



南昌大学  
NANCHANG UNIVERSITY



# 大数据优化：理论、算法及其应用

——来源于《最优化计算方法》（高教社）

★★★ 主讲人：彭振华 ★★★

联系方式：zhenhuapeng@ncu.edu.cn  
zhenhuapeng@whu.edu.cn  
15870605317（微信同号）

研究兴趣：1. 非凸非光滑优化算法与理论  
2. 智能决策  
3. 智能计算与机器学习

数学与计算机学院

2026年

课件资源：<https://zhenhuapeng.github.io/coursematerials/>





# 目录



## 1. 大数据优化简介 (3课时)

## 2. 基础知识 (7课时)

## 3. 无约束优化理论 (2课时)

## 4. 无约束优化算法 (15课时)

## 5. 约束优化理论 (6课时)

## 6. 约束优化算法 (3课时)

## 7. 复合优化算法 (9课时)

- |            |             |
|------------|-------------|
| I. 模型与基本概念 | III. 应用实例   |
| II. 优化建模技术 | IV. 求解器与大模型 |

- |            |               |
|------------|---------------|
| I. 范数与导数   | III. 共轭函数与次梯度 |
| II. 凸集与凸函数 |               |

- |                   |                     |
|-------------------|---------------------|
| I. 最优性问题解的存在性     | III. 无约束不可微问题的最优性理论 |
| II. 无约束可微问题的最优性理论 |                     |

- |              |               |
|--------------|---------------|
| I. 线搜索方法     | IV. (拟)牛顿类算法  |
| II. (次)梯度类算法 | V. 信赖域算法      |
| III. 共轭梯度算法  | VI. 非线性最小二乘算法 |

- |                    |                  |
|--------------------|------------------|
| I. 对偶理论            | III. 凸优化问题的最优性理论 |
| II. 一般约束优化问题的最优性理论 |                  |

- |         |               |
|---------|---------------|
| I. 罚函数法 | II. 增广拉格朗日函数法 |
|---------|---------------|

- |        |         |          |         |        |
|--------|---------|----------|---------|--------|
| I. PPA | II. BCD | III. PGD | IV. SGD | V. SDP |
|--------|---------|----------|---------|--------|





南昌大学  
NANCHANG UNIVERSITY



# 无约束优化理论

## 第三部分

存在性

可微情形

不可微情形



# 解的存在性



$$\min_x f(x) \quad s.t. \quad x \in \mathcal{X}.$$

➤ **经典 Weierstrass 极值定理**: 下半连续 (lower semi-continuous) 的函数  $f$  在紧集  $C$  上一定存在最小值点.

➤ **下半连续函数**: 若对任意  $x$ , 有  $\liminf_{y \rightarrow x} f(y) \geq f(x)$

在许多实际问题中, 定义域可能不是紧的, 目标函数也不一定下半连续, 因此需要将此定理推广来保证最优化问题解的存在性.

➤ **推广的 Weierstrass 定理**: 若函数  $f$  适当且闭, 且以下条件中任意一个成立:

I.  $\text{dom } f = \{x \in X : f(x) < +\infty\}$  是有界的;

II. 存在一个常数  $\gamma$  使得下水平集  $C_\gamma = \{x \in X : f(x) \leq \gamma\}$  是非空且有界的;

III.  $f$  是强制的, 即对于任一满足  $\|x_k\| \rightarrow +\infty$  的点列  $\{x_k\} \subset X$ , 都有  $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x_k) = +\infty$ ,

则函数  $f$  的最小值点集  $\{x \in X \mid f(x) \leq f(y), \forall y \in X\}$  非空且紧.





➤ **强拟凸函数**: 给定凸集 $X$ 和函数 $f$ . 若任取 $x \neq y$ 和 $\lambda \in (0, 1)$ , 有

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \max\{f(x), f(y)\}$$

□ 任意强凸函数均为强拟凸的, 但凸函数并不一定是强拟凸的.

□ **唯一性**: 设 $X$ 是 $R^n$ 的一个非空, 紧且凸的子集, 如果 $f$ 是适当, 闭且强拟凸函数, 那么存在唯一的 $x^*$  满足

$$f(x^*) < f(x), \forall x \in X \setminus \{x^*\}.$$

对于一般的凸函数, 其最优解可能不唯一



$$\min_x f(x)$$

## ➤ 情形一：函数 $f$ 是连续可微的

如何判断  $x^*$  是否是函数  $f$  的一个局部极小解或者全局极小解？

□ (一阶必要条件) 假设  $f$  在全空间  $R^n$  可微. 如果  $x^*$  是一个局部极小点, 那么  $\nabla f(x^*) = 0$ . (若函数  $f$  是凸的, 则  $\nabla f(x^*) = 0 \rightarrow x^*$  是  $f$  的全局极小点)

Proof. 根据  $x^*$  的最优性, 在上式中进行整理分别对  $t$  取点  $0$  处的左, 右极限可知

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} [f(x^* + tv) - f(x^*)] / t = v^T \nabla f(x^*) \geq 0,$$

$$\lim_{t \rightarrow 0^-} [f(x^* + tv) - f(x^*)] / t = v^T \nabla f(x^*) \leq 0,$$

即对任意的  $v$  有  $v^T \nabla f(x^*) = 0$ , 由  $v$  的任意性知  $\nabla f(x^*) = 0$ .





现在能否判断 $x^*$ 是否是函数 $f$ 的一个局部极小解?

## ➤ (二阶最优性条件)

**必要条件:** 若 $x^*$ 是 $f$ 的一个局部极小点, 则  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succeq 0$ .

**充分条件:** 若  $\nabla f(x^*) = 0$ ,  $\nabla^2 f(x^*) \succ 0$ , 则 $x^*$ 是 $f$ 的一个局部极小点.

$$\frac{f(x^* + d) - f(x^*)}{\|d\|^2} = \frac{1}{2} \frac{d^T}{\|d\|} \nabla^2 f(x^*) \frac{d}{\|d\|} + o(1)$$

**必要性:** (反证法) 若  $\nabla^2 f(x^*)$ 有负的特征值 $\lambda_- < 0$ , 设  $\nabla^2 f(x^*)d = \lambda_- d$ .

$$\text{上式} = 1/2\lambda_- + o(1)$$

**充分性:** 上式  $\geq 1/2\lambda_{\min} + o(1)$



## ➤ 线性最小二乘

$$(VI) \min_{\theta} \|X\theta - y\|^2$$

## ➤ 非线性最小二乘

$$\min_{\theta} f(\theta) = \sum_{i=1}^N r_i^2(\theta), r_i(\theta) = (a_i^T \theta)^2 - b_i^2$$

## ➤ 神经网络模型

$$\min_{w_1, w_2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ell \left( \sigma_2 \left( w_2^T \sigma_1 \left( w_2^T x_i \right) \right), y_i \right)$$





# 最优性理论



- `import numpy as np`
- `import gurobipy as gp`
- `from gurobipy import GRB`
  
- `m = gp.Model("my_model")`
- `x = m.addVars(range(3), vtype=GRB.CONTINUOUS, name="x")`
- `m.setObjective(x[2] ** 2 + x[1] ** 2 - x[1] * x[2] - x[2], GRB.MINIMIZE)`
- `m.addGenConstrSin(x[0], x[2])`
- `m.Params.NonConvex=2`
- `m.optimize()`
- `for i in x.keys():`
  - `print('x[%d] = %f' % (i,x[i].x))`
  
- `def Gradientob(x):`
  - `return np.array([2*np.sin(x[0])*np.cos(x[0])-x[1]*np.cos(x[0])-np.cos(x[0]),2*x[1]-np.sin(x[0])])`
- `def Hessianob(x):`
  - `return np.array([[2*np.cos(2*x[0])+x[1]*np.sin(x[0])+np.sin(x[0]),-np.cos(x[0])],[-np.cos(x[0]),2]])`
- `print(Gradientob([x[0].x,x[1].x]))`
- `A = Hessianob([x[0].x,x[1].x])`
- `eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(A)`
- `print("特征值: ", eigenvalues)`

```
Optimal solution found (tolerance 1.00e-04)
Best objective -3.333333333333e-01, best bound -3.333333333333e-01, gap 0.0000%
x[0] = 101.260693
x[1] = 0.333333
x[2] = 0.666667
[ 1.31684663e-11 -8.83371154e-12]
特征值: [0.68775004 2.42336108]
```



$$\min_x f(x)$$

## ➤ 情形二：函数 $f$ 是不可微的

如何判断  $x^*$  是否是函数  $f$  的一个局部极小解或者全局极小解？

□ (一阶充要条件) 假设  $f$  是适当且凸的函数.. 如果  $x^*$  是一个全局极小点, 当且仅当  $0 \in \partial f(x^*)$ .

Proof.  $f(y) \geq f(x^*) + \theta^T (y - x^*)$ ,  $\forall y$ .

□ 假设  $f$  是可微的,  $h$  是凸函数(可能非光滑). 如果  $x^*$  是  $f + h$  的一个局部极小点, 当且仅当  $-\nabla f(x^*) \in \partial h(x^*)$ .

1. 写出Lasso问题和神经网络模型的一阶充要条件？ 2. 对于非凸优化，其最优性理论如何？





南昌大学  
NANCHANG UNIVERSITY

课件资源: <https://zhenhuapeng.github.io/coursematerials/>

# 感谢观看



## 大数据优化：理论、算法及其应用

——来源于《最优化计算方法》（高教社）

★★★ 主讲人：彭振华 ★★★

联系方式: [zhenhuapeng@ncu.edu.cn](mailto:zhenhuapeng@ncu.edu.cn)  
[zhenhuapeng@whu.edu.cn](mailto:zhenhuapeng@whu.edu.cn)  
15870605317 (微信同号)

研究兴趣: 1. 非凸非光滑优化算法与理论  
2. 智能决策  
3. 智能计算与机器学习

数学与计算机学院