

Numerical Recipes と Example Book について

野 寺 隆

慶應義塾大学工学部数理科学科

近年、数学ソフトウェアは、その信頼性の向上とソフトウェア・パッケージの低価格化によって、数値計算の標準的なツールになりつつある。

今回、Numerical Recipes and Example bookについて外観することにするが、これは単に、アルゴリズムの観点からだけではなく、ソフトウェアの観点にも立って利用することをデザインされたものである。また、従来、メインフレーム計算機において利用可能であった多くの科学技術計算用のコードや手法が、パーソナル計算機でも利用できるようになった1例である。

Numerical Recipes and Example Book

Takashi NODERA

Department of Mathematics

Faculty of Science and Engineering

Keio University

3-14-1 Hiyoshi Kohoku Yokohama 223

JAPAN

Mathematical Software has become a standard tool of numerical computation because of the greatly improved reliability and dramatically reduced costs of packaged software.

In this talk, we briefly outline the software of "Numerical Recipes" and its "example book". Numerical Recipes are designed to use not only in the algorithm sense but also in the software sense. Moreover, it is one of the examples that these codes and procedures in this software can be used on personal computers, bringing to these machines a capability for scientific computing previous available only in large mainframe computers.

1. はじめに

ほんの数年前といっても、一世代前といってもよいかもしれないが、数値計算の分野で数学的ソフトウェア (Mathematical Software) という言葉が持て囃された時代があった。この言葉は、当時、アメリカ、Purdue大学のJohn. R. Rice 教授が数回にわたって同名のシンポジウムを行って、数学ソフトウェアの開発、品質向上、利用促進を促したものであった。その内容は、基本アルゴリズムの再検討、ソフトウェアの評価方法、ソフトウェアの標準化、etc におよぶものであり、究極の目的は、利用者がいちいちこまかい指示を与えなくても、コンピュータが問題に応じて適切な解法を選択して、ある程度自動的に解を算出してくれることをめざすものであった。即ち、自動車と言うなれば、ソフトウェアのオートマ車を目指していた。当時、米国では、NSF の援助を得て様々な数値計算を行うソフトウェアの開発がおこなわれていた。とくに、BLAS, EISPACK や LINPACK に代表される基本数値計算向きのソフトウェアだけでなく、偏微分方程式の境界値問題を解くためのITPACKやEIPACKの開発も行われていた。当時、わが国においてもUMS(Universal Mathematical Software)という汎用数値計算パッケージが開発されていたのであるが、残念ながらこの名前を知る人は少ないように思う。これらのソフトウェアは言うなれば、メインフレームのコンピュータを中心に設計されたソフトウェアであり、多少、小回りが効きにくい点もなきにしもあらずであった。そうそこしているうちに、段々と世の中から数学的ソフトウェアという言葉が聞かれなくなり、現在では皆無とってよいのではないかと思うのである。とはいっても、数学的ソフトウェアと言う名が無くなったのではなく、言うなれば一つの転換点にきているとってよいのではないか。

数値計算は、計算機の応用分野の中でもっとも早く世の中に現れた分野であり、計算機科学全体から見ると、多少、異質なFortran 文化と言うことができる。Fortran で記述され現在までに開発されたソフトウェアは、大切な文化遺産であるが、その反面、新天地の開発を妨げる傾向もなきにしもあらずではないか。

近年、非常に驚かされることの1つに、ファミコンや日本語ポータブルワープロの普及が上げられるが、それと同様に、NEC のPC-9800 や AppleのMacintosh の普及も目覚ましいものがある。通常、これらの小型計算機は、パソコンと呼ばれているのだが、ゲームをするだけでなく、いろいろな利用価値がある。一昔前のパソコンと言えば、アセンブラやBASIC 言語しか利用できないものだったが、現在では、立派に Fortran77 やTurbo-Pascal、さらに、C-言語まで利用できるのである。これらのパソコンの普及の原因の1つには、ハードウェアの低価格化が上げられる。それと同様に、ほんの数年前まではソフトウェアは非常に高額でなかなか手のとどくものではなかったが、最近、驚くほどの低価格のものが現れはじめたのである。いうなれば、品質の良い安いソフトウェアが出回りだしたと言っても過言ではなからう。

1986年の初頭に、Numerical Recipies(The Art of Scientific Computing, ISBN 0-521-30811-9) という本が、Cambridge University Press から発行された。これは、848 ページにおよぶ厚さ6cm 程度の本で、なんとなく数値計算に関するクッキングブックと言ったものであり、数値計算に関連する解法の大まかなもの全てを含んでいるのである。ただし、このクッキングブックの料理メニューは重厚なフランス料理とは、言え

ないかもしれない。単刀直入に言えば、英国の家庭料理程度のメニューで、その味は多少大まかではないかと思う。しかし、晩餐会程度の料理メニューも用意されていないわけではない。また、この料理の本には、料理のインストラクターとしてのソフトウェア (Numerical Recipes V1.0 Software) ばかりでなく、簡単なお料理の例題をこなせる例題集 (Example Book, ISBN 0-521-30956-5, and Example Software) まで発売されているのである。この本の驚くべき特徴の1つはそのソフトウェアがびっくりするくらいの低価格 (£15.00) で販売されていることである。ソフトウェア自身の値段は、ほぼ1枚のディスクットの正価程度で、別の言葉で言えば、教科書1冊程度の値段である。

近年、筆者はこのソフトウェアと例題集を入手し、このソフトウェアの特徴を色々分析したので報告する。

2. Numerical Recipes

Numerical Recipes (The Art of Scientific Computing) は、

William H. Press (Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics)

Brian P. Flannery (EXXON Research and Engineering Company)

Saul A. Teukolsky (Dept. of Physics, Cornell University)

William T. Vetterling (Polaroid Corporation)

の4人によって書かれた数値計算のためのクッキング・ブックで、1986年の初頭にCambridge University Pressから発売された。また、そのソフトウェアも数箇月遅れて発売された。その内容は、特殊な数値解析に関する数値計算ではなく、ごく標準的な数値解析を勉強したことのある人ならだれでも知っていなければならない基本的な算法だけでなく、基本的な統計解析などについても言及していると思う。特に、前者に関連するものとして、線形計算、固有値問題、関数近似 (内挿、外挿など)、数値積分、非線形代数方程式の解法、常微分方程式、偏微分方程式の数値解法の入門などが上げられが、これらのトピックの中には、当然、標準的なレベル以上の、言うなれば、最先端の話題も含まれている。そのハイライトは次のようなものである。

- (1) 特殊な線形方程式の解法 (Vandermonde 行列, Toeplitz 行列, 疎行列の解法など)
- (2) 有理関数の内挿, 外挿など
- (3) 特異点をもつ数値積分
- (4) 適応的にステップサイズをコントロールする微分方程式の Bulirsch-Stoer の数値積分

次に、一般的な数値解析の教科書には書かれていない、統計解析などを含むいくつかのトピックについてのべると次のようになる。即ち、特殊関数の評価、乱数、Monte Carlo 法、ソーティング、最適化法 (multidimensional法を含む)、Fourier変換 (FFT 及

び maximum entropy法を含む), 統計解析に関するもの, データのモデル化, 2点境界値問題 (shooting法と緩和法を含む) などが上げられる。これらのトピックのハイライトは, 次のものが上げられる。

- (1) working routine for statistical probability function
- (2) Bessel functions and modified Bessel function
- (3) random deviates from gamma, Poisson, and binomial distribution
- (4) the DATA Encryption Standard
- (5) sorting for determining equivalence classes of data
- (6) a complete implementation of linear programming
- (7) an introduction to annealing methods of optimization
- (8) routines for real Fourier transformations, for sine and cosine transformation
- (9) linear prediction and linear prediction coding
- (10) digital filtering
- (11) entropy measures of statistical dependency
- (12) robust statistical fitting

“Numerical Recipes”では, これらのトピックを取り扱う算法がANSI-Standard FORTRAN-77とPASCALで記述されたものが掲載されており, 単に, 算法の説明書というだけでなく, そのマニュアルも兼ね備えていると言える (C-言語版は, 後日発売される見込みである)。またプログラムは, できるだけ構造(structured programming)を踏まえて書いてある。

3. Numerical Recipes Software

現在, Numerical Recipes のソフトウェアは, Fortran 及びPascalで書かれたものがあり, 様々なコンピュータ, 即ち, メインフレームに代表されるマルチユーザーコンピュータだけでなく, パソコンでも使用可能なように設計されている。主に, DEC VAX-11/780 (o.s. VMS) とIBM-PCまたはXT (PC-DOS) 上で動いているのだが, NEC PC-9800 および Apple Macintosh上でも使用可能である。提供されているソフトウェアは次の通りである。

- (1) Numerical Recipes Pascal Diskette V 1.0
[Pascal procedures as listed in “Numerical Recipes”
in machine-readable form]
- (2) Numerical Recipes Fortran Diskette V 1.0
[Fortran procedures as listed in “Numerical Recipes”
in machine readable form]

- (3) Numerical Recipes UCSD p-System Diskette (UCSD Pascal) V 1.0
[Pascal procedures from "Numerical Recipes" for IBM/PC
using the UCSD p-system operating system]
- (4) Numerical Recipes Macintosh Diskette (Pascal) V 1.0
[Pascal procedures from "Numerical Recipes" for Apple Macintosh]
- (5) Numerical Recipes Object File Diskette (FORTRAN)
[FORTRAN subroutines from "Numerical Recipes" as .OBJ files]
- (6) Numerical Recipes VAX INSTALLATION MAGNETIC TAPE (FORTRAN)
[FORTRAN subroutines from "Numerical Recipes" for multiuser
installation on DEC VAX]

このソフトウェアには、Numerical Recipes に記載されているすべてのアルゴリズム 203個のプログラム・コードとして含まれている。さらに、これらのソフトウェアを有効に使用し評価するために、次のような基本的な例題集のディスクセットもある。

- (1) Numerical Recipes Example Diskette (Pascal)
[demonstration program in the Pascal language as listed in
"Numerical Recipes Example Book (Pascal)" in machine readable form]
- (2) Numerical Recipes Example Diskette (FORTRAN)
[demonstration program in the FORTRAN language as listed in
"Numerical Recipes Example Book (FORTRAN)" in machine readable form]

例題ディスクセットには、Numerical Recipes ソフトウェアを使って仕事をする189 のコードが含まれている。このうち、154 個がNumerical Recipes に対応する個々のコードで残り35個のコードは5つの"omunibus"ファイルから構成されている。さらにこのディスクセットには、デモンストレーション用に使用される14個のデータファイルも含まれている。

FORTRAN プログラムは、VAX-11では、ほぼ修正なしで動き、IBM PCでは、version 3.2 以上の Microsoft FORTRANで動く。

Pascalにおいては、Borland International のTurbo Pascalでも、DEC VAX 上のVAX-11 Pascal でも、他の多くのコンピュータ上で使用可能なUCSD Pascal においても、さらにIBM のメインフレーム上のPascal/VS でも実行可能である。

これらのソフトウェアは、下記のソフトウェア会社で製作され、ソフトウェアについての技術的な質問やプログラムのバグの修正についても、下記に連絡をとる体制がとられている。また、現在、C-言語版が製作途上にあるらしい。

Numerical Recipes Software

P.O. Box 243, Cambridge, MA 02238, U.S.A.

ソフトウェアの値段は、Numerical Recipes ディスクセットおよび Exampleディスクセットとともに、英国では£15.00、米国では\$19.95 でCambridge University Pressから発売されており、下記の住所から直接取り寄せることもできる。

[英国] Edinburgh Building
Shaftesbury Road,
Cambridge CB2 2RU, U.K.

[米国] 510 North Ave.
New Rochelle,
New York 10801, U.S.A.

4. 数值例

(例 1.) ニュートン法

(問題)

```

PROGRAM d9r13(input,output);
(* driver for routine MNEWT *)
CONST
  ntrial=5;
  tolx=1.0e-6;
  n=4;
  np=n;
  tolf=1.0e-6;
TYPE
  glnarray = ARRAY [1..n] OF real;
  glnbyn = ARRAY [1..n,1..n] OF real;
  glindx = ARRAY [1..n] OF integer;
  glnpbyn = glnbyn;
VAR
  i,j,k,kk : integer;
  xx : real;
  x,beta : glnarray;
  alpha : glnbyn;

PROCEDURE usrfun(x: glnarray; n: integer; VAR alpha: glnbyn;
  VAR beta: glnarray);
(* Programs using routine USRFUN must define the types
  TYPE
    glnarray = ARRAY [1..n] OF real;
    glnbyn = ARRAY [1..n,1..n] OF real;
  in the main routine. *)
BEGIN
  alpha[1,1] := -2.0*x[1];
  alpha[1,2] := -2.0*x[2];
  alpha[1,3] := -2.0*x[3];
  alpha[1,4] := 1.0;
  alpha[2,1] := 2.0*x[1];
  alpha[2,2] := 2.0*x[2];
  alpha[2,3] := 2.0*x[3];
  alpha[2,4] := 2.0*x[4];
  alpha[3,1] := 1.0;
  alpha[3,2] := -1.0;
  alpha[3,3] := 0.0;
  alpha[3,4] := 0.0;
  alpha[4,1] := 0.0;
  alpha[4,2] := 1.0;
  alpha[4,3] := -1.0;
  alpha[4,4] := 0.0;
  beta[1] := sqr(x[1])+sqr(x[2])+sqr(x[3])-x[4];
  beta[2] := -sqr(x[1])-sqr(x[2])-sqr(x[3])-sqr(x[4])+1.0;
  beta[3] := -x[1]+x[2];
  beta[4] := -x[2]+x[3]
END;

(*$I MODFILE.PAS *)
(*$I ¥PAS¥LUBKSB.PAS *)
(*$I ¥PAS¥LUDCMP.PAS *)
(*$I ¥PAS¥MNEWT.PAS *)

BEGIN
  FOR kk := 1 to 2 DO BEGIN
    FOR k := 1 to 3 DO BEGIN
      xx := 0.2**k*(2**kk-3);
      writeln('Starting vector number',k:2);
      FOR i := 1 to 4 DO BEGIN
        x[i] := xx+0.2*i;
        writeln('x[':7,i:1,'] := ',x[i]:5:2)
      END;
      writeln;
      FOR j := 1 to ntrial DO BEGIN
        mnewt(1,x,n,tolx,tolf);
        usrfun(x,n,alpha,beta);
        writeln('i':5,'x[i]':13,'f':13);
        FOR i := 1 to n DO BEGIN
          writeln(i:5,x[i]:14:6,-beta[i]:15:6)
        END;
        writeln;
        writeln('press RETURN to continue...');
        readln
      END
    END
  END
END

```

$$\begin{aligned}
 -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 + x_4 &= 0 \\
 x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 - 1 &= 0 \\
 x_1 - x_2 &= 0 \\
 x_2 - x_3 &= 0
 \end{aligned}$$

(実行結果)

```

Starting vector number 1
  x[1] := 0.00
  x[2] := 0.20
  x[3] := 0.40
  x[4] := 0.60

```

i	x[i]	f
1	0.681818	-0.776446
2	0.681818	0.776777
3	0.681818	0.000000
4	0.618182	0.000000

press RETURN to continue...

i	x[i]	f
1	0.491984	-0.106111
2	0.491984	0.108111
3	0.491984	0.000000
4	0.618034	0.000000

press RETURN to continue...

i	x[i]	f
1	0.455360	-0.004024
2	0.455360	0.004024
3	0.455360	0.000000
4	0.618034	0.000000

press RETURN to continue...

i	x[i]	f
1	0.453887	-0.000007
2	0.453887	0.000007
3	0.453887	0.000000
4	0.618034	0.000000

press RETURN to continue...

i	x[i]	f
1	0.453885	-0.000000
2	0.453885	0.000000
3	0.453885	0.000000
4	0.618034	0.000000

(例 2.) ADI 法

(問題)

```

PROGRAM dl7r2(input,output);
(* driver for routine ADI *)
LABEL 1;
CONST
  jmax=11;
  pi=3.1415926;
TYPE
  double = real;
  gljmax = ARRAY [1..jmax,1..jmax] OF double;
VAR
  alim,alpha,beta,eps : double;
  i,j,k,mid,twotok : integer;
  a,b,c,d,e,f,g,u : gljmax;

(*$I %pas%ADI.PAS *)

BEGIN
  FOR i := 1 to jmax DO BEGIN
    FOR j := 1 to jmax DO BEGIN
      a[i,j] := -1.0;
      b[i,j] := 2.0;
      c[i,j] := -1.0;
      d[i,j] := -1.0;
      e[i,j] := 2.0;
      f[i,j] := -1.0;
      g[i,j] := 0.0;
      u[i,j] := 0.0
    END
  END
  mid := (jmax DIV 2)+1;
  g[mid,mid] := 2.0;
  alpha := 2.0*(1.0-cos(pi/jmax));
  beta := 2.0*(1.0-cos((jmax-1)*pi/jmax));
  alim := ln(4.0*jmax/pi);
  k := 0;
  twotok := 1;
  REPEAT
    k := k+1;
    twotok := 2*twotok;
  UNTIL twotok >= alim;
  eps := 1.0e-4;
  adi(a,b,c,d,e,f,g,u,jmax,k,alpha,beta,eps);
  writeln('ADI Solution:');
  FOR i := 1 to jmax DO BEGIN
    FOR j := 1 to jmax DO write(u[i,j]:7:2);
    writeln
  END;
  writeln('Test that solution satisfies difference eqns:');
  FOR i := 2 to (jmax-1) DO BEGIN
    FOR j := 2 to (jmax-1) DO BEGIN
      g[i,j] := -4.0*u[i,j]+u[i+1,j]
        +u[i-1,j]+u[i,j-1]+u[i,j+1]
    END;
    write(' ':7);
    FOR j := 2 to (jmax-1) DO write(g[i,j]:7:2);
    writeln
  END
END.

```

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \rho$$

$$A_{jl} = C_{jl} = D_{jl} = F_{jl} = -1.0$$

$$B_{jl} = E_{jl} = 2.0$$

$$\alpha = 2 \left[1 - \cos \left(\frac{\pi}{j_{\max}} \right) \right]$$

$$\beta = 2 \left[1 - \cos \left(\frac{(j_{\max} - 1)\pi}{j_{\max}} \right) \right]$$

(実行結果)

```

ADI Solution:
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00
0.00 -0.02 -0.04 -0.06 -0.08 -0.09 -0.08 -0.06 -0.04 -0.02 0.00
0.00 -0.04 -0.09 -0.13 -0.17 -0.19 -0.17 -0.13 -0.09 -0.04 0.00
0.00 -0.06 -0.13 -0.20 -0.28 -0.32 -0.28 -0.20 -0.13 -0.06 0.00
0.00 -0.08 -0.17 -0.28 -0.41 -0.55 -0.41 -0.28 -0.17 -0.08 0.00
0.00 -0.09 -0.19 -0.32 -0.55 -1.05 -0.55 -0.32 -0.19 -0.09 0.00
0.00 -0.08 -0.17 -0.28 -0.41 -0.55 -0.41 -0.28 -0.17 -0.08 0.00
0.00 -0.06 -0.13 -0.20 -0.28 -0.32 -0.28 -0.20 -0.13 -0.06 0.00
0.00 -0.04 -0.09 -0.13 -0.17 -0.19 -0.17 -0.13 -0.09 -0.04 0.00
0.00 -0.02 -0.04 -0.06 -0.08 -0.09 -0.08 -0.06 -0.04 -0.02 0.00
0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00

Test that solution satisfies difference eqns:
-0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 -0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00
-0.00 0.00 0.00 0.00 0.00 2.00 0.00 0.00 0.00 -0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00
0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00 0.00 -0.00 -0.00 -0.00 0.00
-0.00 0.00 0.00 0.00 -0.00 0.00 0.00 0.00 -0.00 0.00

```

5. おわりに

Numerical Recipesとそのソフトウェアについて述べてきたが、内容的に見てみると解法のアルゴリズムの点で、多少、偏りはあるものの、その低価格性を見ると、かなり良くできたソフトウェアと言える。ただし、筆者がNEC PC-9800 上のTurbo-Pascalで全てのコードを試したところ全部O.K.というわけではなく、数個のコードはそのままでは動かず、多少の手直しを必要とした。

参考文献

- [1] W.T.Vettering et al., Numerical Recipes, Cambridge University Press, (1986).
- [2] W.T.Vettering et al., Numerical Recipes Example Book(Pascal), Cambridge Cambridge University Press, (1986).
- [3] Numerical Recipes Software, Numerical Recipes Pascal Diskette V1.0, Cambridge University Press, (1986).
- [4] Numerical Recipes Software, Numerical Recipes Example Diskette V1.0, Cambridge University Press, (1986).
- [5] Turbo Pascal User's Guide and Reference Manual, Borland, 1986.

付録 (コンピュータ・コード名)

FLMOON	phases of the moon, calculated by date	ERF	error function
JULDAY	Julian day number, calculated by date	ERFC	error function, complementary
BADLUK	Friday the 13th when the moon is full	ERFCC	error function, complementary, concise routine
CALDAT	calendar date, calculated from Julian day number	BETAI	beta function, incomplete
GAUSSJ	matrix inversion and linear equation solution, Gauss-Jordan	BETACF	beta function, incomplete, continued fraction evaluation
LUDCMP	linear equation solution, LU decomposition	BESSJO	Bessel function J_0
LUBKSB	linear equation solution, backsubstitution	BESSY0	Bessel function Y_0
TRIDAG	linear equation solution, tridiagonal equations	BESSJ1	Bessel function J_1
MPROVE	linear equation solution, iterative improvement	BESSY1	Bessel function Y_1
VANDER	linear equation solution, Vandermonde matrices	BESSJ	Bessel function J of integer order
TOEPLZ	linear equation solution, Toeplitz matrices	BESSY	Bessel function Y of integer order
SVDCMP	singular value decomposition of a matrix	BESSIO	Modified Bessel function I_0
SVBKSJ	singular value backsubstitution	BESSKO	Modified Bessel function K_0
SPARSE	linear equation solution, sparse matrix, conjugate-gradient method	BESSI1	Modified Bessel function I_1
		BESSK1	Modified Bessel function K_1
		BESSI	Modified Bessel function I of integer order
		BESSK	Modified Bessel function K of integer order
POLINT	interpolation, polynomial	PLGNDR	Legendre polynomials, associated (spherical harmonics)
RATINT	interpolation, rational function	EL2	Elliptic integral of the first and second kinds
SPLINE	interpolation, construct a cubic spline	CEL	Elliptic integrals, complete, all three kinds
SPLINT	interpolation, evaluate a cubic spline	SNCRND	Jacobian elliptic functions
LOCATE	search an ordered table, bisection		
HUNT	search an ordered table, correlated calls	RANO	random deviates, improve an existing generator
POLCOE	polynomial coefficients from a table of values	RAN1	random deviates, uniform
POLCOF	polynomial coefficients from a table of values	RAN2	random deviates, uniform
POLIN2	interpolation, two-dimensional polynomial	RAN3	random deviates, uniform, subtractive method
BCUCOF	interpolation, two-dimensional, construct bicubic	EXPDEV	random deviates, exponential
BCUINT	interpolation, two-dimensional, evaluate bicubic	GASDEV	random deviates, normally distributed (Box-Muller)
SPLIE2	interpolation, two-dimensional, construct two-dimensional spline	GAMDEV	random deviates, gamma-law distribution
		POIDDEV	random deviates, Poisson distributed
SPLIN2	interpolation, two-dimensional, evaluate two-dimensional spline	BNLDEV	random deviates, binomial distributed
		IRBIT1	random bit sequence, generate
		IRBIT2	random bit sequence, generate
TRAPZD	integrate a function by trapezoidal rule	RAN4	random deviates, uniform, using Data Encryption Standard
QTRAP	integrate a function to desired accuracy, trapezoidal rule	DES	encryption, using the Data Encryption Standard
QSIMP	integrate a function to desired accuracy, Simpson's rule	KS	encryption, key schedule for Data Encryption Standard
QROMB	integrate a function to desired accuracy, Romberg adaptive method	CYFUN	encryption, cipher function for Data Encryption Standard
MIDPNT	integrate a function by extended midpoint rule		
QROMO	integrate a function to desired accuracy, open Romberg	PIKSRT	sort an array by straight insertion
		PIKSRT2	sort two arrays by straight insertion
MIDINF	integrate a function on a semi-infinite interval	SHELL	sort an array by Shell's method
MIDSQL	integrate a function with a square-root singularity	SORT	sort an array by heapsort method
MIDSQU	integrate a function with an inverse square-root singularity	SORT2	sort two arrays by heapsort method
MIDEXP	integrate a function which decreases exponentially	INDEXX	sort, construct an index for an array
QGAUS	integrate a function by Gaussian quadratures	SORT3	sort, use an index to sort 3 or more arrays
GAULEG	Gauss-Legendre weights and abscissas. compute	RANK	sort, construct a rank table for an array
QUAD3D	integrate a function over a three-dimensional space	QCKSRT	sort an array by quicksort method
		ECLASS	determine equivalence classes
		ECLAZZ	determine equivalence classes
EULSUM	sum a series. Euler-van Wijngaarden algorithm	SCRSHO	graph a function to search for roots
DDPOLY	polynomial, fast evaluation of specified derivatives	ZBRAC	roots of a function, search for brackets on
POLDIV	polynomials, divide one by another	ZBRAK	roots of a function, search for brackets on
CHEBFT	fit a Chebyshev polynomial to a function	RTBIS	root of a function, find by bisection
CHEBEV	Chebyshev polynomial evaluation	RTFLSP	root of a function, find by false-position
CHINT	integrate a function already Chebyshev fitted	RTSEC	root of a function, find by secant method
CHDER	derivative of a function already Chebyshev fitted	ZBRENT	root of a function, find by Brent's method
CHEBPC	polynomial coefficients from a Chebyshev fit	RTNEWT	root of a function, find by Newton-Raphson
PCSHT	polynomial coefficients of a shifted polynomial	RTSAFE	root of a function, find by Newton-Raphson and bisection
		LAGUER	root of a polynomial, Laguerre's method
GAMMLN	logarithm of gamma function	ZROOTS	roots of a polynomial, Laguerre's method with deflation
FACTRL	factorial function	QROOT	root of a polynomial, complex or double, Bairstow
BICO	binomial coefficients function	MNEWT	nonlinear systems of equations, Newton-Raphson
FACTLN	factorial function, logarithm		
BETA	beta function		
GAMMP	gamma function, incomplete		
GAMMQ	gamma function, incomplete, complementary		
GSER	gamma function, incomplete, series evaluation		
GCF	gamma function, incomplete, continued fraction evaluation		

MNBRAK	minimum of a function, bracket	FIT	fit data to a straight line, least squares
GOLDEN	minimum of a function, find by golden section search	LFIT	linear least squares fit, general, normal equations
BRENT	minimum of a function, find by Brent's method	COVSRT	covariance matrix, sort, used by LFIT
DBRENT	minimum of a function, find using derivative information	SVDFIT	linear least squares fit, general, singular value decomposition
AMOEBA	minimum of a function, multidimensions, downhill-simplex	SVDFVAR	variances from singular value decomposition
POWELL	minimum of a function, multidimensions, Powell's method	FPOLY	fit a polynomial, using LFIT or SVDFIT
LINMIN	minimum of a function, along a ray in multidimensions	FLEG	fit a Legendre polynomial, using LFIT or SVDFIT
F1DIM	minimum of a function, used by LINMIN	MRQMIN	nonlinear least squares fit, Marquardt's method
FRPRMN	minimum of a function, multidimensions, conjugate-gradient	MRQCOF	nonlinear least squares fit, used by MRQMIN
DF1DIM	minimum of a function, used by LINMIN	FGAUSS	fit a sum of Gaussians, using MRQMIN
DFPMIN	minimum of a function, multidimensions, variable metric	MEDFIT	fit data to a straight line robustly, least absolute deviation
SIMPLX	linear programming maximization of a linear function	ROFUNC	fit data robustly, used by MEDFIT
SIMP1	linear programming, used by SIMPLX	RK4	integrate one step of ODEs, 4th order Runge-Kutta
SIMP2	linear programming, used by SIMPLX	RKDUMB	integrate ODEs by 4th order Runge-Kutta
SIMP3	linear programming, used by SIMPLX	RKQC	integrate one step of ODEs with accuracy monitoring
ANNEAL	minimize by simulated annealing (traveling salesman problem)	ODEINT	integrate ODEs with accuracy monitoring
JACOBI	eigenvalues and eigenvectors of a symmetric matrix	MMID	integrate ODEs by modified midpoint method
EIGSRT	eigenvectors, sorts into order by eigenvalue	BSSTEP	integrate ODEs, Bulirsch-Stoer step
TRED2	Householder reduction of a real, symmetric matrix	RZEXTR	rational function extrapolation, used by BSSTEP
TQLI	eigenvalues and eigenvectors of a symmetric tridiagonal matrix	PZEXTR	polynomial extrapolation, used by BSSTEP
BALANC	balance a nonsymmetric matrix	SHOOT	two-point boundary value problem, solve by shooting
ELMHES	Hessenberg form, reduce a general matrix to	SHOOTF	two-point boundary value problem, shooting to a fitting point
HQR	eigenvalues of a Hessenberg matrix	SOLVDE	two-point boundary value problem, solve by relaxation
FOUR1	Fourier transform (FFT) in one dimension	BKSUB	backsubstitution, used by SOLVDE
TWOFFT	Fourier transform of two real functions	PINVS	diagonalize a sub-block, used by SOLVDE
REALFT	Fourier transform of a single real function	RED	reduce columns of a matrix, used by SOLVDE
SINFT	sine transform using FFT	SFROID	spheroidal functions, obtain using SOLVDE
COSFT	cosine transform using FFT	DIFEQ	spheroidal matrix coefficients, used by SFROID
CONVLV	convolution or deconvolution of data using FFT	SOR	elliptic PDE solved by simultaneous overrelaxation method
CORREL	correlation or autocorrelation of data using FFT	ADI	elliptic PDE solved by alternating direction implicit method
SPCTRM	power spectrum estimation using FFT		
MEMCOF	power spectrum estimation, evaluate maximum entropy coefficients		
EVLNEM	power spectrum estimation using maximum entropy coefficients		
FIXRTS	roots of a polynomial, reflects inside unit circle		
PREDIC	linear prediction using MEM coefficients		
FOURN	Fourier transform (FFT) in multidimensions		
MOMENT	moments of a data set, calculate		
MDIAN1	median of a data set, calculate by sorting		
MDIAN2	median of a data set, calculate iteratively		
TTEST	Student's t-test for difference of means		
AVEVAR	mean and variance of a data set, calculate		
TUTEST	Student's t-test for means, with unequal variances		
TPTEST	Student's t-test for means, with paired data		
FTEST	F-test for difference of variances		
CHSONE	chi-square test for difference between data and model		
CHSTWO	chi-square test for difference between two data sets		
KSONE	Kolmogorov-Smirnov test of data against model		
KSTWO	Kolmogorov-Smirnov test between two data sets		
PROBKS	Kolmogorov-Smirnov probability function		
CNTAB1	contingency table analysis using chi-square		
CNTAB2	contingency table analysis using entropy measure		
PEARSN	correlation between two data sets, Pearson's		
SPEAR	correlation between two data sets, Spearman's rank		
CRANK	rank, replaces array elements by their		
KENDL1	correlation between two data sets, Kendall's tau		
KENDL2	contingency table analysis using Kendall's tau		
SMOFT	smooth data using FFT		