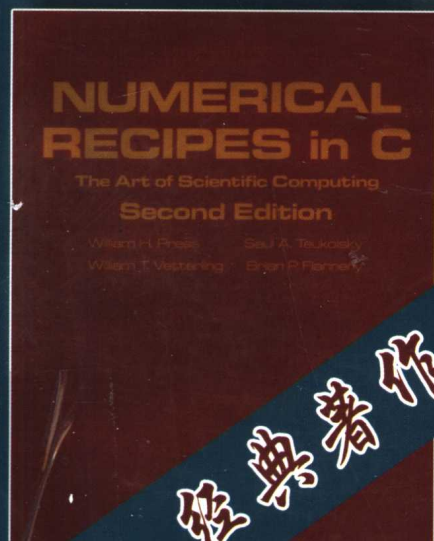


C数值算法

(第二版)

Numerical Recipes in C
The Art of Scientific Computing
Second Edition



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

傅祖芸 赵梅娜 丁岩石 等译
傅祖芸 审校



电子工业出版社
Publishing House of Electronics Industry
<http://www.phei.com.cn>

国外计算机科学教材系列

C 数值算法

(第二版)

Numerical Recipes in C

The Art of Scientific Computing

Second Edition

William H. Press

[美] Saul A. Teukolsky 著
William T. Vetterling

Brian P. Flannery

傅祖芸 赵梅娜 丁岩石 等译

傅祖芸 审校

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京 · BEIJING

内 容 简 介

本书编写了300多个实用而有效的数值算法C语言程序。其内容包括:线性方程组的求解,逆矩阵和行列式计算,多项式和有理函数的内插与外推,函数的积分和估值,特殊函数的数值计算,随机数的产生,非线性方程求解,傅里叶变换和FFT,谱分析和小波变换,统计描述和数据建模,常微分方程和偏微分方程求解,线性预测和线性预测编码,数字滤波,格雷码和算术码等。全书内容丰富,层次分明,是一本不可多得的有关数值计算的C语言程序大全。本书每章中都论述了有关专题的数学分析、算法的讨论与比较,以及算法实施的技巧,并给出了标准C语言实用程序。这些程序可在不同计算机的C语言编程环境下运行。

本书可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,也可以作为大学本科生和研究生的参考书或教材。

Authorized translation from the English language edition published by The Syndicate of the Press of the University of Cambridge, England. Copyright © Cambridge University Press 1988, 1992.

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 © 2004.

本书中文简体专有翻译出版权由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:01-2003-1228

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;傅祖芸等译.

-北京:电子工业出版社,2004.1

(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 7-5053-8709-X

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

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第122286号

责任编辑:杜 萌

印 刷:北京市增富印刷有限责任公司

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:47.5 字数:1368千字

印 次:2004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 zlt@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 |

第二版序言

最初撰写本书第一版的意图是,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,我们觉得数值计算的技巧是非常重要的和非常有用的。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《C 数值算法(第二版)》的内容。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)。同时增加了关于主要专题的原理性讨论,许多新的专题同样以通俗易懂的形式呈现。某些可选专题,从原来第一版到现在的新版本,都标记为“深入讨论”,读者阅读时省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特殊函数
- 已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
- 统计靴带法
- 微分方程组的嵌入式 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

对于本书所涉及的比较“基础”的内容,可以参阅第一版的前言或本书目录。

第一版序言

我们称本书为《C 数值算法》(“Numerical Recipes in C”)有几方面理由。从某种意义上讲,本书确实是一本数值计算方面的完全手册,详细介绍了各种算法。

本书名为《C 数值算法》的另一目的是意味它是抽象技术的折中混合物。本书是独具特色的,对每一个所介绍的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,而对其他一些数字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,并且同时也是(更重要的是)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,以至于只能用做“黑箱”的形式,这种观点我们是断然反感的。

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。

一般地,“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,本书有所重点地讨论了一些内容。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它们的标准范畴,而这些素材特别重要并特别有用。

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。

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。需要首先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这类问题: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目标计算机中。此时,只有“直接许可证”是有效的。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,地址是 <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 C++ 版本。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为你个人的非商业目的使用它们。不可以转让或者发布机器可读的副本给其他任何人,或在多于一台机器上使用这些程序,或者发布包含我们程序的可执行程序。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

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)我们的程序被捆绑入一个程序,但它们不能作为单个程序被访问,或不能实用地被释放出来并用于其他程序。也就是说,在这类许可证之下,你的程序用户一定不能够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发布的条件可以在网站 <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,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,以及每名学生预付 5 美元(估算数)邮寄到 Numerical Recipes Software, 地址为 P. O. Box 243, Cambridge, MA 02238(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未经许可复制到你的计算机,则属于侵权行为。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,然后用自己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 是 Sun Microsystems, Inc. 的注册商标。SPARC 和 SPARCstation 是 SPARC International, Inc. 的注册商标。Microsoft, Windows 95, Windows NT, PowerStation 和 MS 是 Microsoft Corporation 的注册商标。DEC, VMS, Alpha AXP 和 ULTRIX 是 Digital Equipment Corporation 的注册商标。IBM 是 International Business Machines Corporation 的注册商标。Apple 和 Macintosh 是 Apple Computer, Inc. 的注册商标。UNIX 是 X/Open Co. Ltd. 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,(当验明我们的产品时)Numerical Recipes 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,我们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
1.0.1 计算环境和程序有效性	2
1.0.2 和本书第一版的兼容性	2
1.0.3 关于参考文献	3
1.1 程序组织和控制结构	3
1.1.1 控制结构	5
1.1.2 标准结构目录	7
1.1.3 关于“深入讨论”	10
1.2 科学计算的 C 约定	11
1.2.1 函数原型和头文件	12
1.2.2 向量和一维数组	13
1.2.3 矩阵和二维数组	14
1.2.4 复数运算	16
1.2.5 浮点数到双精度数的隐式转换	17
1.2.6 一些技巧	17
1.3 误差、准确性和稳定性	19
第 2 章 线性代数方程组求解	22
2.0 引言	22
2.0.1 非奇异与奇异方程组	22
2.0.2 矩阵	22
2.0.3 线性代数数值计算的任务	23
2.0.4 标准程序包	24
2.1 Gauss-Jordan 消去法	24
2.1.1 列增广矩阵消去法	25
2.1.2 选主元法	26
2.1.3 深入讨论:行和列消去法策略	27
2.2 代过程的高斯消去法	28
2.2.1 回代过程	28
2.3 LU 分解法及其应用	29
2.3.1 进行 LU 分解	30
2.3.2 矩阵的求逆	33
2.3.3 矩阵的行列式	34
2.3.4 深入讨论:复数系统方程	34
2.4 三对角及带状对角系统方程	35
2.4.1 深入讨论:带状对角系统	36
2.5 线性方程组解的迭代改进	39
2.5.1 深入讨论:关于解的迭代改进的更多讨论	40
2.6 奇异值分解	42
2.6.1 方阵的 SVD	43

2.6.2	方程个数少于未知数个数的SVD	46
2.6.3	方程个数多于未知数个数的SVD	46
2.6.4	构造标准正交基	46
2.6.5	矩阵的近似	47
2.6.6	SVD 算法	47
2.7	稀疏线性方程组	50
2.7.1	Sherman-Morrison 公式	52
2.7.2	周期三对角方程组	53
2.7.3	深入讨论:Woodbury 公式	54
2.7.4	分区求逆	55
2.7.5	深入讨论:稀疏矩阵的索引存储	55
2.7.6	深入讨论:共轭梯度法求解稀疏方程组	61
2.8	Vandermonde 矩阵和 Toeplitz 矩阵	66
2.8.1	深入讨论:Vandermonde 矩阵	66
2.8.2	深入讨论:Toeplitz 矩阵	68
2.9	深入讨论:Cholesky 分解	71
2.10	深入讨论:QR 分解	73
2.10.1	深入讨论:更新 QR 分解	75
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
3.4.1	用相关数值进行搜索	88
3.4.2	写在 Hunt 之后	89
3.5	插值多项式的系数	90
3.5.1	其他方法	91
3.6	二维或高维插值	92
3.6.1	用更高的阶获得高精度	93
3.6.2	用更高的阶获得高平滑度:双三次插值	93
3.6.3	用更高的阶获得高平滑度:双三次样条	95
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
4.1.1	Newton-Cotes 闭型公式	98
4.1.2	单个区间的外推公式	99
4.1.3	扩展公式(闭型)	99
4.1.4	扩展公式(开型与半开型)	100
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	109
4.5.1	坐标点和权的计算	111

4.5.2	深入讨论:递推式已知时的情况	116
4.5.3	深入讨论:具有非经典权的正交多项式	117
4.5.4	高斯积分推广	119
4.6	多维积分	120
第5章	函数求值	124
5.0	引言	124
5.1	级数与其收敛性	124
5.1.1	加速级数收敛	124
5.2	连分式求值	126
5.2.1	连分式处理	128
5.3	多项式和有理函数	129
5.3.1	有理函数	131
5.4	复数运算	132
5.5	递推关系及 Clenshaw 递推公式	133
5.5.1	递推式的稳定性	133
5.5.2	Clenshaw 递推公式	135
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
5.9.1	深入讨论:Clenshaw-Curtis 积分法	144
5.10	切比雪夫系数的多项式逼近	145
5.11	深入讨论:幂级数化简	146
5.12	深入讨论:帕德逼近	148
5.13	深入讨论:有理切比雪夫逼近	150
5.14	线积分求函数值	154
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
6.2.1	误差函数	162
6.2.2	累积泊松概率函数	163
6.2.3	χ^2 概率函数	163
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
6.4.1	学生分布概率函数	169
6.4.2	F 分布概率函数	169
6.4.3	累积二项式概率分布	169
6.5	整数阶贝塞尔函数	170
6.6	修正的整数阶贝塞尔函数	175
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	179
6.7.1	一般贝塞尔函数	179
6.7.2	修正贝塞尔函数	184
6.7.3	艾里函数	188
6.7.4	球面贝塞尔函数	189

6.8	球面调和函数	190
6.9	菲涅耳积分、余弦和正弦积分	192
6.9.1	菲涅耳积分	192
6.9.2	余弦和正弦积分	194
6.10	Dawson 积分	195
6.11	椭圆积分和雅可比椭圆函数	197
6.11.1	雅可比椭圆函数	204
6.12	超几何函数	206
第 7 章	随机数	209
7.0	引言	209
7.1	一致偏离	209
7.1.1	系统提供的随机数生成程序	210
7.1.2	可移植的随机数生成程序	212
7.1.3	深入讨论:快速而略有缺陷的生成程序	217
7.1.4	深入讨论:更快的生成程序	217
7.1.5	相对的执行时间和建议	219
7.2	变换方法:指数偏离和正态偏离	219
7.2.1	指数偏离	220
7.2.2	正态(高斯)偏离	221
7.3	拒绝方法:伽马偏离、泊松偏离、二项偏离	223
7.3.1	伽马分布	224
7.3.2	泊松偏离	225
7.3.3	二项偏离	227
7.4	随机位的生成	228
7.5	深入讨论:基于数据加密的随机序列	231
7.6	简单的蒙特卡罗积分	235
7.7	准随机序列	239
7.7.1	拉丁超立方	244
7.8	深入讨论:自适应及递归蒙特卡罗方法	244
7.8.1	重要取样	244
7.8.2	分层取样	245
7.8.3	混合策略	246
7.8.4	自适应蒙特卡罗:VEGAS	247
7.8.5	递归分层取样	251
第 8 章	排序	252
8.0	引言	252
8.1	直接插入法和 Shell 方法	253
8.1.1	Shell 方法	253
8.2	快速排序法	254
8.3	堆积排序法	257
8.4	索引和分秩	259
8.5	挑选第 M 大的元素	261
8.6	深入讨论:等价类的确定	264
第 9 章	求根与非线性方程组	266
9.0	引言	266

9.1	划界与二分	268
9.1.1	二分法	270
9.2	弦截法、试位法和Ridders方法	271
9.2.1	Ridders 方法	274
9.3	Van Wijngaarden-Dekker-Brent 方法	275
9.4	利用导数的 Newton-Raphson 方法	277
9.4.1	Newton-Raphson 方法和分形	281
9.5	多项式的根	282
9.5.1	多项式的降阶	283
9.5.2	Muller 方法	284
9.5.3	拉盖尔方法	284
9.5.4	本征值方法	287
9.5.5	其他可靠的求根方法	288
9.5.6	根修正的技巧	288
9.6	非线性方程系统的 Newton-Raphson 方法	290
9.6.1	牛顿法与极小化	292
9.7	非线性方程系统的全局收敛法	293
9.7.1	深入讨论:线性搜索和回溯	293
9.7.2	深入讨论:多维弦截法——Broyden 方法	298
9.7.3	深入讨论:更先进的实现	301
第 10 章	函数的极值	303
10.0	引言	303
10.1	一维黄金分割搜索	305
10.1.1	确定初始划界为极小的例程	306
10.1.2	黄金分割搜索方法的例程	308
10.2	抛物线内插和一维 Brent 方法	308
10.3	使用一阶导数的一维搜索方法	311
10.4	多维下降单纯形法	313
10.5	多维情况下的方向集(Powell)方法	316
10.5.1	共轭方向	317
10.5.2	Powell 二次收敛方法	318
10.5.3	舍弃函数值下降最多的方向	319
10.5.4	线性极小化的实现	320
10.6	多维共轭梯度法	322
10.6.1	有关利用导数的线性极小化之说明	324
10.7	多维变度量法	326
10.7.1	深入讨论:变度量法的进一步实现	329
10.8	线性规划和单纯形法	330
10.8.1	线性规划基本定理	330
10.8.2	关于约束标准形式的单纯形法	332
10.8.3	将一般问题转化为约束标准形式	334
10.8.4	单纯形法的例程实现	335
10.8.5	其他线性规划方法简述	339
10.9	模拟退火法	340
10.9.1	组合极小化:旅行推销员问题	341
10.9.2	模拟退火法在连续极小化问题中的应用	346

第 11 章 特征系统	350
11.0 引言.....	350
11.0.1 定义和基本事实	350
11.0.2 左特征向量和右特征向量	351
11.0.3 矩阵的对角化	351
11.0.4 成品化特征系统程序的特征系统软件包	352
11.0.5 广义的和非线性特征值问题	353
11.1 对称矩阵的雅可比变换.....	354
11.2 将对称矩阵简化为三对角形式:Givens 约化和 Householder 约化	358
11.2.1 Givens 方法	359
11.2.2 Householder 方法	359
11.3 三对角矩阵的特征值和特征向量.....	363
11.3.1 特征多项式的赋值	363
11.3.2 QR 和 QL 算法	363
11.3.3 具有隐含位移的 QL 算法	364
11.4 埃尔米特矩阵.....	367
11.5 将一般矩阵化为 Hessenberg 形式	368
11.5.1 配平	368
11.5.2 约化成 Hessenberg 形式	369
11.6 实 Hessenberg 矩阵的 QR 算法	371
11.7 用迭代法改进特征值并寻找特征向量.....	376
第 12 章 快速傅里叶变换	378
12.0 引言.....	378
12.1 离散样本数据的傅里叶变换.....	381
12.1.1 取样定理与混叠现象	381
12.1.2 离散傅里叶变换	381
12.2 快速傅里叶变换(FFT)	383
12.2.1 其他 FFT 算法	386
12.3 实函数的 FFT、正弦变换和余弦变换	387
12.3.1 两个实函数同时变换	388
12.3.2 单个实函数的 FFT	388
12.3.3 快速正弦和余弦变换	390
12.4 二维或多维的 FFT	396
12.5 二维和三维实数据的傅里叶变换.....	398
12.6 深入讨论:外部存储和局部内存的 FFT	404
第 13 章 傅里叶和谱的应用	408
13.0 引言.....	408
13.1 使用 FFT 做卷积和解卷积.....	408
13.1.1 用零元填充的终端效应处理	409
13.1.2 FFT 对卷积的使用	410
13.1.3 大型数据集的卷积和解卷积	412
13.2 使用 FFT 做相关和自相关.....	413
13.3 具有 FFT 的最佳(维纳)滤波.....	414
13.4 使用 FFT 做功率谱估计.....	416
13.4.1 数据开窗	418

13.5	深入讨论:时域中的数字滤波	422
13.5.1	线性滤波	423
13.5.2	FIR(非递推)滤波	423
13.5.3	IIR(递推)滤波	424
13.6	线性预测和线性预测编码	426
13.6.1	与最佳滤波的联系	427
13.6.2	线性预测	428
13.6.3	除掉线性预测的偏差	431
13.6.4	线性预测编码(LPC)	431
13.7	深入讨论:用最大熵(全极)方法的功率谱估计	432
13.8	深入讨论:非均匀取样数据的谱分析	434
13.8.1	Lomb 周期图快速计算	439
13.9	深入讨论:使用 FFT 计算傅里叶积分	442
13.10	小波变换	448
13.10.1	Daubechies 小波滤波系数	448
13.10.2	离散小波变换	449
13.10.3	小波特性	453
13.10.4	傅里叶域中的小波滤波	454
13.10.5	被截小波近似	455
13.10.6	多维小波变换	456
13.10.7	图像压缩	456
13.10.8	线性系统的快速求解	457
13.11	深入讨论:取样定理的数值应用	459
第 14 章	数据的统计描述	462
14.0	引言	462
14.1	分布的矩:均值、方差、偏斜度等	463
14.1.1	深入讨论:半不变量	465
14.1.2	中位数和众数	465
14.2	两种分布的均值和方差	466
14.2.1	对于显著不同均值的学生 t 检验	466
14.2.2	对于显著不同方差的 F 检验	468
14.3	两种分布是否不同	469
14.3.1	χ^2 检验	470
14.3.2	K-S 检验	471
14.3.3	深入讨论:K-S 检验的变形	474
14.4	两种分布的列联表分析	475
14.4.1	基于 χ^2 的关联测度	476
14.4.2	基于熵的关联测度	478
14.5	线性相关	481
14.6	非参数相关或秩相关	483
14.6.1	Spearman 秩阶相关系数	484
14.6.2	Kendall 的 τ	486
14.7	深入讨论:二维分布	488
14.8	深入讨论:Savitzky-Golay 平滑滤波器	492

第 15 章 数据建模	497
15.0 引言	497
15.1 最大似然估计的最小二乘方法	497
15.1.1 χ^2 拟合	499
15.2 拟合数据成直线	500
15.3 深入讨论:两个坐标数据都有误差的直线拟合	504
15.4 一般的线性最小二乘方	508
15.4.1 利用正规方程组求解	508
15.4.2 运用奇异值分解法求解	511
15.4.3 示例	514
15.4.4 多维拟合	515
15.5 非线性模型	515
15.5.1 梯度和黑塞矩阵的计算	516
15.5.2 Levenberg-Marquardt 方法	517
15.5.3 示例	520
15.5.4 非线性最小二乘方法的更先进方法	521
15.6 被估模型参数的置信界限	521
15.6.1 合成数据集的蒙特卡罗模拟	522
15.6.2 快速粗糙的蒙特卡罗方法:靴带法	522
15.6.3 置信界限	523
15.6.4 常数 χ^2 边界作为置信界限	524
15.6.5 正态情况下参数的概率分布	525
15.6.6 奇异值分解下的置信界限	527
15.7 稳健估计	528
15.7.1 用局部 M 估计法估计参数	529
15.7.2 M 估计的数值计算	531
15.7.3 通过极小化绝对偏差拟合直线	531
15.7.4 其他的稳健估计方法	533
第 16 章 常微分方程的积分	534
16.0 引言	534
16.1 Runge-Kutta 方法	536
16.2 Runge-Kutta 方法的自适应步长控制	539
16.3 修正中点法	545
16.4 Richardson 外推法和 Bulirsch-Stoer 方法	546
16.5 深入讨论:二阶守恒方程组	553
16.6 方程的刚性集	555
16.6.1 深入讨论:Rosenbrock 方法	557
16.6.2 深入讨论:半隐式外推算法	562
16.7 多步法、多值法和预测-校正法	567
第 17 章 两点边界值问题	570
17.0 引言	570
17.0.1 能用标准边界值问题求解的问题	571
17.1 打靶法	572
17.2 射向某一拟合点	574
17.3 深入讨论:松弛法	576