计算机语言技术系列丛书

学苑出版社

FORTRAN和PASCAL语言

数值计算方法

科学计算的技巧与程序库

（续篇）

林君等　编

学苑出版社

计算机语言技术系列丛书

FORTRAN 和 PASCAL 语言

数值计算方法：科学计算的技巧与程序库

（续篇）

林　君　等编

学 苑 出 版 社

1 9 9 3

(京)新登字151号

内容提要

本书是《C语言数值计算方法:科学计算的技巧与程序库》的续版,书中给出了数值计算方法中200多个实用程序,每个程序都分别用FORTRAN和PASCAL两种语言编写。这些程序本身又构成科学计算的完整子程序库。

书中程序所涉及的主要专题是:特殊线性方程组,有理函数的内插与外推,带奇点的函数积分,用Van Wijngaarden—Dekker—Brent方法求根,具有自适应步长控制的微分方程的Bulirsch—Stoer积分。一些不太常见但又非常有用的专题是:统计概率函数的程序,贝塞尔(Bessel)函数和修正的贝塞尔函数,来自伽玛(r)分布、泊松(Poisson)分布和二元分布的随机偏差,数据加密标准,确定数据等价类的分类,线性规划的实施,最优化方法中的模拟退火法,傅里叶变换、正弦变换和余弦变换、线性预测和线性预测编码,数字滤波,统计相关的熵度量,稳健统计拟合等,几乎包括了数值计算方法所涉及的全部内容。

本书中的程序又可以称为数值方法程序大全,将书中的FORTRAN语言程序库、PASCAL语言程序库与前一版本中的C语言程序库一起,构成了三种主要语言的数值方法程序库,可供科学计算的研究工作者参考使用,也可以作为工具书。

本书还可作为计算机软件研究者参考书。

需要本书的用户,请与北京8721信箱联系,邮码:100080,**电话:**2562329。

计算机语言技术系列丛书

FORTRAN和PASCAL语言

数值计算方法:科学计算的技巧与程序库

续篇)

编　　者:林　君
责任编辑:徐建军
出版发行:学苑出版社　　**邮政编码:**100032
社　　址:北京市西城区成方街33号
印　　刷:北京东升印刷厂印刷
开　　本:787×1092　1/16
印　　张:24.625　**字数:**578千字
印　　数:1～5000
版　　次:1993年11月北京第1版第1次
ISBN7-5077-0776-8/TP.8
本册定价:　27.00元

目　　录

对 FORTRAN 和 PASCAL 语言版的说明

本书是《C 语言数值计算方法：科学计算的技巧与程序库》一书的续集，是专门为那些熟悉 FORTRAN 或者是熟悉 PASCAL 语言但对 C 语言不太了解的读者而编写的。在 C 语言一版中，对每一种数值计算的主题，都提供了一定量的一般讨论，一定量的解析数学和一定量的算法讨论。在本续集中，略去了这些内容，只给出在 C 语言一版中所给出的数值计算方法程序库中每一程序对应的程序，这些程序分别采用 FORTRAN 语言和 PASCAL 语言来编写，其中 FORTRAN 语言编写的算法程序采用了中文注释(对应的 C 语言版中的程序是用英文注释的)。为了简单起见，在用 PASCAL 语言编写的程序中略去了这些注释，为了能够与 C 语言版本中的程序一一对应，在本书中的每段程序的开头均给出该程序名，并且列出了该程序所属的章节标题，若在该章节中含有多个程序，则用标号顺序标列，以便于读者查找。

本书假定读者具有一定的数学修养，即具有相当于物理科学、或工程科学、或经济学、或计量社会科学的大学程度的数学预备知识，并且假定读者熟悉 RORTRAN 或者是熟悉 PASCAL 语言，并且知道如何为计算机编制程序。为了能够较好地使用本书，读者最好手中有一本《C 语言数值计算方法：科学计算的技巧与程序库》，以便于了解每一段程序的数学背景以及该算法的内容。

对于那些不甚了解计算机程序的读者，也可以把本书的大多数程序当作“黑盒子”来使用，以实现读者所期望的目的。这些读者也可以通过使用“黑盒子”逐步积累经验，最终弄清楚其奥秘所在。

本书包含了数值分析课程所包含的全部内容，而且有些章节的内容已超出了数值分析课程的标准处理范围，这些内容对数值计算特别有用，而在通常的数值计算教科书中是难以找到的，因此可以把本书称为“数值计算方法大全”(包括 C 语言版本)。

本书将 FORTRAN 语言和 PASCAL 语言编写的数值方法程序库分为两部分，第一部分为 FORTRAN 数值方法程序库，第二部分为 PASCAL 数值方法程序库，而在计算机程序表中，对每一个程序均给出了 FORTRAN 和 PASCAL 程序所在的页码，以便于读者查找。在本书的附录 B 中还给出了程序隶属表，该表对 FORTRAN 和 PASCAL 两部分程序均适用。

由于每一种程序设计语言都有自身的编程规则与设计风格，因此在每一部分的开头均给出使用该语言版本时的注意事项与说明。

参加本书编写和审校的还有别红霞、张淑艳、姜敏。

在使用本书过程中，如果发现由于印刷等原因造成的错误，请读者批评指正。

在本书的出版过程中，北京希望电脑公司给予大力支持，这里表示衷心的感谢。

编　者

1993

计算机程序表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN (页码)	PASCAL (页码)
1.0	FLMOON	由日期计算的月相	(13)	(214)
1.1	JULDAY	由日期计算的儒略天数	(13)	(214)
1.1	BADLUK	当月亮圆时为星期五的 13 日	(14)	(215)
1.1	CALDAT	由儒略天数计算的公历日期	(15)	(216)
2.1	GAUSSJ	矩阵求逆和线性方程求解,高斯—约旦法(Gauss—Jordan)	(17)	(217)
2.3	LUDCMP	线性方程解,LU 分解法	(19)	(218)
2.3	LUBKSB	线性方程解,回代法	(20)	(219)
2.6	TRIDAG	线性方程解,三对角线性方程组	(21)	(220)
2.7	MPROVE	线性方程解,迭代改善	(22)	(220)
2.8	VANDER	线性方程解,范德蒙(Vandermonde)矩阵	(22)	(221)
2.8	TOEPLZ	线性方程解,托普列茨(Toeplitz)矩阵	(23)	(222)
2.9	SVDCMP	矩阵的奇异值分解	(24)	(223)
2.9	SVDKSB	奇异值回代	(30)	(226)
2.10	SPARSE	线性方程解,稀疏矩阵,共轭梯度法(最速下降法)	(31)	(227)
3.1	POLINT	内插法,多项式	(34)	(229)
3.2	RATINT	内插法,有理函数	(35)	(229)
3.3	SPLINE	内插法,构造一个三次样条函数	(36)	(230)
3.3	SPLINT	内插法,求一个三次样条函数值	(37)	(231)
3.4	LOCATE	查找一个有序表,二分法	(37)	(232)
3.4	HUNT	查找一个有序表,相关调用	(38)	(232)
3.5	POLCOE	从一个数值表求多项式的系数	(39)	(233)
3.5	POLCOF	从一个数值表求多项式的系数	(39)	(234)
3.6	POLIN2	内插法,二维多项式	(40)	(234)
3.6	BCUCOF	内插法,二维的,构造双三次函数	(41)	(235)
3.6	BCUINT	内插法,二维的,求双三次函数的值	(42)	(236)
3.6	SPLIE2	内插法,二维的,构造二维样条函数	(42)	(236)
3.6	SPLIN2	内插法,二维的,求二维样条函数值	(43)	(237)
4.2	TRAPZD	由外推梯形准则求一个函数的积分	(44)	(238)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN（页码）	PASCAL（页码）
4.2	QTRAP	求一个函数的积分到期望的精度，外推梯形规则	(44)	(238)
4.2	QSIMP	求一个函数的积分到期望的精度，辛普森规则	(45)	(238)
4.3	QROMB	求一个函数的积分到期望的精度，Romberg自适应法	(45)	(239)
4.4	MIDPNT	由扩展中点准则求一个函数的积分	(46)	(240)
4.4	QROMO	求一个函数的积分到期望的精度，开式Romberg	(46)	(240)
4.4	MIDINF	关于一个半无限区间函数的积分	(47)	(241)
4.4	MIDSQL	具有一个平方根奇异性函数的积分	(47)	(241)
4.4	MIDSQU	具有一个反平方根奇异性函数的积分	(48)	(242)
4.4	MIDEXP	指数下降函数的积分	(48)	(242)
4.5	QGAUS	高斯求积分	(48)	(243)
4.5	GAULEG	计算高斯一勒让德权系数和横坐标	(49)	(243)
4.6	QUAD3D	在一个三维空间求一个函数的积分	(50)	(244)
5.1	EULSUM	级数求和，Euler－Van Wijngaarden 算法	(51)	(245)
5.3	DDPOLY	多项式，特定导数的快速求值	(51)	(245)
5.3	POLDIV	用一个多项式除另一个多项式	(52)	(246)
5.6	CHEBFT	用车比雪夫多项式逼近一个函数	(53)	(246)
5.6	CHEBEV	车比雪夫多项式求值	(53)	(247)
5.7	CHINT	对一个已用车比雪夫逼近的函数求积分	(54)	(247)
5.7	CHDER	对一个已用车比雪夫逼近的函数求微分	(54)	(247)
5.8	CHEBPC	来自一个车比雪夫逼近的多项式系数	(55)	(248)
5.8	PCSHFT	一个移位的多项式的多项式系数	(55)	(248)
6.1	GAMMLN	伽玛函数(Γ)的对数	(57)	(250)
6.1	FACTRL	阶乘函数	(57)	(250)
6.1	BICO	二项式系数函数	(58)	(251)
6.1	FACTLN	阶乘函数，对数	(58)	(251)
6.1	BETA	贝塔(β)函数	(58)	(251)
6.2	GAMMP	不完全伽玛函数	(58)	(251)
6.2	GAMMQ	补余不完全伽玛函数	(59)	(252)
6.2	GSER	不完全伽玛函数，级数求值	(59)	(252)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN (页码)	PASCAL (页码)
6.2	GCF	不完全伽玛函数，连分式求值	(60)	(253)
6.2	ERF	误差函数	(60)	(253)
6.2	ERFC	互补的误差函数	(61)	(253)
6.2	ERFCC	互补的误差函数，简洁程序	(61)	(253)
6.3	BETAI	不完全的贝塔(β)函数	(61)	(254)
6.3	BETACF	不完全的贝塔函数，连分式求值	(62)	(254)
6.4	BESSJ0	贝塞尔函数 J_0	(62)	(255)
6.4	BESSY0	贝塞尔函数 Y_0	(63)	(255)
6.4	BESSJ1	贝塞尔函数 J_1	(64)	(256)
6.4	BESSY1	贝塞尔函数 Y_1	(64)	(256)
6.4	BESSJ	整阶贝塞尔函数 J	(65)	(257)
6.4	BESSY	整阶贝塞尔函数 Y	(66)	(258)
6.5	BESSI0	修正的贝塞尔函数 I_0	(66)	(258)
6.5	BESSK0	修正的贝塞尔函数 K_0	(67)	(258)
6.5	BESSI1	修正的贝塞尔函数 I_1	(67)	(259)
6.5	BESSK1	修正的贝塞尔函数 K_1	(68)	(259)
6.5	BESSI	整阶的修正贝塞尔函数 I	(68)	(259)
6.5	BESSK	整阶的修正贝塞尔函数 K	(69)	(260)
6.6	PLGNDR	连带的(球谐)勒让德多项式	(69)	(260)
6.7	EL2	第一类和第二类椭圆积分	(70)	(261)
6.7	CEL	完全的，所有第三类椭圆积分	(71)	(262)
6.7	SNCNDN	雅可比椭圆函数	(72)	(262)
7.1	RAN0	随机偏差，改善一个现存的发生器	(75)	(264)
7.1	RAN1	均匀随机偏差	(75)	(264)
7.1	RAN2	均匀随机偏差	(76)	(265)
7.1	RAN3	减法方法的均匀随机偏差	(77)	(266)
7.2	EXPDEV	指数随机偏差	(78)	(267)
7.2	GASDEV	正态分布的(Box－Muller)随机偏差	(78)	(267)
7.3	GAMDEV	伽玛定律分布的随机偏差	(78)	(267)
7.3	POIDEV	泊松分布的随机偏差	(79)	(268)
7.3	BNLDEV	二项式分布的随机偏差	(80)	(269)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN（页码）	PASCAL（页码）
7.4	IRBIT1	产生随机位序列	(81)	(270)
7.4	IRBIT2	产生随机位序列	(81)	(271)
7.5	RAN4	使用数据加密标准的随机偏差	(82)	(272)
7.5	DES	使用数据加密标准的加密	(83)	(273)
7.5	KS	加密，数据加密标准的密钥表	(84)	(275)
7.5	CYFUN	加密，数据加密标准的密码函数	(85)	(275)
8.1	PIKSRT	用直插法分类一个数组	(87)	(278)
8.1	PIKSR2	用直插法分类二个数组	(87)	(278)
8.1	SHELL	用 Shell 方法分类一个数组	(88)	(279)
8.2	SORT	用堆分类法分类一个数组	(88)	(279)
8.2	SORT2	用堆分类法分类两个数组	(89)	(280)
8.3	INDEXX	分类，为一个数组构造一个索引	(90)	(281)
8.3	SORT3	分类，用一个索引分类三个或多个数组	(91)	(282)
8.3	RANK	分类，为一个数组构造一个秩表	(92)	(282)
8.4	QCKSRT	用快速分类法分类一个数组	(92)	(282)
8.5	ECLASS	确定等价类	(94)	(284)
8.5	ECLAZZ	确定等价类	(95)	(284)
9.0	SCRSHO	绘制一个寻根函数图	(96)	(286)
9.1	ZBRAC	一个函数的根，划界	(97)	(287)
9.1	ZBRAK	一个函数的根，划界	(97)	(287)
9.1	RTBIS	一个函数的根，二分法查找	(98)	(288)
9.2	RTFLSP	一个函数的根，错位法查找	(99)	(288)
9.2	RTSEC	一个函数的根，割线法查找	(100)	(289)
9.3	ZBRENT	一个函数的根，Brent 法查找	(100)	(290)
9.4	RTNEWT	一个函数的根，牛顿—拉富生法查找	(102)	(291)
9.4	RTSAFE	一个函数的根，牛顿—拉富生和二分法查找	(102)	(292)
9.5	LAGURE	一个多项式的根，Laguerre 法	(103)	(292)
9.5	ZROOTS	一个多项式的根，紧缩的 Laguerre 法	(105)	(294)
9.5	QROOT	一个多项式的根，Bairstow 法求复根或重根	(106)	(295)
9.6	MNEWT	非线性方程组，牛顿—拉富生法	(106)	(296)
10.1	MNBRAK	一个函数的极小值，划界	(108)	(298)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN（页码）	PASCAL（页码）
10.1	GOLDEN	一个函数的极小值，黄金分割法查找	(109)	(299)
10.2	BRENT	一个函数的极小值，Brent 法查找	(110)	(300)
10.3	DBRENT	一个函数的极小值，使用导数信息查找	(112)	(301)
10.4	AMOEBA	一个函数的极小值，多维空间的下降单纯形法	(115)	(302)
10.5	POWELL	一个函数的极小值，多维空间的 Powell 法	(117)	(304)
10.5	LINMIN	一个函数的极小值，多维空间的线性极小	(118)	(305)
10.6	FRPRMN	一个函数的极小值，多维空间的共轭梯度法	(119)	(306)
10.6	DFLDIM	一个函数的极小值，使用 dlinmin	(120)	(307)
10.7	DFPMIN	一个函数的极小值，高维空间的变尺度法	(121)	(307)
10.8	SIMPLX	一个线性函数的线性规划极大值	(122)	(309)
10.8	SIMP1	线性规划，使用 Simplx	(125)	(311)
10.8	SIMP2	线性规划，使用 Simplx	(125)	(311)
10.8	SIMP3	线性规划，使用 Simplx	(126)	(312)
10.9	ANNEAL	模拟退火求极小（旅行推销员问题）	(126)	(313)
11.1	JACOBI	一个对称的本征值与本征向量	(131)	(317)
11.1	EIGSRT	本征向量，由本征值排序	(133)	(318)
11.2	TRED2	一个实的对称矩阵的 Householder 约化法	(134)	(319)
11.3	TQLI	一个对称三对角矩阵的本征值和本征向量	(136)	(320)
11.5	BALANC	均衡一个非对称矩阵	(137)	(321)
11.5	ELMHES	约化一个一般矩阵为 Hessenberg 形式	(138)	(322)
11.6	HQR	一个 Hessenberg 矩阵的本征值	(140)	(323)
12.2	FOUR1	一维傅里叶变换（FFT）	(144)	(326)
12.3	TWOFFT	两个实函数的傅里叶变换	(145)	(327)
12.3	REALFT	一个实函数的傅里叶变换	(146)	(327)
12.3	SINFT	用 FFT 进行正弦变换	(147)	(328)
12.3	COSFT	用 FFT 进行余弦变换	(148)	(328)
12.4	CONVLV	使用 FFT 的数据卷积与剥卷积	(149)	(329)
12.5	CORREL	使用 FFT 的数据相关或自相关	(150)	(330)
12.7	SPCTRM	用 FFT 进行功率谱估计	(150)	(331)
12.8	MEMCOF	功率谱估计，求最大熵系数	(152)	(332)
12.8	EVLMEM	用最大熵系数作功率谱估计	(153)	(333)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN（页码）	PASCAL（页码）
12.10	FIXRTS	一个多项式的根，单位圆内映射	(153)	(333)
12.10	PREDIC	用 MEM 系数作线性预测	(154)	(334)
12.11	FOURN	多维傅里叶变换(FFT)	(155)	(334)
13.1	MOMENT	计算一组数值的分布矩	(158)	(337)
13.2	MDIAN1	由分类计算一组数值的中位数	(159)	(337)
13.2	MDIAN2	迭代计算一组数值的中位数	(159)	(338)
13.4	TTEST	对不同均值的"学生"t—检验	(161)	(339)
13.4	AVEVAR	计算一组数值的均值和方差	(161)	(339)
13.4	TUTEST	对具有不等偏差的均值的"学生"t—检验	(161)	(340)
13.4	TPTEST	对具有成对数据的均值的"学生"t—检验	(162)	(340)
13.4	FTEST	对不同偏差的 F—检验	(162)	(341)
13.5	CHSONE	数据和模型间区别的 X^2 检验	(163)	(341)
13.5	CHSTWO	两组数据间区别的 X^2 检验	(163)	(342)
13.5	KSONE	依附着模型数据的 Kolmogorov－Smirnov 检验	(164)	(342)
13.5	KSTWO	两组数据间的 Kolmogorov—Smirnov 检验	(164)	(343)
13.5	PROBKS	Kolmogorov—Smirnov 概率函数	(165)	(344)
13.6	CNTAB1	用 X^2 进行列联表分析	(165)	(344)
13.6	CNTAB2	用熵测定进行列联表分析	(166)	(345)
13.7	PEARSN	两组数据间的相关，Pearson 法	(168)	(346)
13.8	SPEAR	两组数据间的相关，Spearman 秩	(168)	(346)
13.8	CRANK	秩，由其代替数组元素	(169)	(347)
13.8	KENDL1	两组数据间的相关，Kendall τ 法	(170)	(348)
13.8	KENDL2	用 Kendall τ 法进行列联表分析	(171)	(348)
13.9	SMOOFT	用 FFT 圆滑数据	(172)	(349)
14.2	FIT	拟合数据到一直线，最小二乘法	(174)	(351)
14.3	LFIT	通用正规方程组的线性最小二乘拟合	(175)	(352)
14.3	COVSRT	协方差矩阵，用 lfit 分类	(177)	(353)
14.3	SVDFIT	通用的，奇异值分解最小二乘拟合	(178)	(354)
14.3	SVDVAR	奇异值分解的方差	(179)	(355)
14.3	FPOLY	用 lfit 或 svdfit 拟合一个多项式	(179)	(355)

续表

章节	程序名	功能说明	FORTRAN（页码）	PASCAL（页码）
14.3	FLEG	用 lfit 或 svdfit 拟合一个 Legendre（勒让德）多项式	(179)	(356)
14.4	MRQMIN	非线性最小二乘拟合，马奎特法	(180)	(356)
14.4	MRQCOF	用 mrqmin 进行非线性最小二乘拟合	(182)	(357)
14.4	FGAUSS	用 mrqmin 拟合高斯数总和	(182)	(358)
14.6	MEDFIT	稳健地拟合数据到一直线，最小绝对偏差	(183)	(359)
14.6	ROFUNC	稳健地拟合数据，使用 medfit	(184)	(360)
15.1	RK4	ODEs 的一步积分，四阶龙格—库塔法	(186)	(361)
15.1	RKDUMB	由四阶龙格—库塔法进行 ODE 积分	(186)	(361)
15.2	RKQC	具有准确监测的 ODEs 一步积分	(187)	(362)
15.2	ODEINT	具有准确监测的 ODEs 积分	(188)	(363)
15.3	MMID	由修正中点法进行 ODEs 积分	(190)	(364)
15.4	BSSTEP	Bulirsch－Stoer 步 ODEs 积分	(190)	(365)
15.4	RZEXTR	由 bsstep 使用的有理函数外推	(191)	(366)
15.4	PZEXTR	由 bsstep 使用的多项式外推	(193)	(367)
16.1	SHOOT	两点边值问题，打靶法解	(194)	(369)
16.2	SHOOTF	两点边值问题，打靶到一拟合点	(195)	(369)
16.3	SOLVDE	两点边值问题，松弛法解	(196)	(370)
16.3	BKSUB	由 Solvde 使用的回代	(198)	(372)
16.3	PINVS	由 Solvde 使用的对角化子块	(199)	(372)
16.3	RED	由 Solvde 使用的矩阵阵列	(200)	(374)
16.4	SFROID	使用 Solvde 获得的球谐函数	(201)	(374)
16.4	DIFEQ	由 Sfroid 使用的球体矩阵系数	(202)	(376)
17.5	SOR	由同步超松弛法解椭圆 PDE	(204)	(378)
17.6	ADI	由交换方向隐函数法解椭圆 PDE	(205)	(379)

第一部分：FORTRAN 数值方法程序库

引　言

用 FORTRAN 语言编写的数值方法程序库中，约定采用 PAUSE 语句处理所有误差和例外情形。一般说来，在出现暂停之后不准备再继续执行程序，但是 FORTRAN 允许用户进行这样的偿试（只要产生的误差不是灾难性的或难以继续的情况）。

对于不熟悉 FORTRAN 的 Pascal 读者，对 FORTRAN 中变量都是隐式说明的规则不了解，该规则就是：以字母 I、J、K、L、M、N 开头的变量都隐式说明为整型（INTEGER）变量，而其它所有变量都被隐式说明为实型（REAL）变量，这个规则又称为 I－N 规则。

本数值方法程序库是用 FORTRAN－77 编写的，可以在运行 VMS 的 DEC VAX 11/780 以及运行 PC－DOS（2.0 以上版本）的 IBM PC/XT/AT 及其兼容机上运行。

本书的程序已经通过示范程序验证，为了减少印刷错误，源程序代码是直接取出的，但本次出版印刷难免出现错误，一旦读者发现这方面的问题，请转告我们。

使用 FORTRAN－77 编写数值算法，我们使用了如下的标准结构：

1. 迭代

本书采用锯齿状来书写控制结构，但结构本身不呈锯齿状，例如使用 DO—循环进行简单的迭代时，总是写成如下的形式：

```
DO 12  J=1,20
   S(J)=0
   DO 11  K=5,10
      S(J)=S(J)+A(J,K)
      11  CONTINUE
 12  CONTINUE
```

上述的例子中，标号<u>11</u>和<u>12</u>的下面有一个下横线，表示该标号为一个驯服标号（tame label），即作为标准结构部分且不会另外转移的标号。我们在 DO—循环书写中，每对驯服标号的开头和结尾处的锯齿形状对齐，以便于阅读。驯服标号下面的横线主要是为了提醒读者注意，在实际程序输入时，不要加驯服标号下面的横线。

2. IF 结构

在 FORTRAN－77 的标准中，采用 IF—THEN—ELSE—END IF 的标准结构，程序例子可以参见第一章中的 JULDAY 程序。这种标准结构类似于 Pascal、Algol 和其它语言。

3. DO—While 迭代

除 FORTRAN 之外，大多数流行的程序设计语言都提供象如下 Pascal 的例子那样的结构：

```
WHILE(n<1000) DO BEGIN
   n:=2*n
```

```
    j:=j+1
END;
```

在 FORTRAN－77 标准范围内，实现上述结构功能要求有一个驯服标号，形如：

```
17  IF (N.LT.1000) THEN
        N=2*n
        J=J+1
GOTO 17
ENDIF
```

在 FORTRAN 中，还有其它的 DO—While 迭代方法，但本书中采用上面的格式。注意到上面的格式的最后两个语句不成锯齿状，因为它们是控制结构的一部分，而不是内部块的一部分。

4. DO—Until 迭代

在 Pascal 中，这种迭代表示成：

```
REPEAT
    n:=n DIV 2;          Pascal 中 DIV 为整数除法
    k:=k+1;
UNTIL(n=1);
```

在 FORTRAN 中，我们把上述结构写成：

```
19  CONTINUE
        N=N+2
        K=K+1
IF (N.NE.1) GOTO 19
```

5. Break 迭代

在一个无限循环中，要进行某种条件的检验，看其是否为真时为止(这种检验可能不止在一处进行)，在该点跳出循环并继续执行其后面的语句。在 FORTRAN 和 Pascal 中实现这种结构都需要使用标号，尽管我们不提倡使用，但有时候又十分必要。在 FORTRAN 中，实现这种结构的形式为：

```
13  CONTINUE
        [检验之前的语句]
        IF (…) GOTO 14
        [检验之后的语句]
          GOTO 13
          14  CONTINUE
```

第一章中的 BADLUK 程序综合使用了几种不同的迭代结构。

FORTRAN 中还有其它的“标准”结构，我们建议尽可能避免使用，因为有些结构难以译成其它语言(程序移植)，并且很难阅读。这些结构是：

- 赋值 GOTO 语句和 ASSIGN 语句
- 计算 GOTO 语句
- 算术 IF 语句

本书程序的一些习惯和对 ANSI 标准的背离

本书中的程序设计具有如下的一些习惯：

- 当一个子程序或过程需要传递某个整数 N 时，通常传递给一个最大可能的预置值，我们习惯上称其为 NMAX，并且在参数语句 PARAMETER 中说明（在 Pascal 中用 CONST 说明）。
- 习惯上用 M 和 N 来表示矩阵的逻辑维数，用 MP 和 NP 来表示矩阵的物理维数。
- 当出现变量 DUM 时，它通常是一个暂时的"虚拟"变量，没有任何特定的意义。
- 用 TINY 表示的数常常是一个参数，它应该比你感兴趣的任何数都要小得多，但也小不到发生下溢出的情况。经常使用它来阻止某些场合下的除法检验。

本书中的程序如果按所印出的形式输入给计算机，有些程序是不能运行的，因为它们出于印刷方便而多少有些背离 FORTRAN－77 的标准，这种背离是为了方便读者的阅读，其内容详述如下：

1)FORTRAN－77 标准规定，子程序的内部变量在对该子程序相继调用中不能保证被保存，除非使用 SAVE 语句对这些变量进行全局变量的说明。我们没有在程序中使用 SAVE 语句，如果按此标准，应该在每个子程序的第二行使用。注意到在本书后面的 Pascal 程序中，遵循了该语言的标准：即任何需要保存的变量都是显式的、全局定义的，并且是过程的外部变量（参看第二部分的引言一节），读者若有疑虑，可以先看看 Pascal 程序的注释，弄清楚变量是否需要保存(SAVE)，然后在 FORTRAN 程序中决定是否要加 SAVE 语句。

2)标准 FORTRAN 每行能读的字符不许超过 72 个，并且忽略 72 列之后的输入。当一个长语句在一行写不下时，可以续写在"继续"行上。在本书的 FORTRAN 程序中，有些行包括的字符多于 72 个，且并非总是明确地表示为分写在继续行上。因此，如果你要把程序输入给计算机，则应当分写在继续行上（即注意实际规则）。

3)在标准的 FORTRAN 中，每行的第 1 至第 6 列有以下各种用途：(i)写语句标号，(ii)标明注释行，(iii)标明继续行。我们稍将格式简化为：在程序左部空白处放有的整数表明是一个语句标号（不是上述的"驯服标号"），星号（ * ）表示继续行，"C"表示注释行。按这种简化格式，程序中的注释行都是单独注释的（注意程序中的中文说明不是这里所说的注释行，在实际输入程序时，应忽略中文说明）。

4)本书中的程序开头说明或程序中的注释所指出的方程以及章节号均应该参考《C 语言数值计算方法：科学计算的技巧与程序库》一书，即本书的前一版本。

误差、准确性和稳定性

用计算机进行数值分析，还要注意到计算机并不是用无限精度来存储数值的，因此要注意数据的类型选择。整型表示数是精确的，而且整型数之间的算术运算也是精确的，但是整型数所表示的范围有限。浮点格式表示的数的范围可以很大，但由于其尾数的位数有限，因此往往不能精确地表示一个数，而且浮点表示的数之间的算术运算也是不精确的（往往要丢弃一些有效位），这样实际使用时要特别注意。

一个浮点数，当把它加到浮点数 1.0 上时产生一个不同于 1.0 的浮点结果，具有这种性质的最小的浮点数称为机器准确度 ϵ_m。粗糙地说，ϵ_m 是表示浮点数的相对准确度，它对应于浮点

数的尾数的最小有效位的变化。浮点数之间的算术运算几乎都应该想象为引进了一个至少为 ϵ_m 的附加相对误差，这种误差称为舍入误差。

舍入误差随着计算量的增加而积累，这是在数值方法中需要考虑的。

舍入误差是计算机硬件的特征。还有一类误差，它是所用程序或算法的特征，与计算机硬件无关，如通过离散点来计算连续点的数值积分算法，它是假定这些离散点无限靠近才能获取"真实"的答案，而实际是有限的点。这种真实答案与实际计算中获得的答案之间的差别称作截断误差。

对程序员来说，舍入误差几乎是无可奈何的，但截断误差是可控制的，可以通过算法来减小。在多数情况下，舍入误差与截断误差二者不会强烈地互相影响，但要注意出现不稳定的情况，即在算法的早期阶段舍入误差被逐渐扩大以致淹没真实答案，这种算法不稳定时，要谨慎使用它们。

算法的稳定性是数值方法中的一个重要内容，详细的例子可参见《C 语言数值计算方法：科学计算的技巧与程序库》一书（本书的前一版本）。