

C++数值算法

(第二版)

Numerical Recipes in C++

The Art of Scientific Computing

Second Edition

NUMERICAL RECIPES in C++

The Art of Scientific Computing
Second Edition

William H. Press Saul A. Teukolsky
William T. Vetterling Brian P. Flannery

经典著作

[美] William H. Press Saul A. Teukolsky
William T. Vetterling Brian P. Flannery

胡健伟 赵志勇 薛运华 等译



电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry
<http://www.phei.com.cn>

内 容 简 介

本书选材内容丰富,除了通常数值方法课程的内容外,还包含当代科学计算大量用到的专题,如求特殊函数值、随机数、排序、最优化、快速傅里叶变换、谱分析、小波变换、统计描述和数据建模、常微分方程和偏微分方程数值解、若干编码算法和任意精度的计算等。

本书科学性和实用性统一。每个专题中,不仅对每种算法给出了数学分析和比较,而且根据作者的经验对算法做出了评论和建议,并在此基础上给出了用C++语言编写的实用程序。读者可以很方便地直接套用这些程序,还可以结合特定的需要进行修改。本书中包含的345个程序构成了C++语言的数值计算程序库。

本书可以作为大学本科生和研究生的教材或参考书,也可以作为从事科学计算的科技工作者的工具书、计算机软件开发者的参考书。

Authorized translation from the English language edition published by The Syndicate of the Press of the University of Cambridge, England. Copyright © Cambridge University Press 2002.

All rights reserved. No part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any information storage retrieval system, without permission from the Publisher.

This edition is licensed for distribution and sale in the People's Republic of China only excluding Hong Kong, Taiwan and Macau and may not be distributed and sold elsewhere.

Simplified Chinese language edition published by Publishing House of Electronics Industry. Copyright © 2005.

本书中文简体专有翻译出版版权由Cambridge University Press 授予电子工业出版社。其原文版权及中文翻译出版版权受法律保护。未经许可,不得以任何形式或手段复制或抄袭本书内容。

本书中文简体字版仅限于在中华人民共和国境内(不包括香港、澳门特别行政区以及台湾地区)发行与销售,并不得在其他地区发行与销售。

版权贸易合同登记号 图字:01-2003-1231

图书在版编目(CIP)数据

C++ 数值算法(第二版)/(美)普雷斯(Press, W. H.)等著. 胡健伟等译.

-北京:电子工业出版社,2005.1

(国外计算机科学教材系列)

书名原文: Numerical Recipes in C++: The Art of Scientific Computing, Second Edition

ISBN 7-5053-8713-8

I. C... II. ①普... ②胡... III. C语言-程序设计-数值计算-教材 IV. TP312

中国版本图书馆CIP数据核字(2004)第118717号

责任编辑:冯小贝 特约编辑:杜 萌

印 刷:北京智力达印刷有限公司

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路173信箱 邮编:100036

经 销:各地新华书店

开 本:787×1092 1/16 印张:46.5 字数:1190千字

印 次:2005年1月第1次印刷

定 价:68.00元

凡购买电子工业出版社的图书,如有缺损问题,请向购买书店调换;若书店售缺,请与本社发行部联系。联系电话:(010)68279077。质量投诉请发邮件至zltts@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至dbqq@phei.com.cn。

出版说明

21 世纪初的 5 至 10 年是我国国民经济和社会发展的关键时期,也是信息产业快速发展的关键时期。在我国加入 WTO 后的今天,培养一支适应国际化竞争的一流 IT 人才队伍是我国高等教育的重要任务之一。信息科学和技术方面人才的优劣与多寡,是我国面对国际竞争时成败的关键因素。

当前,正值我国高等教育特别是信息科学领域的教育调整、变革的重大时期,为使我国教育体制与国际化接轨,有条件的高等院校正在为某些信息学科和技术课程使用国外优秀教材和优秀原版教材,以使我国在计算机教学上尽快赶上国际先进水平。

电子工业出版社秉承多年来引进国外优秀图书的经验,翻译出版了“国外计算机科学教材系列”丛书,这套教材覆盖学科范围广、领域宽、层次多,既有本科专业课程教材,也有研究生课程教材,以适应不同院系、不同专业、不同层次的师生对教材的需求,广大师生可自由选择和自由组合使用。这些教材涉及的学科方向包括网络与通信、操作系统、计算机组织与结构、算法与数据结构、数据库与信息处理、编程语言、图形图像与多媒体、软件工程等。同时,我们也适当引进了一些优秀英文原版教材,本着翻译版本和英文原版并重的原则,对重点图书既提供英文原版又提供相应的翻译版本。

在图书选题上,我们大都选择国外著名出版公司出版的高校教材,如 Pearson Education 培生教育出版集团、麦格劳-希尔教育出版集团、麻省理工学院出版社、剑桥大学出版社等。撰写教材的许多作者都是蜚声世界的教授、学者,如道格拉斯·科默(Douglas E. Comer)、威廉·斯托林斯(William Stallings)、哈维·戴特尔(Harvey M. Deitel)、尤利斯·布莱克(Uyless Black)等。

为确保教材的选题质量和翻译质量,我们约请了清华大学、北京大学、北京航空航天大学、复旦大学、上海交通大学、南京大学、浙江大学、哈尔滨工业大学、华中科技大学、西安交通大学、国防科学技术大学、解放军理工大学等著名高校的教授和骨干教师参与了本系列教材的选题、翻译和审校工作。他们中既有讲授同类教材的骨干教师、博士,也有积累了几十年教学经验的老教授和博士生导师。

在该系列教材的选题、翻译和编辑加工过程中,为提高教材质量,我们做了大量细致的工作,包括对所选教材进行全面论证;选择编辑时力求达到专业对口;对排版、印制质量进行严格把关。对于英文教材中出现的错误,我们通过与作者联络和网上下载勘误表等方式,逐一进行了修订。

此外,我们还将与国外著名出版公司合作,提供一些教材的教学支持资料,希望能为授课老师提供帮助。今后,我们将继续加强与各高校教师的密切联系,为广大师生引进更多的国外优秀教材和参考书,为我国计算机科学教学体系与国际教学体系的接轨做出努力。

电子工业出版社

教材出版委员会

主 任	杨芙清	北京大学教授 中国科学院院士 北京大学信息与工程学部主任 北京大学软件工程研究所所长
委 员	王 珊	中国人民大学信息学院院长、教授
	胡道元	清华大学计算机科学与技术系教授 国际信息处理联合会通信系统中国代表
	钟玉琢	清华大学计算机科学与技术系教授 中国计算机学会多媒体专业委员会主任
	谢希仁	中国人民解放军理工大学教授 全军网络技术研究中心主任、博士生导师
	尤晋元	上海交通大学计算机科学与工程系教授 上海分布计算技术中心主任
	施伯乐	上海国际数据库研究中心主任、复旦大学教授 中国计算机学会常务理事、上海市计算机学会理事长
	邹 鹏	国防科学技术大学计算机学院教授、博士生导师 教育部计算机基础课程教学指导委员会副主任委员
	张昆藏	青岛大学信息工程学院教授

译者序

本书由美国洛斯阿拉莫斯国家实验室(Los Alamos National Laboratory)副主任、美国哈佛大学天文学与物理学教授 William H. Press, 美国康奈尔大学物理学与天体物理学教授 Saul A. Teukolsky, 宝丽来有限公司(Polaroid Corporation)的 William T. Vetterling 和埃克森研究和工程公司(EXXON Research and Engineering Company)的 Brian P. Flannery 四人合著,是这四位作者合著的《Fortran 数值算法》(第二版)、《C 数值算法》(第二版)的孪生版。本系列图书的第一版还包括《Pascal 数值算法》、《BASIC 数值算法》,它们在国外广为发行,颇受读者欢迎。第二版继承了前一版的优点,并做了很大修改,增加了约 100 多种程序,使本书更为完善,内容更加丰富。

本书所涉及的内容较广,除一般数值分析课程中包含的专题外,还包括特殊函数求值、随机数、排序、最优化、FFT 和谱分析、小波变换、统计描述和建模、偏微分方程,以及格雷码和算术码等内容。对于每个专题内容,作者给出了数学分析,论述了各种算法并进行了分析和比较,并根据作者的实际工作经验,对一些算法提出了明确的判断和建议,在此基础上给出了 ANSI/ISO C++ 语言编写的实用程序。根据使用者的爱好,它们可以用于几乎所有现存的 C++ 向量/矩阵类库,以及任何与 ANSI/ISO 兼容的编译器。因此,本书中的程序不但可作为黑箱使用,而且读者将学会如何打开这些黑箱,对其进行分析和研究,然后结合读者特定的任务进行修改,以完成读者的特殊需要。本书的最大特点就是将理论与实际应用结合起来。

本书是美国哈佛大学、美国康奈尔大学、英国剑桥大学等一些著名大学高年级本科生和研究生的数值计算课程的教材。本书给出的 C++ 语言程序构成了完整的 C++ 语言数值算法程序库,所以,这也是一本不可多得的有关数值算法的 C++ 语言程序手册。

参加本书翻译的有胡健伟、赵志勇、薛运华、马岩和孙氢。胡健伟校阅了译文的全稿。考虑到本书的读者都有一定的外语基础,为便于他们查阅外文文献,故本书中部分含有外国学者人名定义的术语,我们都保留其拉丁字母拼写的名字,不译为汉字发音。程序中的注释,也只翻译最主要的部分,其他的小注释保留原文。

本书涉及内容十分广泛,由于译者水平所限,虽经校阅,仍难免有错误和不妥之处,恳请读者批评指正。

C++ 版序言

C++ 已经逐渐成为计算机程序中的主要语言,甚至在科学和工程的应用中取代了 C 和 Fortran 的地位。本书是《数值算法》第二版的完整文本,包含了用 C++ 书写的全部程序。

对数值计算而言,C++ 有其特殊的问题。主要困难在于处理向量和矩阵,使之具有高效率并且使程序具有高水平的结构。至今仍然未有为实现此目的而被人们接受的通用标准库,这就使得问题更为困难。在第 1 章和附录中,我们将介绍我们是如何解决这一问题的。对读者而言,一种默认的选择是,使用由我们提供的非常简单的类库,只需花费几分钟安装和运行。我们也将说明如何使用其他的矩阵/向量类库。这在刚开始时会耗费一些时间,但此后会使读者清晰地访问本书的程序而且完美地发挥其效能。

借此机会,提醒我们的 C 版本读者,将所有的数组和矩阵换为“零基”。在本书中,我们对读者提出的正文和程序中的错误进行了修改,在此深表感谢。

2001 年 9 月

William H. Press

Saul A. Teukolsky

William T. Vetterling

Brian P. Flannery

第二版序言

最初撰写《数值算法》^①第一版的意图是,提供一本汇总一般性讨论、解析数学、算法论述以及实际可运行的程序等多方面内容的书籍。本书第一版取得了很大的成功,但随着时间的推移,有很多新内容值得补充,所以我们决定出版第二版。

现在掌握的素材比六年前增多了。六年前,根据当时的文献和我们自己的研究工作,我们只能从经验上估计哪一些数值计算的技巧是重要和最有生命力的。现在,我们已从大量读者的直接反馈中得益,我们的管理机构 Numerical Recipes Software 每年收到的信件达上千封。这些信件指出,我们忽略了某些特殊的技术,这些技术在科学与工程等特殊领域内具有众所周知的重要性。我们仔细阅读了这些信件,尤其是那些指出特定参考文献的信件。

这些新内容的加入,不可避免地增加了本书的篇幅。事实上,文字内容和程序都增加了约 50% (现在包含的程序超过 300 个)。“请勿增加篇幅”,这是几位明智的同事给我们的忠告。我们遵循了这些忠告,但还是增加了某些主要专题的原理性讨论。某些可选专题以“深入讨论”小节出现,读者阅读时忽略这些章节不会影响阅读的连贯性。

第二版中新增的主要内容有:

- 新增一章关于积分方程和反演方法的内容
- 椭圆型偏微分方程的多重网格求解法的详细讨论
- 带状对角型线性系统的程序
- 对线性代数稀疏矩阵的改进程序
- Cholesky 和 QR 分解
- 任意加权函数的正交多项式和高斯求积法
- 数值求导的计算方法
- 帕德逼近和有理切比雪夫逼近
- 贝塞尔函数、修正的贝塞尔函数、分数阶的贝塞尔函数以及其他新增的特殊函数
- 改进的随机生成程序
- 拟随机序列
- 高维空间中蒙特卡罗积分的自适应和递归程序
- 非线性方程组的全局收敛法
- 连续控制空间的模拟退火极小化
- 二维和三维实数据的快速傅里叶变换(FFT)
- 外部存储的快速傅里叶变换(FFT)
- 改进的快速余弦变换程序
- 小波变换
- 有上限、下限的傅里叶积分
- 非均匀取样数据的谱分析
- Savitzky-Golay 平滑滤波器
- 两个坐标数据都有误差的直线拟合
- 二维 Kolmogorov-Smirnov 检验
- 统计鞅带法
- 微分方程的嵌入式 Runge-Kutta-Fehlberg 法
- 刚性微分方程组的高阶法
- 新增一章关于“非典型的数值算法”的内容,包括霍夫曼码和算术编码、任意精度的计算以及几个其他专题

对于本书所涉及的基础内容,可以参阅第一版的前言或本书目录。

^① 本书是《数值算法》系列丛书之一。——译者注

致谢

在此不可能逐个列出所有提出过有益建议的读者名单,但我们衷心地感谢他们。在正文中,我们尽量给出一些想法的原始出处,但对可能发生的遗漏表示歉意。

一些读者和同事特别慷慨地为本书提供了他们的想法、评注、建议和程序。我们特别要感谢 George Rybicki, Philip Pinto, Peter Lepage, Robert Lupton, Douglas Eardley, Ramesh Narayan, David Spergel, Alan Oppenheim, Sallie Baliunas, Scott Tremaine, Glennys Farrar, Steven Block, John Peacock, Thomas Loredo, Matthew Choptuik, Gregory Cook, L. Samuel Finn, P. Deuffhard, Harold Lewis, Peter Weinberger, David Syer, Richard Ferch, Steven Elstein, Bradley Keister 和 William Gould。Nancy Lee Snyder 帮助我们完成了复杂的 TEX 文稿。我们还要向本书的编辑 Lauren Cowles 和 Alan Harvey、责任编辑 Russell Hahn 致谢。

我们尤其感谢本书的程序顾问 Seth Finkelstein, 他编写、重写或影响了本书(以及本书的 Fortran 语言孪生版和本书伴侣版 Example Book)中的许多程序。本版之所以比其先前版本有更好的 C 类语言程序风格,应主要归功于他(当然,我们接受 Fortran 版本仍然存在错误的批评)。

我们在装有 UNIX 操作系统的 DEC 和 Sun 工作站和装有 MS-DOS 5.0 / Windows 3.0 的 486/33 PC 兼容机上运行过本书的程序(进行程序测试所用的其他计算机请参见 1.0 节所列的计算机)。我们强烈推荐以下一些软件:GUN, Emacs, TEX, Perl, Adobe Illustrator 和 PostScript。我们也曾用过 C 编译器的其他一些版本,因为太多,在此无法一一致谢(它们有时亦有太多的缺陷)。应该清醒地指出,我们的标准试验套件(运行本书中的所有程序)在许多检验过的编译中有未被克服的编译缺陷。如果可能,我们愿和开发商共同探索修复这些缺陷。

本书前两位作者感谢美国科学基金会长期资助他们研究计算方法。还感谢 D.A.R.P.A. 对本书 13.10 节中小波研究的资助。

1992 年 6 月
William H. Press
Saul A. Teukolsky
William F. Vetterling
Brian P. Flannery

第一版序言

我们称本书为《数值算法》(Numerical Recipes)有几方面的理由。从某种意义上讲,本书确实是一本数值计算方面的“食谱大全”^①。当然,食谱和菜单有着重大区别。菜单是为让就餐者能够对餐馆提供的各道菜进行选择而设计的,每道菜中的不同配料已被混合并改变了原先的面貌。而食谱则揭示了各种配料,并讲解如何进行备料和制作。

本书取名为《数值算法》的另一目的是意味着它是展现技术、兼收并蓄的“合剂”^②。本书是独具特色的,对所介绍的每一个专题都提供了一般性讨论、解析数学、算法论述,并(更为重要的)以可执行的计算机程序的形式提供了这些思想的实际实施。我们的任务是寻求每一个专题内容之间恰当的平衡。读者会感受到,对于某些专题我们尤为侧重于解析方面,而对其他一些数学的先决条件已普遍成立的专题,更侧重于深入地讨论其计算算法的性质,以及实施的实际问题。

本书一半内容适用于作为理工科专业本科高年级学生的数值计算教程,另一半内容适用于研究生水平的课程并作为专业研究人员的参考文献。这样安排内容的一个突出特点是,随着经验的积累,读者能够以日趋成熟的水平来使用本书。甚至对于那些缺乏经验的读者,也应该能够将本书中的大多数高级程序作为一个黑箱使用,但希望使用后能回过头来重新学习其内部的奥秘所在。

如果说本书存在一个统一的起支配作用的主旋律,那就是数值计算的实用算法应该是有效的、巧妙的,同时也是清晰的。但是另一种观点认为,有效的计算方法应该是复杂的,以至于只能作为“黑箱”的形式使用,这种观点我们是断然反对的。

因而在本书中,我们的目的是将大量的计算方法的程序黑箱打开,供读者仔细研究。我们希望教会读者怎样打开这些黑箱,然后再将它们组装起来,以便加以修改而适应读者自己的特殊需求。本书假设读者具有一定的数学基础,即具备相当于物理科学、工程科学、经济学,或一定的人文科学方面大学本科文化程度的基本数学基础。同时,假定读者知道怎样进行计算机编程,但并不假定读者在数值分析或数值算法方面具有任何预备知识。

通常,“数值算法”所涉及的范围应该是“直至偏微分方程但不包括偏微分方程的一切内容”。我们荣幸地在这方面有所突破:首先,本书有一章关于偏微分方程算法的简介(第19章)。其次,本书显然未能包含其他“一切”内容。数值分析课程中所有的“标准”专题都已包含在本书中:线性方程组(第2章)、内插法和外推法(第3章)、积分(第4章)、非线性求根(第9章)、特征系统(第11章)以及常微分方程组(第16章)。这些专题的大部分内容由于引进了某些高级素材而超出了它们的标准范畴,而这些素材特别重要且有用。

本书还详细叙述了某些其他专题,通常这些专题无法在标准的数值分析教材中找到,这些内容包括:函数的求值和高等数学中特定的特殊函数求值(第5章和第6章);随机数和蒙特卡罗法(第7章);排序(第8章);最优化,包括多维方法(第10章);傅里叶变换方法,包括FFT算法和其他谱分析法(第12章和第13章);统计描述和数据建模(第14章和第15章),另外还有两点边界值问题、打靶法和松弛法(第17章)。

本书的程序都用ANSI标准C语言编写。本书还有FORTRAN, Pascal 和 BASIC 语言版本。在1.1节中还将更多地阐明关于C语言的编程问题,以及关于我们的程序所假定的计算环境等。

致谢

许多同事慷慨地与我们分享了他们在数值和计算方面的经验,诸如提供计算程序、对本书手稿的评注等。我们要特别感谢 George Rybicki, Douglas Eardley, Philip Marcus, Stuart Shapiro, Paul Horowitz, Bruce Musicus, Ir-

① Recipes 可表示食谱。——译者注

② Recipes 可表示药剂的处方。——译者注

win Shapiro, Stephen Wolfram, Henry Abarbanel, Larry Smarr, Richard Muller, John Bahcall 和 A.G.W. Cameron。

我们还要感谢两位从未谋面的学者:一位是 Forman Acton, 他于 1970 年出版的教科书《实用数值方法》[Numerical Methods that Work (New York: Harper and Row)]的风格深深地影响了我们;另一位是 Donald Knuth, 既因为他的系列著作《计算机程序设计艺术》[The Art of Computer Programming (Reading, MA: Addison-Wesley)],又由于他的计算机排版语言 TEX,后者极大地帮助了本书的出版。

作者在计算方法领域的研究工作部分得到了美国科学基金会的资助。

1985 年 10 月

William H. Press

Brian P. Flannery

Saul A. Teukolsky

William T. Vetterling

许可证信息

如果读者计划在自己的计算机上使用本书中的程序,应当阅读下面的内容。首先需要阅读以下的免责条款,然后把程序安装到计算机上并取得 Numerical Recipes 软件许可证(如果没有该许可证或者下文所述的免费“直接许可证”,本书只能作为教学和参考用书,仅供阅读)。

免责条款

我们无需做出任何明确的或含蓄的承诺,即本书中所包含的程序毫无差错,或者这些程序符合商业销售的特定标准,或者它们能满足读者特定应用的要求。这些程序不可用于求解以下问题:其不正确解答可能导致对某人的伤害或财产的损失。如果你以这种方式使用程序,后果自负。作者和出版者概不承担由你使用程序造成的直接或间接损失的责任。

如何在计算机上安装代码

选择以下方法之一即可进行:

- 可以从本书直接键入程序到你的计算机中。此时,只有“直接许可证”是有效的。你不可以转送或发布机器可读的副本给其他任何人。如果选择这种方式,我们不希望从用户那里得到任何关于程序缺陷的报告,因为经验表明,几乎所有此类缺陷报告皆源于程序键入错误。
- 可以从 Numerical Recipes On-Line Software Store 下载本书程序的电子版本,网址是 <http://www.nr.com>。所有文件(本书的程序和演示程序)被置于一个压缩文件中。需要购买下载和解压缩的许可证。单屏用户许可证可以从 On-Line Store 即时购买(对多屏用户可能有优惠),价格取决于所使用的操作系统(Windows 或 Macintosh 及 Linux 或 UNIX)以及是否属于教育机构。如果希望获得比较通用的(网站或企业)许可证,也可以先购买一个单屏许可证,单屏许可证的付费将在以后的升级许可证费用中扣除。
- 可以从剑桥大学出版社(Cambridge University Press)购买含有程序的介质。有适用于 Windows 和 Macintosh 系统的 ISO-9660 格式的 CD-ROM 版本,其中包含了完整的 C++ 软件,以及原先的 C 版本。这种 CD-ROM 提供单屏幕 Windows 和 Macintosh 许可证,订购书号为 ISBN 0-521-750377。有更加扩展的适用于 Windows, Macintosh 和 UNIX/Linux 系统的 ISO-9660 格式的 CD-ROM 版本,在单张 CD-ROM 上包含 C, C++ 和 FORTRAN 版本(以及第一版的 Pascal 和 BASIC 版本)。这些 CD-ROM 中,有 Windows 和 Macintosh 的单屏用户许可证(订购书号 ISBN 0-521-750350)或(稍贵一些的)UNIX/Linux 工作站单屏用户许可证(订购书号 ISBN 0-521-750369)。可以向剑桥大学出版社订购这些介质,电子邮件地址为 orders@cup.org(北美地区)或者 directcustserv@cambridge.org(其他地区),或者访问剑桥大学出版社的网站 <http://www.cambridge.org>。

许可证的类型

以下是我们提供的许可证的类型。需要指出的是,其中一些是自动取得的:可以从剑桥大学出版社直接购买介质,或者从 Numerical Recipes On-Line Software Store 购买解密密码。其他类型的许可证要求用户按照类别与 Numerical Recipes Software 联系(电子邮件地址为 orders@nr.com, 传真号码为 781 863-1739)。网站 <http://www.nr.com> 上提供了更多的信息。

- [“直接许可证”] 如果你是个人购买本书,并且将其中的一个或多个程序键入到你的计算机中,我们同意你在该计算机上使用它们。不可以转让或者发布机器可读的副本给其他任何人,或在一台以上机器上使用这些程序,或者发布包含我们的程序的可执行程序。这是惟一的免费许可证。
- [“单屏用户许可证”] 这是最常见的低价格许可证,由单屏用户许可证[Single Screen (Shrinkwrap) License]文档上的条款所限定(完整的条款可以通过我们的网站查询)。一般来说,该许可证允许你在任何一个屏幕上(PC,工作站,X 终端等)使用本书的程序。在此许可证下,也可以将采纳了我们的程

程序的预先编译过的可执行程序传送到其他无许可证的计算机上,其前提条件是(i)用于非商业用途,(ii)在有许可证的屏幕上首次开发、编译、成功地运行程序,(iii)我们的程序被捆绑到一个程序中,但它们不能作为单个程序被访问,或不能在实际中提取并用于其他程序。也就是说,在这类许可证之下,程序用户不能使用我们的程序作为程序库或工作平台的一部分。其他类型的商业或非商业分发的条件可以在网站 <http://www.nr.com> 上找到。

- [“多屏、服务器、网站和公司许可证”] 单屏用户的条款可以扩展到指定的机器群,它们由屏幕数目、位置或所有者定义。当估计的屏幕数目超过 40 时,单屏的价格有显著降低。请与 Numerical Recipes Software 联系以了解细节(电子邮件地址为 orders@nr.com,传真号为 781 863-1739)。
- [“课程复制权许可证”] 如果被认定的教育机构中的教师采用本书授课,并已购买一个单屏许可证,可以允许在课程中使用程序,只要将姓名、职称、地址、课程名称、编号、日期和估计注册听课人数,以及每名学生 5 美元的预付款(估算数)邮寄到 Numerical Recipes Software, 地址为 P.O.Box 380243, Cambridge, MA 02238-0243(USA)。教师将收到一份邮寄的许可证,它准许教师将程序复制以供学生使用,和/或准许将程序传送到一台可供学生访问的计算机上(但仅供在授课期间使用)。

关于计算机程序的版权

和艺术或文学作品一样,计算机程序亦受版权保护。一般而言,如果将受版权保护的程序不经许可复制到你的计算机,则属于侵权行为(这也是一种不友好的行为,因为它剥夺了程序作者创造性劳动应得的报酬)。根据版权法,所有“派生工作”(修订版本或转换成其他计算机语言)也受版权保护。

版权并不保护思想,只保护那些思想的特定表现形式。对计算机程序而言,这些思想是程序的方法论和算法,包括程序员采用的一系列必要步骤。这些思想的表达形式是程序源代码(特别是任何其中所嵌入的随意或独特的风格部分)、它们导出的目标代码,以及任何其他派生工作。

如果你对程序中所包含的思想进行分析,然后用你自己的完全不同的实现方式表达这些思想,那么这种新的程序实现属于你个人。本书中的程序也是这样形成的,它们不全都是我们自己的成果。当本书中的程序称为“基于”某已发布的受版权保护的程序时,是指它们的思想是相同的。这些思想的源代码表达方式是属于我们的。我们相信,本书中的任何材料都未侵犯现有的版权。

注册商标

本书正文中出现了几个注册商标:Sun, Solaris, Ultra 和 WorkShop 是 Sun Microsystems, Inc. 的注册商标。Microsoft, Windows 和 Visual C++ 是 Microsoft Corporation 的注册商标。DEC 和 VMS 是 Compaq Computer Corporation 的注册商标。IBM, AIX 和 RS/6000 是 International Business Machines Corporation 的注册商标。Linux 是 Linus Torvalds 的注册商标。Apple 和 Macintosh 是 Apple Computer, Inc. 的注册商标。Borland C++ Builder 是 Inprise Corporation 的注册商标。UNIX 是 The Open Group 的注册商标。IMSL 是 Visual Numerics, Inc. 的注册商标。NAG 是 Numerical Algorithms Group (USA) Inc. 的专属计算机软件。PostScript 和 Adobe Illustrator 是 Adobe Systems Incorporated 的注册商标。最后,毫无疑问, Numerical Recipes NR 和 [nr.com](http://www.nr.com) 是 Numerical Recipes Software 的注册商标。

归属

从法律上说,思想“如同空气一样自由”,但这一事实不能取代以下道德规范:思想属于它们的已知创始人。对本书中那些基于已知来源的程序,无论它们受版权保护还是属于公共领域、正式出版还是手抄本,我们都尽量给出它们的正确归属。遗憾的是,许多公开流传的程序的来源并不清楚。非常感谢读者提供的关于归属方面的信息,无论是新的还是更正过的,我们都会在本书再版时尽力体现它们。

目 录

第 1 章 绪论	1
1.0 引言	1
1.1 程序组织和控制结构	4
1.2 科学计算的 C++ 约定	11
1.3 向量和矩阵类的实施	17
1.4 误差、准确性和稳定性	21
第 2 章 线性代数方程组求解	24
2.0 引言	24
2.1 Gauss-Jordan 消去法	26
2.2 具有回代过程的高斯消去法	30
2.3 LU 分解法及其应用	31
2.4 三对角及带状对角系统方程	37
2.5 线性方程组解的迭代改进	40
2.6 奇异值分解	43
2.7 稀疏线性方程组	51
2.8 Vandermonde 矩阵和 Toeplitz 矩阵	66
2.9 深入讨论: Cholesky 分解	71
2.10 深入讨论: QR 分解	73
2.11 矩阵求逆是否是 N^3 阶运算	76
第 3 章 内插法和外推法	79
3.0 引言	79
3.1 多项式内插法和外推法	81
3.2 有理函数内插法和外推法	83
3.3 三次样条插值	85
3.4 搜索有序表的方法	87
3.5 插值多项式的系数	89
3.6 二维或高维插值	91
第 4 章 函数积分	97
4.0 引言	97
4.1 坐标等距划分的经典公式	98
4.2 基本算法	101
4.3 龙贝格积分	104
4.4 广义积分	105
4.5 高斯求积法与正交多项式	110
4.6 多维积分	121
第 5 章 函数求值	124
5.0 引言	124
5.1 级数与其收敛性	124
5.2 连分式求值	126

5.3	多项式和有理函数	129
5.4	复数运算	132
5.5	递推关系及 Clenshaw 递推公式	133
5.6	二次方程和三次方程	136
5.7	数值求导	137
5.8	切比雪夫逼近	140
5.9	切比雪夫逼近函数的微分和积分	143
5.10	切比雪夫系数的多项式逼近	145
5.11	深入讨论:幂级数的化简	146
5.12	深入讨论:帕德逼近	147
5.13	深入讨论:有理切比雪夫逼近	150
5.14	线积分求函数值	153
第 6 章	特殊函数	156
6.0	引言	156
6.1	Γ 函数、 B 函数、阶乘、二项式系数	156
6.2	不完全 Γ 函数、误差函数、 χ^2 概率函数、累积泊松函数	159
6.3	指数积分	163
6.4	不完全 B 函数、学生分布、 F 分布、累积二项式分布	166
6.5	整数阶贝塞尔函数	169
6.6	修正的整数阶贝塞尔函数	174
6.7	深入讨论:分数阶贝塞尔函数、艾里函数、球面贝塞尔函数	178
6.8	球面调和函数	188
6.9	Fresnel 积分、余弦和正弦积分	190
6.10	Dawson 积分	193
6.11	椭圆积分和雅可比椭圆函数	194
6.12	超几何函数	202
第 7 章	随机数	205
7.0	引言	205
7.1	一致偏离	205
7.2	变换方法:指数偏离和正态偏离	214
7.3	拒绝方法:伽马偏离、泊松偏离、二项偏离	216
7.4	随机位的生成	221
7.5	深入讨论:基于数据加密的随机序列	224
7.6	简单的蒙特卡罗基分	228
7.7	准随机序列	231
7.8	深入讨论:自适应及递归蒙特卡罗方法	236
第 8 章	排序	246
8.0	引言	246
8.1	直接插入法和 Shell 方法	247
8.2	快速排序法	248
8.3	堆排序法	251
8.4	索引和分秩	252
8.5	挑选第 M 大的元素	255
8.6	深入讨论:等价类的确定	258

第 9 章 求根与非线性方程组	260
9.0 引言	260
9.1 划界与二分	262
9.2 弦截法、试位法和Ridders方法	265
9.3 Van Wijngaarden-Dekker-Brent 方法	269
9.4 利用导数的 Newton-Raphson 方法	271
9.5 多项式的根	275
9.6 非线性方程组的 Newton-Raphson 方法	283
9.7 非线性方程组的全局收敛法	285
第 10 章 函数的极值	295
10.0 引言	295
10.1 一维黄金分割搜索	297
10.2 抛物线内插和一维 Brent 方法	300
10.3 使用一阶导数的一维搜索方法	303
10.4 多维下降单纯形法	305
10.5 多维情况下的方向集(Powell)方法	308
10.6 多维共轭梯度法	313
10.7 多维变尺度法	317
10.8 线性规划和单纯形法	321
10.9 模拟退火法	331
第 11 章 特征系统	341
11.0 引言	341
11.1 对称矩阵的雅可比变换	345
11.2 将对称矩阵约化为三对角形式:Givens 约化和 Householder 约化	350
11.3 三对角矩阵的特征值和特征向量	354
11.4 埃尔米特矩阵	358
11.5 将一般矩阵化为 Hessenberg 形式	359
11.6 实 Hessenberg 矩阵的 QR 算法	362
11.7 用迭代法改进特征值并求解特征向量	367
第 12 章 快速傅里叶变换	370
12.0 引言	370
12.1 离散样本数据的傅里叶变换	373
12.2 快速傅里叶变换(FFT)	375
12.3 实函数的 FFT、正弦变换和余弦变换	380
12.4 二维或多维的 FFT	388
12.5 二维和三维实数据的傅里叶变换	391
12.6 深入讨论:外部存储和局部内存的 FFT	395
第 13 章 傅里叶和谐的应用	400
13.0 引言	400
13.1 使用 FFT 做卷积和解卷积	400
13.2 使用 FFT 做相关和自相关	405
13.3 具有 FFT 的最优(维纳)滤波	406
13.4 使用 FFT 做功率谱估计	408
13.5 深入讨论:时域中的数字滤波	414

13.6	线性预测和线性预测编码	419
13.7	深入讨论:用最大熵(全极)方法做功率谱估计	424
13.8	深入讨论:非均匀取样数据的谱分析	427
13.9	深入讨论:使用 FFT 计算傅里叶积分	434
13.10	小波变换	439
13.11	深入讨论:取样定理的数值应用	450
第 14 章	数据的统计描述	452
14.0	引言	452
14.1	分布的矩:均值、方差、偏斜度等	453
14.2	两种分布是否具有相同的均值和方差	456
14.3	两种分布是否不同	459
14.4	两种分布的列联表分析	465
14.5	线性相关	470
14.6	非参数相关或秩相关	472
14.7	深入讨论:二维分布	477
14.8	深入讨论:Savitzky-Golay 平滑滤波器	480
第 15 章	数据建模	485
15.0	引言	485
15.1	最大似然估计的最小二乘方法	485
15.2	拟合数据成直线	488
15.3	深入讨论:两个坐标数据都有误差的直线拟合	491
15.4	一般的线性最小二乘方	495
15.5	非线性模型	503
15.6	被估模型参数的置信界限	508
15.7	稳健估计	515
第 16 章	常微分方程组的积分	521
16.0	引言	521
16.1	Runge-Kutta 方法	523
16.2	Runge-Kutta 方法的自适应步长控制	526
16.3	修正中点法	531
16.4	Richardson 外推法和 Bulirsch-Stoer 方法	533
16.5	深入讨论:二阶守恒方程组	539
16.6	刚性方程组	540
16.7	多步法、多值法和预测-校正法	550
第 17 章	两点边值问题	554
17.0	引言	554
17.1	打靶法	556
17.2	对拟合点打靶	558
17.3	深入讨论:松弛法	559
17.4	实例:球体调和函数	568
17.5	深入讨论:网格点的自动分配	575
17.6	深入讨论:内部边界条件或奇异点的处理	577
第 18 章	积分方程和反演理论	580
18.0	引言	580

18.1	第二类 Fredholm 方程	582
18.2	Volterra 方程	584
18.3	深入讨论:具有奇异核的积分方程	586
18.4	反演问题与先验信息的利用	591
18.5	线性正则化方法	594
18.6	Backus-Gilbert 方法	599
18.7	最大熵图像恢复	601
第 19 章	偏微分方程	607
19.0	引言	607
19.1	通量守恒的初值问题	612
19.2	扩散初值问题	620
19.3	多维初值问题	624
19.4	边值问题的傅里叶方法和循环约简法	627
19.5	边值问题的松弛法	631
19.6	边值问题的多重网格法	636
第 20 章	非典型的数值算法	650
20.0	引言	650
20.1	诊断机器的参数	650
20.2	格雷码	654
20.3	循环冗余度校验和其他的校验和式	655
20.4	霍夫曼编码与数据压缩	660
20.5	算术编码	664
20.6	任意精度的运算	668
附录 A	函数声明表	677
附录 B	实用例程和类	685
附录 C	转换为单精度	700
参考文献		702
程序从属表		706
各章节的计算机程序		719