

# 数值优化

数值方法与优化算法 · 从浮点运算到大规模优化

MarkZZZ WeChat: MarkZZZ20XX

## 课程简介

数值优化 (Numerical Optimization) 是连接**数学理论**与**科学计算**的核心桥梁。本课程系统讲授数值线性代数、逼近理论与最优化方法的数学基础和算法设计, 强调严格的**收敛性分析**、**稳定性理论**与**计算复杂度**评估。课程从 IEEE 754 浮点运算与误差分析的基本框架出发, 深入讲解线性方程组的直接法 (LU/Cholesky/QR 分解及其数值稳定性证明) 与迭代法 (Krylov 子空间法、预条件技术及谱分析), 特征值问题 (QR 算法的隐式移位与收敛理论), 非线性方程与方程组求解 (Newton 法的局部与半局部收敛定理), 插值逼近理论 (Weierstrass 定理、Chebyshev 最佳逼近、样条的最优性), 数值积分 (Gauss 求积的最优性证明与自适应策略), 常微分方程初值问题 (Runge-Kutta 方法的阶条件、A-稳定性与刚性分析), 以及无约束与约束优化的完整算法体系 (梯度法收敛率、Newton 法超线性收敛、拟 Newton 方法的 Dennis-Moré 定理、信赖域全局收敛、内点法多项式复杂度、SQP 的局部二次收敛)。全部 10 讲注重完整的数学证明、深入的算法分析与丰富的计算实例, 达到研究生 (博士) 课程水平。

## 适合人群

- 计算数学、应用数学、运筹学方向的博士研究生
- 已掌握实分析与线性代数基础的高年级硕士生
- 从事科学计算、工程仿真、机器学习算法开发的研究者和工程师
- 需要深入理解优化算法收敛性与数值稳定性的从业者

## 前置知识

- **实分析**: 度量空间、紧性、一致收敛、Banach 不动点定理、隐函数定理
- **线性代数**: 矩阵分解 (LU/QR/SVD/特征值)、正定矩阵、谱理论、Jordan 标准形
- **微积分**: 多元函数 Taylor 展开、隐函数定理、Jacobian 与 Hessian
- **凸分析基础**: 凸集与凸函数、次梯度、对偶理论 (Lagrange 对偶、KKT 条件)
- **编程能力**: Python (NumPy/SciPy) 或 MATLAB, 能实现基本数值算法

## 1 课程内容

讲次	主题	内容概要
1	数值方法导论	浮点运算与 IEEE 754 标准 (规格化/非规格化/特殊值); 机器精度的严格定义与证明; 舍入误差的累积 (Wilkinson 误差分析框架); 灾难性抵消的机制与规避策略; 前向误差与后向误差 (Backward Error Analysis); 条件数的一般定义与可微情形; 矩阵条件数与线性系统扰动定理 (完整证明); 算法稳定性的分类 (后向稳定/混合稳定/前向稳定)
2	线性方程组的直接法	Gauss 消元的矩阵解释 (LU 分解); 部分主元选取的必要性与增长因子分析 (Wilkinson 界); Gauss 消元后向稳定性定理 (完整证明); Cholesky 分解的存在唯一性证明与稳定性; QR 分解三种算法 (经典/修正 Gram-Schmidt、Householder 反射、Givens 旋转); Householder QR 的后向稳定性; 列主元 QR 与秩亏最小二乘问题; 运算量比较与实现细节 (BLAS/LAPACK)
3	线性方程组的迭代法	经典定常迭代 (Jacobi/Gauss-Seidel/SOR) 的收敛充要条件 (谱半径定理); SOR 最优松弛因子 (Young 定理); Krylov 子空间方法的一般框架; 共轭梯度法 (CG) 的最优性证明 ( $A$ -范数极小化); CG 的有限终止性与超线性收敛; CG 收敛率分析 (Chebyshev 多项式界); GMRES 算法与 Arnoldi 过程; 预条件技术 (不完全 LU/Cholesky、代数多重网格 AMG); 收敛率与谱分布的关系
4	特征值计算	特征值问题的条件数 (Bauer-Fike 定理); 幂法与反幂法的收敛率分析; Householder 约化到 Hessenberg/三对角形; QR 算法的基本形式与收敛性证明; 隐式 QR 步与 Wilkinson 移位 (三次收敛); 对称三对角 QR 的特殊结构与 $O(n)$ 每步复杂度; 分治法 (Cuppen 算法); 奇异值分解 (SVD) 的计算与应用 (低秩近似、Eckart-Young 定理); 广义特征值问题与 Lanczos 算法
5	非线性方程求解	二分法的收敛率 (线性收敛); 不动点迭代的 Banach 收敛定理 (完整证明); Newton 法的局部二次收敛定理 (完整证明); Newton-Kantorovich 半局部收敛定理; 割线法的超线性收敛 ( $\phi = (1 + \sqrt{5})/2$ 阶); 多维 Newton 法与 Jacobian 的计算/近似; 拟 Newton 方法 (Broyden 更新); 全局化策略 (线搜索/信赖域/同伦延拓); 收敛阶的统一理论与不动点指标

讲次 主题	内容概要
6 插值与逼近理论	Lagrange 插值的存在唯一性；插值误差定理（完整证明）与 Runge 现象；Chebyshev 节点的最优性（极小化 Lebesgue 常数）；Newton 差商形式与算法稳定性；Hermite 插值与 Birkhoff 插值；三次样条的存在唯一性证明与最优性（最小曲率性质）；B-样条基函数与 de Boor 算法；Weierstrass 逼近定理（Bernstein 多项式构造性证明）；最佳一致逼近的 Chebyshev 交替定理（完整证明）；最小二乘逼近与正规方程
7 数值积分与微分	Newton-Cotes 公式的推导与误差分析；复合求积规则的收敛率；Gauss 求积公式的最优性证明（ $2n - 1$ 阶精度）；Gauss-Legendre、Gauss-Laguerre、Gauss-Hermite；正交多项式与三项递推关系；自适应 Simpson 积分策略；Romberg 积分与 Richardson 外推；数值微分的截断-舍入误差平衡；高维积分（Monte Carlo 方法与拟 Monte Carlo）
8 常微分方程数值解	Euler 法的局部/全局误差分析；Runge-Kutta 方法的阶条件（Butcher 树理论）；经典 RK4 的推导与误差估计；嵌入式 Runge-Kutta（Dormand-Prince）与步长自适应；线性多步法（Adams-Bashforth/Moulton）的推导与阶条件；零稳定性、收敛性与一致性（Dahlquist 等价定理完整证明）；A-稳定性与 Dahlquist 第二障碍定理；刚性问题与隐式方法（BDF）；辛方法与 Hamilton 系统
9 无约束优化	最速下降法的收敛率分析（条件数依赖）；精确线搜索与非精确线搜索（Armijo/Wolfe 条件）；Zoutendijk 条件的证明与全局收敛；Newton 法的局部二次收敛与全局化（修正 Newton/线搜索/信赖域）；拟 Newton 方法（BFGS）的正定性保持与超线性收敛（Dennis-Moré 定理）；L-BFGS 的有限内存策略；非线性共轭梯度法（Fletcher-Reeves/Polak-Ribière）；信赖域方法的全局收敛定理（完整证明）；一阶方法下界定理（Nesterov）与加速梯度法

---

讲次	主题	内容概要
10	约束优化	KKT 条件的一阶与二阶充分性（完整证明）；约束品性（LICQ/MFCQ/Slater）；有效集法（Active Set Method）；内点法的中心路径与多项式复杂度证明思路；序列二次规划（SQP）的等价性与局部二次收敛；增广 Lagrangian 方法（ALM）与 ADMM；罚方法（精确/非精确）；现代求解器架构（IPOPT/KNITRO）；大规模优化前沿（随机优化/分布式优化/自动微分）

---

## 2 参考资料

---

1. Nocedal, J. & Wright, S.J. *Numerical Optimization*. 2nd ed., Springer, 2006.
2. Trefethen, L.N. & Bau, D. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.
3. Golub, G.H. & Van Loan, C.F. *Matrix Computations*. 4th ed., Johns Hopkins University Press, 2013.
4. Stoer, J. & Bulirsch, R. *Introduction to Numerical Analysis*. 3rd ed., Springer, 2002.
5. Higham, N.J. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. 2nd ed., SIAM, 2002.
6. Hairer, E., Nørsett, S.P. & Wanner, G. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. 2nd ed., Springer, 1993.
7. Hairer, E. & Wanner, G. *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems*. 2nd ed., Springer, 1996.
8. Conn, A.R., Gould, N.I.M. & Toint, Ph.L. *Trust-Region Methods*. SIAM, 2000.
9. Boyd, S. & Vandenberghe, L. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.
10. Nesterov, Y. *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*. Springer, 2004.