

前言

最优化计算方法是运筹学、计算数学、机器学习和数据科学与大数据技术等专业的一门核心课程。最优化问题通常需要对实际需求进行定性和定量分析，建立恰当的数学模型来描述该问题，设计合适的计算方法来寻找问题的最优解，探索研究模型和算法的理论性质，考察算法的计算性能等。最优化算法广泛应用于科学与工程计算、数据科学、机器学习、人工智能、图像和信号处理、金融和经济、管理科学等众多领域。本书将介绍最优化的基本概念、典型案例、基本算法和理论，培养学生解决实际问题的能力。

本书可作为数学优化、运筹学、计算数学、机器学习、人工智能、计算机科学和数据科学等方向的本科生或研究生教材，以及相关研究人员的参考书。通过本书的学习，希望读者能掌握最优化的基本概念、最优性理论、一些典型的最优化问题（如凸优化、无约束优化、约束优化、复合优化，等等）的建模或判别、相关优化问题的基本计算方法，能学会调用基于 MATLAB 或 Python 等语言的典型优化软件程序求解一些标准的优化问题，可以灵活运用所讲授的算法和理论求解一些非标准的优化问题，并锻炼对实际问题建立最优化模型、选择合适的现有软件包和算法、遇到没有现成算法自己实现简单算法等能力。

本书从四个方面进行讲述。

- **基础知识：**第二章介绍最优化建模和算法中经常需要使用的一些基础知识，包括范数、导数、凸集、凸函数、共轭函数、次梯度等。
- **无约束优化算法：**第三章先介绍无约束优化最优性理论，包括最优解的存在性、无约束可微问题和无约束不可微问题等。然后介绍无约束优化算法，包括线搜索方法、梯度类算法、次梯度算法、共轭梯度法、牛顿（Newton）类算法、拟牛顿类算法、信赖域算法、非线性最小二乘问题算法。
- **约束优化算法：**第四章先介绍带约束优化问题的对偶理论和一阶、二阶最优性条件。然后介绍约束优化算法，包括罚函数法、增广拉格朗日（Lagrange）函数法及其在典型凸优化问题的原始问题和对偶问题上的具体应用、逐步二次规划。
- **复合优化算法：**第五章介绍复合优化算法，包括近似点梯度法、Nesterov 加速算法、分块坐标下降法、交替方向乘子法、随机优化算法。

本书主要概念配有详细的例子来解释, 主要优化算法的介绍包含算法描述、应用举例和收敛性分析三个方面。在算法描述方面, 本书侧重于算法的基本思想和直观解释; 在应用举例方面, 针对几乎所有算法写出了其在稀疏优化或逻辑回归等典型问题中的具体形式和求解过程, 给出了最优性度量与迭代步数关系等数值结果。相关程序也可以从作者主页下载, 读者可方便地比较各种算法的特点。

本书各部分内容的难易程度有些差异, 比较难的部分在小节标题标注星号。理论和算法涉及的基础知识也有较大差异, 比如向量导数、凸集、凸函数、线性代数等在低年级课程中大多已经覆盖, 但是矩阵函数及其导数、共轭函数、次梯度等可能讲述很少。因此讲授或阅读时可以根据具体情况进行选择, 不一定要按照章节的顺序进行。例如次梯度、无约束不可微问题的最优性理论和次梯度算法等涉及非光滑函数的基础部分可以考虑放在光滑函数的梯度类算法之后再讲授或阅读。

最优化理论与算法内涵十分丰富, 本书涉及的各方面仍然比较初步和浅略。更全面的应用场景、更深入的理论探讨和更详细的算法设计需读者进一步查阅相关章节给出的参考文献。由于篇幅限制, 有很多重要内容没有讲述, 如连续优化里的无导数优化、线性规划单纯形法和更详细的内点法、二次锥规划和半定规划的内点法、非线性规划的内点法等。本书也没有讲述带微分方程约束优化、流形约束优化、鲁棒优化、整数规划、组合优化、次模优化、动态规划等应用广泛的知识, 感兴趣的读者可以阅读相关文献。

诚挚感谢教育部本科教育教学改革试点工作(“101 计划”)组对本书的规划和内容给予的宝贵意见。非常感谢北京大学北京国际数学研究中心和数学科学学院、中国科学院数学与系统科学研究院计算数学与科学工程计算研究所等的长期资助和支持。

本书基于高等教育出版社出版的《最优化: 建模、算法与理论》和《最优化计算方法》整合修改, 感谢刘浩洋、户将和李勇锋的付出与努力。本书写作也参考了 Jorge Nocedal 教授和 Stephen Wright 教授的 *Numerical Optimization*, Stephen Boyd 教授和 Lieven Vandenbergh 教授的 *Convex Optimization* 等经典教材。Lieven Vandenbergh 教授在加州大学洛杉矶分校多门课程的讲义对本书的整理帮助很大。也特别感谢加州大学洛杉矶分校印卧涛教授慷慨分享稀疏优化、交替方向乘子法、坐标下降法等很多方面的内容。

本书内容在北京大学数学科学学院多次开设的“凸优化”“最优化方法”和“大数据分析中的算法”课程中使用, 感谢课题组同学在初稿整理方面的支持, 如刘普凡在内容简介, 金泽宇在数值代数基础和 Nesterov 加速算法, 许东在数学分析基础, 杨明瀚在无约束光滑函数优化方法, 柳伊扬在无约束非光滑函数优化算法, 柳昊明在近似点梯度法, 刘德斌在罚函数法, 赵明明在对偶函数方法, 王

金鑫在交替方向乘子法及其变形,陈铖和谢中林在书稿整理等方面的帮助。感谢邹海军对本书的整理。习题答案由丁思哲、邓展望、李天佑、陈铖、谢中林和俞建江协助准备。电子教案讲义由朱桢源、谢中林、邓展望、丁思哲、华奕轩和李煦恒协助准备。配套代码与教材网页由杨昊桐协助准备。同时也感谢高等教育出版社编辑精心细致的校稿和修改。

限于作者的知识水平,书中恐有不妥之处,恳请读者不吝批评和指正。

文再文、袁亚湘

2024 年 2 月于北京