

数学建模算法库讲解

科研全家桶 · 讲解文档系列（原创）
配套《数学建模_算法库》40 个 clean-room 实现

摘要 本讲解面向数学建模与工程优化的常用算法，按优化、机器学习、降维与聚类、图论、预测与评价、动力学六类

关键词 粒子群优化, 神经网络, 主成分分析, 聚类, 最短路, 灰色预测, 传染病模型

1 引言

数学建模与工程实践中的大量问题，最终都可归结为若干标准算法范式：在可行域中寻最优（优化），从数据中
本讲解配套《数学建模_算法库》中的 40 个原创实现。我们不追求面面俱到的数学证明，而是抓住每个方法

2 优化算法

考虑一般的最小化问题

$$\min_{\mathbf{x} \in \Omega} f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d). \quad (1)$$

当目标函数 f 多峰、不可导或为黑箱时，基于梯度的方法易陷局部极小，此时群体智能与随机搜索更稳健。

2.1 粒子群优化 (PSO)

PSO 维护 N 个粒子，各自记忆个体历史最优 $\mathbf{p}_i$ ，群体共享全局最优 $\mathbf{g}$ 。速度与位置按下式更新：

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = w\mathbf{v}_i^t + c_1r_1(\mathbf{p}_i - \mathbf{x}_i^t) + c_2r_2(\mathbf{g} - \mathbf{x}_i^t), \quad (2)$$

$$\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1}. \quad (3)$$

三项分别为惯性、个体认知、社会协同。经验取 $w \in [0.4, 0.9]$ （可线性递减以先探索后收敛）， $c_1 \approx c_2 \approx 1.5 \sim 2$ 。

```
v = w*v + c1*r1*(pbest-x) + c2*r2*(g-x)
x = np.clip(x + v, lo, hi)
improved = f(x) < pbest_f
pbest[improved] = x[improved]
```

2.2 遗传算法 (GA)

GA 把解编码为“染色体”，通过选择—交叉—变异模拟自然进化。适应度越高被选中概率越大（轮盘赌 $P_i = f_i / \sum_j f_j$ ）；单点交叉交换片段；按小概率翻转基因位以维持多样性。GA 不依赖梯度、易并行，适合组合

2.3 模拟退火与差分进化

模拟退火 (SA) 借鉴固体退火：以 Metropolis 准则接受劣解，概率 $\exp(-\Delta f/T)$ 随温度 T 按 $T \leftarrow \alpha T$ 冷却而减小，从而前期大胆探索、后期稳定收敛。**差分进化 (DE)** 以个体间差分作变异 $\mathbf{m} = \mathbf{a} + F(\mathbf{b} - \mathbf{c})$ ，再二项交叉、贪心选择，在连续优化上收敛快而稳。

2.4 蚁群算法 (ACO)

ACO 用信息素正反馈求解 TSP 等路径问题：蚂蚁按 $p \propto \tau^\alpha \eta^\beta$ 概率选边（ τ 信息素、 $\eta = 1/d$ 启发式），每轮按路径优劣更新信息素并挥发，使好边逐渐被强化。

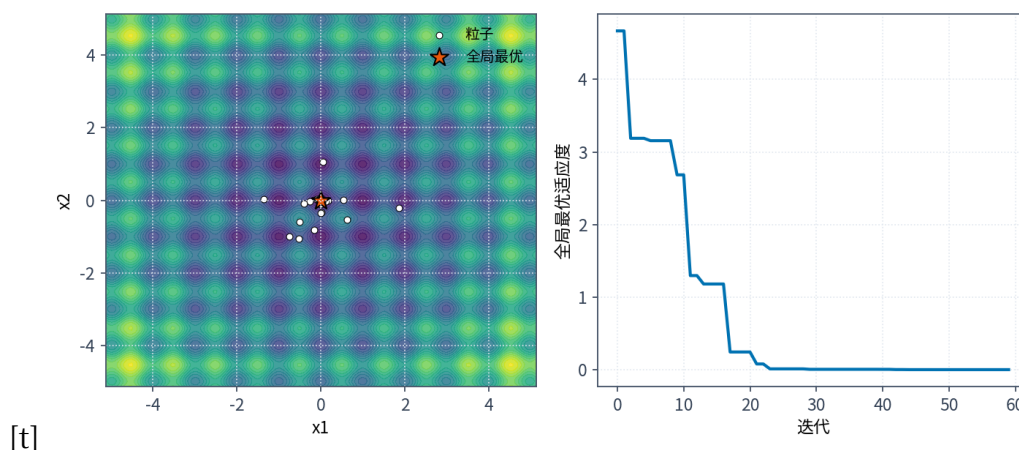


图1 PSO 求解 Rastrigin 函数：粒子逐步聚集到全局最优（左），全局最优适应度单调下降（右）。

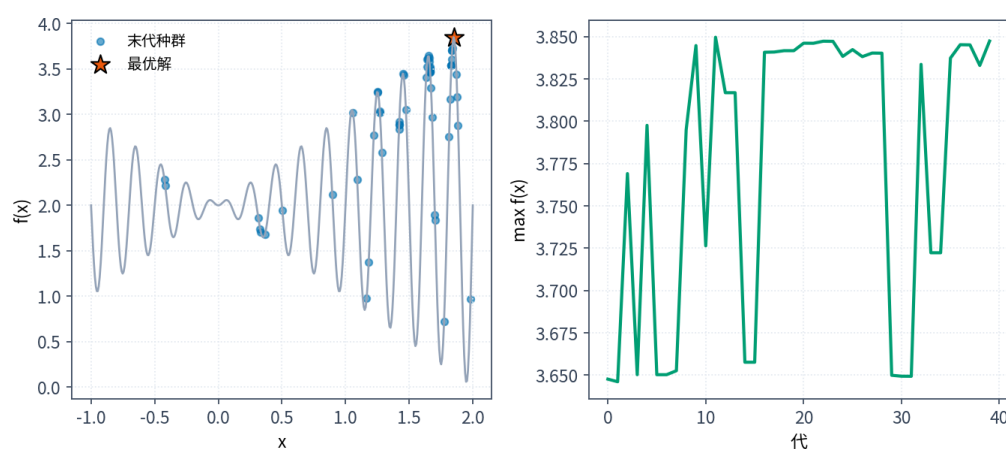


图2 GA 最大化多峰函数：末代种群聚集到全局最优，最优适应度逐代提升。

3 机器学习

3.1 回归与线性分类

线性回归以最小二乘求 $\min_{\mathbf{w}} \|X\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$ ，闭式解 $\mathbf{w} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y}$ 。逻辑回归把线性输出经 sigmoid $\sigma(z) = 1/(1 + e^{-z})$ 映射为概率，以交叉熵为损失，按梯度 $\nabla = X^T(\sigma(X\mathbf{w}) - \mathbf{y})/n$ 下降。感知机对线性可分数据按误分样本更新 $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta y_i \mathbf{x}_i$ 。

3.2 BP 神经网络

多层网络以反向传播训练：前向算输出与损失，再由链式法则自输出层向输入层逐层回传梯度。对 $L = \text{CE}(\hat{y}, y)$ 、隐层用 ReLU、输出用 sigmoid，关键回传为

$$\delta^{(2)} = \hat{y} - y, \quad \delta^{(1)} = (\delta^{(2)} W_2^T) \odot \mathbb{K}[z^{(1)} > 0]. \quad (4)$$

BP 能拟合高度非线性的决策边界。

3.3 决策树与近邻

决策树 (CART) 以基尼不纯度 $G = 1 - \sum_k p_k^2$ 选最优切分，递归二分特征空间，得到可解释的矩形分区。KNN K 个邻居投票，决策边界随 K 平滑。

4 降维与聚类

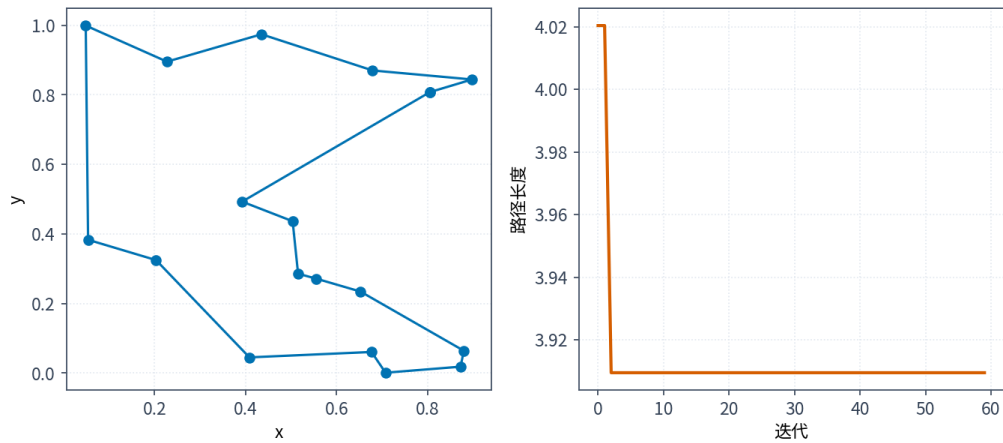


图3 ACO 求解旅行商问题：信息素正反馈下最优路径长度持续收敛。

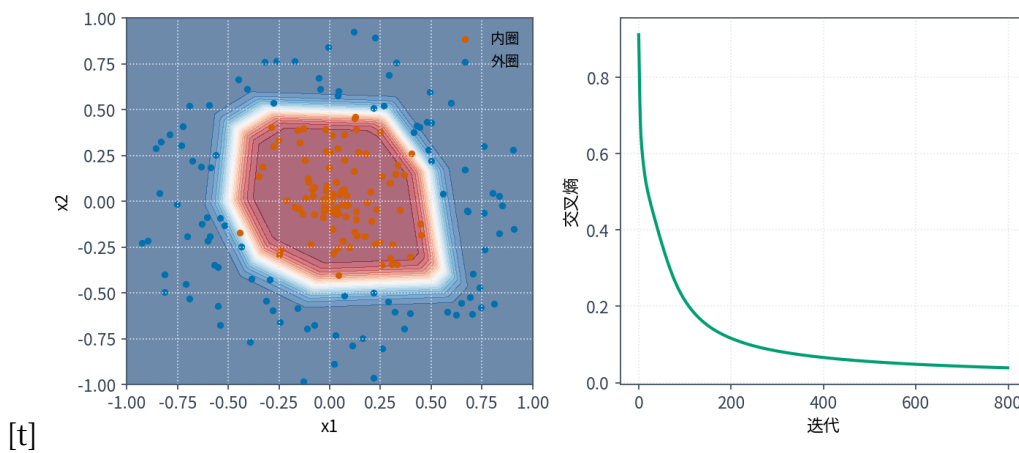


图4 手写反向传播的 2-8-1 网络学到环形非线性决策面（左），训练交叉熵损失收敛（右）。

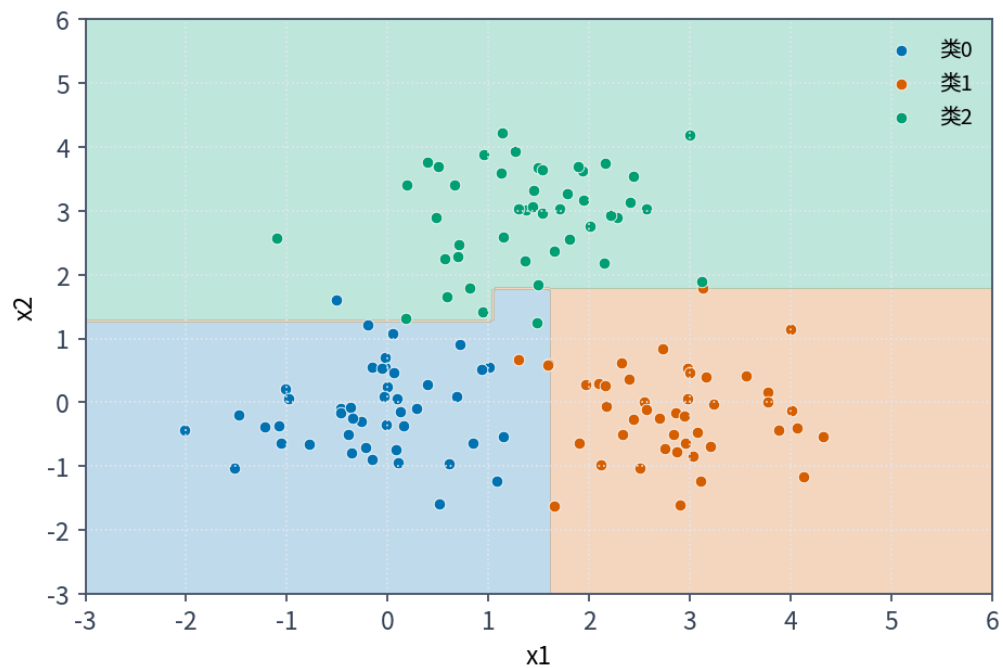


图5 CART 决策树（深度 3）对三类数据的轴对齐分区。

4.1 主成分分析 (PCA)

PCA 求数据方差最大的正交方向。对中心化矩阵作 SVD $X_c = U\Sigma V^T$ ，前 k 个右奇异向量即主成分，投影 $Z = X_c V_k$ 。奇异值平方占比给出方差解释率，用于决定保留维数。

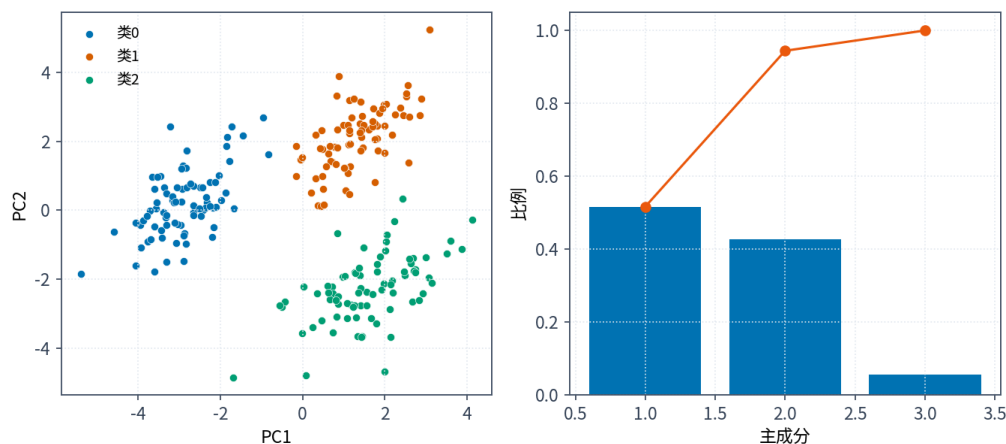


图6 PCA 把三类样本投影到前两主成分（左），并给出方差解释比（右）。

4.2 t-SNE 非线性降维

t-SNE 在高维以高斯、低维以 t 分布定义点对相似度，最小化二者的 KL 散度，善于保留局部簇结构，适合可视化。

4.3 K-means 与 DBSCAN

K-means 最小化簇内平方和 $\sum_i \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{c_i}\|^2$ ，交替“分配—更新质心”直至稳定。**DBSCAN** 基于密度 (ϵ 邻域内点数 $\geq \text{MinPts}$ 为核心点)，能识别任意形状的簇并自动剔除噪声，无需预设簇数。

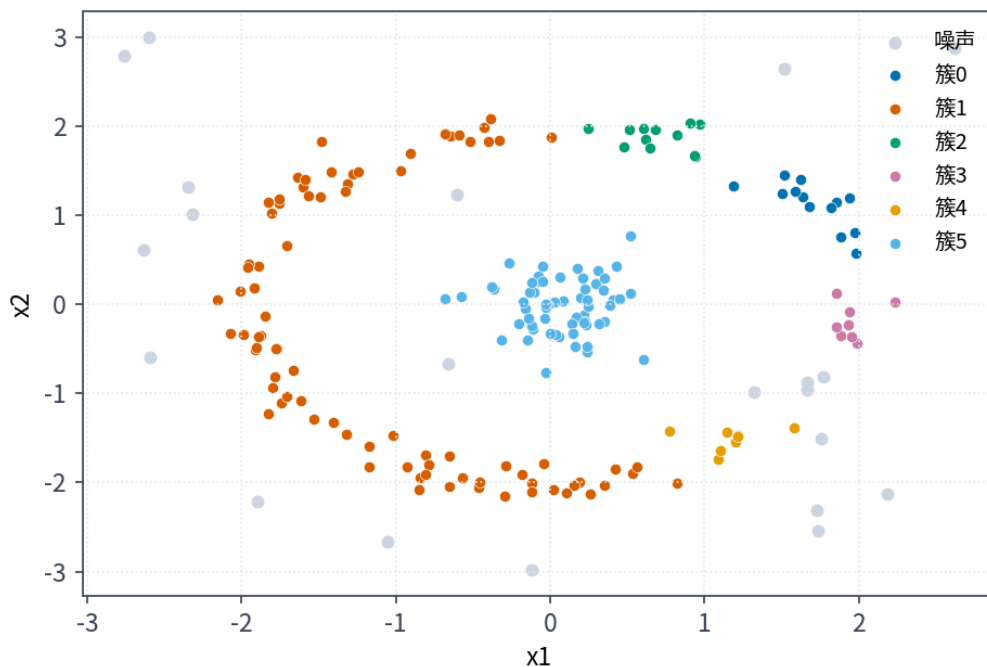


图7 DBSCAN 按密度识别环形与团状簇，并将离群点标记为噪声。

5 图论算法

5.1 最短路

Dijkstra对非负权图，贪心地每次取未访问中距离最小的点并松弛其邻边，得单源最短路。**Floyd-Warshall**以动态规划 $d_{ij} \leftarrow \min(d_{ij}, d_{ik} + d_{kj})$ 求全源最短路，简洁但 $O(n^3)$ 。

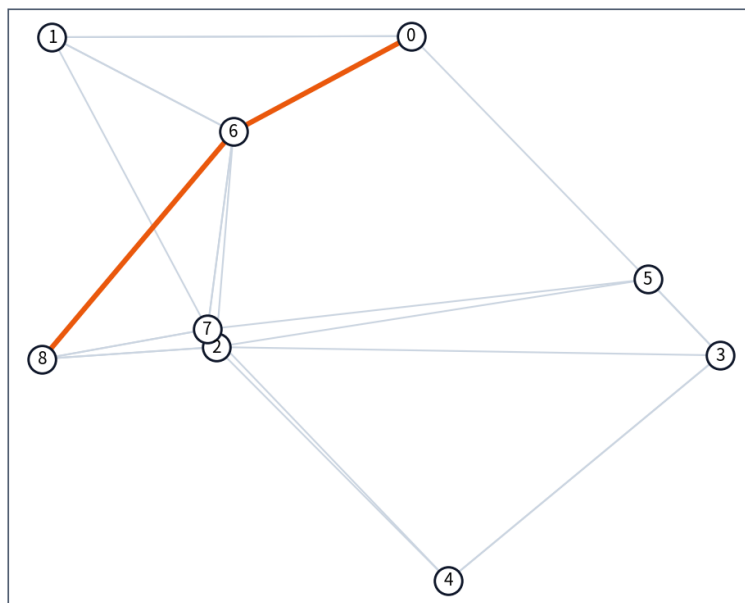


图 8 Dijkstra 求出的单源最短路径（红色高亮）。

5.2 生成树与网络流

最小生成树（Prim/Kruskal）以贪心选最小权边连通所有点。**最大流**由 Ford-Fulkerson 思想在残量网络上反即 Edmonds-Karp），直到无增广路，所得流量即最大流。

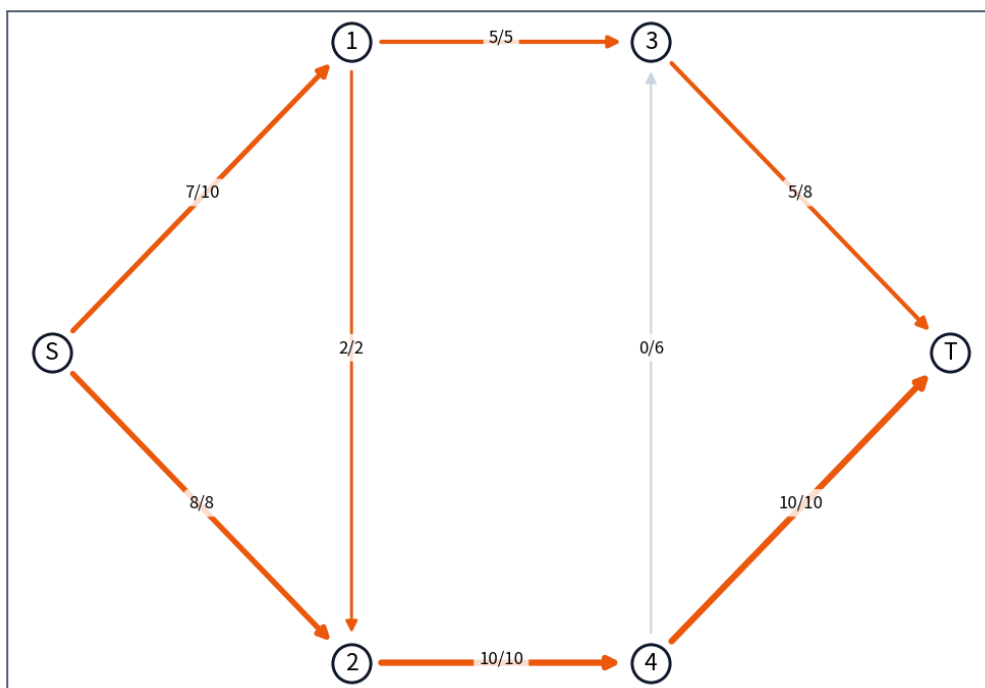


图 9 Edmonds-Karp 在残量网络上求源汇间最大流（边标注 已用/容量）。

6 预测与评价

6.1 灰色预测 GM(1,1)

对小样本、贫信息序列，GM(1,1) 先累加生成削弱随机性，再拟合白化微分方程 $\frac{dx^{(1)}}{dt} + ax^{(1)} = b$ ，得时间响应 $\hat{x}^{(1)}(k) = (x^{(0)}(1) - b/a)e^{-ak} + b/a$ ，最后累减还原预测。

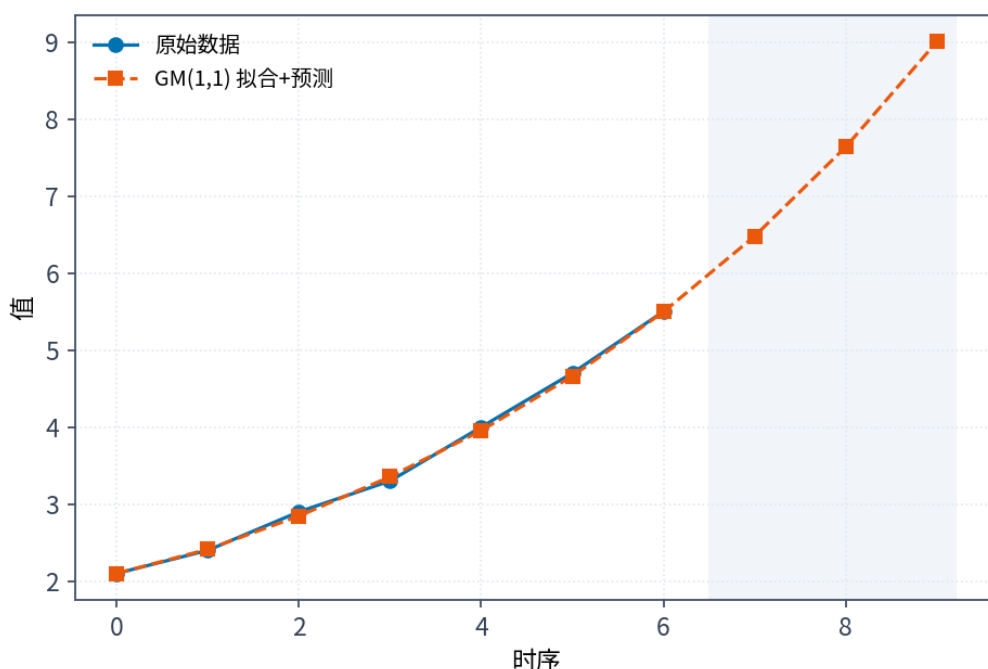


图 10 GM(1,1) 对小样本序列的拟合与外推（阴影区为预测段）。

6.2 AHP 与 TOPSIS

层次分析法 (AHP) 由两两比较的判断矩阵取最大特征值对应特征向量作权重，并以一致性比率 $CR = CI/RI < 0.1$ 检验逻辑一致性。TOPSIS 对加权规范化决策矩阵，计算各方案到正/负理想解的距离 d^+, d^- ，以贴适度 $C = d^- / (d^+ + d^-)$ 排序。

6.3 马尔可夫链

状态按转移矩阵 $\pi^{t+1} = \pi^t P$ 演化，在遍历条件下收敛到稳态分布 $\pi^* = \pi^* P$ ，可用于状态占比的长期预测。

7 动力学模型

7.1 传染病 SIR

SIR 把人群分为易感 S 、感染 I 、康复 R ：

$$\dot{S} = -\beta SI, \quad \dot{I} = \beta SI - \gamma I, \quad \dot{R} = \gamma I. \quad (5)$$

基本再生数 $R_0 = \beta/\gamma$ 决定疫情是否暴发 ($R_0 > 1$ 时 I 先升后降)。配套库以四阶 Runge-Kutta 求解。

7.2 种群增长与捕食

Logistic 增长 $\dot{P} = rP(1 - P/K)$ 受环境容量 K 约束，呈 S 形饱和。Lotka-Volterra 捕食者-猎物系统在相平面上形成极限环，种群此消彼长、周期振荡。

8 结语：如何选型

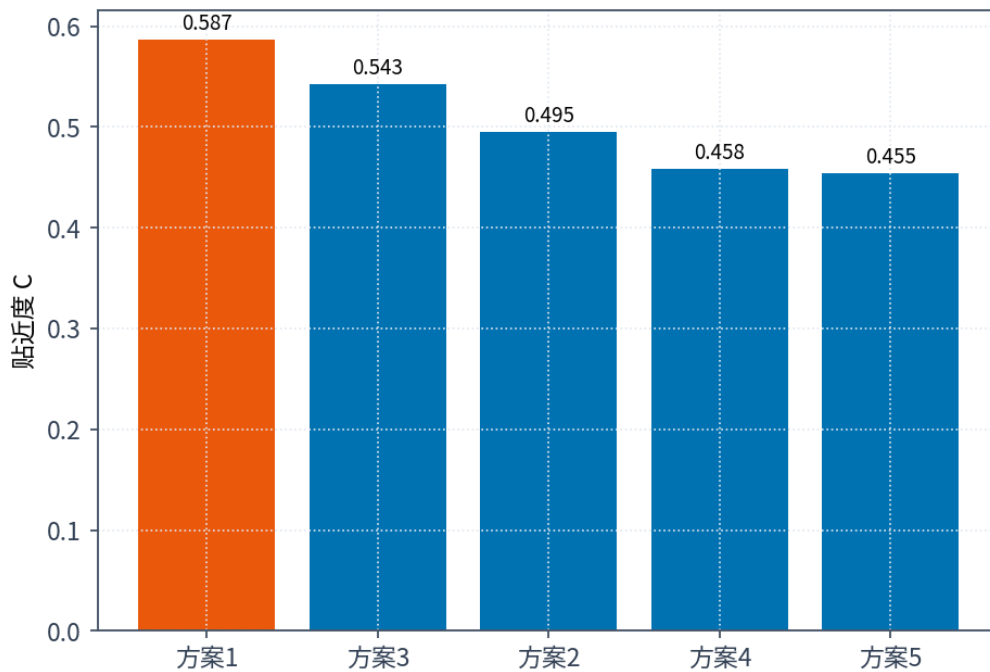


图 11 TOPSIS 优劣解距离法给出各方案综合贴近度排序。

建模现场可按问题类型快速定位：求极值且目标黑箱→优化（连续多峰用 PSO/DE，组合用 GA/ACO）；有标签 BP/决策树）；高维可视化→PCA/t-SNE；无监督分组→K-means/DBSCAN；网络路径与流→图论；小样本外 AHP/TOPSIS；时间演化机理→微分方程动力学。

本文为原创讲解，所述均为公开算法；全部代码与图示见配套《数学建模_算法库》，python3 build.py 可一键复现。

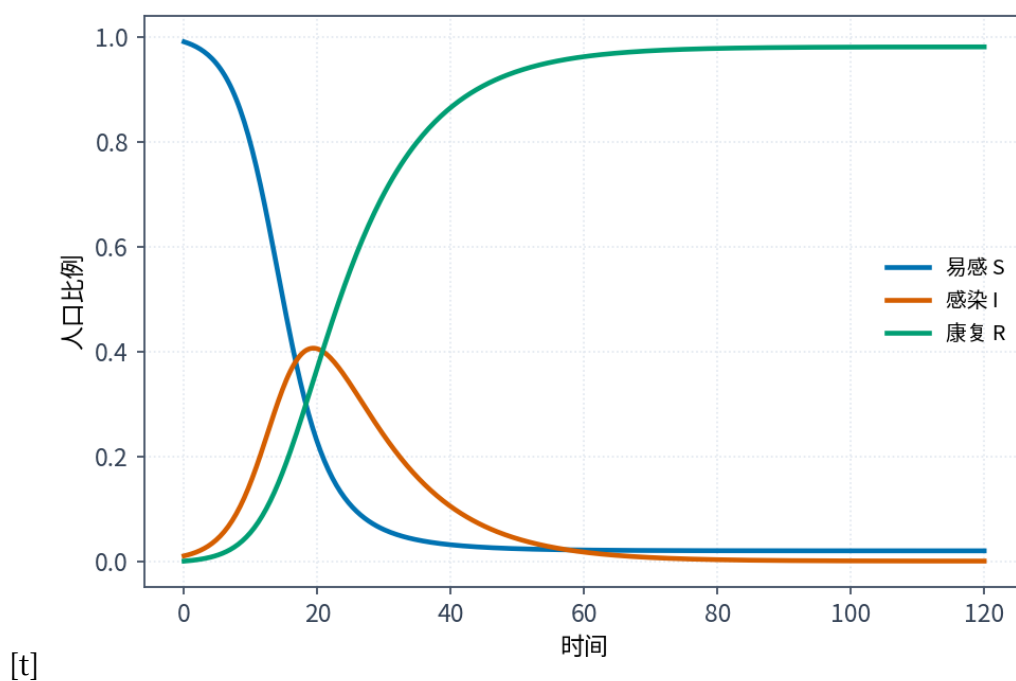


图 12 SIR 模型 ($R_0 = 4$) 的易感/感染/康复比例随时间演化。

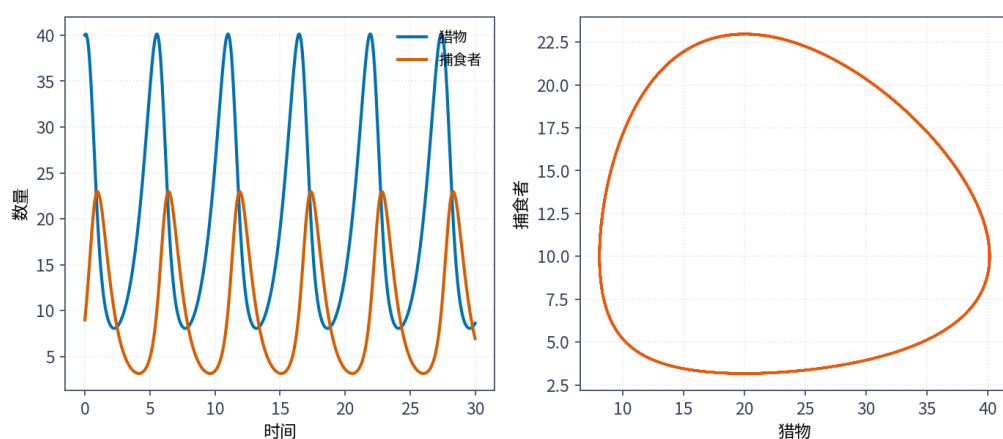


图 13 Lotka-Volterra 模型的时间演化（左）与相平面极限环（右）。