



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/





- 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)

- 模型与基本概念 III. 应用实例
- IV. 求解器与大模型 II. 优化建模技术
- 范数与导数 III. 共轭函数与次梯度
- II. 凸集与凸函数
- 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
- IV. (拟)牛顿类算法 线搜索方法
- 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
- 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
- 罚函数法
- II. 增广拉格朗日函数法
- I. PPA II. BCD III. PGD IV. SGD V. SDP





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

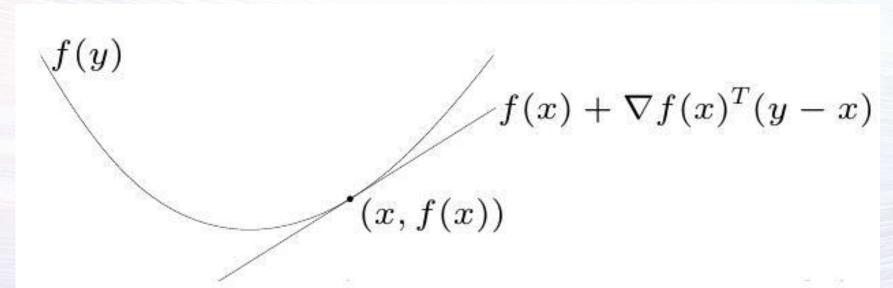
次梯度





> 一阶判别法1: 对于定义在凸集上的可微函数f, f是凸函数当且仅当

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T (y - x), \ \forall x, y \in dom f$$



几何直观: f的一阶逼近始终在f的图像下方





》必要性: 设f是凸函数,则对于任意的 $x,y \in dom f$ 以及 $t \in (0,1)$,有

$$tf(y) + (1-t)f(x) \ge f(x+t(y-x)).$$

> 将上式移项,两边同时除以t, 注意t > 0, 则

$$f(y)-f(x) \ge \frac{f(x+t(y-x))-f(x)}{t}$$

 $> \diamondsuit t \rightarrow 0$, 由极限保号性可得

$$f(y)-f(x) \ge \lim_{t\to 0} \frac{f(x+t(y-x))-f(x)}{t} = \nabla f(x)^{T} (y-x)$$



▶ 充分性: 对任意 $x, y \in dom f$ 以及任意 $t \in (0, 1)$, 定义z = tx + (1 - t)y, 应用两次一阶条件,有

$$f(x) \ge f(z) + \nabla f(z)^T (x-z)$$

$$f(y) \ge f(z) + \nabla f(z)^T (y-z)$$

》将上述第一个不等式两边同时乘t,第二个不等式两边同时乘1-t,相加得

$$tf(x) + (1-t)f(y) \ge f(z)$$



ho 一<mark>阶判别法2:</mark> 设f 为可微函数,则f 为凸函数当且仅当 $dom\ f$ 为凸集且 ∇f 为单调映射.

$$(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T(x - y) \ge 0, \ \forall x,y \in dom f$$

 $> f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T(y-x), \ f(x) \ge f(y) + \nabla f(y)^T(x-y)$

将两式不等号左右两边相加即可得到结论. 反过来,

$$f(y) - f(x) - \nabla f(x)^{T} (y - x) = \int_{0}^{1} \nabla f(x + t(y - x))^{T} (y - x) dt - \nabla f(x)^{T} (y - x)$$

$$= \int_{0}^{1} (\nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x))^{T} (y - x) dt$$

$$= \frac{1}{t} \int_{0}^{1} (\nabla f(x + t(y - x)) - \nabla f(x))^{T} t(y - x) dt \ge 0$$

凸集与凸函数



▶ 例题: 利用一阶方法验证f(x)为凸函数

$$f(x) = \begin{cases} x^2, & x > 0 \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

>一阶导数

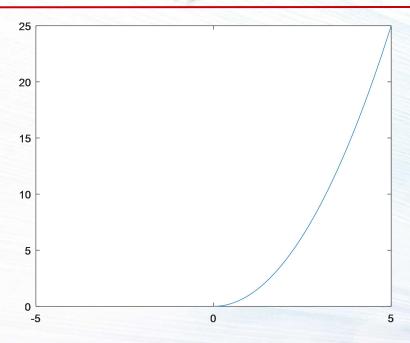
$$f'(x) = \begin{cases} 2x, & x > 0 \\ 0, & otherwise \end{cases}$$

I.
$$(2x - 2y)(x - y), x > 0, y > 0$$

II.
$$(0-0)(x-y), x \le 0, y \le 0$$

III.
$$(2x - 0)(x - y), x > 0, y \le 0$$

IV.
$$(0 - 2y)(x - y), x \le 0, y > 0$$







- ▶二阶判别法: 设f为定义在凸集上的二阶连续可微函数, f是凸函数 当且仅当 $\nabla^2 f(x)$ 半正定。如果 $\nabla^2 f(x)$ 正定, 则f是严格凸函数。
- \triangleright 证明: (必要性) 反设f(x)在点x处的海瑟矩阵不是半正定的,即存在非零向量 $v \in R^n$ 使得 $v^T \nabla^2 f(x) v < 0$.
- ▶根据佩亚诺 (Peano) 余项的泰勒展开

$$f(x+tv) = f(x) + t\nabla f(x)^{T} v + \frac{1}{2}t^{2}v^{T}\nabla^{2} f(x)^{T} v + o(t^{2})$$

$$0 > \frac{1}{2} v^{T} \nabla^{2} f(x)^{T} v + o(1) = \frac{f(x+tv) - f(x) - t \nabla f(x)^{T} v}{t^{2}}$$

> 这显然和一阶条件矛盾





> (充分性) 对任意 $x, y \in dom f$, 根据泰勒展开

$$f(y) = f(x) + \nabla f(x)^{T} (y - x) + \frac{1}{2} (y - x)^{T} \nabla^{2} f(x + t(y - x))^{T} (y - x)$$

>由海瑟矩阵的半正定性可知对任意x, y ∈ dom f, 有

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

- >由凸函数判定的一阶判别法知 / 为凸函数
- →同理可证:如果 $\nabla^2 f(x)$ 正定,则f 是严格凸函数。

练习: 利用二阶判别法说明 $f(x) = 1/2x^TAx + b^Tx$ 和 $g(\theta) = ||X\theta - y||^2$ 的凸性

*课程思政:关注数据科学的关键方法,让学生了解数据科学中最优化的作用,增强他们学习兴趣。





- m.setObjective(x[2] ** 2 + x[1] ** 2 x[1] * x[2] x[2], GRB.MINIMIZE)
- m.addGenConstrSin(x[0], x[2])
- > import numpy as np
- > 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]])
- > x = [np.pi/4, 0.333]
- > A = Hessianob(x)
- > eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(A)
- > print("特征值: ", eigenvalues)

In [2]: runfile('C:/Users/zhenh/untitled13.py', wdir='C:/Users/zhenh')
特征值: [0.5883723 2.35420104]



> 练习: 你能判断如下优化问题哪些是凸优化?

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

(VIII)均值方差模型

(X)深度神经网络模型

$$(XI)\min_{x} \sum_{i=1}^{n} x_{i} \ln x_{i} \quad s.t. \quad Ax = b.$$



- \rightarrow 非负数乘: 若f是凸函数,则 αf 是凸函数,其中 $\alpha \geq 0$.
- \rightarrow 求和: 若 f_1 , f_2 是凸函数,则 f_1+f_2 是凸函数.
- ▶与仿射函数的复合: 若f是凸函数,则f(Ax+b)是凸函数.
- □ 例题: 试说明如下函数的凸性?

$$f(x) = \sum_{i=1}^{p} \left(a_i^T x - b_i\right)^2$$

$$g(x) = -\sum_{i=1}^{p} \log(b_i - a_i^T x)$$



> 复合函数: 给定函数 $g: R^n \to R$ 和 $h: R \to R$, 对f(x) = h(g(x))

若 g是凸函数, h是凸函数, h单调不减 或

g是凹函数, h是凸函数, h单调不增

那么f是凸函数

口 例题: 试说明如下函数的凸性?

$$f(x) = \exp(g(x)), g$$
是凸函数

$$\phi(x) = -\sum_{i=1}^{p} \log g_i(x), g_i$$
是凹函数

$$\varphi(x) = \frac{1}{g(x)}, g$$
是凹函数, $g(x) > 0$



- > 例题: 分段线性函数: $f(x) = max_{i=1,...,m}(a_i^T x + b_i)$ 是凸函数
- ightharpoonup 若对每个 $y \in A$, f(x, y) 是关于x的凸函数,则函数 $g(x) = \sup_{y \in A} f(x, y)$ 是凸函数
- \triangleright 例题: 集合C的支撑函数: $S_C(x) = \sup_{y \in C} y^T x$ 是凸函数
- > 若f(x, y)关于(x, y)是凸函数,C是凸集,则 $g(x) = inf_{y \in C}f(x, y)$ 是凸函数.



> 强凸函数: $f: R^n \to R$ 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

m-强凸函数有没有一阶、二阶判别法? 如果有,是什么?





> 函数f的共轭函数定义为

$$f^*(y) = \sup_{x \in dom \ f} \{y^T x - f(x)\}.$$

□ Fenchel 不等式: $f(x) + f^*(y) \ge y^T x$.

$$f^*(y) = \sup_{x \in dom f} \{y^T x - f(x)\} \ge y^T x - f(x)$$

口 例题: 试给出凸函数 $f(x) = 1/2x^TAx + b^Tx$, g(x) = ||x||, h(x) = -log x 和

指示函数的共轭函数.

*课程思政:可用于后续解释对偶理论,简化问题的求解过程并提高求解效率;还可以用于构建模型的损失函数和正则化项,引导学生思考模型构建中的"平衡"思想。





> 二次共轭函数: 函数f的二次共轭函数定义为

$$f^{**}(x) = \sup_{y \in dom f^{*}} \{x^{T}y - f^{*}(y)\}.$$

- 口 f**恒为闭凸函数;
- 口 若f为闭凸函数,则 $f^* * (x) = f(x)$.

Proof. 由Fenchel 不等式得 $f^* * (x) \leq f(x)$. 反过来,

用反证法,假设 $(x, f^{**}(x))$ 不属于 epif,由凸集分离定理得存在(a, b) 使得

$$a^{T}x + b^{T}f^{**}(x) > a^{T}z + b^{T}f(z), \ \forall (z, f(z)) \in epi f. \ (b < 0)$$

两边除以-b,对z取上确界有

$$-a/b x - f^* * (x) > f^* (-a/b)$$





▶ 可微凸函数f的一阶条件:

$$f(y) \ge f(x) + \nabla f(x)^T (y - x)$$

若f不可微,可否类似地定义一种梯度,使之具有梯度的一些性质?

 \triangleright 设f 为适当凸函数, x为定义域dom f 中的一点. 若向量 $g \in R^n$ 满足

$$f(y) \ge f(x) + g^T(y - x), \ \forall y \in dom f,$$

- > 则称g为函数f在点x处的一个次梯度.
- > 进一步地, 称集合

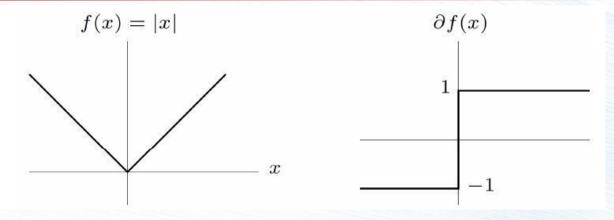
$$\partial f(x) = \{g \mid g \in \mathbb{R}^n, f(y) \ge f(x) + g^T(y - x), \ \forall y \in dom \ f\}$$

> 为f在点x处的次微分.

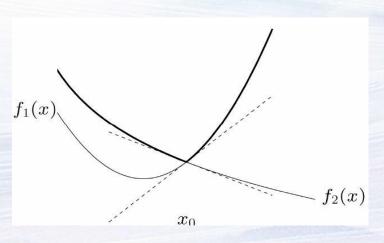




- > 绝对值函数 f(x) = |x|
- ▶ 问: ||x||₁ 的次微分是?



- > 欧几里得范数 $f(x) = ||x||_2$
- **□** 如果 $x \neq 0$, $\partial f(x) = 1/||x||_2 x$, 如果x = 0, $\partial f(x) = \{g: ||g||_2 \leq 1\}$
- $> f(x) = max\{f_1(x), f_2(x)\}, f_1, f_2$ 是凸函数
- I. 点 x_0 处的次梯度可取范围 $conv U_i \partial f_i(x_0)$
- II. 如果 $f_1(x') > f_2(x')$,f 在点x'处的次梯度等于 $\partial f_1(x')$
- III. 如果 $f_1(x') < f_2(x')$,f 在点x'处的次梯度等于 $\partial f_2(x')$







ightharpoonup 存在性: ∂f 为凸函数, $\operatorname{dom} f$ 为其定义域. 如果 $x \in \operatorname{int} \operatorname{dom} f$, 则 $\partial f(x)$

是非空的, 其中int dom f的含义是集合dom f的所有内点.

proof. (x, f(x)) 是epif 边界上的点,

由凸集分离定理得存在(a, b) 使得

$$a^Tx + b^Tf(x) \ge a^Ty + b^Tt$$
, $\forall (y, t) \in epi f. (b < 0)$

取 $t\to\infty$ 可知 $b\leq 0$.

 $\mathbf{Q}y = x + \epsilon a \in dom f, \epsilon > 0, \, 可知b \neq 0$

因此 $b < \theta$ 并且g = a/|b| 是f 在点x处的次梯度





▶ 设凸函数f(x)在 $x_0 \in int dom f$ 处可微,则 $\partial f(x_0) = \{ \nabla f(x_0) \}$.

proof. 根据可微凸函数的一阶条件可知梯度 $\nabla f(x_0)$ 为次梯度

下证f(x) 在点 x_0 处不可能有其他次梯度. 设 $g \in \partial f(x_0)$, 根据次梯度的定义,

对任意的非零 $v \in R^n$ 且 $x\theta + tv \in dom f, t > 0$ 有

$$f(x_0 + tv) \ge f(x_0) + tg^T v.$$

若 $g \neq \nabla f(x_0)$, 取 $v = g - \nabla f(x_0) \neq 0$, 上式变形为

$$\frac{f(x_0 + tv) - f(x_0) - t\nabla f(x_0)^T v}{t \|v\|} \ge \frac{(g - \nabla f(x_0))^T v}{\|v\|} = \|v\|$$





> 闭凸性: 对任何 $x \in dom f$, $\partial f(x)$ 是一个闭凸集 (可能为空集).

在上述不等式中取极限,并注意到极限的保号性,最终我们有

$$f(y) \ge f(x) + g^T(y - x), \ \forall y \in domf.$$

设 $g_1, g_2 \in \partial f(x)$, 并设 $\lambda \in (0, 1)$, 由次梯度定义得

$$f(y) \ge f(x) + g_1^T(y - x), \ \forall y \in domf,$$

$$f(y) \ge f(x) + g_2^T(y - x), \ \forall y \in domf.$$

由上面第一式的λ倍加上第二式的(1-λ)倍,可得

$$\lambda g_1 + (1 - \lambda)g_2 \in \partial f(x)$$





> 有界性: 如果x ∈ int dom f, 则 $\partial f(x)$ 非空有界集.

proof. 非空可由次梯度存在性直接得出

取充分小的r > 0, 使得

$$B = \{x \pm re_i | i = 1, \dots, n\} \subset dom f$$

对任意非零的 $g \in \partial f(x)$, 存在 $y \in B$ 满足

$$f(y) \ge f(x) + g^{T}(y - x) = f(x) + r||g||_{\infty}$$

由此得到∂f(x) 有界:

$$||g||_{\infty} \leq (max_{y \in B} f(y) - f(x))/r < +\infty$$





- ightharpoonup 单调性: $\partial f: R^n \to R$ 为凸函数, $x, y \in dom f$, 则 $(u v)^T(x y) \ge 0$, 其中 $u \in \partial f(x)$, $v \in \partial f(y)$.
- ightharpoonup 连续性: 设f(x)是闭凸函数且 ∂f 在点x'附近存在且非空. 若序列 $x_k \to x'$, $g_k \in \partial f(x_k)$ 为f(x)在点 x_k 处的次梯度,且 $g_k \to g'$,则 $g' \in \partial f(x')$.
- ho 设函数f 是真的,且其定义域为凸集。若对定义域中的任意x , $\partial f(x)$ 非空,则函数f 是凸的。





ho 凸函数的非负线性组合: $\partial f_1, f_2: R^n \to (-\infty, +\infty]$ 是两个凸函数,则对任意的 $x \in R^n$,有

$$\partial f_1(x) + \partial f_2(x) \subseteq \partial (f_1 + f_2)(x).$$

进一步地,若 $int\ dom\ f_1\cap dom\ f_2\neq\emptyset$, $f(x)=\alpha_1f_1(x)+\alpha_2f_2(x)$, $\alpha_1,\alpha_2\geq0$,则f(x)的次微分为

$$\partial f(x) = \alpha_1 \partial f_1(x) + \alpha_2 \partial f_2(x).$$

> 线性变量替换: 设h为适当凸函数, f(x) = h(Ax + b). 若存在 $x^\# ∈ R^m$, 使 ${\partial_t Ax^\# + b} ∈ int dom h$, 则

 $\partial f(x) = A^T \partial h(Ax + b), \ \forall x \in int \ dom \ f.$





 \rightarrow 设 $f_1, f_2, \cdots, f_m: \mathbb{R}^n \rightarrow (-\infty, +\infty)$ 均为凸函数, 令

$$f(x) = \max\{f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x)\}, \ \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

对 $x_0 \in \cap int dom f_i$, 定义 $I(x_0) = \{i: f_i(x_0) = f(x_0)\}$, 则

$$\partial f(x_0) = conv (\bigcup_{i \in I(x_0)} \partial f_i(x_0)).$$

其中, $I(x_0)$ 表示点 x_0 处"有效"函数的指标

□ 如果 f_i 可微, $\partial f(x0) = conv\{\nabla f_i(x_0): i \in I(x_0)\}$

$$f(x) = max_{i=1,2,\dots,m} \{a_i^T x + b_i\}$$

$$\partial f(x) = conv\{a_i: i \in I(x)\}$$

其中 $I(x) = \{i: a_i^T x + b_i = f(x)\}$





 $> f(x) = inf_v h(x, y), h 关于(x, y)$ 联合凸,计算点x'处的一个次梯度:

设 $y' \in R^m$ 满足h(x', y') = f(x')

存在 $g \in R^n$ 使得 $(g, 0) \in \partial h(x', y')$, 则 $g \in \partial f(x')$

设C是Rn中一闭凸集,令

$$f(x) = \inf_{y \in C} ||x - y||^2$$

计算点x处的一个次梯度:

- 口 若f(x) = 0,则容易验证 $g = 0 \in \partial f(x)$;
- 口 若f(x) > 0, 取y为x在C上的投影, 即 $y = P_C(x)$, 计算

$$g = 1/||x - y||_2 (x - y) = 1/||x - P_C(x)||_2 (x - P_C(x))$$





 \triangleright 设 $f_1, f_2, \dots, f_m: \mathbb{R}^n \to (-\infty, +\infty]$ 为m个凸函数, $h: \mathbb{R}^m \to (-\infty, +\infty]$ 为关于

各分量单调递增的凸函数,令

$$f(x) = h(f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x)).$$

计算点x处的一个次梯度:

- $\square z = (z_1, z_2, \dots, z_m) \in \partial h(f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))$ 以及 $g_i \in \partial f_i(x)$
- $\square g := z_1g_1 + z_2g_2 + \cdots + z_mg_m \in \partial f(x)$





> 设函数 f_i 是凸函数,定义h(u,v) 为如下凸问题的最优值

$$\min_{x} f_{\theta}(x)$$
 s.t. $f_{i}(x) \leq u_{i}, i = 1,..., m, Ax = b + v.$

计算h(u, v) 的一个次梯度

$$\max \inf_{x} f_{\theta}(x) + \sum_{i} \lambda_{i} (f_{i}(x) - u_{i}) + w^{T} (Ax - b - v) \quad \text{s.t. } \lambda \geq 0$$

如果 λ , w是最优对偶变量,那么 $(-\lambda,-w) \in \partial h(u,v)$





> 设函数fi是凸函数, 定义h(u, v) 为如下凸问题的最优值

$$\min_{x} f_{\theta}(x)$$
 s.t. $f_{i}(x) \leq u_{i}, i = 1,..., m, Ax = b + v.$

计算h(u, v) 的一个次梯度

$$\max \inf_{x} f_{\theta}(x) + \sum_{i} \lambda_{i} (f_{i}(x) - u_{i}) + w^{T} (Ax - b - v) \quad \text{s.t. } \lambda \geq 0$$

如果 λ , w是最优对偶变量,那么 $(-\lambda,-w) \in \partial h(u,v)$

> u是一个随机变量, h是关于x的凸函数, 令

$$f(x) = Eh(x, u)$$

计算f(x)的一个次梯度

选择一个函数g 满足 $g(u) \in \partial_x h(x, u)$

$$g = E_u g(u) \in \partial f(x)$$





ightharpoonup 方向导数: 设f 为适当函数,给定点 x_0 以及方向 $d \in R^n$,方向导数(若存在)定义为

$$\lim_{t\downarrow 0} f(x_0+td)-f(x_0)/t,$$

其中 $t \downarrow \theta$ 表示 t 单调下降趋于 θ .

 \triangleright 设f为适当凸函数,且在x处次微分不为空集,则对任意 $d \in R^n$ 有

$$\partial f(x; d) = \sup_{g \in \partial f(x)} g^T d,$$

且当 $\partial f(x; d)$ 不为无穷时,上确界可以取到.

□ 例题:

$$f(x) = \begin{cases} \sqrt{x}, & x \ge 0, \\ -x, & x < 0. \end{cases}$$





> Clarke次微分

> 若f:X → R在 $x_0 ∈ X$ 处为局部Lipschitz连续函数,f 在 $x_0 ∈ X$ 处沿方向v ∈ X

的Clarke广义导数定义为

$$f^{0}(x_{0};v) = limsup_{x\to x0,t\downarrow 0} f(x+td) - f(x)/t,$$

> f在x₀处的Clarke次微分定义为

$$\partial f(x_0) = \{ \xi \in X^* : \langle \xi, v \rangle \le f_0(x_0, v), \ \forall v \in X \}$$





> f 在 x_0 处的正则次微分 (regular subdifferential) 定义为

$$\hat{\partial}f(x_0) = \{ v : f(x) \ge f(x_0) + v^T(x - x_0) + o(\|x - x_0\|), \forall x \}$$

> f 在 x_0 处的极限次微分 (limiting subdifferential) 定义为

$$\partial f(x_0) = \left\{ v : \exists x^k \to x_0, v^k \in \hat{\partial} f(x^k), s.t. \ v^k \to v \right\}$$

> f在x₀处的horizon subdifferential定义为

$$\partial^{\infty} f(x_0) = \left\{ v : \exists x^k \to x_0, v^k \in \hat{\partial} f(x^k) \text{ and } t_k \downarrow 0, s.t. \ t_k v^k \to v \right\}$$







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

3. 智能计算与机器学习

数学与计算机学院