

第一章

一. 科学计算的基本概念

1. 科学计算: 利用计算机完成数学问题的计算
2. 科学研究: 科学实验, 理论研究, 科学计算
3. 算法构造: 了解, 理解, 选择, 使用, 基于段近似分析, 分析, 改进, 创造, 创新, 核心问题: 近似影响

二. 误差分析方法

1. 分类:
 - 过失/疏忽误差 → 可避免
 - 非过失误差 → 建模, 观测, 截断舍入

2. 绝对误差 $\epsilon(x) = x^* - x$ 误差限 $|\epsilon(x)| = |x^* - x| \leq \eta$
 相对 $\epsilon_r(x) = \frac{x^* - x}{x}$ 相对 $|\epsilon_r(x)| = \left| \frac{x^* - x}{x} \right| \leq \eta_r$
 $\epsilon(x) = x \cdot \epsilon_r(x)$

实际计算中取 $\epsilon_r^*(x) = \frac{\epsilon(x)}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*}$ 近似

3. 有效数字: $x^* = 0.a_1a_2 \dots a_n \times 10^m$
 x^* 为 n 位有效数字 $|x^* - x| \leq 0.5 \times 10^{m-n}$

4. 误差的传播

算法是稳定的: 误差不增长

避免: 大小相近的同号数相减, 乘数的绝对

值很大, 除数接近于零.

三. 建模与仿真的相似性理论及方法

1. 相似: $\overset{L}{\text{空间}}$ 相似, $\overset{t}{\text{时间}}$ 相似, $\overset{F}{\text{动力}}$ 相似

$k = \frac{M}{P}$, $k_F = k_P k_L k_t \cdot k_U$

第二章 数学建模方法及一般选取原则

一. 概述

1. 分类:
 - 传统: 机理分析, 试验统计
 - 现代: 层次分析, 定性推理, 系统辨识.

2. 原则

自盒: 机理分析, 直接相似, 量纲, 图解

不确定: 蒙特卡罗.

社会问题: 层次分析

二. 层次分析法

1. 基本步骤

- (1) 建立层次结构模型
- (2) 构造两两比较矩阵
- (3) 层次单排序及一致性检验
- (4) 层次总排序及一致性检验
- (5) 计算得分并排序

$CI = \frac{\lambda_{max} - n}{n-1}$ 一致性指标

查 RI 平均随机一致性指标

$CR = \frac{CI}{RI} < 0.1$ 一致性检验

矩阵越一致, λ_{max} 越接近 n

一致矩阵直接归一
不致: 算术平均, 几何平均, 特征值

2. $CR > 0.1$ 修正方法: 往一致矩阵 (各行列倍数关系) 上修正

3. 优点: 系统性, 实用性, 简洁性.

缺点: 局限性.

三. 量纲分析法

1. 数量: 物理学中所有公式都是量的公式
 $\overset{100}{\text{cm}}$ 物理量都有量纲, 无量纲量可以无量纲 (角度无量纲)

2. 单位制:
 - 基本量类: $\overset{L}{\text{长}}, \overset{m}{\text{质量}}, \overset{t}{\text{时间}}$ 导出量类: $\overset{F}{\text{力}}$
 - 基本单位: $\text{cm}, \text{g}, \text{s}$ 导出单位: N

$[F] = \text{dim} F = LMT^{-2} = (\text{dim} L)(\text{dim} M)(\text{dim} T)^{-2}$

3. 定理:
 - $C = A^a B^b \Rightarrow \text{dim} C = (\text{dim} A)^a (\text{dim} B)^b$
 - $C = A + B + \dots \Rightarrow \text{dim} C = \text{dim} A = \text{dim} B$

4. 量纲独立于单位

5. 瑞利法: 设 $t = \lambda m^a l^b g^c$, $(\text{dim} t) = (\text{dim} m)^a (\text{dim} l)^b (\text{dim} g)^c$

6. π 定理: 设 $f(t, m, l, g) = 0$, $t^{\alpha_1} m^{\alpha_2} l^{\alpha_3} g^{\alpha_4} = \pi$

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \alpha_1 = 0, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0, \alpha_4 = 0$
 $t^2 m^0 l^0 g^1 = \pi$
 $t = \sqrt{\pi l / g}$

7. 优点: 不用物理知识, 去掉无关物理量.

缺点: 可能忽略无量纲量, 用不了 \sin, \exp .

第三章 线性规划

一. 线性规划及其概念

1. 思路:
 - 找出决策变量
 - 写出目标函数
 - 确定约束条件

2. 标准型:
 - 目标函数最大
 - 约束条件等式
 - 决策变量非负
 - 右侧限量非负

2. 图解法

3. 基本可行解: $x = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \\ 0 \end{bmatrix}$ 为基本解, $b^1, b^2 \geq 0 \Rightarrow$ 基本可行解

$\max z = x_1 + 3x_2$

\hookrightarrow 画 $x_1 = 3x_2$ 等值线

4. 单纯形法

$$A = [B \ N] \quad X^T = [X_B^T \ X_N^T] \quad C = [C_B \ C_N]$$

$$Z = CX = [C_B \ C_N] \begin{bmatrix} X_B \\ X_N \end{bmatrix} = C_B X_B + C_N X_N$$

$$b = AX = [B \ N] \begin{bmatrix} X_B \\ X_N \end{bmatrix} = B X_B + N X_N \Rightarrow (b - B X_B)$$

$$X_B = B^{-1}(b - N X_N) = B^{-1}b - B^{-1}N X_N$$

$$Z = C_B X_B + C_N X_N = C_B (B^{-1}b - B^{-1}N X_N) + C_N X_N \\ = C_B B^{-1}b + (C_N - C_B B^{-1}N) X_N \Rightarrow (Z = C_B B^{-1}b)$$

步骤:

(1) 化标准型

(2) 找出或构造单位矩阵作为可行基 单纯形表

(3) 计算 $G_j = C_j - C_B B^{-1}A_j$ 若 G_j 所有 ≤ 0 则结束

(4) 若 $G_j > 0$ 且 $A_j \leq 0$ 则问题为无界解结束

(5) $\max \{G_j | G_j > 0\} = G_k$ X_k 换入变量

$\min \{b_i / a_{ik} | a_{ik} > 0\} = b_l / a_{lk}$ 换出变量 X_l

(6) 迭代 转换基变量

MATLAB

$$\max Z = 4x_1 + 3x_2$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} 2x_1 + x_2 \leq 10 \\ x_1 + x_2 \leq 8 \\ x_2 \leq 7 \\ x_1, x_2 \geq 0 \end{cases}$$

求解器:

clc, clear

c = [4; 3]; b = [10; 8; 7]; a = [2, 1; 1, 1; 0, 1];

lb = zeros(2, 1);

[x, fval] = linprog(c, a, b, [], [], lb, []);

y = -fval

$$f = [-4, -3]$$

$$\min(-Z) = -4x_1 - 3x_2$$

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 10 \\ 8 \\ 7 \end{bmatrix}$$

基于问题:

由 max \rightarrow 进基变量

clc, clear

prob = optimproblem('ObjectiveSense', 'max')

c = [4; 3]; b = [10; 8; 7]; a = [2, 1; 1, 1; 0, 1]; lb = zeros(2, 1);

x = optimvar('x', 2, 'LowerBound', 0);

prob.Objective = 4*x1 + 3*x2;

prob.Constraints = a*x <= b; x.Type = 'integer';

[sol, fval, flag, out] = solve(prob)

5. 可以转化为线性规划的问题

① $|x_i| \rightarrow u_i + v_i \quad x_i \rightarrow u_i - v_i$

② $\min(\max(x_i - y_i))$ 令 $v_i = \max(x_i - y_i)$

第四章

整数规划

1. 整数规划问题

1. 背包问题 0-1

$$\max Z = \sum_{i=1}^n C_i X_i$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} \sum_{i=1}^n a_i X_i \leq b \\ X_i = 0 \text{ or } 1, i=1 \dots n \end{cases}$$

3. 非线性约束条件的线性化

(1) 相互排斥的约束条件

$$\begin{cases} 5x_1 + 4x_2 \leq 24 \\ 7x_1 + 3x_2 \leq 45 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} 5x_1 + 4x_2 \leq 24 + yM \\ 7x_1 + 3x_2 \leq 45 + (1-y)M \\ y = 0 \text{ or } 1 \end{cases}$$

$$x_1 = 0 \text{ or } 500 \leq x_1 \leq 800 \Rightarrow 500y \leq x_1 \leq 800y, y = 0 \text{ or } 1$$

2. 整数规划模型求解

1. MATLAB

2. 蒙特卡罗法

根据 x 的整数取值范围随机计算 N 个点

求 $\max(x+y)$ 随机生成 x 和 y 比较

第五章 图与网络规划

1. 图的基本概念

两两一

1. 有向图、无向图、弧(带方向)、环、重边/平行边 (网络)

2. 简单图(无环无重边)、完全图(任意两点均有边)、赋权图

3. 奇顶点(度为奇数的顶点) Σ 奇顶点个数必为偶数

4. $\Sigma d(v) = 2|E|$ 顶点度数之和是边数的二倍

5. 子图若顶点数与母图相等 \rightarrow 生成子图

6. 迹: 各边相异 回路: 起点和终点重合

轨道: 各点相异 圈: 起终点重合 + 轨道

7. 连通图: 无孤立点 非连通图中的孤立点 \rightarrow 连通分支

强连通图: 双向连通

8. 关联矩阵

无向: $e_1 \ e_2 \ e_3 \ e_4$

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 \end{matrix} \\ \begin{matrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

有向: $e_1 \ e_2 \ e_3$

$$\begin{matrix} & \begin{matrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

2. 最短路问题

1. Dijkstra (按自己的格式列表)

2. 最小支撑树问题

9. 邻接矩阵

无向 $\begin{cases} 1 \rightarrow \text{相邻} \\ 0 \rightarrow \text{不相邻} \end{cases}$

有向 $\begin{cases} 1 \rightarrow v_i \rightarrow v_j \\ 0 \rightarrow \text{无弧} \end{cases}$

赋权就写权值

三. 最小支撑树问题

1. 树的基本概念和算法

(1) 树: 连通的天图

(2) 等价命题: 一个图的生成树

(i) 图G是树 通断不唯一

(ii) 任意两个不同顶点之间存在唯一的路

(iii) 连通, 删除任一条边均不连通

(iv) 连通, 且顶点数=边数+1

(v) 无圈, 加一条边可得唯一的圈

(vi) 无圈, 且点=边+1

2. 求解最小生成(支撑)树

(1) Kruskal 避圈 → 按边排序

(2) Prim 破圈 → 像dijkstra.

第六章 动态规划

一. 多阶段决策和动态规划

1. 多阶段决策过程: 看作前后关联具有链状结构的
多阶段过程. 状态 $\xrightarrow{\text{决策}}$ 状态 $\xrightarrow{\text{决策}}$...

2. 动态规划

(1) 阶段: 整个决策过程的自然划分.

(2) 状态: 每个阶段开始时所处的自然状态

或客观条件. (无后效性) 不会跨状态

(3) 决策: 每一阶段状态确定后应选哪个状态

(4) 策略: 一组有序的决策. 的状态转移规律.

(5) 状态转移方程: 第k阶段到第k+1阶段

(6) 指标函数和最优值函数

可观测性衡量的指标 \rightarrow 采取最优策略得到的

二. 动态规划的基本思路 and 步骤

1. 算法思想: 分解. 状态转移. 每段最优以全局考虑.

2. Bellman 最优化原理: 一个最优策略的子策略最优.

$$f(B_1) = \min \begin{cases} d(B_2, C_1) + f_3(C_1) \\ d(B_2, C_2) + f_3(C_2) \\ d(B_2, C_3) + f_3(C_3) \end{cases} = \min \begin{cases} 2+1 \\ 3+3 \\ 1+4 \end{cases} = 3$$

3. 步骤 (大题)

(1) 划分阶段k, 依据时间-空间顺序.

(2) 正确选择状态变量 S_k .

(3) 确定决策变量 u_k 和

四. 背包问题

1. 建模

(1) 状态划分: 带k种物品 \rightarrow 第k个状态.

(2) 状态变量 S_k : 第k个阶段携带时, 背包还可以携带的重量

(3) 决策变量 X_k : 第k个阶段携带第k种物品的件数

(4) 决策允许集合 $D_k(S_k) = \{X_k | 0 \leq X_k \leq S_k/W_k, X_k \text{ 为整数}\}$

(5) 状态转移方程: $S_{k+1} = S_k - W_k X_k$

(6) 阶段指标 $u_k(S_k, X_k)$: 得到的价值 $u_k(S_k, X_k) = C_k X_k$

(7) 递推方程 $f_k(S_k) = \max_{0 \leq X_k \leq \frac{S_k}{W_k}} \{u_k(S_k, X_k) + f_{k+1}(S_{k+1})\}$

2. 过程明天看算法笔记再给吧 $= C_k X_k + f_{k+1}(S_k - W_k X_k)$

以下来自北大算法课中提出的思路

(1) 状态划分: 面对背包容量 S_k 带k种物品.

(2) 状态变量: 第k个阶段背包的余量 S_k

(3) 决策变量: 当前阶段是否携带第k种物品

(4) 允许集合: $X_k = 0 \text{ or } 1$

(5) 状态转移方程: $S_k = S_{k-1} - W_k$

(6) 阶段指标 $f_k(S_k)$ 和递推方程: $f_k(S_k) = \max \begin{cases} f_{k-1}(S_k) \\ f_{k-1}(S_k - W_k) + C_k \end{cases}$

k \ S	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0	0	0	4	4	4	8	8	8	12	12
2	0	0	0	4	5	5	8	9	10	12	13
3	0	0	0	4	5	6	8	9	10	12	13

五. 旅行商问题

1. 建模.

$N_i = \{2, 3, 4, \dots, i-1, i+1, \dots, n\}$ 从1到i的中间城市集合.

S : 从1到i所经中间城市集合, x_{ij} 一个过程

阶段划分: S 中节点数. 状态变量 (i, S) : 从i出发到i, 经过 S 中一次.

最优指标函数 $f_k(i, S)$: $i \rightarrow i$ 的最短. 最优决策函数 $p_k(i, S)$.

$$f_k(i, S) = \min_{j \in S} \{f_{k-1}(j, S \setminus \{j\}) + d_{ij}\} \quad f_0(i, \emptyset) = d_{ii}$$

$j \in i$ 1 2 3 4 \rightarrow 记录最短的 $p_k(i, S) = j$.

j \ i	1	2	3	4
1	0	8	5	6
2	8	0	8	5
3	5	8	0	5
4	6	5	5	0

$$\min d_{ij} \cdot x_{ij}$$

$$\sum_j x_{ij} = \sum_j x_{ji} = 1$$

$$u_i - u_j + n \cdot x_{ij} \leq n-1 \quad j=2, \dots, n$$

$$u_i = 0, 1 \leq u_i \leq n-1$$

$$x_{ij} = 0 \text{ or } 1$$

第7章 算法复杂度概述

一. 算法的基本概念

1. 算法: 若干指令的有序序列.

性质: 输入、输出、确定、有限

必须明确量和时间

2. 算法: 指令有序序列

可以不满足有限性

程序: 算法用某种程序语言的具体实现.

3. 分类: 精确、启发式、近似、随机.

4. 评估算法的执行效率: 经验(程序测试)/理论

(1) 经验法

问题: 依赖计算机、语言与编程耗时.

只能评估部分实例

VS 理论法: 不依赖x2, 节省时间, 可研究任何实例

(2) 理论法

评估时间、空间.

二. 算法的复杂度概述

1. $C = F(N, I, A) \rightarrow \begin{cases} T = T(N, I) \text{ 时间} \\ S = S(N, I) \text{ 空间} \end{cases}$
复杂度 规模输入 算法(参数)

2. $f(n) = \Omega(g(n))$ $f(n) \geq c \cdot g(n)$ $a > b$

等 $f(n) = \Theta(g(n))$ $f(n) = O(g(n))$ & $f(n) = \Omega(g(n))$

上 $f(n) = O(g(n))$ $f(n) \leq c \cdot g(n)$ $a \leq b$

$f(n) = o(g(n))$ $a < b$

$f(n) = \omega(g(n))$ $a > b$

3. 复杂性渐近性态: 渐近表达式 \rightarrow 略去低阶留下主项

4. 大O表示法

三. P类问题与NP类问题

1. 问题 π 算法 $O(n^k)$ \rightarrow 存在多项式时间算法. (不能有指数)

2. P类问题:

(1) 确定性算法: 每步只有一个确定的选择.

(2) P类问题: $O(n^k)$ 时间运行确定性算法

得到 yes/no (确定的) 答案.

(3) 特点: 重复运行结果一样.

3. NP类问题

(1) NP: $O(n^k)$ 运行一个非确定算法得到 yes/no (确定的) 答案.

(2) 非确定性算法包括猜测阶段和验证阶段

(3) NP: 存在一个确定性算法, 多项式时间检查验证猜测答案.

NP不是非P

第8章 优化算法复杂度分析 明天并 不太记得

一. 局部问题

1. ZO zero order oracle 无导数优化算法. $x_0 \rightarrow f(x_0)$.

2. FO first order oracle 梯度法. $f(x_0)$ 及一阶导 $\partial f(x_0)/\partial x$

3. 2nd O second... 牛顿法. $f(x_0)$, 一阶导 $\partial f(x_0)$, 二阶导 $\nabla^2 f(x_0)$

4. SFO stochastic first order 随机梯度法

4. LO linear optimization oracle 条件梯度法. 线性规划问题的解 $\arg\min \langle x_0, x \rangle$

二. 停止算法

1. 凸函数. 所有局部最优解就是全局最优解

条件: ① $f(x_k) - f^* \leq \epsilon$ ② $\frac{f(x_k) - f^*}{f(x_k)} \leq \delta$ ③ $\|\nabla f(x_k)\| \leq \epsilon$ ④ $\|x_k - x^*\| \leq \epsilon$

局部极小值 导数=0.

2. 非凸函数. 局部极小值 \neq 全局最优解. Lipschitz \rightarrow 柯西弦 \rightarrow 解梯度的范数与最优解误差. 比普通连续更强的光滑性条件

三. 各种梯度

1. 条件梯度. $x_{k+1} = \arg\min \langle \nabla f(x_k), x \rangle$ 通过求解线性问题得到下一步

子迭代复杂度低, 简单(不依赖步长). 解具有结构性.

2. 梯度法 $x_{k+1} = x_k - \alpha \cdot \nabla f(x_k)$ (光滑).

3. 梯度投影法 非光滑 \rightarrow 次梯度 替代导数.

有约束 \rightarrow 可能落在约束集合外的点投影回来 $x_{k+1} = \arg\min_{x \in C} \|x_k - x\|$ $\frac{1}{2} \|x_k - x\|^2$ $w(y) = [w_k(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle]$

4. 镜像梯度法. $x_{k+1} = \arg\min_{x \in C} \langle \nabla f(x_k), x \rangle + V(x_k, x)$

投影 \rightarrow L2范数 \rightarrow 镜像欧几里德结构.

5. 近似次梯度法. 针对凸复合函数 $\min [g(x) + h(x)]$.

将 h 近似为欧氏距离平方 + 约束于最小的 u .

把 h 用约束函数表示. 优化 g 之后投影到约束中.

第9章 近似算法

一. 问题变换

1. 复杂性归约

$\begin{matrix} T(n) - O(t(n)) \\ T(n) + O(t(n)) \end{matrix} \rightarrow \pi$ 下界: $T(n) - O(t(n))$ 上界: $T(n) + O(t(n))$

二. NP完全问题

三. 近似算法性能

1. ... 性能比 $\rho(n)$. $\max \left\{ \frac{C}{C^*}, \frac{C^*}{C} \right\} \leq \rho(n)$

四. 代表性近似算法

近似. 输入转换 $A \rightarrow B$ \downarrow 问题求解 $\alpha^* \leftarrow b^*$ 输出转换



同阶时样 $\frac{C}{C^*} \geq C^*$ $\frac{C^*}{C} \geq C^*$

四. 代表性近似算法

1. 顶点覆盖问题
当删除完时:
边集 E_1 : 从 E_1 中任取一条边加入 C_{set} 并删除其相关边.
(并非最优, 只是近似.)
2. 旅行商问题 贪心策略 \rightarrow 最近邻法.
每步选最近邻居.

- (2) Prim
- ① 先生成最小生成树. \leftarrow 用 Kruskal 算法
 - ② 前序遍历 (根左右) 确定顺序, 相连成哈密顿回路.
- (3) Kruskal 避圈法 \rightarrow 最近插入法.