



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/>

大数据优化与机器学习 彭振华 zhenhuapeng@whu.edu.cn



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



基础知识

第二部分

范数与导数

凸规划: 凸集与凸函数

共轭函数

次梯度



➤ 思考: 数之间可以比较大小, 那向量和矩阵咋比较呢?

➤ 受距离定义启发, 给出范数的定义如下:

范数: 称一个从向量空间 R^n 到实数域 R 的非负函数 $|| \cdot ||$ 为范数, 如果

I. 正定性: 对于所有的 $v \in R^n$, 有 $||v|| \geq 0$, 且 $||v|| = 0$ 当且仅当 $v = 0$;

II. 齐次性: 对于所有的 $v \in R^n$ 和 $\alpha \in R$, 有 $||\alpha v|| = |\alpha| ||v||$;

III. 三角不等式: 对于所有的 $v, w \in R^n$, 有 $||v + w|| \leq ||v|| + ||w||$.

你能联想到实数和复数中哪些相关概念?



范数与导数



常用的向量范数

I. $\|v\|_0$: 向量 v 中非0元素的个数

II. $\|v\|_p = (|v_1|^p + \dots + |v_n|^p)^{1/p} \ (p \geq 1)$

III. $\|v\|_\infty = \max_i |v_i|$

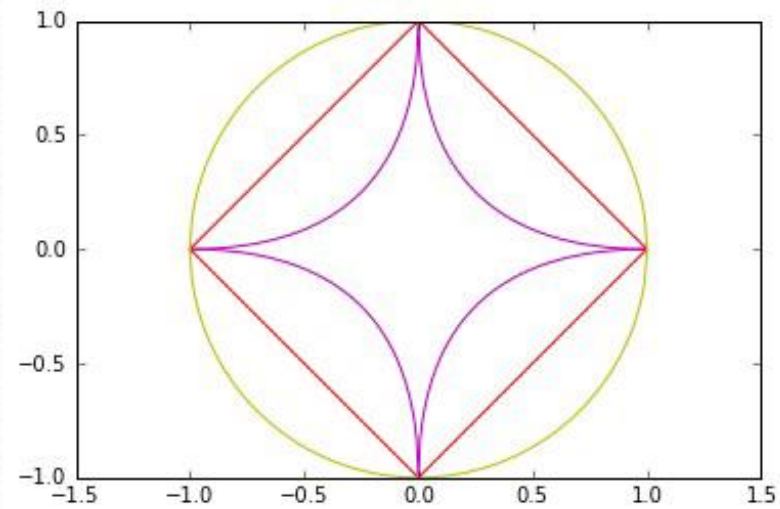
IV. 由正定矩阵 A 诱导的范数 $\|v\|_A = \sqrt{v^T A v}$

□ $\|v\|_1 = |v_1| + \dots + |v_n|$

□ $\|v\|_2 = (|v_1|^2 + \dots + |v_n|^2)^{1/2}$

□ 柯西 (Cauchy) 不等式: $|a^T b| \leq \|a\|_2 \|b\|_2$

□ 练习: 求向量 $v = (0, 0, 1, 1, 2, 0, 0, 1, 1)^T$ 的各个范数



练习: $\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq n^{1/2} \|x\|_2 \leq n \|x\|_\infty$

*课程思政: 范数也是稀疏优化和机器学习领域中常用的正则项, 用来防止过拟合, 已被成功应用于金融、医疗和生物科学和图像识别和处理等领域中. 引导学生关注范数在实际应用中的运用和立志投身相关研究中, 为祖国发展贡献力量.



➤ 矩阵范数

I. $\|A\|_1 = \sum \sum |a_{ij}|$ (一般指最大列绝对值和)

II. $\|A\|_2 = \lambda_{\max}(A)$

III. $\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr}(AA^T)} = \sqrt{\sum \sum (a_{ij})^2}$

IV. 核范数: $\|A\|_* = \sum \delta_i$ (非0奇异值求和)

□ 矩阵F范数具有正交不变性: 对任意的正交矩阵 U, V , 有

$$(\|UAV\|_F)^2 = \text{Tr}(UAVV^TA^TU^T) = \text{Tr}(UAA^TU^T) = \text{Tr}(AA^TU^TU) = \text{Tr}(AA^T) = (\|A\|_F)^2$$

□ 矩阵范数的相容性: $\|Ax\|_2 \leq \|A\|_2 \|x\|_2$

□ 矩阵范数的柯西不等式: $|\langle A, B \rangle| (= |\text{Tr}(AB^T)| = |\sum \sum a_{ij}b_{ij}|) \leq \|A\|_F \|B\|_F$

练习: (1) $\|A\|_2 \leq \|A\|_F$

(2) 计算如下矩阵的各种范数 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$



➤ 导入模块库

```
import numpy as np
```

```
import cvxpy as cp
```

➤ 计算向量范数

```
x = np.array([0, 0, 1, 1, 2, 0, 0, 1, 1])
```

```
print(np.linalg.norm(x, ord = 1))
```

```
print(np.linalg.norm(x, ord = 2))
```

```
print(np.linalg.norm(x,ord = np.inf))
```

```
print(cp.norm(x,1).value)
```

```
print(cp.norm(x,2).value)
```

```
print(cp.norm(x,"inf").value)
```

➤ 计算矩阵范数

```
A = np.array([[0,1],[1,1]])
```

```
print(np.linalg.norm(A, ord = 1))
```

```
print(np.linalg.norm(A, ord = 2))
```

```
print(np.linalg.norm(A, ord = np.inf))
```

```
print(np.linalg.norm(A, 'fro'))
```

```
print(cp.norm(A,1).value)
```

```
print(cp.norm(A,2).value)
```

```
print(cp.norm(A,"inf").value)
```

```
print(cp.norm(A,"fro").value)
```



➤ 导数定义

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

➤ 例题：求如下函数的导数 $f(x) = x^2 + x/2 + x \sin x - \sin x/x$

$$f'(x) = 2x + \frac{1}{2} + x \cos x + \sin x + \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

思考：如何推广至多元函数呢？

➤ 一阶泰勒展开式

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x) \Delta x + o(\Delta x)$$



➤ 设 $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 梯度的计算 $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T$

➤ 梯度的定义

$$\lim_{p \rightarrow 0} \frac{f(x+p) - f(x) - g^T p}{\|p\|} = 0$$

➤ 取 $p = \varepsilon e_i$ 有

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + \varepsilon, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) - g_i \varepsilon}{\varepsilon} = 0$$



$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + \varepsilon, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\varepsilon} = g_i$$



➤ 海瑟Hessian矩阵:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

对称矩阵

➤ 雅可比Jacobi矩阵:

$$f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_l(x))$$

$$J(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_l(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_l(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_l(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$



➤ **例题：对实对称矩阵 A ，求函数 $f_1(x) = d^T x$ 和 $f_2(x) = 1/2x^T Ax + b^T x + c$ 的梯度和Hessian矩阵？**

➤ $\nabla f_1(x) = d$ $\nabla^2 f_1(x) = 0$

➤ $\nabla f_2(x) = Ax + b$ $\nabla^2 f_2(x) = A$

➤ **练习：求解函数 $f_3(x) = \|x\|^2$ 和 $f_4(x) = 1/2\|Cx - d\|^2$ 的梯度和Hessian矩阵？**

➤ $\nabla f_3(x) = 2x$ $\nabla^2 f_3(x) = 2I$

➤ $\nabla f_4(x) = C^T(Cx - d)$ $\nabla^2 f_4(x) = C^T C$



➤ 拉格朗日中值定理

- 如果函数 $f(x)$ 满足在闭区间 $[a,b]$ 上连续, 在开区间 (a,b) 内可导, 那么在 (a,b) 内至少有一点 z , 使等式 $f(b) - f(a) = f'(z)(b-a)$ 成立。

➤ 积分中值定理

- 如果函数 $f(x)$ 满足在闭区间 $[a,b]$ 上连续, 那么在 (a,b) 内至少有一点 z , 使得

$$\int_a^b f(x)dx = f(z)(b-a)$$



➤ 一阶泰勒展开式

$$\begin{aligned} f(x+p) &= f(x) + \nabla f(x)^T p + o(\|p\|) \\ &= f(x) + \int_0^1 \nabla f(x+tp)^T p dt \end{aligned}$$

➤ 二阶泰勒展开式

$$\nabla f(x+tp) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp) p dt$$

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p$$

其中 $t \in (0,1)$



➤ **梯度 L -利普希茨连续(L -光滑):**

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\|, \forall x, y \in \text{dom } f.$$

➤ **二次上界:** $f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{L}{2}\|y - x\|^2, \forall x, y \in \text{dom } f.$

$$\begin{aligned} f(y) - f(x) - \nabla f(x)^T (y - x) &= \int_0^1 \nabla f(x + t(y - x))^T (y - x) dt - \nabla f(x)^T (y - x) \\ &= \int_0^1 (\nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x))^T (y - x) dt \\ &\leq \int_0^1 \|\nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x)\| \|y - x\| dt \\ &\leq \int_0^1 Lt \|y - x\|^2 dt = \frac{L}{2} \|y - x\|^2 \end{aligned}$$



- 设可微函数 $f(x)$ 的定义域为 R^n 且存在一个全局极小点 x^* , 若 $f(x)$ 为梯度 L -利普希茨连续的, 则对任意的 x 有

$$\frac{1}{2L} \|\nabla f(x)\|^2 \leq f(x) - f(x^*)$$

$$f(x^*) \leq f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{L}{2} \|y - x\|^2$$

$$\inf_y f(x^*) \leq \inf_y f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + \frac{L}{2} \|y - x\|^2$$

$$y = x - \frac{\nabla f(x)}{L}$$

$$\longrightarrow f(x^*) \leq f(x) - \frac{1}{2L} \|\nabla f(x)\|^2$$



➤ 对于以 $m \times n$ 矩阵 X 为自变量的函数 $f(X)$ ，若存在矩阵 $G \in R^{m \times n}$ 满足

$$\lim_{\|V\| \rightarrow 0} \frac{f(X+V) - f(X) - \langle G, V \rangle}{\|V\|} = 0$$

称 G 为 f 在 Fréchet 可微意义下的梯度。类似于向量情形，矩阵变量函数 $f(X)$

的梯度为

$$\nabla f(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix}$$

**在实际应用中，
矩阵Fréchet 可
微的定义和使用
往往比较繁琐**



➤ **Gâteaux 可微**: 设 $f(X)$ 为矩阵变量函数, 如果对任意方向 $V \in R^{m \times n}$, 存在矩阵 $G \in R^{m \times n}$ 满足

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(X + tV) - f(X) - t \langle G, V \rangle}{t} = 0$$

称 G 为 f 在 X 处在Gâteaux可微意义下的梯度.

当 f 是Fréchet 可微函数时, f 也是Gâteaux可微的, 且这两种意义下的梯度相等.

$$\square \nabla_X(\text{Tr}(AX^TB)) = BA \quad \nabla_X(\text{Tr}(X^TAX)) = (A+A^T)X \quad \nabla_X(\text{Tr}(XAX^T)) = X(A+A^T)$$

$$\square \nabla_X(\text{Tr}(XAX^TB)) = BXA + B^TXA^T \quad \nabla_X(\det(X)) = \det(X)(X^{-1})^T$$

$$\square \nabla_X(1/2\|XY - A\|^2) = (XY - A)Y^T \quad \nabla_Y(1/2\|XY - A\|^2) = X^T(XY - A)$$



凸规划: 凸集与凸函数



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

➤ 凸与非凸优化

- I. 凸优化: 目标函数是凸函数+可行域为凸集
- II. 非凸优化: 目标函数不是凸函数或可行域不为凸集

怎样判断凸集和凸函数?

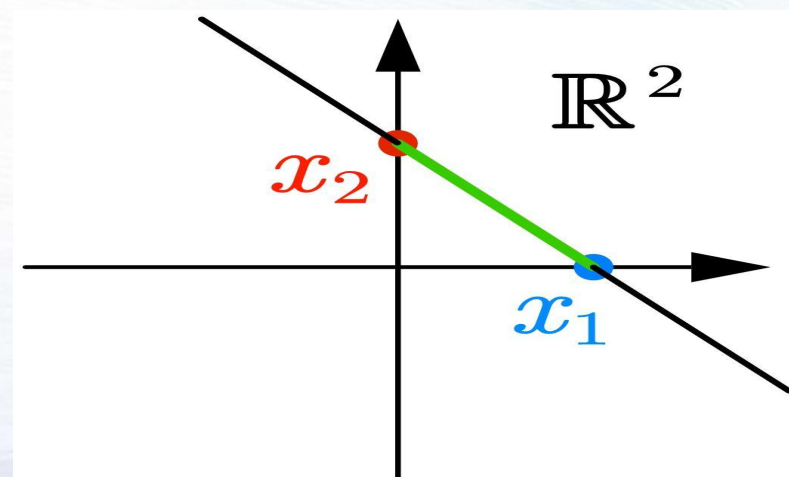
➤ $x_2 + \theta(x_1 - x_2) = \theta x_1 + (1 - \theta)x_2$

➤ 直线: $\theta \in \mathbb{R}$

➤ 线段: $\theta \in [0, 1]$

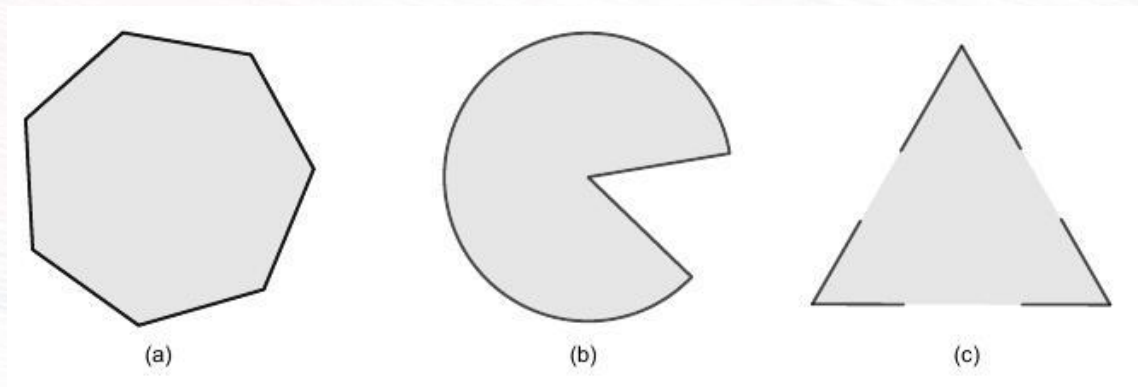
➤ 凸集: 如果连接集合 C 中的任意两点的线段都在 C 内, 则称 C 为凸集, 即

$$x_1, x_2 \in C \Rightarrow \theta x_1 + (1 - \theta)x_2 \in C, \quad \forall \theta \in [0, 1].$$





- 列出了一些凸集、非凸集的例子. 其中(a) 为凸集, (b) 和(c)均为非凸集.



- 从凸集中可以引出凸组合和凸包的概念.

➤ x_1, \dots, x_k 的凸组合: $x = \theta_1 x_1 + \dots + \theta_k x_k, \theta_1 + \dots + \theta_k = 1, \theta_i \geq 0, i=1, \dots, k$

➤ 凸包: 集合 S 的所有点的凸组合构成的点集为 S 的凸包, 记为 $\text{conv } S$.

若 $\text{conv } S \subseteq S$, 则 S 是凸集; 反之亦然.



凸规划: 凸集与凸函数



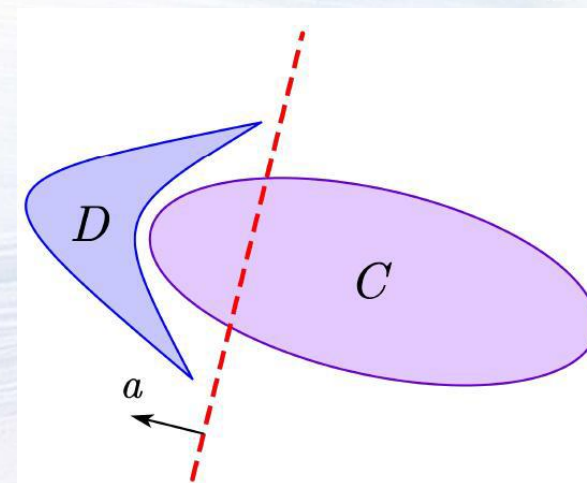
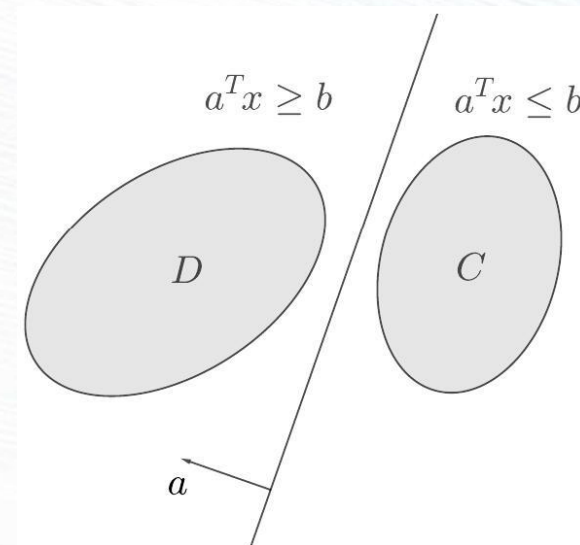
➤ 重要凸集例子

- 超平面: $\{x: a^T x = b\}$
- 半空间: $\{x: a^T x \leq b\}$
- 多面体: $\{x: Ax \leq b, Cx = d\}$
- 范数球: $\{x: \|x - x_0\| \leq r\}$
- 范数锥: $\{(x, t): \|x\| \leq t\}$

➤ 保凸运算

- 任意多个凸集的交为凸集
- S 是凸集, 则 $\{Ax + b: x \in S\}$ 为凸集

凸集有什么好处?

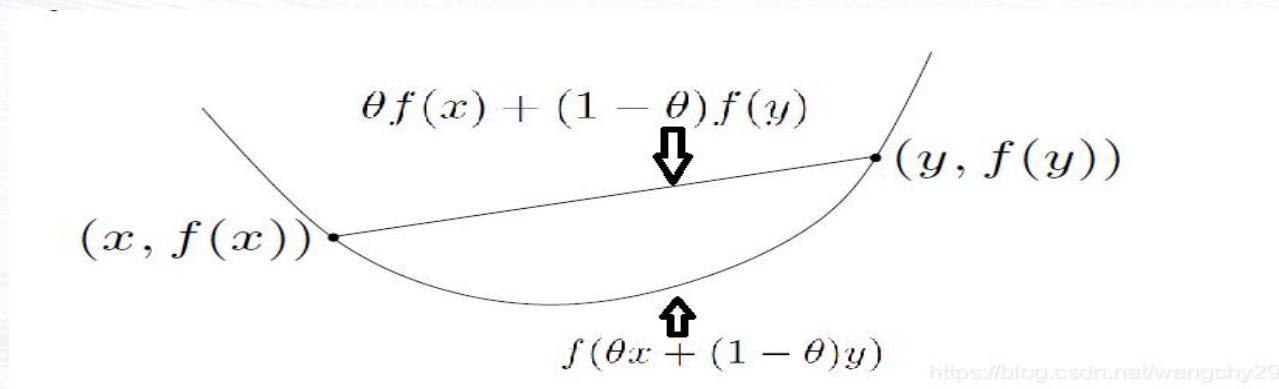




➤ **凸函数**: $f: R^n \rightarrow R$ 为适当函数, 如果 $D \subset \text{dom } f$ 是凸集, 且

$$f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$$

对所有 $x, y \in D$, $0 \leq \theta \leq 1$ 都成立, 则称函数 f 在集合 D 上是凸函数。



□ 若 f 是凸函数, 则 $-f$ 是**凹函数**

□ 若对所有 $x, y \in D$, $x \neq y$, $0 < \theta < 1$, 有 $f(\theta x + (1 - \theta)y) < \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$

则称 f 在集合 D 上是**严格凸函数**



➤ 一元凸函数的例子

- 仿射函数: 对任意 $a \in R^n, b \in R$, $f(x) = a^T x + b$ 是 R 上的凸函数(凹函数)
- 指数函数: 对任意 $a \in R$, e^{ax} 是 R 上的凸函数
- 幂函数: 对 $\alpha \geq 1$ 或 $\alpha \leq 0$, x^α 是 R_{++} 上的凸函数
- 绝对值的幂: 对 $p \geq 1$, $|x|^p$ 是 R 上的凸函数
- 负熵: $x \log x$ 是 R_{++} 上的凸函数
- 幂函数: 对 $0 \leq \alpha \leq 1$, x^α 是 R_{++} 上的凹函数
- 对数函数: $\log x$ 是 R_{++} 上的凹函数



➤ 练习: $\ell^{-1/2}$, ℓ^{-1} , ℓ^{-2} , $\ell^{-\infty}$ 范数哪些是凸 (凹) 函数?

凸优化: 目标函数是凸函数 + 可行域为凸集

➤ 练习: 你能判断如下优化问题哪些是凸优化?

$$(I) \min_x \sqrt{(x - x_0)^2 + (ax + b - y_0)^2}$$

$$(II) \min_{\ell, d} \ell \times d \quad s.t. \quad 2(\ell + d) = 22.$$

(III) 线性规划、二次规划、约束优化

$$(IV) \min_{a, b} \sum_i (a^T x^i + b - y^i)^2$$

$$(V) \min_a \sum_i \left(a_0 + a_1 x^i + a_2 (x^i)^2 \cdots - y^i \right)^2$$

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

(VII) 硬 (软) 间隔 SVM、SVR

(VIII) 均值方差模型

(IX) 交通网络模型

(X) 深度神经网络模型



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

➤ **凸规划的局部最优解均是全局最优解**

□ 设 x^* 是凸规划的局部最优解, 但不是其全局最优解, 则必存在可行解 x' , 使得 $f(x') < f(x^*)$. 对充分小的正数 θ , 有

$$f\left(x^* + \theta(x' - x^*)\right) = f\left(\theta x' + (1 - \theta)x^*\right)$$

由可行域为凸集得
 $x^* + \theta(x' - x^*)$
是凸规划的可行解

$$\leq \theta f(x') + (1 - \theta)f(x^*)$$

$$< f(x^*)$$

□ 这与 x^* 是凸规划的局部最优解矛盾。



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

➤ 若凸规划解存在，且其目标函数是严格凸的，则其最优解唯一

□ 设 x^* 和 x' 是凸规划的最优解，但不相等。不难发现 $f(x') = f(x^*)$ 。对

$\theta \in (0, 1)$ ，有

$$\begin{aligned} f(\theta x' + (1 - \theta)x^*) &< \theta f(x') + (1 - \theta)f(x^*) \\ &= f(x^*) \end{aligned}$$

由可行域为凸集得
 $\theta x' + (1 - \theta)x^*$ ($\neq x^*$)
是凸规划的可行解

□ 这与 x^* 是凸规划的最优解矛盾。



➤ **强凸函数**: $f: R^n \rightarrow R$ 为适当函数, 若存在常数 $m > 0$, 使得

$$g(x) = f(x) - m/2 \|x\|^2$$

为凸函数, 则称 $f(x)$ 为强凸函数, 其中 m 为强凸参数. 为了方便我们也称 $f(x)$ 为 m -强凸函数

➤ **等价定义**: 若存在常数 $m > 0$, 使得对所有 $x, y \in \text{dom } f$, $0 < \theta < 1$ 都有

$$f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y) - m/2 \theta(1 - \theta) \|x - y\|^2$$

则称 $f(x)$ 为强凸函数, 其中 m 为强凸参数.



- 练习: $\ell^{-1/2}$ 、 ℓ^{-1} , ℓ^{-2} , $\ell^{-\infty}$ 范数哪些是强 (严格) 凸函数?
- 练习: 二次函数是否为强 (严格) 凸函数?



➤ 由凸函数诱导出的重要的不等式

□ 基础Jensen 不等式: 设函数 f 是凸函数, 则对 $0 \leq \theta \leq 1$, 有

$$f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y)$$

□ Jensen 不等式: 设函数 f 是凸函数, 则对 $\theta_1 + \dots + \theta_k = 1$, $\theta_i \geq 0$, $i=1, \dots, k$, 有

$$f(\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_k x_k) \leq \sum \theta_i f(x_k)$$

□ 概率Jensen 不等式: 设 f 是凸函数, 则对任意随机变量 z , 有

$$f(Ez) \leq Ef(z)$$



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
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