
!            Cholesky
!-----------------------------------------------------
!  Output data files  :
!      1.   fout.txt 输出文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.  注意：Cholesky 分解只适用于对称正定矩阵
!-----------------------------------------------------
use cholesky
integer,parameter::N=4
real*8::A(n,n),L(N,N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
call solve(A,L,N)
write(12,21)
21 format(T5,'Cholesky 分解',/)
do i=1,N
 write(12,22)L(i,:)
end do
22 format(4F10.6)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备输入数据 fin.txt，如图 1-15 所示。

程序运行后，计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 1-16 所示。

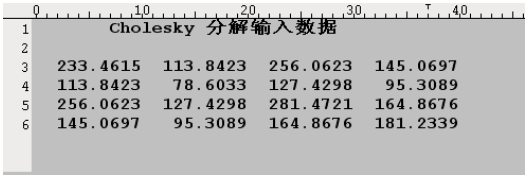


图 1-15　Cholesky 分解输入数据

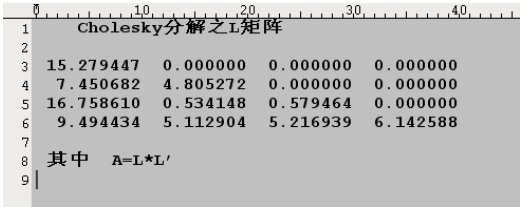


图 1-16　Cholesky 分解计算结果

计算结束后，可以通过 L 矩阵与其转置矩阵相乘验证程序是否正确。

1.9　用Cholesky分解计算对称正定方程

1. 实验基本原理

有了 Cholesky 分解方法计算对称正定线性方程既成水到渠成之事，对于对称正定方程 $\mathbf{Ax = b}$，利用 Cholsky 分解，方程化为

$$\mathbf{LL}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}，\text{等价于}\begin{cases}\mathbf{Ly = b}\\ \mathbf{L^Tx = y}\end{cases}$$

而 $\mathbf{Ly = b}$ 与 $\mathbf{L^Tx = y}$ 都是三角方程，利用前面章节介绍的回带方法，即很容易计算出 $\mathbf{x}$，即得到原方程的解。

这一过程就是 Cholesky 方法或称为平方根法。

2. 实验目的与要求

- 理解 Cholesky 分解方法计算对称正定方程的基本原理。
- 复习三角方程的回带方法。
- 能够编程实现以上算法。

3. 实验内容与数据来源

用 Cholesky 分解方法计算方程组 $\mathbf{Ax = b}$，其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.5 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7.25 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程维数

5. 程序代码

```
module sym p
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Cholesky 分解计算对称正定方程模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,b,x,N)
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::L(N,N),y(N),LT(N,N)
!LT 为 L 的转置矩阵
integer::i,j
call  chol(A,L,N)
call  downtri(L,b,y,N)
do i=1,N
 do j=1,N
    LT(i,j)=L(j,i)
 end do
end do
call uptri(LT,y,x,N)  !这一步已经算出了 x
end subroutine solve
subroutine  chol(A,L,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Cholesky 分解子程序
!-------------------------------------------------------
integer::N
real*8::A(N,N),L(N,N)
integer::i,j,k
L=0
L(1,1)=dsqrt(a(1,1))
L(2:,1)=a(2:,1)/L(1,1)
do j=2,N
   s=0
   do k=1,j-1
   s=s+L(j,k)**2
   end do
   L(j,j)=dsqrt(a(j,j)-s)
   !注意 i 范围
   do i=j+1,N
      s=0
      do k=1,j-1
        s=s+L(i,k)*L(j,k)
```

```
      end do
      L(i,j)=(a(i,j)-s)/L(j,j)
   end do
end do
end subroutine
subroutine uptri(A,b,x,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
subroutine downtri(A,b,x,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  下三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(1)=b(1)/a(1,1)
do k=2,N
   x(k)=b(k)
   do i=1,k-1
      x(k)=x(k)-a(k,i)*x(i)
   end do
   x(k)=x(k)/a(k,k)
end do
end subroutine downtri
end module sym_p
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :  对称正定方程组的计算（Cholesky 分解方法）
!
!-----------------------------------------------------
! data files  :
!      1.  fin.out  输入文件
!      2.  fout.txt 输出文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
use sym_p
integer,parameter::N=3
real*8::A(N,N)
real*8::b(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
read(11,*)b
call solve(A,b,x,N)
write(12,21)
21 format(T5,'对称正定方程组的解为',/)
 write(12,22)x
22 format(T3,3F10.6)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备输入数据 fin.txt，格式如图 1-17 所示。

程序运行后计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 1-18 所示。

```
对称正定矩阵的计算（Chol分解法）

 4     -1     1
-1   4.25  2.75
 1   2.75   3.5

 4
 6
 7.25
```

图 1-17　对称正定方程组的输入数据

```
对称正定方程组的解为

1.000000  1.000000  1.000000
```

图 1-18　方程的解

把方程的解代入原方程可以验证满足原方程。

1.10　行列式的计算

1. 实验基本原理

计算矩阵的行列式可以按照高斯消去法直接进行计算，在已经完成 LU 分解之后也可以利用 LU 分解进行计算。这里采用 Crout 分解法把系数矩阵分解为

$$\mathbf{A = LU}$$

其中 **L** 为下三角矩阵， **U** 为单位上三角矩阵，进而有

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{L})\det(\mathbf{U}) = \det(\mathbf{L}) = \prod_{i=1}^{n} l_{ii}$$

如此便给出了行列式的计算方法。

2. 实验目的与要求

- 复习矩阵的 LU 分解。
- 能自行给出行列式计算的算法。
- 能编程实现对行列式的计算。

3. 实验内容与数据来源

已知

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2.7486 & 1.9022 & 3.8958 & 0.0595 & 2.6427 \\ 4.5860 & 2.8391 & 4.6701 & 1.6856 & 0.8282 \\ 1.4292 & 0.3793 & 0.6495 & 0.8109 & 3.0099 \\ 3.7860 & 0.2698 & 2.8441 & 3.9714 & 1.3149 \\ 3.7686 & 2.6540 & 2.3470 & 1.5561 & 3.2704 \end{pmatrix}$$

要求计算矩阵 **A** 的行列式。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
D	REAL*8	矩阵的行列式
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要计算的矩阵
N	INTEGER	矩阵维数

5. 程序代码

```
module det
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Description :  计算矩阵行列式模块
!
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(A,d,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算矩阵行列式函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  A 矩阵
!      2.  N 矩阵维数
!  Output parameters  :
!      1.    d  矩阵行列式
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i
real*8::A(N,N),L(N,N),U(N,N)
call crout(A,L,U,N)
d=1d0
do i=1,N
   d=d*L(i,i)
end do
end subroutine solve
subroutine crout(A,L,U,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  LU之Crout分解
!            A=LU
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i,k,r
real*8::A(N,N),L(N,N),U(N,N)
!L 第一列
L(:,1)=a(:,1)
!U 第一行
U(1,:)=a(1,:)/L(1,1)
do k=2,N
   do i=k,n
       s=0
      do r=1,k-1
       s=s+l(i,r)*u(r,k)
      end do
      l(i,k)=a(i,k)-s
   end do
```

```
    do j=k+1,n
      s=0
      do r=1,k-1
       s=s+l(k,r)*u(r,j)
      end do
      u(k,j)=(a(k,j)-s)/l(k,k)

    end do
    u(k,k)=1
end do
end subroutine crout
end module det
module driver
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-------------------------------------------------------
!  Description :
!              驱动程序模块
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine dri_main(N)
use det
integer::N
real*8::A(N,N),d
!读入矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
call solve(A,d,N)
write(12,101)
101 format(T5,'该矩阵的行列式为',/)
write(12,*)d
end subroutine dri main
end module driver
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   计算矩阵行列式
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.   fin.txt   读入的数据
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.   fout.txt 计算结果，矩阵的维数由输入卡片读取
!-------------------------------------------------------
use driver
integer::N
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
```

```
    !读入 A 矩阵
    !读入方程维数系数
    read(11,*)N
    !调用驱动函数
    call dri_main(N)
    end program main
```

6. 实验结论

需要准备输入数据文件 fin.txt，格式如图 1-19 所示。

计算结果保存在文件 fou.txt 中，如图 1.20 所示。

```
方阵行列式的计算

   5                : dimension of the matrix

 2.7486    1.9022    3.8958    0.0595    2.6427
 4.5860    2.8391    4.6701    1.6856    0.8282
 1.4292    0.3793    0.6495    0.8109    3.0099
 3.7860    0.2698    2.8441    3.9714    1.3149
 3.7686    2.6540    2.3470    1.5561    3.2704
```

图 1-19　输入数据格式

```
该矩阵的行列式为

 -22.887183372356
```

图 1-20　矩阵行列式计算结果

1.11　矩阵方程的计算

1. 实验基本原理

对于矩阵方程

$$\mathbf{A}_{[N,N]}\mathbf{X}_{[N,M]} = \mathbf{B}_{[N,M]}$$

记 $\mathbf{X}$ 的第 i 列向量为 $\mathbf{X}_i\left(i=1,m\right)$，$\mathbf{B}$ 的第 i 列向量为 $\mathbf{B}_i\left(i=1,m\right)$，则上述方程等价为

$$\begin{cases}\mathbf{AX}_1 = \mathbf{B}_1\\ \mathbf{AX}_2 = \mathbf{B}_2\\ \quad\vdots\\ \mathbf{AX}_m = \mathbf{B}_m\end{cases}$$

但在实际计算时不应该分别求解，如果是这样的话就造成计算机资源极大浪费，而应该是对所有向量一次选主元，然后分别回代。即可以得到方程的解矩阵 $\mathbf{X}_{[N,M]}$。

2. 实验目的与要求

- 了解矩阵方程的计算的基本原理。

- 能够编程对矩阵方程的数值计算。
- 注意不要对方程分别选主元解算。

3. 实验内容与数据来源

计算矩阵方程

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B}$$

其中

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1.80 & 2.88 & 2.05 & -0.89 \\ 525.00 & -295.00 & -95.00 & -380.00 \\ 1.58 & -2.69 & -2.90 & -1.04 \\ -1.11 & -0.66 & -0.59 & 0.80 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 9.52 & 18.47 \\ 2435.00 & 225.00 \\ 0.77 & -13.28 \\ -6.22 & -6.21 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N,M)	矩阵方程的解矩阵
A	REAL*8(N,N)	矩阵方程系数矩阵
B	REAL*8(N,M)	右矩阵
N	INTEGER	方程维数
M	INTEGER	右矩阵的列数

5. 程序代码

```
module mat_eq
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Description : 矩阵方程
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   driver  驱动函数
!     2.   solve   方法函数
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,B,X,N,M)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
```

```
!  Date     :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程组
!               AX=B
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数
!      4.   M 右矩阵的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X 方程的解矩阵
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N,M
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::Aup(N,N),Bup(N,M)
!Ab 为增广矩阵 [AB]
real*8::AB(N,N+M)
real*8::vtemp1(N+M),vtemp2(N+M)
real*8::vtmp(N),xtmp(N)
AB(1:N,1:N)=A
AB(:,N+1:N+M)=B
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)

    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
```

```
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  #  #|
!     [A b]= | 0  *  *  *  #  #|
!           | 0  0  *  *  #  #|
!           | 0  0  0  *  #  #|
!
Aup(:,:)=AB(1:N,1:N)
do i=1,m
!调用用上三角方程组的回带方法
vtmp=AB(:,N+i)
call uptri(Aup,vtmp,xtmp,n)
!把计算结果赋值给 X
X(:,i)=xtmp
end do
end subroutine solve
subroutine uptri(A,b,x,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
subroutine driver(N,M)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 驱动程序
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   N     描述 A(N,N)
!       2.   M     描述方程  X(N,M), B(N,M)
!  Output parameters  :
!       1.
!       2.
!  P.S  :
!     N,M  从文件中读取
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M
integer::i,j
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
!读入系数 A 矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
!读入 B 矩阵
read(11,*)((B(i,j),j=1,M),i=1,N)
call solve(A,B,X,N,M)
write(12,101)
write(12,102)((X(i,j),j=1,m),i=1,n)
!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
102 format(<N>(<m>F16.10/))
!do i=1,m
!
!   do j=1,n
!    write(12,102)j,i,x(j,i)
!   end do
!
!end do
101 format(T4,'消去法计算矩阵方程，版本.1',/)
!102 format(T4,'x(',I2,',',I2,')=',f10.5)
write(12,103)
103 format(/'P.S:本软件既可以计算线性方程组 Ax=b,
! 也可以计算矩阵方程 AX=B')
end subroutine driver
end module mat eq
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  消去法解矩阵方程
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.  fin.txt  输入方程系数
!       2.
!  Output data files  :
!       1. fout.txt  计算结果
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
```

```
!       1.    需要准备输入数据
!       2.    由于驱动函数调用方法函数
!-----------------------------------------------------
use mat_eq
integer::N,M
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读说明文字
!读入方程维数系数
read(11,*)N,M
!调用驱动函数
call driver(N,M)
end program main
```

6. 实验结论

程序要运行需要准备数据文件 fin.txt，输入格式如图 1-21 所示。

```
          矩阵方程的计算

    6    4   : 维数

   0.3536    1.9417    3.9875    6.0472   -1.1708    6.7868
   3.7973    4.7905   -1.0219    3.0987   -0.6007    4.1269
  -1.6345    4.1504   -2.6946    3.1767    5.8651    2.0047
   4.2123    6.0372    4.4407    5.5944   -2.7133    1.7109
  -1.9324    5.9092    2.0002    5.0549    1.8990   -2.4038
   3.5376    0.3416    1.7992    2.7672   -1.3207    3.8197   : END OF MATRIX A

  37.0470   47.8904   43.4260   58.1625
  15.7628   32.4402   39.1398   28.9118
  27.8315   31.5944   13.9424   14.0300
  13.2330   41.2434   63.2477   58.9792
   7.3051   18.5900   30.0510   34.2702
  17.1150   32.1133   32.2324   29.5552  : END OF MATRIX B
```

图 1-21　输入数据

计算结果保存在文件 fou.txt 中，如图 1-22 所示。

```
  消去法计算矩阵方程，版本1.1

   0.2121732635    3.6122334792    4.0016940917    0.8670272755
   0.3572632239    0.7493976331    2.2689460352    1.9546122268
   2.6082553783    3.2981298002    2.1619892132    4.1568916014
   0.4836318352    2.5928760331    4.1266154737    4.0169191135
   4.0907513473    4.8649561369    0.4173970857    0.3023852054
   4.0877427440    3.2449706750    0.6658036012    1.9962224714


P.S:本软件既可以计算线性方程组Ax=b，也可以计算矩阵方程AX=B
```

图 1-22　计算结果

从计算结果可以看到

$$\mathbf{X}=\begin{pmatrix} 0.21217 & 3.61223 & 4.00169 & 0.86703 \\ 0.35726 & 0.74940 & 2.26895 & 1.95461 \\ 2.60826 & 3.29813 & 2.16199 & 4.15689 \\ 0.48363 & 2.59288 & 4.12662 & 4.01692 \\ 4.09075 & 4.86496 & 0.41740 & 0.30239 \\ 4.08774 & 3.24497 & 0.66580 & 1.99622 \end{pmatrix}$$

程序编译并连接以后产生的可执行文件，可以计算一般的线性方程组和形如 **AX = B** 的矩阵方程，只要自行修改输入数据即可。如要计算方程组

$$\begin{pmatrix} -0.7312 & -1.6835 & -2.2759 & 3.2033 & -0.5213 \\ -1.8320 & -5.8451 & -4.0188 & -5.4732 & 3.4274 \\ 0.5686 & 3.8406 & -1.1031 & 1.3786 & -1.8226 \\ 0.2797 & -4.3283 & -2.6051 & -3.3088 & 3.8305 \\ -3.0802 & -4.9378 & 3.5163 & -1.7716 & -2.9855 \end{pmatrix}\mathbf{Y}=\begin{pmatrix} -0.9093 \\ -12.9053 \\ 3.4700 \\ -5.4157 \\ -11.0834 \end{pmatrix}$$

只要将输入卡片改成如图 1-23 所示的格式。

```
          矩阵方程的计算

    5    1    : 维数


  -0.7312   -1.6835   -2.2759    3.2033   -0.5213
  -1.8320   -5.8451   -4.0188   -5.4732    3.4274
   0.5686    3.8406   -1.1031    1.3786   -1.8226
   0.2797   -4.3283   -2.6051   -3.3088    3.8305
  -3.0802   -4.9378    3.5163   -1.7716   -2.9855   : END OF MATRIX A

  -0.9093
 -12.9053
   3.4700
  -5.4157
 -11.0834  : END OF MATRIX B
```

图 1-23　用本软件计算线性方程组输入文件

执行文件后，产生计算结果如图 1-24 所示。

```
  消去法计算矩阵方程，版本1.1

   1.1035170522
   0.9989451250
   0.6173434069
   1.0942914009
   0.9994552047


P.S:本软件既可以计算线性方程组Ax=b，也可以计算矩阵方程AX=B
```

图 1-24　线性方程计算结果

把计算结果代入原方程可以验证计算结果是正确的。

1.12　逆矩阵的计算

1. 实验基本原理

设矩阵 $\mathbf{A}_{[N,N]}$ 为非奇异矩阵，且其逆矩阵存在，记 $\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{X}$，则

$$\mathbf{AX}=\mathbf{I}$$

由此，计算矩阵 A 的逆矩阵可以转化为计算矩阵方程问题，利用上一节介绍的计算方法很容易即可计算出逆矩阵。

实际上，如果没有计算矩阵方程的函数而直接利用消去法也是很容易给出逆矩阵的算法，这里就不多介绍，有兴趣的读者可以参考数值代数专著。

2. 实验目的与要求

- 复习矩阵方程的计算。
- 了解逆矩阵计算的基本原理。
- 能编程实现逆矩阵的计算方法。

3. 实验内容与数据来源

计算矩阵 **A** 的逆矩阵，其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\ 1 & 1 & 2\\ 1 & 2 & -1\end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
INVA	REAL*8(N,N)	逆矩阵
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	欲求逆的矩阵
N	INTEGER	矩阵维数

5. 程序代码

```
module inv mat
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   driver  驱动函数
!     2.   solve   方法函数
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine solve
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
```

```
!  Date     :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程组
!               AX=B
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数
!      4.   M 右矩阵的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X 方程的解矩阵
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N,M
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::Aup(N,N),Bup(N,M)
!Ab 为增广矩阵[AB]
real*8::AB(N,N+M)
real*8::vtemp1(N+M),vtemp2(N+M)
real*8::vtmp(N),xtmp(N)
AB(1:N,1:N)=A
AB(:,N+1:N+M)=B
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
    do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!------------------------------
```

```
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  #  #|
!     [A b]= | 0  *  *  *  #  #|
!           | 0  0  *  *  #  #|
!           | 0  0  0  *  #  #|
!
Aup(:,:)=AB(1:N,1:N)
do i=1,m
!调用用上三角方程组的回带方法
vtmp=AB(:,N+i)
call uptri(Aup,vtmp,xtmp,n)
!把计算结果赋值给 X
X(:,i)=xtmp
end do
end subroutine mateq
subroutine uptri(A,b,x,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
subroutine drive(N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  驱动程序
!               用以读取数据，计算结果并把结果保存于文件中
```

```
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.     fin   输入文件
!       2.     fout  输出文件
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i,j
real*8::A(N,N),invA(N,N)
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
write(12,101)
101 format(/,T12,'逆矩阵为',/)
call solve(A,invA,N)
write(12,102)((invA(i,j),j=1,n),i=1,n)
!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
102 format(<N>(<N>F16.10/))
end subroutine drive
end module inv mat
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  逆矩阵的计算
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.  fin.txt  输入方程系数
!       2.
!  Output data files  :
!       1. fout.txt  计算结果
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.    需要准备输入数据
!       2.    由于驱动函数调用方法函数
!-----------------------------------------------------
use inv mat
integer::N
!N 表示矩阵的维数，由文件读入
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读说明文字
!读入方程维数系数
read(11,*)N
call drive(N)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存于文件 fout.txt 中，打开该文件可以看到结果如图 1-25 所示。

使用本程序时要先准备输入文件，输入文件需要注意格式，输入格式如图 1-26 所示。

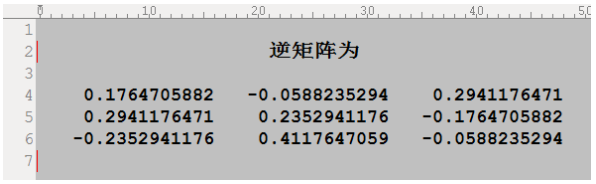


图 1-25　逆矩阵计算结果

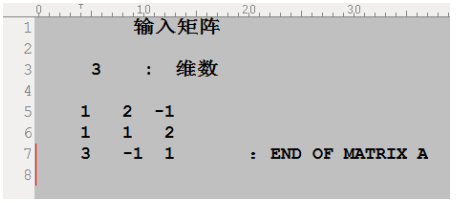


图 1-26　数据输入卡片

1.13　线性方程组解的迭代改进

1. 实验基本原理

一般说来，很难使方程组的解的精度超过计算机浮点数的精度，尤其是对于大型线性方程组，甚至可以说解接近计算机精度都是相当困难的。对于维数较高的方程，在计算中不断有误差累积，造成解丢失两、三位有效数字的情况是时有发生的。

对于这种丢失精度的情况，一个简单可靠的方法可以使解能迅速恢复到计算机精度，即采用解的迭代改进方法，其原理实际上很简单，下面叙述之。

设线性方程组

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$$

的精确解为 $\mathbf{x}$，然而这个精确的 $\mathbf{x}$ 我们却无从知晓。对于上述方程，我们可以采用直接方法计算出带有误差的解 $\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}$。现在我们想办法求出误差，从而使精度得到回复。既然方程的解带有误差，如果把这个带误差的解带入原方程，从而造成右向量 $\mathbf{b}$ 的摄动，即

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta}\mathbf{x})=\mathbf{b}+\boldsymbol{\delta}\mathbf{b}$$

从而我们可以建立残差方程

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}=\mathbf{A}(\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta}\mathbf{x})-\mathbf{b}$$

我们可以通过求解以上方程从而得到改正量 $\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}$，继而我们可以改正方程的解

$$\mathbf{x}_{compute}=(\mathbf{x}+\boldsymbol{\delta}\mathbf{x})-\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}$$

当然，实际上亦不可能求得完全精确的改正量 $\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}$，但是经过一次迭代改进量就会非常小，进而可以循环改进。一般而言，改进一、两次就可以获得比较理想的结果。

2. 实验目的与要求

- 了解解的迭代改进原理。

- 能够建立残差方程并求解之。
- 能通过迭代实现对直接法的解的改进。

3. 实验内容与数据来源

用直接法计算方程 **Ax = b**，其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 3.3435 & 1.4946 & 0.3834 & -1.9537 & -2.4013 & -3.5446 \\ 1.0198 & 6.1618 & 4.9613 & 2.7491 & 3.0007 & -3.6393 \\ 2.3703 & 2.7102 & 4.2182 & 1.1730 & -0.6859 & 3.6929 \\ 1.5408 & 4.1334 & 0.5732 & 5.6869 & 3.1065 & 0.7970 \\ 3.8921 & 3.4762 & 3.9335 & -2.1556 & -6.1815 & 0.4986 \\ 2.4815 & 8.2582 & 4.6190 & -0.0022 & -0.3620 & -8.5505 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{b}=\begin{pmatrix} 5.0537 \\ 0.0228 \\ -3.4177 \\ 7.6380 \\ 0.5575 \\ 9.8252 \end{pmatrix}$$

然后进行解的迭代改进，输出改进序列。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	方程维数

5. 程序代码

```
module iterprove
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Description : 迭代改进模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   solve  方法函数
!     2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.10
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  线性方程组的迭代改进
!
!  Post Script :
!      1.    注意是先调用选主元消去法计算
!      2.    然后计算残差方程
!      3.    再迭代改进
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.       A 系数矩阵
!      2.       b 右向量
!      3.       N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.       x 方程的解
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,N
integer::itmax=5
!默认迭代次
real*8::A(n,n),b(n),x(N),x1(n),x2(n)
real*8::db(N),dx(N)
!先调用一次计算，得到初值
call gauss(A,b,x1,N)
!****************************************
!x1=1d0
! 该语句可以测试在 x1 非常差的情况下计算结果
! 如果要查看可以去掉这 x1=1d0 的注释，
! 而把 call gauss(A,b,x1,N)注释掉
!****************************************
!输出初值
write(12,101)0,x1
do i=1,itmax
  !db 为残差
  db=matmul(A,x1)-b
  call gauss(A,db,dx,N)
  !由此得到改进量 dx
  !x2 为改进后的新解
  x2=x1-dx
```

```
  !更新变量
  x1=x2
  !输出改进结果
  write(12,102)i,x1
end do
x=x1
101 format(/,T25,'迭代改进序列',//,I3,<n>(F10.5))
102 format(I3,<N>(F10.5))
end subroutine solve
subroutine gauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    do i=k+1,n
     if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
        elmax=Ab(i,k)
        id max=i
     end if
    end do
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id max,:)=vtemp1
!
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!------------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
```

```
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine gauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module iterprove
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.  fin.txt  输入方程系数
!      2.
!  Output data files  :
!      1. fout.txt  计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    需要准备输入数据
!
!-----------------------------------------------------
use iterprove
implicit real*8(a-z)
integer,parameter:: N=6
integer::i,j
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
```

```
!读入 A 矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,N),i=1,N)
!读入 B 向量
read(11,*) b
!调用迭代模块
call solve(A,b,x,N)
end program main
```

6. 实验结论

程序编译链接之后，需要准备数据输入文件，格式如图 1-27 所示。

```
迭代改进

  3.3435   1.4946   0.3834  -1.9537  -2.4013  -3.5446
  1.0198   6.1618   4.9613   2.7491   3.0007  -3.6393
  2.3703   2.7102   4.2182   1.1730  -0.6859   3.6929
  1.5408   4.1334   0.5732   5.6869   3.1065   0.7970
  3.8921   3.4762   3.9335  -2.1556  -6.1815   0.4986
  2.4815   8.2582   4.6190  -0.0022  -0.3620  -8.5505

  5.0537
  0.0228
 -3.4177
  7.6380
  0.5575
```

图 1-27　数据输入文件

计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 1-28 所示。

在图 1-28 中，似乎计算结果一直没有变化，实际上是因为第一次结果已经比较好，后面的改正量已经较小，为了排版需要这里输出了小数点后 5 位，如果取小数点位数更多，则可以看到每次都有一定的改进。

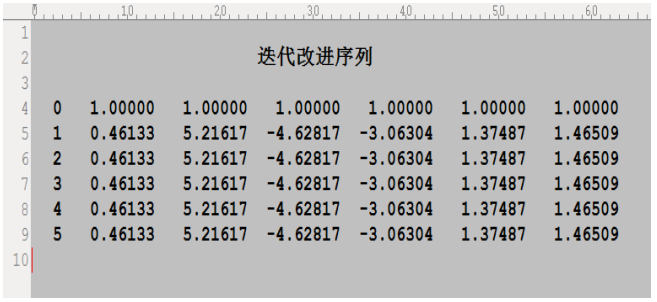
```
迭代改进序列

0   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
1   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
2   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
3   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
4   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
5   0.46133   5.21617  -4.62817  -3.06304   1.37487   1.46509
```

图 1-28　迭代改进序列

如果第一次计算结果较差，则改进效果更明显，如果强制第一次计算结果为

$$x=(1\quad 1\quad 1\quad 1\quad 1\quad 1)^T$$

则迭代一次后，计算结果就会得到明显的改善，结果如图 1-29 所示。



迭代改进序列

0	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
1	0.46133	5.21617	-4.62817	-3.06304	1.37487	1.46509
2	0.46133	5.21617	-4.62817	-3.06304	1.37487	1.46509
3	0.46133	5.21617	-4.62817	-3.06304	1.37487	1.46509
4	0.46133	5.21617	-4.62817	-3.06304	1.37487	1.46509
5	0.46133	5.21617	-4.62817	-3.06304	1.37487	1.46509

图 1-29　第一次解算较差情况下的迭代改进

从计算结果可以看出，迭代改进是相当有效的。

一般而言，迭代改进 1 到 2 次就可以有明显的效果，再进行迭代改进量就已经很小了。迭代改进还有一个好处是可以检验方程解的收敛性。

注意，这里的迭代改进和下一章介绍的线性方程组的迭代法不可混淆。这里依然是采用直接方法计算线性方程，只是如果方程解不是太理想，可以通过求解残差方程以改进原先的计算结果，或者检验方程解的收敛性。

本章小结

本章介绍了常见的线性方程组的计算方法，如选主元消去法，三对角矩阵的追赶法以及矩阵的常见分解方法。

阅读本章内容需要具备线性代数的一些基础知识，如果读者有所遗忘，可以翻阅相关教材。实际上第 3 章将要介绍的正交变换方法也可以用于特定方程组的计算，不过鉴于最小二乘有更多的统计学意义，故而留在第 3 章介绍。

第 2 章

◂解线性方程组的迭代方法方法▸

对于与中小型方程组，一般采用直接法，如果不计舍入误差，直接法能在预定的计算步数内求得方程精确解，计算效率高且很可靠。而对于维数比较高，尤其是大型的稀疏方程组，由于直接法存储量与计算量太大，通常迭代法更有优势。本章将展开常用迭代算法介绍。

2.1 Jacobi迭代法

1. 实验基本原理

设线性方程组

$$\mathbf{AX}=\mathbf{b}$$

的系数矩阵非奇异，且主对角元素 $a_{ii}\neq 0$。令

$$\begin{cases} b_{ij}=-a_{ij}/a_{ii} & i\neq j \\ g_i=b_i/a_{ii} & \text{i=1,2,}\cdots\text{,n} \end{cases}$$

原方程可以改写为

$$\begin{cases} x_1=b_{12}x_2+b_{13}x_3+\cdots+b_{1n}x_n+g_1 \\ x_2=b_{21}x_x+b_{23}x_3+\cdots+b_{2n}x_n+g_2 \\ \vdots \\ x_1=b_{n1}x_1+b_{n2}x_2+\cdots+b_{n,n-1}x_{n-1}+g_n \end{cases}$$

令 $\mathbf{D}=diag(a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn})$， $\mathbf{g}=(g_1,g_2,\cdots g_n)^T$，$\mathbf{B}=\mathbf{D^{-1}(D-A)}=\mathbf{E-D^{-1}A}$

则上述方程用矩阵符号表示既为

$$\mathbf{X}=\mathbf{BX}+\mathbf{g}$$

由此如果我们得到迭代公式 $\mathbf{X}^{(k)}=\mathbf{B}\mathbf{X}^{(k+1)}+\mathbf{g}$，此即 Jacobi 迭代。

2. 实验目的与要求

- 对于给定的线性方程组，能判断是否合适使用 Jacobi 迭代。
- 能够构造出迭代公式。
- 能编程实现 Jacobi 迭代，并处理相关问题。

3. 实验内容与数据来源

应用 Jacobi 迭代法求解如下方程组：

$$\begin{pmatrix}10 & -1 & 0\\ -1 & 10 & -2\\ 0 & -4 & 10\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}9\\ 7\\ 6\end{pmatrix}$$

要求计算精度为10^{-7}。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module jacobi
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : jacobi 迭代法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    IMAX 最大允许迭代次数
```

```
!     2.    tol 误差容限
!  Contains    :
!     1.    solve 雅克比迭代法方法函数
!     2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  雅克比迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  A,b 意义即 AX=b
!      2.  x0 迭代初值
!      3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!      1. x 方程的解
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N)
x1=x0
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,26x,'Jacobi 迭代法',//)
do k=1,IMAX
   do i=1,N
       s=0
       do j=1,N
         if (j==i) cycle
         s=s+A(i,j)*x1(j)
       end do
      x2(i)=(b(i)-s)/A(i,i)
   end do
! 这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
   end do
```

```
    dx2=dsqrt(dx2)
    if (dx2<tol)  exit
!----------------------------------------
    x1=x2
   !记录迭代中间值
     write(102,*)x1
   !----
end do
x=x2
end subroutine solve
end module jacobi
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用雅克比迭代法计算线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. Im_result.txt 计算的中间数据
!      2.  result.txt 计算结果
!-------------------------------------------------------
use jacobi
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=3
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im result.txt')
  x0=(/0d0,0d0,0d0/)
  b=(/9d0,7d0,6d0/)
  A=reshape((/10,-1,0,-1,10,-4,0,-2,10 /),(/3,3/))
  call solve(A,b,x,x0,N)
  write(101,501)x
  501 format(/,T20,'jacobi 迭代法',/,T10,'x(1)',T30,'x(2)',T50,
        'x(3)',/,3F20.15)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后，产生两个数据文件，其中 result.txt 记录了计算结果，如图 2-1 所示。

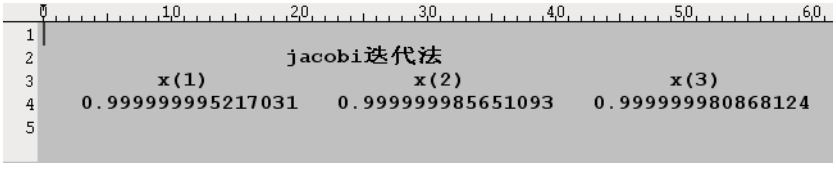


图 2-1　Jacobi 迭代法计算结果

文件 Im_result.txt 记录了中间数据，如表 2-1 所示。

表 2-1　Jacobi 迭代中间结果

迭代序列	x_1	x_2	x_3
1	0.90000000	0.70000000	0.60000000
2	0.97000000	0.91000000	0.88000000
3	0.99100000	0.97300000	0.96400000
4	0.99730000	0.99190000	0.98920000
5	0.99919000	0.99757000	0.99676000
6	0.99975700	0.99927100	0.99902800
7	0.99992710	0.99978130	0.99970840
8	0.99997813	0.99993439	0.99991252
9	0.99999344	0.99998032	0.99997376
10	0.99999803	0.99999410	0.99999213
11	0.99999941	0.99999823	0.99999764
12	0.99999982	0.99999947	0.99999929
13	0.99999995	0.99999984	0.99999979
14	0.99999998	0.99999995	0.99999994

2.2　Gauss-Seidel迭代法

1. 实验基本原理

雅可比迭代法较为简单，方便编程。在雅可比迭代过程中，每次计算出的最新结果，没有用在当次迭代中，而是在一次迭代循环结束后，下一次重新全部使用上次迭代结果。而高斯-赛德尔迭代则把每次迭代的最新结果更新到当前迭代步骤中。

对于方程 **Ax = b**，把系数矩阵做如下分裂

$$\mathbf{A} = \mathbf{D}(\mathbf{I} - \mathbf{L}) - \mathbf{DU}$$

其中

$$\mathbf{D} = \mathrm{diag}(a_{11} \quad a_{22} \quad \cdots \quad a_{nn})$$

$$\mathbf{L}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\dfrac{a_{31}}{a_{33}} & -\dfrac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\dfrac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & \cdots & -\dfrac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}=\begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & -\dfrac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\dfrac{a_{1,n-1}}{a_{11}} & -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}} \\ 0 & 0 & -\dfrac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\dfrac{a_{2,n-1}}{a_{22}} & -\dfrac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\dfrac{a_{n-1,n}}{a_{n-1,n-1}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

高斯-赛德尔迭代格式为

$$\mathbf{x}_k=\mathbf{L}\mathbf{x}_k+\mathbf{U}\mathbf{x}_{k-1}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$$

分量形式为

$$x_i^{(k)}=\frac{1}{a_{ii}}\left(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{(k)}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^{(k-1)}\right)$$

$$i=1,\cdots,n,\quad k=1,2,\cdots$$

上标 k 表示第 k 次迭代，下标 i 表示方程的第 i 个分量。从分量形式很容易看出计算原理。

2. 实验目的与要求

- 了解算法中各表达式的意义。
- 了解高斯-赛德尔迭代法的构造步骤。
- 熟悉高斯-赛德尔迭代法的矩阵形式与分量形式。
- 能够编程实现该算法。

3. 实验内容与数据来源

用高斯-赛德尔迭代法计算上一个实验中的方程，要求精度控制在10^{-7}。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module gs
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : GS 迭代法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.    IMAX 最大允许迭代次数
!      2.    tol 误差容限
!  Contains    :
!      1.    solve GS 迭代法方法函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  GS 迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!       1.  A,b 意义即 AX=b
!       2.  x0 迭代初值
!       3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!       1. x 方程的解
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'G-S 迭代法',//)
!迭代之前两值都设为初值
x1=x0
x2=x1
do k=1,IMAX
   do i=1,N
       s=0
       do j=1,N
      !------------------------
      !这段为 GS 迭代法的核心部分
      !如果 j<i 则表示这些量已经更新过了，则下一个元素就用最新的量计算
      !如果 j>i 则还没有计算到这些量，所以就用上一次迭代的结果
       if (j<i) then
        s=s+A(i,j)*x2(j)
       else if (j>i) then
       s=s+A(i,j)*x1(j)
       end if
       end do
      !------------------------
      x2(i)=(b(i)-s)/A(i,i)
   end do
!这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
   end do
   dx2=dsqrt(dx2)
   if (dx2<tol)  exit
!---------------------------------------
   x1=x2
  !记录迭代中间值
    write(102,502)k,x1
    502 format(I3,3F12.8)
  !----
end do
x=x2
end subroutine solve
end module gs
```

```
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 G-S 迭代法计算线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. Im_result.txt 计算的中间数据
!      2.  result.txt 计算结果
!-------------------------------------------------------
use gs
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=3
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im_result.txt')
  x0=(/0d0,0d0,0d0/)
  b=(/9d0,7d0,6d0/)
  A=reshape((/10,-1,0,-1,10,-4,0,-2,10 /),(/3,3/))
  call solve(A,b,x,x0,N)
  write(101,501)x
  501 format(/,T20,'G-S 迭代法',/,T10,'x(1)',T30,'x(2)',T50,'x(3)',/,3F20.15)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后生成两个数据文件，其中 result.txt 记录了计算结果，如图 2-2 所示。

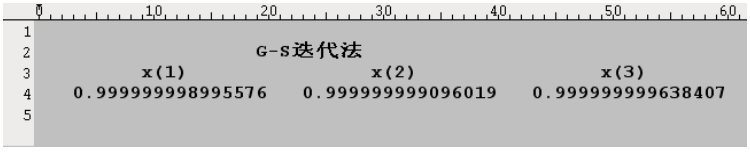


图 2-2　高斯-赛的人迭代法计算结果

文件 Im_result.txt 记录了详细的计算过程，如表 2-2 所示。

表 2-2　高斯-赛德尔迭代法计算的中间结果

迭代序列	x_1	x_2	x_3
1	0.90000000	0.79000000	0.91600000
2	0.97900000	0.98110000	0.99244000
3	0.99811000	0.99829900	0.99931960
4	0.99982990	0.99984691	0.99993876
5	0.99998469	0.99998622	0.99999449
6	0.99999862	0.99999876	0.99999950

7	0.99999988	0.99999989	0.99999996
8	0.99999999	0.99999999	1.00000000

因为在计算中，对每个分量的计算都用了最近更新的值，所以一般而言高斯-赛德尔迭代法要比雅克比迭代法快一些，不过这也不是绝对的。

2.3 逐次超松弛迭代法

1. 实验基本原理

有时候雅可比迭代或者高斯-赛德尔迭代收敛速度不够快，于是发展了逐次松弛迭代法，迭代格式如下

$$x_i^{k+1}=\frac{1}{a_{ii}}\left[(1-\omega)x_i^k+\omega\left(-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}x_j^{k+1}-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j^k+b_i\right)\right]$$

$$i=1,\cdots,n,\quad k=1,2,\cdots$$

其中 ω 称为松弛因子。可以看出当 $\omega=1$ 时即为高斯-赛德尔迭代，当松弛因子大于 1 时称为逐次超松弛迭代，松弛因子小于 1 时称为逐次低松弛迭代。不过，有时都统称为逐次超松弛迭代，或简称 SOR 迭代方法。

不过在实际应用时，松弛因子的选择往往是比较麻烦的事，对于一般情形，目前并未见有绝对好的松弛因子选择方法。这有时需要经验，甚至是反复试验。

2. 实验目的与要求

- 了解 SOR 迭代法的大致含义。
- 知道高斯-赛德尔迭代是 SOR 的特殊情况。
- 能够编程实现 SOR 迭代法。
- 分析计算的中间结果。

3. 实验内容与数据来源

采用逐次超松弛迭代法计算方程组

$$\begin{pmatrix} 5 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 10 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 10 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 8 \\ 34 \end{pmatrix}$$

取松弛因子 $\omega = 1.2$，迭代初值从 $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 出发。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module sor
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : SOR 迭代法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    IMAX 最大允许迭代次数
!     2.    tol 误差容限
!     3.    omiga 松弛因子
!  Contains    :
!     1.    solve SOR 迭代法方法函数
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
```

```
real*8::omiga=1.2
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  SOR 迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A,b 意义即 AX=b
!       2.  x0 迭代初值
!       3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!       1. x 方程的解
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'SOR 迭代法',//)
!迭代之前两值都设为初值
x1=x0
x2=x1
do k=1,IMAX
   do i=1,N
       s=0
       do j=1,N
      !------------------------
      !如果 j<i 则表示这些量已经更新过了，则下一个元素就用最新的量计算
      !如果 j>i 则还没有计算到这些量，所以就用上一次迭代的结果
       if (j<i) then
        s=s+A(i,j)*x2(j)
       else if (j>i) then
       s=s+A(i,j)*x1(j)
       end if
       end do
      !------------------------
      x2(i)=(b(i)-s)*omiga/A(i,i)+(1-omiga)*x1(i)
   end do
!这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
   end do
   dx2=dsqrt(dx2)
```

```
    if (dx2<tol)  exit
  !---------------------------------------
    x1=x2
   !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x1
     502 format(I3,4F12.8)
   !----
  end do
  x=x2
  end subroutine solve
  end module sor
  program  main
  !---------------------------------------program comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010-4-5
  !-------------------------------------------------------
  !  Purpose   :  采用 SOR 迭代法计算线性方程
  !
  !-------------------------------------------------------
  !  In put data  files :
  !       1.
  !       2.
  !  Output data files  :
  !       1. Im_result.txt 计算的中间数据
  !       2.  result.txt 计算结果
  !-------------------------------------------------------
  use sor
  implicit real*8(a-z)
  integer,parameter::N=4
  real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
    open(unit=101,file='result.txt')
    open(unit=102,file='Im result.txt')
    x0=(/0d0,0d0,0d0,0d0/)
    b=(/-4,12,8,34/)
    A=reshape((/5,-1,-1,-1,&
              -1,10,-1,-1,&
              -1,-1,5,-1,&
              -1,-1,-1,10 /),(/4,4/))
    call solve(A,b,x,x0,N)
    write(101,501)x
    501 format(/,T10,'SOR 迭代法',//,&
                2x,'x(1)=',F15.8,/,&
                2x,'x(2)=',F15.8,/,&
                2x,'x(3)=',F15.8,/,&
                2x,'x(4)=',F15.8,/)
  end program main
```

6. 实验结论

程序运行后生成两个数据文件，其中 result.txt 存放计算结果，如图 2-3 所示。

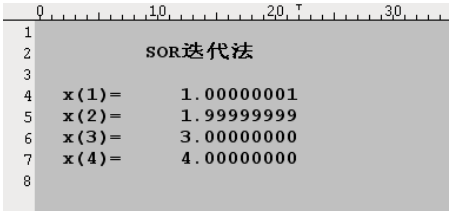


图 2-3 逐次超松弛迭代法计算结果

文件 Im_result.txt 记录了计算的中间结果，如表 2-3 所示。

表 2-3 逐次超松弛迭代计算的中间结果

迭代序列	x_1	x_2	x_3	x_4
1	-0.96000004	1.32480005	2.00755208	4.36468242
2	1.07928838	2.06922277	3.32165609	3.98348357
3	1.07398931	2.03165092	2.95705848	4.01082713
4	0.98509090	1.98802700	3.00473511	3.99517693
5	1.00008719	2.00239451	2.99849105	4.00108134
6	1.00045462	1.99952434	3.00055626	3.99984796
7	0.99989193	2.00013067	2.99985768	4.00001604
8	1.00002267	1.99996143	3.00002850	3.99999830
9	0.99999264	2.00001005	2.99999454	4.00000001
10	1.00000257	1.99999764	3.00000115	4.00000016
11	0.99999923	2.00000054	2.99999975	3.99999991

（续表）

迭代序列	x_1	x_2	x_3	x_4
12	1.00000020	1.99999988	3.00000005	4.00000003
13	0.99999995	2.00000003	2.99999999	3.99999999

2.4 Richardson同步迭代法

1. 实验基本原理

Richardson 迭代法也是带参数的迭代方法，计算过程较为简单，迭代格式为

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k}-\omega(\mathbf{Ax}-\mathbf{b}),k=1,2,\cdots$$

与松弛迭代法一样在 Richardson 迭代中，因子 ω 的选择也是较为麻烦的，未有一般方法给出最优的因子。

2. 实验目的与要求

- 了解 Richardson 迭代法的矩阵与分量形式。
- 能够编程实现 Richardson 迭代方法。
- 分析计算的中间结果。

3. 实验内容与数据来源

采用 Ricardson 同步迭代法计算方程组

$$\begin{pmatrix} 0.8 & -0.01 & 0.12 \\ -0.01 & 0.84 & 0.05 \\ 0.12 & 0.05 & 0.88 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

迭代初值选择 $\mathbf{x}_0 = (0,0,0)^T$， $\omega = 1.2$ 。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module RF
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : RF 迭代法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    IMAX--最大允许迭代次数
!     2.    tol--误差容限
!     3.    omiga --RF 因子
```

```
!  Contains    :
!      1.    solve RF 迭代法方法函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
real*8::omiga=1.5
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  RF 迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  A,b 意义即 AX=b
!      2.  x0 迭代初值
!      3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!      1. x 方程的解
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'RF 迭代法',//)
x1=x0
do k=1,IMAX
   do i=1,N
        s=0
        do j=1,N
        s=s+A(i,j)*x1(j)
        end do
       !------------------------
  !RF 迭代更新
       x2(i)=x1(i)-omiga*(s-b(i))
   end do
 !这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
```

```
    end do
    dx2=dsqrt(dx2)
    if (dx2<tol)  exit
  !----------------------------------------
    x1=x2
   !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x1
     502 format(I3,3F12.8)
   !----
  end do
  x=x2
  end subroutine solve
  end module RF
  program  main
  !--------------------------------------program comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010-4-5
  !-------------------------------------------------------
  !  Purpose   :  采用 RF 迭代法计算线性方程
  !
  !-------------------------------------------------------
  !  In put data  files :
  !      1.
  !      2.
  !  Output data files  :
  !      1. Im result.txt 计算的中间数据
  !      2.  result.txt 计算结果
  !-------------------------------------------------------
  use RF
  implicit real*8(a-z)
  integer,parameter::N=3
  real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
    open(unit=101,file='result.txt')
    open(unit=102,file='Im result.txt')
    x0=(/0d0,0d0,0d0/)
    b=(/1,1,1/)
    A=reshape((/0.8,-0.01,0.12,&
              -0.01,0.84,0.05,&
              0.12,0.05,0.88/),(/3,3/))
    call solve(A,b,x,x0,N)
    write(101,501)x
    501 format(/,T10,'RF 迭代法',//,&
                2x,'x(1)=',F15.8,/,&
                2x,'x(2)=',F15.8,/,&
                2x,'x(3)=',F15.8,/)
  end program main
```

6. 实验结论

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 记录了计算结果，如图 2-4 所示。

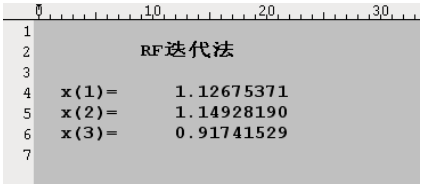


图 2-4 Richardson 迭代法的计算结果

文件 Im_result.txt 记录了计算的中间结果，如表 2-4 所示。

表 2-4 迭代序列

迭代序列	x_1	x_2	x_3
1	1.50000000	1.50000000	1.50000000
2	0.95249998	1.02000006	0.63750002
3	1.21004999	1.20127502	1.04805000
4	1.08736011	1.12721554	0.85671939
5	1.14522671	1.15898045	0.94558382
6	1.11813426	1.14492474	0.90434885
7	1.13076421	1.15126546	0.92347486
8	1.12489065	1.14837187	0.91460559
9	1.12761843	1.14970130	0.91871801
10	1.12635257	1.14908813	0.91681133
11	1.12693975	1.14937157	0.91769531
12	1.12666745	1.14924038	0.91728549
13	1.12679371	1.14930114	0.91747548
14	1.12673517	1.14927299	0.91738740
15	1.12676231	1.14928604	0.91742824
16	1.12674973	1.14927999	0.91740931
17	1.12675556	1.14928279	0.91741808
18	1.12675286	1.14928149	0.91741401
19	1.12675411	1.14928210	0.91741590
20	1.12675353	1.14928182	0.91741502
21	1.12675380	1.14928195	0.91741543

（续表）

迭代序列	x_1	x_2	x_3
22	1.12675367	1.14928189	0.91741524
23	1.12675373	1.14928192	0.91741533

2.5 广义Richardson迭代法

1. 实验基本原理

广义的 Rrichardson 迭代法与 Rrichardson 迭代法类似，仅仅是每一个分量允许有独自的因

子参数。迭代格式为

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k}-\boldsymbol{\Omega}\left(\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\right),k=1,2,\cdots$$

其中

$$\boldsymbol{\Omega}=\begin{pmatrix}\omega_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \omega_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \omega_n\end{pmatrix}$$

可以看到因子矩阵为对角矩阵，因子的选择较 Richardson 迭代有更大的自由度。

2. 实验目的与要求

- 了解广义 Richardson 迭代格式。
- 能够编程实现该算法。
- 分析迭代中间结果。

3. 实验内容与数据来源

采用广义的 Richardson 迭代法计算上一个实验中的方程，迭代初值选 $\mathbf{x}_0=(0,0,0)^T$，$\omega=(1.18,1.17,1.23)^T$，要求精度达到$10^{-7}$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵

（续表）

输入参变量	数据类型	变量说明
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module GRF
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : 广义 RF 迭代法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.    IMAX--最大允许迭代次数
!      2.    tol--误差容限
!      3.
!  Contains    :
!      1.    solve RF 迭代法方法函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,omiga,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  广义 RF 迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A,b 意义即 AX=b
!       2.  x0 迭代初值
!       3.  N 方程的维数
!       4. omiga 这里 omiga 为向量是 GRF 迭代因子（对角阵，简化为向量）
!  Output parameters  :
!       1. x 方程的解
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N),omiga(N)
!写入标题
```

```
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'GRF 迭代法',//)
x1=x0
do k=1,IMAX
   do i=1,N
       s=0
       do j=1,N
       s=s+A(i,j)*x1(j)
       end do
      !------------------------
  !GRF 迭代更新
      x2(i)=x1(i)-omiga(i)*(s-b(i))
   end do
 !这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
   end do
   dx2=dsqrt(dx2)
   if (dx2<tol)  exit
!---------------------------------------
   x1=x2

  !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x1
     502 format(I3,3F12.8)
  !----
end do
x=x2
end subroutine solve
end module GRF
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 GRF 迭代法计算线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. Im_result.txt 计算的中间数据
!      2.  result.txt 计算结果
!-------------------------------------------------------
use GRF
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=3
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N),omiga(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im result.txt')
  x0=(/0d0,0d0,0d0/)
  b=(/1,1,1/)
```

```
    A=reshape((/0.8,-0.01,0.12,&
              -0.01,0.84,0.05,&
              0.12,0.05,0.88/),(/3,3/))
    omiga=(/1.18,1.17,1.23/)
    call solve(A,b,x,x0,omiga,N)
    write(101,501)x
    501 format(/,T10,'GRF迭代法',//,&
                2x,'x(1)=',F15.8,/,&
                2x,'x(2)=',F15.8,/,&
                2x,'x(3)=',F15.8,/)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 记录了计算结果，如图 2-5 所示。

图 2-5 广义 Richardson 迭代法计算结果

文件 Im_result.txt 记录了计算的中间结果，如表 2-5 所示。

表 2-5 广义 Richardson 迭代的中间结果

迭代序列	x_1	x_2	x_3
1	1.17999995	1.16999996	1.23000002
2	1.08571799	1.13197503	0.88252501
3	1.12919196	1.15054519	0.92741151
4	1.12548970	1.14874738	0.91615404
5	1.12685522	1.14933171	0.91773867
6	1.12671420	1.14926503	0.91737061
7	1.12675763	1.14928377	0.91742585
8	1.12675246	1.14928137	0.91741374
9	1.12675386	1.14928197	0.91741565
10	1.12675367	1.14928189	0.91741525

2.6 acobi超松弛迭代法

1. 实验基本原理

雅可比超松弛迭代格式为

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k}-\omega\mathbf{D}^{-1}\left(\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\right),k=1,2,\cdots$$

其中

$$\mathbf{D}=\begin{pmatrix}a_{11} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & a_{22} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix}$$

D 为原方程系数矩阵对角元素组成的对角阵。实际计算编程时是按照分量编写，而不是对对角阵求逆（对角阵的逆实为对角元素各自倒数）。可以看到该算法与广义的 Richardson 迭代法非常类似。甚至于，如果广义的 Richardson 迭代法每次的因子如果都相同的话，则两者可以互相转化。

2. 实验目的与要求

- 了解雅可比超松弛迭代法迭代格式。
- 比较与广义 Richardson 迭代法的异同。
- 能编程实现该算法。
- 分析计算的中间结果。

3. 实验内容与数据来源

采用雅克比超松弛迭代法计算方程组

$$\begin{pmatrix}7 & 2 & 1 & -2\\ 9 & 15 & 3 & -2\\ -2 & -2 & 11 & 5\\ 1 & 3 & 2 & 13\end{pmatrix}\mathbf{x}=\begin{pmatrix}4\\ 7\\ -1\\ 0\end{pmatrix}$$

迭代初值取

$$\mathbf{x}_0=\left(0,0,0,0\right)^T$$

松弛因子取 $\omega=1.04$ 。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module JOR
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : 雅克比超松弛迭代法
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.    IMAX--最大允许迭代次数
!      2.    tol--误差容限
!      3.    omiga --因子
!  Contains    :
!      1.    solve 迭代法方法函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
real*8::omiga=1.04
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  雅克比超松弛迭代法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A,b 意义即 AX=b
!       2.  x0 迭代初值
```

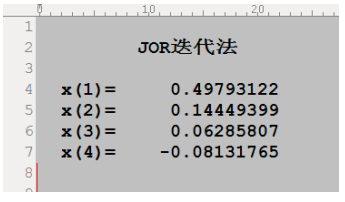
```
!      3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!      1. x 方程的解
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'JOR 迭代法',//)
x1=x0
do k=1,IMAX
   do i=1,N
        s=0
        do j=1,N
        s=s+A(i,j)*x1(j)
        end do
       !------------------------
  !迭代更新
      x2(i)=x1(i)-omiga*(s-b(i))/a(i,i)
   end do
!这段程序用于判断精度，满足精度时退出循环
   dx2=0
   do i=1,N
    dx2=dx2+(x1(i)-x2(i))**2
   end do
   dx2=dsqrt(dx2)

   if (dx2<tol)  exit
!----------------------------------------
   x1=x2
  !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x1
     502 format(I3,4F12.8)
  !----
end do
x=x2
end subroutine solve
end module JOR
program  main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用雅克比超松弛迭代法计算线性方程
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
```

```
!       2.
!  Output data files  :
!       1. Im_result.txt 计算的中间数据
!       2.  result.txt 计算结果
!-------------------------------------------------------
use JOR
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=4
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im_result.txt')
  x0=(/0d0,0d0,0d0,0d0/)
  b=(/4,7,-1,0/)
  A=reshape((/7,9,-2,1,&
            2,15,-2,3,&
            1,3,11,2,&
            -2,-2,5,13/),(/4,4/))
  call solve(A,b,x,x0,N)
  write(101,501)x
  501 format(/,T10,'JOR 迭代法',//,&
              2x,'x(1)=',F15.8,/,&
              2x,'x(2)=',F15.8,/,&
              2x,'x(3)=',F15.8,/,&
              2x,'x(4)=',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 2-6 所示。

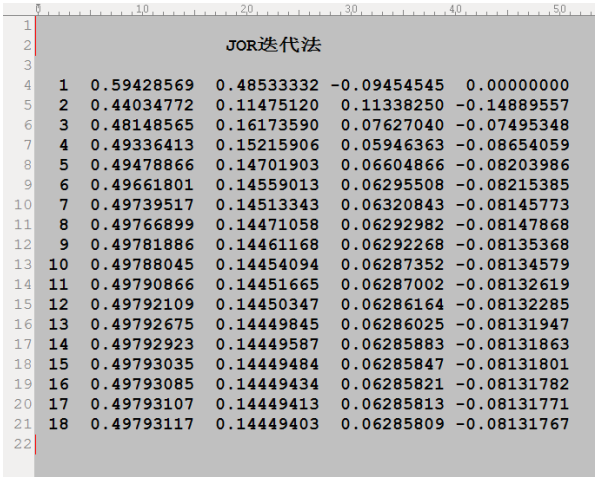
中间结果保存在文件中，如图 2-7 所示。



JOR迭代法

x(1)= 0.49793122
x(2)= 0.14449399
x(3)= 0.06285807
x(4)= -0.08131765

图 2-6 雅可比松弛迭代法



JOR迭代法

1	0.59428569	0.48533332	-0.09454545	0.00000000
2	0.44034772	0.11475120	0.11338250	-0.14889557
3	0.48148565	0.16173590	0.07627040	-0.07495348
4	0.49336413	0.15215906	0.05946363	-0.08654059
5	0.49478866	0.14701903	0.06604866	-0.08203986
6	0.49661801	0.14559013	0.06295508	-0.08215385
7	0.49739517	0.14513343	0.06320843	-0.08145773
8	0.49766899	0.14471058	0.06292982	-0.08147868
9	0.49781886	0.14461168	0.06292268	-0.08135368
10	0.49788045	0.14454094	0.06287352	-0.08134579
11	0.49790866	0.14451665	0.06287002	-0.08132619
12	0.49792109	0.14450347	0.06286164	-0.08132285
13	0.49792675	0.14449845	0.06286025	-0.08131947
14	0.49792923	0.14449587	0.06285883	-0.08131863
15	0.49793035	0.14449484	0.06285847	-0.08131801
16	0.49793085	0.14449434	0.06285821	-0.08131782
17	0.49793107	0.14449413	0.06285813	-0.08131771
18	0.49793117	0.14449403	0.06285809	-0.08131767

图 2-7 计算的中间结果

可以看到迭代 18 次满足设定的精度需求。

2.7　最速下降法

1. 实验基本原理

除了前面介绍的迭代方法之外，还可以从变分的角度给出一些列迭代算法，这一小节的最速下降法与下一节的共轭梯度法即属于此类算法。这里给出最速下降法的算法描述。

输入：方程系数矩阵 $\mathbf{A}$，方程右向量 $\mathbf{b}$，最大允许的迭代次数 IMAX，误差容限 TOL，迭代初值 $\mathbf{x}_0$。

输出：方程的根 $\mathbf{x}$，以及迭代次数等信息。

01 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0$。

02 对 $k = 1, IMAX$，做03~07处理。

03 $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$。

04 $\alpha = \dfrac{(\mathbf{r},\mathbf{r})}{(\mathbf{A}\mathbf{r},\mathbf{r})}$。

05 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \alpha\mathbf{r}$。

06 如果 $|\alpha\mathbf{r}| < TOL$ 则退出循环。

07 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$。

08 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_2$。

09 结束。

2. 实验目的与要求

- 了解最速下降法的意义。
- 从最优化的角度考虑最速下降法。
- 能够编程实现该方法，并计算相关方程。

3. 实验内容与数据来源

采用最速下降算法计算上一实验中的方程组，即

$$\begin{pmatrix} 7 & 2 & 1 & -2 \\ 9 & 15 & 3 & -2 \\ -2 & -2 & 11 & 5 \\ 1 & 3 & 2 & 13 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

迭代初值取

$$\mathbf{x}_0 = (0,0,0,0)^T$$

要求精度达到10^{-7}。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module sd
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : 最速下降法
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    IMAX--最大允许迭代次数
!     2.    tol--误差容限
!
!  Contains    :
!     1.    solve 迭代法方法函数
!     2.
!     3.    dr(r,N) 计算向量长度平方函数
!     4.     Ar(A,r,N)  计算矩阵乘以向量函数，返回向量
!     5.    rAr(A,r,N)   计算（Ar,r）函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.    里面的三个函数，可以简化程序，同时可以用在其他地方
!     2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
```

```
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  最速下降法函数
!               用于计算方程 AX=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A,b 意义即 AX=b
!       2.  x0 迭代初值
!       3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!       1. x 方程的解
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
real*8::r(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'最速下降法',//)
x1=x0
do k=1,IMAX
    r=b-Ar(A,x1,N)
    temp1=dr(r,N)
    temp2=rAr(A,r,N)
    afa=temp1/temp2
    x2=x1+afa*r
     !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x2
     502 format(I3,4F12.8)
    !----
    ! 判断迭代停止标准，实际上 x1-x2 就直接等于 afa*r
    dx2=dr(afa*r,N)
    dx=dsqrt(dx2)
    if (dx<tol) exit
    !---------
    !更新结果
    x1=x2
end do
     x=x2
end subroutine solve
function dr(r,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
! Coded by : syz
! Date     :
!-------------------------------------------------------
! Purpose  : 计算向量长度平方 (r,r)
!
!-------------------------------------------------------
! Input parameters :
!      1.    r向量
!      2.    N维数
! Output parameters :
!      1.    dr 长度平方
!      2.
! Common parameters :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i
real*8::r(N),dr
s=0
do i=1,N
  s=s+r(i)**2
end do
dr=s
end function dr
function Ar(A,r,N)
!---------------------------------subroutine comment
! Version  : V1.0
! Coded by : syz
! Date     :
!-------------------------------------------------------
! Purpose  : !计算 A*r,返回N维向量
!
!-------------------------------------------------------
! Input parameters :
!      1.    r向量
!      2.    N维数
!      3.    A矩阵
! Output parameters :
!      1.    Ar返回向量
!      2.
! Common parameters :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,N
real*8::A(N,N),r(N),temp(N),Ar(N)
temp=0
do i=1,N
  do j=1,n
    temp(i)=temp(i)+A(i,j)*r(j)
  end do
end do
Ar=temp
end function ar
function v1v2(v1,v2,N)
```

```
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 向量点乘  v1v2=v1(1)*v2(1)+v1(2)*v(2)+...
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   v1,v2 向量
!      2.   N 向量维数
!  Output parameters  :
!      1.   v1,v2 向量点乘值
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
real*8::v1(n),v2(n)
integer::i
v1v2=0
do i=1,n
 v1v2=v1v2+v1(i)*v2(i)
end do
end function v1v2
function rAr(A,r,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  !计算（Ar,r）,返回标量
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     r 向量
!      2.     N 维数
!      3.     A 矩阵
!  Output parameters  :
!      1.     Ar 返回标量
!      2.
!  Common parameters  :
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,N
real*8::A(N,N),r(N),temp(N)
temp=Ar(A,r,N)
rAr=v1v2(r,temp,N)
```

```
end function rAr
end module sd
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用最速下降法计算线性方程
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. Im_result.txt 计算的中间数据
!      2.  result.txt 计算结果
!-----------------------------------------------------
use sd
implicit real*8(a-z)
integer,parameter::N=4
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im result.txt')
  x0=(/0d0,0d0,0d0,0d0/)
  b=(/4,7,-1,0/)
  A=reshape((/7,9,-2,1,&
            2,15,-2,3,&
            1,3,11,2,&
            -2,-2,5,13/),(/4,4/))
  call solve(A,b,x,x0,N)
  write(101,501)x
  501 format(/,T10,'最速下降法',//,&
              2x,'x(1)=',F15.8,/,&
              2x,'x(2)=',F15.8,/,&
              2x,'x(3)=',F15.8,/,&
              2x,'x(4)=',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后生成两个数据文件，result.txt 记录了计算结果，如图 2-8 所示。Im_result.txt 记录了中间数据，如图 2-9 所示。

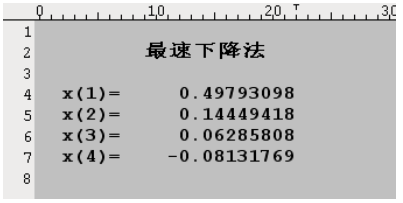


图 2-8　最速下降法计算结果

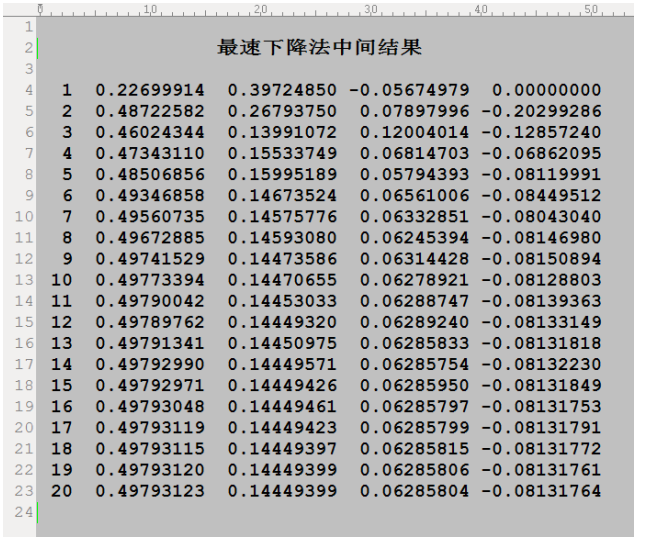


图 2-9　最速下降法计算的迭代序列

迭代次数与方程系数有关，也与设置的精度有关系，同等情况下，一般设置精度越高，迭代次数会更多。

2.8　共轭梯度法

1. 实验基本原理

共轭梯度法又称共轭斜量法，对于系数矩阵是对称正定的矩阵线性方程组，共轭梯度法算法如下：

01 设置初值 $\mathbf{x}^0$。

02 $\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0, \mathbf{p}^0 = \mathbf{r}^0$

03 对于 $k = 1, 2, 3...$

$$\alpha_k = \frac{\left(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right)}{\left(\mathbf{p}^k, \mathbf{A}\mathbf{p}^k\right)}$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}^k$$

$$\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \alpha_k \mathbf{A}\mathbf{p}^k$$

$$\beta_k = \frac{\left(\mathbf{r}^{k+1}, \mathbf{r}^{k+1}\right)}{\left(\mathbf{r}^{k}, \mathbf{r}^{k}\right)}$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{r}^{k+1} + \beta_k \mathbf{p}^{k}$$

在03中，可以设置循环 k 的最大允许迭代次数，然后在03内部，给出精度判断，当满足精度时，退出循环。

2. 实验目的与要求

- 了解共轭梯度法适用范围。
- 了解共轭梯度法的基本原理。
- 能够理解算法中公式的含义。
- 能够编程实现共轭梯度法计算相关线性方程问题。

3. 实验内容与数据来源

采用共轭梯度法计算以下方程

$$\begin{pmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ 7 & 10 & 8 & 7 \\ 6 & 8 & 10 & 9 \\ 5 & 7 & 9 & 10 \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 62 \\ 87 \\ 91 \\ 90 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	计算结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	系数矩阵
B	REAL*8(N)	A*X=B 中的右向量
N	INTEGER	方程维数
X0	REAL*8(N)	迭代初值

5. 程序代码

```
module conj
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-5
!-------------------------------------------------------
!  Description : 共轭梯度法
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    IMAX--最大允许迭代次数
!     2.    tol--误差容限
!
!  Contains    :
!     1.    solve 迭代法方法函数
!     2.
!     3.    dr(r,N) 计算向量长度平方函数
!     4.     Ar(A,r,N)  计算矩阵乘以向量函数，返回向量
!     5.    rAr(A,r,N)   计算（Ar,r）函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.    里面的三个函数，可以简化程序，同时可以用在其他地方
!     2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::IMAX=200
real*8::tol=1d-7
contains
subroutine solve(A,b,x,x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  共轭梯度法
!               用于计算方程 AX=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  A,b 意义即 AX=b
!      2.  x0 迭代初值
!      3.  N 方程的维数
!  Output parameters  :
!      1. x 方程的解
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j,k
real*8::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
```

```
real*8::r0(N),r1(N),p0(N),p1(N)
real*8::x1(N),x2(N)
!写入标题
  write(102,501)
  501 format(//,18x,'共轭梯度法中间结果',//)
x1=x0
r0=b-Ar(A,x1,N)
p0=r0
do k=1,IMAX
    tmp1=dr(r0,N)
    tmp2=rAr(A,p0,N)
    afa=tmp1/tmp2
    x2=x1+afa*p0
     !记录迭代中间值
     write(102,502)k,x2
     502 format(I3,4F12.8)
    !如果 r0 接近于，则停止迭代
    !该部分算法在《数值分析原理》（李庆扬、关治、
    !白峰彬编）中叙述较为详细
    dr_s=dsqrt(dr(r0,N))
    if (dr s<tol) exit
    r1=r0-afa*Ar(A,p0,N)
    tmp3=dr(r1,N)
    beta=tmp3/tmp1
    p1=r1+beta*p0
    !全部更新
    r0=r1
    p0=p1
    x1=x2
end do
     x=x2
end subroutine solve
function dr(r,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算向量长度平方 (r,r)
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     r 向量
!      2.     N 维数
!  Output parameters  :
!      1.     dr 长度平方
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,i
real*8::r(N),dr
s=0
do i=1,N
```

```
  s=s+r(i)**2
end do
dr=s
end function dr
function Ar(A,r,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  !计算 A*r,返回 N 维向量
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.     r 向量
!       2.     N 维数
!       3.     A 矩阵
!  Output parameters  :
!       1.     Ar 返回向量
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,N
real*8::A(N,N),r(N),temp(N),Ar(N)
temp=0
do i=1,N
  do j=1,n
    temp(i)=temp(i)+A(i,j)*r(j)
  end do
end do
Ar=temp
end function ar
function v1v2(v1,v2,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 向量点乘  v1v2=v1(1)*v2(1)+v1(2)*v(2)+...
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!       3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   v1,v2 向量
!       2.   N 向量维数
!  Output parameters  :
!       1.   v1,v2 向量点乘值
!       2.
!  Common parameters  :
```

```
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
real*8::v1(n),v2(n)
integer::i
v1v2=0
do i=1,n
 v1v2=v1v2+v1(i)*v2(i)
end do
end function
function rAr(A,r,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  !计算（Ar,r）,返回标量
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     r 向量
!      2.     N 维数
!      3.     A 矩阵
!  Output parameters  :
!      1.     Ar 返回标量
!      2.
!  Common parameters  :
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,N
real*8::A(N,N),r(N),temp(N)
temp=Ar(A,r,N)
rAr=v1v2(r,temp,N)
end function rAr
end module conj
program  main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-5
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用共轭梯度计算线性方程
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. Im_result.txt 计算的中间数据
!      2.  result.txt 计算结果
!-----------------------------------------------------
use conj
implicit real*8(a-z)
```

```
integer,parameter::N=4
real*8 ::A(N,N),b(N),x(N),x0(N)
  open(unit=101,file='result.txt')
  open(unit=102,file='Im_result.txt')
 !迭代初值
  x0=(/0d0,0d0,0d0,0d0/)
!系数
  b=(/62d0,87d0,91d0,90d0/)
  A=reshape((/5d0,7d0,6d0,5d0,&
              7d0,10d0,8d0,7d0,&
              6d0,8d0,10d0,9d0,&
              5d0,7d0,9d0,10d0/),(/4,4/))
! 调用函数
  call solve(A,b,x,x0,N)
  write(101,501)x
  501 format(/,T10,'共轭梯度法',//,&
               2x,'x(1)=',F15.8,/,&
               2x,'x(2)=',F15.8,/,&
               2x,'x(3)=',F15.8,/,&
               2x,'x(4)=',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 2-10 所示。

在文件 Im_result.txt 中还记录了计算的中间结果，如图 2-11 所示。

```
共轭梯度法

x(1)=     2.00000000
x(2)=     3.00000000
x(3)=     1.00000000
x(4)=     5.00000000
```

图 2-10　共轭梯度法计算结果

```
共轭梯度法中间结果

 1   2.04792193   2.87369690   3.00582089   2.97278989
 2   1.56058255   2.51989545   2.58844050   4.12469697
 3   1.53689971   3.27970581   1.11628376   4.93103148
 4   2.00000000   3.00000000   1.00000000   5.00000000
 5   2.00000000   3.00000000   1.00000000   5.00000000
```

图 2-11　共轭梯度法中间结果

从中间结果可以看到收敛速度还是较快的。

本章小结

本章介绍了常用的线性方程组的迭代方法。其中主要包括雅可比迭代、高斯赛-德尔迭代、逐次超松弛迭代等。还介绍了基于变分原理的最速下降与共轭梯度迭代方法。这些方法各有特点，实际应用时需要视情况而定。需要说明的是，一般在采用迭代法进行数值运算时，我们首先要分析迭代法是否收敛，否则计算可能是没有意义的。就线性方程组迭代法而言，每种方法都有自己的收敛条件，关于这些条件读者可以参阅相关数学手册，这里从略。

第 3 章

◂最小二乘与数据拟合▸

最小二乘法广泛出现在工程技术实践中，因为实际应用中，相当多的问题都是有足够冗余的测量数据，这就需要采用最小二乘估计方法。最小二乘法是最基础、也最重要的参数估计方法。即便是现代出现了名目繁多的参数估计方法，很多方法都和最小二乘有密切联系，如现在比较流行的多传感器数据融合估计，实际上都可以通过最小二乘法得到比较不错的解释。数值代数以及统计学的发展赋予了最小二乘许多新的意义和内涵。

QR 分解是本章的一个重点，除了计算最小二乘之外，QR 分解也是特征值问题的重要手段，其中主要介绍了 Houlseholder 变换和修正的 Gram-Shimdt 正交化方法。关于 Givens 变换因其计算效率较低，故而这里不作介绍。

3.1 Cholesky分解法计算最小二乘

1. 实验基本原理

对于带误差的超定线性方程组

$$\begin{cases} y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n + \eta_1 \\ y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n + \eta_2 \\ \quad \vdots \\ y_m = a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n + \eta_m \end{cases}$$

可以把上述方程用矩阵形式写为

$$\mathbf{Ax = b}$$

是实数域上（m，n）阶的方程。由线性方程组的数值方法一章中知道，上述方程组有解的充分必要条件是方程组的系数矩阵的秩与增广矩阵的秩相同，即

$$\mathbf{rank}(\mathbf{A}) = \mathbf{rank}([\mathbf{A},\mathbf{b}])$$

但有时候方程组不满足上述条件，于是就没有通常意义下的解，这样的方程组称为矛盾方程组。

如果存在 $\mathbf{x}_s$，使

$$f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$$

在 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_s$ 时达到最小，则 $\mathbf{x}_s$ 称为方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的最小二乘解。$\mathbf{x}_s$ 是方程组最小二乘解的充分必要条件是 $\mathbf{x}_s$ 是方程组

$$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

的解。方程 $\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$ 即称为法方程，通过求解法方程来计算最小二乘解是一种可行的方法。在线性方程组直接方法中介绍的 Cholesky 分解法是比较适用于解法方程的。

2. 实验目的与要求

- 了解最小二乘的基本原理
- 知道常用的最小二乘解法
- 对于超定方程能够写出法方程
- 能够编程求出法方程给出最小二乘解

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(M)	方程的解
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,M)	系数矩阵
b	REAL*8(N)	右向量
N	INTEGER	A 的行数
M	INTEGER	A 的列数

3. 实验内容与数据来源

计算超定方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 在最小二乘意义下的解。其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} -4.6429 & -1.0777 & -4.5383 \\ 3.4913 & 1.5548 & -4.0287 \\ 4.3399 & -3.2881 & 3.2346 \\ 1.7874 & 2.0605 & 1.9483 \\ 2.5774 & -4.6817 & -1.8290 \\ 2.4313 & -2.2308 & 4.5022 \end{pmatrix},\mathbf{b}=\begin{pmatrix} -7.0294 \\ -2.1417 \\ -0.3499 \\ 5.1209 \\ -8.0224 \\ 2.5942 \end{pmatrix}$$

5. 程序代码

```
module  normal
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   超定方程的最小二乘计算模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.        模块主函数 solve
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(A,b,x,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算超定方程的最小二乘问题
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.       A   (N,M)      N>M
!      2.       b   (N)
!  Output parameters  :
!      1.       x  (M)
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.      方法是通过求解法方程
!      2.      而法方程的求解基于 Cholesky 分解
!      3.    程序中调用了个基础函数
!
!       transpose 矩阵转置，这个是非 IMSL 函数，Fortran 自带的，
!        可以直接使用
!       Matmul    矩阵相乘，注意矩阵的维数
!-------------------------------------------------------
```

```
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,P
real*8::A(N,M),b(N),x(M)
real*8::AT(M,N)
real*8::ATA(M,M),ATb(M)
integer::i,j,k
! 转置 系统函数
AT=TRANSPOSE(A)
! 矩阵相乘，系统函数，注意维数匹配
ATA=MATMUL(AT,A)
ATb=MATMUL(AT,b)
!调用 Cholesky 分解方法计算法方程
call chol_eq(ATA,ATb,x,M)
end subroutine solve
subroutine chol eq(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  用 cholesky 分解方法解方程
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::L(N,N),y(N),LT(N,N)
!LT 为 L 的转置矩阵
integer::i,j
call  chol(A,L,N)
call  downtri(L,b,y,N)
do i=1,N
 do j=1,N
    LT(i,j)=L(j,i)
 end do
end do
call uptri(LT,y,x,N)  !这一步已经算出了 x
end subroutine chol eq
subroutine  chol(A,L,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  Cholesky 分解子程序
!-----------------------------------------------------
integer::N
real*8::A(N,N),L(N,N)
integer::i,j,k
L=0
L(1,1)=dsqrt(a(1,1))
L(2:,1)=a(2:,1)/L(1,1)
do j=2,N
   s=0
   do k=1,j-1
```

```
      s=s+L(j,k)**2
      end do
      L(j,j)=dsqrt(a(j,j)-s)
      !注意 i 范围
      do i=j+1,N
         s=0
         do k=1,j-1
           s=s+L(i,k)*L(j,k)
         end do
         L(i,j)=(a(i,j)-s)/L(j,j)
      end do
   end do
   end subroutine chol
   subroutine uptri(A,b,x,N)
   !---------------------------------subroutine  comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
   !  Date      :  2010-4-8
   !-----------------------------------------------------
   !  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
   !               Ax=b
   !-----------------------------------------------------
   implicit real*8(a-z)
   integer::i,j,k,N
   real*8::A(N,N),b(N),x(N)
   x(N)=b(N)/A(N,N)
   !回带部分
   do i=n-1,1,-1
      x(i)=b(i)
     do j=i+1,N
      x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
     end do
      x(i)=x(i)/A(i,i)
   end do
   end subroutine uptri
   subroutine downtri(A,b,x,N)
   !---------------------------------subroutine  comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
   !  Date      :  2010-4-9
   !-----------------------------------------------------
   !  Purpose   :  下三角方程组的回带方法
   !               Ax=b
   !-----------------------------------------------------
   implicit real*8(a-z)
   integer::i,j,N
   real*8::A(N,N),b(N),x(N)
   x(1)=b(1)/a(1,1)
   do k=2,N
     x(k)=b(k)
     do i=1,k-1
       x(k)=x(k)-a(k,i)*x(i)
     end do
     x(k)=x(k)/a(k,k)
   end do
```

```
end subroutine downtri
end module normal
module driver
!-----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   驱动程序模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.    dri_main  读文件，并调用方法函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine dri main(N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  驱动程序模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.      可以计算任意 N,M 阶最小二乘 N>M  由用户输入
!       2.
!-------------------------------------------------------
!引用方法模块
use normal
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,M),b(N),x(M)
!读入系数 A 矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,M),i=1,N)
!读入向量 b
read(11,*)b
!调用方法函数
 call solve(A,b,x,N,M)
  write(12,101)
101 format(T5,'最小二乘解为：',/)
do i=1,m
 write(12,'(T5,F10.6)')x(i)
end do
end subroutine dri main
end  module driver
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
```

```
!  Date      :  2010-4-10
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  生成计算最小二乘的软件，方法是采用解法方程
!               法方程的计算是基于 cholesky 分解
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.       软件适用于 超定方程，系数由文件读入
!       2.       由主函数启动驱动程序模块，驱动程序调用方法函数
!-------------------------------------------------------
use driver
integer::N,M
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读入 A 矩阵
!读入方程维数系数
read(11,*)N,M
!调用驱动函数
call dri_main(N,M)
end program main
```

6. 实验结论

先准备数据文件 fin.txt，格式如图 3-1 所示。

程序运行后，计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 3-2 所示。

```
        法方程解最小二乘   版本: 1.1

   6    3        : 矩阵维数信息   Ax=b  A(N,M)

  -4.6429   -1.0777   -4.5383
   3.4913    1.5548   -4.0287
   4.3399   -3.2881    3.2346
   1.7874    2.0605    1.9483
   2.5774   -4.6817   -1.8290
   2.4313   -2.2308    4.5022      :END MATRIX A


  -7.0294
  -2.1417
  -0.3499
   5.1209
  -8.0224
   2.5942   : END VECTOR b

  P.S: 可以处理一般最小二乘，作为验证程序
```

图 3-1　输入数据文件格式

```
    最小二乘解为:

     0.097598
     1.323411
     1.141427
```

图 3-2　计算结果

这里补充说一下文中数据来源，系数矩阵 **A** 由计算机产生 6×3 的在 $[-5,5]$ 区间的正态分布随机数，预给定向量 **x** 一个值，然后令 $\mathbf{b}=\mathbf{Ax}+0.2\times\text{randn}(6,1)$，其中 randn(6,1) 表示 6×1 维的标准正态分布。

3.2　Householder镜像变换之QR分解

1. 实验基本原理

如果给定向量 $\mathbf{x},\mathbf{y}$，二者 2 范数相同，即 $\|\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{y}\|_2$，则可以找到正交变换 $\mathbf{H}$，使 $\mathbf{Hx}=\mathbf{y}$ 。而变换矩阵很容易给出，即著名的 Householder 变换或称为镜像变换。取 $\mathbf{u}=\dfrac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2}$，令 $\mathbf{H}=\mathbf{I}-2\mathbf{u}\mathbf{u}^T$ 即可。很容易验证 $\mathbf{H}$ 为正交矩阵，保持向量 2 范数不变。

对于单个向量 $\mathbf{x}$，欲用镜像变换使之成为

$$\mathbf{Hx}=\mathbf{w}=\|\mathbf{x}\|\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_1=(1,0,\cdots)^T$$

可以令

$$\mathbf{u}=\mathbf{w}-\mathbf{x}$$

继而可以构造镜像变换矩阵

$$\mathbf{H}=\mathbf{I}-2\frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|_2^2}$$

$\|\mathbf{u}\|_2^2$ 表示向量之 2 范数的平方。

实施变换时为了让作为分母的 $\|\mathbf{u}\|^2$ 尽可能的大，从而有利于数值稳定，取

$$k=-\mathrm{sgn}(x_1)\|\mathbf{x}\|_2,\ \ \mathrm{sgn}(x_1)=\begin{cases}1, x_1\geq 0\\ -1, x_1<0\end{cases}$$

$$\mathbf{u}=\left(x_1+\mathrm{sgn}(x_1)\|\mathbf{x}\|_2, x_2,\cdots,x_m\right)^T$$

意义很明了，及当 $\mathbf{x}$ 的第一个分量大于等于 0 时候， $\mathbf{u}$ 的第一个分量取 x_1 与 $\|\mathbf{x}\|_2$ 的和，当 $\mathbf{x}$ 的第一个分量小于 0 时候， $\mathbf{u}$ 的第一个分量取 $x_1-\|\mathbf{x}\|_2$。如果不这样做有可能会损失有效位数。

对于矩阵 $\mathbf{A}$ 做 QR 分解，即连续使用 Houlseholder 变换。如第一次使用正交变换后，使之成为如下形式：

$$\mathbf{H}_1\mathbf{A}=\begin{pmatrix}* & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

第二次变换使之成为如下形式：

$$\mathbf{H}_2\mathbf{H}_1\mathbf{A}=\begin{pmatrix}* & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

如此循环到矩阵的最后一列，至此变换后的矩阵已经成为上三角矩阵。而变换矩阵即 $\mathbf{H}=\cdots\mathbf{H}_2\mathbf{H}_1$。

由数值代数理论可知，如果 $\mathbf{R}$ 对角元素正负号都选正号或者负号，则 QR 分解是唯一的。

计算 $\mathbf{H}$ 时候，并不需要存储各次的变换结果，而是逐步矩阵累成而得，变换到矩阵的最后一列，新的矩阵已经是 $\mathbf{H}$。上三角阵 $\mathbf{R}$ 也不需要再执行 $\mathbf{R}=\mathbf{H}^T\mathbf{A}$，当变换到最后一列时已经自动形成上三角阵，该矩阵即为 $\mathbf{R}$。

2. 实验目的与要求

- 了解 Householder 变换的意义。
- 能给出针对两个矢量做镜像变换时候的变换矩阵。
- 能够会利用作者编写的程序对一般矩阵做 QR 分解。
- 最好会自己编写程序实现 QR 分解。

3. 实验内容与数据来源

采用 Householder 变换求矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1.5355 & -3.3332 & -3.2387 & -4.5617 \\ -0.3335 & -1.1290 & -0.5499 & 8.9328 \\ 8.8507 & 1.1308 & -0.2183 & 5.9550 \\ 1.4531 & 3.9234 & 1.3625 & 2.3291 \\ -2.2278 & -1.0668 & 2.6179 & 3.6779 \\ 8.5732 & 4.0426 & -3.7173 & -1.4407 \\ 9.6962 & 5.6682 & -1.0628 & 1.8827 \\ 1.5830 & -1.6738 & 7.0152 & 9.4463 \end{pmatrix}$$

的 QR 分解。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
Q	REAL*8(M,M)	变换矩阵
R	REAL*8(M,N)	上三角矩阵
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(M,N)	欲求分解之矩阵
M	INTEGER	A 的行数
N	INTEGER	A 的列数

5. 程序代码

```
module m_house
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2009.07.30
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Houlseholder 求 QR 分解之模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine house_qr(A,Q,R,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2009.07.30
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 采用 Householder 做 QR 分解
```

```
!
!  Post Script :
!       1.     A=QR
!       2.     Q为正交矩阵
!       3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A 要求分解之矩阵
!       2.   M,N 矩阵维数
!  Output parameters  :
!       1.   Q  正交矩阵
!       2.   R  上三角矩阵
!  Common parameters  :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------

implicit real*8(a-z)
integer::M,N
real*8::A(M,N),Q(M,M),R(M,N)

real*8::H0(M,M),H1(M,M),H2(M,M),qt(M,M)

real*8::A1(M,N),A2(M,N),u(M)

integer::i,k,j


A1=A

H1=0d0
do j=1,M
 H1(j,j)=1d0
end do

!k表示对所有的列
do k=1,n

 !设置H矩阵初值，这里设置为单位矩阵
  H0=0d0

  !设置为单位矩阵
  do i=1,M
  H0(i,i)=1d0
  end do

  s=0d0
  do i=k,M

  s=s+a1(i,k)*a1(i,k)

  end do

!算的向量的2范数
  s=dsqrt(s)
```

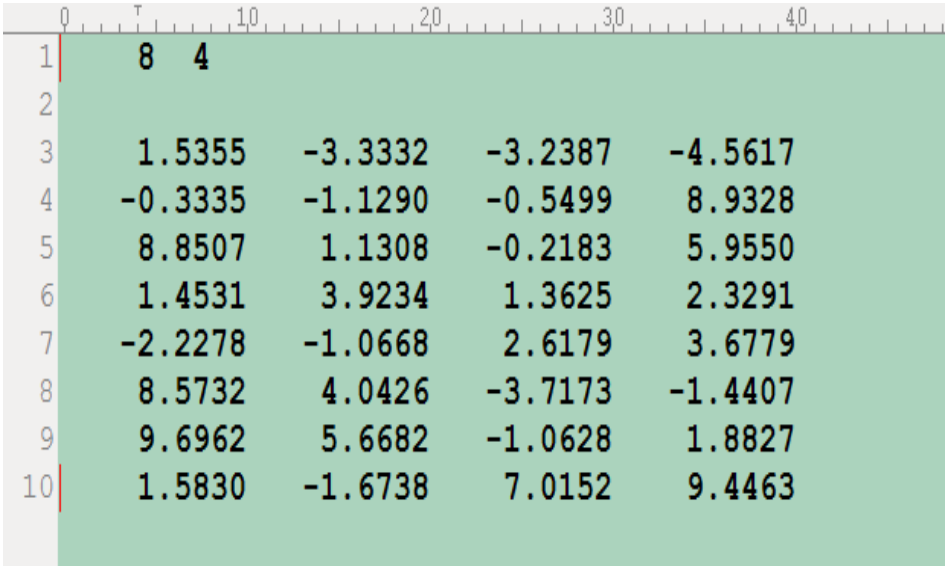
```
  u=0d0

!----------------------------------
! 这段甚为重要，关系到数值稳定性问题
! 目的是使得 u 的 2 范数尽可能大
! 原则是，如果首元素大于零，则 u 的第一个元素是正+正
!        如果首元素小于零，则 u 的第一个元素是负-负
  if (a1(k,k)>=0) then
  u(k)=a1(k,k)+s
  else
  u(k)=a1(k,k)-s
  end if
!--------------------------------

  do i=k+1,m
  u(i)=a1(i,k)
  end do

  du=0
  do i=k,m
  !求的单位 u 长度平方
  du=du+u(i)*u(i)
  end do


  !计算得到大的 H 矩阵
  do i=k,m
    do j=k,m

       H0(i,j)=-2d0*u(i)*u(j)/du

       if (i==j) then
       H0(i,j)=1d0+H0(i,j)
       end if

    end do
  end do

!千万要注意矩阵相乘的次序
!先更新矩阵
A2=matmul(H0,A1)
A1=A2

!H1 初值为单位矩阵，后逐步更新
H1=matmul(H1,H0)


!更新变换后的矩阵


!-----------------------------------------
!--这两行语句可以删除，这里为显示中间结果
!--方便比对
write(11,101)((H0(i,j),j=1,m),i=1,m)
```

```
write(11,102)((H1(i,j),j=1,m),i=1,m)
write(11,103)((A1(i,j),j=1,N),i=1,m)
!-----------------------------------------
end do

!中间结果格式控制
101 format(/,'H0=',/,<M>(<M>F10.5/))
102 format(/,'H=',/,<M>(<M>F10.5/))
103 format(/,'A=',/,<m>(<n>F10.5/))
!-----------------------------------------
Q=H1

R=A1

end subroutine house_qr


end module m_house


subroutine drive(m,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 驱动程序
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------

implicit real*8(a-z)

use m_house
implicit real*8(a-z)

integer::m,n
integer::i,j

real*8::A(m,n),Q(m,m),R(m,n)

read(10,*)((A(i,j),j=1,n),i=1,m)

write(11,100)
100 format('QR 分解中间结果：')

call house_qr(A,Q,R,m,n)

write(11,101)
101 format(T10,'QR 分解之结果：',/,T3,'Q=',/)

write(11,102)((Q(i,j),j=1,M),i=1,M)
```

```
!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
102 format(<M>(<M>F10.5/))

write(11,103)
103 format(T3,'R=',/)

write(11,104)((R(i,j),j=1,n),i=1,m)

!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
104 format(<m>(<N>F10.5/))

end subroutine drive

program main

!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2009.07.30
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : Householder 镜像变幻求 QR 分解主函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt  输出结果
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::m,n

open(unit=10,file='fin.txt')
open(unit=11,file='result.txt')

read(10,*)m,n
call drive(m,n)


end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备输入文件，格式如下图 3-3。



```
    8   4

    1.5355   -3.3332   -3.2387   -4.5617
   -0.3335   -1.1290   -0.5499    8.9328
    8.8507    1.1308   -0.2183    5.9550
    1.4531    3.9234    1.3625    2.3291
   -2.2278   -1.0668    2.6179    3.6779
    8.5732    4.0426   -3.7173   -1.4407
    9.6962    5.6682   -1.0628    1.8827
    1.5830   -1.6738    7.0152    9.4463
```

图 3-3 输入数据格式

计算结果保存在文件 result.txt 中，QR 分解为

$$\mathbf{Q}=\begin{pmatrix}
-0.09561 & -0.60326 & 0.37166 & 0.22346 & 0.24143 & -0.43464 & -0.14854 & 0.41183\\
0.02077 & -0.15337 & 0.07662 & -0.94195 & -0.05549 & -0.03425 & 0.10974 & 0.25809\\
-0.55113 & -0.35482 & -0.12031 & -0.16506 & -0.09674 & -0.12270 & -0.31550 & -0.63615\\
-0.09048 & 0.51543 & -0.20820 & -0.09567 & 0.04609 & -0.43726 & -0.64541 & 0.25252\\
0.13872 & -0.03074 & -0.25615 & -0.11947 & 0.92828 & 0.07701 & 0.00015 & -0.17969\\
-0.53385 & 0.10866 & 0.26076 & 0.01578 & 0.16283 & 0.67039 & -0.24399 & 0.31541\\
-0.60378 & 0.29112 & -0.07204 & 0.03922 & 0.13418 & -0.35445 & 0.62437 & 0.10246\\
-0.09857 & -0.35140 & -0.81202 & 0.10166 & -0.14465 & 0.15056 & 0.02081 & 0.39123
\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}=\begin{pmatrix}
-16.05928 & -6.24641 & 2.59310 & -3.65958\\
0.00000 & 6.51535 & -0.44113 & -2.57160\\
0.00000 & 0.00000 & -8.76306 & -11.33635\\
0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & -10.06737\\
0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & 0.00000\\
0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & 0.00000\\
0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & 0.00000\\
0.00000 & 0.00000 & 0.00000 & 0.00000
\end{pmatrix}$$

容易验证 $\mathbf{A}=\mathbf{QR}$。

3.3　修正的Gram-Schimdt正交化方法的QR分解

1. 实验基本原理

Gram-Schimdt 线性代数或矩阵论中大家都熟悉的正交化方法，令$\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n\}$是 p 维向量子空间 W 的任意一组基，则子空间 W 的标准正交基$\{\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_n\}$可以通过 Gram-Schimdt 正交化构造，这个方法是大家都很熟悉的，即

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{x}_1, \mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{p}_1}{\|\mathbf{p}\|} = \frac{\mathbf{x}_1}{\|\mathbf{x}_1\|}$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{x}_k - \sum_{i=1}^{k=1}\left(\mathbf{v}_i{}^H\mathbf{x}_k\right)\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{p}_k}{\|\mathbf{p}_k\|}$$

对于超定的线性方程系数矩阵的 QR 分解可以通过 Gram-Schimdt 正交化方法来实现，然而采用 Gram-Schimdt 正交化方法求解列正交矩阵$\mathbf{Q}$时，舍入误差较大，这在求解最小二乘法时候，有时会不稳定。针对 Gram-Schimdt 正交化的缺点，下面给出修正的 Gram-Schimdt 正交化算法。

对于 n 个向量$\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots,\mathbf{a}_n$构造标准正交基$\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\cdots,\mathbf{q}_n$方法如下

$$R_{11} = \|\mathbf{a}_1\|$$

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{q}_1}{R_{11}}$$

对于$k = 2,\cdots,n$。

$$R_{jk} = \mathbf{q}_j^H\mathbf{a}_k, j = 1,\cdots,k-1$$

$$R_{kk} = \left\|\mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1}\mathbf{q}R_{jk}\right\|$$

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1}\mathbf{q}R_{jk}}{R_{kk}}$$

可以看出，此方法比上一节介绍的 Holuseholder 要更复杂一些，虽然公式看上去不是很繁，但程序设计时需要较多的编程技巧，而在这一过程中对向量与矩阵的维数分析至关重要，做到这一点的前提是真正理解了算法的实现过程。

2. 实验目的与要求

- 了解 Gram-Schmidt 正交化的几何与代数意义。

- 了解修正的 Gram-Schmidt 正交化的计算步骤。
- 熟悉修正 Gram-Schmidt 正交化的计算流程。
- 最好能自己编写修正 Gram-Schmidt 正交化方法。

3. 实验内容与数据来源

编写修正的 Gram-Schimdit 方法函数，计算矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}1 & 2 & -3\\ 1 & 3 & 10\\ 1 & -1 & 6\end{pmatrix}$$

的 QR 分解。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
Q	REAL*8(M,N)	变换矩阵
R	REAL*8(N,N)	上三角矩阵
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(M,N)	欲求分解之矩阵
M	INTEGER	A 的行数
N	INTEGER	A 的列数

5. 程序代码

```
module gram_sch
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   修正的 Gram-Schimdt 正交化求 QR 分解
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,Q,R,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :   采用修正的 Gram-Schmidt 分解求矩阵的 QR 分解
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A 原始矩阵
!      2.    A(M,N)
!  Output parameters  :
!      1.    分解结果为  Q(M,N):注意 Q 不是方阵，Q 列向量为标准正交基
!      2.                R(N,N): R 是方阵
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  注意矩阵的维数，分解后 Q 列向量是正交的
!      2.  关于编程方法可以参看《矩阵分析与应用》张贤达编著
!      3.  详细的数学解释，可以参看麻省理工学院的
!          线性代数教材《Linear Algebra with Application》
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
integer::i,j,k
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::vec_temp(M)
R(1,1)=dsqrt(dot_product(a(:,1),a(:,1)))
Q(:,1)=a(:,1)/R(1,1)

do k=2,N
     do j=1,k-1
       R(j,k)=dot_product(Q(:,j),A(:,k))
     end do
     vec temp=A(:,k)
     do j=1,k-1
       vec temp=vec temp-Q(:,j)*R(j,k)
     end do
   R(k,k)=dsqrt(dot_product(vec_temp,vec_temp))
   Q(:,k)=vec temp/R(k,k)
end do
end subroutine solve
subroutine dri main(M,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  驱动程序
!
!-----------------------------------------------------
integer::M,N
real*8::A(m,n),Q(m,n),R(n,n)
real*8::b(M),x(N)
!读入矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,n),i=1,m)
call solve(A,Q,R,m,n)
!-------------------这段程序用于输出 QR 分解
write(12,101)
101 format(T10,'修正的 Gram-Schmidt 方法 QR 分解',/,T3,'Q=',/)
```

```
    write(12,102)((Q(i,j),j=1,N),i=1,M)
    !变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
    102 format(<M>(<N>F10.5/))
    write(12,103)
    103 format(T3,'R=',/)
    write(12,104)((R(i,j),j=1,n),i=1,n)
    !变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
    104 format(<n>(<N>F10.5/))
    !------------------------------
    end subroutine dri_main
    end module gram_sch
    program main
    !----------------------------------------program comment
    !  Version   :  V1.0
    !  Coded by  :  syz
    !  Date      :  2010-4-11
    !-----------------------------------------------------
    !  Purpose   :  1. 采用修正的 Gram-Schimidt 方法进行 QR 分解
    !               2. 的主函数
    !-----------------------------------------------------
    !  In put data  files :
    !      1.        fin.txt 输入文件
    !      2.
    !  Output data files  :
    !      1.        fou.txt 输出文件
    !      2.
    !-----------------------------------------------------
    !  Post Script :
    !      1.        由主函数引导驱动程序
    !      2.
    !-----------------------------------------------------
    use gram sch
    integer::M,N
    open(unit=11,file='fin.txt')
    open(unit=12,file='fout.txt')
    read(11,*)
    !读入 A 矩阵
    !读入方程维数系数
    read(11,*)M,N
    !调用驱动函数
    call dri main(M,N)
    end program main
```

6. 实验结论

计算时需要先准备输入卡片，输入格式如图 3-4 所示。

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 3-5 所示。

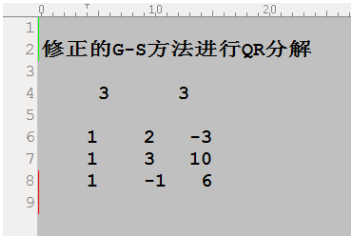


图 3-4　输入数据

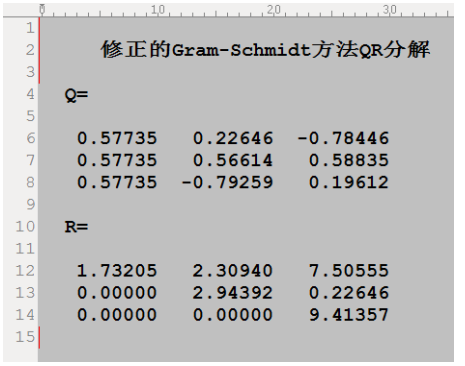


图 3-5　QR 分解结果

可以验证计算结果是符合要求的。

3.4　QR分解法计算最小二乘问题

1. 实验基本原理

前面两节分别介绍了两种 QR 分解方法，有了 QR 分解方法就可以方便的实现对超定或者适定方程的最小二乘法计算。

对于超定方程 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，矩阵 $\mathbf{A}$ 是 $m\times n$ 维，对 $\mathbf{A}$ 的列向量采用上述方法正交化得到 $\mathbf{A}=\mathbf{QR}$，进而可以得到 $\mathbf{Rx}=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$，其中 $\mathbf{R}$ 为上三角矩阵，回带即可得到原超定方程最小二乘意义下的解。

QR 分解方法可以选择 Househoulder 及修正的 G-S 方法或者快速 Givens 变换等，这里选择修正的 G-S 方法。

在编程时，读者需要仔细考虑各矩阵的维数。

2. 实验目的与要求

- 了解最小二乘算法 QR 实现的基本原理
- 能用作者编写的程序计算最小二乘问题。
- 能对最小二乘结果做出解释。

3. 实验内容与数据来源

计算超定方程 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，在最小二乘意义下的解。其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1.4775 & -1.3152 & -0.5322 \\ -0.4908 & 1.2562 & -1.9365 \\ 0.4701 & 2.8023 & 0.0851 \\ -2.0368 & -4.1887 & 0.1077 \\ 2.4469 & 4.2939 & 3.1763 \\ -3.1104 & 2.7571 & 2.9483 \\ 1.8678 & -0.1321 & 1.4432 \\ -3.1649 & -0.6414 & -1.2139 \end{pmatrix},\quad \mathbf{b}=\begin{pmatrix} 2.1960 \\ -1.3255 \\ 7.7531 \\ -14.8732 \\ 21.8125 \\ -1.0265 \\ 7.6441 \\ -13.4903 \end{pmatrix}$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(N)	方程的解
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(M,N)	系数矩阵
b	INTEGER	右向量
M	INTEGER	A 的行数
N	INTEGER	A 的列数

5. 程序代码

```
module gram_sch
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   修正的 Gram-Schimdt 正交化求最小二
!                  乘问题模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    solve     解超定方程方法函数
!     2.    gram dec  G-S ,QR 分解
!     3.    uptri     上三角方程回带函数
!     4.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.      即可以单独调用 QR 分解函数
!     2.      也可以调用解方程函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(A,b,x,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
```

```
!  Date     :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  通过修正的 Gram-Schmidt 正交化求最小二问题
!               方法函数
!-------------------------------------------------------
!  Method    :
!               对超定方程 A 进行 QR 分解后  方程变为
!                  QR x=b
!                => Rx=Q'b   R 为上三角阵
!                => 回带，可以求得最小二乘意义下的解
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.       即求解超定方程组 Ax=b    其中 A(M,N)  M>N
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::b(M)
real*8::QT(N,M)  !Q 的转置矩阵
real*8::QTb(N)   !Q'b
real*8::x(N)
call gram_dec(A,Q,R,M,N)
QT=transpose(Q)
QTb=matmul(QT,b)  !  Rx=Q'b
call uptri(R,QTb,x,N) !回带
end subroutine
subroutine gram_dec(A,Q,R,M,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   采用修正的 Gram-Schmidt 分解求矩阵的 QR 分解
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A 原始矩阵
!      2.    A(M,N)
!  Output parameters  :
!      1.    分解结果为  Q(M,N):注意 Q 不是方阵，Q 列向量为标准正交基
!      2.                R(N,N): R 是方阵
!      3.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
integer::i,j,k
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::vec_temp(M)
R(1,1)=dsqrt(dot product(a(:,1),a(:,1)))
Q(:,1)=a(:,1)/R(1,1)
do k=2,N
     do j=1,k-1
       R(j,k)=dot_product(Q(:,j),A(:,k))
     end do
```

```
      vec_temp=A(:,k)
      do j=1,k-1
        vec_temp=vec_temp-Q(:,j)*R(j,k)
      end do
    R(k,k)=dsqrt(dot_product(vec_temp,vec_temp))
    Q(:,k)=vec_temp/R(k,k)
end do
end subroutine gram_dec
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module gram sch
module driver
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-----------------------------------------------------
!  Description :
!              驱动程序模块
!              分别调用 QR 分解，以及用之解决最小二乘问题
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine dri main(M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  驱动模块主函数
!
!-----------------------------------------------------
use gram sch
integer::M,N
real*8::A(m,n),Q(m,n),R(n,n)
```

```
real*8::b(M),x(N)
!读入矩阵
read(11,*)((A(i,j),j=1,n),i=1,m)
!读入 b 向量
read(11,*)b
call gram_dec(A,Q,R,m,n)
!------------------这段程序用于输出 QR 分解
write(12,101)
101 format(T10,'修正的 Gram-Schmidt 方法 QR 分解计算最小二乘问题',/,T3,'Q=',/)
write(12,102)((Q(i,j),j=1,N),i=1,M)
!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
102 format(<M>(<N>F10.5/))
write(12,103)
103 format(T3,'R=',/)
write(12,104)((R(i,j),j=1,n),i=1,n)
!变量输出格式只针对 IVF 编译器，在 CVF 中不支持
104 format(<N>(<N>F10.5/))
!------------------------------
!调用求解函数
call solve(A,b,x,M,N)
write(12,105)x
105 format(T3,'最小二乘意义下的解为',//,(<N>F10.5))
end subroutine dri_main
end module driver
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-11
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  1. 采用修正的 Gram-Schimidt 方法进行 QR 分解
!               2. 分解后进行超定方程的最小二乘求解
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.        fin.txt 输入文件
!       2.
!  Output data files  :
!       1.        fou.txt 输出文件
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.        由主函数引导驱动程序
!       2.        该程序可以处以一般的最小二乘问题
!                 只要按照输入卡片输入数据，即可以计算
!-----------------------------------------------------
use driver
integer::M,N
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
read(11,*)
!读入 A 矩阵
!读入方程维数系数
read(11,*)M,N
!调用驱动函数
call dri_main(M,N)
```

```
end program main
```

6. 实验结论

程序运行需要准备输入数据 fin.txt，格式如图 3-6 所示。

```
采用修正的Gram-Schmidt方法进行QR分解，并计算最小二乘

    8       3

   1.4775   -1.3152   -0.5322
  -0.4908    1.2562   -1.9365
   0.4701    2.8023    0.0851
  -2.0368   -4.1887    0.1077
   2.4469    4.2939    3.1763
  -3.1104    2.7571    2.9483
   1.8678   -0.1321    1.4432
  -3.1649   -0.6414   -1.2139      : End of Matrix A

   2.1960
  -1.3255
   7.7531
 -14.8732
  21.8125
  -1.0265
   7.6441
 -13.4903   :End of Vector b
```

图 3-6　采用修正的 Gram-Schimdt 方法进行 QR 分解输入数据

计算结果保存在文件 fout.txt 中，如图 3-7 所示。

```
  修正的Gram-Schmidt方法QR分解计算最小二乘问题

 Q=

  0.24638  -0.24554  -0.02305
 -0.08184   0.19539  -0.54836
  0.07839   0.36935  -0.21878
 -0.33965  -0.49536   0.39078
  0.40804   0.49254   0.35471
 -0.51868   0.51528   0.47100
  0.31147  -0.09776   0.33043
 -0.52777   0.04543  -0.20335

 R=

  5.99672   1.83491   0.85446
  0.00000   7.19771   2.61781
  0.00000   0.00000   4.33668

 最小二乘意义下的解为

  3.39103   2.06349   1.31222
```

图 3-7　QR 分解结果及最小二乘解

程序不仅给出了最小二乘的计算结果，还给出了 QR 分解情况，实验中的软件生成以后，可以计算一般的超定方程的最小二乘问题，只要修改输入卡片即可。

3.5　最小二乘曲线拟合

1. 实验基本原理

对于给定的一组数据 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$，假设拟合函数

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_n\varphi_n(x)$$

其中基函数为线性无关的函数系。最小二乘拟合问题就是求系数，使下面的表达式取极小值。

$$E = \sum_{i=1}^{m}\left[\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j(x) - y_i\right]^2$$

根据多元函数极值问题，E 取极值的必要条件是

$$\frac{\partial E(a_0, a_1, \cdots, a_n)}{\partial a_i} = 0$$

设

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

以及 $A = \left[a_{ij}\right]_{m\times(n+1)}$，$a_{ij} = \varphi_j(x_i)$，

那么

$$E = \|A\mathbf{a} - \mathbf{y}\|_2^2$$

如此最小二乘拟合问题就转化为超定线性方程组

$$A\mathbf{a} = \mathbf{y}$$

的最小二乘解问题。

2. 实验目的与要求

- 了解曲线拟合的基本含义
- 能够自行推导出曲线拟合最小二乘方法的计算步骤

- 会使用作者编写的多项式拟合程序
- 最好能自行编写程序解决相关问题

3. 实验内容与数据来源

求数据

x	-3	-2	-1	0	1	2	3
y	4	2	3	0	-1	-2	-5

的二阶与三阶多项式最小二乘拟合。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
C	REAL*8(M)	系数向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
X	REAL*8(N)	输入的自变量
Y	REAL*8(N)	输入的变量
N	INTEGER	输入数据的维数
M	INTEGER	欲采用的多项式阶数

5. 程序代码

```
module lsqcurvefit
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.07.09
!-------------------------------------------------------
!  Description :   任意阶多项式曲线拟合模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    拟合函数，基函数
!     2.    最小二乘法函数
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
```

```
contains
subroutine solve(x,y,N,c,m)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  任意阶多项式拟合函数
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!       3.
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  x,y --- 输入数据
!       2.  N --- x,y 向量的维数
!       3.  m----希望用 m 阶多项式拟合
!  Output parameters  :
!       1. c 系数向量
!       2.
!  Common parameters  :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,m
real*8::x(n),y(n),c(M)
real*8::bv(M)
integer::i
!A 系数矩阵
real*8::A(N,M)
!如果多项式阶数加高于实测数据个数则报错
!-------------
if (m>n) then
write(11,101)
stop
end if
101 format(/,'warning:the order of polynomial+1 > the ',/,&
            'number of date,that is forbidden')
!------------------------------
do i=1,n
   call basefunc(bv,x(i),m)
   A(i,:)=bv
end do
call leas_eq(A,y,c,N,m)
end subroutine solve
subroutine basefunc(bv,x,m)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :2010.07.09
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  任意阶多项式基函数
!
```

```
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 标量
!      2.    m 多项式阶数
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M
real*8::bv(m)
integer::i
bv(1)=1d0
do  i=2,m
    bv(i)=bv(i-1)*x
end do
end subroutine basefunc
subroutine  leas_eq(A,b,x,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  通过修正的 Gram-Schmidt 正交化求最小二问题
!               方法函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.       即求解超定方程组 Ax=b    其中 A(M,N)  M>N
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::b(M)
real*8::QT(N,M)  !Q 的转置矩阵
real*8::QTb(N)   !Q'b
real*8::x(N)
call gram_dec(A,Q,R,M,N)
QT=transpose(Q)
QTb=matmul(QT,b)  !  Rx=Q'b
call uptri(R,QTb,x,N) !回带
end subroutine leas_eq
subroutine gram dec(A,Q,R,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :   采用修正的 Gram-Schmidt 分解求矩阵的 QR 分解
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A 原始矩阵
!      2.    A(M,N)
!  Output parameters  :
!      1.    分解结果为 Q(M,N):注意 Q 不是方阵，Q 列向量为标准正交基
!      2.               R(N,N): R 是方阵
!      3.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
integer::i,j,k
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::vec_temp(M)
R(1,1)=dsqrt(dot_product(a(:,1),a(:,1)))
Q(:,1)=a(:,1)/R(1,1)
do k=2,N
     do j=1,k-1
       R(j,k)=dot product(Q(:,j),A(:,k))
     end do
     vec_temp=A(:,k)
     do j=1,k-1
       vec_temp=vec_temp-Q(:,j)*R(j,k)
     end do
   R(k,k)=dsqrt(dot product(vec temp,vec temp))
   Q(:,k)=vec_temp/R(k,k)
end do
end subroutine gram dec
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
   x(i)=b(i)
  do j=i+1,N
   x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
  end do
   x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module lsqcurvefit
program main
!---------------------------------------program comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.09
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 多项式拟合主函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
use  lsqcurvefit
implicit real*8(a-z)
real*8::x(7),y(7)
real*8::c1(3),c2(4),c3(9)
open(unit=11,file='result.txt')
x=(/-3d0,-2d0,-1d0,0d0,1d0,2d0,3d0/)
y=(/4d0,2d0,3d0,0d0,-1d0,-2d0,-5d0/)
call solve(x,y,7,c1,3)
call solve(x,y,7,c2,4)
write(11,101)c1,c2
101 format(/T4,'多项式拟合曲线拟合',//,&
           T3,'采用二阶多项式拟合，系数为：',3(/,F16.11),//,&
           T3,'采用三阶多项式拟合，系数为：',4(/,F16.11),/)
call solve(x,y,7,c3,9)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保持着文件 result.txt 中，如图 3-8 所示。

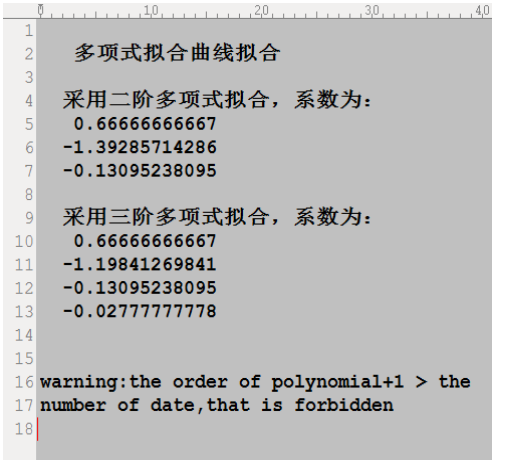


图 3-8　多项式曲线拟合

即如果采用二次多项式拟合函数为

$$f(x)=0.66666666667\text{-}1.39285714286x-\text{-}0.13095238095x^2$$

三阶多项式拟合函数为

$$f(x)=0.66666666667\text{-}1.19841269841x\text{-}0.13095238095x^2$$
$$\text{-}0.02777777778x^3$$

从计算结果可以看出采用二阶多项式已经很好的对数据做了拟合，而高次项则已经很小。在最小二乘曲线拟合时，多项式的阶数加 1 不能高于实测数据对的个数。在主函数中，我们故意用 10 次多项式（加常数-零次项）11 个系数，系统则提示次数过高，这是因为我们在程序设计时候增加了这样的语句，防止调用时不小心输入错误。

需要说明的是数据拟合并不一定需要基是多项式，也可以是其他函数。实际上较高阶多项式拟合并不常用，因为多项式拟合的方程系数矩阵是 Hilbert 矩阵，是一个严重病态矩阵，所以有时候经常采用 Chebyshev 多项式拟合方法，这里就不多做介绍。

本章小结

本章介绍了最小二乘的法方程解法和基于 QR 分解的方法。一般而言在实际计算中，多采用 QR 分解的方法而不是解算法方程，这已经是数值代数里一个基本常识了。也就是说，如果无特殊情况，QR 分解应该是作为最常用的方法。当系数矩阵接近奇异时，可以采用奇异值分解法，不过奇异值分解需要更大的运算量。

对于 QR 分解，本章介绍了 Houlseholder 镜像变换和修正的 Gram-Schimidt 正交化方法，除此之外比较常用的方法还有 Givens 正交变换及其变形算法。相比之下 Givens 变换因计算效率较低，所以有些现代数值分析已经不在介绍。即便是改进的 Givens 变换不需要开平方，部分计算数学家认为，这依然不具备和 Householder 竞争的能力。然而在实际应用时候，使用改

进的 Givens 变换（简称为 G-G 变换）可以对数据逐行处理，而不需要存储数据，这是比较有利的一面，不过作者认为实际上 Houlseholder 加以改进也可以做到这一点。

关于非线性最小二乘问题，需要用到多元微分知识，这在非线性方程组一章有比较充分的体现。我们把非线性最小二乘问题留在应用范例一章中介绍。

关于数据拟合部分，这里介绍了一个常用的多项式拟合方法。多项式拟合因为方便简单且适用，所以常常被用来吸收实测数据中的系统差。如果是知道函数性态的，一般直接以该函数类型作为基函数。另外，近几十年发展起来的人工神经网络对函数具有良好的逼近效果。关于这方面的材料读者可以阅读德克萨斯大学数学系 Ward Cheney、Will Light 教授编写的《A Course in Approximation Theory》一书。

第 4 章

◂矩阵特征值及特征向量▸

特征值问题是数值代数基本问题之一，无论在理论上还是在工程技术上都非常重要。特征值与特征向量理论发展也是相当丰富的。在这一章节中，主要介绍标准的特征值问题 $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$ 的数值方法。

关于数值特征值与特征向量问题，需要一些准备知识，读者可以翻阅线性代数与矩阵分析理论。

4.1 幂法计算主特征值及其特征向量

1. 实验基本原理

在许多工程与物理应用问题中，往往并不需要计算出矩阵的全部特征值与特征向量，而只需要计算出矩阵的按模最大的特征值及其特征向量，通常按模最大的特征值称为主特征值。对于这一类的问题采用乘幂法通常比较合适，乘幂法计算简单而且对于稀疏矩阵比较有效，但有时候收敛速度不是太快。

设 $A \in R^{n\times n}$ 有 n 个线性无关的特征向量，主特征值满足 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$，其对应的特征向量为 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$，那么对于任意的非零初始向量 $\mathbf{v}_0 = \mathbf{u}_0$，按照下面的方法构造向量序列

$$\mathbf{v}_0 = \mathbf{u}_0 \neq \mathbf{0}$$
$$\mathbf{v}_k = \mathbf{A}\mathbf{u}_{k-1}$$
$$\mathbf{u}_k = \frac{\mathbf{v}_k}{\max(\mathbf{v}_k)}$$

则有

$$\lim_{k\to\infty}\mathbf{u}_k=\frac{\mathbf{x}_1}{\max(\mathbf{x}_1)}$$
$$\lim_{k\to\infty}\max(\mathbf{v}_k)=\lambda_1$$

max(**v**) 表示向量 **v** 中绝对值最大的分量。这个收敛定理，就已经包含了乘幂法计算主特征值的计算方法。

2. 实验目的与要求

- 理解乘幂法的基本思想。
- 熟悉计算流程，了解幂法的一些变形形式。
- 在程序设计中灵活处理自己需求的变量。
- 程序设计时应该考虑的计算精度需求，在满足一定精度下即停止迭代，给出允许迭代的最大次数，超过最大迭代次数也停止迭代。

3. 实验内容与数据来源

假设

$$A=\begin{bmatrix}-1 & 2 & 1\\ 2 & -4 & 1\\ 1 & 1 & -6\end{bmatrix}$$

计算 A 的主特征值与主特征向量。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
NAMDA	REAL*8	主特征值
U	REAL*8(N)	主特征向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要计算的方阵
N	INTEGER	矩阵维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module power
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Description :   幂法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   取模最大分量函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,N,namda,u,tol)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 幂法计算主特征值及主特征向量
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  N 矩阵维数
!      2.  A 输入矩阵 N*N 维
!      3.  tol 控制精度
!  Output parameters  :
!      1.  namda 主特征值
!      2.  u     主特征向量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
real*8::A(n,n)
real*8::u(n),u0(n),v(n)
!设置迭代初值向量
do i=1,n
```

```
  u0(n)=1d0
end do
u=u0
!设置模最大分量初值为，使之进入循环
m0=0
do k=1,500
v=matmul(A,u)
call max_rou(v,n,m1)
u=v/m1
!判断迭代停止标准
if (dabs(m1-m0)<tol) exit
!更新 m 值
m0=m1
end do
namda=m1
end subroutine solve
subroutine max_rou(r,n,ma)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  给出向量模最大的分量
!               *是给出分量本身，而非分量的绝对值
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.    r 输入向量
!       2.    n 输入向量的维数
!  Output parameters  :
!       1.    ma 输出结果
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.    本函数取模最大分量本身，而非取其绝对值
!       2.    例如 r=(1,0,-4,3),则结果取 ma= -4
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
!n 为向量维数
!i 为循环指标
!k 为第 k 个分量为模最大的分量，这里作为标记
real*8::r(n)
ma=dabs(r(1))
do i=2,n
  if (dabs(r(i))>ma) then
   ma=dabs(r(i))
   k=i   !用 k 记录指标，但是 ma 不取 r(i)
  end if
end do
ma=r(k)
end subroutine max rou
end module power
program main
```

```
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt 计算结果文件
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use power
implicit real*8(a-z)
real*8::A(3,3),u(3)
open(unit=11,file='result.txt')
a=reshape((/-1d0,2d0,1d0,&
          2d0,-4d0,1d0,&
          1d0,1d0,-6d0/),(/3,3/))
call solve(A,3,namda,u,1d-7)
write(11,101)namda,u
101 format(T5,'幂法计算主特征值及特征向量',//,&
          T3,'主特征值为：',/,F12.7,//,&
          T3,'主特征向量为：',3(/F12.7))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 4-1 所示。

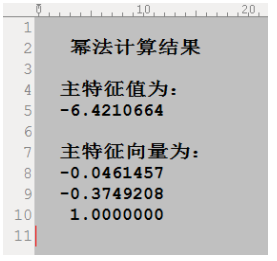


图 4-1　幂法计算结果

关于迭代条件的误差判断问题，可以选择相对误差方法，也可以选择绝对误差，在程序设计时我们采用了选择绝对误差方法，这样便直接知道计算结果与要求的误差范围有多大。当然这一条件可以根据需要而定。判断标准还可以以特征值对应的特征向量作为依据，即以两次迭代前后特征向量之间的误差向量范数作为与误差容限比较，如果误差向量范数小于给定的误差容限，则停止迭代。

4.2 幂法2范数单位化方法

1. 实验基本原理

在用幂法计算时候迭代过程中

$$\begin{cases}\mathbf{u}_k = \mathbf{A}\mathbf{v}_{k-1} \\ \mathbf{v}_k = \dfrac{\mathbf{u}_k}{m_k}\end{cases}$$

m_k 是防止 $|\lambda_1|>1$ 时，$\mathbf{v}_k$ 分量会趋于无穷，而 $|\lambda_1|<1$ 时，$\mathbf{v}_k$ 分量会趋于零，这个过程叫规范化或者单位化，实际上这个过程也可以取 2 范数。

下面给出伪代码算法：

for k=1,2,⋯

$$z^{(k)} = Aq^{(k-1)}$$

$$q^{(k)} = \frac{z^{(k)}}{\left\|z^{(k)}\right\|_2}$$

$$\lambda^{(k)} = \left[q^{(k)}\right]^H Aq^{(k)}$$

end

当然在实际的编程时候，我们不会简单机械的运算一定的次数，而是给出满足精度的判断标准。当运算满足一定精度以后迭代停止，同时如果迭代足够多的次数以后还没收敛，则要给出警告信息。

2. 实验目的与要求

- 理解本实验基本原理部分伪代码的含义。
- 能够准确的把伪代码编程实现。
- 能够给出合理判断迭代停止条件。
- 如果迭代超过一定次数还没收敛，要停止迭代，防止进入死循环。
- 对计算结果做出恰当的分析。

3. 实验内容与数据来源

计算矩阵

$$A=\begin{bmatrix}2 & 3 & 2\\ 10 & 3 & 4\\ 3 & 6 & 1\end{bmatrix}$$

的主特征值及其对应的特征向量。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
NAMDA	REAL*8	主特征值
U	REAL*8(N)	主特征向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要计算的方阵
N	INTEGER	矩阵维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module power
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Description :   幂法范数单位化方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   取模最大分量函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,N,namda,u,tol)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
```

```
!  Date     :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 幂法范数单位化方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  N 矩阵维数
!      2.  A 输入矩阵 N*N 维
!      3.  tol 控制精度
!  Output parameters  :
!      1.  namda 主特征值
!      2.  u     主特征向量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
real*8::A(n,n)
real*8::u(n),u0(n),v(n),vt(n)
!设置迭代初值向量
do i=1,n
  u0(n)=1d0
end do
u=u0
!设置模最大分量初值为，使之进入循环
m0=0
do k=1,500
v=matmul(A,u)
call norm(v,rou,n)
u=v/rou
vt=matmul(A,u)
call vvdot(u,vt,m1,n)
!判断迭代停止标准
if (dabs(m1-m0)<tol) exit
!更新 m 值
m0=m1
end do
namda=m1
end subroutine solve
subroutine norm(r,rou,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算向量范数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  r 输入向量
!      2.  n 向量维数
```

```
!  Output parameters  :
!      1.  rou 向量长度（范数）
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r(n)
rou=0d0
do i=1,n
rou=rou+r(i)**2
end do
rou=dsqrt(rou)
end subroutine norm
subroutine vvdot(r1,r2,dot,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  向量内积
!               r1(1)*r2(1)+r1(2)*r2(2)+...
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  r1,r2 欲求之向量
!      2.  n 维数
!  Output parameters  :
!      1.  dot 向量内积
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r1(n),r2(n)
dot=0d0
do i=1,n
dot=dot+r1(i)*r2(i)
end do
end subroutine vvdot
end module power
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt 计算结果文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use power
implicit real*8(a-z)
real*8::A(3,3),u(3)
open(unit=11,file='result.txt')
a=reshape((/2d0,10d0,3d0,&
          3d0,3d0,6d0,&
          2d0,4d0,1d0/),(/3,3/))
call solve(A,3,namda,u,1d-7)
write(11,101)namda,u
101 format(/,T4,'幂法范数单位化计算结果',//,&
          T3,'主特征值为: ',/,F12.7,//,&
          T3,'主特征向量为: ',3(/F12.7))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 4-2 所示。

```
1
2    幂法2范数单位化计算结果
3
4   主特征值为:
5   11.0000000
6
7   主特征向量为:
8    0.3713907
9    0.7427814
10   0.5570860
11
```

图 4-2　幂法 2 范数单位化方法

可以验证以上计算结果即原矩阵的主特征值及主特征向量。

4.3　Rayleigh加速方法

1. 实验基本原理

上一个实验指出乘幂法在最大特征值与次最大特征值的绝对值比较接近时往往收敛速度会不是很快，针对这样的情况计算数学家发展了一些加速方法，本实验介绍其中比较典型的一种加速方法，Rayleigh 加速方法。

Hermitian 矩阵 $A \in C^{n\times n}$ 的 Rayleigh 商（也叫 Rayleigh-Ritz 比）是一个标量，定义为

$$R(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x},\mathbf{A}) = \frac{(\mathbf{Ax},\mathbf{x})}{(\mathbf{x},\mathbf{x})} = \frac{\mathbf{x}^H\mathbf{Ax}}{\mathbf{x}^H\mathbf{x}}$$

通常 $\mathbf{x}$ 是待选择的向量，目的是使用 Rayleigh 商达到极值。

由此，我们可以把 Rayleigh 商应用到主特征值计算的乘幂法当中，提高乘幂法的收敛速度。

这里直接给出 Rayleigh 加速方法的算法：

任意给定 $\mathbf{x}^{(0)} \in R^n$，给定误差容限 TOL（小量）。

对于 $k = 1,2,\cdots$ 做（3）到（6）

$$\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}$$

$$m_k = \frac{\left(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)},\mathbf{x}^{(k-1)}\right)}{\left(\mathbf{x}^{(k-1)},\mathbf{x}^{(k-1)}\right)}$$

$$\mathbf{x}^{(k)} = \frac{\mathbf{y}^{(k)}}{m_k}$$

如果 $|m_k - m_{k-1}| < TOL$，跳出循环。

结束。

上面的算法已经详细的描述了计算流程，只要把这个算法翻译成程序设计语言就可以。

在第 6 步循环判断时，可以选择相对误差

$$\frac{|m_k - m_{k-1}|}{|m_k|} < TOL$$

当然也可以用迭代前后两次特征向量的误差向量范数作为迭代停止条件。

2. 实验目的与要求

- 知道 Rayleigh 商的相关概念。
- 明白 Rayleigh 加速原理。
- 能够正确的编程实现加速算法，并处理相关特征值计算问题。
- 处理好迭代次数与迭代停止条件，注意不能进入死循环。
- 对结果作出合理分析。

3. 实验内容与数据来源

已知矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}4 & -1 & 1\\ -1 & 3 & -2\\ 1 & -2 & 3\end{bmatrix}$$

计算 A 的主特征值及其对应的特征向量。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
NAMDA	REAL*8	主特征值
U	REAL*8(N)	主特征向量
输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8(N,N)	要计算的方阵

（续表）

输入参变量	数据类型	变量说明
N	INTEGER	矩阵维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module Rayleigh
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-31
```

```
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Rayleigh 加速计算对称矩阵特征值模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   内积函数
!     3.   范数函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,N,namda,u,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : Rayleigh 加速计算对称矩阵特征值函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  N 矩阵维数
!      2.  A 输入矩阵 N*N 维
!      3.  tol 控制精度
!  Output parameters  :
!      1.  namda 主特征值
!      2.  u     主特征向量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
real*8::A(n,n)
real*8::u(n),u0(n),v(n),vt(n)
!设置迭代初值向量
do i=1,n
  u0(n)=1d0
end do
u=u0
m0=0
do k=1,500
v=matmul(A,u)
call vvdot(v,u,temp1,n)
call vvdot(u,u,temp2,n)
!Rayleigh 商
m1=temp1/temp2
u=v/m1
!判断迭代停止标准
```

```
if (dabs(m1-m0)<tol) exit
!更新 m 值
m0=m1
end do
namda=m1
!特征向量归一化
call norm(u,rou,n)
u=u/rou
end subroutine solve
subroutine norm(r,rou,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算向量范数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  r 输入向量
!       2.  n 向量维数
!  Output parameters  :
!       1.  rou 向量长度（范数）
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r(n)
rou=0d0
do i=1,n
rou=rou+r(i)**2
end do
rou=dsqrt(rou)
end subroutine norm
subroutine vvdot(r1,r2,dot,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  向量内积
!               r1(1)*r2(1)+r1(2)*r2(2)+...
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  r1,r2 欲求之向量
!       2.  n 维数
!  Output parameters  :
!       1.  dot 向量内积
!       2.
```

```
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r1(n),r2(n)
dot=0d0
do i=1,n
dot=dot+r1(i)*r2(i)
end do
end subroutine vvdot
end module Rayleigh
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt 计算结果文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use Rayleigh
implicit real*8(a-z)
real*8::A(3,3),u(3)
open(unit=11,file='result.txt')
a=reshape((/4d0,-1d0,1d0,&
          -1d0,3d0,-2d0,&
          1d0,-2d0,3d0/),(/3,3/))
call solve(A,3,namda,u,1d-7)
write(11,101)namda,u
101 format(/,T4,'Rayleigh 加速计算对称特征值',//,&
          T3,'主特征值为: ',/,F12.7,//,&
          T3,'主特征向量为: ',3(/F12.7))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件如图 4-3 所示。

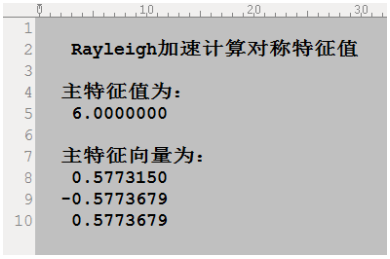


图 4-3 Rayleigh 加速计算对称矩阵特征值

若要判断计算结果是否正确，可以把特征值及特征向量带入原矩阵看矩阵方程两边是否相等。

4.4 修正的Rayleigh加速方法

1. 实验基本原理

修正的 Rayleigh 加速方法与 Rayleigh 加速方法差别不是很大，主要差别在于迭代初值的选择，当然由此引起 Rayleigh 商计算上的一些简化，当然客观的说这减少了计算机的运算量，在迭代过程中减少了向量点乘与与代数除法运算，从这个角度而言修正的算法也是有意义的。

在 Rayleigh 加速方法中，当$(\mathbf{x},\mathbf{x})=\|\mathbf{x}\|_2^{\,2}=1$时，$R(\mathbf{x})=(\mathbf{Ax},\mathbf{x})$。如果在迭代过程中中，$\mathbf{x}^{(k)}$用欧氏范数规范化，就是修正的 Rayleigh 加速方法，下面给出具体的算法步骤。

给定误差容限 TOL>0 和$\mathbf{x}^{(0)}\in R$使$\left\|\mathbf{x}^{(0)}\right\|_2=1$，如$\mathbf{x}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{n}}(1,\cdots,1)^T$。

对于$k=1,2,\cdots$做（3）到（6）

$$\mathbf{y}^{(k)}=\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)}$$

$$m_k=\left(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(k-1)},\mathbf{x}^{(k-1)}\right)=\left(\mathbf{y}^{(k)}\right)^T\mathbf{x}^{(k-1)}$$

$$\mathbf{x}^{(k)}=\mathbf{y}^{(k)}/\left\|\mathbf{y}^{(k)}\right\|_2$$

如果$|m_k-m_{k-1}|<TOL$，跳出迭代循环。

结束。

可以看到这几个算法差别不是特别大，当然从算法构造的出发点的思想是有意义的，

本实验中可以把可以把迭代初值直接用程序方式生成。在迭代过程中对 Rayleigh 商做一些简化。

2. 实验目的与要求

- 明白修正的 Rayleigh 加速方法的原理。
- 能够快速的把基本原理部分的算法用计算机编程语言实现。
- 能用编写好的程序处理相关特征值计算问题。
- 对计算结果作出合理分析。

3. 实验内容与数据来源

用修正的 Rayleigh 加速方法计算矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 1.867310185256756 & 0.676506748114136 & 1.832446222432665 \\ 0.676506748114136 & 0.438313983411573 & 0.927636560784582 \\ 1.832446222432665 & 0.927636560784582 & 2.421070728983985 \end{bmatrix}$$

的主特征值及对应的特征向量。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
NAMDA	REAL*8	主特征值
U	REAL*8(N)	主特征向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要计算的方阵
N	INTEGER	矩阵维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
    module mody_Rayleigh
    !-----------------------------------------module coment
    !  Version     :  V1.0
    !  Coded by    :  syz
    !  Date        :  2010-6-1
    !-----------------------------------------------------
    !  Description :   修正 Rayleigh 加速方法
    !
    !-----------------------------------------------------
    !  Parameters  :
```

```
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   内积函数
!     3.   范数函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,N,namda,u,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : Rayleigh 加速计算对称矩阵特征值函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  N 矩阵维数
!      2.  A 输入矩阵 N*N 维
!      3.  tol 控制精度
!  Output parameters  :
!      1.  namda 主特征值
!      2.  u     主特征向量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
real*8::A(n,n)
real*8::u(n),u0(n),v(n)
!设置迭代初值向量
do i=1,n
  u0(n)=1d0
end do
call norm(u0,rou,n)
!u 已经单位化
u=u0
m0=0
do k=1,500
v=matmul(A,u)
call vvdot(v,u,m1,n)
call norm(v,rou,n)
u=v/rou
!判断迭代停止标准
if (dabs(m1-m0)<tol) exit
!更新 m 值
m0=m1
end do
namda=m1
```

```
!特征向量归一化
call norm(u,rou,n)
u=u/rou
end subroutine solve
subroutine norm(r,rou,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算向量范数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  r 输入向量
!       2.  n 向量维数
!  Output parameters  :
!       1.  rou 向量长度（范数）
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r(n)
rou=0d0
do i=1,n
rou=rou+r(i)**2
end do
rou=dsqrt(rou)
end subroutine norm
subroutine vvdot(r1,r2,dot,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-6-1
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  向量内积
!               r1(1)*r2(1)+r1(2)*r2(2)+...
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  r1,r2 欲求之向量
!       2.  n 维数
!  Output parameters  :
!       1.  dot 向量内积
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
```

```
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r1(n),r2(n)
dot=0d0
do i=1,n
dot=dot+r1(i)*r2(i)
end do
end subroutine vvdot
end module mody_Rayleigh
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt 计算结果文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use mody Rayleigh
implicit real*8(a-z)
real*8::A(3,3),u(3)
open(unit=11,file='result.txt')
a=reshape((/1.867310185256756d0,0.676506748114136d0,&
1.832446222432665d0,&
   0.676506748114136d0, 0.438313983411573d0, &,
0.927636560784582d0,&
   1.832446222432665d0,0.927636560784582d0,& 2.421070728983985d0/),(/3,3/))
call solve(A,3,namda,u,1d-7)
write(11,101)namda,u
101 format(/,T4,'修正 Rayleigh 加速方法',//,&
          T3,'主特征值为: ',/,F12.7,//,&
          T3,'主特征向量为: ',3(/F12.7))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 4-4 所示。

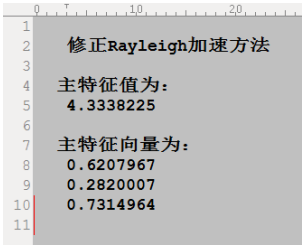


图 4-4　修正 Rayleigh 商加速方法

同样，可以把计算结果带入原矩阵，看矩阵方程两边是否相等，如果相等表示计算是可靠的，如果差别比较大，则有待于分析查找原因。

4.5　QR分解方法求全部特征值

1. 实验基本原理

QR 算法是计算矩阵特征值问题最有效的方法之一，也是普遍被用于工程实践中的一种方法。QR 方法基于对于任何实的非奇异矩阵都可以分解为正交矩阵 Q 和上三角矩阵 R 乘积，而且当 R 的对角元素符号取定时，分解是唯一的。

QR 方法的基本计算步骤如下，令 $A=A_1$，对 A_1 正交分解，分解为正交矩阵 Q_1 和上三角矩阵 R_1 的乘积

$$A_1=Q_1R_1$$

然后将得到的因式矩阵 Q_1 与 R_1 反序相乘，得

$$A_2=R_1Q_1$$

以 A_2 代替 A_1，重复以上步骤得到 A_3，所以得到 QR 算法的计算公式为

$$\begin{cases}A_k=Q_kR_k\\A_{k+1}=R_kQ_k\end{cases}$$

2. 实验目的与要求

- 熟悉 QR 方法的基本思想。

- 理解 QR 方法的计算流程。

- 能够编程实现 QR 方法。
- 给出合理的迭代停止条件，防止进入死循环，同时设置最大允许迭代次数，如果超过次数还没收敛，则停止迭代。

3. 实验内容与数据来源

已知矩阵

$$A=\begin{bmatrix}2 & 1 & 0\\ 1 & 3 & 1\\ 0 & 1 & 4\end{bmatrix}$$

采用 QR 方法计算 A 的全部特征值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
NAMDA	REAL*8(N)	全部的特征值
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
A	REAL*8(N,N)	要计算的方阵
N	INTEGER	矩阵维数
TOL	REAL*8	误差容限

5．实验操作指导

```
module eig_qr
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   QR 分解计算全部特征值模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.        方法函数
!     2.        QR 分解函数（采用 G-S 正交化方法）
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(A,N,namda,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  QR 分解计算全部特征值
!
!  Post Script :
!      1.       QR 分解采用修正的 G-S 分解方法，当然也可以
!      2.        使用 Householder 或者 Givens 变换方法
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A 需要计算的矩阵
!      2.   N 矩阵的维数
!  Output parameters  :
!      1.   namda  特征值组成的向量 N 维
!      2.   tol    用户指定的误差容限
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::A(N,N),namda(N)
real*8::A1(N,N),Q(N,N),R(N,N)
integer::i,j,k
A1=A
!循环迭代,最大允许迭代次
do i=1,200
   call gram dec(A1,Q,R,N,N)
   A1=matmul(R,Q)
! 判断迭代停止标准
   do k=1,N
    ds=0d0
    ds=ds+A1(k,k)**2
   end do
   do j=1,N
   namda(j)=A1(j,j)
   end do
    if (ds<tol) exit
end do
end subroutine solve
subroutine gram_dec(A,Q,R,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   采用修正的 Gram-Schmidt 分解求矩阵的 QR 分解
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A 原始矩阵
!      2.    A(M,N)
!  Output parameters  :
!      1.    分解结果为 Q(M,N):注意 Q 不是方阵，Q 列向量为标准
```

```
!            正交基
!      2.              R(N,N): R 是方阵
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  注意矩阵的维数，分解后 Q 列向量是正交的
!      2.  关于编程方法可以参看《矩阵分析与应用》张贤达编著
!      3.  详细的数学解释，可以参看麻省理工学院的
!          线性代数教材《Linear Algebra with Application》
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
integer::i,j,k
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::vec temp(M)
R(1,1)=dsqrt(dot_product(a(:,1),a(:,1)))
Q(:,1)=a(:,1)/R(1,1)
do k=2,N
     do j=1,k-1
       R(j,k)=dot_product(Q(:,j),A(:,k))
     end do
     vec_temp=A(:,k)
     do j=1,k-1
       vec temp=vec temp-Q(:,j)*R(j,k)
     end do
   R(k,k)=dsqrt(dot_product(vec_temp,vec_temp))
   Q(:,k)=vec temp/R(k,k)
end do
end subroutine gram dec
end module eig qr
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.06
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  QR 分解计算全部特征值
!
!  Post Script :
!      1.        QR 分解采用的修正的 G-S 正交化方法
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.     result.txt  结果输出文件
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
use eig_qr
implicit real*8(a-z)
real*8::A(3,3),namda(3)
open(unit=11,file='result.txt')
```

```
A=reshape((/2d0,1d0,0d0,&
          1d0,3d0,1d0,&
          0d0,1d0,4d0/),(/3,3/))
!调用方法函数
call solve(A,3,namda,1d-7)
write(11,101)namda
101 format(/,T4,'QR 分解计算全部特征值',//,&
          T3,'特征值为：',3(/F16.10))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 4-5 所示。

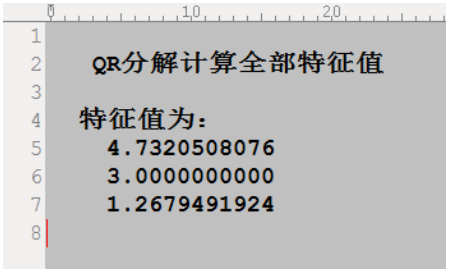


图 4-5　QR 分解解算矩阵的特征值

计算结果已经给出了该矩阵的全部特征值。在实际应用时，有时为了减少计算机运算量，常常先通过正交变化把矩阵化为 Hessenberg 矩阵 **H**，然后再对 **H** 作 QR 分解。关于矩阵特征值及特征向量是数值代数一个比较活跃的领域，还有诸多内容没有介绍，有兴趣的读者可以翻阅一些专著，如 Golub 的《MATRIX COMPUTATION》（1996 年 The Johns Hopkins University Press 出版）等。另外一些数值代数包如 LAPACK 等，都提供了相当丰富的特征值问题的处理方法，有兴趣的读者也可以从网上下载并参照说明自行调用。

本章小结

在这一章中介绍了矩阵特征值与特征向量的常用方法，鉴于本书不是一本矩阵分析教材，因此本章省略了一些基础内容，同时也省略了一些数学理论。矩阵特征值问题内容是很丰富的，所以在这一章中介绍的也只是一些比较常用而且实用的算法，对于一些计算效率比较低下的方法，比如 Jacobi 方法这里不再介绍。

计算特征值与特征向量主要有两类方法，一是从原始矩阵出发，求出其多项式，再求出多项式的根。这个方法虽然理论上可行，但实际上效率一般，并不高效，所以基本上不被采用。比较实用的是把特征值和特征向量作为一个序列极限来求得，了解这一思想可以有助于理解本章中各种算法。

第 5 章

◂非线性方程求根▸

非线性方程的数值方法是数值计算课程的基本内容之一，广泛存在于科研问题中。对于一个比较大的科研项目，在相当多的时候我们都要面对非线性方程的计算。在本章中，我们按照计算的基本思想把计算方法分为二分法、不动点迭代、牛顿法、割线法等，针对每一种计算思想又分别给出一些改进算法。

就本章介绍的方法而言本身并不难理解，而且一般都有直观的几何意义。在工程实践中，要实现这些方法也不会需要很多代码，比较容易实现。不过，这些方法的基本思想在数学理论中往往有深刻的内涵。

本章我们主要介绍非线性方程

$$f(x)=0$$

的数值计算方法。对于上述方程，除了一些比较特殊的方程可以直接给出根的表达式，一般需要用到迭代法。所以本节需要对迭代法及其相关问题作一简单介绍。

设 $f:A\to A$ 是集合 A 到自身的一个映射，其中集合 A 可以是实数集合或复数集合。这个映射把集合 A 映入自身。同样，我们考虑 f 对自身的复合映射：

$$p\mapsto f(f(p)),\forall p\in A$$

可以把这个映射记作： $f^2:A\mapsto A$ 。这里 f^2 只是一个映射记号，而不是函数的平方。

如果把映射 $f^2:A\mapsto A$ 又可以复合以 f 而得到新的映射： $p\mapsto f(f^2(p)),\forall p\in A$ 。并记为 $f^3:A\mapsto A$ 。如此反复下去，便得到一个映射序列

$$f,f^2,f^3,\cdots,f^n,\cdots$$

这样便产生一个迭代序列。

对于迭代法，一般需要考虑迭代法的构造、收敛性、收敛速度与误差估计等问题。对于非线性方程 $f(x)=0$ 一个迭代法产生的序列是否收敛于方程的一个根，通常于初值有关，如果从任何可取的初值出发都能保证收敛，则称为大范围收敛。如果只是在初值选取充分接近根时才收敛，则称为局部收敛。

为了衡量迭代的收敛速度，可以用收敛阶数作为一个衡量标准。设一个迭代法收敛，

$\lim\limits_{k\to\infty} x_k = p$，p 是方程 $f(x)=0$ 的一个解。令

$$e_k = x_k - p$$

如果存在实数 m 和常数 C，使得

$$\lim_{x\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|} = C$$

就称迭代法为 m 阶收敛。M 的大小反映了收敛速度，如果 m=1，则是线性收敛的。对于 m>1 的情况，称为超线性收敛。

为了控制迭代法的终止问题，通常可以选择以下的一些准则。

（1）如果 $|f(x_n)| < TOL$（TOL 为误差容限）停止迭代。但是这样做有一个缺陷，有可能会出现 $f(x_n)$ 很接近 0，但是 x_n 与方程的根相差比较远。

（2）$|x_n - x_{n-1}| < TOL$，则停止迭代。缺点是可能出现 x_n 与 x_{n-1} 很接近，但是 x_n 与方程的根相差比较大。当然这样的情况是和上一种情况不同的，出现这些情况的原因和函数 $f(x)$ 的性质有关。

（3）选择相对误差作为停止迭代的标准 $\dfrac{|x_n - x_{n-1}|}{x_n} < TOL$。

实际应用中，应该考虑函数 $f(x)$ 的性质，选择迭代停止的标准，同时比较好的措施可以在程序设计时候考虑增加参数，控制迭代次数，当超过一定次数还没符合控制条件时给出警告信息。

5.1　Bolzano二分法

1. 实验基本原理

Bolzano 二分法又叫区间半分法是一种简单直观的方法，其基本的数学原理基于数学分析中的介值定理。这里简要阐述二分法的数学原理。

对于实函数方程

$$f(x)=0$$

设函数 $f(x)$ 在区间[a，b]上连续，而且 $f(a)f(b)<0$，则 $f(x)$ 在区间[a，b]上至少有一个根，这是很容易理解的。

记 $[a,b]=[a_1,b_1]$，设 p_1 为 $[a_1,b_1]$ 中点：

$$p_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$$

事先给定一个误差容限 TOL1（足够小），如果 $|f(p_1)| < TOL1$，则 p_1 是原方程 $f(x)=0$ 一个很不错的近似根。

如果 $|f(p_1)| > TOL1$，那么我们并不满足于 p_1 作为近似的方程的根。二分法的思想是我们

在$[a_1,p_1]$与$[p_1,b_1]$中更细一步的寻找根，具体在哪个区间是很容易实现的。如果$f(p_1)f(b_1)<0$则表明则两点异号，则根必然在$[p_1,b_1]$这个区间里。如果$f(p_1)f(b_1)>0$则根必然在$[a_1,p_1]$这个区间里。这样我们就把原来的我们对根的寻找由$[a_1,b_1]$区间缩小了一半，如此反复，不断缩小区间，当区间缩小到我们可以接受的范围内，我们就用区间里的近似值代替真值。

上述过程是一个迭代过程，判断计算停止的条件之一是 TOL1，最好同时还要给出区间容限 TOL2，即当区间缩小到一定范围以后停止迭代。

下面给出二分法的算法：

输入：区间$[a,b]$，最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL。

输出：方程的根x，该点的函数值$f(x)$，实际迭代次数$iter$。

处理：01 k=1。

02 当 k<=MAX 时，做03~07处理。

03 计算$c=\dfrac{a+b}{2}$，$f(c)$。

04 如果$f(c)=0$，则停止循环，输出结果。

05 如果$f(a)f(c)<0$，则

$b=c$

否则$a=c$

06 计算$df=|f(a)-f(b)|$(也可以计算$dx=|a-b|$作为判断标准,依需求而定)。

07 如果$df<TOL$,则停止循环。

08 输出方程的根c，该点的函数值$f(c)$，实际迭代次数$iter$。

09 结束。

2. 实验目的与要求

- 明白二分法基本思想。
- 能够给出二分法的伪代码。
- 能够编程实现二分法，处理非线性方程问题。
- 编程中，需要注意精度控制问题。

3. 实验内容与数据来源

使用二分法计算方程函数 $f(x)=(x-1)^3-3x+2$ 在区间 $[2,4]$ 上的根，并同时给出该点的函数值与实际运算迭代次数。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module bisect
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  不动点迭代法计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.    MAX 最大允许迭代次数
!     2.    tol 误差容限
!     3.    a,b  为区间[a,b]
!  Contains    :
!     1.   方程函数
!     2.   方法函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer ::MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::a=2d0,b=4d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  二分法函数
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer iter,i
do i=1,MAX
   c=(a+b)/2D0
   if (func(c)==0) exit
   if (func(a)*func(c)<0d0) then
       b=c
   else
       a=c
   end if
   dfx=dabs(func(a)-func(b))
   if (dfx<tol) exit
   !--------这段用于中间输出结果，这里用于分析，实际计算中可以注释掉
   write(102,*)i,c,func(c)
   !-----------
end do
   x=c
!根
   fx=func(c)
!函数值
  iter=i
!实际迭代次数
end subroutine
function func(x)
!---------------------------------function  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  要计算的方程函数，其中 f(x)=0
!
!-----------------------------------------------------
 implicit real*8(a-z)
  func=(x-1d0)**3-3d0*x+2d0
end function func
end module bisect
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010 年月日
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  二分法主函数
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.    result.txt   计算结果文件
!      2.   IM_result.txt  中间结果
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use bisect
implicit real*8(a-z)
integer iter
open(unit=101,file='result.txt')
!记录中间结果
open(unit=102,file='Im result.txt')
call solve(x,fx,iter)
write(101,501)x,fx,iter
501 format(T20,'二分法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序编译连接，运行后得到结果产生两个文件，计算结果保存在文件 result.txt 文件中，结果如图 5-1 所示。

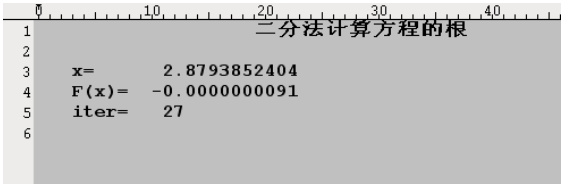


图 5-1　二分法计算结果

中间结果保存在文件 Im_result.txt 文件中，中间结果如表 5-1 所示。

表 5-1　二分法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	3.00000000000000	1.00000000000000
2	2.50000000000000	-2.12500000000000
3	2.75000000000000	-0.890625000000000
4	2.87500000000000	-3.320312500000000E-002
5	2.93750000000000	0.460693359375000
6	2.90625000000000	0.208160400390625
7	2.89062500000000	8.609390258789062E-002

8	2.88281250000000	2.610063552856445E-002
9	2.87890625000000	-3.637254238128662E-003
10	2.88085937500000	1.121016591787338E-002
11	2.87988281250000	3.781077452003956E-003
12	2.87939453125000	7.056735921651125E-005
13	2.87915039062500	-1.783679457730614E-003
14	2.87927246093750	-8.566400592826540E-004
15	2.87933349609375	-3.930573532215931E-004
16	2.87936401367188	-1.612502478849365E-004
17	2.87937927246094	-4.534275706546964E-005
18	2.87938690185547	1.261197289181837E-005
19	2.87938308715820	-1.636547413319533E-005
20	2.87938499450684	-1.876771132280908E-006

（续表）

迭代序列	x	$f(x)$
21	2.87938594818115	5.367595751870624E-006
22	2.87938547134399	1.745411028153399E-006
23	2.87938523292542	-6.568037314025332E-008
24	2.87938535213470	8.398652475705148E-007
25	2.87938529253006	3.870924176752055E-007
26	2.87938526272774	1.607060173824948E-007
27	2.87938524782658	4.751282123294231E-008

表 5-1 给出了计算机处理的详细过程，其中第一列为实际迭代序列，第二列为给出的方程的根，可以看出逐步逼近要计算的结果，第三列为根对应的函数值，可以看到函数值越来越接近零。

二分法对函数的要求较低，计算思想朴素直观，也很容易用计算机编程实现，不过二分法收敛速度不是很快。有时候，可以把这个方法计算的值作为初始值的近似。

5.2 Picard迭代法

1. 实验基本原理

对于非线性方程

$$f(x)=0$$

常常可以化成等价的方程

$$x=g(x)$$

可以选取一个初始近似值 x_0，构造迭代序列

$$x_k=g(x_{k-1}),k=1,2,\cdots$$

如此产生序列 $\{x_k\}$。这种迭代方法称为不动点迭代，或 Picard 迭代。这个原理看似很容

易直观理解，但是却有相当深刻的数学内涵，数学系的学生在泛函分析与微分方程理论等多门专业课程里都会遇到。如果 $g(x)$ 连续，而且 $\lim_{k\to\infty} x_k = p$，则 p 是 g 的一个不动点。因此 p 为方程 $f(x)=0$ 的一个根。

下面的定理给出了迭代收敛性问题。假设 $g(x)$ 为定义在区间[a,b]上的实函数，它满足以下条件：

（1） $g(x)\in[a,b],\forall x\in[a,b]$；

（2）利普希次条件，且利普希次常数 L<1，即存在正常数 L<1，使得

$$\left|g(x)-g(y)\le L|x-y|,\right|\forall x,y\in[a,b]$$

那么对任意的初始值 $\forall x_0\in[a,b]$，由于 Picard 迭代产生的序列都收敛于唯一的不动点 p。

下面给出不动点迭代的算法：

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代初值 x_0。

输出：方程的根 x，该点的函数值 $f(x)$，实际迭代次数 *iter* 。

处理：01　k=1。

02　令 $x_1=x_0$

03　当 k<=MAX 时，做04~07处理。

04　计算 $f(x_1)$。

05　令 $x_2=f(x_1)+x_1$。

06　计算 $dx=|x_2-x_1|$。

07　如果 $dx<TOL$，则停止循环。

08　令 $x_1=x_2$。

09　输出方程的根 $c=x_2$，该点的函数值 $f(c)$，实际迭代次数 *iter* 。

10　结束。

2. 实验目的与要求

- 熟悉不动点迭代的基本原理。
- 了解不动点迭代的计算流程。
- 能编程实现不动点迭代方法，计算非线性方程问题。

3. 实验内容与数据来源

计算 4 阶的勒让德多项式等于 0 在宗量等于 0.3 附近的根，其中 4 阶的勒让德多项式为

$$P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module picard
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  不动点迭代法计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve 不动点迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=0.3
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  不动点迭代计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
```

```
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x1=x0
do i=1,MAX
    x2=func(x1)+x1
    dx=dabs(x2-x1)
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(102,*)i,x2,func(x2)
    !---------
    if (dx<tol) exit
    x1=x2
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i
end subroutine solve
function func(x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程函数值
implicit real*8(a-z)
  func=35d0*x**4-30*x**2+3d0
  func=func/8d0
end function func
end module  picard
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   不动点迭代计算方程的根主函数
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.   IM_result.txt 计算的中间结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use picard
implicit real*8(a-z)
integer::iter
open(unit=101,file='result.txt')
open(unit=102,file='Im_result.txt')
call solve(x,fx,iter)
write(101,501)x,fx,iter
501 format(T20,'不动点迭代法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6．结论与分析

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 存放计算结果，如图 5-2 所示。

```
不动点迭代法计算方程的根

x=      0.3399809991
F(x)=   0.0000000829
iter=   92
```

图 5-2　不动点迭代法计算结果

文件 Im_result.txt 记录了计算机计算的详细经过，如表 5-2 所示。

表 5-2　不动点迭代序列

迭代序列	x	$f(x)$
1	0.3729374907	-0.0619293054
2	0.3110081854	0.0532093806
3	0.3642175660	-0.0454663861
4	0.3187511799	0.0391545777
5	0.3579057576	-0.0335738366
6	0.3243319210	0.0289432142
7	0.3532751351	-0.0248680275
8	0.3284071077	0.0214474013
9	0.3498545089	-0.0184499173

10	0.3314045916	0.0159142811
⋮	⋮	⋮
80	0.3399807796	0.0000004916
81	0.3399812712	-0.0000004238
82	0.3399808473	0.0000003654
83	0.3399812128	-0.0000003151
84	0.3399808977	0.0000002716
85	0.3399811693	-0.0000002342
86	0.3399809352	0.0000002019
87	0.3399811371	-0.0000001741
88	0.3399809630	0.0000001501
89	0.3399811131	-0.0000001294
90	0.3399809837	0.0000001116
91	0.3399810952	-0.0000000962
92	0.3399809991	8.29160337E-8

同样的一个非线性方程，可以选择不同的不动点迭代形式，往往不同形式的迭代收敛速度是不同的，如果选择不合适，甚至出现不收敛的情况。一般而言，不动点迭代法，收敛速度依然不是很快，有必要寻求其他方法。

5.3　Aitken加速与Steffensen迭代方法

1. 实验基本原理

不动点迭代法虽然简单，容易实现，但往往有时候收敛速度不够快。在这样的情况下，我们通常会考虑加速收敛。

假设一个序列$\{x_n\}: x_0, x_1, x_2 \cdots$线性收敛于 p，则有

$$\lim_{n\to\infty} \frac{x_{n+1}-p}{x_n-p} = \lambda, (\lambda \neq 0)$$

当 n 足够大时，有

$$\frac{x_{n+1}-p}{x_n-p} \approx \frac{x_{n+2}-p}{x_{n+1}-p}$$

把上式展开，我们可以得到

$$p \approx x_n - \frac{(x_{n+1}-x_n)^2}{x_{n+2}-2x_{n+1}+x_n}$$

这样我们可以定义

$$\tilde{x}_{n+1} \approx x_n - \frac{(x_{n+1}-x_n)^2}{x_{n+2}-2x_{n+1}+x_n}$$

作为迭代方法，这就是 Aitken 迭代。

如果我们采用差分符号那么记法会更简洁。可以定义一阶差分

$$\Delta x_n = x_{n+1} - x_n$$

二阶差分

$$\begin{aligned}\Delta^2 x_n &= \Delta(\Delta x_n)\\ &= x_{n+2} - 2x_{n+1} + x_n\end{aligned}$$

那么 Aitken 迭代可以表示为

$$\tilde{x}_{n+1} \approx x_n - \frac{(\Delta x_n)^2}{\Delta^2 x_n}$$

Aitken 加速方法不管原序列 $\{x_k\}$ 是如何产生的，如果把 Aitken 方法与不动点迭代法结合，则得到如下迭代格式

$$\begin{aligned}&y_k = g(x_k), z_k = g(y_k)\\ &x_{k+1} = x_k - \frac{(y_k - x_k)^2}{z_k - 2y_k + x_k}, k = 0,1,2\cdots\end{aligned}$$

此即 Steffensen 迭代法。

Steffensen 迭代法解方程 $x = g(x)$ 可以看成是另一种不动点迭代：

$$x_{k+1} = g(x_k), k = 0,1,2\cdots$$

其中迭代函数为

$$\varphi(x) = x - \frac{[g(x)-x]^2}{g(g(x))-2g(x)+x}$$

由于 Steffensen 方法实际上已经包含了 Aitken 方法，更为实用，给出 Aitken 方法已经没有太大意义，这里编程就直接给出 Steffensen 方法。这里给出算法：

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代初值 x_0。

输出：方程的根 x，该点的函数值 $f(x)$，实际迭代次数 *iter*。

处理：01 k=1。

02 令 $x_1 = x_0$

03 当 k<=MAX 时，做03~09处理。

04 计算 $x_2 = f(x_1) + x_1$。

05 计算 $x_3 = f(x_2) + x_2$。

06 计算 $\bar{x} = x_1 - \dfrac{(x_2 - x_1)^2}{(x_3 - 2x_2 + x_1)}$。

07 计算 $dx = |\bar{x} - x_1|$。

08 如果 $dx < TOL$，则停止循环。

09 令 $f(x)$。

10 输出方程的根 $c = \bar{x}$，该点的函数值 $f(c)$，实际迭代次数 $iter$。

11 结束。

2. 实验目的与要求

- 理解 Aitken 加速方法的基本原理。
- 能自己推导出 Aitken 加速方法。
- 理解 Steffensen 方法的原理。
- 能够编程实现 Steffensen 方法。
- 对比不动点迭代法，比较收敛速度。

3. 实验内容与数据来源

采用加速方法计算方程

$$e^{-x} - x = 0$$

在 $x = 0.5$ 附近的根。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module Steffensen
!---------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Steffensen 加速计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve Steffensen 方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!      3.    picard  不动点迭代法的方法函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=0.5d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Steffensen 加速方法处理函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
!这句为标题，计算可以注释掉
   write(102,*)'Steffensen 迭代法中间结果'
!------------------
x1=x0
do i=1,MAX
   x2=func(x1)+x1
   x3=func(x2)+x2
   x1_bar=x1-(x2-x1)**2/(x3-2*x2+x1)
   dx=dabs(x1_bar-x1)
```

```
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(102,*)i,x1_bar,func(x2)
    !---------
    if (dx<tol) exit
    x1=x1_bar
end do
    x=x1_bar
    fx=func(x2)
    iter=i
end subroutine solve
subroutine picard(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  不动点迭代计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1. 此函数用于对比 Steffensen 方法，实际使用时可以删除该 Subroutine
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
!这句为标题，计算可以注释掉
    write(104,*)'picard 迭代法中间结果'
!------------------
x1=x0
do i=1,MAX
    x2=func(x1)+x1
    dx=dabs(x2-x1)
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(104,*)i,x2,func(x2)
    !---------
    if (dx<tol) exit
    x1=x2
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i
end subroutine picard
function func(x)
!---------------------------------function  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 func=dexp(-x)-x
end function func
end module  Steffensen
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   Steffensen 迭代法主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.   IM result.txt 计算的中间结果
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use Steffensen
implicit real*8(a-z)
integer::iter_s,iter_p
open(unit=101,file='result_s.txt')
open(unit=102,file='Im result s.txt')
open(unit=103,file='result p.txt')
open(unit=104,file='Im_result_p.txt')
call picard(x_p,fx_p,iter_p)
write(103,501)x_p,fx_p,iter_p
501 format(T20,'Picard 不动点迭代法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
call solve(x_s,fx_s,iter_s)
write(101,502)x_s,fx_s,iter_s
502 format(T20,'Steffensen 加速计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行产生 4 个数据文件，其中 result_a.txt 用于存放 Steffensen 加速方法的计算结果、result_p.txt 用于存放 Picard 迭代法的计算结果、Im_reslut_a.txt 用于存放 Steffensen 方法的中间结果、Im_result_p.txt 用于存放 Picard 方法的中间结果。

Steffensen 方法结果如图 5-3 所示。

Picard 方法计算结果如图 5-4 所示。

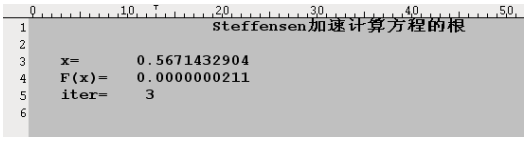


图 5-3　Steffensen 加速方法计算结果

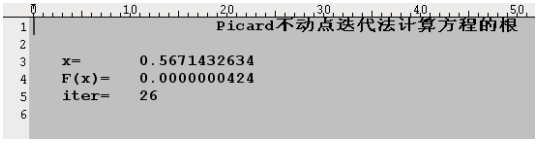


图 5-4　Picard 迭代法计算结果

Steffensen 方法计算的中间结果如表 5-3 所示。

表 5-3　Steffensen 方法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	0.567623876410920	-6.129144782002838E-002
2	0.567143314105564	4.270607751841737E-004
3	0.567143290409784	2.106068552887308E-008

Picard 方法计算的中间结果如表 5-4 所示。

表 5-4　Picard 迭代的比对数据

迭代序列	x	$f(x)$
1	0.60653066	-0.06129145
2	0.54523921	0.03446388

（续表）

迭代序列	x	$f(x)$
3	0.57970309	-0.01963847
4	0.56006463	0.01110752
5	0.57117215	-0.00630920
6	0.56486295	0.00357510
7	0.56843805	-0.00202859
8	0.56640945	0.00115018
9	0.56755963	-0.00065242
10	0.56690721	0.00036998
11	0.56727720	-0.00020984
12	0.56706735	0.00011901
13	0.56718636	-0.00006750
14	0.56711886	0.00003828

15	0.56715714	-0.00002171
16	0.56713543	0.00001231
17	0.56714775	-0.00000698
18	0.56714076	0.00000396
19	0.56714472	-0.00000225
20	0.56714248	0.00000127
21	0.56714375	-0.00000072
22	0.56714303	0.00000041
23	0.56714344	-0.00000023
24	0.56714321	0.00000013
25	0.56714334	-0.00000007
26	0.56714326	4.239169E-008

可以看到，Picard 迭代进行了 26 次，而采用加速方法后，仅迭代三次就已经达到与之相当的计算精度。

有些情况下，不动点迭代法不收敛，采用 Steffensen 迭代法可能收敛，至于原先就收敛的迭代法，采用 Steffensen 迭代，则可以达到二阶收敛。

5.4 Newton-Raphson迭代法

1. 实验基本原理

Newton—Rahpson 迭代方法是解非线性方程比较著名而且也比较有效的方法之一。如果初值比较接近根，收敛速度是很快的。Newton—Rahpson 迭代法也是工程上广泛采用的方法。

Newton 迭代法有比较直观的几何意义。函数方程 $f(x)=0$ 的根是曲线 $y=f(x)$ 与 x 轴的交点的横坐标。通过当前的点做曲线的切线（与一次导数有关），切线方程为

$$y=f(x_k)+f'(x_k)(x-x_k)$$

在上式中令 y=0 得到切线与 x 轴交点的横坐标

$$x=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

于是我们可以构造迭代公式

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

如此反复迭代便可以比较快的得到方程的根，所以 Newton 法又叫切线法。

关于 Newton 迭代法如果函数 $f(x)$ 有二阶以上连续倒数，p 是方程 $f(x)=0$ 的单根，则当 x_0 充分接近 p 时，Newton 迭代法收敛，而且最少二阶收敛。算法如下

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代初值 x_0。

输出：方程的根 x，该点的函数值 $f(x)$，实际迭代次数 *iter* 。

处理：01　k=1。

02　令 $x_1 = x_0$

03　当 k<=MAX 时，做04~07处理。

04　计算 $x_2 = x_1 - \dfrac{f(x_1)}{f'(x_1)}$。

05　计算 $dx = |x_2 - x_1|$。

06　如果 $dx < TOL$，则停止循环。

07　令 $x_1 = x_2$。

08　输出方程的根 $c = x_2$，该点的函数值 $f(c)$，实际迭代次数 *iter* 。

09　结束。

2. 实验目的与要求

- 理解牛顿迭代法的几何意义与数学内涵。
- 明白迭代函数构造原理。
- 牛顿迭代法是最重要的计算非线性方程方法之一，所以要求熟练掌握，能够编程实现。

3. 实验内容与数据来源

用 Newton-Raphson 迭代方法计算方程

$$f(x) = x^3 + 2x^2 + 10x - 20 = 0$$

在[1，2]区间内的一个根。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module newton
!---------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  牛顿迭代计算非线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve 牛顿迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!      3.    dfunc 导函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=1.5d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  牛顿法计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x1=x0
do i=1,MAX
   x2=x1-func(x1)/dfunc(x1)
```

```
    dx=dabs(x2-x1)
    if (dx<tol) exit
    x1=x2

    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(102,*)i,x2,func(x2)
    !---------
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i-1
end subroutine solve
function func(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
   func=x**3+2*x**2+10*x-20d0
end function func
function dfunc(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程导函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   dfunc 方程导函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  dfunc=3*x**2+4*x+10d0
end function dfunc
end module  newton
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   牛顿法计算方程的根主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.   IM_result.txt 计算的中间结果
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use newton
implicit real*8(a-z)
integer::iter
open(unit=101,file='result.txt')
open(unit=102,file='Im_result.txt')
call solve(x,fx,iter)
write(101,501)x,fx,iter
501 format(T20,'牛顿法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 记录了计算结果，如图 5-5 所示。

```
          牛顿法计算方程的根

   x=      1.3688081078
   F(x)=   0.0000000000
   iter=    4
```

图 5-5　牛顿迭代法计算结果

可以看到牛顿迭代法收敛速度还是相当快的，计算的中间数据如表 5-5 所示。

表 5-5　牛顿迭代法计算的中间数据

迭代序列	x	$f(x)$
1	1.37362637362637	0.101788683481715
2	1.36881481962396	1.415933977746420E-004
3	1.36880810783441	2.750830674358440E-010
4	1.36880810782137	0.00000000000000E+000

从程序中可以看出，牛顿法迭代一次，分别需要计算方程函数值一次和导函数值一次。

5.5　重根时的迭代改进

1. 实验基本原理

Newton 迭代法是一种实用性比较强的算法，但是在处理重根运算时候往往效果不是太好，有时候收敛速度会非常的慢。为了处理这一问题，往往我们需要对迭代法进行一些改造。

如果采取以下的迭代方法，计算效果会很不错，但是需要计算二次导数。

$$x_k = x_{k-1} - \frac{F(x_{k-1})}{F'(x_{k-1})}，\text{其中 } F(x) = \frac{f(x)}{f'(x)}$$

展开上市式，便得到迭代公式

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})f'(x_{k-1})}{[f'(x_{k-1})]^2 - f(x_{k-1})f''(x_{k-1})}$$

这里给出算法如下：

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代初值 x_0。

输出：方程的根 x，该点的函数值 $f(x)$，实际迭代次数 $iter$。

处理：01　k=1。

02　令 $x_1 = x_0$

03　当 k<=MAX 时，做04~09处理。

04　计算 $temp1 = f(x)f'(x)$

05　计算 $temp2 = [f'(x)]^2 - f(x)f''(x)$。

06　令 $x_2 = x_1 - \frac{temp1}{temp2}$。

07　$dx = |x_2 - x_1|$。

08　如果 $dx < TOL$，则停止循环。

09　$x_1 = x_2$。

10　输出方程的根 $c = x_2$，该点的函数值 $f(c)$，实际迭代次数 $iter$。

11　结束。

2. 实验目的与要求

- 理解公式的构造方法。
- 会正确使用该公式，知道计算步骤。
- 能编程实现该计算方法。

3. 实验内容与数据来源

分别使用 Newton 迭代法与本实验的加速方法计算以下方程在 $x=1.5$ 附近的根。

$$f(x)=x^4-4x^2+4=0$$

比较收敛速度。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module multiroot
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  重根时改进算法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve 牛顿迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!      3.    dfunc 导函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
```

```
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=1.5d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  重根改进算法
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   引用函数 func  dfunc  d2func
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x1=x0
!标题，实际计算时可以注释掉
write(102,501)
501 format(T20,'重根计算的中间结果')
! --------------
do i=1,MAX
   temp1=func(x1)*dfunc(x1)
   temp2=dfunc(x1)**2-func(x1)*d2func(x1)
   x2=x1-temp1/temp2
   dx=dabs(x2-x1)
   if (dx<tol) exit
   x1=x2
   !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
   write(102,*)i,x2,func(x2)
   !---------
end do
   x=x2
   fx=func(x2)
   iter=i-1
end subroutine solve
subroutine newton(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :  牛顿法计算方程的根
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   引用函数 func  dfunc
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
!标题，实际计算时可以注释掉
write(104,502)
502 format(T20,'牛顿法计算的中间结果')
! --------------
x1=x0
do i=1,MAX
   x2=x1-func(x1)/dfunc(x1)
   dx=dabs(x2-x1)
   if (dx<tol) exit
   x1=x2
   !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
   write(104,*)i,x2,func(x2)
   !---------
end do
   x=x2
   fx=func(x2)
   iter=i-1
end subroutine newton
function func(x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  func=x**4-4*x**2+4d0
end function func
```

```
function dfunc(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程导函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   dfunc 方程导函数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  dfunc=4*x**3-8*x
end function dfunc
function d2func(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程二阶导函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   d2func 方程二阶导数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
d2func=12*x**2-8d0
end function d2func
end module  multiroot
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   重根问题主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result_m.txt 计算结果
!      2.   IM_result_m.txt 计算的中间结果
!      3.   result_n.txt 牛顿法计算结果
!      4.   Im_result_n.txt 牛顿法计算的中间结果
!-----------------------------------------------------
```

```
use multiroot
implicit real*8(a-z)
integer::iter_m,iter_n
open(unit=101,file='result_m.txt')
open(unit=102,file='Im_result_m.txt')
open(unit=103,file='result_n.txt')
open(unit=104,file='Im_result_n.txt')
call solve(x_m,fx_m,iter_m)
write(101,501)x_m,fx_m,iter_m
501 format(T20,'重根改进计算结果',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
call newton(x_n,fx_n,iter_n)
write(103,502)x n,fx n,iter n
502 format(T20,'牛顿法计算结果',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后生成 4 个数据文件，其中 result_m.txt 用于保存改进后方法的计算结果，如图 5-6 所示。

```
                    重根改进计算结果

 x=      1.4142135624
 F(x)=   0.0000000000
 iter=    3
```

图 5-6 改进方法计算结果

文件 result_n.txt 保存采用原始的牛顿法计算结果，如图 5-7 所示。

```
                    牛顿法计算结果

 x=      1.4142136495
 F(x)=   0.0000000000
 iter=   19
```

图 5-7 牛顿迭代法计算情况

文件 Im_result_m.txt 记录了计算机采用改进方法计算的中间结果，如表 5-6 所示。

表 5-6 改进方法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	1.41176470588235	4.789214688472043E-005
2	1.41421143847482	3.608757737083579E-011
3	1.41421356238098	0.000000000000000E+000

文件 Im_result_n.txt 记录了直接采用牛顿法计算的中间结果，如表 5.7 所示。

表 5-7　直接采用牛顿法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	1.45833333333333	1.606204185956894E
2	1.43660714285714	4.075556185719975E
3	1.42549761941756	1.026783518798702E
4	1.41987792168383	2.577088417465845E
5	1.41705139127582	6.455552857964619E
6	1.41563389760442	1.615503010210517E
7	1.41492408625178	4.040782846992386E
8	1.41456891351237	1.010449306448891E
9	1.41439126025950	2.526440523453743E
10	1.41430241689773	6.316498080138899E
11	1.41425799103102	1.579174035981623E
12	1.41423577705225	3.947996596309622E
13	1.41422466980323	9.870078088169976E
14	1.41421911610984	2.467528403826691E
15	1.41421633924764	6.168932031869190E
16	1.41421495079054	1.542055372283357E
17	1.41421425663102	3.855582519918244E
18	1.41421390953562	9.645617637943360E
19	1.41421373588471	2.398081733190338E

计算结果显示，牛顿法需要迭代 19 次，而改进方法仅仅 3 次就达到与之相当的精度，不过改进方法的缺点是需要计算二阶导数。

5.6　割线法

1. 实验基本原理

在 Newton 法计算 $f(x)=0$ 中，迭代过程里下一步是用曲线 $y=f(x)$ 的切线代替曲线 $y=f(x)$，从而把切线与 x 轴的交点横坐标作为 $f(x)=0$ 的根，如此反复。要计算切线的代价是需要计算函数 $y=f(x)$ 的导数。事实上，我们可以考虑迭代前后两次的割线来代替曲线，把割线与 x 轴的交点作为根的近似，如此反复，这样也得到一种求解 $f(x)=0$ 的计算方法，而不需要计算一次导数。

割线的方程为

$$y = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x - x_k)$$

该直线方程与 x 轴交点横坐标容易算出：

$$x = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

我们就把这个 x 作为下一次迭代的初值，那么得到迭代公式

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

这里给出算法如下：

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代区间初值$[a,b]$。

输出：方程的根 x，该点的函数值 $f(x)$，实际迭代次数 *iter* 。

处理：01 k=1。

02 令 $x_0 = a, x_1 = b$。

03 当 k<=MAX 时，做04~07处理。

04 计算 $x_2 = x_1 - \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)} f(x_1)$。

05 $dx = |x_2 - x_1|$。

06 如果 $dx < TOL$，则停止循环。

07 $x_1 = x_2$。

08 输出方程的根 $c = x_2$，该点的函数值 $f(c)$，实际迭代次数 *iter* 。

09 结束。

2. 实验目的与要求

- 从几何的角度理解割线法的几何意义。
- 比较割线法和牛顿迭代法。
- 能在数字计算机上实现割线法，解决非线性方程问题。

3. 实验内容与数据来源

采用割线法计算求方程

$$f(x)=2x^3-5x-1=0$$

在[1,2]中的一个根，取 $x_0=2, x_1=1$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module secant
!-----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-3
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  割线法计算非线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     a,b 区间初值
!  Contains    :
!      1.    solve 牛顿迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::a=2d0,b=1d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 割线法计算方程的根
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
```

```
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x0=a
x1=b
do i=1,MAX
    x2=x1-(x1-x0)*func(x1)/(func(x1)-func(x0))
    dx=dabs(x2-x0)
    if (dx<tol) exit
    x0=x1
    x1=x2
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(102,*)i,x2,func(x2)
    !---------
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i-1
end subroutine solve
function func(x)
!---------------------------------function  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
   func=2*x**3-5*x-1
end function func
end module  secant
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   割线法计算方程的根主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
```

```
!      2.   IM_result.txt 计算的中间结果
!-----------------------------------------------------
use secant
implicit real*8(a-z)
integer::iter
open(unit=101,file='result.txt')
open(unit=102,file='Im_result.txt')
call solve(x,fx,iter)
write(101,501)x,fx,iter
501 format(T20,'割线法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 为输出结果，如图 5-8 所示。

```
1                    割线法计算方程的根
2
3    x=       1.6729816479
4    F(x)=    0.0000000000
5    iter=     8
```

图 5-8　割线法计算结果

Im_result.txt 记录了中间结果，如表 5-8 所示。

表 5-8　割线法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	1.44444444444444	-2.19478737997257
2	1.98480243161094	4.71401077338144
3	1.61610539973298	-0.638649618358173
4	1.66009627557147	-0.150297503747964
5	1.67363511082663	7.710710029897427E-003
6	1.67297442344653	-8.519840962684100E-005
7	1.67298164383841	-4.736775061076060E-008
8	1.67298164785497	2.913225216616411E-013

割线法与牛顿法相比，每迭代一次只需要计算一次方程函数，而牛顿法则还需要计算导函数值，在导函数计算比较费事时，则割线法凸显其优点，不过一般而言割线法的收敛速度略慢于牛顿法。

5.7 多重迭代法

1. 实验基本原理

若给定两个迭代函数 $\varphi(x),\psi(x)$，可以构造多重迭代法

$$\begin{cases} y_k=\varphi(x_k) \\ x_{k+1}=\psi(x_k) \end{cases} \quad k=0,1,\cdots$$

对于方程 $f(x)=0$，给定迭代函数 $\varphi(x)$，构造多重迭代函数

$$g(x)=\varphi(x)-\frac{f(\varphi(x))}{f'(x)}$$

相应迭代法写成

$$\begin{cases} y_k=\varphi_k(x) \\ x_{k+1}=y_k-\dfrac{f(y_k)}{f'(x_k)} \end{cases} \quad k=0,1,\cdots$$

如果取

$$\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$$

即取 $\varphi(x)$ 为牛顿法迭代函数，此时上述迭代为 3 阶收敛，迭代格式可以写成

$$\begin{cases} y_k=x_k-\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\ x_{k+1}=y_k-\dfrac{f(y_k)}{f'(x_k)} \end{cases} \quad k=0,1,\cdots$$

上式每步迭代只需计算两次函数值，与一次导函数值。

这里给出算法如下：

输入：最大允许迭代次数 *IMAX*，误差容限 *TOL*，迭代初值 x_0。

输出：方程的根 x，函数值 $f(x)$，实际迭代次数 iter。

处理：01 $x_1=x_0$。

02 对 $k=1,2,\cdots,IMAX$，做03~08处理。

03 计算函数值 $f(x_1)$，导函数值 $f'(x_1)$。

04 计算 $y=x_1-\dfrac{f(x_1)}{f'(x_1)}$。

05 计算 $x_2 = y - \dfrac{f(y)}{f'(x_1)}$。

06 计算 $dx = |x_2 - x_1|$。

07 如果 $dx < TOL$，则退出循环。

08 $x_1 = x_2$。

09 输出 $x = x_2, f(x) = f(x_2), iter = i$。

10 结束。

2. 实验目的与要求

- 了解多重迭代的一般原理。
- 理解多重迭代收敛阶数。
- 能够编程实现原理部分给出的迭代法。

3. 实验内容与数据来源

用多重迭代法计算

$$f(x) = x^2 - 2x - 5 = 0$$

在区间[2,3]内的根，迭代初值取 $x_0 = 2$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module mul_iter
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  多重迭代法迭代计算非线性方程
!
!-----------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve 迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!      3.    dfunc 导函数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=2d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  多重迭代法计算方程的根
!

!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x1=x0
do i=1,MAX
    !计算函数一次
    f=func(x1)
    !计算导函数一次
    df=dfunc(x1)
    ! 二重迭代格式
    y1=x1-f/df
    x2=y1-func(y1)/df
    dx=dabs(x2-x1)
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
```

```
    write(102,*)i,x2,func(x2)
    !---------
    if (dx<tol) exit
    x1=x2
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i
end subroutine solve
function func(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程导函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  func=x**3-2*x-5d0
end function func
function dfunc(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程导函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   dfunc 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 dfunc=3*x**2-2d0
end function dfunc
end module  mul_iter
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   多重迭代法迭代计算方程的根主函数
!
!-----------------------------------------------------
```

```
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.   IM_result.txt 计算的中间结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use mul_iter
implicit real*8(a-z)
integer::iter
open(unit=101,file='result.txt')
open(unit=102,file='Im_result.txt')
call solve(x,fx,iter)
write(101,501)x,fx,iter
501 format(T20,'多重迭代法计算方程的根',//,&
          3x,'x=   ',F15.10,/,&
          3x,'F(x)=',F15.10,/,&
          3x,'iter=',I5)
end program main
```

6. 实验结论

程序运行后生成两个数据文件，result.txt 保存了计算结果，如图 5-9 所示。

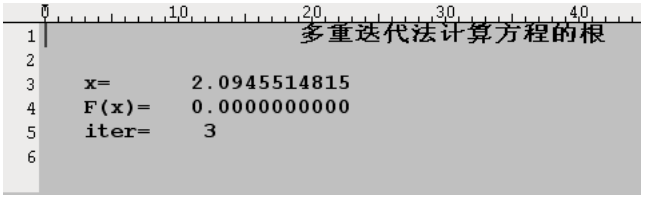


图 5-9　多重迭代计算结果

文件 Im_result.txt 记录了中间数据，如表 5-9 所示。

表 5-9　多重迭代计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	2.09390000000000	-7.268803980999827E-003
2	2.09455148136683	-1.958843753868678E-009
3	2.09455148136683	-8.881784197001252E-016

可以看到实际上进行了 3 次迭代就达到预定的精度需求。

5.8　4阶收敛多重迭代法

1. 实验基本原理

利用牛顿迭代法还可以构造出另一个具有更高阶的多重迭代法

$$\begin{cases} y_k = x_k - \dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\ x_{k+1} = y_k - \dfrac{f(y_k)(y_k - x_k)}{2f(y_k) - f(x_k)} \end{cases} \quad k = 0,1,\cdots$$

它的迭代函数为

$$g(x) = \varphi(x) - \frac{f(\varphi(x))(\varphi(x) - x)}{2f(\varphi(x)) - f(x)}$$

其中

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

这个迭代格式与上一节介绍的迭代格式的计算量相当， 但是收敛阶为 4。

这里给出算法如下：

输入：最大允许迭代次数 $IMAX$ ，误差容限 TOL ，迭代初值 x_0 。

输出：方程的根 x ，此时的函数值 $f(x)$ ，实际迭代次数 $iter$ 。

处理：01　$x_1 = x_0$ 。

02　对 $k = 1,\cdots,IMAX$ ，做03~08处理。

03　计算 $f(x_1)$ ，即其导数值 $f'(x_1)$ 。

04　计算 $y = x_1 - \dfrac{f(x_1)}{f'(x_1)}$ 。

05　计算 $f(y)$ 。

06　计算 $x_2 = y - \dfrac{f(y)(y - x_1)}{2f(y) - f(x_1)}$

07　计算 $dx = |x_2 - x_1|$ 。

08　如果 $dx < TOL$ ，则退出循环。

09　输出 $x = x_2, f(x) = f(x_2), iter = i$ 。

10　结束。

2. 实验目的与要求

- 理解迭代格式的构造。
- 熟悉上述格式的计算流程，并知道其收敛阶数。
- 能够编程实现上述算法。

3. 实验内容与数据来源

采用 4 阶收敛的多重迭代法计算非线性方程

$$\sin(x)-\frac{x}{25}=0$$

在 $x=2.0$ 附近的根，初值即取 $x_0=2.0$，要求精度控制在 10^{-7} 之内。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	方程的根
FX	REAL*8	该点的函数值
ITER	INTEGER	实际迭代次数

5. 程序代码

```
module four iter
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  多重迭代法迭代计算非线性方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1.     MAX 最大允许迭代次数
!      2.     tol 误差容许限
!      3.     迭代初值
!  Contains    :
!      1.    solve 迭代方法函数
!      2.    func  要计算的方程函数
!      3.    dfunc 导函数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
```

```
integer:: MAX=200
real*8::tol=1D-7
real*8::x0=2d0
contains
subroutine solve(x,fx,iter)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  4 阶收敛多重迭代法计算方程的根
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   x 方程的根
!      2.   fx 该点的函数值
!      3.   iter 实际迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i,iter
x1=x0
do i=1,MAX
    !计算函数一次
    fx=func(x1)
    !计算导函数一次
    dfx=dfunc(x1)
    y=x1-fx/dfx
    fy=func(y)
    x2=y-fy*(y-x1)/(2*fy-fx)
    dx=dabs(x2-x1)
    !该段为输出中间结果，为了用于分析，实际计算时，可以注释掉
    write(102,*)i,x2,func(x2)
    !---------
    if (dx<tol) exit
    x1=x2
end do
    x=x2
    fx=func(x2)
    iter=i
end subroutine solve
function func(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   func 方程导函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  func=dsin(x)-x/25d0
end function func
function dfunc(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程导函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   dfunc 方程函数值
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 dfunc=dcos(x)-1/25d0
end function dfunc
end module  four_iter
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  4 阶收敛多重迭代法迭代计算方程的根主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.   IM_result.txt 计算的中间结果
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use four_iter
implicit real*8(a-z)
integer::iter
open(unit=101,file='result.txt')
```

```
    open(unit=102,file='Im_result.txt')
    call solve(x,fx,iter)
    write(101,501)x,fx,iter
    501 format(T20,'4 阶收敛迭代法计算方程的根',//,&
              3x,'x=   ',F12.8,/,&
              3x,'F(x)=',F12.8,/,&
              3x,'iter=',I5)
    end program main
```

6. 实验结论

程序运行后产生两个数据文件，其中 result.txt 保存了计算结果，如图 5-10 所示。

文件 Im_result.txt 记录了计算的中间结果，如表 5-10 所示。

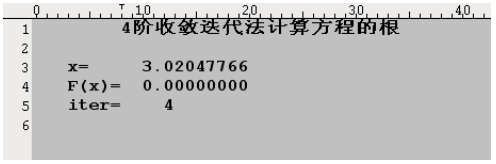


图 5-10　4 阶收敛速度的多重迭代法

表 5-10　4 阶收敛速度的多重迭代法计算的中间结果

迭代序列	x	$f(x)$
1	3.22486548427133	-0.212171242724158
2	3.02047562064798	2.107497333661557E-006
3	3.02047766146288	-5.551115123125783E-017
4	3.02047766146288	-5.551115123125783E-017

迭代的次数还与初值的选取有关系。从计算的中间结果可以看到，4 阶收敛的多重迭代法的收敛速度是非常快的。

5.9　开普勒方程的计算

1. 实验基本原理

在人造卫星轨道理论中对应的二体问题是可积系统，其中有 6 个积分常数为 $(a,e,i,\Omega,\omega,M)^T$，其中 a 表示轨道半长径，e 表示轨道偏心率，i 表示轨道倾角，Ω 是升交点赤经，ω 是近地点辐角，M 是平近点角。其中第六个积分常数，通常可以用其他的一些量替换，如过近地点时刻 t_p，真近点角度 f 与偏近点角度 E。这几个是相互等价的关系，我们这里要讲的就是平近点角 M 与偏近点角 E 的一个关系，有如下方程

$$E - e\sin E = M$$

这就是著名的 Kelper 方程，是在人造卫星运动理论或者行星运动理论中最基本的方程之一。因为如果我们已经知道卫星轨道量去计算卫星的星历时，第 6 个根数通常是使用平近点角。

这时候需要把平近点角化为偏近点角，也就是需要计算上述的 Kepler 方程。具体理论这里不再阐述，而 Kepler 方程本身是我们这里感兴趣的。我们这里采用 Newton 迭代法计算 Kepler 方程，在实际工程中，一般也是这样做的，因为 Newton 迭代法收敛速度快而且精度比较高。

不动点迭代法比较简单，这里从略。牛顿法算法如下：

输入：最大允许迭代次数 MAX，误差容限 TOL，迭代区间初值， M 和 e 。

输出：方程的根 E ，实际迭代次数 $iter$ 。

处理：01 k=1。

02 令 $M_0=\dfrac{M\pi}{180}$ ，把输入量化为弧度，令 $E_0=M_0$ 。

03 当 k<=MAX 时，做04~07处理。

04 计算 $f=E_0-e\sin(E_0)-M_0$

05 计算 $df=1-e\cos(E_0)$ 。

06 计算改正值 $dE=-\dfrac{f}{df}$

07 $E_1=E_0+dE$

08 如果 $dE<TOL$ ，则停止循环。

09 $E_0=E_1$ 。

10 输出方程的根 $E=E_1$ ，实际迭代次数 $iter$ 。

11 结束。

2. 实验目的与要求

- 了解 Kepler 方程。
- 能够用牛顿迭代方法计算 Kepler 方程。
- 通过调节轨道偏心率 e 查看运算收敛情况。

3. 实验内容与数据来源

编写解 kepler 方程的方法，给定偏心率为 0.01、平近点角为 32 度时计算出偏近点角。

Kepler 方程为

$$E-e\sin E=M$$

取偏心率 $e=0.01$ ，分别取 $M=10,20,\cdots,70,80$ ，计算 E 。

4. 函数调用接口说明

Newton

输出参变量	数据类型	变量说明
E	REAL*8	偏近点角
I	INTEGER	实际迭代次数
输入参变量	数据类型	变量说明
M	REAL*8	平近点角
EC	REAL*8	轨道偏心率

picard

输出参变量	数据类型	变量说明
E	REAL*8	偏近点角
I	INTEGER	实际迭代次数
输入参变量	数据类型	变量说明
M	REAL*8	平近点角
EC	REAL*8	轨道偏心率

5. 程序代码

```
module kepler
!----------------------------------------module coment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-4
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算 kepler 方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!      1. MAX 最大允许迭代次数
!      2. tol 误差容限
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.  newton 牛顿法计算
!      2.  picard 不动点迭代法计算
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::MAX=200
real*8::eps=1d-12
contains
subroutine newton(E,M,ec,i)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-4
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用牛顿迭代法计算 kepler 方程
```

```
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1. M 平近点角
!       2. ec 轨道偏心率
!  Output parameters  :
!       1. E 偏近点角
!       2. i 迭代次数
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.计算时，需要注意角度与弧度之间的换算
!       2.本来牛顿法需要提供方程函数与导函数，这里就直接在计算中给出计算格式
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i
parameter(pi=3.141592653589793d0)
M0=M
M0=M0*pi/180
E0=M0
!最大允许迭代次
do i=1,MAX
!方程函数
  f=E0-ec*dsin(E0)-M0
!导函数
  df=1d0-ec*dcos(E0)
  dE=-f/df
  E1=E0+de
  E0=E1
   if (dE<eps) exit
end do
   E=E1*180/pi
end subroutine newton
subroutine picard(E,M,ec,i)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-4
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 采用不动点迭代法计算 kepler 方程
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1. M 平近点角
!       2. ec 轨道偏心率
!  Output parameters  :
!       1. E 偏近点角
!       2. i 迭代次数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i
parameter(pi=3.141592653589793d0)
M0=M*pi/180
```

```
!把角度化为弧度
E0=M0
!最大允许迭代次
do i=1,MAX
   E1=M0+ec*dsin(E0)
   tol=E1-E0
   E0=E1
   if (tol<eps) exit
end do
   E=E1*180/pi
!弧度还原为角度
end subroutine picard
end module kepler
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   计算 kepler 方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Output data files  :
!       1.  kepler.txt  计算结果
!       2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.    非线性方程的参数可以由外部读入
!       2.
!-------------------------------------------------------
use kepler
implicit real*8(a-z)
integer j,k
open(unit=101,file='kepler.txt')
!以文件保存结果
write(101,501)
501 format(30x,'牛顿迭代法计算结果',/,&
          10x,'M',T35,'E',T59,'iter')
!iter 为迭代次数
!此句为说明各量意义
do k=1,8
 M=k*10d0
 ec=0.01D0
 call newton(E,M,ec,j)
!调用牛顿迭代法迭代法函数
 write(101,*)M,E,j
end do
write(101,502)
502 format(///,30x,'不动点迭代计算结果',/,&
           10x,'M',T35,'E',T59,'iter')
!iter 为迭代次数
!此句为说明各量意义
do k=1,8
M=k*10d0
ec=0.01D0
```

```
    call picard(E,M,ec,j)
    !调用牛顿迭代法迭代法函数
    write(101,*)M,E,j
    end do
    end program main
```

6. 实验结论

程序运行后，生成数据文件 kepler.txt。计算结果如图 5-11 所示。

牛顿迭代法计算结果

M	E	iter
10.0000000000000	10.1004824827757	2
20.0000000000000	20.1978208433850	2
30.0000000000000	30.2889778649518	2
40.0000000000000	40.3711254112930	2
50.0000000000000	50.4417374963576	2
60.0000000000000	60.4986705337862	2
70.0000000000000	70.5402279408279	2
80.0000000000000	80.5652072806913	2

不动点迭代计算结果

M	E	iter
10.0000000000000	10.1004824827756	6
20.0000000000000	20.1978208433848	6
30.0000000000000	30.2889778649516	6
40.0000000000000	40.3711254112929	6
50.0000000000000	50.4417374963576	6
60.0000000000000	60.4986705337862	6
70.0000000000000	70.5402279408279	6
80.0000000000000	80.5652072806912	5

图 5-11　kepler 方程解算结果

可以看到牛顿迭代法明显要比不动点迭代法快。

作者先前曾编写过计算方法书籍，在答疑中经常有初学者对以下的问题不知道如何处理。即一般书上总是介绍形如

$$x^2+3x=5$$
$$\vdots$$
$$\cos x+e^x-7x=0$$

这些类型的方程，因为这些方程的系数是已知的，所以便于利用书上的方法。而有时候读者要编写的方程形如

$$ax^3+bx=c$$
$$\vdots$$
$$\cos x+ae^x-by=c$$

这样的方程，其中系数 a,b,c 是由外部输入的。很多读者对此不知道如何处理，其实方法很即在编写函数时把系数作为参数，由外部传入。本实验即属于这样的情况，M,e 两个变量都是由外部输入的。实际上略微有些编程经验的人，这不是一个真正的问题，不过很多初学者经常提到，这里做简要的说明。

本章小结

非线性方程的数值方法因为内容并不是很多，而且方法相对其他内容也比较简单一些，所以在很多数值分析教材中往往被安排在导言之后的第一章或者教材的最后一章。

本书之所以把非线性方程放在在线性方程组之后，主要是基于以下的考虑。如果一开始就讲非线性方程，那么后续的一章非线性方程组的计算方法则不太好衔接上，因为在非线形方程组一章需要用到非线性方程计算方法与线性方程组的方法。而本书在线性方程组与非线性方程的解法具备之后紧接着介绍非线性方程组。如此安排，使读者有比较好的基础知识准备，而且衔接比较自然、紧凑。

就数值方法本身而言，目前的方法对于非线形方程的计算总体效果还是不错的，基本上能满足一般的工程需求，而且在程序设计时一般比较容易实现。当然针对一些特殊的问题，可能有时候还需要构造一些特别的方法。

第 6 章

◂非线性方程组的数值方法▸

上一章介绍了非线性方程的计算方法，在实际应用中，往往更多情况是非线性方程组。可以认为非线性方程是非线性方程组的一种简单特例，非线性方程的一些方法可以推广到非线性方程组的处理方法中。不过非线性方程组实际上要比非线性方程复杂许多，很多理论依然没有完善。本章介绍了多种重要的非线性方程组的计算方法，这些方法针对适合定方程。对于超定的非线性方程组，需要本章与最小二乘法一章的知识准备，我们留在应用范例一章的非线性参数估计中介绍。阅读本章需要的准备知识是线性方程组的计算方法与非线性方程的计算方法。

6.1 牛顿迭代法

1. 实验基本原理

牛顿迭代法是非线性方程组中最基础也是最重要的方法。虽然在本章后面会介绍各种“更先进”的拟牛顿系列算法，但是实际上工程使用中一般用的最多的还是牛顿迭代法。牛顿迭代法编程简单，收敛速度快。实际上，上一章介绍的非线性方程的牛顿迭代法是本节介绍的方程组牛顿迭代法的特例。任意的非线性方程租可以化为如下形式

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ \quad\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \end{cases}$$

欲求解 $x_1, x_2, \cdots, x_n$，在 $\mathbf{x}^{(k)}$ 处按照多元函数的泰勒展开，并取线性项得到

$$\begin{pmatrix} f_1^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \\ f_2^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ f_n^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \end{pmatrix} + \mathbf{f'(x}^{(k)}\mathbf{)} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)}-x_1^{(k)} \\ x_2^{(k+1)}-x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)}-x_n^{(k)} \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

其中

$$\mathbf{f'(x)} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

这样便得到迭代公式：

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} - \left[\mathbf{f'(x}^{(k)}\mathbf{)}\right]^{-1} \begin{pmatrix} f_1^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \\ f_2^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \\ \vdots \\ f_n^{(k)}(x_1^{(k)},x_2^{(k)},\cdots,x_n^{(k)}) \end{pmatrix}$$

以上就是牛顿迭代法的计算公式分量形式。如果以向量形式表示则更为简洁。可以看到，在使用牛顿法时每一步迭代需要计算两个函数，一是方程函数，另一个是偏导数矩阵函。一般做程序设计时，会分别把这两个数学意义上的函数用程序函数编写出来，为每次调用提供准备。偏导数矩阵一般是需要手工推导的。

2. 实验目的与要求

- 了解多应变量、多自变量泰勒线性展开的矩阵表示方法。
- 能够自行推导牛顿迭代格式。
- 能够编程实现牛顿迭代法。

3. 实验内容与数据来源

采用牛顿迭代法计算非线性方程组

$$\begin{cases} 6x^3+xy-3y^2-4=0 \\ x^2-18xy^2+16y^3+1=0 \end{cases}$$

迭代初值取$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$，要求计算精度达到$10^{-8}$。

5. 程序代码

```
module m_gauss
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 高斯列主元消去法模块
!              此模块主要为牛顿法中解线性化方程所调用
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   lineq 解线性方程组
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine lineq(A,b,x,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab为增广矩阵[Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
   elmax=dabs(Ab(k,k))
```

```
      id_max=k
      !这段为查找主元素
      !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
       do i=k+1,n
        if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
           elmax=Ab(i,k)
           id_max=i
        end if
      end do
    !至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与第 k 行交换
     !交换两行元素，其他不变
      vtemp1=Ab(k,:)
      vtemp2=Ab(id_max,:)
      Ab(k,:)=vtemp2
      Ab(id_max,:)=vtemp1
    !
    !以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
    !############################################################
      do i=k+1,N
       temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
       Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
      end do
    end do
    Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
    bup(:)=Ab(:,N+1)
    !调用用上三角方程组的回带方法
    call uptri(Aup,bup,x,n)
    end subroutine lineq
    subroutine uptri(A,b,x,N)
    !--------------------------------subroutine  comment
    !  Version   :  V1.0
    !  Coded by  :  syz
    !  Date      :  2010-4-8
    !-----------------------------------------------------
    !  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
    !               Ax=b
    !-----------------------------------------------------
    !  Input  parameters  :
    !       1.   A(N,N)系数矩阵
    !       2.   b(N)右向量
    !       3.   N 方程维数
    !  Output parameters  :
    !       1.  x  方程的根
    !       2.
    !  Common parameters  :
    !
    !-----------------------------------------------------
    implicit real*8(a-z)
    integer::i,j,N
    real*8::A(N,N),b(N),x(N)
    x(N)=b(N)/A(N,N)
    !回带部分
    do i=n-1,1,-1
       x(i)=b(i)
      do j=i+1,N
       x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
```

```
    end do
     x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module m gauss
module  m newton
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    函数文件
!     2.    偏导数文件
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve()
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算非线性方程组
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.    report.txt 计算结果迭代序列
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    需要用到线性方程组的解法，这里用选主元消去法
!      2.    需要准备函数文件与偏导数文件
!-------------------------------------------------------
use m_gauss
!IVF 中，在 USE 模块时，需要模块在被调用之前
!当然在调用之前 include 包含模块的 fortran 文件也是可以的
implicit real*8(a-z)
integer::I,itmax=50
integer::N=2
real*8::x(2),f(2),dx(2)
real*8::df(2,2)
!itmax 最大允许迭代次数
!N 方程组维数
!df 偏导数矩阵
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
```

```
101 format(/,T6,'牛顿法计算非线性方程组迭代序列',/)
x=(/2d0,2d0/)
tol=1d-8
do i=1,itmax
  call  func(f,x)
  call  jac(df,x)
  call  lineq(df,-f,dx,N)
  x=x+dx
  write(11,102)i,x
102 format(I5,2F16.10)
!判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
   dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
    if (dx2<tol) exit
!------
end do
end subroutine solve
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),f(2)
f(1)=6*x(1)**3+x(1)*x(2)-3*x(2)**3-4
f(2)=x(1)**2-18*x(1)*x(2)**2+16*x(2)**3+1
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),df(2,2)
df(1,1)=18*x(1)**2+x(2)
df(2,1)=2*x(1)-18*x(2)**2
df(1,2)=x(1)-9*x(2)**2
df(2,2)=-36*x(1)*x(2)+48*x(2)**2
end subroutine jac
end module m_newton
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  牛顿法解非线性方程组的主函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
use m_newton
!调用牛顿法中的函数
call solve()
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件可以看到计算结果如图 6-1 所示。

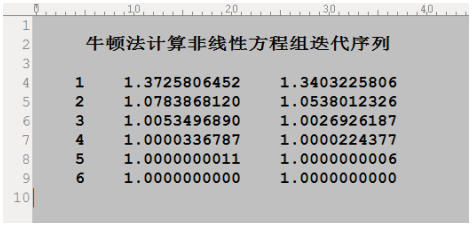


图 6-1 牛顿迭代法计算非线性方程组

可以看到计算牛顿迭代法收敛速度还是比较快的。在 solve 函数中，我们直接把计算结果

用文件保存起来。

6.2　简化牛顿法

1. 实验基本原理

牛顿迭代法在每次迭代过程中都需要计算雅可比矩阵的逆（实际计算时，我们是直接计算线性方程组的），为了减少牛顿法的计算量，有时候可以使用如下迭代格式

$$\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k}-\left[\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^{0}\right)\right]^{-1}\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{k}\right)\quad(k=0,1,\ldots)$$

这种方法在除了在开始计算$\left[\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^{0}\right)\right]^{-1}$，以后每步迭代只计算一个函数值，大大减少了计算量，但这个算法缺点是只有线性收敛，收敛速度较慢。

2. 实验目的与要求

- 复习牛顿迭代法原理。
- 知道简化牛顿法的优缺点。
- 能够编程实现简化牛顿法计算非线性方程组。

3. 实验内容与数据来源

采用简化牛顿迭代法计算

$$\begin{cases}6x^3+xy-3y^2-4=0\\ x^2-18xy^2+16y^3+1=0\end{cases}$$

迭代初值取$\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\2\end{pmatrix}$，要求计算精度达到$10^{-8}$。

5. 程序代码

```
module inv_mat
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
```

```
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
   elmax=dabs(Ab(k,k))
   id_max=k
   !这段为查找主元素
   !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
    do i=k+1,n
     if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
        elmax=Ab(i,k)
        id_max=i
     end if
```

```
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为上三角矩阵
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv_mat
module  simple newton
!---------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-----------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
```

```
!     1.    函数文件
!     2.    偏导数文件
!     3.    solve 函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve()
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  简化牛顿法计算非线性方程组
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.    report.txt 计算结果迭代序列
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    需要用到线性方程组的解法，这里用选主元消去法
!      2.    需要准备函数文件与偏导数文件
!-------------------------------------------------------
use inv_mat
implicit real*8(a-z)
integer::I,itmax=100
integer::N=2
real*8::x(2),f(2),dx(2)
real*8::df(2,2),invdf(2,2)
!itmax 最大允许迭代次数
!N 方程组维数
!df 偏导数矩阵
!invdf 偏导数矩阵的逆矩阵
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
101 format(/,T6,'简化牛顿法计算非线性方程组迭代序列',/)
x=(/2d0,2d0/)
tol=1d-8
!计算初值的偏导数矩阵
call jac(df,x)
!计算偏导数的逆矩阵
!仅进行一次矩阵求逆，不进入循环
call  inv(df,invdf,N)
do i=1,itmax
  call  func(f,x)
   dx=-matmul(invdf,f)
  x=x+dx
  write(11,102)i,x
102 format(I5,2F16.10)
!判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
```

```
    dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
    if (dx2<tol) exit
!------
end do
end subroutine solve
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),f(2)
f(1)=6*x(1)**3+x(1)*x(2)-3*x(2)**3-4
f(2)=x(1)**2-18*x(1)*x(2)**2+16*x(2)**3+1
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),df(2,2)
df(1,1)=18*x(1)**2+x(2)
df(2,1)=2*x(1)-18*x(2)**2
df(1,2)=x(1)-9*x(2)**2
df(2,2)=-36*x(1)*x(2)+48*x(2)**2
```

```
end subroutine jac
end module simple_newton
program main
!----------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :    简化牛顿法主函数
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!
!-------------------------------------------------------
use simple newton
!调用方法函数
call solve
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如表 6-1 所示。

表 6-1　简化牛顿法迭代序列

迭代序列	x^i	y^i
1	1.3725806452	1.3403225806
2	1.2167942743	1.1816005356
3	1.1358334158	1.1023919764
4	1.0881712805	1.0582208605
5	1.0584331991	1.0325429682
6	1.0392634917	1.0174327469
7	1.0266524170	1.0085907081
8	1.0182404829	1.0035215879
9	1.0125717957	1.0007242760
10	1.0087202625	0.9992806777
⋮	⋮	⋮
46	1.0000001458	0.9999996203
47	1.0000001099	0.9999997130
48	1.0000000828	0.9999997830
49	1.0000000625	0.9999998360
50	1.0000000471	0.9999998761
51	1.0000000355	0.9999999063
52	1.0000000268	0.9999999292
53	1.0000000202	0.9999999465
54	1.0000000152	0.9999999596
55	1.0000000115	0.9999999695
56	1.0000000087	0.9999999769

从表 6-1 中可以看到对于相同的初值和精度要求，简化牛顿法进行了 56 次迭代才满足，

虽然计算中省去了多次计算逆矩阵，不过代价是付出了较多的迭代次数。

6.3 拟牛顿之Broyden方法

1. 实验基本原理

牛顿迭代法每迭代一次，计算当前一步的 Jacobi 矩形阵的逆矩阵，计算量还是比较大，而简化牛顿法不失为一种方法，但有时候计算效果不能令我们满意。为了不每次迭代都计算逆矩阵，我们设法构造 H_k 逼近 $\mathbf{f'(x}_k\mathbf{)}$ 的逆矩阵。这样迭代公式为

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

选取不同的 $\mathbf{H}_k$ 就得到各种类型的拟牛顿方法。这里主要介绍 Broyden 方法，Broyden 方法的基本迭代格式为：

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \dfrac{(\Delta\mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)(\Delta\mathbf{x}_k)^T\mathbf{H}_k}{(\Delta\mathbf{x}_k)^T\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k} \end{cases}$$

其中

$$\Delta\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

拟牛顿法是 20 世纪 60 年代以来发展起来的算法，相对而言是比较新的一种方法，它克服了牛顿法需要求导数和求逆的缺点，是目前实际使用较为有效的一种方法。

2. 实验目的与要求

- 了解拟牛顿法的大致思想。
- 能够理解 Broyden 迭代格式中各变量的含义。
- 会使用作者编写的函数进行非线性方程计算。
- 最好能自行编写 Broyden 方法。

3. 实验内容与数据来源

采用拟牛顿之 Broyden 方法计算非线性方程组

$$\begin{cases} 3x-\cos(yz)-\dfrac{1}{2}=0 \\ x^2-81(y+0.2)+\sin z+1.06=0 \\ \exp(-xy)+20z+\dfrac{10\pi-3}{3}=0 \end{cases}$$

初值取 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.1 \\ -0.1 \end{pmatrix}$，要求精度达到 10^{-8}。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
X0	REAL*8(N)	初值
N	INTEGER	方程的维数

5. 程序代码

```
module inv_mat
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
```

```
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
```

```
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
   x(i)=b(i)
  do j=i+1,N
   x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
  end do
   x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv mat
module  broyden1
!---------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-----------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    函数文件
!     2.    偏导数文件
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
use inv mat
contains
subroutine solve(x0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   Broyden 第一公式方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax=50
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n)
real*8::v1(n),v2(n),v3(n)
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n)
!itmax 最大允许迭代次数
tol=1d-8
!误差容限
call jac(df,x0)
!注意：设置 H0 初值为 偏导数矩阵的逆矩阵
!  也可以直接设置 H0 为单位矩阵，但是那样收敛较慢
!  设置 H0 初值为偏导数逆矩阵，但是在迭代过程中则不计算逆矩阵
call inv(df,H0,N)
write(11,101)
write(12,102)
do i=1,itmax
    !计算函数值
    call func(f0,x0)
    !更新方程的根
    x1=x0-matmul(H0,f0)
    dx=x1-x0
    call func(f1,x1)
    y=f1-f0
    v1=matmul(H0,y)
     v2=dx-v1
    t1=vdot(v2,dx,N)
    t2=vdot(dx,v1,N)
    H1=H0+t1/t2*H0
    !把计算中的 H 矩阵写入文件
    write(12,103)H0
    x0=x1
    H0=H1
    !把计算迭代序列写入文件
    write(11,104)i,x0
    !判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
    dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
     if (dx2<tol) exit
!------
end do
101 format(/,T5,'Broyden 秩方法计算序列',/)
```

```
102 format(/,T5,'Broyden H 矩阵序列为: ',/)
103 format(<N>(<N>F16.10/),/)
104 format(I8,3F16.10)
end subroutine solve
function vdot(a,b,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   N 向量维数
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!      2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),f(3),pi=3.141592653589793
f(1)=3*x(1)-dcos(x(2)*x(3))-1d0/2
f(2)=x(1)**2-81*(x(2)+0.1d0)**2+dsin(x(3))+1.06d0
f(3)=dexp(-x(1)*x(2))+20*x(3)+(10*pi-3d0)/3
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),df(3,3)
df(1,1)=3d0
df(1,2)=x(3)*dsin(x(2)*x(3))
df(1,3)=x(2)*dsin(x(2)*x(3))
df(2,1)=2*x(1)
df(2,2)=-162*(x(1)+0.1)
df(2,3)=dcos(x(3))
df(3,1)=-x(2)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,2)=-x(1)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,3)=20d0
end subroutine jac
end module broyden1
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   Broyden 方法计算非线性方程组主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 给出了计算结果
!      2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use  inv mat
use  broyden1
implicit real*8(a-z)
integer::N=3
real*8::x0(3)
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='Hmatrix.txt')
```

```
    x0=(/0.1d0,0.1d0,-0.1d0/)
    call solve(x0,n)
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开 result.txt 文件可以看到结果图 6-2 所示。

```
                Broyden 秩1方法计算序列

    1    0.4998696729    0.0194668487   -0.5215204865
    2    0.4999863755    0.0087378390   -0.5231745890
    3    0.5000064375    0.0008476767   -0.5235707275
    4    0.4999943455    0.0000360183   -0.5235879349
    5    0.5000056351   -0.0000002421   -0.5236079247
    6    0.4999968377    0.0000002190   -0.5235937074
    7    0.5000000071    0.0000000108   -0.5235987840
    8    0.5000000000    0.0000000052   -0.5235987900
```

图 6-2　迭代序列计算结果

为了方便读者以后编程进行调试，这里给出了计算的中间结果，在文件 Hmatrix.txt 中给出了计算过程中迭代矩阵的变化，结果如下所示。

$$\mathbf{H}_1=\begin{pmatrix}0.3333331840 & 0.0021086068 & 0.0016605204\\ 0.0000102385 & -0.0308688253 & -0.0001527577\\ 0.0000161570 & 0.0015358359 & 0.0500076828\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_2=\begin{pmatrix}0.3348909937 & 0.0021184613 & 0.0016682808\\ 0.0000102864 & -0.0310130886 & -0.0001534716\\ 0.0000162325 & 0.0015430135 & 0.0502413902\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_3=\begin{pmatrix}0.5772941813 & 0.0036518610 & 0.0028758277\\ 0.0000177319 & -0.0534612036 & -0.0002645585\\ 0.0000279821 & 0.0026598886 & 0.0866074716\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_4=\begin{pmatrix}0.6365913495 & 0.0040269644 & 0.0031712203\\ 0.0000195533 & -0.0589525079 & -0.0002917328\\ 0.0000308563 & 0.0029331009 & 0.0955034175\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_5=\begin{pmatrix}0.6652119891 & 0.0042080135 & 0.0033137958\\ 0.0000204324 & -0.0616029656 & -0.0003048489\\ 0.0000322435 & 0.0030649708 & 0.0997971751\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_6 = \begin{pmatrix} 0.5206610321 & 0.0032936097 & 0.0025937060 \\ 0.0000159924 & -0.0482166049 & -0.0002386050 \\ 0.0000252370 & 0.0023989508 & 0.0781111901 \end{pmatrix}$$

6.4　Broyden第二公式计算非线性方程组

1. 实验基本原理

Broyden 第二方法和 Broyden 第一方法一样，推导起来比较麻烦一些，这里就不再介绍推导过程，直接给出计算公式。有兴趣的读者可以参考《现代应用数学手册-计算与数值分析卷》（清华大学出版社 2005 年出版）。

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + (\Delta\mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)\dfrac{(\Delta\mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)^T}{(\Delta\mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k\mathbf{y}_k)^T\mathbf{y}_k} \end{cases}$$

其中 $\Delta\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$。

2. 实验目的与要求

- 了解 Broyden 第二公式各变量的含义。
- 会使用作者编写的函数进行非线性方程组的计算。
- 最好能自行编写 Broyden 第二公式方法函数。

3. 实验内容与数据来源

采用 Broyden 第二公式计算非线性方程组

$$\begin{cases} 3x - \cos(yz) - \dfrac{1}{2} = 0 \\ x^2 - 81(y+0.1)^2 + \sin z + 1.06 = 0 \\ e^{-xy} + 20z + \dfrac{10\pi - 3}{3} = 0 \end{cases}$$

初值取$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 \\ 0.1 \\ -0.1 \end{bmatrix}$，要求精度达到$10^{-8}$。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
X0	REAL*8(N)	初值
N	INTEGER	方程的维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module inv_mat
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
```

```
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
```

```
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
    do i=k+1,n
     if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
        elmax=Ab(i,k)
        id_max=i
     end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!             | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!            | 0  0  *  *  # |
!            | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv_mat
module  broyden2
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    函数文件
!     2.    偏导数文件
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
use inv_mat
contains
subroutine solve(x0,N,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   Broyden 第二公式方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax=50
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n)
real*8::v1(n),v2(n),v3(n)
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n),dH(N,N)
!itmax 最大允许迭代次数
!tol 误差容限
call jac(df,x0)
!注意：设置 H0 初值为 偏导数矩阵的逆矩阵
!  也可以直接设置 H0 为单位矩阵，但是那样收敛较慢
!  设置 H0 初值为偏导数逆矩阵，但是在迭代过程中则不计算逆矩阵
call inv(df,H0,N)
write(11,101)
write(12,102)
do i=1,itmax
    !计算函数值
    call func(f0,x0)
    !更新方程的根
    x1=x0-matmul(H0,f0)
    dx=x1-x0
    call func(f1,x1)
    y=f1-f0
    v1=dx-matmul(H0,y)
    t1=vdot(v1,y,N)
    dH=vvmat(v1,v1,N)
    dH=dH/t1
    H1=H0+dH
    !把计算中的 H 矩阵写入文件
    write(12,103)H0
    x0=x1
    H0=H1
    !把计算迭代序列写入文件
    write(11,104)i,x0
    !判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
    dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
     if (dx2<tol) exit
!------
end do
```

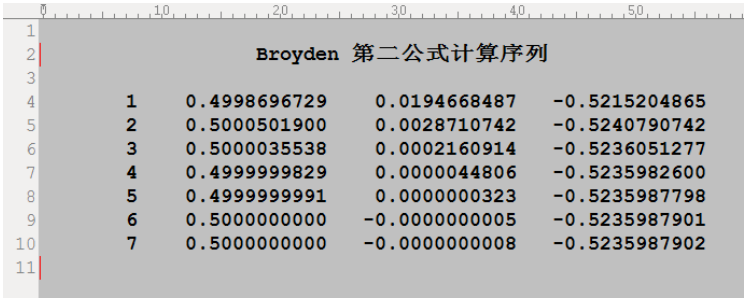
```
101 format(/,T5,'Broyden 第二公式计算序列',/)
102 format(/,T5,'Broyden 第二公式 H 矩阵序列为：',/)
103 format(<N>(<N>F16.10/),/)
104 format(I8,3F16.10)
end subroutine solve
function vdot(a,b,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   N 向量维数
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
function vvmat(a,b,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  N 维列向量 a 乘以 N 维横向量 b
!               结果为  n*n 维矩阵
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::n,i,j
real*8::a(n),b(n),vvmat(n,n)
do i=1,n
  do j=1,n
    vvmat(i,j)=a(i)*b(j)
  end do
end do
end function vvmat
subroutine func(f,x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),f(3),pi=3.141592653589793
f(1)=3*x(1)-dcos(x(2)*x(3))-1d0/2
f(2)=x(1)**2-81*(x(2)+0.1d0)**2+dsin(x(3))+1.06d0
f(3)=dexp(-x(1)*x(2))+20*x(3)+(10*pi-3d0)/3
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),df(3,3)
df(1,1)=3d0
df(1,2)=x(3)*dsin(x(2)*x(3))
df(1,3)=x(2)*dsin(x(2)*x(3))
df(2,1)=2*x(1)
df(2,2)=-162*(x(1)+0.1)
df(2,3)=dcos(x(3))
df(3,1)=-x(2)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,2)=-x(1)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,3)=20d0
end subroutine jac
end module broyden2
program main
```

```
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   Broyden 第二公式计算非线性方程组主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 给出了计算结果
!      2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use  inv_mat
use  broyden2
implicit real*8(a-z)
integer::N=3
real*8::x0(3)
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='Hmatrix.txt')
x0=(/0.1d0,0.1d0,-0.1d0/)
!1d-8  表示允许的误差容限
call solve(x0,n,1d-8)
end program main
```

6. 实验结论

计算迭代序列保存在文件 result.txt 文件中，打开该文件如图 6-3 所示。



```
                Broyden 第二公式计算序列

      1    0.4998696729    0.0194668487   -0.5215204865
      2    0.5000501900    0.0028710742   -0.5240790742
      3    0.5000035538    0.0002160914   -0.5236051277
      4    0.4999999829    0.0000044806   -0.5235982600
      5    0.4999999991    0.0000000323   -0.5235987798
      6    0.5000000000   -0.0000000005   -0.5235987901
      7    0.5000000000   -0.0000000008   -0.5235987902
```

图 6-3　Broyden 第二公式迭代序列

计算中的迭代矩阵保存在文件 Hmatrix.txt 中，结果如下所示。

$$\mathbf{H}_1=\begin{pmatrix}0.3333331840 & 0.0021086068 & 0.0016605204\\ 0.0000102385 & -0.0308688253 & -0.0001527577\\ 0.0000161570 & 0.0015358359 & 0.0500076828\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_2=\begin{pmatrix}0.3333311218 & 0.0022981893 & 0.0016897486\\ 0.0001998210 & -0.0482980293 & -0.0028398360\\ 0.0000453851 & -0.0011512424 & 0.0495934131\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_3=\begin{pmatrix}0.3333287819 & 0.0021649756 & 0.0017135288\\ 0.0000666073 & -0.0558818462 & -0.0014860331\\ 0.0000691654 & 0.0002025605 & 0.0493517430\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_4=\begin{pmatrix}0.3333275048 & 0.0020892961 & 0.0017159849\\ -0.0000090722 & -0.0603666532 & -0.0013404830\\ 0.0000716215 & 0.0003481106 & 0.0493470193\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_5=\begin{pmatrix}0.3333274882 & 0.0020938623 & 0.0017165185\\ -0.0000045060 & -0.0616254186 & -0.0014875624\\ 0.0000721550 & 0.0002010312 & 0.0493298339\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_6=\begin{pmatrix}0.3333271167 & 0.0021070900 & 0.0017206718\\ 0.0000087217 & -0.0620963485 & -0.0016354293\\ 0.0000763084 & 0.0000531643 & 0.0492834053\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_7=\begin{pmatrix}0.3333263905 & 0.0021288222 & 0.0017283355\\ 0.0000304539 & -0.0627467538 & -0.0018647887\\ 0.0000839721 & -0.0001761951 & 0.0492025238\end{pmatrix}$$

6.5 DFP方法

1. 实验基本原理

DFP 方法全称是 Davidon-Fletcher-Powell 方法，也是拟牛顿法的一种。Broyden 方法及其第二方法是秩 1 的拟牛顿方法，而本节要介绍的 DFP 方法与下一个实验的 BFS 方法是是秩 2 的校正方法。

这里给出迭代格式

$$\begin{cases}\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k-\mathbf{H}_k\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\\ \mathbf{H}_{k+1}=\mathbf{H}_k+\dfrac{(\Delta\mathbf{x}_k)(\Delta\mathbf{x}_k)^T}{(\Delta\mathbf{x}_k)^T\mathbf{y}_k}-\dfrac{\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k\mathbf{y}_k{}^T\mathbf{H}_k}{\mathbf{y}_k\mathbf{H}_k\mathbf{y}_k}\end{cases}$$

其中

$$\Delta\mathbf{x}_k=\mathbf{x}_{k+1}-\mathbf{x}_k,\mathbf{y}_k=\mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1})-\mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

其推导原理这里略去，有兴趣的读者可以阅读《数值计算方法（下）》（南京大学编，科学出版社出版，林成森）或者《数值计算方法》（冯康等著，国防工业出版社 1978 年出版）

2. 实验目的与要求

- 了解 DFP 方法大致原理。
- 会使用作者编写的 DFP 方法计算非线性方程组。
- 最好能自行编写出 DFP 方法函数。

3. 实验内容与数据来源

计算非线性方程组

$$\begin{cases}3x-\cos(yz)-\dfrac{1}{2}=0\\ x^2-81(y+0.1)^2+\sin z+1.06=0\\ e^{-xy}+20z+\dfrac{10\pi-3}{3}=0\end{cases}$$

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
X0	REAL*8(N)	初值
N	INTEGER	方程的维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
  module inv mat
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
   E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
```

```
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id_max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)

    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!------------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!             | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!            | 0  0  *  *  # |
!            | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
```

```
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv_mat
module  DFP
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-----------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    函数文件
!     2.    偏导数文件
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
use inv mat
contains
subroutine solve(x0,N,tol)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   DFP 方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
```

```
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax=50
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n)
real*8::v1(n),v2(n)
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n)
real*8::m1(n,n),m2(n,n)
!itmax 最大允许迭代次数
!tol 误差容限
call jac(df,x0)
!注意：设置 H0 初值为 偏导数矩阵的逆矩阵
!  也可以直接设置 H0 为单位矩阵，但是那样收敛较慢
!  设置 H0 初值为偏导数逆矩阵，但是在迭代过程中则不计算逆矩阵
call inv(df,H0,N)
write(11,101)
write(12,102)
do i=1,itmax
    !计算函数值
    call func(f0,x0)
    !更新方程的根
    x1=x0-matmul(H0,f0)
    dx=x1-x0
    call func(f1,x1)
    y=f1-f0
    m1=vvmat(dx,dx,n)
    t1=vdot(dx,y,N)
    !第一项矩阵
    m1=m1/t1
    !第二项分子结果为矩阵
    m2=vvmat(y,y,n)
    m2=matmul(H0,M2)
    M2=matmul(m2,H0)
    !第二项分母
    v1=matmul(H0,y)
    t2=vdot(y,v1,N)
    m2=m2/t2
    H1=H0+m1-m2
    !把计算中的 H 矩阵写入文件
    write(12,103)i,H0
    x0=x1
    H0=H1
    !把计算迭代序列写入文件
    write(11,104)i,x0
    !判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
    dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
     if (dx2<tol) exit
!------
end do
101 format(/,T18,'DFP 方法计算序列',/)
102 format(/,T5,'DFP 方法 H 矩阵序列为: ',/)
103 format(T5,'iter=',I4,/,<N>(<N>F16.10/),/)
104 format(I4,3F16.10)
end subroutine solve
```

```
function vdot(a,b,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   N 向量维数
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!      2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
function vvmat(a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  N 维列向量 a 乘以 N 维横向量 b
!               结果为  n*n 维矩阵
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
integer::n,i,j
real*8::a(n),b(n),vvmat(n,n)
do i=1,n
  do j=1,n
    vvmat(i,j)=a(i)*b(j)
  end do
end do
end function vvmat
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
```

```
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),f(3),pi=3.141592653589793
f(1)=3*x(1)-dcos(x(2)*x(3))-1d0/2
f(2)=x(1)**2-81*(x(2)+0.1d0)**2+dsin(x(3))+1.06d0
f(3)=dexp(-x(1)*x(2))+20*x(3)+(10*pi-3d0)/3
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),df(3,3)
df(1,1)=3d0
df(1,2)=x(3)*dsin(x(2)*x(3))
df(1,3)=x(2)*dsin(x(2)*x(3))
df(2,1)=2*x(1)
df(2,2)=-162*(x(1)+0.1)
df(2,3)=dcos(x(3))
df(3,1)=-x(2)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,2)=-x(1)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,3)=20d0
end subroutine jac
end module DFP
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :   DFP 方法计算非线性方程组主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 给出了计算结果
!      2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use  inv mat
use  DFP
implicit real*8(a-z)
integer::N=3
real*8::x0(3)
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='Hmatrix.txt')
x0=(/0.1d0,0.1d0,-0.1d0/)
!1d-8  表示允许的误差容限
call solve(x0,n,1d-8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件结果如图 6-4 所示。

```
DFP方法计算序列

  1    0.4998696729    0.0194668487   -0.5215204865
  2    0.4991991549    0.0089641311   -0.5223350556
  3    0.5000200726    0.0007381429   -0.5235828977
  4    0.4999985735    0.0000296401   -0.5235972866
  5    0.5000000243    0.0000000412   -0.5235987956
  6    0.4999999998    0.0000000002   -0.5235987901
  7    0.5000000000   -0.0000000008   -0.5235987902
```

图 6-4　DFP 方法迭代序列

其中 **H** 矩阵序列保存于文件 Hmatrix.txt 中，打开该文件结果如下所示。

$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 0.3333331840 & 0.0021086068 & 0.0016605204 \\ 0.0000102385 & -0.0308688253 & -0.0001527577 \\ 0.0000161570 & 0.0015358359 & 0.0500076828 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_2=\begin{pmatrix} 0.3344372773 & 0.0008166496 & 0.0003436749 \\ -0.0023109383 & -0.0302418744 & 0.0023169055 \\ -0.0003706664 & 0.0027619617 & 0.0505796669 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_3=\begin{pmatrix} 0.3347465856 & 0.0000923753 & 0.0001264187 \\ 0.0000498164 & -0.0545071297 & -0.0013364636 \\ -0.0006152287 & -0.0013443512 & 0.0502532185 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_4=\begin{pmatrix} 0.3348236231 & 0.0000064424 & 0.0000442658 \\ -0.0001065610 & -0.0591926213 & -0.0014172857 \\ -0.0007112128 & -0.0014040040 & 0.0503470828 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_5=\begin{pmatrix} 0.3348299588 & 0.0000103334 & 0.0000419415 \\ 0.0000146919 & -0.0616651107 & -0.0015433676 \\ -0.0007118937 & -0.0015476048 & 0.0503427453 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_6=\begin{pmatrix} 0.3348338005 & -0.0000122464 & 0.0000400061 \\ -0.0000364824 & -0.0617495100 & -0.0015318121 \\ -0.0007158479 & -0.0015249547 & 0.0503447155 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_7=\begin{pmatrix} 0.3359260250 & 0.0003438095 & -0.0002362068 \\ 0.0005157805 & -0.0632140367 & -0.0017056005 \\ -0.0010835733 & -0.0018023000 & 0.0504344420 \end{pmatrix}$$

6.6 BFS方法

1. 实验基本原理

BFS 是 Broyden-Flether-Shanno 三位作者提出来的方法，也是拟牛顿法的方法范畴。前面已经说明拟牛顿法是实用价值和理论价值都比较高的算法，前面介绍的三个算法都是比较优秀的。很多数值计算表明 BFS 方法比 DFP 方法有更好的数值稳定性，是拟牛顿法里比较成功的算法。

这里给出迭代格式

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{H}_k + \dfrac{\mu_k \Delta\mathbf{x}_k (\Delta\mathbf{x}_k)^T - \mathbf{H}_k \mathbf{y}_k (\Delta\mathbf{x}_k)^T - (\Delta\mathbf{x}_k)\mathbf{y}_k{}^T \mathbf{H}_k}{(\Delta\mathbf{x}_k)^T \mathbf{y}_k} \\ \mu_k = 1 + \dfrac{\mathbf{y}_k{}^T \mathbf{H}_k \mathbf{y}_k}{(\Delta\mathbf{x}_k)^T \mathbf{y}_k} \end{cases}$$

其中

$$\Delta\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$$

至于迭代过程的推导，这里不再给出，有兴趣的读者可以参考相关专著。

2. 实验目的与要求

- 了解 BFS 算法的大致流程。
- 明白迭代格式中各变量的意义。
- 会使用作者编写的 BFS 方法计算非线性方程组。

3. 实验内容与数据来源

采用 BFS 方法计算上一节中的非线性方程组。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
X0	REAL*8(N)	初值
N	INTEGER	方程的维数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module inv mat
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
   E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
```

```
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!#############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
   elmax=dabs(Ab(k,k))
   id_max=k
   !这段为查找主元素
   !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
    do i=k+1,n
     if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
        elmax=Ab(i,k)
        id_max=i
```

```
      end if
    end do
 !至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
  do i=k+1,N
    temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
    Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
  end do
end do
!------------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!             | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!            | 0  0  *  *  # |
!            | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
   x(i)=b(i)
  do j=i+1,N
```

```
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv_mat
module  m_bfs
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.05.11
!-------------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.    函数文件
!      2.    偏导数文件
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use inv mat
contains
subroutine solve(x0,N,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.11
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  BFS 方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax=50
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n)
real*8::v1(n),v2(n),v3(n)
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n)
real*8::m1(n,n),m2(n,n),m3(n,n)
!itmax 最大允许迭代次数
!tol 误差容限
```

```
call jac(df,x0)
!注意：设置 H0 初值为 偏导数矩阵的逆矩阵
!  也可以直接设置 H0 为单位矩阵，但是那样收敛较慢
!  设置 H0 初值为偏导数逆矩阵，但是在迭代过程中则不计算逆矩阵
call inv(df,H0,N)
write(11,101)
write(12,102)
do i=1,itmax
    !计算函数值
    call func(f0,x0)
    !更新方程的根
    x1=x0-matmul(H0,f0)
    dx=x1-x0
    call func(f1,x1)
    y=f1-f0
    !这段程序求得 miu
    v1=matmul(H0,y)
    t1=vdot(y,v1,n)
    t2=vdot(dx,y,N)
    u=1d0+t1/t2
    !分子第一项
    m1=vvmat(dx,dx,n)*u
    !分子第二项
    m2=vvmat(dx,y,n)
    m2=matmul(m2,H0)
    !分子第三项
    v3=matmul(H0,y)
    m3=vvmat(v3,dx,n)
    !分母
    t3=vdot(dx,y,n)
    H1=(m1-m2-m3)/t3
    H1=H0+H1
    !把计算中的 H 矩阵写入文件
    write(12,103)i,H0
    x0=x1
    H0=H1
    !把计算迭代序列写入文件
    write(11,104)i,x0
    !判断计算精度，当满足误差容限时退出循环。
    dx2=dsqrt(dx(1)**2+dx(2)**2)
     if (dx2<tol) exit
!------
end do
101 format(/,T5,'BFS 方法计算序列',/)
102 format(/,T5,'BFS 方法 H 矩阵序列为：',/)
103 format(T5,'iter=',I4,/,<N>(<N>F16.10/),/)
104 format(I8,3F16.10)
end subroutine solve
function vdot(a,b,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
```

```
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   N 向量维数
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
function vvmat(a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  N 维列向量 a 乘以 N 维横向量 b
!               结果为  n*n 维矩阵
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::n,i,j
real*8::a(n),b(n),vvmat(n,n)
do i=1,n
  do j=1,n
    vvmat(i,j)=a(i)*b(j)
  end do
end do
end function vvmat
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.    x 自变量
!       2.
!  Output parameters  :
!       1.    f 方程函数
!       2.
!  Common parameters  :
!
```

```
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),f(3),pi=3.141592653589793
f(1)=3*x(1)-dcos(x(2)*x(3))-1d0/2
f(2)=x(1)**2-81*(x(2)+0.1d0)**2+dsin(x(3))+1.06d0
f(3)=dexp(-x(1)*x(2))+20*x(3)+(10*pi-3d0)/3
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(3),df(3,3)
df(1,1)=3d0
df(1,2)=x(3)*dsin(x(2)*x(3))
df(1,3)=x(2)*dsin(x(2)*x(3))
df(2,1)=2*x(1)
df(2,2)=-162*(x(1)+0.1)
df(2,3)=dcos(x(3))
df(3,1)=-x(2)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,2)=-x(1)*dexp(-x(1)*x(2))
df(3,3)=20d0
end subroutine jac
end module m_bfs
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.11
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  BFS 方法计算非线性方程组主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
```

```
!       1.   result.txt 给出了计算结果
!       2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
use  inv_mat
use  m_bfs
implicit real*8(a-z)
integer::N=3
real*8::x0(3)
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='Hmatrix.txt')
x0=(/0.1d0,0.1d0,-0.1d0/)
!1d-8  表示允许的误差容限
call solve(x0,n,1d-8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存于文件 result.txt 中，打开该文件如图 6-5 所示。

```
                BFS方法计算序列

   1    0.4998696729    0.0194668487   -0.5215204865
   2    0.4991975995    0.0089854025   -0.5223304185
   3    0.5000163055    0.0007400750   -0.5235811416
   4    0.4999991828    0.0000296287   -0.5235975655
   5    0.5000000118    0.0000000598   -0.5235987907
   6    0.4999999999   -0.0000000002   -0.5235987902
   7    0.5000000000   -0.0000000008   -0.5235987902
```

图 6-5　BFS 方法迭代序列

为了方便读者自行编程比对，这里给出了计算中的 **H** 矩阵序列，该矩阵序列保存于文件 Hmatrix.txt 中，结果如下所示。

$$\mathbf{H}_1=\begin{pmatrix} 0.3333331840 & 0.0021086068 & 0.0016605204 \\ 0.0000102385 & -0.0308688253 & -0.0001527577 \\ 0.0000161570 & 0.0015358359 & 0.0500076828 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_2=\begin{pmatrix} 0.3344394379 & 0.0007871034 & 0.0003372340 \\ -0.0023155255 & -0.0301791423 & 0.0023305808 \\ -0.0003714067 & 0.0027720853 & 0.0505818738 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_3=\begin{pmatrix}0.3346476413 & 0.0000937951 & 0.0001686036\\ 0.0000652752 & -0.0545019170 & -0.0013432949\\ -0.0003311433 & -0.0013486321 & 0.0501247966\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_4=\begin{pmatrix}0.3347139976 & 0.0000162494 & 0.0000957237\\ -0.0000597815 & -0.0591918888 & -0.0014391899\\ -0.0004126429 & -0.0014302985 & 0.0502057763\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_5=\begin{pmatrix}0.3347168978 & 0.0000081268 & 0.0000944481\\ 0.0000093008 & -0.0616554221 & -0.0015412782\\ -0.0004124026 & -0.0015435411 & 0.0502021149\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_6=\begin{pmatrix}0.3347180653 & -0.0000052051 & 0.0000937172\\ -0.0000155068 & -0.0617803354 & -0.0015400880\\ -0.0004137463 & -0.0015374526 & 0.0502026310\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}_7=\begin{pmatrix}0.3347700935 & 0.0000495876 & 0.0000867298\\ 0.0000715923 & -0.0623905179 & -0.0015670351\\ -0.0004253221 & -0.0015860360 & 0.0502033949\end{pmatrix}$$

6.7 拓展收敛域之数值延拓法

1. 实验基本原理

两个拓扑流形 $\mathbf{M}$ 与 $\mathbf{N}$ 间有两个连续映射 $\mathbf{f}$ 与 $\mathbf{g}$

$$\mathbf{f},\mathbf{g}:\mathbf{M}\to\mathbf{N}$$

如果存在一簇连续映射

$$\mathbf{H}:\mathbf{M}\times[0,1]\to\mathbf{N}$$
$$\mathbf{x},t\to\mathbf{H}(\mathbf{x},t)$$

在这簇映射中，如果 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t)$ 中参数 t 由 0 连续的变化大 1 时，有

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},\mathbf{t})=\mathbf{f}(\mathbf{x}),\mathbf{H}(\mathbf{x},\mathbf{t})=\mathbf{g}(\mathbf{x})$$

使映射 $\mathbf{f}$ 连续的变为 $\mathbf{g}$，则称此连续映射 $\mathbf{f}$ 与 $\mathbf{g}$ 同伦。

对于适定的非线性方程组

$$\mathbf{F}(\mathbf{x})=\mathbf{0}$$

可以构造映射 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t):D\times[0,1]\subset R^{n+1}\to R^n$，使之满足条件

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},0)=\mathbf{F}_0(\mathbf{x}),\mathbf{H}(\mathbf{x},1)=\mathbf{F}(\mathbf{x}),\forall\mathbf{x}\in D$$

如果方程

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{0},t\in[0,1]$$

有解 $\mathbf{x}=\mathbf{x}(t),\mathbf{x}:[0,1]\to R^n$ 连续的依赖于 t，当 $t=1$ 时，即为方程 $\mathbf{F}(\mathbf{x})=\mathbf{0}$ 的解，此即构造了同伦映射，把原方程的求解问题转化为求解同伦方程

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{0},t\in[0,1]$$

的解。

关于同伦 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{0},t\in[0,1]$，解的曲线 $\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)$ 的存在性可以针对特殊情形给出如下的定理。

设映射 $\mathbf{F}:D\subset R^n\to R^n$ 在 D 上连续可导，假定存在一个开球 $S=S(\mathbf{x}^0,r)\subset D$，使对 $\forall\mathbf{x}\in S$，$\left\|\mathbf{F}'(\mathbf{x})^{-1}\right\|\le\beta$ 成立，其中 $r\ge\beta\left\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)\right\|$，则方程

$$\mathbf{F}(\mathbf{x})=(1-t)\mathbf{F}(\mathbf{x}^0),t\in[0,1],\mathbf{x}\in S$$

存在唯一的解 $\mathbf{x}:[0,1]\to S\subset R^n$，且 $\mathbf{x}(t)$ 连续可导并满足常微分方程初值问题:

$$\begin{cases}\mathbf{x}'(t)=-\left[\mathbf{F}'(\mathbf{x}(t))\right]^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}^0),\forall t\in[0,1]\\ \mathbf{x}(0)=\mathbf{x}^0\end{cases}$$

上述定理表明同伦方程

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{F}(\mathbf{x})+(t-1)\mathbf{F}(\mathbf{x}^0)=\mathbf{0}$$

存在唯一的解.除了上面给出的同伦之外，还可以构造其他一些形式的同伦方程，这里不多作介绍。

数值延拓法是计算同伦方程的一种有效算法，目前相关文献中一般也是处理适定方程组.这里对这一方法作了推广，用以处理大范围收敛的非线性回归问题.作上述推广是基于以下的考虑。如果测量数据没有误差，则任意选择与方程维数相同个数的测量数据组成方程组，然后采用数值延拓法或者参数微分法计算同伦方程的解，一般这样的结果有一定的精度保证，所以也不失为一种可行的方法。但是，如果在选择的数据中有些数据的测量误差非常大，则由参数微分法计算的解会很不理想，甚至结果不可靠。在这个过程中没有充分利用大量测量数据的统计信息。

设 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t):D\times[0,1]\subset R^{n+1}\to R^n$ 是满足 $\mathbf{H}(\mathbf{x},0)=\mathbf{F}_0(\mathbf{x})$，$\mathbf{H}(\mathbf{x},1)=\mathbf{F}(\mathbf{x}),\forall\mathbf{x}\in D$ 的已知同伦，可以将区间 $[0,1]$ 划分为 N 等分，记 $t_i=\dfrac{i}{N}(i=1,\cdots,N-1)$。用某种迭代法（如牛顿法，拟牛顿法等）求方程 $\mathbf{H}(\mathbf{x},t_i)=\mathbf{0},(i=1,2,\cdots,N)$ 的解 $\mathbf{x}^i$ 时，如果 t_i-t_{i-1} 充分小，则可以期望 $\mathbf{x}^{i-1}$ 是

$\mathbf{x}^i$ 的一个足够好的近似，从而使迭代法收敛。在计算第 i 个方程组时，是为超定非线性方程组，可以采用高斯-牛顿法进行计算，由此得到数值延拓法序列

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{i,j+1}=\mathbf{x}^{i,j}-\left\{\left[\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^{i,j},t_i\right)\right]^T\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^{i,j},t_i\right)\right\}^{-1}\left[\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^{i,j},t_i\right)\right]^T\mathbf{H}\left(\mathbf{x}^{i,j},t_i\right)\\ \mathbf{x}^{1,0}=\mathbf{x}^0,\mathbf{x}^{i+1,0}=\mathbf{x}^{i,m_i}\\ \mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\left\{\left[\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k,1\right)\right]^T\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k,1\right)\right\}^{-1}\left[\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k,1\right)\right]^T\mathbf{H}\left(\mathbf{x}^k,1\right)\\ \mathbf{x}^N=\mathbf{x}^{N,0}\\ j=0,1,\cdots,m_j-1;i=1,2,\cdots,N-1;k=N,N+1,\cdots\end{cases}$$

上述计算方法是一种大范围收敛方法，第一式利用延拓法求出 $\mathbf{x}(1)$ 一个足够好的近似，使之进入高斯-牛顿法的收敛域，从而保证后续计算收敛。在实际计算中，选择一定的同伦映射后可以对上面的计算方法作进一步简化.如果同伦映射取

$$\mathbf{H}(\mathbf{x},t)=\mathbf{F}(\mathbf{x})+(t-1)\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^0\right)=\mathbf{0}$$

$m_j\equiv 1$,则大范围的高斯-牛顿序列简化为

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\left[\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)^T\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)\right]^{-1}\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)^T\left[\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^k\right)+\left(\dfrac{k}{N}-1\right)\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^0\right)\right]\\ (k=0,1,\cdots,N-1)\\ \mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\left[\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)^T\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)\right]^{-1}\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^k\right)^T\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^k\right)\\ (k=N,N+1,\cdots)\end{cases}$$

一般而言，通常用上述公式的第一式获得迭代初值，所以 N 不必取很大。回到适定方程情况则迭代格式即简化为

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^k\right)^{-1}\left[\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^k\right)-\left(1-\dfrac{k}{N}\right)\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^0\right)\right]\\ k=0,1,\cdots,N-1\\ \mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^k-\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^k\right)^{-1}\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^k\right)\\ k=N,N+1,\cdots\end{cases}$$

2. 实验目的与要求

- 大致了解同伦的数学含义。

- 了解数值延拓法的基本思想。
- 会使用作者编写的程序进行相关问题处理。

3. 实验内容与数据来源

计算非线性方程组

$$\mathbf{F}(\mathbf{X})=\begin{pmatrix} x_1^2-x_2+1 \\ x_1-\cos\left(\frac{\pi}{2}x_2\right) \end{pmatrix}=\mathbf{0}$$

迭代初值取 $\mathbf{X}_0=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
XT	REAL*8(N)	终止点向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
X0	REAL*8(N)	起始点向量
N	INTEGER	方程组维数
STEP	INTEGER	划分序列

5. 程序代码

```
module inv_mat
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
```

```
    X(:,i)=xtemp
end do
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!#############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id_max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!#############################################################
   do i=k+1,N
```

```
      temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
      Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
    end do
  end do
  !-----------------------------
  ! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
  !           | *  *  *  *  # |
  !     [A b]= | 0  *  *  *  # |
  !           | 0  0  *  *  # |
  !           | 0  0  0  *  # |
  !
  Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
  bup(:)=Ab(:,N+1)
  !调用用上三角方程组的回带方法
  call uptri(Aup,bup,x,n)
  end subroutine elgauss
  subroutine uptri(A,b,x,N)
  !--------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010-4-8
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
  !               Ax=b
  !-----------------------------------------------------
  !  Input  parameters  :
  !       1.   A(N,N)系数矩阵
  !       2.   b(N)右向量
  !       3.   N 方程维数
  !  Output parameters  :
  !       1.  x  方程的根
  !       2.
  !  Common parameters  :
  !
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer::i,j,N
  real*8::A(N,N),b(N),x(N)
  x(N)=b(N)/A(N,N)
  !回带部分
  do i=n-1,1,-1
     x(i)=b(i)
    do j=i+1,N
     x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
    end do
     x(i)=x(i)/A(i,i)
  end do
  end subroutine uptri
  end module inv_mat
  module  homotopy
  !---------------------------------------module coment
  !  Version    :  V1.0
  !  Coded by   :  syz
  !  Date       :
  !-----------------------------------------------------
```

```
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.    函数文件
!      2.    偏导数文件
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use inv_mat
contains
subroutine solve(x0,N,step,xt)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   homotopy 方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::k,n,itmax=50
integer::step  !划分序列
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n)
real*8::x2(n),xt(n),vect1(n)
!xt 计算终值
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n)
real*8::m1(n,n),m2(n,n)
!itmax 最大允许迭代次数
!计算初始函数值
call func(f0,x0)
x1=x0
write(11,101)
do k=1,step-1
   call func(f1,x1)
   call jac(df,x1)
   call inv(df,H1,n)
   vect1=f1-(1d0-k*1d0/step*1d0*f0)
   x2=x1-matmul(H1,vect1)
   !把计算迭代序列写入文件
```

```
    write(11,102)k,x2
     x1=x2
end do
101 format(/,T12,'数值延拓法获取初值序列',/)
102 format(I4,3F16.10)
 xt=x2
end subroutine solve
function vdot(a,b,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   N 向量维数
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!      2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
function vvmat(a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  N 维列向量 a 乘以 N 维横向量 b
!               结果为  n*n 维矩阵
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
integer::n,i,j
real*8::a(n),b(n),vvmat(n,n)
do i=1,n
  do j=1,n
    vvmat(i,j)=a(i)*b(j)
  end do
end do
end function vvmat
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),f(2),pi=3.141592653589793
f(1)=x(1)**2-x(2)+1d0
f(2)=x(1)-dcos(pi/2d0*x(2))
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),df(2,2),pi=3.141592653589793
df(1,1)=2d0*x(1)
df(1,2)=-1d0
df(2,1)=1d0
df(2,2)=dsin(pi/2d0*x(2))*pi/2d0
end subroutine jac
end module homotopy
subroutine newton(x0,N,itmax)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用牛顿法获得最终计算结果
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   x0 为初值，N 为阶数，tol 为误差容限
!      2.   计算结果保存在文件中
!-----------------------------------------------------
use  inv_mat
use  homotopy
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax
real*8::x2(N),x1(N),x0(N),dx(N),f(N)
real*8::df(N,N),H(n,n)
x1=x0
write(12,101)
do i=1,itmax
   call func(f,x1)
   call jac(df,x1)
   call inv(df,H,N)
   dx=-matmul(H,f)
   x2=x1+dx
   write(12,102)i,x2
!更新 x 值
   x1=x2
end  do
101 format(/,T5,'由数值延拓法提供初值后牛顿法计算序列',/)
102 format(I4,2F16.9)
end subroutine newton
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      : 2010.05.11
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   数值延拓法计算非线性方程组主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 给出了计算结果
!      2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use  inv mat
use  homotopy
implicit real*8(a-z)
integer::N=2,step=8
!N 为方程组的维数，step 为微分方程的步数
real*8::x0(2),x1(2),xt(2)
```

```
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='newton.txt')
x0=(/1d0,1d0/)
!直接调用牛顿法，则计算失败不收敛,可以保留此语句
!而注释下面两行语句，进行验证
!--------
!call newton(x0,n,1d-8)
!--------
!step 为微分方程步数
! 通过数值延拓法计算的中间结果放在文件 result.txt 中
! 最后终值放在参数 xt 中回代出来，后面作为牛顿法初值
call solve(x0,n,step,xt)
!把数值延拓法计算结果作为牛顿法初值，最大允许迭代次
!计算结果放在文件 newton.txt 中
call newton(xt,n,5)
end program main
```

6. 实验结论

如果直接采用牛顿迭代法则计算失败，采用数值延拓法计算结果保存在文件 result.txt 中，计算结果如图 6-6 所示。

```
        数值延拓法获取初值序列

   1    0.9224091755     0.9698183510
   2    0.8375237808     0.9442405531
   3    0.7458600681     0.9229050050
   4    0.6457200566     0.9069263696
   5    0.5343515027     0.8981285736
   6    0.4071196983     0.8995585167
   7    0.2551067455     0.9169715138
```

图 6-6　数值延拓法计算获取的初值

在数值延拓法的基础上采用牛顿迭代法 5 次就已经得到较高的精度，计算结果保存在文件 newton.txt 中，内容如图 6-7 所示。

```
     由数值延拓法提供初值后牛顿法计算序列

   1     0.056889867      0.963946526
   2     0.004358435      0.997259445
   3     0.000029419      0.999981260
   4    -0.000000042      0.999999999
   5    -0.000000044      1.000000000
```

图 6-7　在延拓法基础上牛顿法获得最终计算结果

6.8 拓展收敛域之参数微分法

1. 实验基本原理

上一节简要介绍了拓扑学中的同伦方法的基本思想，除了采用数值延拓方法之外，还可以采用参数微分法解算非线性方程组。求解同伦方程的可以转化为等价的微分方程组的初值问题.假设 $\mathbf{x}(t)$ 与 $\mathbf{H}$ 都是 Frechet 可微的，同伦方程两边对 t 求导，有

$$\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}(t),t\right)\frac{d\mathbf{x}}{dt}+\mathbf{H}_{t}\left(\mathbf{x}(t),t\right)=0$$

如果 $\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}(t),t\right)$ 非奇异，则求同伦方程的解等价于微分方程的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{d\mathbf{x}}{dt}=-\left[\mathbf{H}_{\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}(t),t\right)\right]^{-1}\mathbf{H}_{t}\left(\mathbf{x}(t),t\right)\\ \mathbf{x}(0)=\mathbf{x}^{0}\end{cases}$$

如此，便可以利用常微分方程初值问题的各种解法求 $t_N=1$ 时的数值解 $\mathbf{x}^N$ 作为 $\mathbf{x}=\mathbf{x}(1)$ 的近似解。实际使用时，一般可以针对具体的同伦方程构造一定的微分方程计算格式进行初值问题计算。

比如构造微分方程的欧拉中点求积公式，则有

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{1}=\mathbf{x}^{0}-\dfrac{1}{N}\left[\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^{0}\right)\right]^{-1}\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{0}\right)\\ \mathbf{x}^{k+\frac{1}{2}}=\mathbf{x}^{k}+\dfrac{1}{2}\left(\mathbf{x}^{k}-\mathbf{x}^{k-1}\right),k=1,\cdots,N-1\\ \mathbf{x}^{k+1}=\mathbf{x}^{k}-\dfrac{1}{N}\left[\mathbf{F}'\left(\mathbf{x}^{k+\frac{1}{2}}\right)\right]^{-1}\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{0}\right)\end{cases}$$

实际上即便是采用简单的欧拉格式（非中点格式），在某种意义上参数微分法即相当于牛顿迭代法。可以期望用更精确的数值方法和变步长的数值积分法得到更好的结果，因这涉及到更多的微分流形与拓扑学知识，这里就不多做讨论。

2. 实验目的与要求

- 大致了解参数微分法的基本思想。
- 理解参数微分法公式中各量的意义。

- 会使用作者编写的程序进行相关问题处理。

3. 实验内容与数据来源

计算非线性方程组

$$\mathbf{F}(\mathbf{X})=\begin{pmatrix} x_1^2-x_2+1 \\ x_1-\cos\left(\dfrac{\pi}{2}x_2\right) \end{pmatrix}=\mathbf{0}$$

迭代初值取 $\mathbf{X}_0=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
XT	REAL*8(N)	积分终点向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
X0	REAL*8(N)	积分起点向量
N	INTEGER	方程组维数
STEP	INTEGER	微分方程积分步数

5. 程序代码

```
module inv_mat
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Description : 计算逆矩阵
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   inv 计算逆矩阵
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine inv(A,invA,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  计算逆矩阵
```

```
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i
real*8::A(n,n),invA(n,n),E(n,n)
E=0
!设置 E 为单位矩阵
do i=1,n
  E(i,i)=1
end do
call mateq(A,E,invA,N,N)
end subroutine inv
subroutine mateq(A,B,X,N,M)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法计算矩阵方程
!               AX=B
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   B(N,M)右矩阵
!      3.   N 方程维数,
!      4.   M---B 的列数
!  Output parameters  :
!      1.  X  方程的根（N,M）维
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M,i
real*8::A(N,N),B(N,M),X(N,M)
real*8::btemp(N),xtemp(N)
do i=1,M
   btemp=B(:,i)
   call elgauss(A,btemp,xtemp,N)
   X(:,i)=xtemp
end do
```

```
end subroutine mateq
subroutine elgauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id max=i
      end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
```

```
   end do
end do
!-----------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine elgauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module inv mat
module  homotopy
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :
!-----------------------------------------------------
!  Description :   要计算的方程相关模块
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.    函数文件
!      2.    偏导数文件
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use inv_mat
contains
subroutine solve(x0,N,step,xt)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   homotopy 方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::k,n,itmax=50
integer::step  !微分方程步数
real*8::x1(n),x0(n),y(n),f0(n),f1(n),dx(n),xbar(n)
real*8::x2(n),xt(n)
!xt 计算终值
real*8::H0(n,n),H1(n,n),df(n,n)
real*8::m1(n,n),m2(n,n)
!itmax 最大允许迭代次数
!tol 误差容限
call func(f0,x0)
call jac(df,x0)
call inv(df,H0,N)
x1=x0-1d0/step*matmul(H0,f0)
write(11,101)
do k=1,step-1
   xbar=x1+1d0/2*(x1-x0)
   call jac(df,xbar)
   call inv(df,H1,n)
   x2=x1-matmul(H1,f0)/step
   !把计算迭代序列写入文件
   write(11,102)k,x2
```

```
    x0=x1
     x1=x2
end do
101 format(/,T12,'参数微分法获取初值序列',/)
102 format(I4,3F16.10)
 xt=x2
end subroutine solve
function vdot(a,b,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 计算向量 a,b 内积
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   N 向量维数
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   vdot=a1(1)*(1)+a(2)*b(2)+...
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::i,N
real*8::a(n),b(n),vdot
vdot=0
do i=1,N
  vdot=vdot+a(i)*b(i)
end do
end function vdot
function vvmat(a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  N 维列向量 a 乘以 N 维横向量 b
!               结果为  n*n 维矩阵
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
integer::n,i,j
real*8::a(n),b(n),vvmat(n,n)
do i=1,n
  do j=1,n
    vvmat(i,j)=a(i)*b(j)
  end do
end do
end function vvmat
subroutine func(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  方程函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    f 方程函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),f(2),pi=3.141592653589793
f(1)=x(1)**2-x(2)+1d0
f(2)=x(1)-dcos(pi/2d0*x(2))
end subroutine func
subroutine  jac(df,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  偏导数矩阵
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::x(2),df(2,2),pi=3.141592653589793
df(1,1)=2d0*x(1)
df(1,2)=-1d0
df(2,1)=1d0
df(2,2)=dsin(pi/2d0*x(2))*pi/2d0
end subroutine jac
end module homotopy
subroutine newton(x0,N,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用牛顿法获得最终计算结果
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   x0 为初值，N 为阶数，tol 为误差容限
!      2.   计算结果保存在文件中
!-----------------------------------------------------
use  inv_mat
use  homotopy
implicit real*8(a-z)
integer::i,n,itmax=50,k
!itmax 允许最大迭代次数
real*8::x2(N),x1(N),x0(N),dx(N),f(N)
real*8::df(N,N),H(n,n)
x1=x0
write(12,101)
do i=1,itmax
   call func(f,x1)
   call jac(df,x1)
   call inv(df,H,N)
   dx=-matmul(H,f)
   x2=x1+dx
  write(12,102)i,x2
!更新 x 值
   x1=x2
   !判断迭代停止标准
   len_dx=0
   do k=1,n
     len dx=len dx+dx(i)**2
   end do
   len dx=dsqrt(len dx)
   if (len dx<tol)  exit
end  do
101 format(/,T5,'由参数微分提供初值后牛顿法计算序列',/)
102 format(I4,2F16.9)
end subroutine newton
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      : 2010.05.11
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :   参数微分方法计算非线性方程组主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 给出了计算结果
!      2.   Hmatrix.txt 给出了计算中的 H 矩阵值
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
```

```
!      2.
!-------------------------------------------------------
use  inv_mat
use  homotopy
implicit real*8(a-z)
integer::N=2,step=8
!N 为方程组的维数，step 为微分方程的步数
real*8::x0(2),x1(2),xt(2)
open(unit=11,file='result.txt')
open(unit=12,file='newton.txt')
x0=(/1d0,0d0/)
!直接调用牛顿法，则计算失败不收敛,可以保留此语句
!而注释下面两行语句，进行验证
!--------
!call newton(x0,n,1d-8)
!--------
!step 为微分方程步数
! 通过参数微分法计算的中间结果放在文件 result.txt 中
! 最后终值放在参数 xt 中回代出来，后面作为牛顿法初值
call solve(x0,n,step,xt)
!把参数微分法计算结果作为牛顿法初值，计算精度要求达到的-8 次方
!计算结果放在文件 newton.txt 中
call newton(xt,n,1d-8)
end program main
```

6. 实验结论

由参数微分法提供的初值保存在文件 result.txt 中，结果图 6-8 所示。

在获得初值后，利用参数微分法获得的初值进行牛顿迭代，计算结果保存在 newton.txt 文件中。结果如图 6-9 所示。

参数微分法获取初值序列

1	0.9205311130	0.3410622260
2	0.8336428488	0.4380004385
3	0.7336618444	0.5299907158
4	0.6188253608	0.6229698900
5	0.4841321122	0.7217343928
6	0.3189711407	0.8340610006
7	0.0955542544	0.9784336725

图 6-8　参数微分法获得初值序列

由参数微分提供初值后牛顿法计算序列

1	0.011035999	0.992978458
2	0.000185281	0.999882296
3	0.000000010	0.999999966

图 6-9　牛顿法再次微分改正序列

可以看到牛顿法再迭代三次以后已经达到较高的精度。

本章小结

本章介绍了常见的非线性方程组的数值方法。如本章引言所述，非线性方程组的一些理论依然没有完善。尤其是对于大范围收敛性问题，一直是困扰数学家的一个难题，目前还没有一般性的方法彻底解决这个问题，甚至有人预言在即便是在将来，采用传统方法这依然是一个

相当困难的问题的。本章最后两小节是数学家采取的一些扩大收敛域的方法，但依然没有完全解决这个问题。幸而，近年来一些新兴的智能算法可以在一定程度上弥补以上的缺陷，因而受到部分计算数学家的关注和期望。

第 7 章

◄ 插值法 ►

插值法属函数逼近范畴，是数值分析中一个基础性的内容。数值微分、数值积分、微分方程数值解法等理论都需要具备插值法基础。给定一组基函数，函数值用基函数的线性组合表示，在 Hilbert 空间下给定各基函数的坐标后，如果函数值完全等于 Hilbert 空间下的向量值，则称为插值问题。使用较多也相对简单的基函数为多项式函数，当然根据需要也会选择其他的一些基函数如样条函数、连分式等。

7.1 拉格朗日插值

1. 实验基本原理

拉格朗日插值方法是比较基础的方法，方法本身比较容易实现，而且效果还不错，也容易理解。

通过平面上不同两点可以确定一条直线经过这两点，这就是拉格朗日线性插值问题，对于不在同一条直线的三个点得到的插值多项式为抛物线。

这里给出一般的插值公式，拉格朗日插值的基多项式为：

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_i}{x_i-x_j},i=0,1,2,\cdots,n$$

对于没有接触过插值方法的读者，一个比较好的快速熟悉拉格朗日插值方法是把上面的多项式展开一下，看看如何计算基函数。

有了基函数以后就可以直接构造插值多项式，插值多项式为：

$$p_n=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)$$

虽然拉格朗日插值法较为基础，但因算法实现简单，且在一定条件下精度能得到保证，

故而很多实际应用问题就采用该方法实现插值。

2. 实验目的与要求

- 理解拉格朗日插值多项式方法。
- 会构造插值基函数。
- 能够编程实现拉格朗日多项式插值法。
- 能用插值多项式解决一些应用问题。

3. 实验内容与数据来源

已经知道 $\cos 30^\circ=\frac{\sqrt{3}}{2}$，$\cos 45^\circ=\frac{\sqrt{2}}{2}$，$\cos 60^\circ=\frac{1}{2}$，cos，使用拉格朗日插值法计算 $\cos 47^\circ$，$\cos 53^\circ$，c的数值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(M)	输出插值点的结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
X	REAL*8(N)	节点自变量
Y	REAL*8(N)	节点函数值
N	INTEGER	节点个数
M	INTEGER	要插值点的个数
T	REAL*8(N)	插值节点

5. 程序代码

```
module lagrange
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   拉格朗日插值法模块
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Contains    :
!      1.  solve 方法函数
!      2.   lag  单点插值
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,m,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  拉格朗日插值函数，可以直接针对向量插值
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   n  节点个数
!      2.   x 节点自变量值
!      3.   y 节点因变量值
!      4.   m  要插值点的个数
!      5.   t 要插值点的值 为向量
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.   ty 插值点的结果 为向量
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m
integer:: i
real*8::x(n),y(n),t(m),ty(m)
do i=1,m
  call la(n,x,y,t(i),ty(i))
end do
end subroutine solve
subroutine  la(n,x,y,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.11
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  拉格朗日单点插值，为 solve 所调用
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
```

```
implicit real*8(a-z)
integer::n,i,k
!输入序列 x,y  为 N 维向量
!要插值的点 t
!t 对应的插值结果 ty
real*8::x(n),y(n),a(n)
!a(i)为各项
do i=1,n
   a(i)=y(i)
   do k=1,n
      if (k==i) cycle
      a(i)=a(i)*(t-x(k))/(x(i)-x(k))
   end do
end do
ty=0
do i=1,n
  ty=ty+a(i)
end do
end subroutine la
end module lagrange
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 拉格朗日插值法主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use lagrange
implicit real*8(a-z)
integer::N=4
real*8::x0(4),x(4),y(4),t0(3),t(3),ty(3),tyreal(3)
real*8,parameter::pi=3.141592653589793d0
open(unit=11,file='result.txt')
!插值节点及其函数值，化为弧度
x0=(/30,45,60,90/)
x=x0*pi/180
y=(/dsqrt(3d0)/2,dsqrt(2d0)/2,1d0/2,0d0/)
!待计算的点，化为弧度
t0=(/47,53,79/)
t=t0*pi/180
call solve(4,x,y,3,t,ty)
!调用系统逐元函数
```

```
    tyreal=dcos(t)
    write(11,101)
    !输出标题
    write(11,102)t0
    !输出角度
    write(11,103)ty
    !输出插值结果
    write(11,104)tyreal
    !输出实际函数值
    101 format(/,T22,'拉格朗日插值法',/)
    102 format(T3,'角度：',T16,3F12.5)
    103 format(T3,'插值结果：',T16,3F12.6)
    104 format(T3,'实际结果:',T16,3F12.6)
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 文件中，如图 7-1 所示。

```
                拉格朗日插值法

角度：          47.00000    53.00000    79.00000
插值结果：      0.681956    0.601712    0.191458
实际结果：      0.681998    0.601815    0.190809
```

图 7-1　拉格朗日插值结果

可以看出在数据比较稀疏而且较少的情况下，插值结果与实际结果已经符合的很好了。

7.2　牛顿插值法

1. 实验基本原理

拉格朗日插值多项式是一种很优秀的方法，其理论在很多方面都有应用。然而，如果增加一个插值基点，原先计算的插值多项式 $p_n(x)$ 对 $p_{n+1}(x)$ 没有用，这样必然增加计算工作量，尤其在没有计算机的情况下这个问题更加突出。我们期望增加插值基点时原先的计算结果对后面的计算仍然有用，本实验的牛顿插值方法具备这样的特点。在介绍牛顿插值之前先要了解一下差商的基本概念。

函数 $f(x)$ 的差商定义为：

$$f[x_k]=f(x_k)$$
$$f[x_{k-1},x_k]=\frac{f[x_k]-f[x_{k-1}]}{x_{k-1}-x_k}$$
$$f[x_{k-2},x_{k-1},x_k]=\frac{f[x_{k-1},x_k]-f[x_{k-2},x_{k-1}]}{x_{k-2}-x_k}$$
$$\vdots$$
$$f[x_{k-j},x_{k-j+1},\cdots,x_k]=\frac{f[x_{k-j+1},\cdots,x_k]-f[x_{k-j},\cdots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-j}}$$

有了上面的准备，便可以给出牛顿插值多项式为：

$$\begin{aligned}N_n(x)=&f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2]\\&(x-x_0)(x-x_1)+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n]\\&(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\end{aligned}$$

如果记 $w_k=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1}),k=1,2,\cdots,n$，则牛顿插值可以表达为：

$$\begin{aligned}N_n(x)=&f[x_0]+f[x_0,x_1]w_1+f[x_0,x_1,x_2]w_2\\&+\cdots+f[x_0,x_1,\cdots,x_n]w_n\end{aligned}$$

有了上面的牛顿插值公式，就可以对给定的数据处理了，实验中的程序设计正是围绕这个公式展开的。

2. 实验目的与要求

- 熟悉差商、均差的基本概念。
- 比较牛顿插值方法与拉格朗日插值方法。
- 能够正确构造牛顿插值公式。
- 能够把牛顿插值方法用计算机程序实现。
- 要求程序中可以同时实现对多数据的一次处理。而不是只对单个数据处理。

3. 实验内容与数据来源

有离散数据

k	x_k	$f(x_k)$

1	1	0
2	2	-5
3	3	-6
4	4	3

用牛顿插值法计算 $f(2), f(3)$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(M)	要计算的插值结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
N	INTEGER	节点个数
M	INTEGER	要计算的节点个数
X	REAL*8(N)	节点向量
Y	REAL*8(N)	节点函数值
T	REAL*8(M)	要计算的节点向量

5. 程序代码

```
module  newton
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   牛顿插值方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   提供两个函数，一个是单点插值，一个是 solve 函数
!           注意两者的 N 是不一样的。
!           在单点插值中 N 是节点的个数减
!           为方便使用，在 solve 中 N 就直接指节点个数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(n,x,y,m,t,ty)
!-----------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  方法主函数
!               可直接对多点插值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  n  节点个数
!       2.  x 节点自变量值 N 维向量
!       3.  y 节点因变量值 N 维向量
!       4.  m  要计算点的个数
!       5.  t  要计算的点  M 向量
```

```
!  Output parameters  :
!       1.  ty  计算结果，为M维向量
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   注意这里的N  就直接指节点的个数
!       2.   而子函数 new 中N 是指节点个数减1
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m
integer::i,j,k
real*8::x(n),y(n),t(m),ty(m)
do i=1,m
call new(n-1,x,y,t(i),ty(i))
end do
end subroutine solve
subroutine new(n,x,y,t,ty)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------
!  Purpose   :  单点插值程序
!               此函数目的为solve所调用
!-------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.
!       2.   t 标量
!  Output parameters  :
!       1.
!       2.    ty 标量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.    N 是节点个数减1，比如共个节点 则N=3
!       2.
!       3.   详细算法可以参看《数值计算方法》
!            南京大学林成森编 科学出版社
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::b(n+1)
real*8::Q(0:n,0:n)
do i=0,n
Q(i,0)=y(i)
end do
do i=1,n
  do j=1,i
   Q(i,j)=(Q(i,j-1)-Q(i-1,j-1))/(x(i)-x(i-j))
  end do
end do
b(n+1)=Q(n,n)
do k=n,1,-1
```

```
  b(k)=Q(k-1,k-1)+b(k+1)*(t-x(k-1))
end do
ty=b(1)
end subroutine new
end module newton
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  牛顿插值法主函数
!               solve 函数可以直接对向量插值
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.
!       2.
!  Output data files  :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
use newton
implicit real*8(a-z)
integer::N=4,M=2
real*8::x(4),y(4),t(2),ty(2)
open(unit=11,file='result.txt')
!插值节点极其函数值
x=(/1d0,2d0,3d0,4d0/)
y=(/0d0,-5d0,-6d0,3d0/)
!要计算的点
t=(/2d0,3d0/)
call solve(4,x,y,2,t,ty)
write(11,101)
write(11,102)ty
101 format(/,T5,'牛顿插值结果为:')
102 format(/,2F10.4)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件可以看到结果如图 7-2 所示。

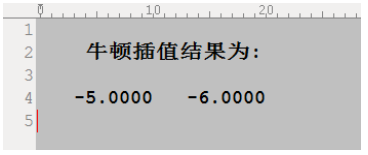


图 7-2　牛顿插值法计算结果

与上一节一样，这里给出的插值方法可以输入向量，计算结果亦为这些向量的插值结果。

7.3 Hermite插值

1. 实验基本原理

前面几个实验中介绍的插值公式都要求插值多项式在插值点出的取值和函数值相等。有些实际问题，不仅要求插值多项式在插值点与函数值相同，而且还要求导数相同，这类问题就是 Hermit 插值问题。

如果 $f(x)$ 在区间[a,b]上连续可以导，$x_0, x_1, \cdots x_n \in [a,b]$ 是互异的，那么存在唯一的多项式 $H_{2n+1}(x)$ 满足多项式在这些点上的值与函数 $f(x)$ 的值相等、多项式在这些点的一阶导数值与函数的一阶导数值相等。

这个多项式可以表示为

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)[1-2(x-x_i)l_i'(x_i)]l_i^2(x) + \sum_{i=0}^{n} f'(x_i)(x-x_i)l_i^2(x)$$

其中

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{(x-x_i)}{(x_i-x_j)}, i = 0,1,\cdots,n$$

$$l_i'(x_i) = \sum_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{1}{x_i-x_j}, i = 0,1,\cdots,n$$

这就是 Hermite 插值的基本公式。

2. 实验目的与要求

- 了解 Hermite 插值的适用条件。
- 理解插值公式的计算流程。
- 会使用作者编写的函数解决 Hermite 插值问题。
- 最好能自行编程实现 Hermite 插值方法。

3. 实验内容与数据来源

已知函数 $f(x)$ 在以下各点处的函数值与导数值如下：

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$
1	1.3	0.6200860	-0.5220232
2	1.6	0.4554022	-0.5698959
3	1.9	0.2818186	-0.5811571

用 Hermite 插值求 $f(1.5), f(1.7)$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(M)	输出的插值结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
N	INTEGER	节点个数
X	REAL*8(N)	节点向量
Y	REAL*8(N)	节点函数值
DY	REAL*8(N)	节点导数值
T	REAL*8(M)	要计算的节点
M	INTEGER	要计算的节点个数

5. 程序代码

```
module Herm
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :    Hermite 插值模块
!                提供两个函数
!                solve 函数为方法函数
!                single 函数为单点插值函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,dy,m,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   Hermite 插值方法函数
```

```
!              可直接对向量插值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   n 节点个数
!      2.   x  节点向量 N 维
!      3.   y  节点函数值 N 维
!      4.   dy  节点导数值 N 维
!      5.   m  需要插值向量维数
!      6    t  需要插值的点 M 维
!  Output parameters  :
!      1.   ty  插值结果 M 维 -----与 t 对应
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.      需要注意的是这里的输入参数 N  即表示节点个数
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m
integer::i,j,k
real*8::x(n),y(n),dy(n),t(m),ty(m)
do i=1,m
call single(n-1,x,y,dy,t(i),ty(i))
end do
end subroutine solve
subroutine  single(n,x,y,dy,t,ty)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  单点 Hermite 插值
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   需要注意：输入参数 N 表示节点数减
!      2.      如个节点，则 N=5
!           t,ty 为标量
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
integer::i,j
real*8::x(0:n),y(0:n),dy(0:n)
real*8::l(0:n),dl(0:n)
```

```
!---------这段程序求得 l
do i=0,n
    l(i)=1
    do j=0,n
      if (j==i) cycle
     l(i)=l(i)*(t-x(j))/(x(i)-x(j))
    end do
end do
!-------这段程序求得 dl
do i=0,n
  dl(i)=0
  do j=0,n
    if (j==i) cycle
    dl(i)=dl(i)+1d0/(x(i)-x(j))
  end do
end do
ty=0
do i=0,n
!& 表示续行
  ty=ty+y(i)*(1d0-2d0*(t-x(i))*dl(i))*l(i)**2  &
     +dy(i)*(t-x(i))*l(i)**2
end do
end subroutine single
end module Herm
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.11
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Hermite 插值主函数
!               可直接对向量插值
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   计算结果保存在文件 result.txt 中
!       2.
!-------------------------------------------------------
use Herm
implicit real*8(a-z)
integer::N=3
real*8::x(3),y(3),dy(3),t(2),ty(2)
open(unit=11,file='result.txt')
x=(/1.3d0,1.6d0,1.9d0/)
y=(/0.620086d0,0.4554022d0,0.2818186d0/)
dy=(/-0.5220232d0,-0.5698959d0,-0.5811571d0/)
t=(/1.5d0,1.7d0/)
call solve(3,x,y,dy,2,t,ty)
write(11,101)
write(11,102)t
write(11,103)ty
101 format(/,T10,'Hermite 插值',/)
102 format('要计算的点：',T14,2F12.5)
103 format('插值结果：',T14,2F12.5)
end
```

6. 实验结论

程序运行后，计算结果保存在文件 result.txt 文件中，打开该文件如图 7-3 所示。

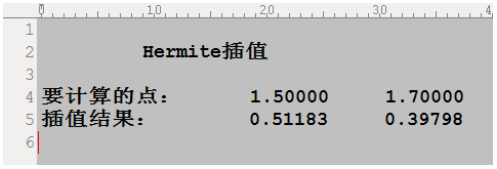


图 7-3 Hermite 插值计算结果

Hermite 插值也是一种常见的插值方法，但是需要提供插值基点的导数值。

7.4 三次样条插值之固支条件

1. 实验基本原理

在具有收敛性与稳定性的插值函数中，最重要也最常用的是样条函数插值。样条函数给出的光滑插值曲线或曲面在飞机、汽车、船舶、精密机械等方面有相当广泛的应用。在函数逼近、数值积分、微分方程数值方法等计算数学领域中，样条函数也是最重要的工具之一。

设$[a,b]$上一个划分$\Delta: a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$，如果函数$s(x)$满足条件

（1）$s(x)\in C^{m-1}[a,b]$；

（2）$s(x)$在每个子区间$[x_{i-1},x_i],i=1,2,\ldots,n$上是$m$次代数多项式；

则称$s(x)$为关于节点划分Δ的m次样条多项式。

实际应用中，较为常用的是三次样条插值，三次样条插值不同的边界条件构成了不同的插值问题，这一节介绍固支条件下插值方法。固支条件也称为第一类边界条件即

$$s'(x_0)=f'(x_0),s'(x_n)=f'(x_n)$$

求解三次样条插值有多种方法，这里介绍三弯矩方法。

对于划分Δ，记子区间$[x_{i-1},x_i]$的长度

$$h_i=x_{i+1}-x_i,i=0,1,2,\ldots,n-1$$

三次样条插值可以构造多项式

$$s(x)=M_i\frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h_i}+M_{i+1}\frac{(x-x_i)^3}{6h_i}+\left[f(x_i)-\frac{M_ih_i^2}{6}\right]\frac{x_{i+1}-x}{h_i}+\left[f(x_{i+1})-\frac{M_{i+1}h_i^2}{6}\right]\frac{x-x_i}{h_i}$$

$$x \in [x_i, x_{i+1}], i = 0,1,...,n-1$$

进而可以通过以下步骤求解插值点的函数值 $y_i = f(x_i), i = 0,1,2,...,n$ 。

计算参数

$$\begin{cases} h_i = x_{i+1} - x_i, \\ f[x_i, x_{i+1}] = \dfrac{y_{i+1} - y_i}{h_i}, i = 0,1,,n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mu_i = \dfrac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}, \lambda_i = 1 - \mu_i \\ f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}] = \dfrac{f[x_{i-1}, x_i] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i-1} - x_{i+1}}, i = 1,2,...,n-1 \\ d_i = 6f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}] \end{cases}$$

设置固支边界条件相关参数

$$\begin{cases} d_0 = \dfrac{6}{h_0}\left(f[x_0, x_1] - f'(x_0)\right) \\ d_n = \dfrac{6}{h_{n-1}}\left(f'(x_n) - f[x_{n-1}, x_n]\right) \end{cases}$$

求解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_0 \\ M_1 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

把求解步骤 3 中的方程得到 $\{M_i\}_{i=0}^n$ ，带入三次样条多项式。即得到函数逼近式，如果对于要计算的点，先搜索其在整个区间中的位置，然后用逼近式给出该点的插值结果。

实际上，我们在程序设计时，也是对要插值点的个各分量分别搜索，然后给出插值结果的向量。

2. 实验目的与要求

- 了解样条函数的重要性。

- 大致了解样条插值的原理。
- 了解固支条件下三次样条插值方法。
- 会用作者编写的程序进行相关问题处理。

3. 实验内容与数据来源

已知离散点列如下

i	x_i	$f(x_i)$
0	-2	-0.9093
1	-1.5	-0.9975
2	-1	-0.8415
3	-0.5	-0.4794
4	0	0
5	0.5	0.4794
6	1	0.8415
7	1.5	0.9975
8	2	0.9093

已知 $f'(-2)=-0.4161$，$f'(2)=-0$。试用三次样条方法对以上数据插值，并求 $\mathbf{x}=(0.4\quad -0.6\quad 1.7\quad 0.8\quad 1.8)^T$ 处的值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:NT)	要计算的函数值

（续表）

输入参变量	数据类型	变量说明
N	INTEGER	插值节点个数减 1
X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
NT	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:NT)	要计算的节点向量
DA	REAL*8	起点处导数
DB	REAL*8	终点处导数

5. 程序代码

```
module  spline
!----------------------------------------module coment
```

```
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Description :   三次样条插值之固支条件模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     solve 函数即方法函数
!     2.
!     3.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.     可以直接对向量插值
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,da,db,nt,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   三次样条之固支条件
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   n-----插值节点个数减，如有九个节点则 N=8
!      2.   x ---节点自变量 为（: N）维向量
!      3.   y----节点因变量 （: N）维向量
!      4.   nt 要计算向量的维数
!      5.   t 要计算的向量 (1:nt) 维向量
!      6.   da  ------起点处导数 f'(x(0))
!      7.   db -------终点处导数 f'(x(0))
!  Output parameters  :
!      1.   ty ---要计算的向量，（: nt）维
!
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!           算法可以参考施妙根，顾丽珍编写的科学计算
!           对于要插值的向量分量，可以不必按大小排列
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,nt
!n 为插值节点数减，即如果有个节点，则 n=8
!nt 要插值点的个数，及向量 t,ty 的维数
integer::i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(nt),ty(nt)
real*8::h(0:n-1)
real*8::f1(0:n-1),f2(1:n-1)
real*8::u(1:n-1),namda(1:n-1),d(0:n)
real*8::M(0:n)
```

```
real*8::A(0:n,0:n)
do i=0,n-1
  h(i)=x(i+1)-x(i)
  f1(i)=(y(i+1)-y(i))/h(i)
end do
!对固支边界条件而言  设置 d(0) 与 d(n)
d(0)=6d0/h(0)*(f1(0)-da)
d(n)=6d0/h(n-1)*(db-f1(n-1))
!求得 u, namda, d
do i=1,n-1
u(i)=h(i-1)/(h(i-1)+h(i))
 namda(i)=1-u(i)
f2(i)=(f1(i-1)-f1(i))/(x(i-1)-x(i+1))
  d(i)=6d0*f2(i)
end do
!设置 A 矩阵值
A=0
do i=1,n-1
a(i,i)=2d0
end do
do i=2,n-1
a(i,i-1)=u(i)
end do
do i=1,n-2
a(i,i+1)=namda(i)
end do
!-------相比于自然条件，这里需要设置 A 矩阵首末行元素，其他相同
!设置 A 矩阵的首行元素
a(0,0)=2d0
a(0,1)=1d0
!设置 A 矩阵元素的末行元素
a(n,n-1)=1d0
a(n,n)=2d0
! 设置右向量值
d(1)=d(1)-u(1)*M(0)
d(n-1)=d(n-1)-namda(n-1)*M(n)
call gauss(a,d,M,N+1)
!--------以上以及求得系数
!已经完成插值多项式的建立
!--------------------------------------------------
! 以下开始计算具体值
do k=1,nt
!------------
!  对要插值向量每个分量而言，先找到其在数据中的位置
do i=1,n-1
 if (t(k)<x(i+1)) exit
end do
  ty(k)=M(i)*(x(i+1)-t(k))**3/6d0/h(i)+ M(i+1)*(t(k)-x(i))**3/6d0/h(i)+ &
     (y(i)-M(i)*h(i)**2/6d0)*(x(i+1)-t(k))/h(i)+ &
     (y(i+1)-M(i+1)*h(i)**2/6d0)*(t(k)-x(i))/h(i)
end do
!-------------------------------
!为了方便读者比对结果，这里输出中间值，实际应用时可以去掉输出部分
!!-------------------------
!write(11,101)
```

```
!write(11,102)((i,h(i),m(i)),i=0,n-1)   !输出 h
!
!
!write(11,103)
!write(11,104)((i,u(i),namda(i),d(i)),i=1,n-1)
!
!101 format(/,T5,'         h           m')
!102 format(I3,2F16.8)
!
!103 format(/,T5,'        u           namda          d')
!104 format(I3,3F16.8)
!!-----------------------------------------------------------------
end subroutine solve
subroutine gauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!################################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id max=i
       end if
    end do
```

```
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!------------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine gauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
```

```
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module spline
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  固定支边界条件下的三次样条插值
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.   reslut.txt 文件保存了计算结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit real*8(a-z)
integer::i,j
real*8::x(0:8),y(0:8),t(5),ty(5),simty(5)
open(unit=11,file='result.txt')
!插值基点
x=(/-2d0 ,-1.5d0 ,-1d0 , -0.5d0,  0d0 , 0.5d0 , 1d0 , 1.5d0,2.0d0/)
y=(/ -0.9093d0,-0.9975d0,-0.8415d0, -0.4794d0,0d0,0.4794d0,0.8415d0,
0.9975d0,0.9093d0/)
!第一类边界条件，即一次导数边界条件
da= -0.4161d0
db= -0.4161d0
!要进行计算的点 ------不需要按照大小排列
t=(/0.4d0,-0.6d0,1.7d0,0.8d0,1.8d0/)
!调用方法函数
call solve(8,x,y,da,db,5,t,ty)
!仿真函数值
simty=dsin(t)
write(11,101)
write(11,102)
write(11,103)((i,t(i),ty(i),simty(i)),i=1,5)
101  format(/,T9,'三次样条插值之固支条件',/)
102  format('  序列    插值点       插值结果       真值')
103  format(I3,3F16.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 文件中，内容如图 7-4 所示。

三次样条插值之固支条件

序列	插值点	插值结果	真值
1	0.40000000	0.38958497	0.38941834
2	-0.60000000	-0.56423331	-0.56464247
3	1.70000000	0.99375613	0.99166481
4	0.80000000	0.71643249	0.71735609
5	1.80000000	0.97519209	0.97384763

图 7-4　三次样条插值之固支条件插值结果

实际上原题数据来源于仿真函数 $y=\sin x$ 在区间 $[-2,2]$ 上的值，通过与真值比较可以发现计算精度还是不错的。

7.5　三次样条插值之自然边界条件

1. 实验基本原理

三次样条的第二类边界条件为

$$s''(x_0)=f''(x_0),s''(x_n)=f''(x_n)$$

尤其是如果

$$f''(x_0)=f''(x_n)=0$$

称为自然边界条件，可见自然边界条件是第二类边界条件的特殊情况。不过在程序设计时，我们依然给的是一般意义下的第二类边界条件，如果是自然边界条件情况值需要将 $f''(x_0)$ 与 $f''(x_n)$ 分别设置为 0，这样程序更有一般性。

求解第二类边界条件插值问题的算法与固支条件下较为类似，其中第一步是相同的，其步骤如下：

01 计算参数

$$\begin{cases} h_i=x_{i+1}-x_i, \\ f[x_i,x_{i+1}]=\dfrac{y_{i+1}-y_i}{h_i},i=0,1,,n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases}\mu_i=\dfrac{h_{i-1}}{h_{i-1}+h_i},\lambda_i=1-\mu_i\\ f\left[x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right]=\dfrac{f\left[x_{i-1},x_i\right]-f\left[x_i,x_{i+1}\right]}{x_{i-1}-x_{i+1}},i=1,2,...,n-1\\ d_i=6f\left[x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right]\end{cases}$$

02 设置第二类边界条件相关参数

$$\begin{cases}M_0=f''(x_0)\\ M_n=f''(x_n)\end{cases}$$

03 采用第 1 章中介绍的追赶法求解三对角线性方程组

$$\begin{pmatrix}2&\lambda_1&&&\\ \mu_2&2&\lambda_2&&\\ &\ddots&\ddots&\ddots&\\ &&\mu_{n-2}&2&\lambda_{n-2}\\ &&&\mu_{n-1}&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}M_1\\ M_2\\ \vdots\\ M_{n-2}\\ M_{n-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}d_1-\mu_1M_0\\ d_2\\ \vdots\\ d_{n-2}\\ d_{n-1}-\lambda_{n-1}M_n\end{pmatrix}$$

04 把求解**03**中的方程得到$\{M_i\}_{i=0}^n$，带入三次样条多项式。即得到函数逼近式，如果对于要计算的点，先搜索其在整个区间中的位置，然后用逼近式给出该点的插值结果。

可以看到第二类边界条件解算的方程组的维数与固支条件下是不同的，其中M_0与M_n事先就给定了。

2. 实验目的与要求

- 知道三次样条插值的第二类边界条件。
- 能看懂算法的大致流程。
- 会使用作者编写的函数进行相关数据处理。

3. 实验内容与数据来源

已知以下离散数据

i	x_i	$f(x_i)$
0	1	3.0
1	2	3.7
2	3	3.9
3	6	4.2
4	7	5.7
5	8	6.6
6	10	7.1
7	13	6.7
8	17	4.5

要求在自然边界条件采用三次样条插值方法计算向量

$$\mathbf{x}=(3.5 \quad 1.5 \quad 5.5 \quad 6.5 \quad 7.5 \quad 9.0 \quad 11.5 \quad 15.0)^T$$

处的值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:NT)	要计算的函数值
N	INTEGER	插值节点个数减 1
X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
NT	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:NT)	要计算的节点向量
D2FA	REAL*8	起点二阶导数
D2FB	REAL*8	终点二阶处导数

5. 程序代码

```
module  spline
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Description :   三次样条插值之第二类边界条件模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     solve 函数即方法函数
!     2.
!     3.     chase 为用追赶法计算线性方程，因为插值中的
!            方程为三对角方程，用追赶法计算效率较高。
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
```

```
!     2.     可以直接对向量插值
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,d2fa,d2fb,nt,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   三次样条之第二类边界条件
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   n-----插值节点个数减，如有九个节点则 N=8
!       2.   x ---节点自变量 为（: N）维向量
!       3.   y----节点因变量 （: N）维向量
!       4.   nt 要计算向量的维数
!       5.   t 要计算的向量 (1:nt) 维向量
!       6.
!       7.    d2fa,d2fb  起点于终点处的二阶导数条件，
!              如果是自然边界条件，则二者为皆为
!  Output parameters  :
!       1.   ty ---要计算的向量，（: nt）维
!
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!
!       1.   自然边界条件是第一类边界条件的特殊情况
!            本程序可以直接处理第一类边界条件
!       2.
!            对于要插值的向量分量，可以不必按大小排列
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,nt
!n 为插值节点数减，即如果有个节点，则 n=8
!nt 要插值点的个数，及向量 t,ty 的维数
integer::i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(nt),ty(nt)
real*8::h(0:n-1)
real*8::f1(0:n-1),f2(1:n-1)
real*8::u(1:n-1),namda(1:n-1),d(1:n-1)
real*8::M(0:n),v(1:n-1)
real*8::A(1:n-1,1:n-1)
M(0)=d2fa
M(n)=d2fb
do i=0,n-1
  h(i)=x(i+1)-x(i)
  f1(i)=(y(i+1)-y(i))/h(i)
end do
!求得 u, namda, d
do i=1,n-1
 u(i)=h(i-1)/(h(i-1)+h(i))
```

```
 namda(i)=1-u(i)
f2(i)=(f1(i-1)-f1(i))/(x(i-1)-x(i+1))
  d(i)=6d0*f2(i)
end do
!设置 A 矩阵值
A=0
do i=1,n-1
a(i,i)=2d0
end do
do i=2,n-1
a(i,i-1)=u(i)
end do
do i=1,n-2
a(i,i+1)=namda(i)
end do
! 设置右向量值
d(1)=d(1)-u(1)*M(0)
d(n-1)=d(n-1)-namda(n-1)*M(n)
call chase(a,d,v,N-1)
do i=1,n-1
   M(i)=v(i)
end do
!--------以上以及求得系数
!已经完成插值多项式的建立
!-------------------------------------------------
! 以下开始计算具体值
do k=1,nt
!------------
!  对要插值向量每个分量而言，先找到其在数据中的位置
do i=1,n-1
 if (t(k)<x(i+1)) exit
end do
  ty(k)=M(i)*(x(i+1)-t(k))**3/6d0/h(i)+ M(i+1)*(t(k)-x(i))**3/6d0/h(i)+ &
     (y(i)-M(i)*h(i)**2/6d0)*(x(i+1)-t(k))/h(i)+ &
     (y(i+1)-M(i+1)*h(i)**2/6d0)*(t(k)-x(i))/h(i)
end do
!--------------------------------
!为了方便读者比对结果，这里输出中间值，实际应用时可以去掉输出部分
!-------------------------
write(11,101)
write(11,102)((i,h(i),m(i)),i=0,n-1)   !输出 h
write(11,103)
write(11,104)((i,u(i),namda(i),d(i)),i=1,n-1)
101 format(/,T5,'         h           m')
102 format(I3,2F16.8)
103 format(/,T5,'        u           namda          d')
104 format(I3,3F16.8)
!-----------------------------------------------------------------
end subroutine solve
 subroutine chase(A,f,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程组
!               Ax=f
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A 系数矩阵
!       2. f 右向量
!  Output parameters  :
!       1.  x 方程的解
!       2.  N 维数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   注意：该方法仅适用于三对角方程组
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 integer::N
 real*8::A(N,N),f(N),x(N)
 real*8::L(2:N),u(N),d(1:N-1)
real*8::c(1:N-1),b(N),e(2:N)
integer::i
real*8::y(N)
!---------------把 A 矩阵复制给向量 e,b,c
do i=1,N
    b(i)=a(i,i)
end do
do i=1,N-1
   c(i)=a(i,i+1)
end do
do i=2,N
  e(i)=a(i,i-1)
end do
!-------------------------
do i=1,N-1
 d(i)=c(i)
end do
u(1)=b(1)
do i=2,N
  L(i)=e(i)/u(i-1)
  u(i)=b(i)-L(i)*c(i-1)
end do
!------开始回带,求得 y
y(1)=f(1)
do i=2,N
  y(i)=f(i)-L(i)*y(i-1)
end do
!-----开始回带，求得 x
x(n)=y(n)/u(n)
do i=n-1,1,-1
x(i)=(y(i)-c(i)*x(i+1))/u(i)
end do
end subroutine chase
end module spline
program main
```

```
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  三次样条插值之自然边界条件
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit  real*8(a-z)
integer::i
real*8::x(0:8),y(0:8)
real*8::t(8),ty(8)
open(unit=11,file='result.txt')
!插值节点，九个节点
x=(/1d0,2d0,5d0,6d0,7d0,8d0,10d0,13d0,17d0/)
!插值因变量
y=(/3d0,3.7d0,3.9d0,4.2d0,5.7d0,6.6d0,7.1d0,6.7d0,4.5d0/)
!要计算的点，可以不必按照大小排列
t=(/3.5d0,1.5d0,5.5d0,6.5d0,7.5d0,9.0d0,11.5d0,15d0/)
write(11,101)
!
!调用函数
call solve(8,x,y,0d0,0d0,8,t,ty)
! 作者提供的函数具有一般性，可以直接处理第一类边界条件，
!而如果是自然条件，则边界处的二阶导数为
write(11,102)
write(11,103)((i,t(i),ty(i)),i=1,8)
101 format(/,T5,'三次样条插值之自然边界条件')
102 format(/,T5,'       t             ty')
103 format(I3,2F16.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在 result.txt 文件中。打开该文件可以看到，插值结果。为了便于读者编程比对自己的程序，这里给出了计算中间数据。其中 h_i 、 m_i 见表 7-1。u_i 、 λ_i 、 d_i 见表 7-2。插值结果见表 7-3。

表 7-1　h_i、m_i 序列

i	h_i	m_i
0	1.00000000	0.00000000
1	3.00000000	-0.51422654
2	1.00000000	0.10460410
3	1.00000000	2.10584684
4	1.00000000	-1.32799146
5	2.00000000	-0.39388098
6	3.00000000	-0.10436132
7	4.00000000	-0.15620829

表 7-2　u_i、λ_i、d_i 序列

i	u_i	λ_i	d_i
1	0.25000000	0.75000000	-0.95000000
2	0.75000000	0.25000000	0.35000000
3	0.50000000	0.50000000	3.60000000
4	0.50000000	0.50000000	-1.80000000
5	0.33333333	0.66666667	-1.30000000
6	0.40000000	0.60000000	-0.46000000
7	0.42857143	0.57142857	-0.35714286

表 7-3　插值结果

i	x	$s(x)$
1	3.50000000	4.03041262
2	1.50000000	3.36712867
3	5.50000000	3.91184682
4	6.50000000	4.90138404
5	7.50000000	6.25761703
6	9.00000000	6.97456058
7	11.50000000	7.04657040
8	15.00000000	5.75620829

7.6　三次样条之周期边界条件

1. 实验基本原理

三次样条的周期边界条件为

$$\begin{cases} s'(x_0+0)=s'(x_n-0) \\ s''(x_0+0)=f''(x_n-0) \end{cases}$$

其中函数值的周期条件 $s(x_0+0)=s(x_n-0)$，由于已知 $f(x_0)=f(x_n)$ 确定。周期边界条

件亦称为第三类边界条件。三种类型的边界条件都有它们的实际背景及相应的物理意义，针对不同的情况。

求解周期边界条件插值问题的算法与前两节介绍的算法也较为类似，其中第一步是相同的，其步骤如下：

01 计算参数

$$\begin{cases} h_i = x_{i+1} - x_i, \\ f[x_i, x_{i+1}] = \dfrac{y_{i+1} - y_i}{h_i}, i = 0,1,,n-1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \mu_i = \dfrac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}, \lambda_i = 1 - \mu_i \\ f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}] = \dfrac{f[x_{i-1}, x_i] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i-1} - x_{i+1}}, i = 1,2,...,n-1 \\ d_i = 6f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}] \end{cases}$$

02 设置周期边界条件相关参数

$$\begin{cases} \mu_n = \dfrac{h_{n-1}}{h_0 + h_{n-1}} \\ \lambda_n = 1 - \mu_n \\ \tilde{d}_n = \dfrac{6}{h_0 + h_{n-1}}\left(f[x_0, x_1] - f[x_{n-1}, x_n]\right) \end{cases}$$

03 计算线性方程组（注意该方程不是三对角方程）。

$$\begin{pmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \mu_1 \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ \lambda_n & & & \mu_{n-1} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ \tilde{d}_n \end{pmatrix}$$

04 把求解**03**中的方程得到$\{M_i\}_{i=0}^n$，带入三次样条多项式。即得到函数逼近式，如果对于要计算的点，先搜索其在整个区间中的位置，然后用逼近式给出该点的插值结果。

可以看到各类边界条件下直接求解方程的维数是不同的，但是多项式的形式是相同的，最后都将给出$\{M_i\}_{i=0}^n$，从而为计算插值结果提供前提条件。

2. 实验目的与要求

- 了解三次样条插值的周期边界条件。
- 能看懂周期边界条件下插值方法。
- 会使用作者编写的函数实现对相关问题的数据处理。

3. 实验内容与数据来源

已知离散数据点列如下

i	x_i	$f(x_i)$
0	0	0.6000
1	0.3000	0.8687
2	0.6000	1.0598
3	0.9000	1.1563
4	1.2000	1.1495
5	1.5000	1.0399
6	1.8000	0.8375
7	2.1000	0.5603
8	2.4000	0.2330
9	2.7000	-0.1151
10	3.0000	-0.4529
11	3.3000	-0.7502
12	3.6000	-0.9806
13	3.9000	-1.1233
14	4.2000	-1.1657
15	4.5000	-1.1040
16	4.8000	-0.9437
17	5.1000	-0.6990
18	5.4000	-0.3919
19	5.7000	-0.0499
20	6.0000	0.2967
21	6.2832	0.6000

已知数据为周期函数，要求对以上数据采用三次样条插值，计算

$$\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0.4 & 2.8 & 5.9 & 6.1 & 4.7\end{pmatrix}^T$$

处的函数值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:NT)	要计算的函数值

（续表）

输入参变量	数据类型	变量说明
N	INTEGER	插值节点个数减 1
X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
NT	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:NT)	要计算的节点向量

5. 程序代码

```
module  spline
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Description :   三次样条插值之周期条件模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     solve 函数即方法函数
!     2.
!     3.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.     可以直接对向量插值
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,nt,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   三次样条之周期条件
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   n-----插值节点个数减，如有九个节点则 N=8
!      2.   x ---节点自变量 为（: N）维向量
!      3.   y----节点因变量 （: N）维向量
!      4.   nt 要计算向量的维数
!      5.   t 要计算的向量 (1:nt) 维向量
!  Output parameters  :
!      1.   ty ---要计算的向量，（: nt）维
```

```
!
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!
!           对于要插值的向量分量，可以不必按大小排列
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,nt
!n 为插值节点数减，即如果有个节点，则 n=8
!nt 要插值点的个数，及向量 t,ty 的维数
integer::i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(nt),ty(nt)
real*8::h(0:n-1)
real*8::f1(0:n-1),f2(1:n-1)
real*8::u(1:n),namda(1:n),d(1:n)
real*8::M(1:n)
real*8::A(1:n,1:n)
do i=0,n-1
  h(i)=x(i+1)-x(i)
  f1(i)=(y(i+1)-y(i))/h(i)
end do
!求得 u, namda, d
do i=1,n-1
 u(i)=h(i-1)/(h(i-1)+h(i))
 namda(i)=1-u(i)
f2(i)=(f1(i-1)-f1(i))/(x(i-1)-x(i+1))
  d(i)=6d0*f2(i)
end do
!对于周期条件而言，系数设置
u(n)=h(n-1)/(h(0)+h(n-1))
namda(n)=1-u(n)
!右向量
d(n)=6d0/(h(0)+h(n-1))*(f1(0)-f1(n-1))
!设置 A 矩阵值
A=0
do i=1,n
a(i,i)=2d0
end do
do i=2,n
a(i,i-1)=u(i)
end do
do i=1,n-1
a(i,i+1)=namda(i)
end do
!设置 A 矩阵的首行元素
a(1,n)=u(1)
!设置 A 矩阵元素的末行元素
a(n,1)=namda(n)
!注意三种条件下，用 Gauss 法解线性方程时 N 大小设置
call gauss(a,d,M,N)
!--------以上以及求得系数
!已经完成插值多项式的建立
```

```
!-----------------------------------------------
! 以下开始计算具体值
do k=1,nt
!------------
!  对要插值向量每个分量而言，先找到其在数据中的位置
do i=1,n-1
 if (t(k)<x(i+1)) exit
end do
  ty(k)=M(i)*(x(i+1)-t(k))**3/6d0/h(i)+ M(i+1)*(t(k)-x(i))**3/6d0/h(i)+ &
     (y(i)-M(i)*h(i)**2/6d0)*(x(i+1)-t(k))/h(i)+ &
     (y(i+1)-M(i+1)*h(i)**2/6d0)*(t(k)-x(i))/h(i)
end do
!-------------------------------
!为了方便读者比对结果，这里输出中间值，需要这些数值时可以去掉注释
!!------------------------
!write(11,101)
!write(11,102)((i,h(i),m(i)),i=0,n-1)   !输出 h
!
!
!write(11,103)
!write(11,104)((i,u(i),namda(i),d(i)),i=1,n-1)
!
!101 format(/,T5,'         h           m')
!102 format(I3,2F16.8)
!
!103 format(/,T5,'        u           namda          d')
!104 format(I3,3F16.8)
!!-----------------------------------------------------------------
end subroutine solve
subroutine gauss(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  高斯列主元消去法
!               Ax=b
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   A(N,N)系数矩阵
!      2.   b(N)右向量
!      3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!      1.  x  方程的根
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,k,N
integer::id_max  !主元素标号
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
real*8::Aup(N,N),bup(N)
!Ab 为增广矩阵 [Ab]
real*8::Ab(N,N+1)
```

```
real*8::vtemp1(N+1),vtemp2(N+1)
Ab(1:N,1:N)=A
Ab(:,N+1)=b
!############################################################
!  这段是列主元消去法的核心部分
do k=1,N-1
    elmax=dabs(Ab(k,k))
    id_max=k
    !这段为查找主元素
    !这段程序的主要目的不是为了赋值最大元素给 elmax，而是为了找出最大元素对应的标号
     do i=k+1,n
      if (dabs(Ab(i,k))>elmax) then
         elmax=Ab(i,k)
         id_max=i
       end if
    end do
!至此，已经完成查找最大元素，查找完成以后与 第 k 行交换
 !交换两行元素，其他不变
    vtemp1=Ab(k,:)
    vtemp2=Ab(id_max,:)
    Ab(k,:)=vtemp2
    Ab(id_max,:)=vtemp1
!
!以上一大段是为交换两行元素，交换完成以后即按照消元法进行
!############################################################
   do i=k+1,N
     temp=Ab(i,k)/Ab(k,k)
     Ab(i,:)=Ab(i,:)-temp*Ab(k,:)
   end do
end do
!------------------------------
! 经过上一步，Ab 已经化为如下形式的矩阵
!           | *  *  *  *  # |
!     [A b]= | 0  *  *  *  # |
!           | 0  0  *  *  # |
!           | 0  0  0  *  # |
!
Aup(:,:)=Ab(1:N,1:N)
bup(:)=Ab(:,N+1)
!调用用上三角方程组的回带方法
call uptri(Aup,bup,x,n)
end subroutine gauss
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N 方程维数
```

```
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module spline
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  周期边界条件下的三次样条插值
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.
!       2.
!  Output data files  :
!       1.
!       2.   reslut.txt 文件保存了计算结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit real*8(a-z)
integer::i,j
real*8::x(0:21),y(0:21),t(5),ty(5),simty(5)
open(unit=11,file='result.txt')
x=(/   0d0,&
    0.3000d0,&
    0.6000d0,&
    0.9000d0,&
    1.2000d0,&
    1.5000d0,&
    1.8000d0,&
    2.1000d0,&
    2.4000d0,&
    2.7000d0,&
```

```
      3.0000d0,&
      3.3000d0,&
      3.6000d0,&
      3.9000d0,&
      4.2000d0,&
      4.5000d0,&
      4.8000d0,&
      5.1000d0,&
      5.4000d0,&
      5.7000d0,&
      6.0000d0,&
      6.2832d0 /)
  y=(/0.6000d0,&
      0.8687d0,&
      1.0598d0,&
      1.1563d0,&
      1.1495d0,&
      1.0399d0,&
      0.8375d0,&
      0.5603d0,&
      0.2330d0,&
     -0.1151d0,&
     -0.4529d0,&
     -0.7502d0,&
     -0.9806d0,&
     -1.1233d0,&
     -1.1657d0,&
     -1.1040d0,&
     -0.9437d0,&
     -0.6990d0,&
     -0.3919d0,&
     -0.0499d0,&
      0.2967d0,&
      0.6000d0  /)
  !要进行计算的点 ------不需要按照大小排列
  t=(/0.4d0,2.8d0,5.9d0,6.1d0,4.7d0/)
  !调用方法函数
  call solve(21,x,y,5,t,ty)
  !仿真函数值
  simty=dsin(t)+dcos(t)*0.6d0
  write(11,101)
  write(11,102)
  write(11,103)((i,t(i),ty(i),simty(i)),i=1,5)
  101  format(/,T9,'三次样条插值之周期条件',/)
  102  format('  序列    插值点       插值结果       真值')
  103  format(I3,3F16.8)
  end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件可以看到内容如图 7-5 所示。

三次样条插值之周期条件

序列	插值点	插值结果	真值
1	0.40000000	0.94200589	0.94205494
2	2.80000000	-0.23037804	-0.23034525
3	5.90000000	0.18260098	0.18261039
4	6.10000000	0.40780541	0.40779856
5	4.70000000	-1.00736694	-1.00735646

图 7-5　三次样条之周期条件

实际上，原题的数据来源于函数 $f(x)=\sin x+0.6\cos x$，该函数在 $0\sim 2\pi$ 为周期函数。在产生数据时，并不要求等间隔，比如最后两个节点之间即非等间隔。通过插值函数与函数真值比较可以看到计算还是有相当不错的精度。

7.7　反插值

1. 实验基本原理

设函数 f 的离散数据为

$$(x_i,y_i),y_i=f(x_i),i=0,1,...,n$$

插值的目的是在给定 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 之间给定自变量的值之后，去求函数 f 的近似值，不同的构造方法，得到不同插值方法。与之相反，反插值的目的在 $y_0,y_1,\cdots,y_n$ 之间给定函数值之后，求自变量 x 的近似值，其基本途径的实质仍然是插值方法。

这里以牛顿插值法为例说明反插值方法。设函数在点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 上的值为 $y_0,y_1,\cdots,y_n$。若 f 的反函数 f^{-1} 存在，则 f^{-1} 在点 $y_0,y_1,\cdots,y_n$ 上的自变量值为 $x_0,x_1,\cdots,x_n$。如此，反函数 f^{-1} 以 $y_0,y_1,\cdots,y_n$ 为节点的牛顿插值多项式为

$$\begin{aligned}p(y)=&f^{-1}(y_0)+f^{-1}[y_0,y_1](y-y_0)+\\&f^{-1}[y_0,y_1,y_2](y-y_0)(y-y_1)+\cdots+\\&f^{-1}[y_0,y_1,\cdots,y_n](y-y_0)(y-y_1)\cdots(y-y_{n-1})\end{aligned}$$

2. 实验目的与要求

- 了解反插值问题的应用背景。
- 能够构造出反插值多项式。

- 能编程处理反插值问题。

3. 实验内容与数据来源

设 $f(x)=x^3-3x^2-x+9$，已知 f 的下列函数值

x	$f(x)$
1.7200	0.988889766004701
1.7400	0.985719178835553
1.7600	0.982154317137618
1.7800	0.978196606808045
1.8000	0.973847630878195
1.8200	0.969109128880456

现求

方程 $f(x)=0$ 在区间 $[-1.7,-1.3]$ 的根。

求使 $f(x)=-1.6$ 的 x 值。

5. 程序代码

```
module  newton
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   反插值问题
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.   提供两个函数，一个是单点插值，一个是 solve 函数
!          注意两者的 N 是不一样的。
!          在单点插值中 N 是节点的个数减
!          为方便使用，在 solve 中 N 就直接指节点个数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(n,x,y,m,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  方法主函数
!               可直接对多点插值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  n  节点个数
!      2.  x 节点自变量值 N 维向量
!      3.  y 节点因变量值  N 维向量
```

```
!      4.  m  要计算点的个数
!      5.  t  要计算的点  M向量
!  Output parameters  :
!      1.  ty  计算结果，为M维向量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   注意这里的N  就直接指节点的个数
!      2.   而子函数 new中N 是指节点个数减1
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m
integer::i,j,k
real*8::x(n),y(n),t(m),ty(m)
do i=1,m
call new(n-1,x,y,t(i),ty(i))
end do
end subroutine solve
subroutine new(n,x,y,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------
!  Purpose   :  单点插值程序
!               此函数目的为solve所调用
!-------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.   t 标量
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.    ty 标量
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    N 是节点个数减1，比如共个节点 则N=3
!      2.
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n
integer::i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::b(n+1)
real*8::Q(0:n,0:n)
do i=0,n
Q(i,0)=y(i)
end do
do i=1,n
  do j=1,i
   Q(i,j)=(Q(i,j-1)-Q(i-1,j-1))/(x(i)-x(i-j))
  end do
end do
b(n+1)=Q(n,n)
do k=n,1,-1
```

```
  b(k)=Q(k-1,k-1)+b(k+1)*(t-x(k-1))
end do
ty=b(1)
end subroutine new
end module newton
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  反插值问题主函数
!               solve 函数可以直接对向量插值
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
call drive
end program main
subroutine  drive
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  反插值问题驱动函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use newton
implicit real*8(a-z)
integer::N=5,M=2
real*8::x(5),y(5),t(2),ty(2)
open(unit=11,file='result1.txt')
!插值节点极其函数值
x=(/-1.3d0,-1.4d0,-1.5d0,-1.6d0,-1.7d0/)
y=(/3.033d0,1.776d0,0.375d0,-1.176d0,-2.883d0/)
!要计算的点
```

```
t=(/0d0,-1.6d0/)
call solve(n,y,x,m,t,ty)
write(11,101)
write(11,102)ty
101 format(/,T5,'反插值结果为:')
102 format(/,2F10.4)
end subroutine drive
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 文件中，如图 7-6 所示。

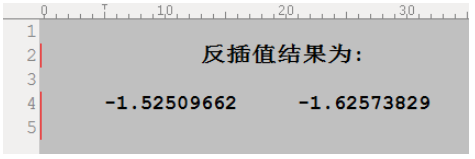


图 7-6 反插值结果

当把-1.52509662 带入原方程函数时候得到 8.524562075606923e-005，-1.62573829 把带入方程函数得到-1.600203596439146。从计算结果可以看到反插值精度是很不错的。

7.8 第一类标准B样条

1. 实验基本原理

近几十年，函数逼近在理论研究与实际应用中均取得重大进展，其中十分活跃的分支即样条函数。

前面几节导出三次样条插值函数在每个子区间有一表达式，这在应用和理论分析中都很不方便。接下来几小节专门讨论样条函数系统，使得其他所有样条函数都可以由它的线性组合得到。这些样条构成某些样条空间的基，称为 B 样条。一旦给定节点，B 样条很容易通过递推关系产生，而且算法也较为简单。B 样条以其优美的理论和数值计算中的典型性著称。在许多实践中都有了较为广泛的应用，如弹道逼近等领域。有兴趣的读者可以参看王正明等著《弹道跟踪数据的校准与评估》及刘利生等著《卫星导航测量差分自校准融合技术》。

记

$$u_+^m=\begin{cases}u^m,(u\geq 0)\\0,(u<0)\end{cases},(m=1,2,...)$$

称为 m 次半截单项式，并规定

$$u_+^0=\begin{cases}1,(u>0)\\ \dfrac{1}{2},(u=0)\\ 0,(u<0)\end{cases}$$

设 Ω_k 是 $(-\infty,+\infty)$ 上的函数，

$$\Omega_k=\frac{\sum_{j=0}^{k+1}(-1)^j\binom{k+1}{j}\left(x+\frac{k+1}{2}-j\right)_+^k}{k!}$$

称之为 k 次基样条或 B 样条。

如

$$\Omega_3=\begin{cases}0,(|x|\geq 2)\\ \dfrac{1}{2}|x|^3-x^2+\dfrac{2}{3},(|x|\leq 1)\\ -\dfrac{1}{6}|x|^3+x^2-2|x|+\dfrac{4}{3},(1<|x|<2)\end{cases}$$

设划分是均匀的，即

$$\begin{cases}x_i=a+ih\\ h=\dfrac{b-a}{n}\end{cases},i=0,1,...,n$$

三次 B 样条中共有 $n+3$ 个 B 样条，考虑以它们的线性组合作为插值函数

$$S(x)=\sum_{j=-1}^{n+1}c_j\Omega_3\left(\frac{x-x_0}{h}-j\right)$$

B 样条插值与前面介绍的三次样条插值有相似的边界条件处理情况，这一节先介绍第一类边界条件问题。

第一类边界条件即

$$\begin{cases}S'(x_0)=y_0'\\ S'(x_n)=y_n'\end{cases}$$

根据插值条件及边界条件有

$$\begin{cases}S'(x_0)=\dfrac{1}{h}\sum_{j=-1}^{n+1}c_j\Omega_3'(-j)=y_0'\\ S(x_i)=\sum_{j=-1}^{n+1}c_j\Omega_3'(i-j)=y_i \qquad ,i=0,1,...,n\\ S'(x_0)=\dfrac{1}{h}\sum_{j=-1}^{n+1}c_j\Omega_3'(n-j)=y_n'\end{cases}$$

从而归结为线性方程组

$$\mathbf{Ac}=\mathbf{f}$$

其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}4 & 2 & & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 & \\ & & & & 2 & 4 & \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f}=\begin{pmatrix}6y_0+2hy_0' \\ 6y_1 \\ 6y_2 \\ \vdots \\ 6y_{n-1} \\ 6y_n-2hy_n' \end{pmatrix},\mathbf{c}=\begin{pmatrix}c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix}$$

还有关系式

$$\begin{cases}c_{-1}=c_1-2hy_0' \\ c_{n+1}=c_{n-1}+2hy_n' \end{cases}$$

以上方程为三对角方程，可以采用第一章介绍的追赶方法计算。此时，已经完整的给出样条基在 Hilbert 空间下的投影坐标，有此可以方便的计算出插值结果。在程序设计时，我们直接可以输入要插值的向量，计算输出插值结果向量。

2. 实验目的与要求

- 大致了解 B 样条背景。
- 大致了解第一类边界条件下 B 样条插值方法。
- 会使用作者编写的程序进行相关数据处理。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:M)	要计算的函数值
输入参变量	数据类型	变量说明
N	INTEGER	插值节点个数减 1

X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
M	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:M)	要计算的节点向量
DA	REAL*8	起点处导数
DB	REAL*8	终点处导数

3. 实验内容与数据来源

已知离散点列如下

i	x_i	$f(x_i)$
1	1.0000	0.841470984807897
2	1.2000	0.932039085967226
3	1.4000	0.985449729988460
4	1.6000	0.999573603041505
5	1.8000	0.973847630878195
6	2.0000	0.909297426825682
7	2.2000	0.808496403819590
8	2.4000	0.675463180551151
9	2.6000	0.515501371821464
10	2.8000	0.334988150155905
11	3.0000	0.141120008059867

且

$f'(1)=0.540302305868140$

$f'(3)=-0.989992496600445$

今给定 $\mathbf{x}=(2.1 \quad 1.7 \quad 1.9 \quad 2.5)^T$，要求用标准 B 样条插值求 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$。

5. 程序代码

```
module spline
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-----------------------------------------------------
!  Description :   第一类标准 B 样条模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   3 阶样条基
!     3.   追赶法解三对角方程
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,da,db,m,t,ty)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  第一类标准 B 样条方法函数
!               可以直接对多点插值
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.n 节点个数减,比如九个节点 N=8
!      2. x 节点向量  (: n) 维
!      3. y 节点处函数值(0:n)维
!      4. da  起点处导数值
!      5. db  终点处导数值
!      6.  m  要计算点的个数
!      7.  t  要计算的点  (: m) 维向量
!  Output parameters  :
!      1.  ty  计算结果  (: m) 维向量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m,i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(m),ty(m)
real*8::A(0:n,0:n),c0(0:n),f(0:n),c(-1:n+1)
!设置 A 矩阵-------------------
!设初值
A=0
do i=0,n
   A(i,i)=4d0
end do
!主对角以下元素
do i=1,n-1
   A(i,i-1)=1d0
end do
A(n,n-1)=2d0
!主对角以上元素
do i=1,n-1
A(i,i+1)=1d0
end do
A(0,1)=2d0
!-------------------------
```

```
!设置 f 向量
h=x(1)-x(0)  ! 步长间隔
do i=1,n-1
f(i)=6d0*y(i)
end do
f(0)=6d0*y(0)+2d0*h*da
f(n)=6d0*y(n)-2d0*h*db
!注意调用追赶法时，方程维数的值
call chase(A,f,c0,N+1)
do i=0,n
  c(i)=c0(i)
end do
c(-1)=c0(1)-2d0*h*da
c(n+1)=c0(n-1)+2d0*h*db
!至此已经给出完整的系数 c
!以下开始计算值
do k=1,m
ty(k)=0
do j=-1,n+1
   ty(k)=ty(k)+c(j)*omiga3((t(k)-x(0))/h-j)
end do
end do
end subroutine solve
function omiga3(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  三阶 B 样条基
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if (dabs(x)>=2d0) then
 omiga3=0
else if (dabs(x)<=1d0) then
 omiga3=0.5d0*(dabs(x))**3-x**2+2d0/3d0
else if (dabs(x)>1d0.and.dabs(x)<2d0) then
 omiga3=-1d0/6d0*(dabs(x))**3+x**2-2d0*dabs(x)+4d0/3d0
end if
end function omiga3
 subroutine chase(A,f,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程组
!            Ax=f
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
```

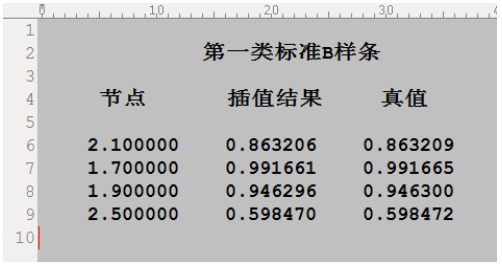
```
!      1.  A 系数矩阵
!      2. f 右向量
!  Output parameters  :
!      1.  x 方程的解
!      2.  N 维数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   注意：该方法仅适用于三对角方程组
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 integer::N
 real*8::A(N,N),f(N),x(N)
 real*8::L(2:N),u(N),d(1:N-1)
real*8::c(1:N-1),b(N),e(2:N)
 integer::i
 real*8::y(N)
!---------------把 A 矩阵复制给向量 e,b,c
do i=1,N
    b(i)=a(i,i)
end do
do i=1,N-1
   c(i)=a(i,i+1)
end do
do i=2,N
  e(i)=a(i,i-1)
end do
!------------------------
do i=1,N-1
 d(i)=c(i)
end do
u(1)=b(1)
do i=2,N
  L(i)=e(i)/u(i-1)
  u(i)=b(i)-L(i)*c(i-1)
end do
!------开始回带,求得 y
y(1)=f(1)
do i=2,N
  y(i)=f(i)-L(i)*y(i-1)
end do
!-----开始回带，求得 x
x(n)=y(n)/u(n)
do i=n-1,1,-1
x(i)=(y(i)-c(i)*x(i+1))/u(i)
end do
end subroutine chase
end module spline
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
```

```
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  第一类标准 B 样条主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.    result.txt 保存计算结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit real*8(a-z)
real*8::x(0:10),y(0:10),t(4),ty(4),rty(4)
 open(unit=11,file='result.txt')
!节点
x=(/    1.0000d0,&
    1.2000d0,&
    1.4000d0,&
    1.6000d0,&
    1.8000d0,&
    2.0000d0,&
    2.2000d0,&
    2.4000d0,&
    2.6000d0,&
    2.8000d0,&
    3.0000d0/)
! 节点因变量
y=(/   0.841470984807897d0,&
   0.932039085967226d0,&
   0.985449729988460d0,&
   0.999573603041505d0,&
   0.973847630878195d0,&
   0.909297426825682d0,&
   0.808496403819590d0,&
   0.675463180551151d0,&
   0.515501371821464d0,&
   0.334988150155905d0,&
   0.141120008059867d0/)
!边界导数值  这里实为 dcos(1d0)、dcos(3d0)
   da=0.540302305868140d0
   db=-0.989992496600445d0
! 要计算的点,不必按照大小排列
   t=(/2.1d0,1.7d0,1.9d0,2.5d0/)
! 调用方法函数
   call solve(10,x,y,da,db,4,t,ty)
  !真值
  rty=dsin(t)
  write(11,101)
write(11,102)((t(i),ty(i),rty(i)),i=1,4)
101 format(/,T15,'第一类标准 B 样条',//,&
```

```
              '     节点       插值结果     真值',/)
    102 format(3F12.6)
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件如图 7-7 所示。



第一类标准B样条

节点	插值结果	真值
2.100000	0.863206	0.863209
1.700000	0.991661	0.991665
1.900000	0.946296	0.946300
2.500000	0.598470	0.598472

图 7-7　第一类标准 B 样条插值结果

实际上实验中的数据来源于仿真函数 $f(x)=\sin x$，可以看到采用第一类标准 B 样条插值结果还是很不错的。

7.9　第二类标准B样条

1. 实验基本原理

第二类边界条件即

$$\begin{cases} S''(x_0)=y_0'' \\ S''(x_n)=y_n'' \end{cases}$$

当

$$S''(x_0)=S''(x_n)=0$$

时称为自然边界条件，可以看出自然边界条件是第二类边界条件的特殊情况。

线性方程组

$$\mathbf{Ac}=\mathbf{f}$$

其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}4 & 2 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 2 & 4\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f}=\begin{pmatrix}6y_1-y_0+\dfrac{h^2}{6}y_0'' \\ 6y_2 \\ 6y_3 \\ \vdots \\ 6y_{n-2} \\ 6y_{n-1}-y_n+\dfrac{h^2}{6}y_n''\end{pmatrix},\mathbf{c}=\begin{pmatrix}c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1}\end{pmatrix}$$

还有关系式

$$\begin{cases}c_0=y_0-\dfrac{h^2}{6}y_0'' \\ c_{-1}=2c_0-c_1+h^2y_0'' \\ c_n=y_n-\dfrac{h^2}{6}y_n'' \\ c_{n+1}=2c_n-c_{n-1}+h^2y_n''\end{cases}$$

至此，也已经给出基函数在 Hilbert 空间下的投影分量。计算具体的插值结果只需要对基做展开即可。

2. 实验目的与要求

- 了解第二类边界条件下 B 样条插值算法的基本流程。
- 会使用作者编写的函数进行相关数据处理。

3. 实验内容与数据来源

已知离散点列如下

i	x_i	$f(x_i)$

1	1.0000	0.841470984807897
2	1.2000	0.932039085967226
3	1.4000	0.985449729988460
4	1.6000	0.999573603041505
5	1.8000	0.973847630878195
6	2.0000	0.909297426825682
7	2.2000	0.808496403819590
8	2.4000	0.675463180551151
9	2.6000	0.515501371821464
10	2.8000	0.334988150155905
11	3.0000	0.141120008059867

且

$f''(1)=0.540302305868140$

$f''(3)=-0.989992496600445$

今给定 $\mathbf{x}=(2.1 \quad 1.7 \quad 1.9 \quad 2.5)^T$，要求用标准 B 样条插值求 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:M)	要计算的函数值
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
N	INTEGER	插值节点个数减 1
X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
M	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:M)	要计算的节点向量
D2FA	REAL*8	起点二阶导数
D2FB	REAL*8	终点二阶处导数

5. 程序代码

```
module spline
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   第二类标准 B 样条模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
```

```
!     2.   3 阶样条基
!     3.   追赶法解三对角方程
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,d2a,d2b,m,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  第二类标准 B 样条方法函数
!               可以直接对多点插值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.n 节点个数减,比如九个节点 N=8
!      2. x 节点向量  (: n) 维
!      3. y 节点处函数值(0:n)维
!      4. d2a  起点处二阶导数值
!      5. d2b  终点处二阶导数值
!      6.  m  要计算点的个数
!      7.  t  要计算的点  (: m) 维向量
!  Output parameters  :
!      1.  ty  计算结果  (: m) 维向量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m,i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(m),ty(m)
real*8::A(1:n-1,1:n-1),c0(1:n-1),f(1:n-1),c(-1:n+1)
!设置 A 矩阵-------注意与第一类 B 样条的下标不同
!设初值
A=0
do i=1,n-1
   A(i,i)=4d0
end do
!主对角以下元素
do i=2,n-1
   A(i,i-1)=1d0
end do
!主对角以上元素
do i=1,n-2
A(i,i+1)=1d0
end do
!-------------------------
```

```
!设置 f 向量
h=x(1)-x(0)  ! 步长间隔
do i=2,n-2
f(i)=6d0*y(i)
end do
f(1)=6d0*y(1)-y(0)+h**2/6d0*d2a
f(n-1)=6d0*y(n-1)-y(n)+h**2/6d0*d2b
!注意调用追赶法时，方程维数的值,这与第一类 B 样条不同
!由参数意义决定
call chase(A,f,c0,N-1)
do i=1,n-1
  c(i)=c0(i)
end do
c(0)=y(0)-h**2/6d0*d2a
c(-1)=2d0*c(0)-c(1)+h**2*d2a
c(n)=y(n)-h**2/6d0*d2b
c(n+1)=2d0*c(n)-c(n-1)+h**2*d2b
!至此已经给出完整的系数 c
!以下开始计算值
do k=1,m
ty(k)=0
do j=-1,n+1
   ty(k)=ty(k)+c(j)*omiga3((t(k)-x(0))/h-j)
end do
end do
end subroutine solve
function omiga3(x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  三阶 B 样条基
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if (dabs(x)>=2d0) then
 omiga3=0
else if (dabs(x)<=1d0) then
 omiga3=0.5d0*(dabs(x))**3-x**2+2d0/3d0
else if (dabs(x)>1d0.and.dabs(x)<2d0) then
 omiga3=-1d0/6d0*(dabs(x))**3+x**2-2d0*dabs(x)+4d0/3d0
end if
end function omiga3
 subroutine chase(A,f,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程组
```

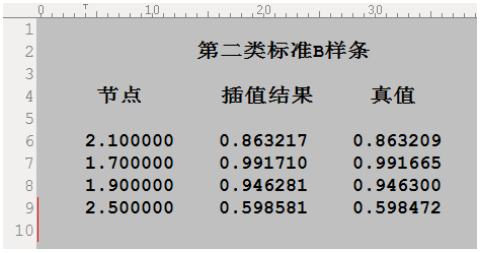
```
!            Ax=f
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  A 系数矩阵
!       2. f 右向量
!  Output parameters  :
!       1.  x 方程的解
!       2.  N 维数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   注意：该方法仅适用于三对角方程组
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 integer::N
 real*8::A(N,N),f(N),x(N)
 real*8::L(2:N),u(N),d(1:N-1)
 real*8::c(1:N-1),b(N),e(2:N)
 integer::i
real*8::y(N)
!---------------把 A 矩阵复制给向量 e,b,c
do i=1,N
    b(i)=a(i,i)
end do
do i=1,N-1
   c(i)=a(i,i+1)
end do
do i=2,N
  e(i)=a(i,i-1)
end do
!-------------------------
do i=1,N-1
 d(i)=c(i)
end do
u(1)=b(1)
do i=2,N
  L(i)=e(i)/u(i-1)
  u(i)=b(i)-L(i)*c(i-1)
end do
!------开始回带,求得 y
y(1)=f(1)
do i=2,N
  y(i)=f(i)-L(i)*y(i-1)
end do
!-----开始回带，求得 x
x(n)=y(n)/u(n)
do i=n-1,1,-1
x(i)=(y(i)-c(i)*x(i+1))/u(i)
end do
end subroutine chase
end module spline
program  main
!---------------------------------------program comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  第二类标准 B 样条主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.    result.txt 保存计算结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit real*8(a-z)
real*8::x(0:10),y(0:10),t(4),ty(4),rty(4)
 open(unit=11,file='result.txt')
!节点
x=(/    1.0000d0,&
    1.2000d0,&
    1.4000d0,&
    1.6000d0,&
    1.8000d0,&
    2.0000d0,&
    2.2000d0,&
    2.4000d0,&
    2.6000d0,&
    2.8000d0,&
    3.0000d0/)
! 节点因变量
y=(/   0.841470984807897d0,&
   0.932039085967226d0,&
   0.985449729988460d0,&
   0.999573603041505d0,&
   0.973847630878195d0,&
   0.909297426825682d0,&
   0.808496403819590d0,&
   0.675463180551151d0,&
   0.515501371821464d0,&
   0.334988150155905d0,&
   0.141120008059867d0/)
!第二类边界条件  二阶导数值
   d2a=0.540302305868140d0
   d2b=-0.989992496600445d0
! 要计算的点,不必按照大小排列
   t=(/2.1d0,1.7d0,1.9d0,2.5d0/)
! 调用方法函数
   call solve(10,x,y,d2a,d2b,4,t,ty)
  !真值
  rty=dsin(t)
```

```
  write(11,101)
write(11,102)((t(i),ty(i),rty(i)),i=1,4)
101 format(/,T15,'第二类标准 B 样条',//,&
           '     节点       插值结果     真值',/)
102 format(3F12.6)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，内容如图 7-8 所示。



第二类标准B样条

节点	插值结果	真值
2.100000	0.863217	0.863209
1.700000	0.991710	0.991665
1.900000	0.946281	0.946300
2.500000	0.598581	0.598472

图 7-8　第二类标准 B 样条

实际上本实验的数据插值节点与上一实验相同，对于边界条件这里但是二阶导数未按照仿真函数取值，可以看到在区间内插值依然精度很好，可见样条插值方法的优良性。

7.10　第三类标准B样条

1. 实验基本原理

第三类边界条件即周期边界条件

$$S(x_0)=S(x_n)=y_0$$

$$S^{(k)}(x_0+0)=S^{(k)}(x_0-0),(k=1,2)$$

由插值条件及第三类边界条件可以推出

$$\begin{cases} c_{n+1}=c_1 \\ c_0=c_n \\ c_{-1}=c_{n-1} \end{cases}$$

及线性方程

$$\mathbf{Ac}=\mathbf{f}$$

其中

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}4 & 2 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 2 & 4\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f}=\begin{pmatrix}6y_1\\6y_2\\6y_3\\\vdots\\6y_{n-1}\\6y_0\end{pmatrix},\mathbf{c}=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\\c_{n-1}\\c_n\end{pmatrix}$$

可以由线性方程先解出**c**，继而由

$$\begin{cases}c_{n+1}=c_1\\c_0=c_n\\c_{-1}=c_{n-1}\end{cases}$$

可以给出c_{-1},c_0,c_{n+1}。

在解线性方程组时，因是三对角阵，故可采用追赶法计算。至此，已经给出第三类边界条件下 B 样条插值基函数在 Hilbert 空间下的坐标，若要计算插值结果只需要对基函数展开。

2. 实验目的与要求

- 了解第三类边界条件下 B 样条插值的适用范围。
- 大致了周期条件下 B 样条插值的计算流程。
- 会使用作者提供的函数进行相关数据处理。

3. 实验内容与数据来源

已知周期条件下的离散点列如下：

i	x_i	$f(x_i)$
1	0	1
2	2	1.144122806

3	4	1.260073511
4	6	1.344997024
5	8	1.396802247
6	10	1.414213562
7	12	1.396802247
8	14	1.344997024
9	16	1.260073511
10	18	1.144122806
11	20	1
12	22	0.831253876
13	24	0.642039522

（续表）

i	x_i	$f(x_i)$
14	26	0.437016024
15	28	0.221231742
16	30	1.11E-16
17	32	-0.221231742
18	34	-0.437016024
19	36	-0.642039522
20	38	-0.831253876
21	40	-1
22	42	-1.144122806
23	44	-1.260073511
24	46	-1.344997024
25	48	-1.396802247
26	50	-1.414213562
27	52	-1.396802247
28	54	-1.344997024
29	56	-1.260073511
30	58	-1.144122806
31	60	-1
32	62	-0.831253876
33	64	-0.642039522
34	66	-0.437016024
35	68	-0.221231742
36	70	-3.33E-16
37	72	0.221231742
38	74	0.437016024
39	76	0.642039522
40	78	0.831253876
41	80	1

今给定向量 $\mathbf{x}=(35.2 \quad 27.6 \quad 19 \quad 65.7 \quad 55.7)^T$，采用标准 B 样条插值计算 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
TY	REAL*8(1:M)	要计算的函数值
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
N	INTEGER	插值节点个数减 1
X	REAL*8(0:N)	节点自变量
Y	REAL*8(0:N)	节点因变量
M	INTEGER	要计算的向量的维数
T	REAL*8(1:M)	要计算的节点向量

5. 程序代码

```
module spline
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   第三类标准 B 样条模块
!                处理周期函数插值
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   3 阶样条基
!     3.   追赶法解三对角方程
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(n,x,y,m,t,ty)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  第三类标准 B 样条方法函数
!             可以直接对多点插值
!             处理周期函数插值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.n 节点个数减,比如九个节点 N=8
!      2. x 节点向量  (: n) 维
!      3. y 节点处函数值(0:n)维
!      6.  m  要计算点的个数
```

```
!      7.  t  要计算的点  (: m) 维向量
!  Output parameters  :
!      1.  ty  计算结果  (: m) 维向量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,m,i,j,k
real*8::x(0:n),y(0:n)
real*8::t(m),ty(m)
real*8::A(1:n,1:n),c0(1:n),f(1:n),c(-1:n+1)
!设置 A 矩阵-------注意与 A 矩阵下标
!设初值
A=0
do i=1,n
   A(i,i)=4d0
end do
!主对角以下元素
do i=2,n
   A(i,i-1)=1d0
end do
!主对角以上元素
do i=1,n-1
A(i,i+1)=1d0
end do
!-------------------------
!设置 f 向量
do i=1,n-1
f(i)=6d0*y(i)
end do
f(n)=6d0*y(0)
!注意调用追赶法时，方程维数的值
!由参数意义决定
call chase(A,f,c0,N)
do i=1,n
  c(i)=c0(i)
end do
c(n+1)=c(1)
c(0)=c(n)
c(-1)=c(n-1)
!至此已经给出完整的系数 c
h=x(1)-x(0)
!以下开始计算值
do k=1,m
ty(k)=0
do j=-1,n+1
   ty(k)=ty(k)+c(j)*omiga3((t(k)-x(0))/h-j)
end do
end do
end subroutine solve
function omiga3(x)
```

```
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  三阶 B 样条基
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if (dabs(x)>=2d0) then
 omiga3=0
else if (dabs(x)<=1d0) then
 omiga3=0.5d0*(dabs(x))**3-x**2+2d0/3d0
else if (dabs(x)>1d0.and.dabs(x)<2d0) then
 omiga3=-1d0/6d0*(dabs(x))**3+x**2-2d0*dabs(x)+4d0/3d0
end if
end function omiga3
 subroutine chase(A,f,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-9
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  追赶法计算三对角方程组
!               Ax=f
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  A 系数矩阵
!      2. f 右向量
!  Output parameters  :
!      1.  x 方程的解
!      2.  N 维数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   注意：该方法仅适用于三对角方程组
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
 integer::N
 real*8::A(N,N),f(N),x(N)
 real*8::L(2:N),u(N),d(1:N-1)
real*8::c(1:N-1),b(N),e(2:N)
 integer::i
 real*8::y(N)
!---------------把 A 矩阵复制给向量 e,b,c
do i=1,N
   b(i)=a(i,i)
end do
do i=1,N-1
  c(i)=a(i,i+1)
```

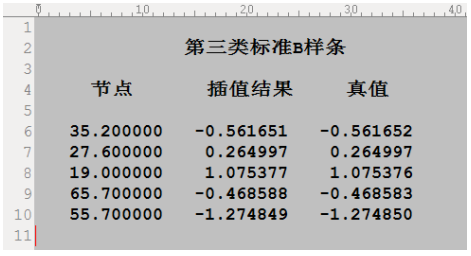
```
end do
do i=2,N
  e(i)=a(i,i-1)
end do
!------------------------
do i=1,N-1
 d(i)=c(i)
end do
u(1)=b(1)
do i=2,N
  L(i)=e(i)/u(i-1)
  u(i)=b(i)-L(i)*c(i-1)
end do
!------开始回带,求得 y
y(1)=f(1)
do i=2,N
  y(i)=f(i)-L(i)*y(i-1)
end do
!-----开始回带，求得 x
x(n)=y(n)/u(n)
do i=n-1,1,-1
x(i)=(y(i)-c(i)*x(i+1))/u(i)
end do
end subroutine chase
end module spline
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  第三类标准 B 样条主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.    result.txt 保存计算结果
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
use spline
implicit real*8(a-z)
real*8::x(0:40),y(0:40),t(5),ty(5),rty(5)
real*8,parameter::pi=3.141592653589793d0
 open(unit=11,file='result.txt')
!节点
x=(/ 0d0,  &
     2d0,  &
     4d0,  &
     6d0,  &
     8d0,  &
```

```
      10d0,  &
      12d0,  &
      14d0,  &
      16d0,  &
      18d0,  &
      20d0,  &
      22d0,  &
      24d0,  &
      26d0,  &
      28d0,  &
      30d0,  &
      32d0,  &
      34d0,  &
      36d0,  &
      38d0,  &
      40d0,  &
      42d0,  &
      44d0,  &
      46d0,  &
      48d0,  &
      50d0,  &
      52d0,  &
      54d0,  &
      56d0,  &
      58d0,  &
      60d0,  &
      62d0,  &
      64d0,  &
      66d0,  &
      68d0,  &
      70d0,  &
      72d0,  &
      74d0,  &
      76d0,  &
      78d0,  &
      80d0  /)
  ! 节点因变量
  y=(/   1.0000000000000000d0 ,&
     1.144122805635369d0 ,&
     1.260073510670101d0 ,&
     1.344997023927915d0 ,&
     1.396802246667421d0 ,&
     1.414213562373095d0 ,&
     1.396802246667421d0 ,&
     1.344997023927915d0 ,&
     1.260073510670101d0 ,&
     1.144122805635369d0 ,&
     1.000000000000000d0 ,&
     0.831253875554907d0 ,&
     0.642039521920206d0 ,&
     0.437016024448821d0 ,&
     0.221231742082474d0 ,&
     0.000000000000000d0 ,&
    -0.221231742082474d0 ,&
    -0.437016024448821d0 ,&
    -0.642039521920206d0 ,&
```

```
     -0.831253875554907d0 ,&
     -1.0000000000000000d0 ,&
     -1.144122805635369d0 ,&
     -1.260073510670101d0 ,&
     -1.344997023927915d0 ,&
     -1.396802246667420d0 ,&
     -1.414213562373095d0 ,&
     -1.396802246667421d0 ,&
     -1.344997023927915d0 ,&
     -1.260073510670101d0 ,&
     -1.144122805635369d0 ,&
     -1.0000000000000000d0 ,&
     -0.831253875554907d0 ,&
     -0.642039521920206d0 ,&
     -0.437016024448821d0 ,&
     -0.221231742082475d0 ,&
     -0.0000000000000000d0 ,&
      0.221231742082474d0 ,&
      0.437016024448821d0 ,&
      0.642039521920206d0 ,&
      0.831253875554907d0 ,&
      1.0000000000000000d0/)
! 要计算的点,不必按照大小排列
   t=(/35.2d0,27.6d0,19d0,65.7d0,55.7d0/)
! 调用方法函数
   call solve(40,x,y,5,t,ty)
  !真值
  rty=dsin(t*pi/40)+dcos(t*pi/40)
  write(11,101)
write(11,102)((t(i),ty(i),rty(i)),i=1,5)
101 format(/,T15,'第三类标准 B 样条',//,&
           '     节点      插值结果     真值',/)
102 format(3F12.6)
end program main
```

6. 实验结论

实验中的数据实际上是用函数 $f(x)=\sin\left(\frac{\pi}{40}x\right)+\cos\left(\frac{\pi}{40}x\right)$ 仿真得到的。计算结果保存在 result.txt 文件中，内容如图 7-9 所示。



第三类标准B样条

节点	插值结果	真值
35.200000	-0.561651	-0.561652
27.600000	0.264997	0.264997
19.000000	1.075377	1.075376
65.700000	-0.468588	-0.468583
55.700000	-1.274849	-1.274850

图 7-9　第三类标准 B 样条

可以看到计算结果还是很不错的。至此已经介绍完三类标准 B 样条，在使用这三类 B 样

条时需要注意各自的适用条件。

本章小结

本章介绍常见的插值方法，其中拉格朗日插值、牛顿插值、Hermite 插值是基础。本章重点强调了样条插值方法，分别介绍了三类条件下的三次样条插值及三类条件下的 B 样条插值方法。B 样条插值插值方法因其实用强，理论优美而应该给于一定的重视。除了本章介绍的插值方法之外，还有其他一些插值方法如有理插值等未作介绍，有兴趣的读者可以参阅相关资料或专著。

第 8 章

◄ 数值微分 ►

一般而言，积分问题要比微分问题麻烦。对于初等函数，通常我们是可以通过解析的方法求出函数的导数。

不过在实际应用中，有时候给出的数据是离散的形式，比如工程测量中的数据，因为无函数解析式，这时需要采用数值方法求出其导数。这样的情况是存在的，比如对空间目标进行跟踪测量，获得的数据是离散的位置描述，采用数值微分方法可以获得目标的运动速度与加速度信息。本章即讨论数值微分方法。

8.1 简单的中点公式

1. 实验基本原理

在微积分中，函数的导数通过极限定义的，然后有时候我们只能获得离散的点列，这时候就不可用定义来求其导数，只能用近似方法求数值导数。

数值导数中最简单的即中点公式

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

以上公式实际上过于简单，实际计算时很少采用，这里主要是起示范性说明作用。以上公式看似 h 越小则结果越准确。当 h 很小时，由于 $f(x+h)$ 与 $f(x-h)$ 很接近，直接相减会早晨有效数字的严重损失，所以必须选择合适的 h 。

2. 实验目的与要求

- 知道中点公式。
- 分析为什么当 h 小到一定程度之后，越小反而精度不能提高。

- 能编程验证随着 h 的减小，数值微分的精度变化情况。

3. 实验内容与数据来源

用简单的中点公式计算 $f(x)=\tan^{-1}x$ 在 $x=\sqrt{2}$ 处的导数。$f(x)$ 的导函数为 $f'(x)=\left(x^2+1\right)^{-1}$，在 $x=\sqrt{2}$ 时应为 $\frac{1}{3}$。把 h 逐步取小，看精度是否一直在提高。

5. 程序代码

```
module middiff
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.08.11
!-------------------------------------------------------
!  Description :
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve()
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 方法函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i
s=dsqrt(2d0)
h=1d0
!建立文件
open(unit=file1,file='result.txt')
do i=1,50
   f2=datan(s+h)
   f1=datan(s-h)
```

```
    d=f2-f1
    r=d/(h*2d0)
!文件写入的内容为序号，步长与计算结果，准确值为/3
    write(file1,*)i,h,r
    h=h/2
end do
end subroutine solve
end module middiff
program main
!----------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 主函数
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!
!-------------------------------------------------------
use middiff
call solve
end
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，整理如表 8-1 所示。

表 8-1　中点公式计算结果

序号	h	数值导数
1	1.00000000000000	0.392699081698724
2	0.500000000000000	0.348771003583907
3	0.250000000000000	0.337193879218859
4	0.125000000000000	0.334298029698348
5	6.250000000000000E-002	0.333574472267674
6	3.125000000000000E-002	0.333393615751437
7	1.562500000000000E-002	0.333348403791302
8	7.812500000000000E-003	0.333337100938635
9	3.906250000000000E-003	0.333334275234080
10	1.953125000000000E-003	0.333333568808484
11	9.765625000000000E-004	0.333333392202121
12	4.882812500000000E-004	0.333333348050473
13	2.441406250000000E-004	0.333333337012618
14	1.220703125000000E-004	0.333333334253439
15	6.103515625000000E-005	0.333333333563132
16	3.051757812500000E-005	0.333333333392147
17	1.525878906250000E-005	0.333333333346673

18	7.629394531250000E-006	0.333333333335759
19	3.814697265625000E-006	0.333333333343035
20	1.907348632812500E-006	0.333333333313931
21	9.536743164062500E-007	0.333333333372138

（续表）

序号	h	数值导数
22	4.768371582031250E-007	0.333333333372138
23	2.384185791015625E-007	0.333333333255723
24	1.192092895507812E-007	0.333333333022892
25	5.960464477539062E-008	0.333333333954215
26	2.980232238769531E-008	0.333333332091570
27	1.490116119384766E-008	0.333333332091570
28	7.450580596923828E-009	0.333333328366280
29	3.725290298461914E-009	0.333333343267441
30	1.862645149230957E-009	0.333333313465118
31	9.313225746154785E-010	0.333333373069763
32	4.656612873077393E-010	0.333333253860474
33	2.328306436538696E-010	0.333333492279053
34	1.164153218269348E-010	0.333333015441895
35	5.820766091346741E-011	0.333333969116211
36	2.910383045673370E-011	0.333332061767578
37	1.455191522836685E-011	0.333335876464844
38	7.275957614183426E-012	0.333328247070312
39	3.637978807091713E-012	0.333343505859375
40	1.818989403545856E-012	0.333312988281250
41	9.094947017729282E-013	0.333374023437500
42	4.547473508864641E-013	0.333251953125000
43	2.273736754432321E-013	0.333496093750000
44	1.136868377216160E-013	0.333007812500000
45	5.684341886080801E-014	0.333984375000000
46	2.842170943040401E-014	0.332031250000000
47	1.421085471520200E-014	0.335937500000000
48	7.105427357601002E-015	0.328125000000000
49	3.552713678800501E-015	0.343750000000000
50	1.776356839400250E-015	0.312500000000000

计算结果表明，并不是 h 越小精度高，这也证实了原理部分所叙述的内容。

8.2 三点公式法

1. 实验基本原理

如果对离散数据进行插值，然后对插值多项式进行求导，这可以给出近似的一些列微分

公式。这里给出三点公式

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}(-3y_0 + 4y_1 - y_2) \\ f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}(y_{-2} - 4y_{-1} + 3y_0) \\ f'(x_0) \approx \dfrac{1}{2h}(y_1 - y_{-1}) \end{cases}$$

关于以上公式的推导可以参看清华大学数学系编写的计算数学手册，这里从略。

2. 实验目的与要求

- 知道三点公式方法。
- 能够采用三点公式计算数值微分问题。
- 比较不同公式的计算结果。

3. 实验内容与数据来源

计算出函数 $f(x)=\sin(x)+\cos(x)$ 一些等距离散点列，然后根据这些点列采用三点公式计算出 $f'(3)$。

5. 程序代码

```
module therepoint
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.08.11
!-------------------------------------------------------
!  Description :   三点公式计算微分模块
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve()
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 三点公式求微分
!
!  Post Script :
```

```
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i
real*8::f(-2:2)
h=0.1d0
!建立文件用以存放离散数据
open(unit=11,file='file1.txt')
write(11,101)
do i=-2,2
  f(i)=dsin(3d0+i*h)+dcos(3d0+i*h)
!记录下离散的函数数据，写入文件
  write(11,102)3d0+i*h,f(i)
end do
!以上为产生模拟数据，以下为三点公式计算微分
!公式
df1=-3d0*f(0)+4d0*f(1)-f(2)
df1=df1/(2d0*h)
!公式
df2=f(-2)-4d0*f(-1)+3d0*f(0)
df2=df2/(2d0*h)
!公式
df3=(f(1)-f(-1))/(2d0*h)
!新建文件用以保存数值微分结果
open(unit=12,file='file2.txt')
write(12,103)
write(12,*)'公式计算结果：',df1
write(12,*)'公式计算结果：',df2
write(12,*)'公式计算结果：',df3
write(12,104)dcos(3d0)-sin(3d0)
101 format(/,T14,'离散数据为：',/)
102 format(2(F16.10))
103 format(/,T14,'三点微分公式',/)
104 format('实际结果应该为：',F16.12)
end subroutine solve
end module therepoint
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 三点公式求微分
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
use therepoint
call solve
end
```

6. 实验结论

编译并运行程序。在当前文件夹下得到两个文件，file1.txt 用来记录原函数的离散点列。内容如图 8-1 所示。

而计算结果保存在文件 file2.txt 中，内容如图 8-2 所示。

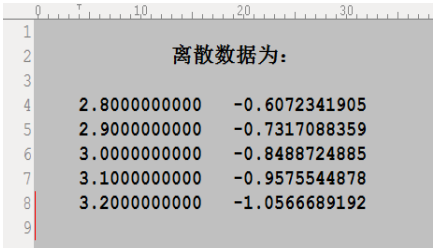


图 8-1　离散数据

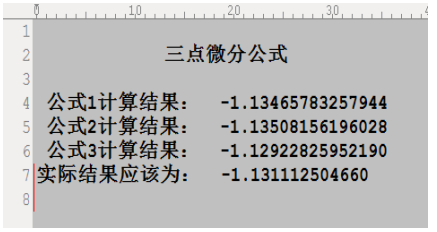


图 8-2　三点微分公式

三点公式中最后一个公式实际上退化为中点公式，精度也较低。

8.3　五点公式法

1. 实验基本原理

除了上一节介绍的三点公式，常用的还有五点公式，其基本原理与上一节一样。下面给出计算公式。

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{12h}(-25y_0+48y_1-36y_2+16y_3-3y_4)$$

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{12h}(y_{-2}-8y_{-1}+8y_1-y_2)$$

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{12h}(-y_{-3}+6y_{-2}-18y_{-1}+10y_0+3y_1)$$

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{12h}(3y_{-4}-16y_{-3}+36y_{-2}-48y_{-1}+25y_0)$$

对于给定的离散数据，用五点公式一般可以获得比三点公式更好的结果。

2. 实验目的与要求

- 了解五点微分公式中各量的意义。
- 能够编程实现五点微分公式。

- 比较五点微分公式与三点公式的计算结果。

3. 实验内容与数据来源

对上一个实验中的函数 $f(x)=\sin(x)+\cos(x)$，计算出该函数的一些等距离散点列，然后根据这些离散点列，采用五点公式计算出 $f'(3)$。

4. 程序代码

```
module fivediff
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.08.11
!-------------------------------------------------------
!  Description :
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  五点公式计算微分
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i
real*8 f(-4:4)
h=0.1d0
```

```
!建立文件用以存放离散数据
open(unit=file1,file='file1.txt')
do i=-4,4
  f(i)=dsin(3d0+i*h)+dcos(3d0+i*h)
!记录下离散的函数数据，写入文件
  write(file1,*)3d0+i*h,f(i)
end do
!以上为产生模拟数据，以下为三点公式计算微分
!公式
df1=-25*f(0)+48*f(1)-36*f(2)+16*f(3)-3*f(4)
df1=df1/12/h
!公式
df2=f(-2)-8*f(-1)+8*f(1)-f(2)
df2=df2/12/h
!公式
df3=-f(-3)+6*f(-2)-18*f(-1)+10*f(0)+3*f(1)
df3=df3/12/h
!公式
df4=3*f(-4)-16*f(-3)+36*f(-2)-48*f(-1)+25*f(0)
df4=df4/12/h
!新建文件用以保存数值微分结果
open(unit=file2,file='file2.txt')
write(file2,*)df1
write(file2,*)df2
write(file2,*)df3
write(file2,*)df4
write(file2,*)'实际结果应该为：'
write(file2,*)dcos(3d0)-sin(3d0)
end subroutine solve
end module fivediff
program main
!----------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 五点公式计算微分
!
!-------------------------------------------------------
use fivediff
call solve
end
```

5. 实验结论

编译并运行程序，得到两个文件。file1.txt 用以保存离散点列数据，整理后如表 8-2 所示。

表 8-2　离散数据

x	$f(x)$
2.60000000000000	-0.341387381547483
2.70000000000000	-0.476692261783231
2.80000000000000	-0.607234190512753

2.90000000000000	-0.731708835935608
3.00000000000000	-0.848872488540578
3.10000000000000	-0.957554487839989
3.20000000000000	-1.05666891922233
3.30000000000000	-1.14522546405211
3.40000000000000	-1.22233929460629

计算结果保存在文件 file2.txt 中，内容如图 8-3 所示。

```
1  -1.13109304317996
2  -1.13110873877122
3  -1.13111848614841
4  -1.13108741931260
5  实际结果应该为：
6  -1.13111250466031
```

图 8-3　5 点微分公式计算结果

相比于三点公式，很容易看出，采用五点公式结果要更好一些。

8.4　Richardson外推方法

1. 实验基本原理

用中心差分计算数值导数有

$$f'(x)\approx G(h)=\frac{f\left(x+\frac{h}{2}\right)-f\left(x-\frac{h}{2}\right)}{h}$$

可以用 Richardson 外推方法提高精度

$$\begin{cases} G_1(h)=G(h) \\ G_{m+1}(h)=\dfrac{G_m\left(\frac{h}{2}\right)-\left(\frac{1}{2}\right)^{2m}G_m(h)}{1-\left(\frac{1}{2}\right)^{2m}} \end{cases}$$

一般而言外推几步就可以得到较好的计算结果。在数值积分中也有 Richardson 外推方法，在下一章节中将做介绍。

2. 实验目的与要求

- 了解 Richardson 外推方法。
- 能够编程实现 Richardson 外推。
- 比较外推后的精度变化。

3. 实验内容与数据来源

函数 $f(x)=x^2e^{-x}$，分别取 $h=0.1,0.05,0.025$。求出上的一节导数的中心差商，进行外推三级，求得 $f'(0.5)$。

4. 程序代码

```
module richardson
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Richardson 外推模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : Richardson 外推
!
!  Post Script :
```

```
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!外推三级
real*8 h(3)
real*8 g(3,3)
h(1)=0.1d0
h(2)=h(1)/2
h(3)=h(2)/2
x=0.5d0
!求的底层差商
call fun(y1,x+h(1))
call fun(y2,x-h(1))
g(1,1)=(y1-y2)/2/h(1)
call fun(y1,x+h(2))
call fun(y2,x-h(2))
g(1,2)=(y1-y2)/2/h(2)
call fun(y1,x+h(3))
call fun(y2,x-h(3))
g(1,3)=(y1-y2)/2/h(3)
!进行外推
call gf(y,g(1,1),g(1,2),1)
g(2,1)=y
call gf(y,g(1,2),g(1,3),1)
g(2,2)=y
call gf(y,g(2,1),g(2,2),1)
g(3,1)=y
!记录整个外推结果
open(unit=20,file='file1.txt')
write(20,'(3f16.8)') g(1,1),g(1,2),g(1,3)
write(20,'(2f16.8)') g(2,1),g(2,2)
write(20,'(f16.8)')g(3,1)
!!----这段注释程序为验证程序-
! x=0.5d0
! y=x*2*dexp(-x)-x**2*dexp(-x)
! write(20,*)'----'
! write(20,*)y
!!----
end subroutine solve
subroutine fun(y,x)
implicit real*8(a-z)
!所求之函数
y=x**2*dexp(-x)
end subroutine fun
subroutine gf(y,a1,a2,n)
implicit real*8(a-z)
integer n
!外推公式
y=a2-a1*(1/2d0)**(2*n)
temp=1-(1/2d0)**(2*n)
y=y/temp
end subroutine gf
end module richardson
```

```
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  主函数
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!
!-------------------------------------------------------
use richardson
!调用外推函数
call solve
end program main
```

5. 实验结论

程序运行后，计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 8-4 所示。

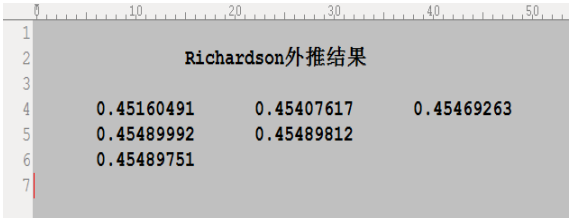


图 8-4　Richardson 外推结果

最后一行即我们所要之结果，$f'(0.5)$ 的准确值为 0.454897994784475，可以看出虽然第一次差商精度都很低，但是外推 3 次之后精度得到很大的提高。

从这一实验中可以看出，随着外推级数的增加数值微分的精度也在不断提高，在实际应用时，根据需要，还可以根据需要把外推的级数设置成任意次。不过实际上，一般外推几次以后精度已经达到一个很不错的水平。

8.5　数值微分应用范例—雷达跟踪微分求速

1. 实验基本原理

作为数值微分的应用，这里介绍一个较为简化的小范例，即对目标跟踪的微分求速度及加速度的方法。计算公式由以下给出。

$$\begin{cases} f'(x_0) \approx \dfrac{1}{12h}(y_{-2} - 8y_{-1} + 8y_1 - y_2) \\ f''(x_0) \approx \dfrac{1}{12h^2}(11y_{-1} - 20y_0 + 6y_1 + 4y_2 - y_3) \end{cases}$$

以上公式包含了二阶导数计算公式，还有其他多种计算二阶导数方法，有兴趣的读者可以参考相关数学手册。

在实验过程是先用一个模型产生测量数据，这个过程即仿真过程，进而对“测量”数据进行数值微分处理，然后比较处理结果与模型给出的“真实”数据进行比较。

2. 实验目的与要求

- 能编程实现数值微分方法。
- 能够编程实现二阶导数的数值方法。
- 注意实际情况的一些条件限制。

3. 实验内容与数据来源

已知雷达对某动态目标进行跟踪，在一时间段内，获得以下数据。现根据这些数据，求目标在$t=6s$时，目标的运动速度与加速度。该数据在直角坐标系下获得，数据如表 8-3 所示。

表 8-3 雷达跟踪数据

t	$x(t)$	$y(t)$	$z(t)$
5.6	47.52873336	297.79514079	145.03156588
5.7	49.03931446	326.81671542	153.53771278
5.8	50.57539782	358.83495773	162.35751952
5.9	52.13612334	394.16359120	171.49647843
6.0	53.72058450	433.14937799	180.96017029
6.1	55.32783750	476.17560758	190.75426844
6.2	56.95691060	523.66595169	200.88454210
6.3	58.60681390	576.08872403	211.35685864
6.4	60.27654920	633.96158708	222.17718492

5. 程序代码

```
module radardiff
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.08.11
```

```
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.08.04
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : 微分求速函数
!
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!       3.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer i
real*8 t(-4:4),x(-4:4),y(-4:4),z(-4:4)
open(unit=20,file='file1.txt')
open(unit=21,file='file2.txt')
!从测量资料里读数据，程序运行时，需要把测量资料放在当前目录下
do i=-4,4
 read(20,*)t(i),x(i),y(i),z(i)
end do
!该段注释代码是把读的数据重写一遍，检查看是否有错误
!open(unit=30,file='file2.txt')
!do i=-4,4
! write(30,'(f3.1,3f16.8)')t(i),x(i),y(i),z(i)
!end do
!采用五点公式微分求速
vx=x(-2)-8*x(-1)+8*x(1)-x(2)
vx=vx/12/0.1
vy=y(-2)-8*y(-1)+8*y(1)-y(2)
vy=vy/12/0.1
vz=z(-2)-8*z(-1)+8*z(1)-z(2)
vz=vz/12/0.1
ax=11*x(-1)-20*x(0)+6*x(1)+4*x(2)-x(3)
ax=ax/12/0.01
ay=11*y(-1)-20*y(0)+6*y(1)+4*y(2)-y(3)
ay=ay/12/0.01
az=11*z(-1)-20*z(0)+6*z(1)+4*z(2)-z(3)
az=az/12/0.01
!该段注释代码为验证程序-------------------------
!即严格按照运动学求其速度与加速度，为使之与数值法比较
!第一行为速度，第二行为加速度
write(21,'(3f16.8)')vx,vy,vz
write(21,'(3f18.8)')ax,ay,az
t1=6d0
write(21,*)'---'
write(21,*)'the real velocity'
write(21,*)(dcos(t1)+2*t1+3d0)
write(21,*)(dexp(t1)+dcos(t1)+5d0)
write(21,*)(-dsin(t1)+3*t1**2-2*t1)
write(21,*)'---'
write(21,*)'the real acceleration'
```

```
    write(21,*)(-dsin(t1)+2d0)
    write(21,*)(dexp(t1)-dsin(t1))
    write(21,*)(-dcos(t1)+6*t1-2d0)
    !-------------------------------------------------
    end subroutine solve
    end module radardiff
    program main
    !--------------------------------------program comment
    !  Version   :  V1.0
    !  Coded by  :  syz
    !  Date      :
    !-------------------------------------------------------
    !  Purpose     : 主函数
    !
    !  Post Script :
    !       1.
    !       2.
    !
    !-------------------------------------------------------
    use radardiff
    call solve
    end
```

6. 实验结论

首先要准备数据文件，数据文件以 ASCII 码形式保存，可用记事本等文本程序打开，如图 8-5 所示。

执行程序，产生数据结果如图 8-6 所示。

```
1  5.6    47.52873336    297.79514079    145.03156588
2  5.7    49.03931446    326.81671542    153.53771278
3  5.8    50.57539782    358.83495773    162.35751952
4  5.9    52.13612334    394.16359120    171.49647843
5  6.0    53.72058450    433.14937799    180.96017029
6  6.1    55.32783750    476.17560758    190.75426844
7  6.2    56.95691060    523.66595169    200.88454210
8  6.3    58.60681390    576.08872403    211.35685864
9  6.4    60.27654920    633.96158708    222.17718492
10
```

图 8-5　准备的数据文件

```
1     15.96016685    409.38760813    96.27941315
2      2.27933538    403.67227244    33.03981182
3  ---
4  the real velocity
5    15.9601702866504
6    409.388963779385
7    96.2794154981989
8  ---
9  the real acceleration
10   2.27941549819893
11   403.708208990934
12   33.0398297133496
```

图 8-6　计算结果

验证部分代码，是计算所不需要的，实际计算中可能并不知道跟踪目标动力学特征所以无法知道运动学规律，故这部分代码是没有的。

这里给出模拟数据的仿真代码，供读者参考。

```
    program main
    !该文件为仿真程序，目的是产生数据
    !假设目标运动学为 x(t)=sin(t)+t**2+3*t
    !y 方向运动学为 y(t)=exp(t)+sin(t)+5*t
    !z 方向运动学为 z(t)=cos(t)+t**3-t**2
    implicit real*8(a-z)
```

```
integer i
real*8 t(-4:4),x(-4:4),y(-4:4),z(-4:4)
h=0.1d0
!建立文件用以存放离散数据
open(unit=file1,file='file1.txt')
do i=-4,4
  t(i)=6d0+i*h
  x(i)=dsin(t(i))+t(i)**2+3*t(i)
  y(i)=dexp(t(i))+dsin(t(i))+5*t(i)
  z(i)=dcos(t(i))+t(i)**3-t(i)**2
!记录下离散的函数数据，写入文件
  write(file1,'(f3.1,3f16.8)')t(i),x(i),y(i),z(i)
end do
end
```

仿真使用的运动学模型为：

$$\begin{cases} x(t)=\sin(t)+t^2+3t \\ y(t)=e^t+\sin(t)+5t \\ z(t)=\cos(t)+t^3-t^2 \end{cases}$$

从数值计算的结果可以看到，对运动学求实际的速度与加速度后与计算结果是吻合的。至此，完成了模型的仿真与解算。

本章小结

本章介绍了三点、五点求微分公式，同时还给出了 Richardson 外推方法，在最后一个实验中，还给出了数值微分方法在跟踪测量中的小范例。因本章内容较为简单，本章给出的并非软件成品，而是介绍数值微分的方法，希望读者注意。读者在掌握方法之后，很容易根据自己的需求编写数值微分计算程序。

第 9 章

◄ 数值积分 ►

在工程问题中，经常会遇到定积分的计算问题

$$S = \int_a^b f(x)dx$$

部分积分问题可以通过求原函数的方法计算而得，这也是微积分中的重要内容。但是也有相当多的一些积分问题，找原函数是很困难的，甚至根本就不能用初等函数表为闭形式。即使有些函数看上去很简单，但是其原函数却无法用初等函数表示，如

$$\int \frac{\sin x}{x}dx, \int \frac{\cos x}{x}dx, \int \sin x^2 dx$$

$$\int \frac{e^x}{x}dx, \int e^{x^2}dx, \int \frac{1}{\ln x}dx, \int \frac{x}{\ln x}dx$$

数学上可以证明上面的函数的原函数不能用初等函数表示，这时候就需要考虑使用数值方法，正是这一章要介绍的内容。

当然还有一种情况，有时候我们不是对确定的函数进行数值积分，而是仅仅拿到离散的点列资料，这时候当然无法采用一般微积分教材中介绍的各种积分法方法处理，只能依靠数值积分方法。

9.1 复合梯形求积法

1. 实验基本原理

梯形公式计算积分问题是最基本的方法，几何意义也比较直观，但是单独的梯形公式是不会被用来作为数值积分方法的。事实上，如果我们把积分区间等分为很多小区间，这就得到复合梯形公式，如果划分比较稠密，则计算结果相对可靠一些。下面给出复合梯形法的计算方法，对于积分问题 $\int_a^b f(x)dx$，把区间 $[a,b]$ 分为 n 个相等的子区间，在每个子区间上使用梯形

公式得到

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right]-\frac{h^3}{12}f''(\xi_i),\xi_i\in[x_i,x_{i+1}]$$

于是有

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n}\frac{h}{2}\left[f(x_i)+f(x_{i+1})\right]-\sum_{i=1}^{n}\frac{h^3}{12}f''(\xi_i)$$

如果函数的二次导数在区间上连续，则开区间内必然存在一点 ξ，使得

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f''(\xi_i)=f''(\xi)$$

从而有

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)\right]-\frac{nh^3}{12}f''(\xi)$$

于是近似的

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(a+ih)\right],h=\frac{b-a}{n}$$

这就是复合梯形的基本计算方法。

2. 实验目的与要求

- 知道简单梯形法的几何意义。
- 了解复合梯形法的构造步骤。
- 能编程实现复合梯形方法，并计算积分问题。
- 分析区间划分细度与积分精度情况。

3. 实验内容与数据来源

计算积分

$$\int_{-2}^{2}\left(x^2+\sin(x)\right)dx$$

分别把区间分为 40、80 和 200 个小区间，比较计算精度情况。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
N	INTEGER	区间划分个数

5. 程序代码

```
module trapezoid
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Description :   复合梯形法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     方法函数
!     2.     测试函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合梯形公式计算数值积分
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.        func 为外部子程序
!      2.
!      3.        a,b 积分区间
!      4.        n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!      1.        s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
```

```
integer::n,k
s=0d0
h=(b-a)/n
call func(f1,a)
call func(f2,b)
s=f1+f2
do k=1,n-1
t=a+k*h
call func(f,t)
s=s+2d0*f
end do
s=s*h/2d0
end subroutine solve
subroutine fun1(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.     f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=x**2+dsin(x)
end subroutine fun1
end module trapezoid
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合梯形法计算数值积分主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Post Script :
!       1.  梯形公式精度不是很高，要想得到较高的精度需要
!       2.  划分较细
!       3.  可以通过公式预先估计在一定的精度下需要划分
!           多少节点
!-------------------------------------------------------
use trapezoid
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,40)
write(11,102)s
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,80)
write(11,103)s
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,200)
write(11,104)s
101 format(/,T5,'复合梯形法计算数值积分',/)
102 format(T5,'n=40',F12.6)
103 format(T5,'n=80',F12.6)
104 format(T5,'n=200',F11.6)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件如图 9-1 所示。

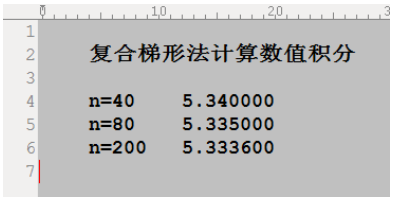


图 9-1 复合梯形法计算数值积分结果

实验中的积分精确值为 $\frac{16}{3}=5.333333\cdots$。从计算结果可以看到随着区间划分越细，精度越高，但是随着划分越细，精度提高之速度并不是特别快。由此可见，复合梯形法带有一定的示范性，精度并不是很高，实际计算中较少采用。

9.2 复合Simpson积分

1. 实验基本原理

复合 Simpson 公式是一种比较实用的积分方法，可以给出误差估计。下面阐述方法的基本原理。用 n+1 个点将区间[a,b]划分为 m 个相等的子区间 $[x_{2i-2},x_{2i}],i=1,\cdots,m$。设子区间的中点为 x_{2i-1}，且

$$x_{2i}-x_{2i-2}=2h=\frac{b-a}{m}$$

则在区间[a,b]上有，

$$I=\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx$$
$$=\frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+4f\left(\frac{x_k+x_{k+1}}{2}\right)+f(x_{k+1})\right]+R_n(f)$$

或可以表达为

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{i=1}^{m}\int_{x2i-2}^{x2i} f(x)dx$$
$$=\frac{h}{3}[f(a)+f(b)+4\sum_{i=1}^{m} f(a+2(i-1)h)$$
$$+2\sum_{i-1}^{m-1} f(a+2ih)]-\frac{mh^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$
$$a<\xi<b$$

这样就得到复合 Simpson 公式为

$$\int_a^b f(x)dx\approx S_m(f)$$
$$=\frac{h}{3}[f(a)+f(b)+4\sum_{k=0}^{m} f(a+2(k+1)h)$$
$$+2\sum_{k=1}^{m-1} f(a+2kh)]$$
$$h=\frac{b-a}{2m}$$

离散误差为

$$E_n(f)=-\frac{mh^5}{90}f^{(4)}(\xi)=-\frac{h^4(b-a)}{180}f^{(4)}(\xi)$$
$$a<\xi<b$$

由此，已经给出了复合 Simpson 的计算方法。在实际应用时，可以先根据离散误差估计出需要划分的区间数，然后调用 Simpson 公式进行积分计算。

2. 实验目的与要求

- 了解单独的 Simpson 公式原理及几何意义。
- 了解复合 Simpson 公式的构造步骤。
- 理解复合公式中的各项的意义，会正确计算之。
- 能够编程实现复合 Simpson 公式。

3. 实验内容与数据来源

采用复合 Simpson 方法计算积分

$$\int_{-2}^{2}\left(x^2+\sin(x)\right)dx$$

要求先用分析方法给出计算结果，然后分别把区间分为 40、80 和 200 个小区间，比较计算精度情况。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
N	INTEGER	区间划分个数

5. 程序代码

```
module Simpson
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Description :   复合 Simpson 法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     方法函数
!     2.     测试函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合 Simpson 公式计算数值积分
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!      1.        func 为外部子程序
!      2.
!      3.        a,b 积分区间
!      4.        n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!      1.        s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::n,k
s=0d0
h=(b-a)/n/2d0
call func(f1,a)
call func(f2,b)
s=f1+f2
!k=0 情况
call func(f1,a+h)
s=s+4d0*f1
do k=1,n-1
t1=a+(2d0*k+1)*h
t2=a+2d0*k*h
call func(f3,t1)
call func(f4,t2)
s=s+f3*4d0+f4*2d0
end do
s=s*h/3d0
end subroutine solve
subroutine fun1(f,x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.     f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
```

```
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=x**2+dsin(x)
end subroutine fun1
end module Simpson
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合 Simpson 法计算数值积分主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  可以通过公式预先估计在一定的精度下需要划分
!          多少节点
!-----------------------------------------------------
use Simpson
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,40)
write(11,102)s
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,80)
write(11,103)s
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,200)
write(11,104)s
101 format(/,T5,'复合 Simpson 法计算数值积分',/)
102 format(T5,'n=40',F15.8)
103 format(T5,'n=80',F15.8)
104 format(T5,'n=200',F14.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保证在文件 result.txt 中，如图 9-2 所示。

可以看到划分同样的区间数 Simpson 方法比梯形公式精度要高许多，即便是区间划分细度不如梯形公式计算结果相对于复合梯形也是不错的。。

```
复合Simpson法计算数值积分

n=40      5.33333333
n=80      5.33333333
n=200     5.33333333
```

图 9-2 复合 Simpson 方法计算数值积分

9.3　自动变步长Simpson方法

1. 实验基本原理

前面的实验可以看出，Simpson 公式较梯形公式精度要高，然而要用户在调用前指定区间划分细度，而这往往是靠经验来确定的。

实际上有了 Simpson 方法，则很容易实现变步长的积分方法，关于如何变步长有很多技巧，一个最简单的方法是，前后两次调用 Simpson 公式，然后求差，如果差大于给定的容限，则把划分细度加倍，如此循环，当前后两次差小于误差容限后，认为已经达到精度要求，停止循环，输出最后一次划分下的数值积分结果。

2. 实验目的与要求

- 知道精度控制方法。
- 能够编程实现可以控制精度的 Simpson 方法。
- 合理控制划分细度。
- 能对计算结果的误差做出合理分析。

3. 实验内容与数据来源

用自动变步长 Simpson 方法计算积分

$$\int_0^2 \frac{1}{x^3-2x-5}dx$$

要求精度控制在10^{-7}之内，并输出计算中实际划分的区间数。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
N	INTEGER	实际区间划分个数

TOL	REAL*8	积分误差容限

5. 程序代码

```
module autoSimpson
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Description :   自动变步长 Simpson 法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains   :
!     1.    方法函数
!     2.    测试函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,tol,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  自动变步长 Simpson 积分方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  func 外部函数
!      2.
!      3.  a,b 积分区间
!      4.  tol  积分误差容限
!
!  Output parameters  :
!      1.   s  积分结果
!      2.   n  实际区间划分个数
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  需要调用复合 Simpson 公式
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
```

```
integer::n,i
!初始划分个子区间
n=40
!最大允许划分次
do i=1,20
call simp(func,s,a,b,n)
n=n*2
call simp(func,s1,a,b,n)
del=dabs(s-s1)
!满足精度后就停止循环
if(del<tol)  exit
end do
s=s1
end subroutine solve
subroutine simp(func,s,a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合 Simpson 公式计算数值积分
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.        func 为外部子程序
!      2.
!      3.        a,b 积分区间
!      4.        n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!      1.        s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::n,k
s=0d0
h=(b-a)/n/2d0
call func(f1,a)
call func(f2,b)
s=f1+f2
!k=0 情况
call func(f1,a+h)
s=s+4d0*f1
do k=1,n-1
```

```
t1=a+(2d0*k+1)*h
t2=a+2d0*k*h
call func(f3,t1)
call func(f4,t2)
s=s+f3*4d0+f4*2d0
end do
s=s*h/3d0
end subroutine simp
subroutine fun1(f,x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.     f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=1d0/(x**3-2*x-5)
end subroutine fun1
end module autoSimpson
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  自动变步长 Simpson 法计算数值积分主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Post Script :
!      1.
!-------------------------------------------------------
use autoSimpson
implicit real*8(a-z)
integer::n
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
call solve(fun1,s,0d0,2d0,1d-7,n)
write(11,102)n,s
101 format(/,T5,'自动变步长 Simpson 法计算数值积分',/)
102 format(T5,'区间划分等份为：',I5,/,T5,'积分结果：',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 9-3 所示。

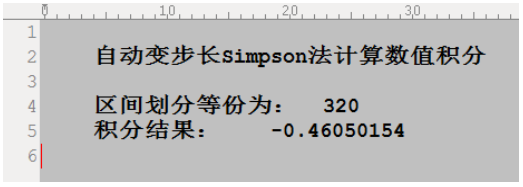


图 9-3　自动变步长 Simpson 积分结果

可以看到积分结果为-0.46050154，区间划分由最初的 40 份变成了 320 份。

9.4　复合高阶Newton-Cotes方法

1. 实验基本原理

前面介绍的梯形公式与 Simpson 公式实际上都是 Newton-Cotes 积分公式的特殊情况。构造 Newton-Cotes 积分方法是插值理论，在区间 $[a,b]$ 上的节点 $x_0,x_1,...,x_n$，定义

$$l_i(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j},(0\le i\le n)$$

为插值多项式基。在节点上构造插值多项式

$$p(x)=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)l_i(x)$$

用插值多项式的积分去近似函数积分，即

$$\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b p(x)dx=\sum_{i=0}^{n}f(x_i)\int_a^b l_i(x)dx$$

令

$$A_i = \int_a^b l_i(x)dx$$

则积分可以写为

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$$

这就是一般的 Newton-Cotes 公式。n 取不同的值就得到不同的积分公式，这其中就包含梯形公式与 Simpson 公式。

本节采用 5 点的 Newton-Cotes 公式计算，系数请直接查看程序。如前面几节一样，一般不会单独在全区间上采用 Newton-Cotes 公式，而是采用复合方法，复合方法的算法与前面是类似的。

2. 实验目的与要求

- 了解 Newton-Cotes 公式的推导思路。
- 知道梯形公式与 Simpson 公司皆属于 Newton-Cotes 公式的特殊情况。
- 会编程实现高阶级 Newton-Cotes 公式处理数值积分问题。

3. 实验内容与数据来源

用复合 5 点 Newton-Cotes 方法计算定积分

$$\int_{-2}^{2}\left(x^2+\sin(x)\right)dx$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
N	INTEGER	区间划分个数

5. 程序代码

```
module newton_cotes
```

```
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Description :  复合点 Newton-Cotes 公式计算定积分模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.   复合方法函数
!      2.   单区间点 Newton-Cotes 积分函数
!      3.   要计算的函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合点 Newton-Cotes 积分函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1. func 外部函数
!       2. a,b 积分区间
!       3. n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!       1.  s 积分结果
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   需要调用单区间点 Newton-Cotes 公式函数
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::n,i
hstep=(b-a)/n
s=0
do i=1,n
    c=a+(i-1)*hstep
    d=a+i*hstep
   call cotes(func,s1,c,d)
```

```
    s=s+s1
  end do
  end subroutine solve
  subroutine cotes(func,s1,c,d)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose   :  单区间点 Newton-Cotes 公式
  !
  !-----------------------------------------------------
  !  Input  parameters  :
  !      1.   func  外部函数
  !      2.   c,d 积分区间
  !  Output parameters  :
  !      1.
  !      2.
  !  Common parameters  :
  !
  !-----------------------------------------------------
  !  Post Script :
  !      1.
  !      2.
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  external func
  h=(d-c)/5d0
  call func(f1,c)
  call func(f2,c+h)
  call func(f3,c+2d0*h)
  call func(f4,c+3d0*h)   !d-2*h
  call func(f5,c+4d0*h)   !d-h
  call func(f6,d)
  s1=19d0*f1+75d0*f2+50d0*f3+50d0*f4+75d0*f5+19d0*f6
  s1=s1*5d0*h/288d0
  end subroutine cotes
  subroutine fun1(f,x)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010-5-29
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose   :  需要计算的函数
  !
  !-----------------------------------------------------
  !  Input  parameters  :
  !      1.     x  自变量
  !      2.
  !  Output parameters  :
```

```
!      1.    f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=x**2+dsin(x)
end subroutine fun1
end module newton_cotes
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合点 Newton-Cotes 方法主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!-------------------------------------------------------
use newton_cotes
implicit real*8(a-z)
integer::n
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
call solve(fun1,s,-2d0,2d0,8)
write(11,102)s
101 format(/,T5,'复合高阶 Newton-Cotes 法计算数值积分',/)
102 format(T5,'积分结果: ',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 9-4 所示。

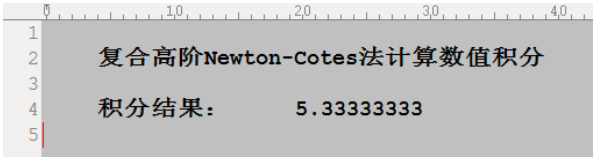


图 9-4 复合 5 点 Newton-Cotes 公式计算结果

感觉上似乎阶数越高，精度越高，实际上高阶 Newton-Cotes 公式的舍入误差的干扰较大，在实际计算中并不适宜采用 n 很大的公式。

9.5 Romberg积分方法

1. 实验基本原理

Romberg 方法是实用性很强的一种数值积分方法，其收敛速度是很快的，这里给出 Romberg 积分的计算方法，算法如下所示。

01 计算 $T_1^0=\dfrac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right]$

对 $i=1,2,\cdots$，做02~05处理。

02 计算

$$T_1^i=\frac{1}{2}T_1^{i-1}+\frac{b-a}{2^i}\sum_{j=1}^{2^{i-1}}f\left(a+(2j-1)\frac{b-a}{2^l}\right)$$

03 计算表 12.x 中第 $i+1$ 元素

$$T_{m+1}^{k-1}=\frac{4^mT_m^k-T_m^{k-1}}{4^m-1}$$

$m=1,2,\cdots,i$，$k=i,i-1,i-2,\cdots,1$。

04 收敛控制

如果 $\left|T_m^0-T_{m-1}^0\right|<\varepsilon$ 则，停止循环，取 T_m^0 作为积分结果。

05 i 增加 1，转入02。为了防止计算进入死循环，可以设置允许最大迭代次数，超过一定次数便停止迭代。

如此便构成了 Romberg 积分的基本步骤，其计算步骤如表 9.2。表 9.2 中尖括号内的数字表示计算机在执行时的计算次序。

表 9.2 Romberg 计算步骤

$T_1^0\langle 1\rangle$						
$T_1^1\langle 2\rangle$	$T_2^0\langle 3\rangle$					
$T_1^2\langle 4\rangle$	$T_2^1\langle 5\rangle$	$T_3^0\langle 6\rangle$				
$T_1^3\langle 7\rangle$	$T_2^2\langle 8\rangle$	$T_3^1\langle 9\rangle$	$T_4^0\langle 10\rangle$			
$T_1^4\langle 11\rangle$	$T_2^3\langle 12\rangle$	$T_3^2\langle 13\rangle$	$T_4^1\langle 14\rangle$	$T_5^0\langle 15\rangle$		
$T_1^5\langle 16\rangle$	$T_2^4\langle 17\rangle$	$T_3^3\langle 18\rangle$	$T_4^2\langle 19\rangle$	$T_5^1\langle 20\rangle$	$T_6^0\langle 21\rangle$	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	…

可以证明 Romberg 方法是数值稳定的。下面通过实验阐述 Romberg 计算的详细步骤。

2. 实验目的与要求

- 熟悉 Romberg 积分方法的计算流程。
- 会使用作者编写的 Romberg 方法处理一般的数值积分问题。
- 最好能自行编程实现 Romberg 方法处理相关问题。
- 在程序设计中能够控制误差容限。

3. 实验内容与数据来源

用 Romberg 积分方法计算

$$S=\int_0^{1.5}\frac{x}{4+x^2}dx$$

要求误差控制在10^{-6}。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module Romberg
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Romberg 方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     方法函数
!     2.     测试函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,tol)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Romberg 方积分方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  func 外部函数
!      2.
!      3.  a,b 积分区间
!      4.  tol  积分误差容限
!
!  Output parameters  :
!      1.   s  积分结果
!
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i,j,k,m
!定义较大矩阵存放数据
!此处亦可定义可变维数组
!因 Romberg 积分收敛较快，实际上用不了很大的矩阵
real*8::T(1:50,0:49)
call func(fa,a)
call func(fb,b)
T(1,0)=(b-a)/2d0*(fa+fb)
do i=1,40
    s=0
   do j=1,2**(i-1)
```

```
      x1=a+(2*j-1)*(b-a)/(2d0**i)
      call func(f1,x1)
      s=s+f1
    end do
!计算 T(i,1)
    T(1,i)=T(1,i-1)/2d0+(b-a)*s/2d0**i
 !开始外推
    do m=1,i
      do k=i,1,-1
       temp=4d0**m*T(m,k)-T(m,k-1)
       T(m+1,k-1)=temp/(4d0**m-1)
      end do
    end do
!计算最后两相邻元素绝对误差
     del=dabs(T(m,0)-T(m-1,0))
!如果误差小于给定的容限，则迭代停止
     if (del<tol) exit
end do
!最后一个对角线元素作为计算结果
     s=T(m,0)
end subroutine solve
subroutine fun1(f,x)
!----------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.     f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=x/(4+x**2)
end subroutine fun1
end module romberg
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  Romberg 方法计算数值积分主函数
!
```

```
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!-----------------------------------------------------
use Romberg
implicit real*8(a-z)
integer::n
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
call solve(fun1,s,0d0,1.5d0,1d-7)
write(11,102)s
101 format(/,T5,'Romberg 方法计算数值积分',/)
102 format(T5,T5,'积分结果：',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 9-5 所示。

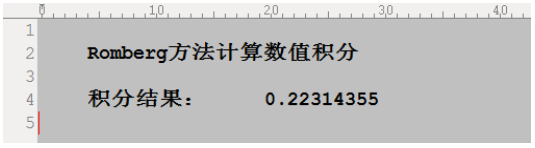


图 9-5 Romberg 方法计算的积分结果

Romberg 积分方法是本章的一个重点，虽然公式看上去并不是很难，然而程序设计时候需要较多的技巧，建议读者最好能自行尝试编写一下 Romberg 积分的程序。

9.6 Gauss-Legendre积分

1. 实验基本原理

从本实验开始，在接下来的几个实验中介绍 Gauss 型积分方法。其中需要用到正交多项式的一些理论，正交多项式在数值分析中是基本的工具之一。本实验就介绍 Gauss-Legendre 积分方法。

Gauss-Legendre 求积公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

其中 x_k 为 Legendre 多项式在$[-1,1]$区间上的零点。

n 阶 Legendre 多项式定义为：

$$P_n(t)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dt^n}\left[\left(t^2-1\right)^n\right]$$

A_k 为权系数，

$$A_k=\frac{2}{\left(1-x_k\right)^2\left[P_n'(x_k)\right]^2}=\frac{2\left(1-x_k\right)^2}{n^2\left[P_n(x_k)\right]^2}$$

对于一般的积分区间$[a,b]$，可以做变换

$$x=\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}t$$

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}\sum_{k=1}^{n}A_k f\left(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}x_k\right)$$

结点与权可以通过程序计算出来，而很多计算手册中都直接给出了常用的计算零点与系数。

如这里采用的零点为：

$$\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-0.9061798459\\-0.5384693101\\0\\0.5384693101\\0.9061798459\end{pmatrix}$$

相对应的权系数为：

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}0.2369268851\\0.4786286705\\0.5688888889\\0.4786286705\\0.2369268851\end{pmatrix}$$

即采用 5 阶的 Legendre 方法。

2. 实验目的与要求

- 了解 Gauss 系列方法的基本原理。
- 熟悉 Legendre 多项式的定义及性质。
- 能够计算出 n 阶 Legendre 多项式的零点及权系数。

- 能利用已知道的零点及对应的权系数快速计算相关积分问题。

3. 实验内容与数据来源

用 Gauss-Legendre 积分方法计算定积分

$$S = \int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x dx$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点

5. 程序代码

```
module Gauss_Legendre
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Description :   高斯-勒让德计算数值积分模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   要计算的函数
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : Gauss-Legendre 积分
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    func  外部函数
```

```
!      2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!      1.    s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i
real*8::node(5),w(5),t(5)
node=(/-0.9061798459,-0.5384693101,0,0.5384693101,0.9061798459/)
w=(/0.2369268851,0.4786286705,0.5688888889,&
  0.4786286705,0.2369268851/)
  t=(b+a)/2d0+(b-a)*node/2d0
s=0
do i=1,5
  call func(fx,t(i))
  s=s+fx*w(i)
end do
s=s*(b-a)/2d0
end subroutine solve
subroutine fun1(fx,x)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  fx  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
fx=dexp(x)*dcos(x)
```

```
    end subroutine fun1
    end module Gauss_Legendre
    program main
    !--------------------------------------program comment
    !  Version   :  V1.0
    !  Coded by  :  syz
    !  Date      :  2010-5-30
    !-----------------------------------------------------
    !  Purpose   :  主函数
    !
    !-----------------------------------------------------
    !  In put data  files :
    !      1.
    !      2.
    !  Output data files  :
    !      1.  result.txt  计算结果存放文件
    !      2.
    !-----------------------------------------------------
    !  Post Script :
    !      1.
    !      2.
    !-----------------------------------------------------
    use Gauss_Legendre
    implicit real*8(a-z)
    open(unit=11,file='result.txt')
    pi=3.141592653589793238D0
    call solve(fun1,s,0d0,pi)
    write(11,101)s
    101 format(/,T5,'Gauss-Legendre 积分',//,&
              T3,'积分结果为: ',F12.5  )
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，打开该文件如图 9-6 所示。

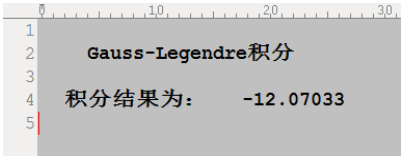


图 9-6　Guass-Legendre 积分结果

从运算结果来看，Gauss-Legendre 方法是行之有效的。采用 Gauss-Legendre 方法求积的余项为：

$$R(f)=\frac{2^{2n+1}}{2n+1}\frac{(n!)^4}{\left[(2n!)\right]^3}f^{(2n)}(\xi),\xi\in[-1,1]$$

高阶 Legendre 方法的零点和权系数可以通过查表得到，也可以通过编程计算而得。这里不作过多介绍。

9.7　Gauss-Laguerre方法计算反常积分

1. 实验基本原理

对于区间在$[0,\infty]$上的积分

$$S=\int_0^{\infty} f(x)dx$$

n 个结点 Gauss-Laguerre 求积公为

$$S\approx\sum_{k=1}^{n}A_k f(x_k)$$

其中 x_k 为零点，A_k 为权系数

$$A_k=\frac{x_k}{(n+1)^2}\left[L_{n+1}(x_k)\right]^2$$

Laguerre 多项式为

$$L_n(x)=e^x\frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right),0\le x<\infty$$

这里采用 5 阶的 Laguerre 多项式，其零点为

$$\mathbf{x}=\begin{pmatrix}0.2635599\\1.4134029\\3.596246\\7.0858099\\12.6408\end{pmatrix}$$

相应的权系数为

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}0.6790941054\\1.638487956\\2.769426772\\4.315944\\7.10489623\end{pmatrix}$$

2. 实验目的与要求

- 知道 Laguerre 多项式的定义。
- 熟悉 Laguerre 多项式的重要性质。
- 能够计算出 Laguerre 多项式的零点以及相应的权系数。
- 能利用已知的零点及权系数进行相关反常积分的数值运算。

3. 实验内容与数据来源

计算反常积分

$$S = \int_0^{\infty} e^{-x} \sin x dx$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数

5. 程序代码

```
module Gauss_Laguerre
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-30
!-------------------------------------------------------
!  Description :   高斯-拉盖尔计算数值积分模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   要计算的函数
!-------------------------------------------------------
contains
```

```
subroutine solve(func,s)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : Gauss-Laguerre 积分
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    func  外部函数
!      2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!      1.    s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i
real*8::node(5),Ae(5)
node=(/0.263560319718d0,&
      1.413403059107d0,&
      3.596425771041d0,&
      7.085810005859d0,&
     12.640800844276d0  /)
Ae=(/0.67909404221d0,&
    1.63848787360d0,&
    2.76944324337d0,&
    4.31565690092d0,&
    7.21918635435d0  /)
s=0d0
do i=1,5
  call func(fx,node(i))
  s=s+Ae(i)*fx
end do
end subroutine solve
subroutine fun1(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
```

```
!      1.  fx  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
fx=dexp(-x)*dsin(x)
end subroutine fun1
end module Gauss_Laguerre
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt  计算结果存放文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use Gauss_Laguerre
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
call solve(fun1,s)
write(11,101)s
101 format(/,T5,'Gauss-Laguerre 积分',//,&
          T3,'积分结果为: ',F12.8  )
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，结果如图 9-7 所示。

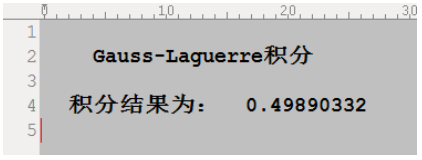


图 9-7　Gauss-Laguerre 计算反常积分

Gauss-Laguerre 求积公式余项为

$$R(f)=\frac{(n!)^2}{(2n)!}f^{(2n)}(\xi),0\le\xi<\infty$$

Gauss-Laguerre 方法对于形如

$$\int_0^\infty e^{-x}g(x)dx$$

的积分尤为有效。

9.8　Gauss-Hermite方法计算反常积分

1. 实验基本原理

Gauss-Hermite 方法可以计算区间在$(-\infty,\infty)$上的积分问题

$$S=\int_{-\infty}^{\infty}f(x)dx$$

n 个结点 Guass-Hermite 求积公式为

$$S\approx\sum_{k=1}^{n}A_k f(x_k)$$

其中x_k,A_k分别为结点以及相应的权系数。这里取 5 阶的 Hermite 多项式作为基函数，其相应的结点为

$$\mathbf{x}=\begin{pmatrix}-2.020182\\-0.9585719\\0\\0.9585719\\2.020182\end{pmatrix}$$

对应的权系数为

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}1.181469599\\0.9865791417\\0.9453089237\\0.9865791417\\1.181469599\end{pmatrix}$$

2. 实验目的与要求

- 熟悉 Hermite 多项式定义及其性质。
- 能采用数值方法获得多项式的值、零点、权系数。
- 能构造出低阶次的 Gauss-Hermite 求积公式。
- 能根据已知的零点及其对应的权系数用数值方法实现 Gauss-Hermite 法求积分。

3. 实验内容与数据来源

采用 Gauss-Hermite 方法计算反常积分

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数

5. 程序代码

```
module Gauss_Hermite
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Description :   Gauss-Hermite 计算数值积分模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   要计算的函数
!-----------------------------------------------------
contains
```

```
subroutine solve(func,s)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : Gauss-Hermite 积分
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    func  外部函数
!      2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!      1.    s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i
real*8::node(5),Ae(5)
node=(/-2.020182870456086d0,&
      -0.958572464613819d0,&
                    0d0,&
     0.958572464613819d0,&
     2.020182870456086d0  /)
Ae=(/1.1814886255360d0,&
     0.9865809967514d0,&
     0.9453087204829d0,&
     0.9865809967514d0,&
     1.1814886255360d0  /)
s=0d0
do i=1,5
  call func(fx,node(i))
  s=s+Ae(i)*fx
end do
end subroutine solve
subroutine fun1(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
```

```
!      1.  fx  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
fx=dexp(-x**2)
end subroutine fun1
end module Gauss_Hermite
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt  计算结果存放文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use Gauss_Hermite
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
call solve(fun1,s)
write(11,101)s
101 format(/,T5,'Gauss-Hermite 积分',//,&
          T3,'积分结果为: ',F12.8  )
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，内容如图 9-8 所示。

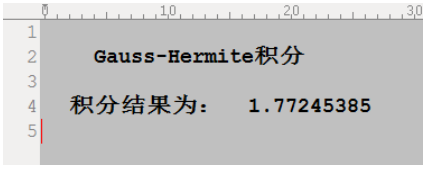


图 9-8　Gauss-Hermite 积分结果

Gauss-Hermite 求积方法，尤其实用于形如

$$S=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}g(x)dx$$

的积分。

Hermite 多项式是微分方程

$$\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+2ny=0$$

的一个特解，可以表示为

$$H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

$H_n(x)$ 有如下的递推关系

$$H_0(x)=1$$
$$H_1(x)=2x$$
$$H_n(x)=2xH_{n-1}(x)-2(n-1)H_{n-2}(x),n\geq 2$$

9.9　复合高斯积分法

1. 实验基本原理

高斯积分法具有较高的精度，在实际应用时如果积分区间较大，为了提高精度还可以采用复合高斯积分方法。即对积分区间划分若干小区间，在小区间分别使用高斯积分法，最后对各积分区间求和。算法如下：

01　$h=\dfrac{b-a}{n}$

02　对 $i=1,2,\cdots,n$

$c=a+(i-1)\times$

$d=a+i\times h$

调用单区间高斯-勒让德积分函数，计算出子区间积分 s_i。

03　$S=\sum_{i=1}^{n}s_i$。

2. 实验目的与要求

- 复习高斯积分方法。

- 会自行构造复合高斯积分方法。
- 能够编程实现复合高斯积分方法。

3. 实验内容与数据来源

计算积分

$$I=\int_1^2\frac{1}{x}dx$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
N	INTEGER	区间划分个数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module com_Gauss
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Description :  复合高斯勒让德方法计算定积分模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!      1.   复合方法函数
!      2.   单区间点高斯勒让德积分函数
!      3.   要计算的函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合点高斯勒让德积分函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1. func 外部函数
!      2. a,b 积分区间
!      3. n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!      1.  s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.   需要调用单区间高斯勒让德公式函数
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::n,i
hstep=(b-a)/n
s=0
do i=1,n
    c=a+(i-1)*hstep
    d=a+i*hstep
   call GL(func,s1,c,d)
   s=s+s1
end do
end subroutine solve
subroutine GL(func,s,a,b)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :5 点 Gauss-Legendre 积分
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    func  外部函数
!      2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!      1.    s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
```

```
external func
integer::i
real*8::node(5),w(5),t(5)
node=(/-0.9061798459,-0.5384693101,0,0.5384693101,0.9061798459/)
w=(/0.2369268851,0.4786286705,0.5688888889,&
  0.4786286705,0.2369268851/)
  t=(b+a)/2d0+(b-a)*node/2d0
s=0
do i=1,5
  call func(fx,t(i))
  s=s+fx*w(i)
end do
s=s*(b-a)/2d0
end subroutine GL
subroutine fun1(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  f 因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=1/x
end subroutine fun1
end module com_Gauss
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-29
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合高斯法主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.   result.txt 计算结果
!      2.
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!-----------------------------------------------------
use com_Gauss
implicit real*8(a-z)
integer::n
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
!划分个区间
call solve(fun1,s,1d0,2d0,4)
write(11,102)s
101 format(/,T5,'复合高斯数值积分',/)
102 format(T5,'积分结果: ',F15.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 9-9 所示。

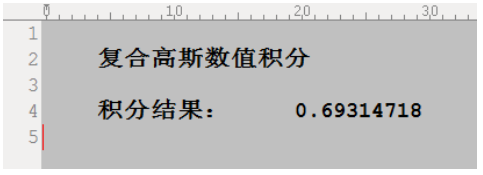


图 9-9　复合高斯数值积分

高斯积分方法是较为优秀的数值积分方法，把高斯积分法采用复合方法使用，虽然这个思想的产生很简单，但无疑这是计算数值积分中很有效的方法。

9.10　变步长高斯积分方法

1. 实验基本原理

上一节介绍的复合高斯数值积分方法有较高的精度，然后需要用户判断区间划分细度，不能根据精度需要求自信判断划分细度。由此，可以先给初始划分细度，然后在此基础上划分细度加倍，对划分前后分别使用复合高斯积分方法。比较前后两次的计算误差，如果误差大于给定的误差容限，则重复加倍划分，直到满足精度需求后退出循环。算法如下：

01 设置 $m=2$。将积分区间划分为 m 个子区间。

02 对 $i=1,2,\cdots$

采用复合高斯积分方法计算 m 个区间积分结果，记为 s_1。

$m=2\times m$，区间划分细度加倍。

采用复合高斯积分方法计算 m 个区间积分结果，记为 s_2（此时 m 已经加倍）。

如果 $|s_2-s_1|<\varepsilon$，则退出循环，ε 为给定的误差容限。

03 取积分结果为 s_2，并记录最终的 m。

04 计算结束。

2. 实验目的与要求

- 复习高斯积分方法与复合高斯积分方法。
- 能够自行给出变步长的判断方法。
- 能够编程实现变步长高斯积分法。

3. 实验内容与数据来源

采用变步长高斯积分方法计算定积分

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{1}{x^4+x^2+0.9}dx$$

要求精度控制在 10^{-10} 之内。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	区间左端点
B	REAL*8	区间右端点
M	INTEGER	实际区间划分个数
TOL	REAL*8	误差容限

5. 程序代码

```
module auto Gauss
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
```

```
!  Date       :  2010-5-31
!-----------------------------------------------------
!  Description :  变步长高斯勒让德方法计算定积分模块
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   变步长方法函数
!     2.   复合高斯勒让德积分函数
!     2.   单区间点高斯勒让德积分函数
!     3.   要计算的函数
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,tol,M)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  变步长高斯积分方法
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  func 外部函数（待计算的函数）
!      2.  s 积分结果
!      3.  a,b 积分区间
!      4.  tol  误差容限
!  Output parameters  :
!      1.  s  积分结果
!      2.  M  实际区间划分个数
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.  需要调用复合高斯积分函数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::m,i
m=2
!最大允许重新划分次，
do i=1,20
call com Gauss(func,s1,a,b,m)
!划分细度加倍
m=m*2
call com Gauss(func,s2,a,b,m)
!前后两次积分值之差
del=dabs(s2-s1)
if (del<tol) exit
end do
s=s2
```

```
end subroutine solve
subroutine com_Gauss(func,s,a,b,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  复合点高斯勒让德积分函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1. func 外部函数
!       2. a,b 积分区间
!       3. n 区间划分个数
!  Output parameters  :
!       1.  s 积分结果
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.   需要调用单区间高斯勒让德公式函数
!       2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::n,i
hstep=(b-a)/n
s=0
do i=1,n
    c=a+(i-1)*hstep
    d=a+i*hstep
   call GL(func,s1,c,d)
   s=s+s1
end do
end subroutine com Gauss
subroutine GL(func,s,a,b)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :5 点 Gauss-Legendre 积分
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.    func  外部函数
!       2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!       1.    s 积分结果
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
```

```
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i
real*8::node(5),w(5),t(5)
node=(/-0.9061798459,-0.5384693101,0,0.5384693101,0.9061798459/)
w=(/0.2369268851,0.4786286705,0.5688888889,&
  0.4786286705,0.2369268851/)
  t=(b+a)/2d0+(b-a)*node/2d0
s=0
do i=1,5
  call func(fx,t(i))
  s=s+fx*w(i)
end do
s=s*(b-a)/2d0
end subroutine GL
subroutine fun1(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x  自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  f 因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=1/(x**4+x**2+0.9d0)
end subroutine fun1
end module auto Gauss
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-31
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  变步长高斯法主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
```

```
!       2.
!  Output data files  :
!       1.   result.txt 计算结果
!       2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!-------------------------------------------------------
use auto_Gauss
implicit real*8(a-z)
integer::m
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
!用 m 记录实际区间划分细度
call solve(fun1,s,-1d0,1d0,1d-10,m)
write(11,102)m,s
101 format(/,T5,'变步长高斯积分',/)
102 format(T5,'实际划分区间为：',I5,/,T5,'积分结果：',F15.10)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，内容如图 9-10 所示。

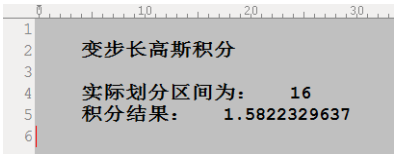


图 9-10 变步长高斯积分计算结果

这一节在复合高斯积分法的基础上作以改进，相比于普通的符合高斯积分法更为适用，因为计算机会自己根据精度来做出适当的调整。

9.11 重积分的数值方法

1. 实验基本原理

对于任意区域的重积分问题 $\iint_{\Omega} f(x,y)dxdy$，可以构造一个矩形区域 R，使 R 覆盖原积分区域 Ω，并且 R 的边平行于坐标轴。考虑辅助函数 F，其定义为

$$F(x,y)=\begin{cases} f(x,y),(x,y)\in\Omega \\ 0, \qquad (x,y)\in R-\Omega \end{cases}$$

如此便有

$$\iint_{\Omega} f(x,y)dxdy=\iint_{R} F(x,y)dxdy$$

辅助函数用计算机编程在数值上是很容易实现的。

如此可以看出，任意区域重积分问题转化为矩形区域情况，故这里就仅介绍矩形区域重积分方法。

矩形区域重积分的计算有多种方法，这里介绍高斯型求积方法。先考虑积分区间在

$[-1,1]\times[-1,1]$有求积公式

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} f(x,y)\,dxdy \approx \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_i A_j f(t_i,t_j)$$

对于一般区间的矩型求积方法，可以通过对积分区间作线性变换，则有

$$\int_{c}^{d}\int_{a}^{b} f(x,y)\,dxdy \approx \frac{(d-c)(b-a)}{4}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_i A_j f\left(\frac{a+b}{2}+\frac{b-a}{2}x_i,\frac{c+d}{2}+\frac{d-c}{2}y_j\right)$$

其中系数 A_iA_j 仍然同一元积分高斯方法中的系数。

2. 实验目的与要求

- 了解矩形区域重积分的重要性。
- 知道为什么一般区域问题数值方法可以很方便的化为矩形区域积分问题。
- 回顾一元数值积分的高斯方法。
- 能编程实现重积分的高斯方法。

3. 实验内容与数据来源

采用高斯-勒让德方法计算二重积分

$$\int_{1}^{1.5}\int_{1.4}^{2}\ln(x+2y)\,dxdy$$

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
S	REAL*8	积分结果
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
A	REAL*8	X 区间左端点
B	REAL*8	X 区间右端点
C	REAL*8	Y 区间左端点
D	REAL*8	Y 区间右端点

5. 程序代码

```
module dbquad
```

```
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-5-30
!-------------------------------------------------------
!  Description :   重积分之高斯勒让德方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   要计算的函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,s,a,b,c,d)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 重积分之高斯勒让德方法
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    func  外部函数
!      2.    a,b   积分区间
!  Output parameters  :
!      1.    s 积分结果
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  选用节点的公式
!      2.  计算时先把一般区间变换到[-1,1]区间上利用公式
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
external func
integer::i,j
real*8::node(5),w(5),t1(5),t2(5)
node=(/-0.9061798459,-0.5384693101,0,0.5384693101,0.9061798459/)
w=(/0.2369268851,0.4786286705,0.5688888889,&
  0.4786286705,0.2369268851/)
  t1=(b+a)/2d0+(b-a)*node/2d0
  t2=(c+d)/2d0+(d-c)*node/2d0
s=0
do i=1,5
   do j=1,5
  call func(fx,t1(i),t2(j))
  s=s+fx*w(i)*w(j)
  end do
end do
```

```
s=s*(b-a)/2d0*(d-c)/2d0
end subroutine solve
subroutine fun1(f,x,y)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  待计算的二元函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x , y 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  f  因变量
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
f=dlog(x+2d0*y)
end subroutine fun1
end module dbquad
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-5-30
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.  result.txt  计算结果存放文件
!      2.
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
use dbquad
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
pi=3.14159265389793238D0
call solve(fun1,s,1.4d0,2d0,1d0,1.5d0)
write(11,101)s
101 format(/,T5,'重积分之高斯方法',//,&
```

```
            T3,'积分结果为: ',F12.5  )
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 9-11 所示。

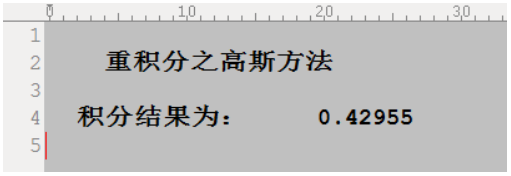


图 9-11 重积分计算结果

至此，介绍了重积分方法，实际上对于更高维数的积分问题，还有其他方法可以处理，比如蒙特卡罗方法等。

本章小结

在这一章中介绍了多种数值积分方法，其中梯形法与 simpson 方法是 Newton-Cotes 方法 n 为 1 与 2 时的积分公式，这两个方法放在前面容易理解积分的基本方法。其中比较重要的也比较实用的方法是 Romberg 方法和高斯型积分方法，这是这一章中的重点。本章还介绍了重积分的计算的高斯方法。要想从数学上更清晰的把握数值积分的思想，以及许多变形算法的原理，需要插值理论和多项式理论为基础。

第 10 章

◂常见的特殊函数计算▸

特殊函数又称为高等超越函数，特殊函数在自然科学许多领域都会涉及。比如地球物理、电磁场理论、量子力学、统计分布等领域都会涉及到。在数学物理方法中会介绍一些特殊函数理论，不过很多情况下数学物理方法中给出的特殊函数递推公式是不适合用于数值计算的。本章给出一些常见的特殊函数计算方法。

10.1 Gamma函数

1. 实验基本原理

Γ 函数定义为积分形式

$$\Gamma(z)=\int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}dt$$

计算Γ 函数的方法有多种，这里给出 Lanczos 导出的公式

$$\Gamma(z+1)=\left(z+\gamma+\frac{1}{2}\right)^{z+\frac{1}{2}}\exp\left(-z-\gamma-\frac{1}{2}\right)$$
$$\sqrt{2\pi}\left[c_0+\sum_{i=1}^{N}\frac{c_i}{z+i}+\varepsilon\right],(z>0)$$

计算时可以取 $\gamma=5,N=6$。系数可取

$$\mathbf{c}=\begin{pmatrix}76.18009172947146\\-86.50532032941677\\24.01409824083091\\-1.231739572450155\\0.1208650973866179\\-0.5395239384953\end{pmatrix}$$

因直接计算Γ函数很容易溢出，故通常计算Γ函数的对数值。按照以上公式计算误差可以控制在2×10^{-10}之内。

2. 实验目的与要求

- 了解 Gamma 函数的基本知识。
- 能够用给出的公式计算 Gamma 函数的对数值。
- 搞清楚计算中各量的意义。

3. 实验内容与数据来源

对$\mathbf{x}=(0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1.0)^T$，分别计算其 Gamma 函数值

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
LN_GAMMA	REAL*8	Gamma 函数的对数值
输入参变量	数据类型	变量说明
X0	REAL*8	自变量

5. 程序代码

```
module gammlog
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(ln_gamma,x0)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 伽马函数的对数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x0   自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   ln gamma  伽马函数的对数
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i
real*8::cof(6)
 cof=(/76.18009172947146d0,-86.50532032941677d0,&
    24.01409824083091d0,-1.231739572450155d0,&
     0.1208650973866179d-2,-.5395239384953d-5/)
temp1=dsqrt(2*3.141592653589793d0)
x=x0
y=x
tmp=x+5.5d0
tmp=(x+0.5d0)*dlog(tmp)-tmp
ser=1.000000000190015d0
do i=1,6
  y=y+1.d0
  ser=ser+cof(i)/y
end do
ln_gamma=tmp+dlog(temp1*ser/x)
end subroutine solve
end module gammalog
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 计算 Gamma 函数主程序
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
```

```
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
use gammalog
implicit real*8(a-z)
integer::i
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,101)
do i=1,10
   x=i/10d0
   call solve(y,x)
  write(11,102)x,dexp(y)
end do
101 format(/,T12,'Gamma 函数',//,&
          T9,'x',T18,'Gamma(x)',/)
102 format(T3,2F12.7)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 10-1 所示。

```
Gamma函数

      x          Gamma(x)

 0.1000000   9.5135077
 0.2000000   4.5908437
 0.3000000   2.9915690
 0.4000000   2.2181595
 0.5000000   1.7724539
 0.6000000   1.4891922
 0.7000000   1.2980553
 0.8000000   1.1642297
 0.9000000   1.0686287
 1.0000000   1.0000000
```

图 10-1　Gamma 函数计算结果

在计算 Gamma 函数值时，我们对原函数进行了指数运算。

10.2　不完全Gamma函数及其互补函数

1. 实验基本原理

不完全 Gamma 函数定义为

$$P(a,x)=\frac{\gamma(a,x)}{\Gamma(a)}=\frac{1}{\Gamma(a)}\int_0^{\infty}\exp(-t)t^{a-1}dt,(a>0)$$

$P(a,x)$ 的互补形式也称为不完全 Gamma 函数

$$Q(a,x)=1-P(a,x)=\frac{\Gamma(a,x)}{\Gamma(a)}=\frac{1}{\Gamma(a)}\int_x^{\infty}\exp(-t)t^{a-1}dt,(a>0)$$

$\gamma(a,x)$ 有如下的级数展开式：

$$\gamma(a,x)=\exp(-x)x^a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a+1+n)}x^n$$

$\Gamma(a,x)$ 可以用如下的连分式展开：

$$\Gamma(a,x)=\exp(-x)x^a\left(\cfrac{1}{x+1-a-\cfrac{1\cdot(1-a)}{x+3-a-\cfrac{2\cdot(2-a)}{x+5-a-\cdots}}}\right)$$

研究发现当 $x<a+1$ 时用级数展开的方法收敛较快，而当 $x>a+1$ 时连分式收敛较快。

2. 实验目的与要求

- 了解不完全 Gamma 函数的定义。
- 了解不完全 Gamma 函数的一些基本性质。
- 了解连分式逼近方法。
- 能够编程计算不完全 Gamma 函数及其互补形式。

3. 实验内容与数据来源

分别计算计算不完全 Gamma 函数 $P(1,1),Q(1,0.1)$。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	GP 中表示不完全 P(A,X)，GQ 中表示 Q(A,X)

输入参变量	数据类型	变量说明
A	REAL*8	参数
X	REAL*8	自变量

5. 程序代码

```
module incompGamma
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Description :   不完全 Gamma 函数及其互补形式
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     gp---求 P
!     2.     gq---求 Q
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine gp(fx,a,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 求 P（afa,x）
!
!  Post Script :
!      1.   当 x<a+1 时采用级数展开式计算
!      2.
!      3.   当不满足 x<a+1 时，实际上是直接计算互补函数 Q
!           然后，用-Q
!           互补函数的计算是用连分式逼近
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
```

```
implicit real*8(a-z)
if(x<a+1d0)then
  call series(fx1,a,x,gln)
  fx=fx1
else
  call contfra(fx2,a,x,gln)
  fx=1d0-fx2
endif
end subroutine gp
subroutine gq(fx,a,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 计算 Q
!
!  Post Script :
!      1.   当 x<a+1 时候，计算 Q 的互补形式 P，然后用-P
!      2.   计算 P 是用级数展开的方式
!      3.   不满足 x<a+1 时，采用连分式直接计算 Q
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if(x<a+1d0) then
  call series(fx1,a,x,gln)
  fx=1d0-fx1
else
  call contfra(fx2,a,x,gln)
  fx=fx2
endif
end subroutine gq
subroutine contfra(gammcf,a,x,gln)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 用级数展开方法求 P
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
```

```
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i,Imax
Imax=100
eps=3d-7
fpmin=1d-30
call lngamma(gln,a)
b=x+1d0-a
c=1d0/fpmin
d=1d0/b
h=d
do i=1,Imax
  an=-i*(i-a)
  b=b+2d0
  d=an*d+b
  if(abs(d)<fpmin) d=fpmin
  c=b+an/c
  if(abs(c)<fpmin) c=fpmin
  d=1d0/d
  del=d*c
  h=h*del
  if(abs(del-1d0)<EPS) then
    gammcf=exp(-x+a*log(x)-gln)*h
    return
  endif
end do
end subroutine contfra
subroutine series(gamser,a,x,gln)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :  用连分式逼近 Q
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
```

```
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::Imax,n
Imax=100
eps=3d-7
call lngamma(gln,a)
if(x<=0.) then
  if(x<0d0) pause 'x < 0 in gser'
  gamser=0d0
  return
endif
ap=a
sum=1d0/a
del=sum
do n=1,Imax
  ap=ap+1d0
  del=del*x/ap
  sum=sum+del
  if(abs(del)<abs(sum)*EPS) then
    gamser=sum*exp(-x+a*log(x)-gln)
    return
  end if
end do
end subroutine series
subroutine lngamma(ln gamma,x0)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 伽马函数的对数
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i
real*8::cof(6)
 cof=(/76.18009172947146d0,-86.50532032941677d0,&
    24.01409824083091d0,-1.231739572450155d0,&
     0.1208650973866179d-2,-.5395239384953d-5/)
temp1=dsqrt(2*3.141592653589793d0)
x=x0
y=x
tmp=x+5.5d0
tmp=(x+0.5d0)*dlog(tmp)-tmp
ser=1.000000000190015d0
do i=1,6
  y=y+1.d0
  ser=ser+cof(i)/y
end do
ln_gamma=tmp+dlog(temp1*ser/x)
end subroutine lngamma
end module incompGamma
program  main
```

```
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 不完全 Gamma 函数及其互补形式
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
use incompGamma
implicit real*8(a-z)
open(unit=11,file='result.txt')
call gp(a,1d0,1d0)
call gq(b,1d0,0.1d0)
write(11,101)a,b
101 format(/,T5,'不完全 Gamma 函数及其互补形式',//,&
          T3,'计算结果为: ',/,2(/F16.8))
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 10-2 所示。

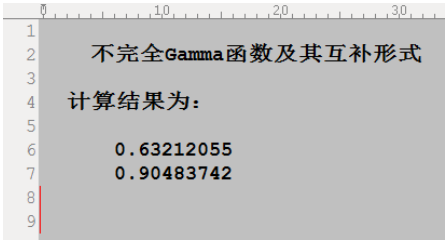


图 10-2　不完全 Gamma 函数及其互补形式

10.3　Beta函数及卡方分布函数

1. 实验基本原理

Beta 函数也是这一种比较常见的特殊函数，其定义为

$$B(z,w)=\int_0^1 t^{z-1}(1-t)^{w-1}\,dt$$

Beta 函数与Γ的关系为

$$B(z,w)=\frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}$$

因为前面已经编写好Γ函数的对数函数，所以这里可以直接调用。

χ^2 分布函数是统计学里比较常见的特殊函数，该函数与不完全Γ函数的关系为

$$P\left(\chi^2 \mid \nu\right)=P\left(\frac{\nu}{2},\frac{\chi^2}{2}\right)$$

因不完全Γ前面已经编写好程序，这里也可以直接调用。

2. 实验目的与要求

- 知道 Beta 函数的定义。
- 了解 Beta 函数与Γ的关系，并能编程计算。
- 了解 χ^2 分布函数及其与不完全Γ函数的关系。
- 会编程计算 χ^2 分布函数。

3. 实验内容与数据来源

1. 计算 $B(1.5,2.5)$， $B(2.3,7.2)$ 及 $B(4.6,2.4)$。
2. 计算当 $\nu=1,2,3,4,5$ 时， $\chi^2=0.5,5$ 的 χ^2 分布函数值 $P\left(\chi^2,\nu\right)$。

4. 函数调用接口说明

beta(fx,z,w)

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	Beta 函数值
输入参变量	数据类型	变量说明
Z	REAL*8	参数
W	REAL*8	参数

chi_sq(fx,x,v)

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	函数值
输入参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	自变量
V	INTEGER	参数

5. 程序代码

```
module beta_chi
```

```
!---------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-7-25
!-----------------------------------------------------
!  Description :   贝塔函数及 Chi square 函数
!
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine beta(fx,z,w)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-25
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 计算贝塔函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.  需要调用伽马函数对数
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   z
!      2.   w
!  Output parameters  :
!      1.  fx 贝塔函数值
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
call lngamma(fz,z)
call lngamma(fw,w)
call lngamma(fzw,z+w)
fx=dexp(fz+fw-fzw)
end subroutine beta
subroutine chi sq(fx,x,v)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : Chi squre 函数
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::v
call gp(fx,v/2d0,x/2d0)
end subroutine chi sq
subroutine gp(fx,a,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
```

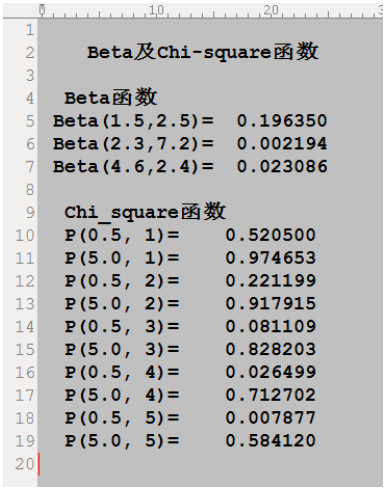
```
!  Purpose    : 求 P（afa,x）
!
!  Post Script :
!      1.   当 x<a+1 时采用级数展开式计算
!      2.
!      3.   当不满足 x<a+1 时，实际上是直接计算互补函数 Q
!           然后，用-Q
!           互补函数的计算是用连分式逼近
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if(x<a+1d0)then
  call series(fx1,a,x,gln)
  fx=fx1
else
  call contfra(fx2,a,x,gln)
  fx=1d0-fx2
endif
end subroutine gp
subroutine contfra(gammcf,a,x,gln)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 用级数展开方法求 P
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i,Imax
Imax=100
eps=3d-7
fpmin=1d-30
call lngamma(gln,a)
b=x+1d0-a
c=1d0/fpmin
d=1d0/b
h=d
do i=1,Imax
  an=-i*(i-a)
  b=b+2d0
  d=an*d+b
  if(abs(d)<fpmin) d=fpmin
  c=b+an/c
  if(abs(c)<fpmin) c=fpmin
  d=1d0/d
  del=d*c
  h=h*del
  if(abs(del-1d0)<EPS) then
```

```
      gammcf=exp(-x+a*log(x)-gln)*h
      return
    endif
  end do
  end subroutine contfra
  subroutine series(gamser,a,x,gln)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010.07.12
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose    :  用连分式逼近Q
  !
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer::Imax,n
  Imax=100
  eps=3d-7
  call lngamma(gln,a)
  if(x<=0.) then
    if(x<0d0) pause 'x < 0 in gser'
    gamser=0d0
    return
  endif
  ap=a
  sum=1d0/a
  del=sum
  do n=1,Imax
    ap=ap+1d0
    del=del*x/ap
    sum=sum+del
    if(abs(del)<abs(sum)*EPS) then
      gamser=sum*exp(-x+a*log(x)-gln)
      return
    end if
  end do
  end subroutine series
  subroutine lngamma(ln gamma,x0)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010.07.12
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose    : 伽马函数的对数
  !
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer:: i
  real*8::cof(6)
   cof=(/76.18009172947146d0,-86.50532032941677d0,&
      24.01409824083091d0,-1.231739572450155d0,&
       0.1208650973866179d-2,-.5395239384953d-5/)
  temp1=dsqrt(2*3.141592653589793d0)
  x=x0
  y=x
  tmp=x+5.5d0
  tmp=(x+0.5d0)*dlog(tmp)-tmp
  ser=1.000000000190015d0
```

```
    do i=1,6
      y=y+1.d0
      ser=ser+cof(i)/y
    end do
    ln_gamma=tmp+dlog(temp1*ser/x)
    end subroutine lngamma
    end module beta_chi
    program main
    !--------------------------------------program comment
    !  Version   :  V1.0
    !  Coded by  :  syz
    !  Date      :  2010-7-25
    !-----------------------------------------------------
    !  Purpose    : Beta 函数与 Chi  squre 函数主函数
    !
    !-----------------------------------------------------
    use beta_chi
    implicit real*8(a-z)
    integer::i
    open(unit=11,file='beta chi.txt')
    call beta(fb1,1.5d0,2.5d0)
    call beta(fb2,3.4d0,7.2d0)
    call beta(fb3,4.6d0,2.4d0)
    write(11,101)fb1,fb2,fb3
    101 format(/,T5,'Beta 及 Chi-square 函数',//,&
              T3,'Beta 函数',/,&
              T2,'Beta(1.5,2.5)=',F10.6,/,&
              T2,'Beta(2.3,7.2)=',F10.6,/,&
              T2,'Beta(4.6,2.4)=',F10.6,//,&
              T3,'Chi square 函数')
    do i=1,5
    call chi sq(a,0.5d0,i)
    call chi_sq(b,5d0,i)
    write(11,103)i,a
    write(11,104)i,b
    end do
    103 format(T3,'P(0.5,',I2,')=',F12.6)
    104 format(T3,'P(5.0,',I2,')=',F12.6)
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 10-3 所示。



```
   Beta及Chi-square函数

 Beta函数
Beta(1.5,2.5)=  0.196350
Beta(2.3,7.2)=  0.002194
Beta(4.6,2.4)=  0.023086

 Chi_square函数
 P(0.5, 1)=    0.520500
 P(5.0, 1)=    0.974653
 P(0.5, 2)=    0.221199
 P(5.0, 2)=    0.917915
 P(0.5, 3)=    0.081109
 P(5.0, 3)=    0.828203
 P(0.5, 4)=    0.026499
 P(5.0, 4)=    0.712702
 P(0.5, 5)=    0.007877
 P(5.0, 5)=    0.584120
```

图 10-3　Beta 函数与 Chi_square 函数

10.4　误差函数、余误差函数及标准正态分布表的制作

1. 实验基本原理

误差函数定义为

$$\operatorname{erf}(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \exp\left(-t^2\right)\mathrm{d}t$$

余误差函数为

$$\operatorname{erfc}(x)=1-\operatorname{erf}(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_x^{\infty} \exp\left(-t^2\right)\mathrm{d}t$$

误差函数及余误差函数与不完全伽马函数的关系为

$$\operatorname{erf}(x)=P\left(\frac{1}{2},x^2\right),(x\geq 0)$$

$$\operatorname{erfc}(x)=Q\left(\frac{1}{2},x^2\right),(x\geq 0)$$

由误差函数很容易计算正态分布概率积分

$$\Phi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x}\exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)dt=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$

2. 实验目的与要求

- 了解误差函数及余误差函数的定义。
- 会编程计算误差函数及余误差函数。
- 能够编程计算正态分布概率积分。

3. 实验内容与数据来源

1. 计算误差函数 erf(0.5)，及其互补形式 erfc(0.6)。
2. 制作标准正态分布表。

4. 函数调用接口说明

err(fx,x)

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	误差函数应变量
输入参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	误差函数自变量

errc(fx,x)

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	误差函数互补形式应变量
输入参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	误差函数互补形式自变量

normal(fx,x)

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	正态分布函数值
输入参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	正态分布函数自变量

5. 程序代码

```
module err_norm
!----------------------------------------module coment
!  Version    :  V1.0
!  Coded by   :  syz
!  Date       :  2010.07.12
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Description :   误差函数，互补形式，正态分布函数
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-----------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine err(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-15
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 误差函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if (x<0d0) then
 call gp(tmp1,0.5d0,x*x)
 fx=-tmp1
else
 call gp(tmp1,0.5d0,x*x)
 fx=tmp1
end if
end subroutine err
subroutine errc(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010 年月日
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 误差函数的互补形式
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if(x<0d0) then
 call gp(tmp1,0.5d0,x*x)
 fx=1+tmp1
else
 call gq(tmp1,0.5d0,x*x)
 fx=tmp1
end if
end subroutine errc
subroutine  normal(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-15
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 标准正态分布
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
t=x/dsqrt(2d0)
call err(fx,t)
```

```
fx=0.5d0+0.5d0*fx
end subroutine normal
subroutine gp(fx,a,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : 求 P（afa,x）
!
!  Post Script :
!      1.   当 x<a+1 时采用级数展开式计算
!      2.
!      3.   当不满足 x<a+1 时，实际上是直接计算互补函数 Q
!           然后，用-Q
!           互补函数的计算是用连分式逼近
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if(x<a+1d0)then
  call series(fx1,a,x,gln)
  fx=fx1
else
  call contfra(fx2,a,x,gln)
  fx=1d0-fx2
endif
end subroutine gp
subroutine gq(fx,a,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : 计算 Q
!
!  Post Script :
!      1.   当 x<a+1 时候，计算 Q 的互补形式 P，然后用-P
!      2.   计算 P 是用级数展开的方式
!      3.   不满足 x<a+1 时，采用连分式直接计算 Q
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
```

```
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
if(x<a+1d0) then
  call series(fx1,a,x,gln)
  fx=1d0-fx1
else
  call contfra(fx2,a,x,gln)
  fx=fx2
endif
end subroutine gq
subroutine contfra(gammcf,a,x,gln)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 用级数展开方法求 P
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i,Imax
Imax=100
eps=3d-7
fpmin=1d-30
call lngamma(gln,a)
b=x+1d0-a
c=1d0/fpmin
d=1d0/b
h=d
do i=1,Imax
  an=-i*(i-a)
  b=b+2d0
  d=an*d+b
  if(abs(d)<fpmin) d=fpmin
  c=b+an/c
  if(abs(c)<fpmin) c=fpmin
  d=1d0/d
  del=d*c
```

```
    h=h*del
    if(abs(del-1d0)<EPS) then
      gammcf=exp(-x+a*log(x)-gln)*h
      return
    endif
  end do
  end subroutine contfra
  subroutine series(gamser,a,x,gln)
  !---------------------------------subroutine  comment
  !  Version   :  V1.0
  !  Coded by  :  syz
  !  Date      :  2010.07.12
  !-----------------------------------------------------
  !  Purpose    :  用连分式逼近Q
  !
  !  Post Script :
  !       1.
  !       2.
  !       3.
  !-----------------------------------------------------
  !  Input  parameters  :
  !       1.
  !       2.
  !  Output parameters  :
  !       1.
  !       2.
  !  Common parameters  :
  !       1.
  !       2.
  !-----------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer::Imax,n
  Imax=100
  eps=3d-7
  call lngamma(gln,a)
  if(x<=0.) then
    if(x<0d0) pause 'x < 0 in gser'
    gamser=0d0
    return
  endif
  ap=a
  sum=1d0/a
  del=sum
  do n=1,Imax
    ap=ap+1d0
    del=del*x/ap
    sum=sum+del
    if(abs(del)<abs(sum)*EPS) then
      gamser=sum*exp(-x+a*log(x)-gln)
      return
    end if
  end do
  end subroutine series
  subroutine lngamma(ln_gamma,x0)
  !---------------------------------subroutine  comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 伽马函数的对数
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: i
real*8::cof(6)
 cof=(/76.18009172947146d0,-86.50532032941677d0,&
    24.01409824083091d0,-1.231739572450155d0,&
     0.1208650973866179d-2,-.5395239384953d-5/)
temp1=dsqrt(2*3.141592653589793d0)
x=x0
y=x
tmp=x+5.5d0
tmp=(x+0.5d0)*dlog(tmp)-tmp
ser=1.000000000190015d0
do i=1,6
  y=y+1.d0
  ser=ser+cof(i)/y
end do
ln gamma=tmp+dlog(temp1*ser/x)
end subroutine lngamma
end module err_norm
program  main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 误差函数，互补形式，及标准正态分布表
!               的制作
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
use err_norm
implicit real*8(a-z)
real*8::A(0:30,0:9),FX3(0:30,0:9)
integer::i,j
open(unit=11,file='result err.txt')
open(unit=12,file='normal.txt')
call err(fx1,0.5d0)
```

```
    call errc(fx2,0.6d0)
    do i=0,30
      do j=0,9
       a(i,j)=i/10d0+j/100d0
       call normal(tmp1,a(i,j))
       fx3(i,j)=tmp1
      end do
    end do
    write(11,100)fx1,fx2
    write(12,101)
    write(12,102)((fx3(i,j),j=0,9),i=0,30)
    100 format(/,t5,'误差函数及其互补形式计算结果',//,&
              T1,2F16.7)
    101 format(/,T28,'正态分布表',//)
    102 format(31(10F7.4,/))
    end program main
```

6. 实验结论

误差函数及其互补形式的计算结果保存在文件 result_err.txt 中，计算结果为 erf(0.5)= 0.5204999，erfc(0.6)= 0.3961439。

生成的标准正态分布计算结果保存在文件 normal.txt 中，整理如表 10-1 所示。

即

$$\Phi(x)=\int_{-\infty}^{x}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)\mathrm{d}u=P(X\le x)$$

表 10-1 标准正态分布表

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0.5	0.504	0.508	0.512	0.516	0.5199	0.5239	0.5279	0.5319	0.5359
0.1	0.5398	0.5438	0.5478	0.5517	0.5557	0.5596	0.5636	0.5675	0.5714	0.5753
0.2	0.5793	0.5832	0.5871	0.591	0.5948	0.5987	0.6026	0.6064	0.6103	0.6141

（续表）

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0.3	0.6179	0.6217	0.6255	0.6293	0.6331	0.6368	0.6406	0.6443	0.648	0.6517
0.4	0.6554	0.6591	0.6628	0.6664	0.67	0.6736	0.6772	0.6808	0.6844	0.6879
0.5	0.6915	0.695	0.6985	0.7019	0.7054	0.7088	0.7123	0.7157	0.719	0.7224
0.6	0.7257	0.7291	0.7324	0.7357	0.7389	0.7422	0.7454	0.7486	0.7517	0.7549
0.7	0.758	0.7611	0.7642	0.7673	0.7704	0.7734	0.7764	0.7794	0.7823	0.7852
0.8	0.7881	0.791	0.7939	0.7967	0.7995	0.8023	0.8051	0.8078	0.8106	0.8133
0.9	0.8159	0.8186	0.8212	0.8238	0.8264	0.8289	0.8315	0.834	0.8365	0.8389
1	0.8413	0.8438	0.8461	0.8485	0.8508	0.8531	0.8554	0.8577	0.8599	0.8621
1.1	0.8643	0.8665	0.8686	0.8708	0.8729	0.8749	0.877	0.879	0.881	0.883
1.2	0.8849	0.8869	0.8888	0.8907	0.8925	0.8944	0.8962	0.898	0.8997	0.9015

1.3	0.9032	0.9049	0.9066	0.9082	0.9099	0.9115	0.9131	0.9147	0.9162	0.9177
1.4	0.9192	0.9207	0.9222	0.9236	0.9251	0.9265	0.9279	0.9292	0.9306	0.9319
1.5	0.9332	0.9345	0.9357	0.937	0.9382	0.9394	0.9406	0.9418	0.9429	0.9441
1.6	0.9452	0.9463	0.9474	0.9484	0.9495	0.9505	0.9515	0.9525	0.9535	0.9545
1.7	0.9554	0.9564	0.9573	0.9582	0.9591	0.9599	0.9608	0.9616	0.9625	0.9633
1.8	0.9641	0.9649	0.9656	0.9664	0.9671	0.9678	0.9686	0.9693	0.9699	0.9706
1.9	0.9713	0.9719	0.9726	0.9732	0.9738	0.9744	0.975	0.9756	0.9761	0.9767
2	0.9772	0.9778	0.9783	0.9788	0.9793	0.9798	0.9803	0.9808	0.9812	0.9817
2.1	0.9821	0.9826	0.983	0.9834	0.9838	0.9842	0.9846	0.985	0.9854	0.9857
2.2	0.9861	0.9864	0.9868	0.9871	0.9875	0.9878	0.9881	0.9884	0.9887	0.989
2.3	0.9893	0.9896	0.9898	0.9901	0.9904	0.9906	0.9909	0.9911	0.9913	0.9916
2.4	0.9918	0.992	0.9922	0.9925	0.9927	0.9929	0.9931	0.9932	0.9934	0.9936
2.5	0.9938	0.994	0.9941	0.9943	0.9945	0.9946	0.9948	0.9949	0.9951	0.9952
2.6	0.9953	0.9955	0.9956	0.9957	0.9959	0.996	0.9961	0.9962	0.9963	0.9964
2.7	0.9965	0.9966	0.9967	0.9968	0.9969	0.997	0.9971	0.9972	0.9973	0.9974
2.8	0.9974	0.9975	0.9976	0.9977	0.9977	0.9978	0.9979	0.9979	0.998	0.9981
2.9	0.9981	0.9982	0.9982	0.9983	0.9984	0.9984	0.9985	0.9985	0.9986	0.9986
3	0.9987	0.9987	0.9987	0.9988	0.9988	0.9989	0.9989	0.9989	0.999	0.999

10.5　第一类整数阶贝塞尔函数

1. 实验基本原理

对于任何实数 ν，第一类贝塞尔函数 $J_\nu(x)$ 的积分表达式为

$$J_\nu = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\cos(\nu t - x\sin t)\,dt$$

亦可由级数表示为

$$J_\nu(x) = \left(\frac{1}{2}x\right)^\nu \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{1}{4}x^2\right)^k}{k!\Gamma(\nu+k+1)}$$

原则上此级数对任何 x 都收敛，但是当 x 非常大的时候，计算不是很有效。

计算一般阶第一类贝塞尔函数可以由 0 阶与 1 阶函数递推得到，0 阶与 1 阶函数可以按以下方法计算

当 $|x<8|$ 时，有：

$$J_0(x) = \frac{a_0x + a_1x^2 + a_2x^4 + a_3x^6 + a_4x^8 + a_5x^{10}}{b_0 + b_1x^2 + a_2x^4 + b_3x^6 + b_4x^8 + b_5x^{10}}$$

$$J_1(x)=\frac{x\left(c_0x+c_1x^2+c_2x^4+c_3x^6+c_4x^8+c_5x^{10}\right)}{d_0+d_1x^2+d_2x^4+d_3x^6+d_4x^8+d_5x^{10}}$$

其中

$$\begin{pmatrix}a_0\\a_1\\a_2\\a_3\\a_4\\a_5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}57568490574\\-13362590354\\651619640.7\\-11214424.18\\77392.33017\\-184.9052456\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}b_0\\b_1\\b_2\\b_3\\b_4\\b_5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}57568490411\\1029532985\\9494680.718\\59272.64853\\267.8532712\\1.0\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}c_0\\c_1\\c_2\\c_3\\c_4\\c_5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}72362614232\\-7895059235\\242396853.1\\-2972611.439\\15704.48260\\-30.16036606\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}d_0\\d_1\\d_2\\d_3\\d_4\\d_5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}144725228442\\2300535178\\18583304.74\\99447.43394\\376.9991397\\1.0\end{pmatrix}$$

当$|x|\geq 8$时，有：

$$J_0(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi|x|}}\left[R(z)\cos\theta-zS(z)\sin\theta\right]$$

$$\begin{cases}J_1(x)=\sqrt{\dfrac{2}{\pi|x|}}\left[P(z)\cos\varphi-zQ(z)\sin\varphi\right],x>0\\J_1(-x)=-J_1(x),x<0\end{cases}$$

其中

$$z=\frac{8}{|x|},\theta=|x|-\frac{\pi}{4},\varphi=|x|-\frac{3\pi}{4}$$

$$R(z)=r_0+r_1z^2+r_2z^4+r_3z^6+r_4z^8$$

$$S(z)=s_0+s_1z^2+s_2z^4+s_3z^6+s_4z^8$$

$$P(z)=p_0+p_1z^2+p_2z^4+p_3z^6+p_4z^8$$

$$Q(z)=q_0+q_1z^2+q_2z^4+q_3z^6+q_4z^8$$

系数如下

$$\begin{pmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \text{-0.1098628627E-2} \\ \text{0.2734510407E-4} \\ \text{-0.2073370639E-5} \\ \text{0.2093887211E-6} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ s_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{-0.1562499995E-1} \\ \text{0.1430488765E-3} \\ \text{-0.6911147651E-5} \\ \text{0.7621095161E-6} \\ \text{-0.934945152E-7} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ \text{0.183105E-2,} \\ \text{-0.3516396496E-4} \\ \text{0.2457520174e-5} \\ \text{-0.240337019E-6} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{0.04687499995} \\ \text{-0.2002690873E-3} \\ \text{0.8449199096E-5} \\ \text{-0.88228987E-6} \\ \text{0.105787412E-6} \end{pmatrix}$$

以上已经给出了 0 阶与 1 阶的第一类贝塞尔函数计算问题，适用于对于 $x>0, n\geq 2$ 情况，这个一方法是由 Miller 给出的。

对于给定的 $x\geq n$，选定较大的正整数 M，令

$$J_{M+1}^{*}=0, J_{M}^{*}=1$$

以递推式

$$J_{n-1}^{*}=\frac{2}{x}J_{n}^{*}-J_{n+1}^{*}, n=M, M-1, \cdots, 1$$

算出 $J_{M-1}^{*}, J_{M-2}^{*}, \cdots, J_{1}^{*}$。由公式

$$TK=J_{n}^{*}+2\sum_{i=1}^{\left[\frac{K}{2}\right]}J_{2i}^{*}$$

有

$$J_{n}=\frac{J_{n}^{*}}{TK}, (n\geq 2)$$

对于 $x<n$，就以递推公式

$$J_{n+1}(x)=\frac{2n}{x}J_{n}(x)-J_{n-1}(x)$$

2. 实验目的与要求

- 了解第一类整数阶贝塞尔函数的定义。
- 能够编程实现对 0 阶、1 阶贝塞尔函数的计算。
- 能够编程实现对任意整数阶第一类贝塞尔函数的计算。

3. 实验内容与数据来源

对 $\mathbf{x}=(0.5 \quad 5 \quad 50)$，分别计算 1 到 10 阶第一类贝塞尔函数值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	第一类整数阶贝塞尔函数值
输入参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8	自变量
N	INTEGER	阶数

5. 程序代码

```
module bessj
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-7-23
!-------------------------------------------------------
!  Description :   第一类整数阶贝塞尔函数模块
!
!  Post Script :
!     1.     入口函数 solve 中包含阶和阶情况
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.  0 阶函数
!     2.  1 阶函数
!     3.  任意阶函数
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(fx,x,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : 第一类任意整数阶贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.    计算方法实际是根据阶和阶而得出任意阶函数值
!      2.
!      3.
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!       1.     x 自变量
!       2.     n 阶数（n=0,1,2,3,.....）
!  Output parameters  :
!       1.     fx 贝塞尔函数值
!       2.
!  Common parameters  :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer:: n,index1
integer:: j,sum_j,m
! 如果输入是 0 阶，直接调用 0 阶函数
!调用结束后返回
  if (n==0) then
    call bessj0(bj0,x)
    fx=bj0
     return
  end if
!如果输入是 1 阶，直接调用 1 阶贝塞尔函数
!调用结束后返回
  if (n==1) then
   call bessj1(bj1,x)
   fx=bj1
   return
  end if
!以下计算 N>=2 的情况
index1=40
b_0=1d10
b_1=1d-10
ax=dabs(x)
if(ax==0d0) then
  fx=0d0
else if(ax>float(n)) then
  tox=2d0/ax
  call bessj0(bjm,ax)
  call bessj1(bj,ax)
!n>=2 的情况
  do j=1,n-1
    bjp=j*tox*bj-bjm
    bjm=bj
    bj=bjp
  end do
  fx=bj
else
  tox=2d0/ax
  m=2*((n+int(sqrt(float(index1*n))))/2)
  fx=0d0
  sum_j=0d0
  sum1=0d0
  bjp=0d0
  bj=1d0
  do j=m,1,-1
    bjm=j*tox*bj-bjp
    bjp=bj
    bj=bjm
    if(dabs(bj)>b_0) then
```

```
      bj=bj*b_1
      bjp=bjp*b_1
      fx=fx*b_1
      sum1=sum1*b_1
    endif
    if(sum_j/=0) sum1=sum1+bj
    sum_j=1-sum_j
    if(j==n) fx=bjp
  end do
  sum1=2d0*sum1-bj
  fx=fx/sum1
endif
if(x<0d0.and.mod(n,2)==1) then
fx=-fx
end if
end subroutine solve
subroutine bessj0(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 0 阶第一类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.     0 阶函数可以单独计算阶结果
!      3.     这里为任意阶函数所调用
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   fx 0 阶计算结果
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
data p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,-.1098628627d-2,.2734510407d-4,&
    -.2073370639d-5,.2093887211d-6/, q1,q2,q3,q4,q5&
     /-.1562499995d-1,.1430488765d-3,-.6911147651d-5,&
     .7621095161d-6,-.934945152d-7/
data r1,r2,r3,r4,r5,r6/57568490574.d0,-13362590354.d0,&
    651619640.7d0,-11214424.18d0,77392.33017d0,&
     -184.9052456d0/,s1,s2,s3,s4,s5,s6/57568490411.d0,&
     1029532985.d0,9494680.718d0,59272.64853d0,&
     267.8532712d0,1.d0/
if(dabs(x)<8d0) then
  y=x**2
  fx=(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*s6)))))
else
  ax=dabs(x)
  z=8d0/ax
  y=z**2
```

```
  xx=ax-0.785398164d0
  fx=dsqrt(.636619772/ax)*(dcos(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))-z*dsin(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))
endif
end subroutine bessj0
subroutine bessj1(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 1 阶第一类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.     可以单独计算阶函数结果
!      2.     这里为任意阶函数所调用
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1. fx 1 阶计算结果
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
data r1,r2,r3,r4,r5,r6/72362614232.d0,-7895059235.d0,&
    242396853.1d0,-2972611.439d0,15704.48260d0,&
     -30.16036606d0/,s1,s2,s3,s4,s5,s6/144725228442.d0,&
     2300535178.d0,18583304.74d0,99447.43394d0,&
     376.9991397d0,1.d0/
data p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,.183105d-2,-.3516396496d-4,&
    .2457520174d-5,-.240337019d-6/, q1,q2,q3,q4,q5/&
     .04687499995d0,-.2002690873d-3,.8449199096d-5,&
     -.88228987d-6,.105787412d-6/
if(dabs(x)<8.) then
  y=x**2
  fx=x*(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*s6)))))
else
  ax=dabs(x)
  z=8d0/ax
  y=z**2
  xx=ax-2.356194491d0
  fx=dsqrt(0.636619772d0/ax)*(dcos(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))-z*dsin(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))*sign(1d0,x)
endif
end subroutine bessj1
end module bessj
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :  第一类整数阶贝塞尔函数主函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-------------------------------------------------------
use bessj
implicit real*8(a-z)
integer::i
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,100)
do i=0,10
   call solve(a,0.5d0,i)
   call solve(b,5d0,i)
   call solve(c,50d0,i)
write(11,101)i,a
write(11,102)i,b
write(11,103)i,c
end do
100 format(/,T10,'第一类整数阶贝塞尔函数',/)
101 format(T2,'i=',I3,3x,'x=0.5',3x,'Bessj(x,i)=',F11.8)
102 format(T2,'i=',I3,3x,'x=5.0',3x,'Bessj(x,i)=',F11.8)
103 format(T2,'i=',I3,3x,'x=5 0',3x,'Bessj(x,i)=',F11.8)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，结果如下所示。

```
i=0    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.93846981
i=0    x=5.0    Bessj(x,i)=-0.17759677
i=0    x=5 0    Bessj(x,i)= 0.05581233
i=1    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.24226862
i=1    x=5.0    Bessj(x,i)=-0.32757914
i=1    x=5 0    Bessj(x,i)=-0.09751183
i=2    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.03060402
i=2    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.04656512
i=2    x=5 0    Bessj(x,i)=-0.05971280
i=3    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00256373
i=3    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.36483123
i=3    x=5 0    Bessj(x,i)= 0.09273480
i=4    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00016074
i=4    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.39123236
i=4    x=5 0    Bessj(x,i)= 0.07084098
```

```
i=5    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000805
i=5    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.26114055
i=5    x=5 0    Bessj(x,i)=-0.08140025
i=6    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000034
i=6    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.13104873
i=6    x=5 0    Bessj(x,i)=-0.08712103
i=7    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000001
i=7    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.05337641
i=7    x=5 0    Bessj(x,i)= 0.06049120
i=8    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000000
i=8    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.01840522
i=8    x=5 0    Bessj(x,i)= 0.10405856
i=9    x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000000
i=9    x=5.0    Bessj(x,i)= 0.00552028
i=9    x=5 0    Bessj(x,i)=-0.02719246
i=10   x=0.5    Bessj(x,i)= 0.00000000
i=10   x=5.0    Bessj(x,i)= 0.00146780
i=10   x=5 0    Bessj(x,i)=-0.11384785
```

10.6 第二类整数阶贝塞尔函数

1. 实验基本原理

第二类整数阶贝塞尔函数递推公式为

$$Y_{n+1}(x)=\frac{2n}{x}Y_n(x)-J_{n-1}(x),(x>0)$$

其中 0 阶与 1 阶函数可以按以下方法计算。

当 $x<8$ 时，有：

$$Y_0(x)=\frac{a_0+a_1y+a_2y^2+a_3y^3+a_4y^4+a_5y^5}{b_0+b_1y+b_2y^2+b_3y^3+b_4y^4+b_5y^5}+\frac{2}{\pi}J_0(x)\ln x$$

$$Y_1(x)=\frac{c_0+c_1y+c_2y^2+c_3y^3+c_4y^4+c_5y^5}{d_0+d_1y+d_2y^2+d_3y^3+d_4y^4+d_5y^5+d_6y^6}+\frac{2}{\pi}\left[J_1(x)\ln x-\frac{1}{x}\right]$$

其中 $y=x^2$，系数如下：

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{-2957821389} \\ 7062834065 \\ \text{-512359803} \\ 10879881.29 \\ \text{-86327.92757} \\ 228.4622733 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 40076544269 \\ 745249964.8 \\ 7189466.438 \\ 47447.26470 \\ 226.1030244 \\ 1.0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{-4.900604943E12} \\ 0.1275274390\text{E13} \\ \text{-0.5153438139E11} \\ 0.7349264551\text{E9} \\ \text{-0.4237922726E7} \\ 0.8511937935\text{E4} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \\ d^6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2499580570\text{E14} \\ 0.4244419664\text{E12} \\ 0.3733650367\text{E10} \\ 0.2245904002\text{E8} \\ 0.1020426050\text{E6} \\ 0.3549632885\text{E3} \\ 1.0 \end{pmatrix}$$

当 $x \geq 8$ 时，令 $z = \dfrac{8}{x}, y = z^2$，有

$$Y_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left[P(y)\sin\theta + zQ(y)\cos\theta\right]$$

其中 $\theta = x - \dfrac{\pi}{4}$，且

$$P(y) = p_0 + p_1 y + p_2 y^2 + p_3 y^3 + p_4 y^4$$

$$Q(y) = q_0 + q_1 y + q_2 y^2 + q_3 y^3 + q_4 y^4$$

系数为

$$\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ \text{-0.1098628627E-2} \\ 0.2734510407\text{E-4} \\ \text{-0.2073370639E-5} \\ 0.2093887211\text{E-6} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{-0.1562499995E-1} \\ 0.1430488765\text{E-3} \\ \text{-0.6911147651E-5} \\ 0.7621095161\text{E-6} \\ \text{-0.934945152E-7} \end{pmatrix}$$

$$Y_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\left[G(y)\sin\theta + zH(z)\cos\theta\right]$$

其中 $\theta = x - \dfrac{3\pi}{4}$，且

$$G(y) = g_0 + g_1 y + g_2 y^2 + g_3 y^3 + g_4 y^4$$

$$H(y) = h_0 + h_1 y + h_2 y^2 + h_3 y^3 + h_4 y^4$$

系数为：

$$\begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ g_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 0.183105\text{E-}2 \\ -0.3516396496\text{E-}4 \\ 0.2457520174\text{E-}5 \\ -0.240337019\text{E-}6 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.04687499995\text{E0} \\ -0.2002690873\text{E-}3 \\ 0.8449199096\text{E-}5 \\ -0.88228987\text{E-}6 \\ 0.105787412\text{E-}6 \end{pmatrix}$$

由以上公式可以看到，在计算 0 阶及 1 阶第二类贝塞尔函数时分别需要调用 0 阶及 1 阶第一类贝塞尔函数。

2. 实验目的与要求

- 了解第二类整数阶贝塞尔函数的定义及递推方法。
- 能够编程实现 0 阶及 1 阶级第二类贝塞尔函数的计算。
- 能够编程实现一般整数阶第二类贝塞尔函数的计算。

3. 实验内容与数据来源

对于 $x=(0.8 \quad 5.6 \quad 37)$，分别计算 0 到 10 阶的第二类整数阶贝塞尔函数值。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
FX	REAL*8	第二类整数阶贝塞尔函数值
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
X	REAL*8	函数自变量
N	INTEGER	第二类整数阶贝塞尔函数的阶数

5. 程序代码

```
module bessy
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-7-25
!-----------------------------------------------------
!  Description :   第二类整数阶贝塞尔函数模块
!
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Contains    :
!      1.     零一阶第二类贝塞尔函数
!      2.     零一阶第一类贝塞尔函数
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(fx,x,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-25
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : 任意阶第二类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.      由，阶递推
!      2.      而，阶级需要调用,1 阶第一类函数
!      3.
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    x  自变量
!      2.    n  阶数   n=0,1,2,....
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::j,n
!如果 N=0，则直接调用阶函数
!调用结束后返回
if(n==0)then
call bessy0(fx,x)
return
end if
!如果 N=1,则调用阶函数
!调用结束后返回
if(n==1)then
call bessy1(fx,x)
return
end if
call bessy0(by0,x)
call bessy1(by1,x)
!采用递推公式
do j=1,n-1
  byn=j*by*2d0/x-by0
  by0=by1
  by1=byn
end do
fx=by1
end subroutine solve
subroutine bessy0(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 0 阶第二类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.      需要调用阶第一类贝塞尔函数
!      2.
!      3.
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  fx 函数值
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
data p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,-.1098628627d-2,.2734510407d-4,&
    -.2073370639d-5,.2093887211d-6/, q1,q2,q3,q4,q5/&
     -.1562499995d-1,.1430488765d-3,-.6911147651d-5,&
     .7621095161d-6,-.934945152d-7/
data r1,r2,r3,r4,r5,r6/-2957821389.d0,7062834065.d0,&
    -512359803.6d0,10879881.29d0,-86327.92757d0,&
     228.4622733d0/,s1,s2,s3,s4,s5,s6/40076544269.d0,&
     745249964.8d0,7189466.438d0,47447.26470d0,&
     226.1030244d0,1.d0/
if(x<8d0)then
  y=x*x
! 调用阶第一类贝塞尔函数值
  call bessj0(tmp,x)
  fx=(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*s6)))))+&
         .636619772*tmp*dlog(x)
else
  z=8d0/x
  y=z*z
  xx=x-0.785398164d0
  fx=dsqrt(.636619772/x)*(dsin(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))+z*dcos(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))
end if
end subroutine bessy0
subroutine bessy1(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-25
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :  1 阶第二类贝塞尔函数
```

```
!
!  Post Script :
!      1.   需要调用阶第一类贝塞尔函数值
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1. fx 函数值
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
SAVE p1,p2,p3,p4,p5,q1,q2,q3,q4,q5,r1,r2,r3,r4,r5,r6,&
    s1,s2,s3,s4,s5,s6,s7
DATA p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,.183105d-2,-.3516396496d-4,&
     .2457520174d-5,-.240337019d-6/, q1,q2,q3,q4,q5/&
      .04687499995d0,-.2002690873d-3,.8449199096d-5,&
      -.88228987d-6,.105787412d-6/
DATA r1,r2,r3,r4,r5,r6/-.4900604943d13,.1275274390d13,&
    -.5153438139d11,.7349264551d9,-.4237922726d7,&
     .8511937935d4/,s1,s2,s3,s4,s5,s6,s7/.2499580570d14,&
     .4244419664d12,.3733650367d10,.2245904002d8,&
     .1020426050d6,.3549632885d3,1.d0/
if(x<8.)then
  y=x**2
  call bessj1(tmp,x)
  fx=x*(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*(s6+y*s7))))))&
         +.636619772*(tmp*dlog(x)-1./x)
else
  z=8./x
  y=z**2
  xx=x-2.356194491
  fx=dsqrt(.636619772/x)*(dsin(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))+z*dcos(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))
endif
end subroutine bessy1
subroutine bessj0(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 0 阶第一类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.     0 阶函数可以单独计算阶结果
!      3.     这里为任意阶函数所调用
!
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!      1.   x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.   fx 0 阶计算结果
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
DATA p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,-.1098628627d-2,.2734510407d-4,&
    -.2073370639d-5,.2093887211d-6/, q1,q2,q3,q4,q5&
     /-.1562499995d-1,.1430488765d-3,-.6911147651d-5,&
     .7621095161d-6,-.934945152d-7/
DATA r1,r2,r3,r4,r5,r6/57568490574.d0,-13362590354.d0,&
    651619640.7d0,-11214424.18d0,77392.33017d0,&
     -184.9052456d0/,s1,s2,s3,s4,s5,s6/57568490411.d0,&
     1029532985.d0,9494680.718d0,59272.64853d0,&
     267.8532712d0,1.d0/
if(dabs(x)<8d0) then
  y=x**2
  fx=(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*s6)))))
else
  ax=dabs(x)
  z=8d0/ax
  y=z**2
  xx=ax-0.785398164d0
  fx=dsqrt(.636619772/ax)*(dcos(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))-z*dsin(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))
endif
end subroutine bessj0
subroutine bessj1(fx,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    : 1 阶第一类贝塞尔函数
!
!  Post Script :
!      1.     可以单独计算阶函数结果
!      2.     这里为任意阶函数所调用
!      3.
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x 自变量
!      2.
!  Output parameters  :
!      1. fx 1 阶计算结果
!      2.
!  Common parameters  :
```

```
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
data r1,r2,r3,r4,r5,r6/72362614232.d0,-7895059235.d0,&
    242396853.1d0,-2972611.439d0,15704.48260d0,&
     -30.16036606d0/,s1,s2,s3,s4,s5,s6/144725228442.d0,&
     2300535178.d0,18583304.74d0,99447.43394d0,&
     376.9991397d0,1.d0/
data p1,p2,p3,p4,p5/1.d0,.183105d-2,-.3516396496d-4,&
    .2457520174d-5,-.240337019d-6/, q1,q2,q3,q4,q5/&
     .04687499995d0,-.2002690873d-3,.8449199096d-5,&
     -.88228987d-6,.105787412d-6/
if(dabs(x)<8.) then
  y=x**2
  fx=x*(r1+y*(r2+y*(r3+y*(r4+y*(r5+y*r6)))))/&
        (s1+y*(s2+y*(s3+y*(s4+y*(s5+y*s6)))))
else
  ax=dabs(x)
  z=8d0/ax
  y=z**2
  xx=ax-2.356194491d0
  fx=dsqrt(0.636619772d0/ax)*(dcos(xx)*(p1+y*(p2+y*&
        (p3+y*(p4+y*p5))))-z*dsin(xx)*(q1+y*(q2+y*&
         (q3+y*(q4+y*q5)))))*sign(1d0,x)
endif
end subroutine bessj1
end module bessy
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-7-23
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     :  第二类整数阶贝塞尔函数主函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
use bessy
implicit real*8(a-z)
integer::i
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,100)
do i=0,10
```

```
call solve(a,0.8d0,i)
call solve(b,5.6d0,i)
call solve(c,37.d0,i)
write(11,101)i,a
write(11,102)i,b
write(11,103)i,c
end do
100 format(/,T10,'第二类整数阶贝塞尔函数',/)
101 format(T2,'i=',I3,3x,'x=0.8',3x,'Bessj(x,i)=',E16.6)
102 format(T2,'i=',I3,3x,'x=5.6',3x,'Bessj(x,i)=',E16.6)
103 format(T2,'i=',I3,3x,'x=3 7',3x,'Bessj(x,i)=',E16.6)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，结果如下所示。

```
 i=  0   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.868023E-01
 i=  0   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.335444E+00
 i=  0   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.130715E+00
 i=  1   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.978144E+00
 i=  1   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.568056E-01
 i=  1   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.126295E-01
 i=  2   x=0.8   Bessj(x,i)=    0.868023E-01
 i=  2   x=5.6   Bessj(x,i)=    0.335444E+00
 i=  2   x=3 7   Bessj(x,i)=    0.130715E+00
 i=  3   x=0.8   Bessj(x,i)=    0.978144E+00
 i=  3   x=5.6   Bessj(x,i)=    0.568056E-01
 i=  3   x=3 7   Bessj(x,i)=    0.126295E-01
 i=  4   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.868023E-01
 i=  4   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.335444E+00
 i=  4   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.130715E+00
 i=  5   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.978144E+00
 i=  5   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.568056E-01
 i=  5   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.126295E-01
 i=  6   x=0.8   Bessj(x,i)=    0.868023E-01
 i=  6   x=5.6   Bessj(x,i)=    0.335444E+00
 i=  6   x=3 7   Bessj(x,i)=    0.130715E+00
 i=  7   x=0.8   Bessj(x,i)=    0.978144E+00
 i=  7   x=5.6   Bessj(x,i)=    0.568056E-01
 i=  7   x=3 7   Bessj(x,i)=    0.126295E-01
 i=  8   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.868023E-01
 i=  8   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.335444E+00
 i=  8   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.130715E+00
 i=  9   x=0.8   Bessj(x,i)=   -0.978144E+00
 i=  9   x=5.6   Bessj(x,i)=   -0.568056E-01
 i=  9   x=3 7   Bessj(x,i)=   -0.126295E-01
 i= 10   x=0.8   Bessj(x,i)=    0.868023E-01
 i= 10   x=5.6   Bessj(x,i)=    0.335444E+00
 i= 10   x=3 7   Bessj(x,i)=    0.130715E+00
```

本章小结

本章介绍了几种常见的特殊函数，除了介绍的几种特殊函数之外还有许多其他比较有用的特殊函数，限于篇幅，这里就不多做介绍。

关于特殊函数理论方面的知识可以参考王竹溪先生与郭敦仁先生所著的《特殊函数概论》，该书既照顾到理论性又类似于手册，是一本优秀的工具书。关于特殊函数计算方面的内容，如果想深入一步了解可以参看 Willian H．Press 等编著的《Numerical recipes》。

第 11 章

◂常微分方程（组）的数值方法▸

常微分方程数值方法是数值分析中最重要的内容之一，常微分方程数值方法包括初值问题与边值问题，这里主要介绍初值问题。为了让初学者逐步适应，在本章前两节介绍了经典的 RK 方法及 Gill 方法计算一阶微分方程方法。而后面的方法则以非线性方程组作为范例进行介绍。由微分方程基本理论可以知道，高阶方程（允许包含高阶方程组），最后都可以化为等价的一阶方程组进行计算。微分方程组的数值方法可以从一阶方程数值方法得以推广，

把一些变量改变为向量即可，好在现在的 Fortran 语言对数组的支持已经较 Fortran 77 大大增强，这就给程序设计带来了方便。对于 Euler 方法及低于 4 阶的 Rung-Kutta 方法因为比较简单，这里就略去，而直接从经典的 Rung-Kutta 开始介绍。

11.1　经典Rung-Kutta方法

1. 实验基本原理

对于常微分方程初值问题，总可以写为

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = f(x,t) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

求解微分方程初值问题的方法有很多，其中最常见的莫过于著名的经典的 Rung-Kutta 经典方法。以下简称 Rung-Kutta 方法为 RK 方法，RK 方法是一种典型的单步法，经典的 4 阶公式大家都很熟悉。

在给出公式之前，读者需要搞清楚微分方程数值方法中阶与级的含义。对于以上的微分方程显式单步法

$$x_{n+1}=x_n+h\phi(x_n,t_n,h)$$

称满足

$$x(t+h)-x(t)-h\phi(x(t),t,h)=O(h^{p+1})$$

的最大整数 p 称为该方法的阶。

显式的 RK 方法是一种显式单步法。R 级的显式 RK 方法形式为

$$x_{n+1}=x_n+h\sum_{r=1}^{R}c_rK_r \quad (n=0,1,...)$$

其中

$$\begin{cases}K_1=f(x_n,t_n)\\ K_r=f\left(x_n+h\sum_{s=1}^{r-1}b_{rs}K_s,t_n+a_rh\right),(r=2,3,...,R)\end{cases}$$

4 级 4 阶的 RK 方法又称为 RK 经典方法公式如下

$$\begin{cases}x_{n+1}=x_n+\dfrac{h}{6}(K_1+2K_2+2K_3+K_4)\\ K_1=f(x_n,t_n)\\ K_2=f\left(x_n+\dfrac{1}{2}hK_1,t_n+\dfrac{1}{2}h\right)\\ K_3=f\left(x_n+\dfrac{1}{2}hK_2,t_n+\dfrac{1}{2}h\right)\\ K_4=f(x_n+hK_3,t_n+h)\end{cases}$$

以上方法有时候称简称为 RK4 方法，该方法较简单，且精度还很不错，所以是最常见的一种微分方程初值方法，在精度要求不是很高的情况下，适合使用。

2. 实验目的与要求

- 复习微分方程初值理论。
- 了解 RK4 方法计算微分方程初值问题的算法。
- 能编程实现 RK4 方法实现对微分方程初值问题的计算。

3. 实验内容与数据来源

1. 用经典的 Rung-Kutta 方法计算微分方程

$$\begin{cases} y' = -y + t^2 + 1, t \in [0,1] \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

2. 计算微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = \dfrac{2}{t} y + t^2 e^t, t \in [1,2] \\ y(1) = 0 \end{cases}$$

4. 函数调用接口说明

RK4

输入参变量	数据类型	变量说明
T0	REAL*8	起始时刻
TT	REAL*8	结束时刻
Y0	REAL*8	初状态
N	INTEGER	积分步数

RK4_2

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
T0	REAL*8	起始时刻
TT	REAL*8	结束时刻
Y0	REAL*8	初状态
N	INTEGER	积分步数

5. 程序代码

```
module m_rk4
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   RK-4 经典方法计算微分方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.    RK4
!     2.    RK4_2  传递函数版本
!-------------------------------------------------------
contains
  subroutine rk4(t0,tt,y0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0         Vesion type 1
```

```
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-11
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  RK 经典方法计算常微分方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     t0 积分初时刻
!      2.     y0 初状态
!      3.     N  积分步数
!  Output parameters  :
!      1.
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    调用 func 子程序
!      2.
!-------------------------------------------------------
  implicit real*8(a-z)
  integer::N
!步长
  h=(tt-t0)/N
  t=t0
  y=y0
  do i=1,N
     call fun1(k1,t,y)
     call fun1(k2,t+h/2,y+h/2*k1)
     call fun1(k3,t+h/2,y+h/2*k2)
     call fun1(k4,t+h,y+h*k3)
     y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
     t=t0+i*h
     write(11,101)t,y
  end do
     101 format(T5,2F12.6)
  end subroutine rk4
subroutine rk4 2(func,t0,tt,y0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0         Vesion type 2
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-11
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  RK 经典方法计算常微分方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.     t0 积分初时刻
!      2.     y0 初状态
!      3.     N  积分步数
!  Output parameters  :
!      1.
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.    调用 func 子程序
!      2.
```

```
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
  !声明 func 是外部函数，这句不能省略
  !把外部函数当初参数传递
 external func
  integer::N
  h=(tt-t0)/N
  t=t0
  y=y0
   do i=1,N
     call func(k1,t,y)
     call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1)
     call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2)
     call func(k4,t+h,y+h*k3)
     y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
     t=t0+i*h
     write(12,101)t,y
  end do
  101 format(T5,2F12.6)
 end subroutine rk4_2
   subroutine fun1(f,t,y)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 待计算的函数 其中 f=(t,y)
!
!-----------------------------------------------------
   implicit real*8(a-z)
    f=-y+t**2+1
   end subroutine fun1

   subroutine fun2(f,t,y)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : 待计算的函数 其中 f=(t,y)
!
!-----------------------------------------------------
   implicit real*8(a-z)
   f=2/t*y+t**2*exp(t)
   end subroutine fun2
end module m_rk4
  program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   : RK 方法主程序
!
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Output data files  :
!      1.    fout1.txt
!      2.    fout2.txt
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  提供两个版本
!      2.
!-------------------------------------------------------
 use m_rk4
 implicit real*8(a-z)
 integer::N=20
 open(unit=11,file='fout1.txt')
 open(unit=12,file='fout2.txt')
 t0=0
 t1=1
 y0=1
 write(11,101)
 101 format(/,T5,'采用版本计算函数结果为：',/)
 call rk4(t0,t1,y0,N)
write(12,102)
102 format(/,T5,'采用版本计算函数结果为：',/)
 call rk4_2(fun1,t0,t1,y0,N)
 write(12,103)
 103 format(/,T5,'函数计算结果为：',/)
t0=1
 t1=2
 y0=0
 call rk4_2(fun2,t0,t1,y0,n)
 end program main
```

6. 实验结论

在这一个实验中，我们提供了两个版本，这两个版本算法没有任何区别，仅仅是编程方法上不同，rk4 方法在过程内部调用右函数，通常大部分时候，我们都这样设计程序。如果只是用一次过程或函数，则两种方法方便程度相当，但是如果经常调用某函数或者方法，则使用传递函数名则比较方便，尤其是函数名内部多次调用其他函数的时候。

就这里而言，如要经常使用 Rung-Kutta 方法去计算不同类型的问题，因为每次计算 Rung-Kutta 方法需要调用 4 次方程函数 $y' = f(t, y)$（通常简称为右函数），则每次调用时需要修改 rk4 函数内部的右函数名称 4 次，每次如此，则比较麻烦。对于高阶 RK 方法，则更麻烦。

和其他许多语言一样，Fortran 支持把过程名字或函数名当成参数传递出去。版本 2，只需要把函数名当成参数一样修改就可以了，不过这需要在过程内部用 external 修饰函数名，具体方法请参考 Fortran 语法书籍。

方程 1 的计算结果保存在文件 fout1.txt 中，结果如表 11-1 所示。

表 11-1　方程 1 的计算结果

序列	t_i	y_i
1	0.05000000	1.00004115
2	0.10000000	1.00032517

3	0.15000000	1.00108405
4	0.20000000	1.00253850
5	0.25000000	1.00489844
6	0.30000000	1.00836357
7	0.35000000	1.01312383

（续表）

序列	t_i	y_i
8	0.40000000	1.01935992
9	0.45000000	1.02724371
10	0.50000000	1.03693870
11	0.55000000	1.04860040
12	0.60000000	1.06237675
13	0.65000000	1.07840847
14	0.70000000	1.09682942
15	0.75000000	1.11776693
16	0.80000000	1.14134211
17	0.85000000	1.16767017
18	0.90000000	1.19686072
19	0.95000000	1.22901800
20	1.00000000	1.26424116

采用版本 2 计算方程 1 的结果与之相当，方程 2 的计算结果放在文件 fout2.txt 中，其计算结果如表 11-2 所示。

表 11-2　方程 2 的计算结果

序列	t_i	y_i
1	1.05000000	0.15365432
2	1.10000000	0.34591920
3	1.15000000	0.58178135
4	1.20000000	0.86664107
5	1.25000000	1.20634361
6	1.30000000	1.60721272
7	1.35000000	2.07608655
8	1.40000000	2.62035618
9	1.45000000	3.24800681
10	1.50000000	3.96766181
11	1.55000000	4.78862994
12	1.60000000	5.72095582
13	1.65000000	6.77547394
14	1.70000000	7.96386643
15	1.75000000	9.29872484
16	1.80000000	10.79361616
17	1.85000000	12.46315349
18	1.90000000	14.32307147
19	1.95000000	16.39030698

20	2.00000000	18.68308533

两个版本的算法是一样的，仅仅是程序设计的方法略不同而已。

11.2 Gill方法

1. 实验基本原理

四级四阶方法除了经典的 RK4 方法之外，比较著名的还有 Gill 方法，Gill 方法计算公式如下

$$x_{n+1}=x_n+\frac{h}{6}\left[K_1+\left(2-\sqrt{2}\right)K_2+\left(2+\sqrt{2}\right)K_3+K_4\right]$$

$$\begin{cases}K_1=f\left(x_n,t_n\right)\\ K_2=f\left(t_n+\dfrac{1}{2}h,x_n+\dfrac{1}{2}hK_1\right)\\ K_3=f\left(t_n+\dfrac{1}{2}h,x_n+\dfrac{\sqrt{2-1}}{2}hK_1+\left(1-\dfrac{\sqrt{2}}{2}\right)hK_2\right)\\ K_4=f\left(t_n+h,x_n-\dfrac{\sqrt{2}}{2}hK_2+\left(1+\dfrac{\sqrt{2}}{2}\right)hK_3\right)\end{cases}$$

研究表明，Gill 方法具有减小舍入误差的优点。不过 Gill 方法在递推过程中，需要反复计算 $\sqrt{2}$，在程序设计时为了提高运算效率，可以在递推之前把 $\sqrt{2}$ 先算出来用一个变量表示，然后在递推过程中直接使用变量替代 $\sqrt{2}$ 。

2. 实验目的与要求

- 了解 Gill 方法。
- 能够编程实现 Gill 方法计算微分方程初值问题。

3. 实验内容与数据来源

计算微分方程初值问题

$$\frac{dy}{dt}=\frac{(1+t)y^2}{2}$$

其中 $y(0)=1$，积分区间为 $t\in[0,1]$。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
T0	REAL*8	起始时刻

（续表）

输入参变量	数据类型	变量说明
TT	REAL*8	结束时刻
Y0	REAL*8	初状态
N	INTEGER	积分步数

5. 程序代码

```
module m_gill
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Gill 方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      gill---    Gill 方法函数
!     2.      func---    求解的函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(func,t0,tt,y0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  Gill 方法求解微分方程
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.         func 为外部子程序
!      2.
!  Output parameters  :
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!声明 func 为外部子程序
external func
integer::N,i
h=(tt-t0)/N
t=t0
y=y0
!先把根号算出来，这样不用每递推一步都要进行开方，而每
! 递推一步要用到次根号
sq2=dsqrt(2d0)
do i=1,N
```

```
      call func(k1,t,y)
      call func(k2,t+h/2,y+h*k1/2)
      call func(k3,t+h/2,y+(sq2-1)/2d0*h+(1-sq2/2)*h*k2)
      call func(k4,t+h/2,y-sq2/2*h*k2+(1+sq2/2)*h*k3)
      y=y+(k1+(2-sq2)*k2+(2+sq2)*k3+k4)*h/6
      t=t+h
      write(11,101)i,t,y
   end do
   101 format(5x,I4,2F15.8)
   end subroutine solve
     subroutine fun1(f,t,y)
   !--------------------------------subroutine  comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
   !  Date      :
   !-----------------------------------------------------
   !  Purpose   : 待计算的函数 其中 f=(t,y)
   !
   !-----------------------------------------------------
     implicit real*8(a-z)
      f=0.5d0*(1+t)*y**2
     end subroutine fun1
   end module m_gill
    program main
   !-------------------------------------program comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
   !  Date      :  2010-4-12
   !-----------------------------------------------------
   !  Purpose   : Gill 方法主程序
   !
   !-----------------------------------------------------
   !  Output data files  :
   !      1.    fout.txt
   !-----------------------------------------------------
   !  Post Script :
   !      1.
   !      2.
   !-----------------------------------------------------
    use m_gill
    implicit real*8(a-z)
    integer::N=20
    open(unit=11,file='fout1.txt')
    t0=0
    t1=1
    y0=1
    write(11,101)
    101 format(/,T5,'采用 Gill 方法计算微分方程：',/)
    call solve(fun1,t0,t1,y0,N)
   end program main
```

6. 实验结论

步长取 $h=0.5$，计算结果如表 11-3 所示。

表 11-3　Gill 方法计算结果

序列	t_i	y_i
1	0.05000000	1.02634656
2	0.10000000	1.05549514
3	0.15000000	1.08780570
4	0.20000000	1.12370814
5	0.25000000	1.16371977

（续表）

序列	t_i	y_i
6	0.30000000	1.20846811
7	0.35000000	1.25872131
8	0.40000000	1.31542931
9	0.45000000	1.37978031
10	0.50000000	1.45327971
11	0.55000000	1.53786261
12	0.60000000	1.63605781
13	0.65000000	1.75123294
14	0.70000000	1.88797164
15	0.75000000	2.05267378
16	0.80000000	2.25454879
17	0.85000000	2.50733839
18	0.90000000	2.83247817
19	0.95000000	3.26532042
20	1.00000000	3.86852431

可以看出 Gill 方法与 RK4 经典方法非常类似，仅仅是系数不同而已，前面已经提到，最好不要把 $\sqrt{2}$ 留在每一步递推过程中计算。

11.3　Rung-Kutta方法计算微分方程组

1. 实验基本原理

从本节开始，将以方程组为范例介绍微分方程组的数值方法，考虑到示范性，这里仍然以简单的 RK4 方法作为开始，介绍微分方程组的计算过程。

为了简洁起见，这里采用矩阵与向量的方法描述，这样的话前面介绍的 RK4 方法几乎可以不动的搬到这里来。不过这时候很多量已经不再是标量。RK4 计算微分方程组的方法如下。

$$\begin{cases}\mathbf{x}_{n+1}=\mathbf{x}_n+\dfrac{h}{6}\left(\mathbf{K}_1+2\mathbf{K}_2+2\mathbf{K}_3+\mathbf{K}_4\right)\\ \mathbf{K}_1=\mathbf{f}\left(\mathbf{x}_n,t_n\right)\\ \mathbf{K}_2=\mathbf{f}\left(\mathbf{x}_n+\dfrac{1}{2}h\mathbf{K}_1,t_n+\dfrac{1}{2}h\right)\\ \mathbf{K}_3=f\left(\mathbf{x}_n+\dfrac{1}{2}h\mathbf{K}_2,t_n+\dfrac{1}{2}h\right)\\ \mathbf{K}_4=f\left(\mathbf{x}_n+h\mathbf{K}_3,t_n+h\right)\end{cases}$$

采用向量表示方法，非常清晰、明了，对初学者有利的地方是有整体观点。在老的 Fortran77 语言中，一般对向量与矩阵的处理都需要用循环指标。

而现代的 Fortran 语言，对向量与矩阵的支持已经比较丰富，虽然还不及 MATLAB 那样数学工具那么灵活，但是在很多问题的处理上已经较为类似。从后面的程序我们将看到，在这个问题的程序设计上，与 RK4 方法的程序很接近，这为程序设计带了较大的便捷。

2. 实验目的与要求

- 复习常微分方程组初值理论。
- 了解微分方程组的数值计算过程。
- 能够编程实现 RK4 对方程组的计算。

3. 实验内容与数据来源

采用 Rung-Kutta 经典方法计算以下方程组

$$\begin{cases}\dfrac{dy_1}{dt}=y_2y_3\\ \dfrac{dy_2}{dt}=-y_1y_3\\ \dfrac{dy_3}{dt}=-0.51y_1y_2\end{cases},\quad \begin{cases}y_1(0)=0\\ y_2(0)=1\\ y_3(0)=1\end{cases}$$

积分区间为 $t\in[0,12]$

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数

T0	REAL*8	起始时刻
TT	REAL*8	结束时刻
Y0	REAL*8	初状态
N	INTEGER	方程组维数

5. 程序代码

```
module m_rk_ods
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   RK4 经典方法计算微分法方程组方法模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.     M ---积分区间划分的细度
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      RK   RK 方法
!     2.      fun  需要计算的函数
!-------------------------------------------------------
integer::M=100 !积分区间划分 N 步
contains
subroutine  solve(func,t0,tt,y0,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :      4 阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.          func  传递的右函数名
!      2.          t0 积分初时刻
!      3.          tt 积分结束时刻
!      4.          y0  初状态
!      5.          N 方程组的维数
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!方程组的维数
```

```
external func
integer::N
real*8::y0(N),y(N)
real*8::k1(N),k2(N),k3(N),k4(N)
h=(tt-t0)/M
t=t0
y=y0
do i=1,M
    call func(k1,t,y,N)
    call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1,N)
    call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2,N)
    call func(k4,t+h,y+h*k3,N)
    y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
    t=t0+i*h
    write(11,101)t,y
  end do
  101 format(<M+1>F12.6)
end subroutine solve
subroutine fun1(f,t,y,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的方程右函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    N  方程阶数
!      2.    t,y
!  Output parameters  :
!      1.    f
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  注意：在自治系统中，其实 t 是不起作用的
!      2.        如本例
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::f(N),y(N)
f(1)=y(2)*y(3)
f(2)=-y(1)*y(3)
f(3)=-0.51*y(1)*y(2)
end subroutine fun1
end module m_rk_ods
  program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-12
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 RK4 方法计算微分方程组
```

```
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.   fout.txt  存放计算结果
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
  use m_rk_ods
  implicit real*8(a-z)
  integer::N
  real*8::y(3),y0(3)
  open(unit=11,file='fout1.txt')
  write(11,101)
  101 format(/,T5,'采用 RK4 方法计算方程组',/)
  N=3
  t0=0
  tt=12
  y0=(/0,1,1/)
  call solve(fun1,t0,tt,y0,N)
end
```

6. 实验结论

解算结果保存在文件 fout.txt 中，打开文件可以看到计算结果如表 11-4 所示。

表 11-4　采用 RK4 计算结果

t	y_1	y_2	y_3
0.120000	0.119566	0.992826	0.996348
0.240000	0.236575	0.971613	0.985625
0.360000	0.348665	0.937247	0.968504
0.480000	0.453835	0.891085	0.946021
0.600000	0.550554	0.834799	0.919464
0.720000	0.637793	0.770208	0.890248
0.840000	0.715009	0.699114	0.859807
0.960000	0.782075	0.623184	0.829495
⋮	⋮	⋮	⋮
10.920000	0.251723	-0.967798	0.983709
11.040000	0.135236	-0.990812	0.995325
11.160000	0.015863	-0.999873	0.999935
11.280000	-0.103852	-0.994592	0.997246
11.400000	-0.221340	-0.975196	0.987428
11.520000	-0.334204	-0.942500	0.971100
11.640000	-0.440388	-0.897806	0.949257

11.760000	-0.538293	-0.842756	0.923158
11.880000	-0.626826	-0.779157	0.894211
12.000000	-0.705383	-0.708824	0.863852

表 11-4 中清晰的给出了各个分量随时间的变化。如前面提到的，这里建议使用现代的 Fortran 语言，而不必再使用老的 Fortran77，对每一个向量使用指标循环处理，那样程序设计既麻烦，又容易出错。

11.4 Adams-Bashforth 三步三阶方法

1. 实验基本原理

微分方程的计算分为单步法和多步法。前面介绍的 RK 方法属于典型的单步法，从本小节开始讲介绍一些常见的多步方法。

对于 n 维微分方程组

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dt} = f_1(t, y_1, y_2, ..., y_n) \\ \dfrac{dy_2}{dt} = f_2(t, y_1, y_2, ..., y_n) \\ \quad \vdots \\ \dfrac{dy_n}{dt} = f_2(t, y_1, y_2, ..., y_n) \end{cases}$$

满足初值条件

$$\begin{cases} y_1(t_0) = y_{10} \\ y_2(t_0) = y_{20} \\ \quad \vdots \\ y_n(t_0) = y_{n0} \end{cases}$$

可以简记为

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

其中

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}, \mathbf{y}_0 = \begin{pmatrix} y_{10} \\ y_{20} \\ \vdots \\ y_{n0} \end{pmatrix}$$

顾名思义，如果计算下一点的函数值，仅需要用到前一点的函数值，就称为单步法，而如果需要用到多点的函数值就称为多步法。本节介绍三步三阶的 Adams-Bashforth 方法，该方法的计算公式为

$$\mathbf{y}_{i+3}=\mathbf{y}_{i+2}+\frac{h}{12}\left(23\mathbf{f}_{i+2}-16\mathbf{f}_{i+1}+5\mathbf{f}_{i}\right)$$

可以看到多步法除了提供的初值之外，前面总会有几个点是一开始不能直接提供的，这时候可以采用单步法启动，或者构造自身迭代的方法。

2. 实验目的与要求

- 知道多步法与单步法的区别。
- 能够采用单步法为多步法的前几步提供启动条件。
- 能够编程实现三步三阶的 Adams-Bashforth 方法。

3. 实验内容与数据来源

计算微分方程组初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{dx_1}{dt}=x_2\\ \dfrac{dx_2}{dt}=-x_1\\ \dfrac{dx_3}{dt}=-x_3\end{cases},\begin{cases}x_1(0)=0\\ x_2(0)=1\\ x_3(0)=1\end{cases}$$

积分区间为$t\in[0,0.5]$。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
TA	REAL*8	起始时刻
TB	REAL*8	结束时刻
YA	REAL*8	初状态
N	INTEGER	方程组维数

5. 程序代码

```
module m_adam3
```

```
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-13
!-------------------------------------------------------
!  Description :   3 阶 Adms 方法计算微分法方程组模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      adam3 方法函数
!     2.      RK4  -修改的 RK4 阶方法提供起步
!     3.      func 需要计算的函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(ta,tb,ya,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :3 阶 Adms 方法计算微分法方程组方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  ta 起步时间
!      2.  tb 介绍时间
!      3.  ya 初状态
!      4.  N  方程组维数
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M=100
integer::i
real*8::ya(N),y0(N),y1(N),y2(N),y3(N),y4(N)
real*8::f0(N),f1(N),f2(N),f3(N)
h=(tb-ta)/M
t0=ta
y0=ya
t1=ta+h
t2=t1+h
call RK4(t0,t1,y0,y1,N)
!算出 y1
call RK4(t1,t2,y1,y2,N)
!算出 y2
    call  func(f0,t0,y0,N)
    !算出 f0
    call  func(f1,t1,y1,N)
```

```
      !算出 f1
      call  func(f2,t2,y2,N)
      !算出 f2
   do i=3,M
      y3=y2+h/12d0*(23d0*f2-16d0*f1+5d0*f0)
      t3=t2+h
      !输出计算结果
      write(11,101)t3,y3
      !  以下为各量更新
      t2=t2+h
       y2=y3
      f0=f1
      f1=f2
       call func(f2,t2,y2,N)
   end do
   101 format(T3,<N+1>f10.5)
   end subroutine solve
   subroutine  RK4(t0,tt,y0,yt,N)
   !---------------------------------subroutine  comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
   !  Date      :  2010-4-13
   !-----------------------------------------------------
   !  Purpose   :  修改后的阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
   !
   !-----------------------------------------------------
   !  Input  parameters  :
   !       1.
   !       2.          t0 积分初时刻
   !       3.          tt 积分结束时刻
   !       4.          y0 初状态
   !       5.          方程组的维数
   !-----------------------------------------------------
   implicit real*8(a-z)
   !方程组的维数
   integer::N,M=20
   real*8::y0(N),y(N),yt(N)
   real*8::k1(N),k2(N),k3(N),k4(N)
   h=(tt-t0)/M
   t=t0
   y=y0
   do i=1,M
      call func(k1,t,y,N)
      call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1,N)
      call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2,N)
      call func(k4,t+h,y+h*k3,N)
      y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
      t=t0+i*h
    end do
   yt=y
   end subroutine RK4
   subroutine func(f,t,y,N)
   !---------------------------------subroutine  comment
   !  Version   :  V1.0
   !  Coded by  :  syz
```

```
!  Date     :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的方程右函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    N  方程阶数
!      2.    t,y
!  Output parameters  :
!      1.    f
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  注意：在自治系统中，其实 t 是不起作用的
!      2.        如本例
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::f(N),y(N)
f(1)=y(2)
f(2)=-y(1)
f(3)=-y(3)
end subroutine func
end module m_adam3
  program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 Adams3 阶方法计算微分方程组的主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
  use m_adam3
  implicit real*8(a-z)
  integer::N
  real*8::y(3),y0(3),x(3)
  open(unit=11,file='fout1.txt')
  write(11,101)
  101 format(/,T5,'采用 Adams3 方法计算方程组',/)
  N=3
  t0=0
  tt=0.5
  y0=(/1,0,-1/)
  call solve(t0,tt,y0,N)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 fout.txt 中，计算结果如表 11-5 所示。

表 11-5　Adams-Bashforth 三步三阶方法计算结果

t	x_1	x_2	x_3
0.01500	0.99989	0.01500	0.98511
0.02000	0.99980	0.02000	0.98020
0.02500	0.99969	0.02500	0.97531
0.03000	0.99955	0.03000	0.97045
0.03500	0.99939	0.03499	0.96561
0.04000	0.99920	0.03999	0.96079
0.04500	0.99899	0.04498	0.95600
0.05000	0.99875	0.04998	0.95123
⋮	⋮	⋮	⋮
0.46500	0.89382	0.44842	0.62814
0.47000	0.89157	0.45289	0.62500

（续表）

t	x_1	x_2	x_3
0.47500	0.88929	0.45734	0.62189
0.48000	0.88699	0.46178	0.61878
0.48500	0.88467	0.46621	0.61570
0.49000	0.88233	0.47063	0.61263
0.49500	0.87997	0.47503	0.60957
0.50000	0.87758	0.47943	0.60653

在计算中需要多次计算右边函数 $\mathbf{f}$，如果是微分方程组的话，每计算一次右函数，需要对每一个分量都进行计算。对于初学者，需要说明的是，这里的多步法与单步法本身不限于微分方程还是微分法方程组。

一般而言，在高精度的计算中，多步法启动时候，最好采用精度较高的数值方法，这里作为范例以相对简单的 RK4 方法作为起步，对多步法的讨论本身没有影响。

11.5　Adams-Bashforth 四步四阶方法

1. 实验基本原理

这里再介绍一下 Adams-Bashforth 四步四阶的微分方程初值方法，用以计算常微分方程组问题。Adams-Bashforth 四步四阶方法的计算公式为

$$\mathbf{y}_{n+4}=\mathbf{y}_{n+3}+\frac{h}{24}\left(55\mathbf{f}_{n+3}-59\mathbf{f}_{n+2}+37\mathbf{f}_{n+1}-9\mathbf{f}_{n}\right)$$

如果是 m 维方程组，采用分量形式即为

$$\begin{cases} y_{n+4}^1 = y_{n+3}^1 + \dfrac{h}{24}\left(55 f_{n+3}^1 - 59 f_{n+2}^1 + 37 f_{n+1}^1 - 9 f_n^1\right) \\ y_{n+4}^2 = y_{n+3}^2 + \dfrac{h}{24}\left(55 f_{n+3}^2 - 59 f_{n+2}^2 + 37 f_{n+1}^2 - 9 f_n^2\right) \\ \vdots \\ y_{n+4}^m = y_{n+3}^m + \dfrac{h}{24}\left(55 f_{n+3}^m - 59 f_{n+2}^m + 37 f_{n+1}^m - 9 f_n^m\right) \end{cases}$$

其中上标表示方程的维数，下标表示递推的序列。

可以看到四步四阶方法，前几个点也需要额外的手段来提供，方法同样是可以采用单步法或者自身迭代来完成。

2. 实验目的与要求

- 了解 Adams-Bashforth 四步四阶方法的计算公式。
- 对于微分方程组能够用向量表示算法但需知道分量的意义。
- 能够采用有效的方法计算前面若干点，为多步法启动做准备。
- 会使用作者编写的程序计算微分方程组初值问题。
- 最好能自己编写出 Adams-Bashforth 四步四阶方法。

3. 实验内容与数据来源

计算一下常微分方程组初值问题

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 x_3 \\ \dot{x}_2 = x_1 x_3 \\ \dot{x}_3 = -x_1 x_2 \end{cases}$$ ，初值条件为 $$\begin{cases} x_1(0) = 0 \\ x_2(0) = 1 \\ x_3(0) = 1 \end{cases}$$

积分区间 $t \in [0,8]$ 。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
TA	REAL*8	起始时刻

TB	REAL*8	结束时刻
YA	REAL*8	初状态
N	INTEGER	方程组维数

5. 程序代码

```
module  m_adam4
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-13
!-------------------------------------------------------
!  Description :   4 阶 Adms 方法计算微分法方程组模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      adam4 方法函数
!     2.      RK4  -修改的 RK4 阶方法提供起步
!     3.      func 需要计算的函数
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(ta,tb,ya,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :4 阶 Adms 方法计算微分法方程组方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  ta 起步时间
!      2.  tb 介绍时间
!      3.  ya 初状态
!      4.  N  方程组维数
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M=100
integer::i
real*8::ya(N),y0(N),y1(N),y2(N),y3(N),y4(N)
real*8::f0(N),f1(N),f2(N),f3(N)
h=(tb-ta)/M
t0=ta
y0=ya
```

```
t1=ta+h
t2=t1+h
t3=t2+h
call RK4(t0,t1,y0,y1,N)
!算出 y1
call RK4(t1,t2,y1,y2,N)
!算出 y2
call RK4(t2,t3,y2,y3,N)
!算出 y3
    call  func(f0,t0,y0,N)
    !算出 f0
    call  func(f1,t1,y1,N)
    !算出 f1
    call  func(f2,t2,y2,N)
    !算出 f2
    call  func(f3,t3,y3,N)
    !算出 f3
do i=4,M
    y4=y3+h/24*(55*f3-59*f2+37*f1-9*f0)
    t4=t3+h
    !输出计算结果
    write(11,101)t4,y4
    !  以下为各量更新
    t3=t3+h
     y3=y4
    f0=f1
    f1=f2
    f2=f3
    ! 更新 f3
     call func(f3,t3,y3,N)
end do
101 format(T3,<N+1>f10.5)
end subroutine solve
subroutine  RK4(t0,tt,y0,yt,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-13
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  修改后的阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.          t0 积分初时刻
!      3.          tt 积分结束时刻
!      4.          y0  初状态
!      5.          方程组的维数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!方程组的维数
integer::N,M=20
real*8::y0(N),y(N),yt(N)
real*8::k1(N),k2(N),k3(N),k4(N)
h=(tt-t0)/M
```

```
t=t0
y=y0
do i=1,M
    call func(k1,t,y,N)
    call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1,N)
    call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2,N)
    call func(k4,t+h,y+h*k3,N)
    y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
    t=t0+i*h
  end do
yt=y
end subroutine RK4
subroutine func(f,t,y,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的方程右函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    N  方程阶数
!      2.    t,y
!  Output parameters  :
!      1.    f
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  注意：在自治系统中，其实 t 是不起作用的
!      2.        如本例
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::f(N),y(N)
f(1)=y(2)*y(3)
f(2)=y(1)*y(3)
f(3)=-y(1)*y(2)
end subroutine func
end module m_adam4
  program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 Adams4 阶方法计算微分方程组的主函数
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
```

```
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
  use m_adam4
  implicit real*8(a-z)
  integer::N
  real*8::y(3),y0(3)
  open(unit=11,file='fout1.txt')
  write(11,101)
  101 format(/,T5,'采用 Adams4 方法计算方程组',/)
  N=3
  t0=0
  tt=8
  y0=(/0,1,1/)
  call solve(t0,tt,y0,N)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 fout.txt 中，打开文件可以看到计算结果，如表 11-6 所示。

表 11-6 Adams-Bashforth 四步四阶方法计算微分法方程组

t	x_1	x_2	x_3
0.32000	0.31968	1.04985	0.94753
0.40000	0.39900	1.07667	0.91694
0.48000	0.47750	1.10816	0.87862
0.56000	0.55458	1.14349	0.83211

（续表）

t	x_1	x_2	x_3
0.64000	0.62946	1.18162	0.77699
0.72000	0.70112	1.22130	0.71298
0.80000	0.76834	1.26109	0.63993
0.88000	0.82973	1.29939	0.55799
⋮	⋮	⋮	⋮
7.44000	0.42554	1.08678	-0.90476
7.52000	0.34646	1.05832	-0.93791
7.60000	0.26683	1.03499	-0.96361
7.68000	0.18695	1.01732	-0.98225
7.76000	0.10696	1.00570	-0.99415
7.84000	0.02696	1.00035	-0.99953
7.92000	-0.05304	1.00139	-0.99849
8.00000	-0.13304	1.00880	-0.99101

可以看到 Adams-Bashforth 四步四阶方法与三步三阶方法在方法上并无太大的区别，仅仅是阶数更高一些。实际上，除了上述两种公式之外，还有其他多种的多步法，但方法都是类似的。我们对于普通的多步方法介绍也到此为止，如果读者需要更高阶的方法，仅需要查看计算数学手册即可，程序设计方法和这里基本一致。接下来我们将转到预测校正方法的介绍。

11.6　三阶Adams预测校正方法（PECE）

1. 实验基本原理

在微分方程数值方法中，无论是单步法还是多步法一般隐式公式的稳定性要高于显式公式。但是隐式公司计算往往比较麻烦，通常需要迭代进行，一个可行的方法是，先使用显式公式进行预测，进而采用隐式公式进行校正一次。这样的话会提高精度，研究表明，第一次校正可以明显的提高精度，而进行反复校正时效果就不再明显。

微分方程数值方法中著名的预测校正方法即基于以上思想，先使用显式公式进行预测，进而校正，这样既保证了计算精度，又使隐式公式显式化，克服了隐式公式需要反复迭代的困难，是实际应用中较为重要的一类方法。

通常，可以把 Adams 隐式公式与显式公式联合使用，构成预测校正方法：

预测公式为：

$$\mathbf{y}_{n+1}^{(0)}=\mathbf{y}_n+h\left[\beta_{k0}\mathbf{f}_n+\beta_{k1}\mathbf{f}_{n-1}+\cdots+\beta_{kk}\mathbf{f}_{n-k}\right]$$

校正公式为：

$$\mathbf{y}_{n+1}^{(i+1)}=\mathbf{y}_n+h\left[\beta_{k0}^{*}\mathbf{f}_{n+1}^{(i)}+\beta_{k1}^{*}\mathbf{f}_n+\cdots+\beta_{kk}^{*}\mathbf{f}_{n-k+1}\right]$$

PECE 方法用 P 步表示预测，E 步表示计算向量函数 $\mathbf{f}$ 的过程，C 步表示校正过程，对于以上公示中第一式取 $k=2$，第二式取 $k=3$。可以给出 PECE 公式计算格式：

P 步：$\mathbf{y}_{n+1}^{(0)}=\mathbf{y}_n+\dfrac{h}{12}\left[23\mathbf{f}_n-16\mathbf{f}_{n-1}+5\mathbf{f}_{n-2}\right]$

E 步：$\mathbf{f}_{n+1}^{(0)}=\mathbf{f}\left(t_{n+1},\mathbf{y}_{n+1}^{(0)}\right)$

C 步：$\mathbf{y}_{n+1}=\mathbf{y}_n+\dfrac{h}{24}\left[9\mathbf{f}_{n+1}^{(0)}+19\mathbf{f}_n-5\mathbf{f}_{n-1}+\mathbf{f}_{n-2}\right]$

E 步：$\mathbf{f}_{n+1}=\mathbf{f}\left(t_{n+1},\mathbf{y}_{n+1}\right)$

注意这里采用的记号全部针对向量而言，可以直接计算微分方程组，在计算中应变量函数向量及右函数的所有运算对每一个分量都要进行。

2. 实验目的与要求

- 了解预测校正方法的基本思想。
- 能看懂预测校正方法中每步计算的意义。

- 会使用作者编写的程序计算微分方程组初值问题。
- 最好尝试自行编写 PECE 方法函数。

3. 实验内容与数据来源

计算微分方程组

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = y_2 y_3 \\ \dot{y}_2 = -y_1 y_3 \\ \dot{y}_3 = -0.4 y_1 y_2 \end{cases}$$

其初值条件为

$$\begin{cases} y_1(1) = 1 \\ y_2(1) = 1 \\ y_3(1) = 1 \end{cases}$$

积分区间为积分区间为$t \in [1,6]$。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
TA	REAL*8	起始时刻
TB	REAL*8	结束时刻
YA	REAL*8	初状态
N	INTEGER	方程组维数

5. 程序代码

```
module  PECE3
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010-4-13
!-------------------------------------------------------
!  Description :   三阶 PECE 方法计算微分法方程组模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      三阶 PECE 方法函数
!     2.      RK4  -修改的 RK4 阶方法提供起步
!     3.      func 需要计算的函数
```

```
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.可以参考南京大学编《数值计算方法》
!      2.
!-----------------------------------------------------
contains
subroutine solve(ta,tb,ya,N)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :三阶 Adams  PECE 方法计算微分法方程组方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.  ta 起步时间
!       2.  tb 介绍时间
!       3.  ya 初状态
!       4.  N  方程组维数
!
!-----------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M=100
integer::i
real*8::ya(N),y0(N),y1(N),y2(N),y3(N)
real*8::f0(N),f1(N),f2(N),f3(N)
real*8::y3 p(N),f3 e(N)
h=(tb-ta)/M
t0=ta
y0=ya
t1=ta+h
t2=t1+h

call RK4(t0,t1,y0,y1,N)
!算出 y1
call RK4(t1,t2,y1,y2,N)
!算出 y2
    call  func(f0,t0,y0,N)
    !算出 f0
    call  func(f1,t1,y1,N)
    !算出 f1
    call  func(f2,t2,y2,N)
    !算出 f2
!----输出前几个结果,实际为 RK 法启动
 write(11,101)t0,y0
 101 format(T3,<N+1>f10.5)
 write(11,102)t1,y1
 102 format(T3,<N+1>f10.5)
  write(11,103)t2,y2
 103 format(T3,<N+1>f10.5)
```

```
!------------------
do i=3,M
    !P 步:预测
     y3_p=y2+h/12*(23*f2-16*f1+5*f0)
     t3=t2+h
     !E 步: 计算 f
     call func(f3_e,t4,y3_p,N)
     !C 步: 计算下一点的值
     y3=y2+h/24d0*(9*f3_e+19*f2-5*f1+f0)
     !E:计算 f3
    call func(f3,t3,y3,N)
     !输出计算结果
     write(11,105)t3,y3
     !  以下为各量更新
     t2=t2+h
      y2=y3
     f0=f1
     f1=f2
     f2=f3
end do
105 format(T3,<N+1>f10.5)
end subroutine solve
subroutine  RK4(t0,tt,y0,yt,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-13
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  修改后的阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
!
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.          t0 积分初时刻
!      3.          tt 积分结束时刻
!      4.          y0 初状态
!      5.          方程组的维数
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!方程组的维数
integer::N,M=20
real*8::y0(N),y(N),yt(N)
real*8::k1(N),k2(N),k3(N),k4(N)
h=(tt-t0)/M
t=t0
y=y0
do i=1,M
     call func(k1,t,y,N)
     call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1,N)
     call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2,N)
     call func(k4,t+h,y+h*k3,N)
     y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
     t=t0+i*h
  end do
yt=y
```

```
end subroutine RK4
subroutine func(f,t,y,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的方程右函数
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::f(N),y(N)
f(1)=y(2)*y(3)
f(2)=-y(1)*y(3)
f(3)=-0.4*y(1)*y(2)
end subroutine func
end module pece3
  program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用阶 Adams  PECE 方法计算微分方程组的主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
  use pece3
  implicit real*8(a-z)
  integer,parameter::N=3
  real*8::y(N),y0(N)
  open(unit=11,file='fout1.txt')
  write(11,101)
  101 format(/,T5,'3 阶 Adams 预测校正方法计算方程组',/)
  t0=1
  tt=6
  y0=(/1d0,1d0,1d0/)
  call solve(t0,tt,y0,N)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 fout1.txt 中，整理后如表 11-7 所示。

表 11-7　三阶 Adams 预测校正方法计算结果

t	y_1	y_2	y_3
1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
1.05000	1.04826	0.94929	0.98003
1.10000	1.09305	0.89735	0.96026
1.15000	1.13445	0.84441	0.94086
1.20000	1.17253	0.79068	0.92199
1.25000	1.20738	0.73636	0.90382
1.30000	1.23912	0.68161	0.88647
1.35000	1.26784	0.62656	0.87007
1.40000	1.29367	0.57133	0.85473
1.45000	1.31671	0.51601	0.84054
1.50000	1.33708	0.46068	0.82758
⋮	⋮	⋮	⋮
5.40000	-1.39027	0.25915	0.79175
5.45000	-1.37886	0.31424	0.79969
5.50000	-1.36511	0.36942	0.80906
5.55000	-1.34894	0.42468	0.81984
5.60000	-1.33026	0.48000	0.83196
5.65000	-1.30898	0.53533	0.84536
5.70000	-1.28497	0.59063	0.85996
5.75000	-1.25815	0.64581	0.87569
5.80000	-1.22838	0.70077	0.89243
5.85000	-1.19557	0.75539	0.91008
5.90000	-1.15960	0.80952	0.92851
5.95000	-1.12037	0.86300	0.94758
6.00000	-1.07780	0.91561	0.96713

由于三阶 Adams 依然属于多步法，故而需要其他条件进行启动，这里还是采用 RK 方法作为起步。

虽然在许多专业领域中，方法可能较这里提供的精度更高，也更复杂，但是基本原理依然是采用 PECE 方法。

11.7 四阶Adams预测校正方法（PECE）

1. 实验基本原理

在预测校正公式中，如果采用四步显式 Adams 公式与三步隐式公式联合使用，可以得到四阶 Adams 预测校正公式。

预测公式为：

$$\mathbf{y}^{(0)}_{n+1}=\mathbf{y}_n+\frac{h}{24}\left[55\mathbf{f}_n-59\mathbf{f}_{n-1}+37\mathbf{f}_{n-2}-9\mathbf{f}_{n-3}\right]$$

校正公式为：

$$\mathbf{y}_{n+1}^{(i+1)}=\mathbf{y}_n+\frac{h}{24}[9\mathbf{f}_{n+1}^{(i)}+19\mathbf{f}_n-5\mathbf{f}_{n-1}+\mathbf{f}_{n-2}]$$

其 PECE 模式为

P 步：$\mathbf{y}^{(0)}{}_{n+1}=\mathbf{y}_n+\frac{h}{24}\left[55\mathbf{f}_n-59\mathbf{f}_{n-1}+37\mathbf{f}_{n-2}-9\mathbf{f}_{n-3}\right]$

E 步：$\mathbf{f}_{n+1}^{(0)}=\mathbf{f}\left(t_{n+1},\mathbf{y}^{(0)}{}_{n+1}\right)$

C 步：$\mathbf{y}_{n+1}=\mathbf{y}_n+\frac{h}{24}[9\mathbf{f}_{n+1}^{(0)}+19\mathbf{f}_n-5\mathbf{f}_{n-1}+\mathbf{f}_{n-2}]$

E 步：$\mathbf{f}_{n+1}=\mathbf{f}\left(t_{n+1},\mathbf{y}_{n+1}\right)$

与上一节一样，这里的方法同样是既可以解单一的方程，也可以直接计算微分方程组。在编程时候，还会有一些细节方法，读者可以对照作者编写的程序，了解更细致的算法。

2. 实验目的与要求

- 了解四阶 Adams 预测校正的计算流程。
- 会使用作者编写的程序进行微分方程组初值问题的计算。
- 尝试自己编写四阶 Adams 预测校正方法。

3. 实验内容与数据来源

计算微分方程初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{dx}{dt}=yz\\ \dfrac{dy}{dt}=-xz\\ \dfrac{dz}{dt}=\dfrac{2}{5}xy\end{cases},\begin{cases}x(1)=1\\ y(1)=1\\ z(1)=1\end{cases}$$

积分区间为$t\in[1,6]$。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
FUNC	SUBROUTINE	外部函数
TA	REAL*8	起始时刻

TB	REAL*8	结束时刻
YA	REAL*8	初状态
N	INTEGER	方程组维数

5. 程序代码

```
module pece
!----------------------------------------module coment
! Version    :  V1.0
! Coded by   :  syz
! Date       :  2010-4-13
!-------------------------------------------------------
! Description :   PECE 方法计算微分法方程组模块
!
!-------------------------------------------------------
! Contains    :
!     1.      PECE 方法函数
!     2.      RK4 -修改的 RK4 阶方法提供起步
!     3.      func 需要计算的函数
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(ta,tb,ya,N)
!---------------------------------subroutine  comment
! Version   :  V1.0
! Coded by  :  syz
! Date      :
!-------------------------------------------------------
! Purpose   :PECE 方法计算微分法方程组方法函数
!
!-------------------------------------------------------
! Input  parameters  :
!      1.  ta 起步时间
!      2.  tb 介绍时间
!      3.  ya 初状态
!      4.  N  方程组维数
!
!-------------------------------------------------------
! Post Script :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N,M=100
integer::i
real*8::ya(N),y0(N),y1(N),y2(N),y3(N),y4(N)
real*8::f0(N),f1(N),f2(N),f3(N)
real*8::y4 p(N),f4 e(N),f4(N)
h=(tb-ta)/M
t0=ta
y0=ya
t1=ta+h
t2=t1+h
t3=t2+h
```

```
call RK4(t0,t1,y0,y1,N)
!算出 y1
call RK4(t1,t2,y1,y2,N)
!算出 y2
call RK4(t2,t3,y2,y3,N)
!算出 y3
    call  func(f0,t0,y0,N)
    !算出 f0
    call  func(f1,t1,y1,N)
    !算出 f1
    call  func(f2,t2,y2,N)
    !算出 f2
    call  func(f3,t3,y3,N)
    !算出 f3
!----输出前几个结果,实际为 RK 法启动
 write(11,101)t0,y0
 101 format(T3,<N+1>f10.5)
 write(11,102)t1,y1
 102 format(T3,<N+1>f10.5)
  write(11,103)t2,y2
 103 format(T3,<N+1>f10.5)
  write(11,102)t3,y3
 104 format(T3,<N+1>f10.5)
!------------------
do i=4,M
   !P 步:预测
    y4 p=y3+h/24*(55*f3-59*f2+37*f1-9*f0)
    t4=t3+h
    !E 步: 计算 f
    call func(f4 e,t4,y4 p,N)
    !C 步: 计算下一点的值
    y4=y3+h/24d0*(9*f4 e+19*f3-5*f2+f1)
    !E:计算 f4
   call func(f4,t4,y4,N)
    !输出计算结果
    write(11,105)t4,y4
    !  以下为各量更新
    t3=t3+h
     y3=y4
    f0=f1
    f1=f2
    f2=f3
    f3=f4
end do
105 format(T3,<N+1>f10.5)
end subroutine solve
subroutine  RK4(t0,tt,y0,yt,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-13
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  修改后的阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
!
!-----------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!       1.
!       2.          t0 积分初时刻
!       3.          tt 积分结束时刻
!       4.          y0 初状态
!       5.          方程组的维数
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
!方程组的维数
integer::N,M=20
real*8::y0(N),y(N),yt(N)
real*8::k1(N),k2(N),k3(N),k4(N)
h=(tt-t0)/M
t=t0
y=y0
do i=1,M
     call func(k1,t,y,N)
     call func(k2,t+h/2,y+h/2*k1,N)
     call func(k3,t+h/2,y+h/2*k2,N)
     call func(k4,t+h,y+h*k3,N)
     y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
     t=t0+i*h
  end do
yt=y
end subroutine RK4
subroutine func(f,t,y,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  需要计算的方程右函数
!
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::f(N),y(N)
f(1)=y(2)*y(3)
f(2)=-y(1)*y(3)
f(3)=-0.4*y(1)*y(2)
end subroutine func
end module pece
  program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  采用 PECE 方法计算微分方程组的主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.
!       2.
!  Output data files  :
```

```
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
  use pece
  implicit real*8(a-z)
  integer,parameter::N=3
  real*8::y(N),y0(N)
  open(unit=11,file='fout1.txt')
  write(11,101)
  101 format(/,T5,'预测校正方法计算方程组',/)
  t0=1
  tt=6
  y0=(/1d0,1d0,1d0/)
  call solve(t0,tt,y0,N)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 fout.txt 中，如表 11-8 所示。

表 11-8　Adams 预测校正方法计算结果

t	*x*	*y*	*z*
1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
1.05000	1.04826	0.94929	0.98003
1.10000	1.09305	0.89735	0.96026
1.15000	1.13445	0.84441	0.94086
1.20000	1.17253	0.79068	0.92199
1.25000	1.20738	0.73636	0.90382
1.30000	1.23912	0.68161	0.88647
1.35000	1.26784	0.62656	0.87008
1.40000	1.29367	0.57133	0.85473
1.45000	1.31671	0.51601	0.84054
1.50000	1.33708	0.46068	0.82758
1.55000	1.35487	0.40537	0.81592
⋮	⋮	⋮	⋮
5.40000	-1.39027	0.25915	0.79175
5.45000	-1.37886	0.31424	0.79969
5.50000	-1.36511	0.36942	0.80907

（续表）

t	*x*	*y*	*z*
5.55000	-1.34894	0.42468	0.81984
5.60000	-1.33026	0.48000	0.83196
5.65000	-1.30897	0.53534	0.84536
5.70000	-1.28497	0.59063	0.85996
5.75000	-1.25815	0.64581	0.87569
5.80000	-1.22838	0.70077	0.89243
5.85000	-1.19557	0.75539	0.91008

5.90000	-1.15960	0.80952	0.92851
5.95000	-1.12037	0.86300	0.94758
6.00000	-1.07780	0.91562	0.96713

在实际应用时，不应该局限于以上提供 PECE 的公式，而是应该搞清楚计算原理，这样方可以灵活运用。比如，有时候可以反复对 E 步和 C 步骤进行迭代 t 次，这样的方案称为 $P(EC)^t E$ 模式。

本章小结

本章介绍常微分方程的数值方法，包括单步法和多步法。高阶微分方程与微分方程组都可以化一阶微分方程组，所以我们便可以用“一般”的方法进行处理。

当然本章介绍的是一般通用的算法，对于某些具体领域，数学家与应用学家一直在开发新的数值方法。如研究大时间尺度的演化问题，我国学者提出了著名哈密顿（辛）算法具备保能量的特性。目前，对于微分方程数值方法依然是一个应用性极强且比较活跃的领域。

第 12 章

◄ 应用范例 ►

到上一章为止，已经介绍完常用的科学计算方法。计算方法是一般性内容，具有通用性和普遍意义，本不需要配备具体的应用范例。不过就以往作者与读者的交流中，很多初学者希望能给出一些应用范例作为参考。

作为范例，这里不可能罗列所有科学领域的研究范畴，同时由于作者知识面有限，只列举了一些比较熟悉的问题。这些问题都已经做了相当的简化，不需要读者具备专业知识，只需要掌握普通的高等数学基础就能读懂范例，同时范例对算法也做了较为明晰的说明。

12.1 航天器轨道外推

1. 实验基本原理

本实验旨在介绍常微分方程初值问题的应用。由力学基本理论可以知，航天器飞行力学可以用常微分方程描述。在惯性坐标系中，卫星运动方程为

$$\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{GM_E}{r^3}\mathbf{r} + \mathbf{f}_\varepsilon$$

$$GM_E = 3.98600448 \times 10^{14} m^3 / s^2$$

其中第一项为中心天体引力，而 $\mathbf{f}_\varepsilon$ 则为地球非球形引力、第三体（日、月）引力、光压大气阻力等摄动力（这里实为摄动加速度）。

为了说明问题，这里不考虑其他摄动力，并且积分器取简单的 RK4 方法。如果令

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x & y & z & v_x & v_y & v_z \end{pmatrix}^T$$

则运动方程可以写为

$$\begin{cases} \dfrac{dx_1}{dt} = x_4 \\ \dfrac{dx_2}{dt} = x_5 \\ \dfrac{dx_3}{dt} = x_6 \\ \dfrac{dx_4}{dt} = -\dfrac{GM_E}{r^3}x_1 \\ \dfrac{dx_5}{dt} = -\dfrac{GM_E}{r^3}x_2 \\ \dfrac{dx_6}{dt} = -\dfrac{GM_E}{r^3}x_3 \end{cases}$$

由此，可以将运动方程化为一阶微分方程组，由微分方程初值问题的数值方法可以解之。

2. 实验目的与要求

- 了解用微分方程描述力学系统的方法。
- 能把微分方程一章中学习到数值方法应用到实际问题中。
- 对解的结果有一个物理意义上的认识。
- 尝试使用不同的数值方法比较计算带来的误差。

3. 实验内容与数据来源

给定历元时刻卫星状态为

$$\begin{cases} 6678.137000\text{km} \\ 0\text{km} \\ 0\text{km} \\ 0\text{km/s} \\ 6.789530\text{km/s} \\ 3.686414\text{km/s} \end{cases}$$

现要求进行轨道外推 6 小时，给出卫星轨道。

4. 函数调用接口说明

输入参变量	数据类型	变量说明
T0	REAL*8	初始时刻
TT	REAL*8	结束时刻
Y0	REAL*8(6)	初状态

5. 程序代码

```
module orbit
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   二体问题轨道外推模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.       右函数
!     2.       经典的 RK4 积分器
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine  solve(t0,tt,y0)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :      4 阶经典 RK 方法计算微分方程组方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.
!      2.          t0 积分初时刻
!      3.          tt 积分结束时刻
!      4.          y0  初状态
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------
```

```
!  Post Script :
!      1.    计算结果保存在文件中，而没用用参数带出
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::y0(6),y(6)
real*8::k1(6),k2(6),k3(6),k4(6)
h=60d0  !积分步长秒
t=t0
y=y0
do
    call twobody(k1,y)
    call twobody(k2,y+h/2*k1)
    call twobody(k3,y+h/2*k2)
    call twobody(k4,y+h*k3)
    y=y+(k1+2*k2+2*k3+k4)*h/6
    t=t+h
    write(11,101)t,y/1000d0
    if (t>=tt) exit
end do
  101 format(F8.1,6F15.4)
end subroutine solve
subroutine twobody(f,x)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.17
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  二体问题右函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x 状态向量
!      2.  t 时间
!  Output parameters  :
!      1.  f 右函数
!      2.
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.  可以看到 f 仅仅是 x 的函数 而与 t 无关
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::f(6),x(6)
real*8,parameter::gm=3.98600448D14
!引力常数 单位：m**3/sec**2
r2=x(1)**2+x(2)**2+x(3)**2
r1=dsqrt(r2)
!r1 表示向量长度，r2 表示平方
!速度向量
f(1)=x(4)
f(2)=x(5)
f(3)=x(6)
```

```
gm1=gm/(r1*r2)
!加速度向量
f(4)=-gm1*x(1)
f(5)=-gm1*x(2)
f(6)=-gm1*x(3)
end subroutine twobody
end module orbit
program main
!--------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : 二体问题轨道外推主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1. report.txt 记录轨道数据文件
!      2.
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!      1.
!      2.  轨道根数初值为 JASON 卫星 1 Jul 2007 12:00:00.000 状态
!      3.  输出节点为每间隔秒
!-------------------------------------------------------
use orbit
implicit real*8(a-z)
real*8::x0(6)
open(unit=11,file='report.txt')
!单位 km，km/s
x0=(/6678.137000d0,-0.000000d0, -0.000000d0,&
     -0.000000d0, 6.789530d0,  3.686414d0/)
write(11,101)
write(11,102)t0,x0
!化为标准单位(m,m/s)
x0=x0*1000d0
t0=0
!单位 s
tt=360*60
!单位 s,即外推小时共分钟
!调用积分器
call solve(t0,tt,x0)
 101 format(/,T38,'航天器轨道外推',//,&
          T2,'(单位：秒，千米，千米/秒)')
 102 format(F8.1,6F15.4)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 report.txt 中，航天器空间位置变化如表 12-1 所示。

表 12-1 航天器空间位置变化

$time(s)$	$x(km)$	$y(km)$	$z(km)$
0.0	6678.137	0.000	0.000
60.0	6662.056	407.045	221.007
120.0	6613.889	812.129	440.950
180.0	6533.868	1213.302	658.769

（续表）

$time(s)$	$x(km)$	$y(km)$	$z(km)$
240.0	6422.380	1608.631	873.416
300.0	6279.960	1996.214	1083.856
360.0	6107.295	2374.182	1289.075
420.0	5905.217	2740.715	1488.087
480.0	5674.698	3094.049	1679.932
540.0	5416.849	3432.482	1863.685
600.0	5132.911	3754.383	2038.464
660.0	4824.253	4058.202	2203.424
720.0	4492.360	4342.477	2357.773
780.0	4138.832	4605.837	2500.766
840.0	3765.370	4847.016	2631.715
0.0	6678.137	0.000	0.000
60.0	6662.056	407.045	221.007
120.0	6613.889	812.129	440.950
180.0	6533.868	1213.302	658.769
240.0	6422.380	1608.631	873.416
300.0	6279.960	1996.214	1083.856
360.0	6107.295	2374.182	1289.075
420.0	5905.217	2740.715	1488.087
480.0	5674.698	3094.049	1679.932
540.0	5416.849	3432.482	1863.685
600.0	5132.911	3754.383	2038.464
660.0	4824.253	4058.202	2203.424
720.0	4492.360	4342.477	2357.773
780.0	4138.832	4605.837	2500.766
840.0	3765.370	4847.016	2631.715
900.0	3373.774	5064.850	2749.989
⋮	⋮	⋮	⋮
20340.0	-207.660	-5866.014	-3184.986
20400.0	255.790	-5864.545	-3184.188
20460.0	718.008	-5834.832	-3168.055
20520.0	1176.768	-5777.018	-3136.665

20580.0	1629.861	-5691.380	-3090.167
20640.0	2075.103	-5578.332	-3028.787
20700.0	2510.352	-5438.417	-2952.820
20760.0	2933.510	-5272.310	-2862.631
20820.0	3342.540	-5080.811	-2758.655
20880.0	3735.472	-4864.842	-2641.394
20940.0	4110.414	-4625.442	-2511.410

（续表）

$time(s)$	$x(km)$	$y(km)$	$z(km)$
21000.0	4465.558	-4363.766	-2369.332
21060.0	4799.196	-4081.074	-2215.842
21120.0	5109.720	-3778.726	-2051.681
21180.0	5395.635	-3458.179	-1877.638
21240.0	5655.564	-3120.977	-1694.552
21300.0	5888.254	-2768.744	-1503.305
21360.0	6092.586	-2403.176	-1304.818
21420.0	6267.575	-2026.034	-1100.047
21480.0	6412.378	-1639.134	-889.977
21540.0	6526.298	-1244.340	-675.622
21600.0	6608.786	-843.553	-458.012

速度变化数据如表 12-2 所示。

表 12-2　航天器速度变化

$time(s)$	$v_x(km/s)$	$v_y(km/s)$	$v_z(km/s)$
0.0	0.000	6.790	3.686
60.0	-0.536	6.773	3.678
120.0	-1.069	6.724	3.651
180.0	-1.597	6.643	3.607
240.0	-2.118	6.530	3.545
300.0	-2.628	6.385	3.467
360.0	-3.125	6.209	3.371
420.0	-3.608	6.004	3.260
480.0	-4.073	5.769	3.133
540.0	-4.519	5.507	2.990
600.0	-4.942	5.219	2.833
660.0	-5.342	4.905	2.663
720.0	-5.716	4.567	2.480
780.0	-6.063	4.208	2.285
840.0	-6.381	3.828	2.079

900.0	-6.667	3.430	1.862
⋮	⋮	⋮	⋮
20340.0	7.722	-0.211	-0.115
20400.0	7.720	0.260	0.141
20460.0	7.681	0.730	0.396
20520.0	7.605	1.196	0.650
20580.0	7.492	1.657	0.900
20640.0	7.343	2.110	1.146

（续表）

$time(s)$	$v_x(km/s)$	$v_y(km/s)$	$v_z(km/s)$
20700.0	7.159	2.552	1.386
20760.0	6.941	2.982	1.619
20820.0	6.688	3.398	1.845
20880.0	6.404	3.798	2.062
20940.0	6.089	4.179	2.269
21000.0	5.745	4.540	2.465
21060.0	5.372	4.879	2.649
21120.0	4.974	5.195	2.821
21180.0	4.552	5.486	2.979
21240.0	4.109	5.750	3.122
21300.0	3.645	5.987	3.250
21360.0	3.164	6.194	3.363
21420.0	2.667	6.372	3.460
21480.0	2.158	6.519	3.540
21540.0	1.638	6.635	3.603
21600.0	1.111	6.719	3.648

为节省篇幅，这里只摘取了少量数据。只考虑二体问题情况下，航天器运动轨迹是为绕地心的空间椭圆。实际应用中，还有其他作用力（称为摄动力），这里不多做介绍。

12.2 卫星三位置矢量的Gibbs定初轨方法

1. 实验基本原理

学习过理论物理中的热力学与统计物理的读者对 Gibbs 一定比较熟悉。本实验介绍由他提出的三位置矢量定初轨方法，即由 t_1,t_2,t_3 三个时刻卫星在地心天球坐标系下的位置矢量 $\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3$ 确定卫星轨道。这里略去繁琐的推导过程直接给出算法：

01 计算出 $\|\mathbf{r}_1\|,\|\mathbf{r}_2\|,\|\mathbf{r}_3\|$。

02 计算出

$$\begin{cases}\mathbf{C}_{12}=\mathbf{r}_1\times\mathbf{r}_2\\ \mathbf{C}_{23}=\mathbf{r}_2\times\mathbf{r}_3\\ \mathbf{C}_{31}=\mathbf{r}_3\times\mathbf{r}_1\end{cases}$$

03 计算出

$$\begin{cases}\mathbf{N}=\|\mathbf{r}_1\|\mathbf{r}_2\times\mathbf{r}_3+\|\mathbf{r}_2\|\mathbf{r}_3\times\mathbf{r}_1+\|\mathbf{r}_3\|\mathbf{r}_1\times\mathbf{r}_2\\ \mathbf{D}=\mathbf{C}_{12}+\mathbf{C}_{23}+\mathbf{C}_{31}\\ \mathbf{S}=\mathbf{r}_1\left(\|\mathbf{r}_2\|-\|\mathbf{r}_3\|\right)+\mathbf{r}_2\left(\|\mathbf{r}_3\|-\|\mathbf{r}_1\|\right)+\mathbf{r}_3\left(\|\mathbf{r}_1\|-\|\mathbf{r}_2\|\right)\end{cases}$$

04 计算

$$\mathbf{v}_2=\sqrt{\frac{GM_E}{\|\mathbf{N}\|\bullet\|\mathbf{D}\|}}\left(\frac{\mathbf{D}\times\mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_2\|}+\mathbf{S}\right)$$

由于已经得到t_2的卫星位置与速度，则卫星状态就完全确定下来，完成了初轨确定。

2. 实验目的与要求

- 对卫星定初轨有个感性的认识。
- 能够利用实验基本原理部分介绍的算法实现三位置矢量的 Gibbs 定轨。
- 了解位置速度与轨道根数之间存在对应关系。

3. 实验内容与数据来源

已知卫星在三次连续时刻的地心天球坐标系下的位置矢量为

$$\mathbf{r}_1=(-294.32,4265.1,5986.7)km$$

$$\mathbf{r}_2=(-1365.5,3637.6,6346.8)km$$

$$\mathbf{r}_3=(-2940.3,2473.7,6555.8)km$$

用实验原理部分介绍的 Gibbs 方法定初轨。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
V2	REAL*8(3)	时刻 2 的速度向量
输入参变量	数据类型	变量说明
R1	REAL*8(3)	时刻 1 的位置向量
R2	REAL*8(3)	时刻 2 的位置向量
R3	REAL*8(3)	时刻 3 的位置向量

5. 程序代码

```
module gibbs
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.07.09
!-------------------------------------------------------
!  Description :   gibbs 三位置矢量定初轨模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(v2,r1,r2,r3)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  方法函数
!
!  Post Script :
!      1.     需要用到矢量叉乘函数
!      2.
!      3.     注意定出的是 v2
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::r1(3),r2(3),r3(3),v2(3)
real*8::c12(3),c23(3),c31(3)
real*8::N(3),D(3),S(3)
real*8::Dr(3)
mu=398600
rou1=dsqrt(r1(1)**2+r1(2)**2+r1(3)**2)
rou2=dsqrt(r2(1)**2+r2(2)**2+r2(3)**2)
rou3=dsqrt(r3(1)**2+r3(2)**2+r3(3)**2)
call cross(c12,r1,r2)
call cross(c23,r2,r3)
call cross(c31,r3,r1)
N=rou1*c23+rou2*c31+rou3*c12
```

```
N_norm=dsqrt(n(1)**2+n(2)**2+n(3)**2)
D=c12+c23+c31
D_norm=dsqrt(d(1)**2+d(2)**2+d(3)**2)
S=r1*(rou2-rou3)+r2*(rou3-rou1)+r3*(rou1-rou2)
call cross(Dr,D,r2)
v2=dsqrt(mu/N_norm/D_norm)*(Dr/rou2+S)
end subroutine solve
subroutine cross(v,va,vb)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    :   三维向量叉乘   V=Va * Vb
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
real*8::v(3),va(3),vb(3)
v(1)=va(2)*vb(3)-va(3)*vb(2)
v(2)=va(3)*vb(1)-va(1)*vb(3)
v(3)=va(1)*vb(2)-va(2)*vb(1)
end subroutine cross
end module gibbs
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    :  主函数
!
!  Post Script :
!      1.    定出卫星 v2
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
use gibbs
implicit real*8(a-z)
real*8::r1(3),r2(3),r3(3),v2(3)
r1=(/-294.32d0,4265.1d0,5986.7d0/)
r2=(/-1365.d0,3637.6d0,6346.8d0/)
r3=(/-2940.3d0,2473.7d0,6555.8d0/)
call solve(v2,r1,r2,r3)
```

```
    open(unit=11,file='result.txt')
    write(11,101)v2
    101 format(/,T5,'Gibbs 三位置矢量定初轨',///,&
                T5,'V2 为(km/s): ',/,&
                3(/,T3,F12.8))
    end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 12-2 所示。

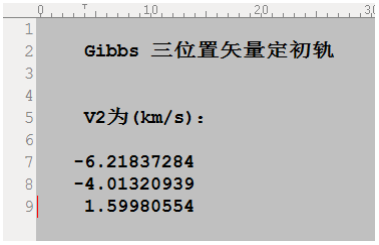


图 12-2 Gibbs 方法定初轨计算结果

已经知道 t_2 时刻的位置，又知道该时刻的速度，由微分方程知识可以知道 6 个积分都已经找到，这也等同于找到 6 个轨道根数。把位置速度化为轨道根数为

$$\begin{cases} a = 8000km \\ e = 0.1 \\ i = 60^\circ \\ \Omega = 40^\circ \\ \omega = 30^\circ \\ \theta = 50^\circ \end{cases}$$

以上轨道根数是相对于 $\mathbf{r}_2$ 时刻的轨道根数。

在工程应用中，一般不会仅仅由 2、3 组资料来确定轨道，而是多组资料，甚至多种测量手段，进行统计意义下的初轨确定。这里仅仅做原理性说明。

11.3 空间导航基本原理

1. 实验基本原理

本实验为非线性最小二乘的一个典型应用，在最小二乘一章介绍的都是线性方程组没有介绍非线性最小二乘，而在非线性方程组一章介绍的都是适定非线性方程组而没有介绍超定非线性方程组，这一节即为上两部分的一个结合。现实世界中绝大部分自然现象都是非线性，所以非线性最小二乘广泛存在许多问题中。

下面以实验内容说明计算方法，设卫星对用户定位的基本方程为

$$\begin{cases} \rho_1 = \sqrt{(x_1 - x_u)^2 + (y_1 - y_u)^2 + (z_1 - z_u)^2} + ct_u \\ \rho_2 = \sqrt{(x_2 - x_u)^2 + (y_2 - y_u)^2 + (z_1 - z_u)^2} + ct_u \\ \vdots \\ \rho_n = \sqrt{(x_n - x_u)^2 + (y_n - y_u)^2 + (z_n - z_u)^2} + ct_u \end{cases}, n > 3$$

ρ_i 为测量资料，$(x_{i,} y_i, z_i)$ 为卫星位置，$(x_{u,} y_u, z_u)$ 为用户位置，同时接收机含有钟差 t_u。现欲通过一定量数据的测量，给出用户位置和接收机钟差。

其计算方法即非线性参数估计问题，令

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_u \\ y_u \\ z_u \\ t_u \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \sqrt{(x_1 - x_u)^2 + (y_1 - y_u)^2 + (z_1 - z_u)^2} + ct_u \\ \sqrt{(x_2 - x_u)^2 + (y_2 - y_u)^2 + (z_1 - z_u)^2} + ct_u \\ \vdots \\ \sqrt{(x_n - x_u)^2 + (y_n - y_u)^2 + (z_n - z_u)^2} + ct_u \end{pmatrix}, n > 3$$

$$\mathbf{H_X} = \begin{pmatrix} \frac{x_u - x_1}{\sqrt{(x_u - x_1)^2 + (y_u - y_1)^2 + (z_u - z_1)^2}}, \frac{y_u - y_1}{\sqrt{(x_u - x_1)^2 + (y_u - y_1)^2 + (z_u - z_1)^2}}, \frac{z_u - z_1}{\sqrt{(x_u - x_1)^2 + (y_u - y_1)^2 + (z_u - z_1)^2}}, c \\ \frac{x_u - x_2}{\sqrt{(x_u - x_2)^2 + (y_u - y_2)^2 + (z_u - z_2)^2}}, \frac{y_u - y_2}{\sqrt{(x_u - x_2)^2 + (y_u - y_2)^2 + (z_u - z_2)^2}}, \frac{z_u - z_2}{\sqrt{(x_u - x_2)^2 + (y_u - y_2)^2 + (z_u - z_2)^2}}, c \\ \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\ \frac{x_u - x_n}{\sqrt{(x_u - x_n)^2 + (y_u - y_n)^2 + (z_u - z_n)^2}}, \frac{y_u - y_n}{\sqrt{(x_u - x_n)^2 + (y_u - y_n)^2 + (z_u - z_n)^2}}, \frac{z_u - z_n}{\sqrt{(x_u - x_n)^2 + (y_u - y_n)^2 + (z_u - z_n)^2}}, c \end{pmatrix}$$

线性化方程为

$$\boldsymbol{\rho} - \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{H\Delta X}$$

上述方程为超定方程，可以用最小二乘估计方法。在计算出线性化方程后，对自变量进行改正，然后反复迭代，直到满足计算精度需求。最小二次估计方法建议最好不要解法方程，而是通过正交变换的方法来实现，这在最小二乘一章已经提及过。

2. 实验目的与要求

- 复习最小二乘估计方法。

- 复习非线性方程组的计算方法。
- 能够对非线性参数估计问题自行写出算法。
- 能够编程实现非线性参数估计问题。

3. 实验内容与数据来源

一个用户在一个时刻，通过测量全球卫星导航系统来确定自己位置，他同时测量到 8 颗卫星的伪距数据，伪距为

$$\rho = \begin{pmatrix} 23744.370148 \\ 24192.167976 \\ 24423.302089 \\ 24249.126973 \\ 26517.149564 \\ 26973.488734 \\ 26366.329636 \\ 27190.224074 \end{pmatrix} km$$

导航卫星的轨道数据可以从广播星历或相关地面监控站得到，是已知的。在地固坐标系中，卫星位置如表 12-3 所示。

表 12-3 导航卫星星历

	x(km)	y(km)	z(km)
卫星 13	-7134.529244	16113.648836	23709.205570
卫星 22	-22383.700040	18533.233168	5307.245613
卫星 23	-5384.901317	28971.622323	2079.796362
卫星 14	637.466571	28016.053841	9347.297933
卫星 12	-11568.199533	-3328.511543	26977.312423
卫星 21	-28908.916747	-577.061760	6051.375658
卫星 5	-1205.651181	28296.890128	-8397.025036
卫星 4	16456.527324	12347.282494	21199.173063

用户接收机与系统时间是不同步的，即接收机有误差，这个量在微秒量级不能忽略，因为这将引起千米量级的误差，所以必须考虑。同时观测数据是有误差的，观测的数据是多组资料。

实验要求通过卫星定位方法，计算出用户位置和用户持的接收机的钟差。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
X	REAL*8(4)	用户位置和钟差的解
输入参变量	数据类型	变量说明
RS	REAL*8(N,3)	卫星星历
ROU	REAL*8(N)	测量数据
X0	REAL*8(4)	位置和钟差的初值
TOL	REAL*8	误差容限
N	INTGER	测量资料个数

5. 程序代码

```
module navigation
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :  2010.07.08
!-------------------------------------------------------
!  Description :   导航模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.      主要包含解算函数
!     2.      理论值计算函数
!     3.      偏导数矩阵计算
!     4.      正交分解的最小二乘相关函数
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(rs,x,rou,x0,tol,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  解算函数
!
!  Post Script :
!      1.    需要调用理论值函数偏导数函数
!      2.    线性最小二乘函数
!      3.
!-------------------------------------------------------
```

```
!  Input  parameters  :
!      1.  rs 卫星星历
!      2.  rou 测量数据
!      3.  x0 初值 包含用户位置和钟差
!      4.  tol 误差容限
!      5.  资料个数
!  Output parameters  :
!      1.  x 用户位置和钟差
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::rou(N),rs(N,3),x(4),x0(4)
real*8::com(N),dx(N),oc(N),H(N,3)
integer::i
x=x0
do i=1,50
  call compu(x,rs,com,N)
  oc=rou-com
  call jacobi(x,rs,H,n)
  call  lineq(H,oc,dx,N,4)
  x=x+dx
  s=0d0
  s=dx(1)**2+dx(2)**2+dx(3)**2
  s=dsqrt(s)
  if (s<TOL) exit
end do
end subroutine solve
subroutine jacobi(x,rs,H,n)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.08
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :   偏导数矩阵
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x  用户位置与钟差
!      2.  rs 卫星星历
!      3.  n  维数即资料个数
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.  H 偏导数矩阵
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
```

```
implicit real*8(a-z)
integer::n
real*8::x(4),rs(n,3),H(n,4)
integer::i
!光速
c=299792.458
do i=1,n
   a=x(1)-rs(i,1)
   b=(x(1)-rs(i,1))**2+(x(2)-rs(i,2))**2+(x(3)-rs(i,3))**2
   b=dsqrt(b)
   H(i,1)=a/b
   a=x(2)-rs(i,2)
   H(i,2)=a/b
   a=x(3)-rs(i,3)
   H(i,3)=a/b
   H(i,4)=c
end do
end subroutine jacobi
subroutine compu(x,rs,rou,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    :  理论值函数
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  x,rs  用户位置钟差,   卫星星历
!      2.  N  维数
!  Output parameters  :
!      1.  rou  理论值
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::N
real*8::x(4),rs(N,3),rou(N)
integer::i
!光速
c=299792.458
do i=1,n
   rou(i)=(rs(i,1)-x(1))**2+(rs(i,2)-x(2))**2  &
          +(rs(i,3)-x(3))**2
   rou(i)=dsqrt(rou(i))+c*x(4)
end do
end subroutine compu
subroutine  lineq(A,b,x,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
```

```
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :  通过修正的 Gram-Schmidt 正交化求最小二问题
!               方法函数
!-------------------------------------------------------
! Post Script :
!      1.       即求解超定方程组 Ax=b    其中 A(M,N)  M>N
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::b(M)
real*8::QT(N,M)  !Q 的转置矩阵
real*8::QTb(N)   !Q'b
real*8::x(N)
call gram_dec(A,Q,R,M,N)
QT=transpose(Q)
QTb=matmul(QT,b)  !  Rx=Q'b
call uptri(R,QTb,x,N) !回带
end subroutine lineq
subroutine gram dec(A,Q,R,M,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   采用修正的 Gram-Schmidt 分解求矩阵的 QR 分解
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.    A 原始矩阵
!      2.    A(M,N)
!  Output parameters  :
!      1.    分解结果为 Q(M,N):注意 Q 不是方阵，Q 列向量为标准正交基
!      2.               R(N,N): R 是方阵
!      3.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::M,N
integer::i,j,k
real*8::A(M,N),Q(M,N),R(N,N)
real*8::vec_temp(M)
R(1,1)=dsqrt(dot_product(a(:,1),a(:,1)))
Q(:,1)=a(:,1)/R(1,1)
do k=2,N
     do j=1,k-1
       R(j,k)=dot product(Q(:,j),A(:,k))
     end do
     vec_temp=A(:,k)
     do j=1,k-1
       vec_temp=vec_temp-Q(:,j)*R(j,k)
     end do
```

```
    R(k,k)=dsqrt(dot_product(vec_temp,vec_temp))
    Q(:,k)=vec_temp/R(k,k)
end do
end subroutine gram_dec
subroutine uptri(A,b,x,N)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010-4-8
!-----------------------------------------------------
!  Purpose   :  上三角方程组的回带方法
!               Ax=b
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   A(N,N)系数矩阵
!       2.   b(N)右向量
!       3.   N方程维数
!  Output parameters  :
!       1.  x  方程的根
!       2.
!  Common parameters  :
!
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::i,j,k,N
real*8::A(N,N),b(N),x(N)
x(N)=b(N)/A(N,N)
!回带部分
do i=n-1,1,-1
    x(i)=b(i)
   do j=i+1,N
    x(i)=x(i)-a(i,j)*x(j)
   end do
    x(i)=x(i)/A(i,i)
end do
end subroutine uptri
end module navigation
subroutine drive
use navigation
implicit real*8(a-z)
real*8::rou(8),rs(8,3)
integer::i,j
real*8::x(4),x0(4)
open(unit=23,file='result.txt')
rou=(/23744.370148d0,&
24192.167976d0,&
24423.302089d0,&
24249.126973d0,&
26517.149564d0,&
26973.488734d0,&
26366.329636d0,&
27190.224074d0/)
rs=reshape((/-7134.529244d0,&
-22383.700040d0,&
-5384.901317d0,&
```

```
637.466571d0,&
-11568.199533d0,&
-28908.916747d0 ,&
-1205.651181d0,&
16456.527324d0,&
16113.648836d0,&
18533.233168d0,&
28971.622323d0,&
28016.053841d0,&
-3328.511543d0,&
-577.061760d0   ,&
28296.890128d0,&
12347.282494d0,&
 23709.205570d0 ,&
5307.245613d0  ,&
 2079.796362d0  ,&
 9347.297933d0  ,&
26977.312423d0 ,&
 6051.375658d0  ,&
 -8397.025036d0 ,&
 21199.173063d0/),(/8,3/))
!设置初值
x0=(/ -2d3,5d3,3d3,1d-5/)
call solve(rs,x,rou,x0,1d-7,8)
write(23,101)x
101 format(/,T4,'导航定位结果',//,&
         T2, '用为位置为(km): ',/,&
         T2,  3(/F18.10),//,&
         T2,   '钟差为(s): ',/,&
         T2,   F18.12 )
end subroutine drive
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.08
!-----------------------------------------------------
!  Purpose    : 定位主函数
!
!  Post Script :
!      1.   调用驱动函数
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
!  In put data  files :
!      1.
!      2.
!  Output data files  :
!      1.
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
call  drive
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 中，如图 12-3 所示。

计算结果已经明确的给出了用户在地球上的位置，可以通过反算的方法验证定位结果是否可靠，方法即把解算结果带入到测量方程，看产生的计算值与测量值是否在误差允许的可接受范围之内。

```
  导航定位结果

用为位置为(km)：

 -2604.2985330047
  4743.2972166549
  3364.9785130080

钟差为(s)：
    0.000006999997
```

图 12-3　定位结果

12.4　计算机辅助设计中的Bézier样条曲线

1. 实验基本原理

本节通俗的介绍一下 Bézier 曲线。Bézier 曲线是允许用户控制在节点处控制斜率的样条，这样的代价是不在保证经过节点处的一阶与二阶导数的光滑性质。Bézier 样条有时候比较适合曲率急剧变化的场合，如有角的情况。

这里以平面 Bézier 样条作为范例做介绍，每一段平面 Bézier 样条由 4 个点 $(x_i, y_i), i = 1, 2, 3$确定。第一个点和最后一个点是样条曲线的端点，而中间两个点是控制点。曲线沿切线方向 $(x_2 - x_1, y_2 - y_1)$ 由 (x_1, y_1) 出发，并沿切线方向 $(x_4 - x_3, y_4 - y_3)$ 在 (x_4, y_4) 终止。以上样条的算法为

给定端点 $(x_i, y_i), i = 1, 4$ 及控制点 $(x_i, y_i), i = 2, 3$。

令

$$\begin{cases} b_x = 3(x_2 - x_1) \\ c_x = 3(x_3 - x_2) - b_x \\ d_x = x_4 - x_1 - b_x - c_x \end{cases}$$

$$\begin{cases} b_y = 3(y_2 - y_1) \\ c_y = 3(y_3 - y_2) - b_y \\ d_y = y_4 - y_1 - b_y - c_y \end{cases}$$

对于 $t \in [0,1]$，Bézier 曲线为

$$\begin{cases} x(t) = x_1 + b_x t + c_x t^2 + d_x t^3 \\ y(t) = y_1 + b_y t + c_y t^2 + d_y t^3 \end{cases}$$

下面通过范例介绍平面 Bézier 样条曲线。

2. 实验目的与要求

- 了解 Bézier 样条曲线的应用背景。
- 知道平面 Bézier 样条曲线的构造 方法。
- 能够编程实现平面 Bézier 样条曲线的生成。

3. 实验内容与数据来源

求平面上经过端点$(1,1),(2,2)$控制点为$(1,3),(3,3)$的 Bézier 曲线，并根据计算的数据画出曲线图像。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
T	REAL*8(N)	参数向量
X	REAL*8(N)	横坐标向量
Y	REAL*8(N)	纵坐标向量
输入参变量	**数据类型**	**变量说明**
R1	REAL*8(2)	第一个点坐标（起点）
R2	REAL*8(2)	第二个点坐标（控制点 1）
R3	REAL*8(2)	第三个点坐标（控制点 2）
R4	REAL*8(2)	第四个点坐标（终点）
N	INTEGER	需要计算样条值的个数

5. 程序代码

```
module bezier
!-----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   Bézier 曲线模块
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.     方法函数 solve
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(r1,r2,r3,r4,n,t,x,y)
```

```
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   :   Bézier 曲线方法函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!       1.   r1  r4 端点
!       2.   r2  r3 控制点
!       3.   n  要计算的节点个数
!       4    t  节点参数   t 在 0 到 1 之间
!  Output parameters  :
!       1.   x  坐标
!       2.   y  坐标
!  Common parameters  :
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r1(2),r2(2),r3(2),r4(2)
real*8::c1(4),c2(4)
real*8::t(n),x(n),y(n)
bx=3d0*(r2(1)-r1(1))
cx=3d0*(r3(1)-r2(1))-bx
dx=r4(1)-r1(1)-bx-cx
by=3d0*(r2(2)-r2(1))
cy=3d0*(r3(2)-r2(2))-by
dy=r4(2)-r1(2)-by-cy
!已经解算出系数
do i=1,n
   x(i)=r1(1)+bx*t(i)+cx*(t(i))**2+dx*(t(i))**3
   y(i)=r1(2)+by*t(i)+cy*(t(i))**2+dy*(t(i))**3
end do
end subroutine solve
end module bezier
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.05.13
!-------------------------------------------------------
!  Purpose   : Bézier 曲线主函数
!
!-------------------------------------------------------
!  Post Script :
!       1.
!       2.
!-------------------------------------------------------
use bezier
```

```
implicit real*8(a-z)
integer::n,i
real*8::r1(2),r2(2),r3(2),r4(2)
real*8::t(0:20),x(0:20),y(0:20)
open(unit=11,file='result.txt')
do i=0,20
  t(i)=1d0/20*i
end do
!端点
r1=(/1d0,1d0/)
r4=(/2d0,2d0/)
!控制点
r2=(/1d0,3d0/)
r3=(/3d0,3d0/)
call solve(r1,r2,r3,r4,21,t,x,y)
write(11,101)
write(11,102)((t(i),x(i),y(i)),i=0,20)
101 format(/,T16,'Bézier 曲线',/)
102 format(3F12.6)
end program main
```

6. 实验结论

计算结果保存在文件 result.txt 文件中，内容如图 12-4 所示。

把样条曲线的计算结果绘制成图形，如图 12-5 所示，从图中很明显可以看出 Bézier 样条曲线的几何特征。

```
          Bézier曲线

  0.000000    1.000000    1.000000
  0.050000    1.014375    1.285125
  0.100000    1.055000    1.541000
  0.150000    1.118125    1.768375
  0.200000    1.200000    1.968000
  0.250000    1.296875    2.140625
  0.300000    1.405000    2.287000
  0.350000    1.520625    2.407875
  0.400000    1.640000    2.504000
  0.450000    1.759375    2.576125
  0.500000    1.875000    2.625000
  0.550000    1.983125    2.651375
  0.600000    2.080000    2.656000
  0.650000    2.161875    2.639625
  0.700000    2.225000    2.603000
  0.750000    2.265625    2.546875
  0.800000    2.280000    2.472000
  0.850000    2.264375    2.379125
  0.900000    2.215000    2.269000
  0.950000    2.128125    2.142375
  1.000000    2.000000    2.000000
```

图 12-4 样条曲线计算结果

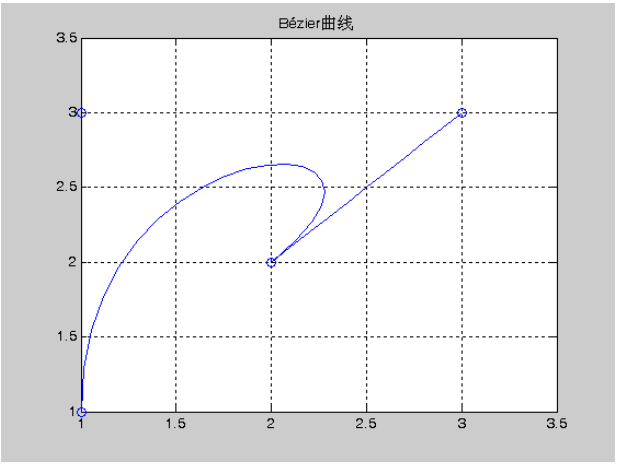


图 12-5 Bézier 样条曲线图形

Pierre Bézier 为雷诺汽车公司工作时产生了 Bézier 样条的想法，而在雪铁龙汽车公司工作的 Paul de Casteljau 也独立的发现了相同的样条曲线，当时被作为两家汽车公司的商业机密，后来当 Bézier 发表他的研究之后，大家才发现两人英雄所见略同。如今，Bézier 样条曲线已经

成为计算机辅助设计的一个常见工具。

12.6 人体生理周期预测

1. 实验基本原理

上实际 60 年代曾在国外比较流行，很多人相信人体生理周期预测往往基于对影响我们生活三个循环周期的观察，生理循环 23 天一个周期，情绪循环 28 天一个周期，智力循环为 33 天一个周期，对任何人而言，这些循环都是从人出生时就开始的。

我们这里暂且把这个当作一种玩笑，开发基于以上说法的一个小软件。软件需要具备以下功能：把三项指数都设置为 0-10，然后对当天人的各项指数打分。预测下次指数高峰的日期。获取计算机日期可以调用 Fortran 的内置函数 GETDAT (Y,M,D)。软件的思路是把生日和当前日期都转换为儒略日，然后就可以方便的求出当天的指数分值，算下一次高峰日期方法是算出下一次高峰的儒略日，然后把儒略日反过来化为公历日期。这里提供公历和儒略日互化的方法。

由公历转化为儒略日，可以按照一下公式进行：

$$JD = D - 32075 + \frac{1461\times\left(Y + 4800 + \dfrac{M-4}{12}\right)}{4} + \frac{367\times\left[M - 2 - \left(\dfrac{M-14}{12}\right)\times 12\right]}{12} - \frac{3\times\dfrac{Y + 4900 + \dfrac{M-14}{12}}{100}}{4} - 0.5$$

以上公式中，Y,M,D 分别为公历的年月日，注意每步除法都要取整。

公历转化为儒略日 JD（含小数）的方法为

$$\begin{cases} J = \left[JD + 0.5 \right] \\ N = \left[\dfrac{4\left(J + 68569 \right)}{146097} \right] \\ L1 = J + 68569 - \left[\dfrac{N \times 146097 + 3}{4} \right] \\ Y1 = \left[\dfrac{4000\left(L1 + 1 \right)}{1461001} \right] \\ L2 = L1 - \left[\dfrac{1461 \times Y1}{4} \right] + 31 \\ M1 = \left[\dfrac{80 \times L2}{2447} \right] \\ D = L2 - \left[\dfrac{2447 \times M1}{80} \right] \\ L3 = \left[\dfrac{M1}{11} \right] \\ M = M1 + 2 - 12L3 \\ Y = \left[100\left(N - 49 \right) + Y1 + L3 \right] \end{cases}$$

以上中括号均表示取整数。

2. 实验目的与要求

- 能够根据实际需求设计简单的小软件。
- 了解儒略日与公历之间的互化关系。

3. 实验内容与数据来源

输入自己的生日，然后根据实验原理部分提供的方法计算当天的生理、情绪和智力指数，并预测下一次各项指标高峰值的日期。

4. 函数调用接口说明

输出参变量	数据类型	变量说明
STAR_INDEX	REAL*8(3)	当前生理、情绪、智力指数
PHY_CLI	REAL*8(3)	下一个生理高峰日期（年、月、日）
EMO_CLI	REAL*8(3)	下一个情绪高峰日期（年、月、日）
INTE_CLI	REAL*8(3)	下一个智力高峰日期（年、月、日）

输入参变量	数据类型	变量说明
BITH	REAL*8(3)	生日（年、月、日）

5. 程序代码

```
module predict
!----------------------------------------module coment
!  Version     :  V1.0
!  Coded by    :  syz
!  Date        :
!-------------------------------------------------------
!  Description :   生理周期预测模块
!
!  Post Script :
!     1.
!     2.
!
!-------------------------------------------------------
!  Contains    :
!     1.   方法函数
!     2.   儒略日化公历
!     3.   公历化儒略日
!-------------------------------------------------------
!  Parameters  :
!     1.
!     2.
!-------------------------------------------------------
contains
subroutine solve(bith,star_index,phy_cli,emo_cli,inte_cli)
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :   生理(Physiological)、情绪(Emotional)
!                智力(Intelligence)预测模块
!
!  Post Script :
!      1.      指数分为-10 分
!      2.
!      3.
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.          bith () --输入生日整型年月日
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.    star_index () 双精度 当前生理、情绪、智力预测指数,
!                              最高分，最低分
!      2.   phy cli(3) 整型下一个生理高峰 日期
!      3.   emo_cli(3)  整型下一个情绪高峰日期 整型
!      4.  inte cli(3) 整型 下一个智力高峰日期
!
!  Common parameters  :
```

```
!      1.
!      2.
!-----------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::bith(3),now(3),next_climax(3)
integer::phy_cli(3),emo_cli(3),inte_cli(3)
!span 为生日到当前日期的总天数
integer::y,m,d,span1
real*8::star(3),span,jdnow,temp(3)
real*8::star_index(3)
!调用计算机函数，获取当前日期
call GETDAT (Y,M,D)
now(1)=y
now(2)=m
now(3)=d
!把生日及当前时间转化成儒略日
call gre2jule(bith,jdbith)
call gre2jule(now,jdnow)
twopi=6.2831853071795864
span=jdnow-jdbith
!让指标为分到分
star_index(1)=5d0*dsin(twopi*span/23d0)+5d0
star_index(2)=5d0*dsin(twopi*span/28d0)+5d0
star_index(3)=5*dsin(twopi*span/33d0)+5d0
!以上已经算出当日指数，下面计算下一个高峰日期
span1=int(span)
!直接算出下次高峰的儒略日
next_climax(1)=23-mod(span1+23*3/4,23)+int(jdnow)+1
next_climax(2)=28-mod(span1+28*3/4,28)+int(jdnow)+1
next_climax(3)=33-mod(span1+33*3/4,33)+int(jdnow)+1
!转为双精度
temp=DBLE(next_climax)
!把下一个高峰的儒略日化为公历
call  jule2gre(temp(1),phy_cli)
call  jule2gre(temp(2),emo_cli)
call  jule2gre(temp(3),inte_cli)
end subroutine solve
subroutine gre2jule(date,JD)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.07
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : 公历（格里高利）化儒略日
!
!  Post Script :
!      1.
!      2.
!      3.
!-----------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.   date(3)  整型年月日
!      2.
!  Output parameters  :
!      1.  JD  儒略日
```

```
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
integer date(3),Y,M,D
real*8 j,jd
real*8 temp1,temp2,temp3
Y=date(1)
m=date(2)
d=date(3)
temp1=1461*(Y+4800+(M-14)/12)/4
temp2=367*(M-2-((m-14)/12)*12)/12
temp3=3*(Y+4900+(M-14)/12)/100/4
JD=D-32075+temp1+temp2-temp3-0.5d0
end subroutine gre2jule
subroutine jule2gre(JD,date)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.07
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :  儒略日化成公历（格里高利）
!
!  Post Script :
!      1.JD 允许带小数
!      2.
!      3. 编程方法可以参看《航天器轨道确定》，于志坚编
!-------------------------------------------------------
!  Input  parameters  :
!      1.  JD   浮点数，儒略日
!      2.  date(3)  整型分别为年月日
!  Output parameters  :
!      1.
!      2.
!  Common parameters  :
!      1.
!      2.
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::date(3)
integer::J,N,L1,Y1,L2,M1,D,L3,M,Y
J=int(JD+0.5D0)
N=4*(J+68569)/146097
L1=J+68569-(N*146097+3)/4
Y1=4000*(L1+1)/1461001
L2=L1-1461*Y1/4+31
M1=80*L2/2447
D=L2-2447*M1/80
L3=INT(M1/11)
M=M1+2+12*L3
Y=100*(N-49)+Y1+L3
date(1)=Y
date(2)=M
date(3)=D
```

```
end subroutine jule2gre
end module predict
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  生理、情绪、智力周期预测函数
!
!  Post Script :
!       1.     今天的时间，从计算机读取
!       2.
!
!-------------------------------------------------------
!  In put data  files :
!       1.     bithday.txt 生日----- 年月日
!       2.
!  Output data files  :
!       1.     predict.txt   当天生理、情绪、智力指数
!       2.      以及下次高峰的日期
!
!-------------------------------------------------------
use predict
implicit real*8(a-z)
integer::now(3),next_climax(3),bith(3)
integer::a(3),b(3),c(3)
real*8::star_index(3)
integer::y,m,d
open(unit=11,file='birthday.txt')
open(unit=12,file='predict.txt')
read(11,*)
!读入生日
read(11,*)bith
!调用计算机函数，获取当前日期
call GETDAT (Y,M,D)
now(1)=y
now(2)=m
now(3)=d
call solve(bith,star_index,a,b,c)
write(12,101)now,star index,a,b,c
101 format(/,T12,'生理周期预测',//,&
           T3,'今天是公元:',3(I6),//,&
           T3,'您今日生理指数为：',F6.1,/,&
           T3,'您今日情绪指数为：',F6.1,/,&
           T3,'您今日智力指数为：',F6.1,//,&
           T3,'您下次生理峰值日期为：',3(I6),/,&
           T3,'您下次情绪峰值日期为：',3(I6),/,&
           T3,'您下次智力峰值日期为：',3(I6),/ )
end program main
```

6. 实验结论

编译后生成可执行文件 Console1.exe，读者也可以把这个文件重命名，或者拷贝到其他地方，使用方法是在该文件的当前目录下，准备一个 birthday.txt 文件，并输入自己的生日。假设某人是 1949 年 10 月 1 日出身，则输入格式如图 12-6 所示。

双击 Console.exe，在当前目录下可以找到一个文件 predict.txt，打开文件如图 12-7 所示。

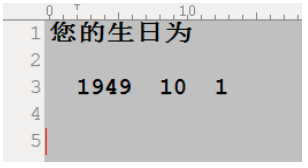


图 12-6　输入生日

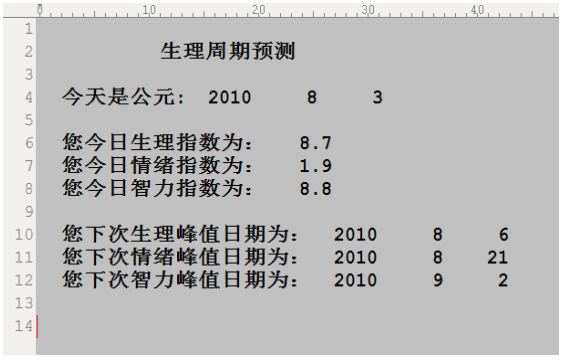


图 12-7　预测结果

至此，已经完成了一个有趣的小实验程序设计。

本章小结

作为本书的最后一章，在这一章节中介绍了几个计算方法的应用范例，这几个实验都是经过相当程度的简化，目的是要说明原理性的东西。在实际工程中，往往比实验中的要复杂的多，比如第一个实验，实际应用中涉及到复杂的时间、空间转换关系，摄动力也非常复杂。而且在轨道计算问题上，为了获得较高的精度，通常不会简单的用经典的 RK4 方法，一般都是经过特殊构造的数值方法。希望读者通过本章的学习，能够增强分析实际应用问题的能力。

附录 A　集成开发环境介绍

Fortran 语言开发本身并不需要集成开发环境，只要有编译器即可。现在程序设计，往往集成开发环境做的比较友好，这对程序开发无疑是比较方便的。在 Windows 系统下 Fortarn 比较常见的集成开发环境有 Fortran-Powerstation、Compac Visual Fortran 6.6 等，在 UNIX、LINUX 等系统上一般需要用命令编译。这里以微软的 Visaul Studio 2008+Intel Fortran Complier 11（以下简称 IVF）为版本介绍给初学者。有 Fortran 编程经验的读者可以不必阅读本附录。

一、第一个 Fortran 程序

启动 IVF 集成环境后，界面如图 A-1 所示。

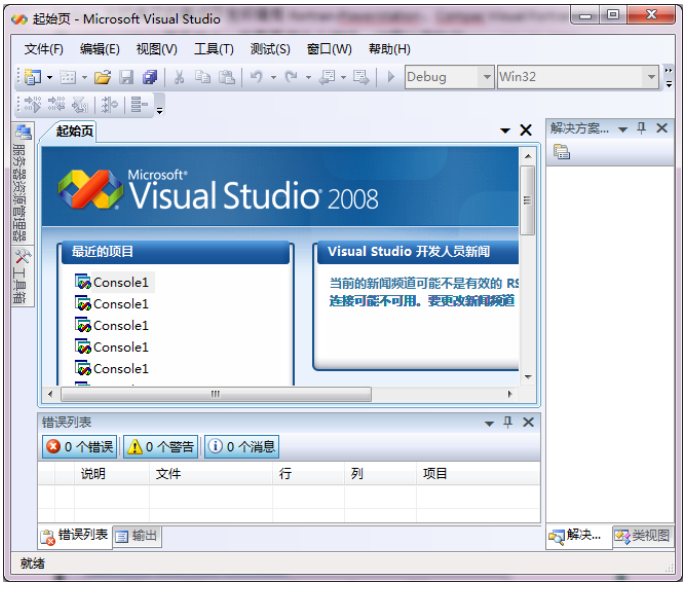


图 A-1　IVF 主界面

界面起始页中有最近项目，如果鼠标左键单击项目，就会进入该项目。如果是初次使用 IVF 且无太多编程经验的读者建议这时候不要用鼠标乱点界面上的其他地方。

下面以一个简单的小程序介绍，如何程序设计流程。很多语言的第一个程序都是“Hello world!”，这里落个俗套。下面设计一个程序，要求程序运行后，在当前目录下生成一个 hello.txt 文件，在该文件中打印出“Hello world!”。

首先，打开主界面菜单“文件”|“新建”|“项目”，如图 A-2 所示。

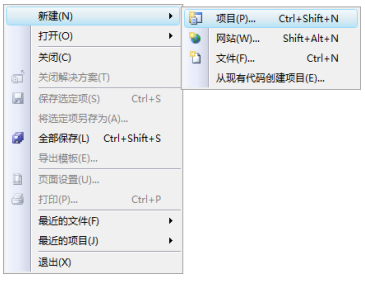


图 A-2　新建项目菜单

完成以上步骤后弹出如图 A-3 所示的对话框。注意选择“Intel(R) Visual Fortran”|“Console Application”|“Empty Project”。如果是默认的话有可能你建立的是 VC#或 VC++等项目。

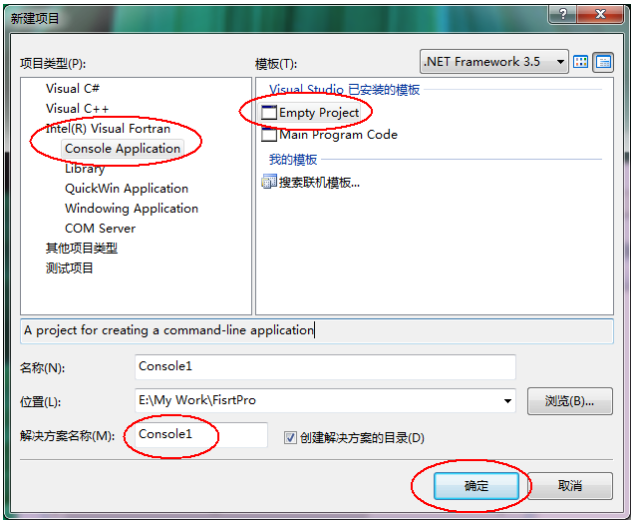


图 A-3　新建立解决方案对话框

在图 A-3 需要填写的对话框中，位置一项为你要建立的项目在你磁盘上的位置，解决方案比项目要大一级，一个解决方案里可以包含多个项目，甚至可以包含其他语言项目如 C#项目等，初学者可以先不去理会，采用默认值。名称一栏当然就是指该项目名称，可以使用默认值。

关于解决方案位置，可以包含中文名，不过不建议这样做，实际情况是，包含中文名的情况下编译运行都是没问题的，不过如果是程序调试可能会出错。完成以上步骤后，界面如图 A-4 所示。

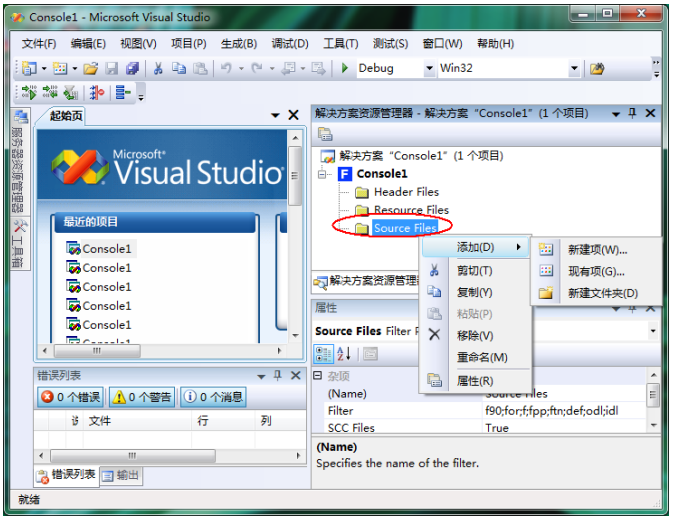


图 A-4　完成项目建立

完成以上步骤后，鼠标右键单击解解决方案下“Console1”|“Source File”，弹出菜单如图 A-4 所示。依次选择“添加”|“新建项”，弹出如图 A-5 所示的对话框。

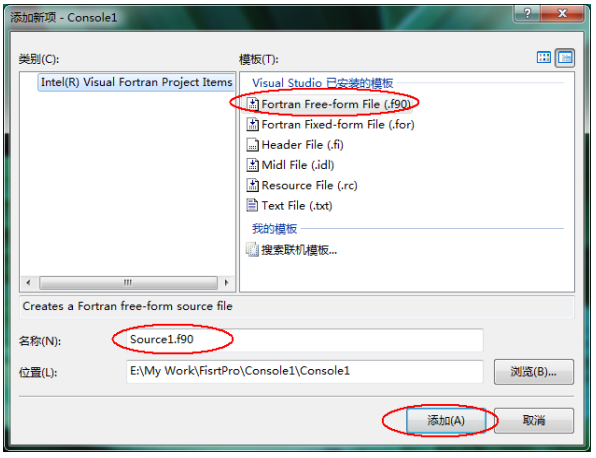


图 A-5 添加代码文件

初学者直接使用默认设置即可，完成设置之后鼠标左键单击“添加”。这一步完成后，即可在代码编辑区添加代码，如图 A-6 所示。

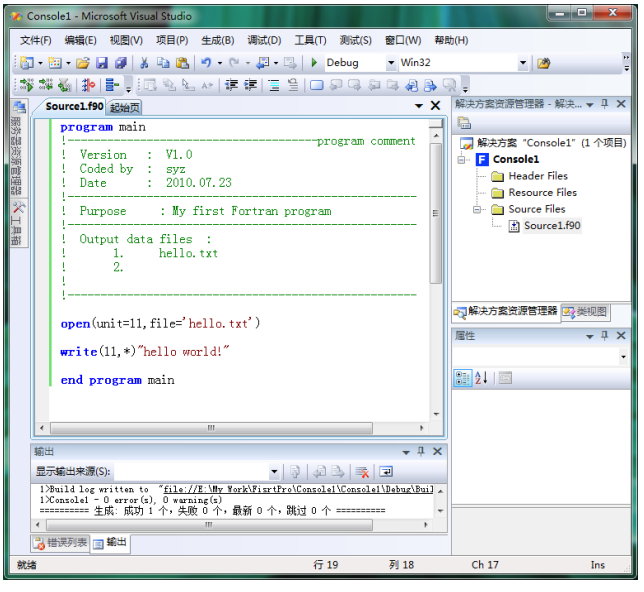


图 A-6 编写程序代码

现在可以到解决的目录下，寻找可执行文件了。在 IVF 中可以方便的直接打开解决方案目录，方法是鼠标右键盘单击“解决方案”console1”” | “在 Windows 资源管理器中打开文件夹”，如图 A-7 所示。

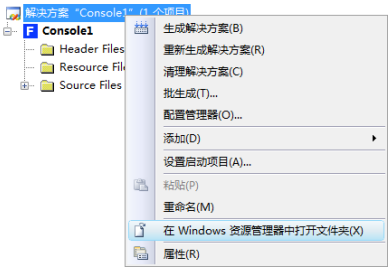


图 A-7 打开解决方案文件夹

以感叹号开头的语句属于注释部分，对程序结果没有影响。下面即可以编译程序，步骤是鼠标右键单击“Console1”，在弹出的对话框中选择“生成”，如图 A-8 所示。

这一步还可以在主菜单选择“生成”|“生成 Console1”，如图 A-9 所示。

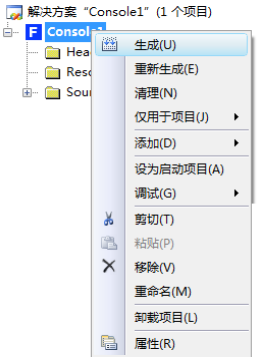


图 A-8　生成项目

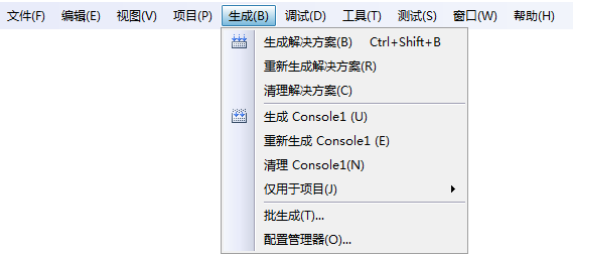


图 A-9　由主菜单生成项目

实际上这里的生成包括编译和链接两部分。也可以选择生成解决方案，两者的区别是解决方案对方案内的所有项目都生成，如果解决方案呢不止一个项目的话。如果是修改代码后又要生成，可以直接选择重新生成。

如果一切顺利的话，可以看到 IVF 做下角的输出窗口显示出编译及链接成功与否的信息，如图 A-10 所示。

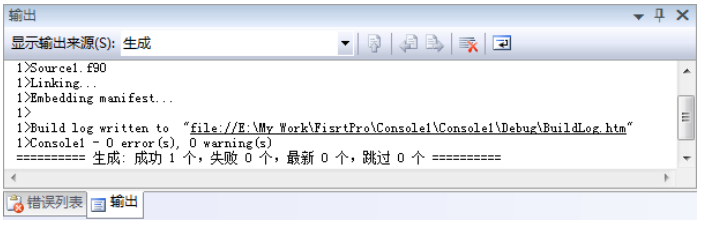


图 A-10　生成信息输出

当然，如果代码语法有误，这里将会报错。

如果一切顺利的话，这时候可以打开可执行文件运行查看结果了。在 IVF 中可以很方便的打开解决方案文件夹。鼠标右键单击“解决方案”Console1””|“在 Windows 资源管理器中打开文件夹”，如图 A-11 所示。

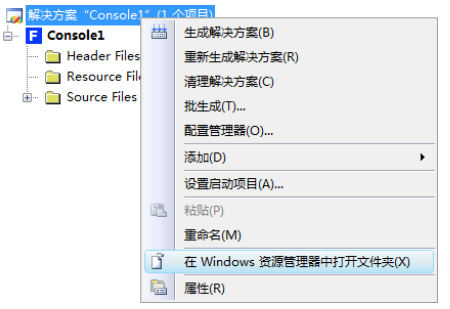


图 A-11　打开解决方案文件夹

进入解决方案文件夹后，在进入具体的项目文件夹，在项目的 Debug 文件夹下可以找到 Console1.exe 文件，如图 A-12 所示。

双击鼠标左键双击该程序，会在当前目录下生成 hello.txt 文件。打开该文件后，如图 A-13 所示。

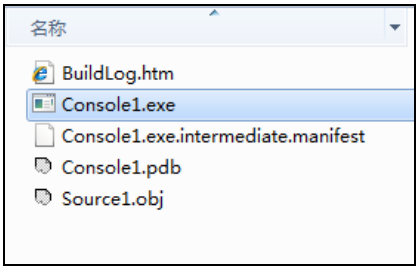


图 A-12 生成的可以执行文件

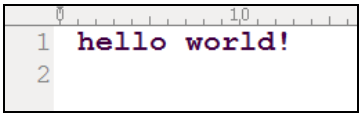


图 A-13 运行结果

至此已经完成任务，可以把 Console1 改名字或者复制到其他地方都可以运行。这里在编译时我们选择的是 Debug 格式，一般在确认程序正确以后可以改用 Release 格式编译，Release 格式编译出来的文件执行效率更高，但是 Debug 格式可以配合调试工具进行程序调试。

二、添加多个文件

有时候需要把子函数写在一个文件里，还有时候可能有多个文件需要加载到项目中，下面对刚才的程序添加一些内容。首先是把 Source1.f90 代码添加到一个子程序中，代码如下所示。

```
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : My first Fortran program
!-----------------------------------------------------
!  Output data files  :
!      1.     hello.txt
!      2.
!
!-----------------------------------------------------
open(unit=11,file='hello.txt')
write(11,*)"hello world!"
call sub1()
call sub2()
end program main
subroutine sub1()
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-----------------------------------------------------
!  Purpose     : sub1
!
```

```
!-------------------------------------------------------
write(11,*) "say hello from sub1! "
end subroutine sub1
```

然后按照往项目添加 source1.f90 的方法添加 source2.f90，解决方案窗口如图 A-14 所示。

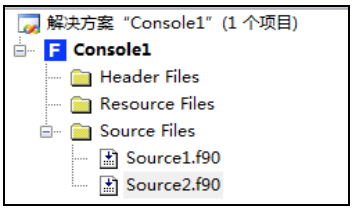


图 A-14　添加另一 fortran 文件

Source2.f90 代码如下所示。

```
subroutine sub2()
!---------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     : sub2
!
!-------------------------------------------------------
write(11,*) "say hello from sub2! "
end subroutine sub2
```

以上程序很明了，主程序在文件中输出“hello world!”,sub1 在文件中输出“say hello from sub1”,sub2 在文件中输出“say hello from sub2”。

按照前面的方法生成项目，执行程序后结果如图 A-15 所示。

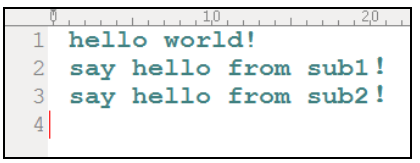


图 A-15　运行结果

可以看到执行结果如期望一样。

三、浮点数精度

每个程序员都有自己的编程习惯，原则上只要合乎语法都是可行的，但是好的编程习惯往往会增加工作效率，并且减少程序出错的机会。

熟悉 Fortran 语法的读者都知道 Fortran 有默认的变量规则。如果不做说明则一个变量以 I、J、K、L、M、N 开头会默认为整型，其他变量默认为单精度浮点数。不过这一点可以通过 implicit 命令设置各种习惯的默认方法。一个比较好的习惯，也是很多 Fortran 语言图书作者建议的是使用 implicit none 命令，如此则每一个变量都需要先声明，这样有时候可以有效的减少因变量使用出错的情况。

在本书中，对于浮点数都使用双精度来计算。作者的习惯如下代码所示：

```
subroutine  ***
!---comment
!---comment
implicit real*8(a-z)
```

```
integer::***
real*8::a(5),b(6)
real*8::c(4,3),d(5,2)
------------
------------
end subroutine ****
```

即一个变量如果不声明直接默认为双精度，对于整型变量单独声明，对于一维数组，二维数组也声明为双精度。因为一个程序毕竟整型是少数的，整型变量多用于循环、指标之类。个人感觉这样做变量很明晰，不容易出错。不过也不要求读者接受，只要读者对自己的习惯满意即可。

关于浮点数在 Compaq Fortran 中不支持 KIND=16 型，而在 IVF 中的编译器支持 KIND=16 的浮点数。实际计算者在双精度的情况下使用是比较多的。只有在精度要求特别高的时候才使用 Kind=16。双精度的数据科学记数法用 Q 表示，范例程序如下所示。

```
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-----------------------------------------------------
implicit real*16(a-z)
integer::a=3
b=2.4Q0
c=b+real(a)
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,*)c
end program main
```

程序编译后运行结果如图 A-16 所示。

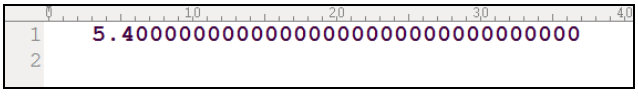


图 A-16　KIND=16 运行结果

关于默认的变量精度，在 IVF 中可以自行设置，比如要把默认的 real 型浮点数，设置成为 Kind=8 的精度。设置方法是选择“项目”|“Console1 属性”，如图 A-17 所示。

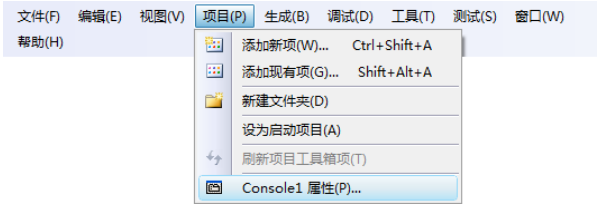


图 A-17　Console1 属性

完成以上操作后，弹出对话框如图 A-18 所示。

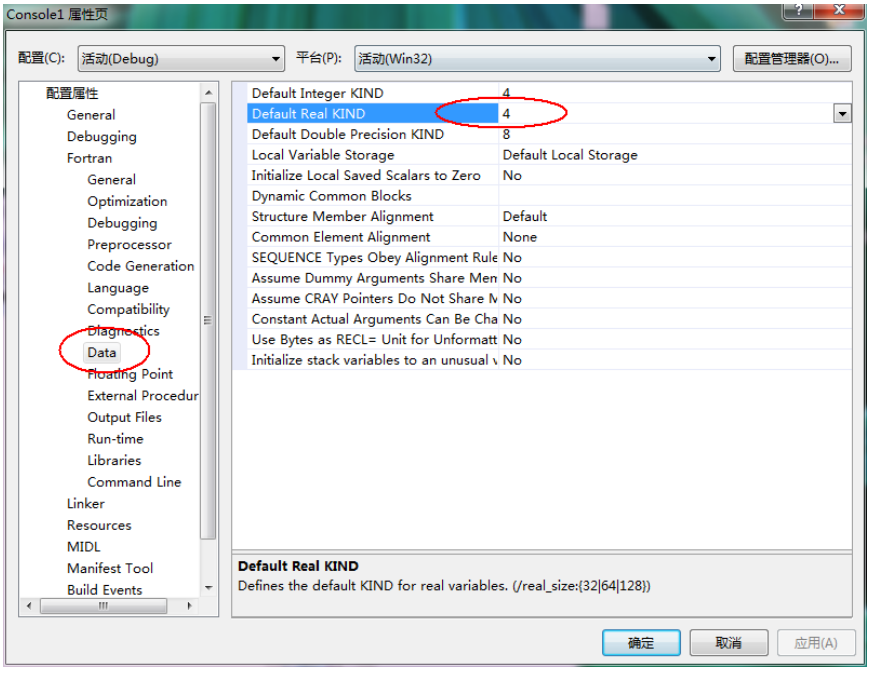


图 A-18　变量选择默认精度

依次选择“配置属性”|“Fortran”|“Data”|“Default Real KIND”，可以在后面填写 4，8 甚至 16，这里改成 16。

编写代码如下所示。

```
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------------
integer::a=1
real::b
b=real(a)
open(unit=11,file='result.txt')
write(11,*)b
end program main
```

程序运行后输出结果如图 A-19 所示。

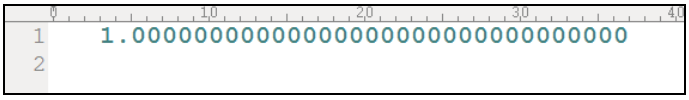


图 A-19　默认 real 为 KIND=16 输出结果

以上的程序是把一个整型变量，转化为 real 型，而这里的 real 型是 KIND=16。如果需要，也可以修改其他的变量默认属性，不过这样的默认设置方法作者并不建议读者使用。

附录 B　程序调试方法

程序调试方法是编程工作中最重要且基础的一项技能之一。一个好的程序员不是希望在程序编写过程中一次性的完全没有错误，而是在有错误的代码上能够通过程序调试快速找到并改正错误。事实上，试图一次性完全没有错误的想法是很不切实际的，而且完全没有必要的，尤其是面对大型的程序，有成千上万条语句。当然，养成良好的编程习惯，尽量在代码编写中减少错误，这无疑是很重要的。

程序调试是一项实践性比较强的工作，可惜目前很多编程教材中没有讲解，或者只是针对语言提供的帮助系统“理论性”地介绍，这样对很多初学者还是难以掌握程序调试方法。而如前所言，程序调试是相当重要的。可以说没有掌握程序调试方法，就并没有真正具备使用该语言处理复杂问题的能力。

不同的程序员有不同的调试习惯，程序调试方法也有许多。在学习程序调试时，不一定要求全，但要有效，能解决问题。

粗略的说，程序错误可以分为两类，一类是语法错误，另一类是逻辑错误。语法错误是比较容易找到的，才运行程序时，如果语法有错误则系统会自动给出错误信息。而逻辑错误，则比较麻烦，计算机并不能检查出逻辑错误。因为计算机是按照人的意图来进行运算，而计算机并不清楚人的意图。

为了解释逻辑错误，这里打个比方，在计算机工作空间中有 4 个变量 a=1、b=2、c=3、d=4。现在程序员希望计算的是 a+d，而在代码中程序员错误的把 a+b 写成了 a+d，如果原程序代码很多，而这一句只是在中间看上去很不起眼的一句。运行这段程序，结果当然是错的。如果在检查代码后程序员发现了这个错误，当然会改正过来。但是计算机是永远不会发现这个错误的，因为计算机并不知道程序员的意图，它以为也许程序员要计算的就是 a+b。这就是所谓的逻辑错误的一种情况。当然在实际问题中，情况可能远要比这样复杂。解决逻辑错误的，就需要有效的程序调试方法。

相比较而言，语法错误则相对容易发现，比如在调用函数时候，不小心把函数名称写错了；或者使用一个变量时，这个变量事先并没有任何的赋值或者声明；或者调用函数时候，参数设置不符合原函数给定的输入类型或格式，这些问题计算机会自动给出错误信息，程序员也很容易定位到错误的位置，从而改正错误，这里就不再介绍。

一、断点调试

这里以范例说明介绍手动断点调试错误的方法。

【例 1】编写一个函数计算

$$S=1+2+\cdots+n$$

编写的代码如下所示。

```
program main
!---------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------------
implicit real*8(a-z)
integer::n,s
open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')
!从输入文件读 n
read(11,*)n
call sub1(s,n)
!写入到输出文件中
write(12,*)s
end program main
subroutine sub1(s,n)
!--------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose    :  计算 s=1+2+3+...+n
!
!  Post Script :
!      1.       范例程序
!-------------------------------------------------------
integer::s,n,i
s=0
do i=1,n
   s=s+n
end do
end subroutine sub1
```

这个程序实际上是有问题的，这里假设我们初步查找并没发现错误。我们在可执行文件同目录下创建一个 fin.txt 文件，文件内容即为 5，如图 B-1 所示。

程序运行后，查看 fout.txt 为 25，如图 B-2 所示。

实际上即便我们拿笔算，也很容易算出来$1+2+3+4+5=15$。明显程序是有问题的。下面进行断点调试，目的是查找出问题出在什么地方，然后加以改正。

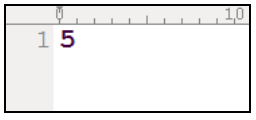


图 B-1　输入数据

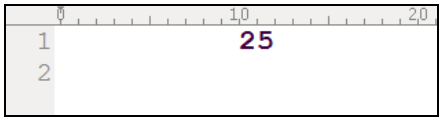


图 B-2　输出结果

要注意的是，在程序调试时候，默认的文件夹不再是 Debug 文件夹，而是直接转到当前工程目录下。把输入文件 fin.txt 复制一份到该文件夹下，即可以进行调试。

调试工具在主菜单“调试”一栏目，如图 B-3 所示。

从图 B-3 中可以看到，包括断点、启动调试、停止调试、逐过程、逐语句等功能。可以把这些工具设置到主窗口的快捷工具栏，设置方法是依次选择“视图”|“工具栏”|“调试”，

如图 B-4 所示。

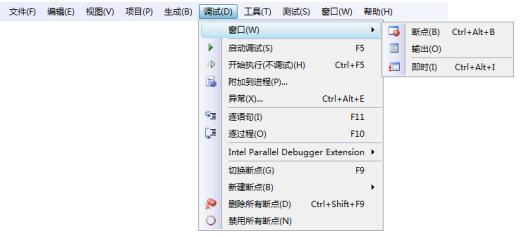


图 B-3 调试工具栏

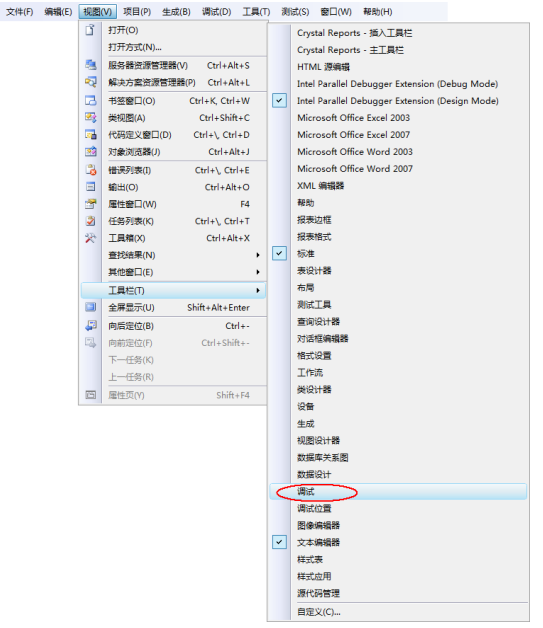


图 B-4 设置调试工具到快捷工具栏

实际上作者在调试的时候，很少利用图标工具，而是直接利用快捷键，这样会更快捷方便。其中取消和设置断点为“F9”键、启动调试为“F5”键，逐过程为“F10”键，逐语句为“F11”键，停止调试是“Shift+F5”组合键。

回到程序中，我们先看能否正确读入数据，断点设置到 read(11,*)n 这一行，如图 B-5 所示。

```
program main
!-------------------------------------program comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------

implicit real*8(a-z)

integer::n,s

open(unit=11,file='fin.txt')
open(unit=12,file='fout.txt')

!从输入文件读n
read(11,*)n

call sub1(s,n)

!写入到输出文件中
write(12,*)s

end program main


subroutine sub1(s,n)
!-------------------------------subroutine  comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------
!  Purpose     :  计算  s=1+2+3+...+n
```

图 B-5 设置断点

断点设置好之后，可以按下“F5”键，则程序运行到当前光标处，等待程序员的下一个动作。

可以按“F10”键向下走一步，这时候，可以看到 IVF 左下角的局部变量情况，如图 B-6 所示。

在图 B-6 中，可以看到局部变量 N 已经变为 5，表明读数据的过程是正确的，S 因为还没有赋值，在这一步系统设置为 0。还可以通过监视窗口输入要查看的变量名，如图 B-7 所示，这在变量较多的时候比较有用。

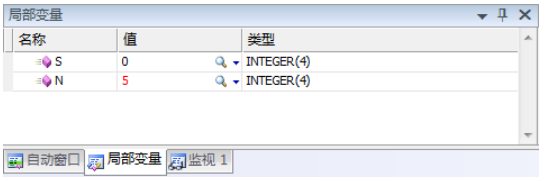


图 B-6　局部变量

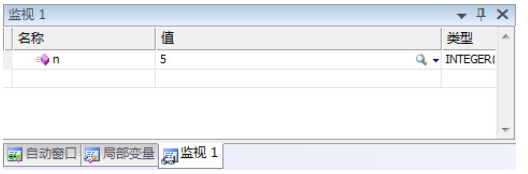


图 B-7　变量监视窗口

需要说明的是，如果调试者有需要，可以在局部变量处修改变量值，则后面程序的调试执行就以当前修改过后的为准，而不以原先程序获得的变量值为准，这为调试带来了较大的灵活性和方便性。

这里我们暂且不改变量值，往下走看问题出在什么地方。主程序中，调用完子程序 sub1 后直接输出结果，我们几乎可以断言程序应该就出在子程序 sub1 中，所以执行到该语句时我们用逐语句进行调试，如果用逐过程调试的话，就不再进入过程内部，这不是我们期望的。

一直按“F11”键逐语句往下走，进入 sub1 内部，直到光标跑到如图 B-8 所示的位置。

这时候查看局部变量，如图 B-9 所示。

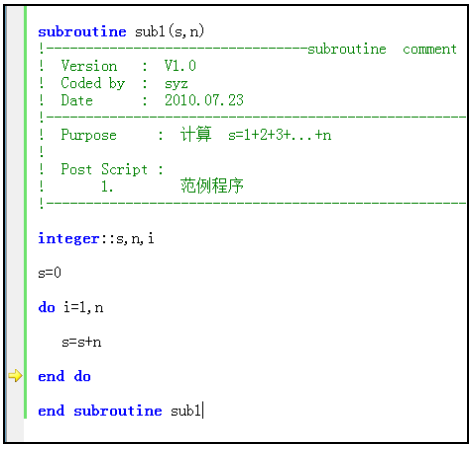


图 B-8　当前光标位置

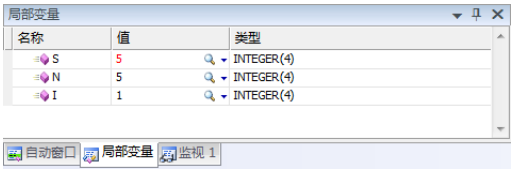


图 B-9　局部变量

从图 B-9 中可以看到，I=1，这时候是第一次循环，由公式 $S=1+2+\cdots+n$。这时候 S 应该就等于 1，但是看局部变量里 S=5，由此可见，问题就初值这里。

分析一下可以知道，原来不小心把 s=s+i 写成 s=s+n 了，后者的意思是

$$s=\underbrace{n+n+\cdots+n}_{n\text{个}}$$

按“shift+F5”组合键退出调试模式，去掉所有断点。再次执行程序，计算结果如图 B-10 所示。

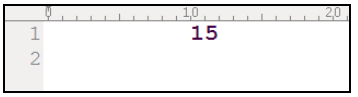


图 B-10 计算结果

这时可以检验，程序已经正确了。

实际应用时，可能错误不只一处，这时候可以按照刚才的方法继续向下查找错误，有时候甚至折回找错误。

二、条件断点

在 IVF 中还支持条件断点，这在 CVF 中是不支持的。条件断点在某些情况下会比较有效，尤其是条件循环的时候。

这里仍然以以上的范例说明，比如这次是计算

$$S=1+2+\ldots+100$$

调试者希望在 $S=1+2+\ldots+50+\ldots$ 加到 50 时到该处断点成立，之前的不查看变量中间值。设置断点位置如图 B-11 所示。

鼠标右键单击该断点，弹出对话框如图 B-12 所示。

```
subroutine sub1(s,n)
!-----------------------------------subroutine comment
!  Version   :  V1.0
!  Coded by  :  syz
!  Date      :  2010.07.23
!-------------------------------------------------------
!  Purpose     :  计算  s=1+2+3+...+n
!
!  Post Script :
!       1.        范例程序
!-------------------------------------------------------

integer::s,n,i

s=0

do i=1,n

   s=s+i

end do

end subroutine sub1
```

图 B-11 设置断点

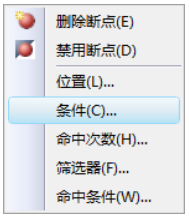


图 B-12 条件断点

选择“条件(C)…”菜单项，弹出如图 B-13 所示的对话框。

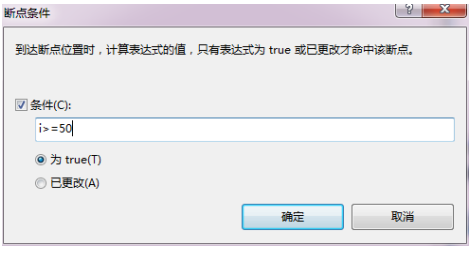


图 B-13 条件设置

在条件中输入 i>=50，注意该条件要符合 Fortran 语法。这时，断点由原先的小红点，变为红点中间有加号。

在编译程序后，按“F5”，光标停留在当前断点出，注意查看局部变量窗口，如图 B-14 所示。

可以看到 I=50，这时候 S=1225。这时候还没有执行 S=S+I，即 $S=1+2+\ldots+49$ 。那么如果程序向下走一步，则 S=1225+50=1275。如果程序向下走一步之后不是 1275，表明程序可能有问题，或者是目前调试者的分析有问题。

按“F11”，向下走一步骤，局部变量如图 B-15 所示。

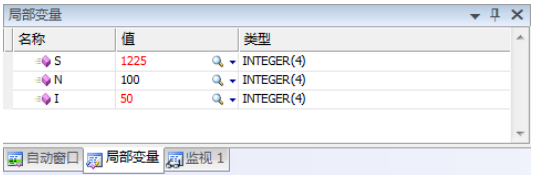


图 B-14　条件断点下的局部变量

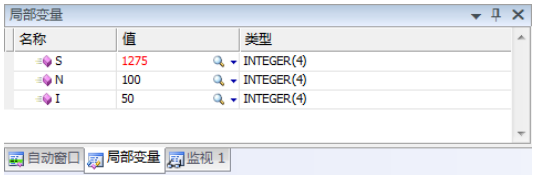


图 B-15　更新局部变量

图 B-15 中可以看到 S 已经更新了，如期望一样，但这时候 I 还没有更新，再循环的时候 I 将变为 51。

上面的循环是指定次数的循环，当条件是需要通过计算判断时候，比如 $\varepsilon < TOL$ 这一类循环时，条件断点可能会起到相当大的威力。

程序调试方法是相当灵活的，其实即便是没有了 Debug 格式编译，一个好的程序员依然可以想出办法进行程序调试，比如通过设置中间数据用文件输出，通过这样查看中间变量，有时候这个方法也是相当有效的。

一般来说程序调试可以按照如图 B-16 所示的流程进行，当然在实际操作时可以灵活处理。

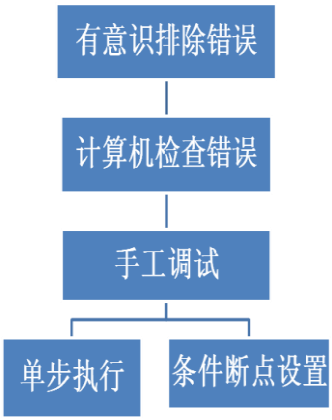


图 B-16　程序调试一般步骤

程序调试，本来就是涉及到很多技巧的，这需要多进行程序编写及调试实践。一般而言，掌握一种语言或环境的调试方法，对于其他语言或环境都是相通的。

附录 C　代码编辑器 UltraEdit

一般的软件开发系统都自带了比较友好的代码编辑器。使用 Windows 下的记事本也可以编辑代码，不过这有时候很不方便。一个好的代码编辑器虽然对程序本身无意义，但是起到较好的辅助作用，提高工作效率。

这里介绍一下 UltraEdit 及其 Fortran 语法高亮设置，UltraEdit 虽然仅仅是一个编辑器，但是有很多强大的功能，比如可以设置 FTP，可以直接运行 DOS 命令等，尤其是可以扩展设置几乎各种语言的语法高亮，所以很受程序员的青睐。

这里以 UltraEdit 16 为例介绍语法高亮设置，要设置 Fortran 语法高亮，首先需要准备高亮文件，内容如图 C-1 所示。

```
/L1"Fortran 2003" Line Comment = ! Line
/Delimiters = ~ ! @%^&*()-+=|\/{}[]:;"'<
/Function String = "%[ ^t]+SUBROUTINE[ ^
/Function String 1 = "%[ ^t]+[0-9A-Z]++[
/Indent Strings = "THEN" "ELSE" "DO" "FO
/Unindent Strings = "ELSE" "END IF" "END
/Open Brace Strings =  "(" "["
/Close Brace Strings = ")" "]"
/Open Fold Strings = "FUNCTION" "MODULE"
/Close Fold Strings = "END FUNCTION" "EN
/C1"Statements"
ALLOCATABLE ALLOCATE ASSIGNMENT
BLOCK
CALL CASE CHARACTER COMMON COMPLEX CONTA
DATA DEALLOCATE DIMENSION DO DOUBLE
ELEMENTAL ELSE ELSEIF ELSEWHERE END ENDD
FORALL FORMAT FUNCTION
GO GOTO
IF IMPLICIT IN INOUT INQUIRE INTEGER INT
LOGICAL
MODULE
NAMELIST NONE NULLIFY
ONLY OPERATOR OPTIONAL OUT
PARAMETER POINTER PRECISION PRIVATE PROC
REAL RECURSIVE RESULT RETURN
SAVE SELECT SEQUENCE STOP SUBROUTINE
TARGET THEN TO TYPE
USE
WHERE WHILE
/C2"Intrinsic Operators"
```

图 C-1　Fortran 语法高亮文件截图

把以上文件以文件名 Fortran.uew 保存，复制到 UltraEdit 16 安装目录的 wordfiles 文件夹下。这时用 UltraEdit 打开 Fortran 程序文件就会显示语法高亮。如果不满意系统的默认高亮设置，可以自行修改各种配色方案。

设置方法是主菜单“高级”|“配置”，如图 C-2 所示。

这时弹出对话框如图 C-3 所示。

图 C-2　语法高亮配置

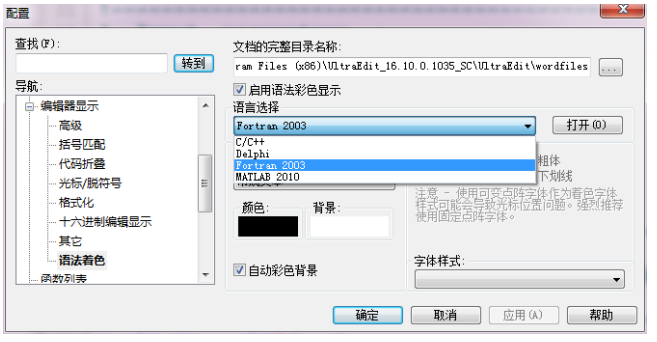


图 C-3　语法高亮配置对话框

选择 Fortran2003 即可以对高亮设置进行自定义配置。如开发人员自行配置以后，打开 Fortran 代码文件，显示效果如图 C-4 所示。

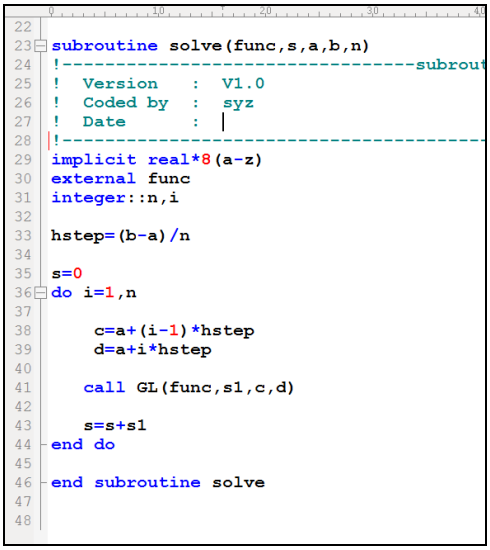


图 C-4　Fortran 语法高亮设置效果

读者不需要手工输入以上文件，随书光盘中将给出 Fortran.uew 文件，实际上这些文件往往都不是由生产商提供的，而是由程序员编写的，如果使用者有兴趣，也可以自行修改高亮文件。关于 UltraEdit 的其他功能这里不再介绍。

参考文献

1．《现代应用数学手册》编委会编．现代应用数学手册，计算与数值分析卷．北京：清华大学出版社，2005．

2．林成森．数值计算方法（上、下）（第二版）．北京：科学出版社，2005．

3．冯康等编．数值计算方法．北京：国防工业出版社，1978．

4．彭国伦．Fortran95 程序设计．北京：中国电力出版社，2002．

5．张贤达．矩阵分析与应用．北京：清华大学出版社，2004．

6．李庆扬、王能超、易大义编．数值分析（第四版）．清华大学出版社、施普林格出版社，2001．

7．宋叶志，贾东永．MATLAB 数值分析与应用．北京：机械工业出版社，2009．

8．Timothy Sauer．Numerical Analysis．Person Education,2006．

9．David Kincaid、Ward Cheney．Numerical Analysis :Mathematics of Scientific Computing,Third Edition,Brooks cole Pub co,2002.

10．Stephen J.Chapman．Fortran95/2003 for Scientists and Engineers．McGraw-Hill Companies，Inc，2008．

11．Cleve B．Moler．Numerical Computing with MATLAB．Society for Industrial and Applied Mathmatics,2004．

12．James W.Demmel. Applied Numerical Linear Algebra,Society for Industrial and Applied Mathematics,1997.

13．Lloyd N.Trefthen David Baud,III. Numerical Linear Algebra,Society for Industrial and Applied Mathematics,1997.

14．G.H.Golub and C.F.Van Loan,Matrix Computations,3rd ed.,Johns Hopkins U.Press,Baltimeore,1996.

15．Steven J.Leon.Linear Algegbra with Applications(Sixth Editsion),Pearson Education,Inc.,2002.

16．Willian H．Press、Saul A．Teukolsky、William T．Vetterling、Brian P．Flannery．NUMERICAL RECIPES (Third Editon)．Cambrige University Press,2007．

17．Ward Cheney and Will Light.A Course in Approximation Theory.Brooks Publishing Company,2000.

18．Kleibaum,Kupper,Muller and Nizam.Applied Regression Ananlysis and Other Multivarialbe Mehods.Brooks Publishing Company,1998.