

研究生教材
YANJIUSHENG JIAOCAI

数学方法与应用

谷根代 主编
杨晓忠 刘敬刚 苏岩 副主编



中国电力出版社
CHINA ELECTRIC POWER PRESS

数学方法与应用

主编 谷根代

副主编 杨晓忠 刘敬刚 苏 岩

编写 李 鹏

主 审 牛东晓



中国电力出版社
CHINA ELECTRIC POWER PRESS

内 容 提 要

本书为研究生教材，介绍了解决科学与工程中常见问题的数学方法，并强调方法在计算机上如何实现。全书共7章，主要包括数学基本知识回顾、矩阵理论、矩阵计算、数值逼近与数值积分、常微分方程初始问题的数值解、线性回归分析、时间序列分析等内容。

本书可作为理工科院校工程硕士和工学硕士研究生教材，还可作为工程技术人员和科研人员的参考用书。

图书在版编目 (CIP) 数据

数学方法与应用/谷根代主编 .—北京：中国电力出版社，2011.12

研究生教材

ISBN 978 - 7 - 5123 - 2476 - 3

I. ①数… II. ①谷… III. ①高等数学—数学方法—研究生—教材 IV. ①O13 - 0

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 260831 号

中国电力出版社出版、发行

(北京市东城区北京站西街 19 号 100005 <http://www.cepp.sgcc.com.cn>)

北京市同江印刷厂印刷

各地新华书店经售

*

2012 年 1 月第一版 2012 年 1 月北京第一次印刷

787 毫米×1092 毫米 16 开本 11 印张 232 千字

定价 19.00 元

敬 告 读 者

本书封面贴有防伪标签，加热后中心图案消失

本书如有印装质量问题，我社发行部负责退换

版 权 专 有 翻 印 必 究

前　　言

科学和工程技术的进步和发展，对在计算机上使用的数学方法提出了迫切的要求。

为了既方便从事电力研究的工程技术人员使用，又方便工程硕士和工学硕士研究生的数学教学，我们编写了此书。在内容上尽量选用电力领域的数学问题和常用的、行之有效的数学方法，并力求阐明算法思想和计算步骤。各章具有相对独立性，读者可以根据需要选用有关内容。

本书由华北电力大学的谷根代教授主编，杨晓忠、刘敬刚、苏岩副主编，李鹏编写。全书由谷根代统稿，华北电力大学牛东晓教授主审。牛东晓教授认真审阅了书稿，纠正了书中的一些不妥之处，并提出了许多宝贵的修改意见。华北电力大学数学建模与仿真中心的教师和同学们，对书中内容的讨论，保证了科学性。这里，向他们及本书所列参考文献的作者们表示衷心的感谢。

本书的出版得到国家自然科学基金（批准号 10771065）、河北省自然科学基金（批准号 A2007001027）和华北电力大学“211 工程”创新人才核心课程建设基金资助。

出版精品书籍，使莘莘学子受益，一直是作者追求的目标。但限于作者水平，加之时间仓促，书中错漏和不足之处在所难免，衷心期望广大读者和同行专家、学者批评指正。

编　者
2011 年 11 月

目 录

前言

| | |
|--------------------------|-----|
| 第1章 数学基本知识回顾 | 1 |
| 1.1 函数的微积分 | 1 |
| 1.2 向量与矩阵 | 4 |
| 1.3 随机变量及其分布 | 8 |
| 1.4 计算机算术和算法 | 13 |
| 本章总结 | 18 |
| 习题1 | 19 |
| 第2章 矩阵理论 | 21 |
| 2.1 矩阵函数 | 21 |
| 2.2 函数矩阵 | 27 |
| 2.3 矩阵分解 | 29 |
| 2.4 矩阵的广义逆 | 37 |
| 2.5 矩阵理论的应用 | 38 |
| 本章总结 | 40 |
| 习题2 | 41 |
| 第3章 矩阵计算 | 43 |
| 3.1 线性代数方程组的解法 | 44 |
| 3.2 非线性方程(组)的迭代法 | 61 |
| 3.3 矩阵特征值问题 | 66 |
| 本章总结 | 82 |
| 习题3 | 83 |
| 第4章 数值逼近与数值积分 | 87 |
| 4.1 数据插值方法 | 87 |
| 4.2 数据的最小二乘拟合 | 99 |
| 4.3 数值微分 | 101 |
| 4.4 数值积分 | 103 |
| 本章总结 | 111 |
| 习题4 | 111 |
| 第5章 常微分方程初始问题的数值解 | 114 |
| 5.1 基本概念 | 114 |

| | |
|------------------------------|------------|
| 5.2 常微分方程初始问题的单步法 | 116 |
| 5.3 刚性问题 | 126 |
| 5.4 常微分方程两点边值问题的解法 | 127 |
| 本章总结 | 130 |
| 习题 5 | 130 |
| 第 6 章 线性回归分析 | 133 |
| 6.1 概论 | 133 |
| 6.2 一元正态线性回归 | 136 |
| 6.3 多元正态线性回归 | 141 |
| 6.4 SAS/STAT 软件及应用实例分析 | 142 |
| 本章总结 | 145 |
| 习题 6 | 145 |
| 第 7 章 时间序列分析 | 149 |
| 7.1 时间序列的概念 | 149 |
| 7.2 平稳时间序列分析 | 150 |
| 7.3 非平稳时间序列分析 | 161 |
| 7.4 应用：日元/美元汇率的建模与预测 | 162 |
| 本章总结 | 165 |
| 习题 7 | 166 |
| 参考文献 | 168 |

数学基本知识回顾

人类从数数开始逐渐建立了自然数和常数的概念，形成了常量数学或初等数学体系。初等数学大约持续了两千年的历史，直到 16 世纪末结束。17 世纪以来，随着资本主义社会的发展，以机器为主的大工业占主导地位。与此同时，对运动的研究变成了自然科学的中心问题。在对各种变化过程和各种变化着的量之间的依赖关系的研究中，产生了变量和函数这两个新的数学概念。直到 17 世纪后半叶，牛顿和莱布尼兹建立了微积分，开创了变量数学或高等数学的新篇章。高等数学，以及后来发展起来的线性代数、概率论与数理统计等学科已成为当代大学本科生必备知识，也是进一步学习现代数学方法的基础。

本章主要回顾大学本科期间学过的并将在后面章节用到的知识，目的是为学习本书提供方便。

1.1 函数的微积分

对各种变化过程或各种变化着的量之间的依赖关系的观察、预测和跟踪，是人们研究“运动”的根本目的。也就是说，研究函数的变化规律是微积分的主要内容。本节不想在微积分的基本概念（如极限、连续、可微或导数、可积或积分、级数等）上泼洒墨水，只介绍一些用于观察、预测和跟踪的概念、理论和方法，比如连续函数的介值定理、微分中值定理、泰勒（Taylor）公式、积分中值定理等。

定理 1.1（介值定理）设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，且 $f(a) = A$, $f(b) = B$, $A \neq B$ ，则对于 A 与 B 之间的任意一个常数 C ，则至少存在一个 $\xi \in (a, b)$ ，使 $f(\xi) = C$ 。

推论 1.1（零点定理）设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，且 $f(a), f(b)$ 异号，则至少存在 $\xi \in (a, b)$ ，使 $f(\xi) = 0$ 。

介值定理是连续函数没有缝隙的最好解释。介值定理和零点定理的直观描述如图 1-1 和图 1-2 所示。

定理 1.2（积分中值定理）设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续，则在 $[a, b]$ 上至少存在一点 ξ ，使

$$\int_a^b f(x) dx = f(\xi)(b-a) \quad (1-1)$$

积分中值定理表明：区间 $[a, b]$ 上连续函数的积分值总可以规范到某个矩形的面积，如图 1-3 和图 1-4 所示。

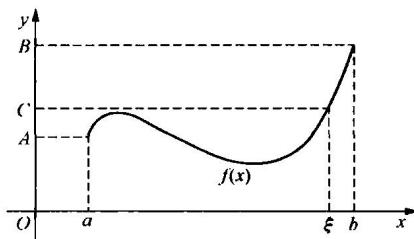


图 1-1 介值定理示意图

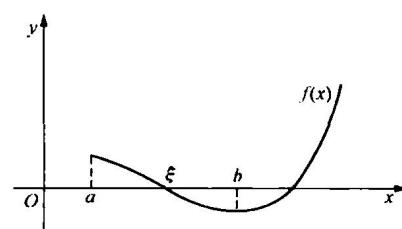


图 1-2 零点定理示意图

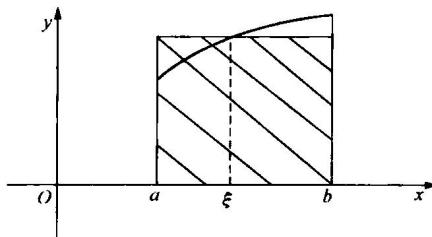


图 1-3 积分中值定理示意图（一）

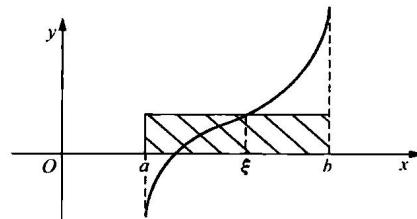


图 1-4 积分中值定理示意图（二）

定理 1.3 (加权积分中值定理) 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上不
变号且可积, 则在 $[a, b]$ 上至少存在一点 ξ ($a \leq \xi \leq b$), 使

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx \quad (1-2)$$

显然, $g(x) \equiv 1$ 时, 加权积分中值定理就是积分中值定理.

可微函数 (也称为光滑函数) 往往比具有许多尖点特征的函数 (连续但不可导) 表现得更加容易预测. 它不仅保有连续函数的性质, 而且显示出更多特性.

定理 1.4 (拉格朗日中值定理) 设 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, (a, b) 内可导, 则至少存在一点 $\xi \in (a, b)$, 使

$$f'(\xi) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \quad (1-3)$$

拉格朗日中值定理的另一种表现形式为: 对于任意的 $x \in [a, b]$ 和 $\Delta x + x \in [a, b]$, 有 $0 < \theta < 1$, 使

$$f(x + \Delta x) - f(x) = f'(x + \theta \Delta x) \Delta x \quad (1-4)$$

它称之为有限增量定理或微分中值定理.

有限增量定理是估计预测精度 (误差估计) 的重要手段. 比如: 如果 $f(x)$ 在 x_0 处有连续的导数, 则有 $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + o(|x - x_0|)$. 于是, 当 $|\Delta x| = |x - x_0|$ 充分小时, 可预测出 x_0 的邻近点 x 的值

$$f(x) \approx f(x_0) \quad (1-5)$$

有误差 $f'(x_0)(x - x_0)$; 或者

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (1-6)$$

有误差估计 $o(|x - x_0|)$.

【例 1-1】 计算 $\sqrt{2}$ 的近似值.

解 $\sqrt{2} \approx \sqrt{1.4^2} = 1.4$, 有误差

$$\frac{1}{2\sqrt{x_0}}(x - x_0) = \frac{1}{2\sqrt{1.4^2}}(2 - 1.4^2) = 0.0143$$

$$\sqrt{2} \approx \sqrt{1.4^2} + \frac{1}{2\sqrt{1.4^2}}(2 - 1.4^2) = 1.4143, \text{ 有误差 } o(0.04).$$

本例说明, 估计式 (1-6) 比式 (1-5) 提供了更大的预测范围. 可惜的是, 式 (1-6) 没有明确给出像式 (1-5) 那样的误差估计式.

泰勒公式提供了更好的函数预测和误差估计方法, 并显示了一般函数与多项式类函数的依赖关系.

定理 1.5 (泰勒定理) 设 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 在 $x_0 \in \mathbb{R}$ 及其邻域 $N_\delta(x_0)$ 有直到 $n+1$ 阶的导数, 则对于任意 $x \in N_\delta(x_0)$, 存在介于 x_0 和 x 之间的数 ξ , 使得

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \\ &\quad + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \end{aligned} \quad (1-7)$$

实际中, 要求函数具有 3 阶及 3 阶以上导数是很苛刻的. 因此, 最常用的是函数在 x_0 及其邻域 $N_\delta(x_0)$ 内的一阶泰勒公式 (局部线性化公式)

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (1-8)$$

有误差为 $\frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)^2$.

局部线性化公式 (1-8) 是解决非线性问题的很重要的手段. 图 1-5 和图 1-6 显示了不同曲率半径下局部线性化公式 (1-8) 的逼近效果.

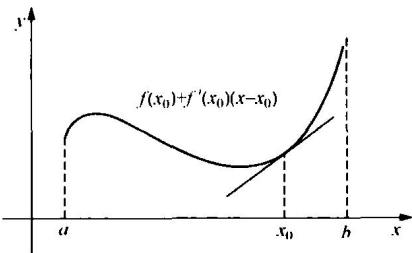


图 1-5 曲率半径小 ($|f''(x_0)|$ 大)

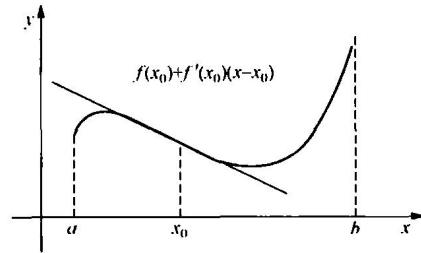


图 1-6 曲率半径大 ($|f''(x_0)|$ 小)

注意, 二阶泰勒公式

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f''(\xi)}{6}(x - x_0)^3 \quad (1-9)$$

也很有用.

【例 1-2】 用一阶和二阶泰勒公式计算 $\sqrt{2}$ 的近似值.

解 一阶泰勒公式

$$\sqrt{2} \approx \sqrt{1.4^2} + \frac{1}{2\sqrt{1.4^2}}(2 - 1.4^2) = 1.4143$$

有误差

$$e = \left| \frac{f''(\xi)}{2} (x - x_0)^2 \right| \approx \frac{1}{8 \times 1.4^3} (2 - 1.96)^2 = 7.2886 \times 10^{-5}$$

二阶泰勒公式

$$\sqrt{2} \approx \sqrt{1.4^2} + \frac{1}{2\sqrt{1.4^2}}(2 - 1.96) - \frac{1}{8 \times 1.4^3}(2 - 1.96)^2 = 1.4142$$

有误差

$$e = \left| \frac{f''(\xi)}{6} (x - x_0)^3 \right| \approx \frac{3}{8 \times 1.4^5} \times 0.04^3 = 4.4624 \times 10^{-6}$$

除了上面讨论的连续函数之外，还有科学与工程领域经常要面对的两类函数，一是周期函数，二是平方可积函数（能量有限函数）。对这两类函数的性质，法国数学家 J. Fourier (傅里叶) 给出了明确的解答。

定理 1.6 设 $f(x)$ 是周期为 T 的函数，且在区间 $[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}]$ 上满足条件：

(1) 连续或只有有限个第一类间断点；(2) 至多有有限个极值点。则 $f(x)$ 有傅里叶级数展开式

$$\frac{f(x-0) + f(x+0)}{2} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{2n\pi}{T} x + b_n \sin \frac{2n\pi}{T} x \right) \quad (1-10)$$

其中

$$a_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \cos \left(\frac{2n\pi}{T} x \right) f(x) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1-11)$$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \sin \left(\frac{2n\pi}{T} x \right) f(x) dx, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1-12)$$

定理 1.6 明确指出：一个周期为 T 的函数均为一系列简谐振荡函数

$$\begin{cases} u_n(x) = a_n \cos \frac{2n\pi}{T} x + b_n \sin \frac{2n\pi}{T} x = A_n \sin \left(\frac{2n\pi}{T} x + \theta_n \right) \\ n = 0, 1, \dots, m \end{cases}$$

的叠加。

定理 1.7 设 $f(x) \in L^2(R) = \left\{ f(x) \mid \int_{-\infty}^{\infty} [f(x)]^2 dx < \infty \right\}$ (称之为平方可积函数)，则有

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega x} d\omega \quad (1-13)$$

这里，

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (1-14)$$

称为 $f(x)$ 的傅里叶变换。

定理 1.7 中， $i^2 = -1$ 。式 (1-14) 称为 $f(x)$ 的傅里叶变换，显示了能量有限函数的谱分布，它是信号分析的基础；式 (1-13) 称为 $f(x)$ 的傅里叶逆变换或傅里叶积分。

1.2 向量与矩阵

1.1 节介绍了一种最简单的量与量之间的依赖关系，即一对一的关系，或者说是一元

函数。实际上量与量之间的依赖关系要比这复杂得多，经常要观察、预测一对多和多对多的关系。因此，必须把“数”扩展到向量和矩阵，才能方便地描述复杂的问题，如“系统”和“网络”等。

有关 n 维向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 和矩阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

的概念、运算和性质这里不再赘述，只对科学与工程实践中所面对的几个问题加以讨论。

1.2.1 线性代数方程组

形如

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1-15)$$

称为 n 元线性代数方程组。若记

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

则线性代数方程组 (1-15) 可简写为

$$Ax = b \quad (1-16)$$

线性代数的理论明确指出：线性代数方程组 (1-16) 有解的充分必要条件是系数矩阵 A 的秩与增广矩阵 $B = (Ab)$ 的秩相等。并且，当 $\det(A) \neq 0$ 时，方程组 (1-16) 有唯一解 $x = A^{-1}b$ 。

1.2.2 方阵的特征值

设 A 为一个 n 阶实矩阵，满足方程

$$Ax = \lambda x \quad (1-17)$$

的数 λ 和非零向量 x ，分别称为矩阵 A 的特征值和相应的特征向量。

如式 (1-17) 所表示的问题称为矩阵 A 的特征值问题，其用处很大，是系统的稳定性分析基础。

线性代数的理论指出：特征多项式方程

$$\det(A - \lambda E) = 0 \quad (1-18)$$

包含了 A 的全部特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ （可以有重根），相应于每个特征值 λ_i 的特征向量包含在下列齐次线性代数方程组中。

$$(A - \lambda_i E)x = 0 \quad (1-19)$$

1.2.3 向量范数和矩阵范数

观察或预测空间两点 x, x^* 之间的距离，需要下面的范数概念。

定义 1.1 在 \mathbb{R}^n 上定义的一个实函数 $\|x\|$, 如果对于任意的 $a \in \mathbb{R}$, $x, y \in \mathbb{R}^n$, 满足

- (1) 非负性, 即 $\|x\| \geq 0$, $\|x\|=0$ 当且仅当 $x=0$;
- (2) 齐次性, 即 $\|\alpha x\|=|\alpha| \cdot \|x\|$;
- (3) 三角不等式, 即 $\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|$;

则称 $\|x\|$ 为向量 x 的范数.

特别地, \mathbb{R}^n 上两种常用的范数是

2—范数

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} \quad (1-20)$$

∞ —范数

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (1-21)$$

相应地, 两点 x^* 、 x 的距离

$$\|x^* - x\|_2 = \sqrt{(x_1^* - x_1)^2 + (x_2^* - x_2)^2 + \cdots + (x_n^* - x_n)^2} \quad (1-22)$$

$$\|x^* - x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i^* - x_i| \quad (1-23)$$

定义 1.2 在 $\mathbb{R}^{n \times n}$ 上定义一个实函数 $\|A\|$, 如果对于任意的 $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$, 以及 $\alpha \in \mathbb{R}$, 满足下列性质

- (1) 非负性, 即 $\|A\| \geq 0$, $\|A\|=0$ 当且仅当 $A=0$;
- (2) 齐次性, 即 $\|\alpha A\|=|\alpha| \cdot \|A\|$;
- (3) 三角不等式, 即 $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$;
- (4) 相容性, 即 $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$, $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$;

则称 $\|A\|$ 为矩阵 A 的范数.

特别地, $\mathbb{R}^{n \times n}$ 中常用的矩阵范数是

∞ —范数

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (1-24)$$

1—范数

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (1-25)$$

2—范数

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)} \quad (1-26)$$

其中, $\rho(A^T A) = \max_{1 \leq i \leq n} (|\lambda_i(A^T A)|)$ 称为矩阵 $A^T A$ 的谱半径, $\lambda_i(A^T A)$ 表示矩阵 $A^T A$ 的特征值.

1.2.4 多元函数和向量值函数泰勒公式

把一元函数泰勒公式推广到多元函数 $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 即

$$y = f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

和向量值函数 $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, 即

$$F(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

更有实际意义.

首先将一元函数可微的定义

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} [f(x_0 + t) - f(x_0) - at] = 0$$

推广到向量值函数 $F(x)$. 这里 $a = F'(x_0)$.

定义 1.3 向量值函数 $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 在点 $x^{(0)} \in D$ 称为可微的, 如果存在 n 阶矩阵 A , 满足

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{1}{\|h\|} \|F(x^{(0)} + h) - F(x^{(0)}) - Ah\| = 0 \quad (h \in \mathbb{R}^n) \quad (1-27)$$

可以证明, 这个矩阵 A 是唯一的.

记 $A = F'(x_0)$, 它称为 $F(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 的导数, 且

$$F'(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{x=x^{(0)}} \quad (1-28)$$

多元函数可以看成向量值函数的特例. 因此, 多元函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 的导数

$$f'(x^{(0)}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)_{x=x^{(0)}} \quad (1-29)$$

记 $\nabla f(x^{(0)}) = [f'(x^{(0)})]^T$, 称为多元函数 $f(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 处的梯度.

多元函数的梯度函数 $\nabla f(x)$ 是向量值函数. 若 $\nabla f(x)$ 在点 $x^{(0)}$ 处可微, 则 $f(x)$ 有二阶导数

$$f''(x^{(0)}) = \nabla^2 f(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}_{x=x^{(0)}} \quad (1-30)$$

$f''(x)$ 又称为 $f(x)$ 在 $x^{(0)}$ 处的海色 (Hesse) 矩阵.

定义 1.4 称向量值函数 $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 在点 $x^{(0)} \in D$ 及其邻域二阶可微, 如果

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{1}{\|h\|} \|F'(x^{(0)} + h) - F'(x^{(0)}) - F''(x^{(0)})h\| = 0 \quad (1-31)$$

成立. 这里 $F''(x^{(0)})$ 为二阶导数.

如果 $F(x)$ 在 $x^{(0)} \in D$ 二阶可微, 则有

$$F'(x^{(0)} + h) - F'(x^{(0)}) - F''(x^{(0)})h = o(\|h\|)E$$

推出

$$\begin{aligned}
 F''(x^{(0)})h &= F'(x^{(0)} + h) - F'(x^{(0)}) + o(\|h\|)E \\
 &= \left(\frac{\partial f_i(x^{(0)} + h)}{\partial x_j} - \frac{\partial f_i(x^{(0)})}{\partial x_j} \right)_{n \times n} + o(\|h\|)E \\
 &= \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f_i(x^{(0)})}{\partial x_k \partial x_j} h_k \right)_{n \times n} + o(\|h\|)E
 \end{aligned}$$

于是, 对于充分小的 $\|h\|$ 有

$$F''(x^{(0)})h = (H_1(x^{(0)})h \quad H_2(x^{(0)})h \quad \cdots \quad H_n(x^{(0)})h)^T$$

其中

$$H_i(x^{(0)}) = f''_i(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_1} \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}_{x=x^{(0)}} \quad (1-32)$$

$$i = 1, 2, \dots, n.$$

定理 1.8 (多元函数的泰勒公式) 设多元函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 在 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ 及其邻域二阶可微, 则对于此邻域中的任意 x , 存在 $0 \leq t \leq 1$, 使

$$\begin{aligned}
 f(x) &= f(x^{(0)}) + f'(x^{(0)})^T(x - x^{(0)}) \\
 &\quad + (x - x^{(0)})^T \frac{f''(x^{(0)} + t(x - x^{(0)}))}{2}(x - x^{(0)}) \quad (1-33)
 \end{aligned}$$

定理 1.9 (向量值函数的泰勒公式) 设向量值函数 $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 在 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ 及其邻域二阶可微, 则对于此邻域中的任意 x , 有

$$\begin{aligned}
 F(x) &= F(x^{(0)}) + F'(x^{(0)})(x - x^{(0)}) \\
 &\quad + \int_0^1 (1-t)F''(x^{(0)} + t(x - x^{(0)}))(x - x^{(0)})(x - x^{(0)}) dt \quad (1-34)
 \end{aligned}$$

1.3 随机变量及其分布

自然界和社会上发生的现象是多种多样的. 有一类现象, 在一定条件下必然发生, 例如向上抛一枚石子必然下落, 同性电荷必然相互排斥等, 这类现象称为确定性现象. 另一类现象表现为: 一次试验或观察之前不能预知确切的结果, 但大量重复试验的统计结果却呈现出某种规律性. 比如, 在相同条件下抛一枚硬币, 观察其哪面朝上? 大量重复试验观察的结果是硬币的每一面大致各占一半. 这类现象, 称为随机现象.

研究随机现象的手段就是随机试验, 它的特点是: ①可以在相同条件下重复进行; ②每次试验的可能结果不止一个, 并且能事先明确试验的所有可能结果; ③一次试验之前不能确定哪个结果会出现. 如果将随机试验的每个结果记为样本点 e , 把所有可能结果的集合记为样本空间 $S = \{e\}$, 则随机试验的某事件 A 就是样本空间的子集 ($A \subset S$).

1.3.1 随机变量的概念

研究随机现象的目的就是确定事件 A 在一次实验中发生的可能性大小，称为事件 A 的概率，记为 $P(A)$ 。为了更方便地实现这个目标，引入随机变量和随机变量分布函数的概念。

定义 1.5 对每一个样本 $e \in S$ ，规定一个实数 $X(e)$ 与之对应，这样就得到一个定义在样本空间 S 上单值实值函数 $X = X(e)$ ，称之为随机变量。

定义 1.6 设随机变量 X , $\forall x \in R$, 定义函数

$$F(x) = P\{X \leq x\} \quad (1-35)$$

称为随机变量 X 的分布函数。

若随机变量的值是有限个或可列个点时，称为离散型随机变量。设离散型随机变量 X 的所有可能取值为 $x_k (k=1, 2, \dots)$ ，则有概率分布（或分布律）

$$P\{X = x_k\} = p_k, k = 1, 2, \dots \quad (1-36)$$

凡不是离散型的随机变量称为非离散型随机变量。在非离散型随机变量类中，人们只关注连续型随机变量。

定义 1.7 随机变量 X 的分布函数为 $F(x)$ ，若存在非负函数 $f(x) \geq 0$ ，对 $\forall x \in R$ 有

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt \quad (1-37)$$

则称 X 是连续型随机变量。 $f(x)$ 称为 X 的概率密度函数（概率密度）。

引入随机变量及其分布函数，事件 $A = \{e | X(e) \in I, I \subset R\}$ 或 $\{X \in I\}$ 的概率就转化为常规的数的计算问题。即，当 X 为离散型随机变量时， $P\{X \in I\} = \sum_{x_k \in I} p_k$ ；

当 X 为连续型随机变量时， $P\{X \in I\} = \int_I f(x) dx$ 。

1.3.2 几个重要的随机变量及其概率分布

(1) $(0, 1)$ 分布 ($0 < p < 1$)

$$P\{X = x_k\} = p^k (1-p)^{1-k}, k = 0, 1$$

满足 $(0, 1)$ 分布的随机变量 X 描述的是只有两个可能结果的随机试验。

(2) 二项分布 $X \sim b(n, p)$ ($0 < p < 1, q = 1 - p$)

$$P\{X = k\} = C_n^k p^k q^{n-k}, k = 0, 1, 2, \dots$$

满足二项分布的随机变量 X 描述的是 n 次重复独立试验（ n 重贝努利试验）中事件 A 出现的次数。

(3) 泊松分布 $X \sim \pi(\lambda)$ ($\lambda > 0$)

$$P\{X = k\} = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}, k = 0, 1, 2, \dots$$

满足泊松分布的随机变量 X 描述的是在一个时间间隔内事件 A 出现的次数。它与二项分布的关系是： $\lim_{n \rightarrow \infty} b(n, p) = \pi(\lambda)$ ，其中 $\lambda = np$ 。

(4) 均匀分布 $X \sim U(a, b)$

概率密度函数

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a < x < b \\ 0, & x \notin (a, b) \end{cases}$$

均匀分布的随机变量表示 X 落在 (a, b) 中任意等长度的子区间内的概率相同.

(5) 指数分布

概率密度函数 ($\theta > 0$ 为常数)

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-\frac{x}{\theta}}, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

指数分布的随机变量 X 具有无记忆性的特性, 即

$$\forall s, t > 0, P\{X > s + t | X > s\} = P\{X > t\}$$

(6) 正态分布 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$

概率密度函数为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

其中 μ, σ 为常数, 且 $\sigma > 0$.

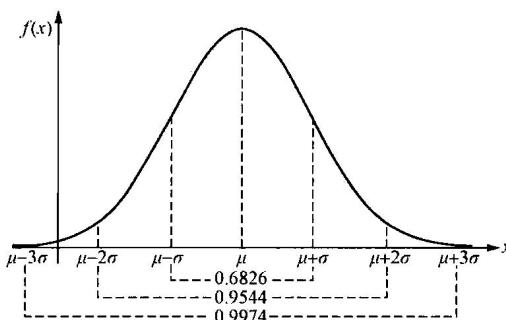


图 1-7 服从参数为 μ, σ 的正态分布

特别地, 当 $\mu=0, \sigma=1$ 时, 正态分布称为标准正态分布, 记为 $X \sim N(0, 1)$.

如图 1-7 所示, 正态分布是对称的, 且具有下列特性.

(1) 渐近性 $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0$;

(2) σ 原则

$$P\{\mu - \sigma < x < \mu + \sigma\} = 68.26\%$$

$$P\{\mu - 2\sigma < x < \mu + 2\sigma\} = 95.44\%$$

$$P\{\mu - 3\sigma < x < \mu + 3\sigma\} = 99.74\%$$

这说明, x 落在区间 $(\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma)$ 内几乎是肯定的. 这就是人们所说的“ 3σ ”原则.

在自然和社会现象中, 我们观察的指标 X 是由大量相互独立的随机变量之和生成的, 它们往往服从或近似服从正态分布. 比如: 在指定时刻, 一个城市的耗电量是大量用户耗电量的总和; 一个物理试验的测量误差是由许多观察不到的微小误差合成的. 这就是为什么正态随机变量占有重要地位的一个原因.

1.3.3 随机变量的数字特征

(1) 随机变量的数学期望 (均值)

设离散型随机变量 X 的分布为 $P\{X=x_k\}=p_k$ ($k=1, 2, \dots$), X 取值的中心

$$E(X) = \sum_{k=1}^{\infty} x_k p_k$$

称为离散型随机变量的 X 数学期望.

设连续型随机变量 X 的概率密度函数为 $f(x)$, X 取值的中心

$$E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$$

称为连续型随机变量的数学期望.

(2) 随机变量的方差

$D(X) = \text{var}(X) = E\{(X - E(X))^2\}$ 称为随机变量 X 的方差; $\sigma(X) = \sqrt{D(X)}$ 称为随机变量 X 的标准差或均方差. 它刻画了 X 取值的分散程度.

(3) 协方差与相关系数

我们知道, 当 X, Y 相互独立时, 有

$$E\{(X - E(X))(Y - E(Y))\} = E(X - E(X)) \cdot E(Y - E(Y)) = 0$$

因此, $E\{(X - E(X))(Y - E(Y))\} \neq 0$, 说明 X, Y 不相互独立, 即相关. 关于 X, Y 相关性的度量有定义: 称

$$\text{cov}(X, Y) = E\{(X - E(X))(Y - E(Y))\}$$

为 X, Y 的协方差;

$$\rho_{XY} = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{D(X)} \sqrt{D(Y)}}$$

为 X 与 Y 的相关系数.

显然, $|\rho_{XY}| \leq 1$. 特别地, 当 $|\rho_{XY}| = 1$ 时, 存在常数 a, b , 使 $P\{Y = a + bX\} = 1$.

几个重要随机变量的均值和方差如表 1-1 所示. 表中结果说明, 数字特征决定了随机变量的分布.

表 1-1 重要随机变量的均值和方差

| 随机变量 | 分布模型 | 数学期望 | 方差 |
|------|--------------------|-----------------|----------------------|
| 正态分布 | $N(\mu, \sigma^2)$ | μ | σ^2 |
| 均匀分布 | $U(a, b)$ | $\frac{a+b}{2}$ | $\frac{(b-a)^2}{12}$ |
| 二项分布 | $b(n, p)$ | np | $np(1-p)$ |
| 泊松分布 | $\pi(\lambda)$ | λ | λ |

1.3.4 统计量及其抽样分布

1. 常用的统计量

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的样本, 相应观察值为 x_1, x_2, \dots, x_n , 根据实际统计需要, 常采用如下统计量进行参数估计和检验, 如表 1-2 所示.

表 1-2 常用的统计量

| 名称 | 统计量 | 观察值 |
|------|--|--|
| 样本均值 | $X = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ | $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ |
| 样本方差 | $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ | $s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$ |