

课程简介

数学与计算机交叉的基础课程，主要介绍如何将现实中的决策问题求解抽象为**数学优化模型**，并通过系统的方法求得最优解。

课程既注重**理论基础**，又强调**方法应用**，旨在为后续机器学习、深度学习及计算机视觉等课程奠定坚实的理论与方法基础。

- ① 掌握优化问题的建模思路与基本理论；
- ② 理解常见优化算法的基本原理、适用范围；
- ③ 能够将数学优化方法应用到工程、数据分析等实际问题中；
- ④ 为后续深度学习类课程提供数学与方法论支撑。

第一章 最优化简介



目录

§1.1 最优化问题概括

§1.2 最优化的基本概念

§1.3 优化实例

§1.1 最优化问题概括

§1.1 最优化问题概括

最优化问题泛指定量决策问题，主要关心如何对**有限资源**进行有效分配和控制，并达到某种意义上的最优。

- **最优化问题一般可以描述为：**

$$\begin{array}{ll}\min & f(x) \\ \text{s. t.} & x \in \mathcal{X}\end{array}$$

- ① $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ 是**决策变量**
- ② $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是**目标函数**
- ③ $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 是**约束集合或可行域**
- ④ 可行域中的点称为**可行解或可行点**

§1.1 最优化问题概括

● 求解 $\min f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 4x_2$

s. t. $-x_1 - x_2 + 1 \geq 0, x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$

决策变量

可行域、可行解

目标函数

§1.2 最优化的基本概念

§1.2 最优化问题概括

- 无约束和约束最优化问题
- 线性和非线性规划问题
- 凸和非凸优化问题
- 连续和离散优化问题
- 随机和确定性优化问题
- 全局和局部最优解

无约束和约束最优化问题

无约束优化问题泛指目标函数在**整个实数空间**中寻找最优解，不存在任何约束条件。

- 定义：

$$\begin{array}{ll}\min & f(x) \\ \text{s. t.} & x \in \mathbb{R}^n\end{array}$$

- 可行域：整个空间 \mathbb{R}^n
- 常用方法：梯度下降法、牛顿法、拟牛顿法
- 示例：最小二乘回归

无约束和约束最优化问题

无约束优化问题

- 问题:

$$\begin{aligned} \min f(x) &= (x - 2)^2 \\ \text{s. t. } x &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

- 解析:

- 没有约束条件;

- 最优解: $x = 2$, 最小值为0。

- 函数图像是一条抛物线, 最小点在 $x = 2$, 对应的最小值为0

习题1

无约束和约束最优化问题

约束优化问题泛指在给定约束条件下最小化（或最大化）目标函数。

- 定义：

$$\min f(x)$$

$$\text{s. t. } g_i(x) \geq 0, i \in I$$

$$h_j(x) = 0, j \in E$$

- 可行域：由约束函数决定

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n | g_i(x) \geq 0, i \in I; h_j(x) = 0, j \in E\}$$

无约束和约束最优化问题

等式约束优化: $E \neq \emptyset, I = \emptyset$

- 定义:

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{s. t. } h_j(x) = 0 \end{aligned}$$

- 可行域:

$$\mathcal{X} = \{x | h_j(x) = 0, j \in E\}$$

- 求解方法: 拉格朗日乘子法
- 拉格朗日函数:

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum \lambda_j h_j(x)$$

无约束和约束最优化问题

等式约束优化：以构造拉格朗日乘子法为例

- 问题：

$$\begin{aligned}\min f(x, y) &= x^2 + y^2 \\ \text{s. t. } x + y &= 1\end{aligned}$$

- 构造拉格朗日函数：

$$L(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(x + y - 1)$$

解方程组可得

$$x = y = \frac{1}{2}, \quad f(x, y) = \frac{1}{2}$$

- 几何意义：在直线 $x + y = 1$ 上寻找距离原点最近的点

习题2

无约束和约束最优化问题

不等式约束优化: $E = \emptyset, I \neq \emptyset$

- 定义:

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{s. t. } g_i(x) \geq 0 \end{aligned}$$

- 可行域:

$$\mathcal{X} = \{x | g_i(x) \geq 0, i \in I\}$$

- 求解方法: KKT条件、内点法

无约束和约束最优化问题

不等式约束优化：以KKT条件为例

● 问题：

$$\begin{aligned} \min f(x) &= x^2 \\ \text{s. t. } x &\geq 1 \end{aligned}$$

● 解析：

- 无约束最优解在 $x = 0$ ，但不满足约束条件；
- 在可行域 $x \geq 1$ 上，最优解为 $x = 1$ ，函数值为 $f(x) = 1$ 。

● 几何意义：抛物线在 $x = 1$ 处截断，最小点被“推”到边界。

习题3

无约束和约束最优化问题

一般约束优化: $E \neq \emptyset, I \neq \emptyset$

- 定义: 同时存在等式和不等式约束, 即:

$$\begin{aligned} & \min f(x) \\ & \text{s.t. } g_i(x) \geq 0, i \in I; h_j(x) = 0, j \in E \end{aligned}$$

- 可行域:

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n | g_i(x) \geq 0, i \in I; h_j(x) = 0, j \in E\}$$

- 求解方法: 罚函数法、增广拉格朗日法、内点法

无约束和约束最优化问题

一般约束优化：以罚函数法为例

- 问题：

$$\begin{aligned} \min f(x, y) &= x^2 + y^2 \\ \text{s. t. } x + y &= 1, x \geq 0 \end{aligned}$$

- 罚函数法转化：

$$F(x, y) = f(x, y) + \mu(x + y - 1)^2 + \mu \max(0, -x)^2$$

其中 μ 为惩罚系数

- 解析：

- 当 μ 很大时，解会趋近于满足约束；
- 数值优化可得到近似解 $x = 0.5, y = 0.5$

习题4

- 思想：违反约束就“罚”，引导解逐步进入可行域

线性和非线性规划问题

线性规划指目标函数与约束条件函数**均为线性函数**的优化问题。

- 定义:

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x \\ \text{s. t.} \quad & Ax = b, x \geq 0 \end{aligned}$$

其中: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m, c^T$ 表示 $c \in \mathbb{R}^n$ 的转置。

- 目标函数: $c^T x$
- 约束条件: $Ax = b$ (线性等式约束)
- 非负约束: $x \geq 0$
- 求解方法: 单纯形法、内点法

线性和非线性规划问题

线性规划指目标函数与约束条件函数**均为线性函数**的优化问题。

● 问题:

$$\begin{aligned} & \min 3x_1 + 5x_2 \\ & \text{s. t.} \quad \begin{cases} 2x_1 + x_2 \leq 100 \\ x_1 + 3x_2 \leq 90 \\ x_1, x_2 \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

● 候选顶点: $(0,0), (50,0), (0,30), (42,16)$

● 对应目标函数值: $0, 150, 150, 206$

● 最优解: $x^* = (0,0), f^* = 0$; *表示最优解

习题5

线性和非线性规划问题

非线性规划指**目标函数或约束条件函数**中至少有一个是**非线性函数**的优化问题。

- 定义:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s. t.} \quad & g_i(x) \geq 0, i \in I; h_j(x) = 0, j \in E \end{aligned}$$

- 求解方法: 梯度法、牛顿法、内点法、序列二次规划
- 示例:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x, y) = x^2 + y^2 \\ \text{s. t.} \quad & x^2 + y \leq 1, x \geq 0 \end{aligned}$$

可行域是曲线和区域的交集, 解通常在边界。

习题6

线性和非线性规划问题

二次规划指**目标函数为二次函数**，**且约束条件为线性函数**的优化问题；二次规划是一种特殊的非线性规划。

- 定义：

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x \\ \text{s. t.} \quad & A x = b, x \geq 0 \end{aligned}$$

其中： $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 且 $b \in \mathbb{R}^m$ 。

- 示例：支持向量机

$$\begin{aligned} \min \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 \\ \text{s. t.} \quad & y_i (w^T x_i + b) \geq 1 \end{aligned}$$

凸和非凸优化问题

凸优化问题指目标函数是凸函数，且可行域是凸集的优化问题。

- 定义：

$$\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s. t. } & g_i(x) \geq 0, h_j(x) = 0 \end{aligned}$$

其中： f 为凸函数，约束形成的集合为凸集

- 特点：局部最优解即全局最优解

- 典型示例：

- 最小二乘回归
- LASSO回归
- 支持向量机

凸和非凸优化问题

非凸优化问题指目标函数不是凸函数，或可行域不是凸集的优化问题。

- 特点：

- 存在多个局部最优解
- 理论分析非常困难
- 求解算法一般只能保证找到“局部最优”或“近似最优”解

- 在现实世界中应用广泛：

- 机器学习：聚类（如K-means）算法
- 深度学习：神经网络训练（非凸损失函数）
- 组合优化：旅行商问题、背包问题等

连续和离散优化问题

连续优化问题指目标函数和约束条件都是连续函数的优化问题；决策变量可以在一个连续空间(通常是实数域 \mathbb{R}^n)中取值。

- **特点：** 变量取值是连续的，可以用微积分工具（如梯度）求解
- **求解方法：** 梯度下降、牛顿法、拟牛顿法、内点法等
- **示例：** 最小二乘回归

$$\min \frac{1}{2} \|y - Xw\|^2$$

连续和离散优化问题

离散优化问题指目标函数或约束条件中至少有一个是离散的；决策变量的取值范围是离散值（如整数、有限集合）。

- **特点：** 变量取值是离散的，通常不能直接用微积分工具
- **求解方法：** 多数为NP-hard问题，常用近似算法或启发式方法
- **示例：**
 - **旅行商问题：** 寻找最短路径经过所有城市
 - **背包问题：** 有限物品，选择是否放入背包以最大化价值

随机和确定性优化问题

随机优化指在目标函数或约束条件中包含随机性或不确定性时，采用概率方法或随机算法来寻找最优解。

$$\min_{\omega} F(\omega) = \mathbb{E}_{\xi \sim \mathcal{D}}[f(\omega; \xi)]$$

- ω : 待优化参数
- ξ : 随机变量（比如训练样本、噪声）
- \mathcal{D} : 数据或者噪声的分布
- $f(\omega; \xi)$: 在单一样本或环境下的损失

随机和确定性优化问题

确定性优化指在目标函数和约束条件已知且确定的情况下，使用解析方法或数值方法寻找最优解。

● 定义：

$$\min f(x)$$

$$\text{s. t. } g_i(x) \leq 0, i \in I, h_j(x) = 0, j \in E$$

其中： $f(x)$, $g_i(x)$, $h_j(x)$ 都是确定的函数

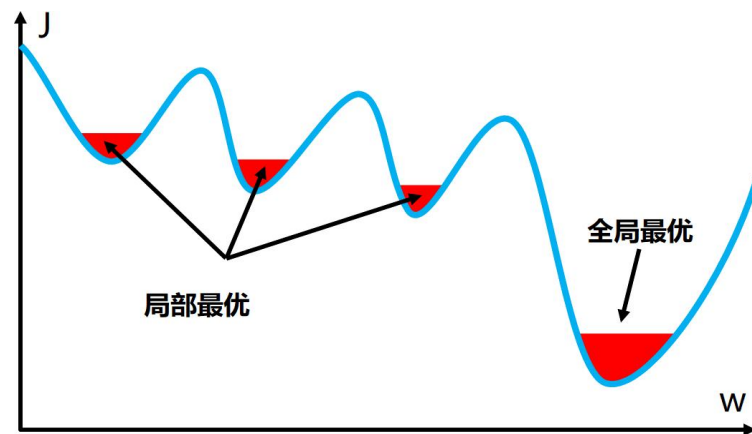
全局和局部最优解

- 定义:

点 x^* 称为 **局部最优解**, 如果在某个领域 $N(x^*)$ 内:

$$f(x^*) \leq f(x), \forall x \in N(x^*)$$

- 局部最优解只在 **小范围** 内最优
- 非凸优化问题常有多个局部最优解
- 在实际优化中, 梯度法往往只能保证收敛到局部最优



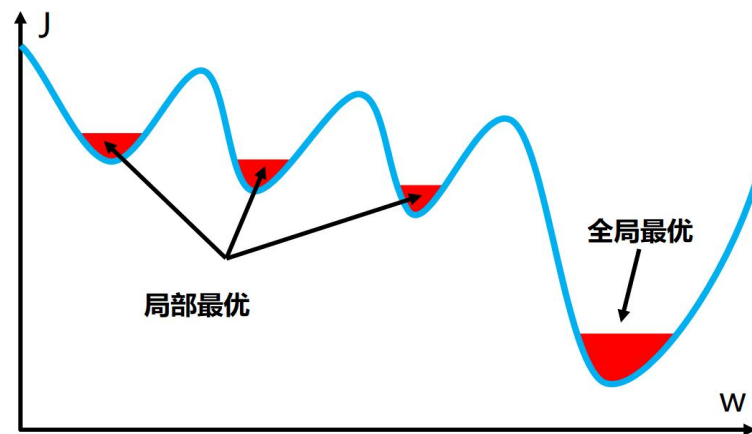
全局和局部最优解

- 定义:

点 x^* 称为全局**最优解**, 如果在整个可行域 F 内:

$$f(x^*) \leq f(x), \forall x \in F$$

- 全局最优解是整个问题的最优解
- 凸优化问题保证局部最优解=全局最优解
- 非凸优化问题中, 找到全局最优很困难



§1.3 优化实例

§1.3 优化实例

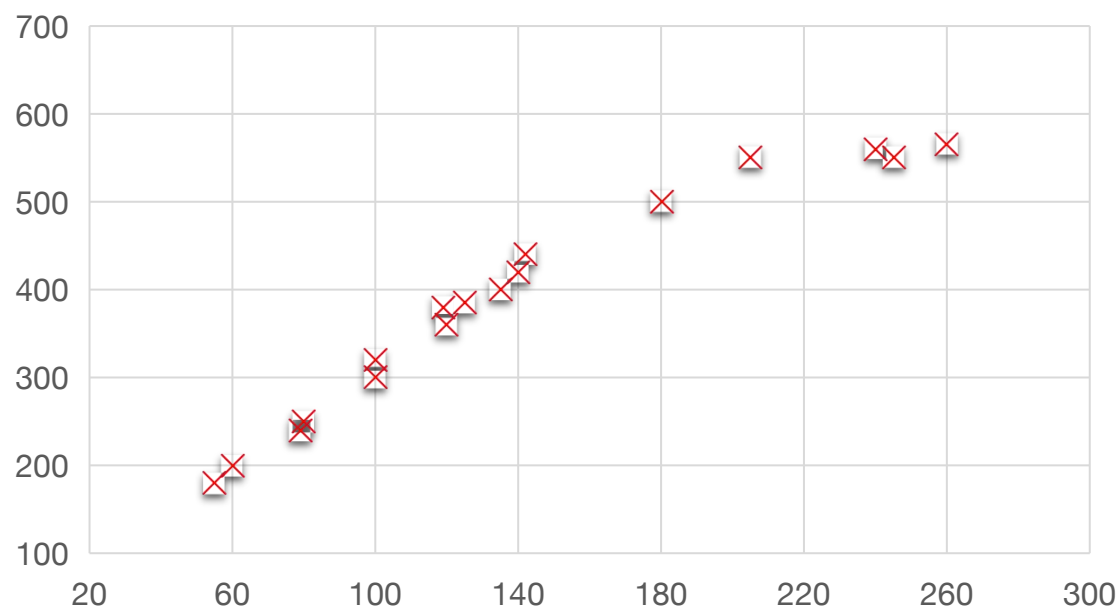
- 最小二乘线性回归
- LASSO (套索回归)
- 支持向量机
- 多层感知机

最小二乘线性回归

● 示例(回归问题)

房价预测(南京某地区)

价格(万元)



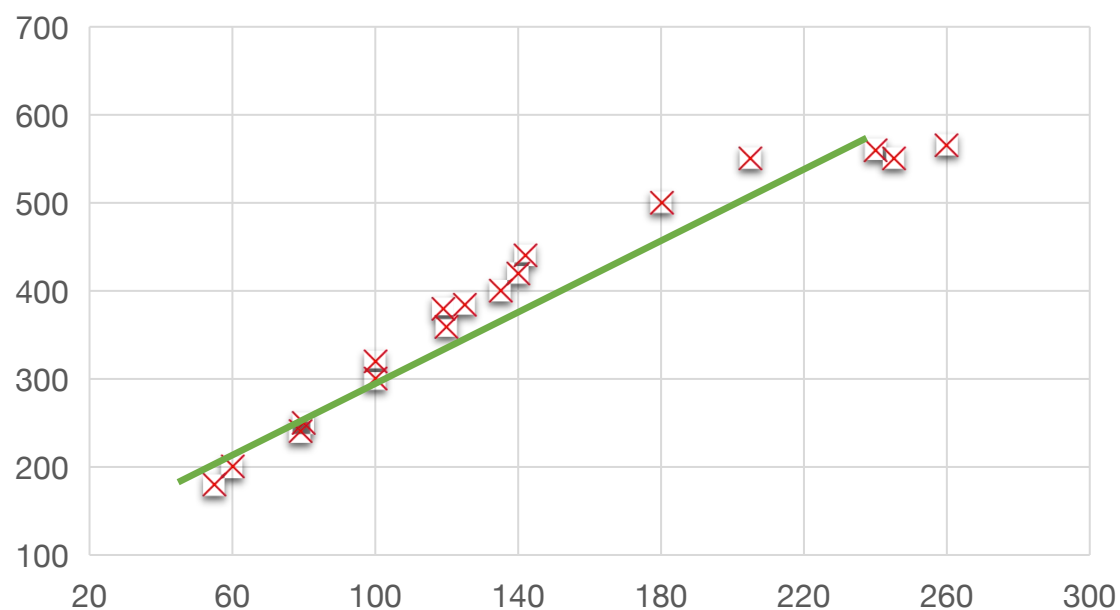
面积 (平方米)

最小二乘线性回归

● 示例(回归问题)

房价预测(南京某地区)

价格(万元)



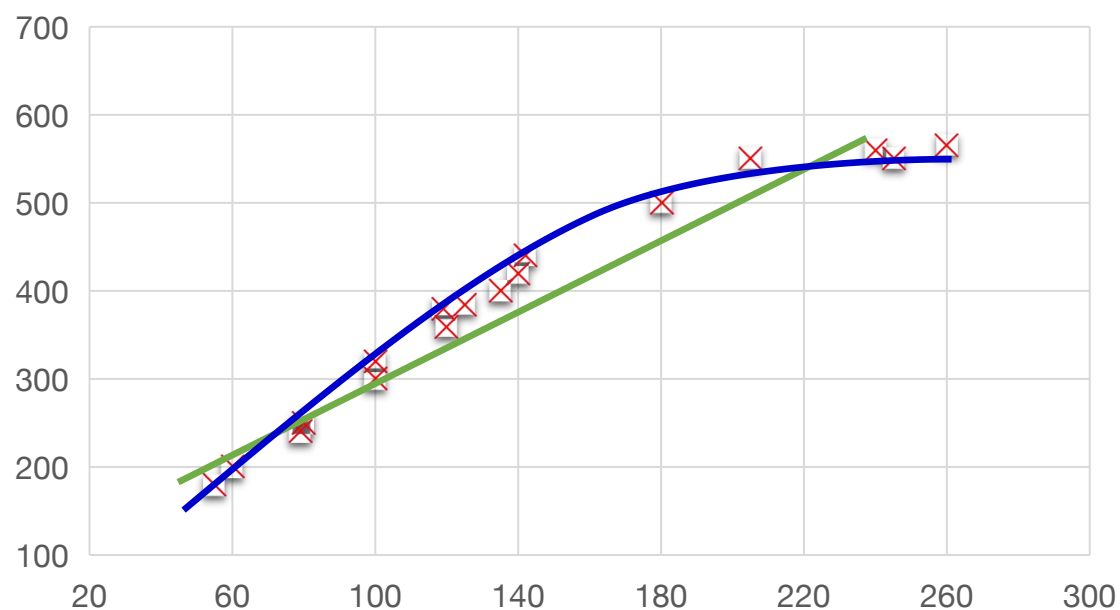
面积 (平方米)

最小二乘线性回归

● 示例(回归问题)

房价预测(南京某地区)

价格(万元)



面积 (平方米)

最小二乘线性回归

● 示例(回归问题)

● 训练集:

- $\mathbf{X}_i \in \mathbb{R}^n$: 输入变量 (特征)
- $y_i \in \mathbb{R}$: 输出变量 (目标值)
- (\mathbf{X}, \mathbf{y}) 代表训练集中的实例或样本;
- (\mathbf{X}_i, y_i) 代表第 i 个观察实例或样本;
- $i = 1, 2, \dots, m$ 代表训练集中样本的数量。

面积 (平方米)	价格 (万元)
60	200
80	240
100	300
100	306
...	...

最小二乘线性回归

线性回归研究输入变量和输出变量之间的线性关系。在给定训练集下，拟合一个**线性函数**，通过最小化**误差的平方和**，使得预测值与真实值之间的误差最小。

- 训练数据： m 个训练样本点

$$\{(X_i, y_i)_{i=1}^m\}, \quad X_i \in \mathbb{R}^n, \quad y_i \in \mathbb{R}$$

- 数据矩阵表示

$$X = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_m^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

- 超平面（目标函数）

$$h(z) = w^T z + b$$

其中： $w \in \mathbb{R}^n$ 表示权重向量； $b \in \mathbb{R}$ 表示偏置项

最小二乘线性回归

线性回归研究输入变量和输出变量之间的线性关系。在给定训练集下，拟合一个**线性函数**，通过最小化**误差的平方和**，使得预测值与真实值之间的误差最小。

● 引入增广向量

➤ 增广数据点: $\tilde{z} := (1, z^T)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$

➤ 增广权重向量: $\tilde{w} := (b, w^T)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$

● 目标函数

$$h(z) = w^T z + b \quad \longrightarrow \quad h(z) = \tilde{w}^T \tilde{z}$$

● 预测向量

$$\hat{y} = \tilde{D} \tilde{w}$$

● 优化目标

$$\min \|y - \tilde{D} \tilde{w}\|$$

最小二乘线性回归

小结

- 根据跟定的数据点，寻找最优超平面或增广权重向量来最小化预测值 \hat{y} 和真实值 y 之间的误差。

- 优化目标：

$$\min \|\hat{y} - y\|_2^2 = \min \|\tilde{D}\tilde{w} - y\|_2^2$$

- 最优解（正规方程）：

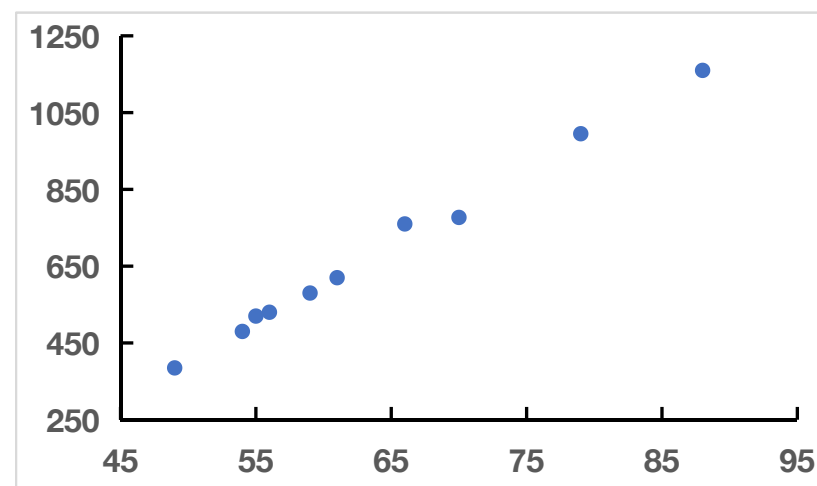
$$\tilde{w} = (\tilde{D}^T \tilde{D})^{-1} \tilde{D} y$$

最小二乘线性回归

练习题

某小区房价与面积样本数据如下表所示，请选择一些数据样本（如序号1-5）建立房价与面积的**线性回归模型**，并计算其均方误差MSE。

某小区房价		
序号	价格/万	面积
1	385	49
2	480	54
3	520	55
4	530	56
5	580	59
6	620	61
7	760	66
8	777	70
9	995	79
10	1160	88



最小二乘线性回归

练习题

某小区房价与面积样本数据如下表所示，请选择一些数据样本（如序号1-5）建立房价与面积的线性回归预测模型，并计算其均方误差MSE。

解：

利用前5组数据，基于最小二乘法，线性模型的系数为：

某小区房价		
序号	价格/万	面积
1	385	49
2	480	54
3	520	55
4	530	56
5	580	59

$$\tilde{w} = (\tilde{D}^T \tilde{D})^{-1} \tilde{D} y$$

$$D = \begin{bmatrix} 49 & 1 \\ 54 & 1 \\ 55 & 1 \\ 56 & 1 \\ 59 & 1 \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} 385 \\ 480 \\ 520 \\ 530 \\ 580 \end{bmatrix}$$

由此计算出：

$$w = 19.89, b = -586.84, \text{MSE} = 7.5$$

线性回归模型为：

$$y = 19.89x - 586.84$$

习题7

§1.3 优化实例

- 最小二乘线性回归
- LASSO
- 支持向量机
- 多层感知机

LASSO(索套回归)

● 定义:

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) 是一种线性回归方法, 又称为L1正则化。
- 在最小二乘目标中加入L1正则化, 能够: 1) 限制参数大小, 防止过拟合; 2) 产生稀疏解, 即部分权重收缩为0, 实现特征选择。

● 数学表达:

$$\min \|\tilde{D}\tilde{w} - y\|_2^2 + \lambda \|\tilde{w}\|_1$$

- 第一项: 拟合误差 (残差平方和)
- 第二项: L1正则化项 (参数的绝对值和)
- $\lambda > 0$: 正则化系数

● 与L2正则化对比:

- L2: 收缩参数, 但很少为0
- L1: 推动部分参数为0, 得到稀疏解

LASSO(索套回归)

- 求解方法:

- 梯度下降 (Gradient Descent)
- 软阈值迭代 (Soft-thresholding / ISTA)
- 神经网络近似方法 (如深度展开算法, Learned ISTA)

- 以软阈值迭代为例, 对于每一步迭代:

$$w^{k+1} = S_{\frac{\lambda}{2}}(w^k - \frac{1}{L} D^T (Dw^k - y))$$

- L : 步长参数
- $S_{\theta}(\cdot)$: 软阈值算子 (soft-thresholding operator)

$$S_{\theta}(z) = \text{sign}(z) \cdot \max(|z| - \theta, 0)$$

§1.3 优化实例

- 最小二乘线性回归
- LASSO
- 支持向量机
- 多层感知机

支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)

● 定义:

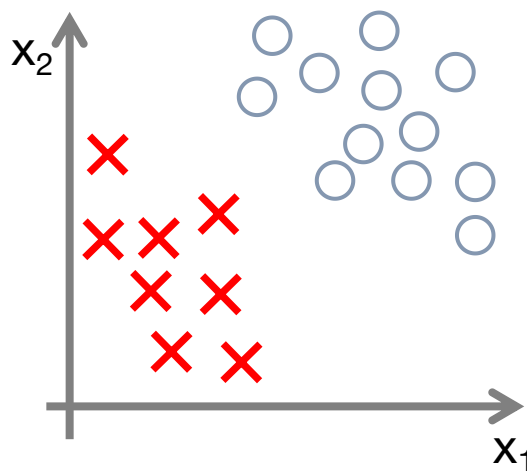
- 支持向量机 (Support Vector Machine, SVM) 是一类用于分类和回归的 supervised 学习模型
- 核心思想: 找到一个最优超平面, 使两类数据的间隔最大

● 分类:

- 硬间隔SVM
 - 适用于线性可分的情况
 - 要求所有样本完全正确分类
- 软间隔SVM
 - 允许一定的分类错误
 - 通过引入松弛变量, 解决线性不可分问题
- 核SVM
 - 利用核函数将数据映射到高维特征空间
 - 适用于非线性分类

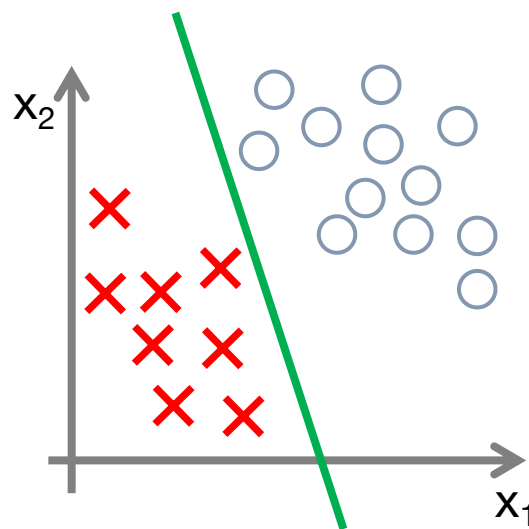
硬间隔支持向量机

例：一组叉和圆的样本数据如下所示，请确定一个超平面（或分界线）将叉与圆这两类样本分隔开，并思考这样的分割面/线有多少个？什么样的分割面/线是最佳的？为什么？



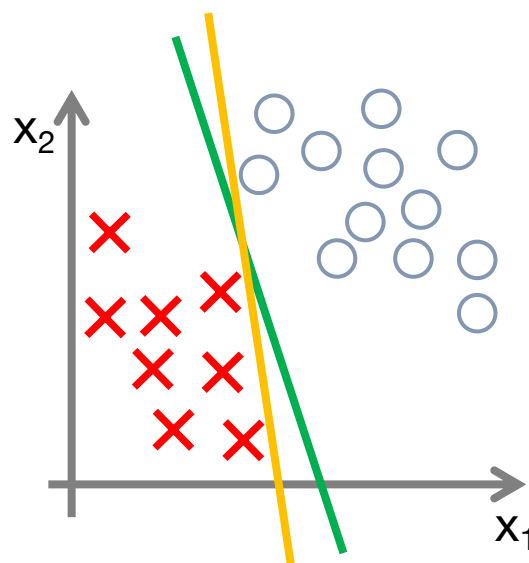
硬间隔支持向量机

例：一组叉和圆的样本数据如下所示，请确定一个超平面（或分界线）将叉与圆这两类样本分隔开，并思考这样的分割面/线有多少个？什么样的分割面/线是最佳的？为什么？



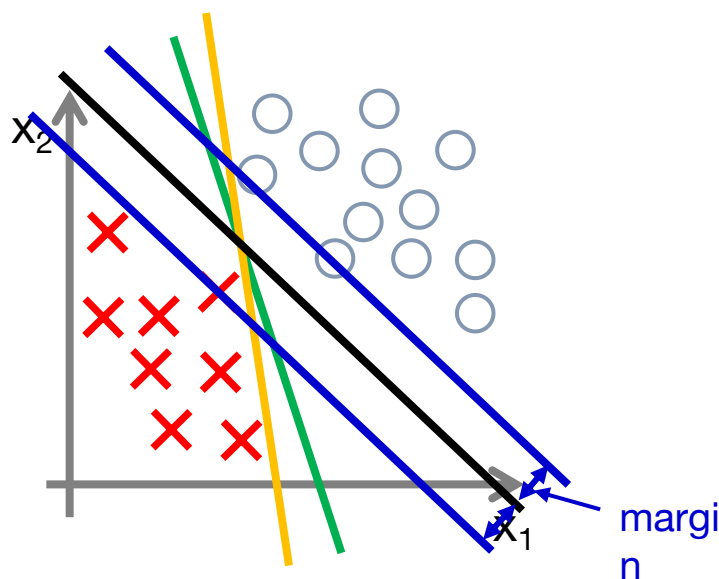
硬间隔支持向量机

例：一组叉和圆的样本数据如下所示，请确定一个超平面（或分界线）将叉与圆这两类样本分隔开，并思考这样的分割面/线有多少个？什么样的分割面/线是最佳的？为什么？



硬间隔支持向量机

例：一组叉和圆的样本数据如下所示，请确定一个超平面（或分界线）将叉与圆这两类样本分隔开，并思考这样的分割面/线有多少个？什么样的分割面/线是最佳的？为什么？



最大化最近的数据点(或类)和超平面之间的距离，将帮助我们确定最佳的分类超平面

SVM: 最大间距分类器 (Large margin classifier)

硬间隔支持向量机

线性可分二分类硬间隔支持向量机

假设具有正负标签的二分类数据是线性可分的。

- 超平面:

$$h(x) = \omega^T x + b$$

$$\Rightarrow y = \text{sgn}(h(x)) = \begin{cases} +1, & h(x) > 0, \\ -1, & h(x) < 0 \end{cases}$$

- 分类条件:

$$y_i(\omega^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, m$$

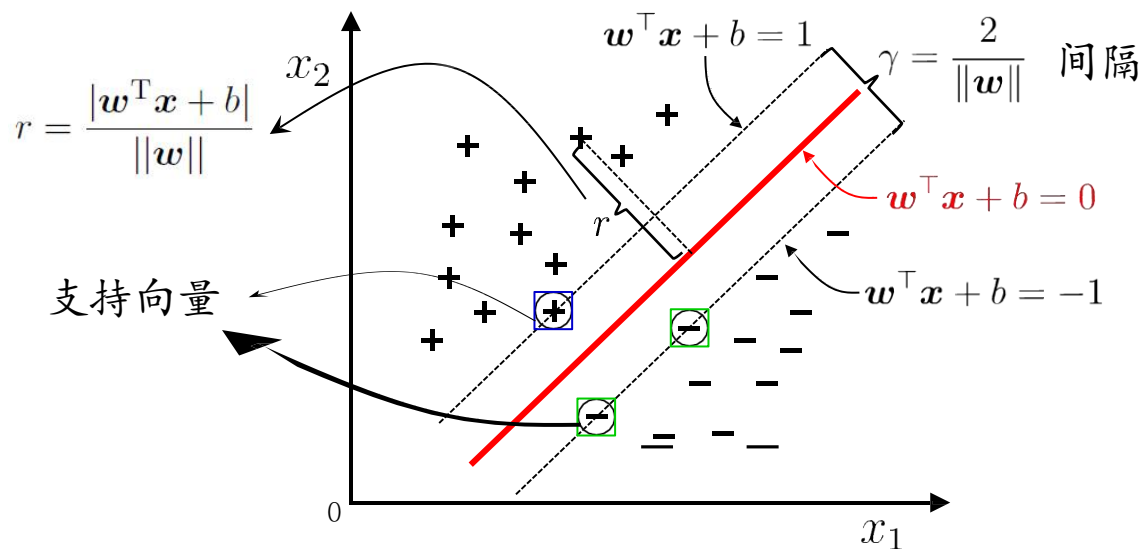
硬间隔支持向量机

线性可分二分类硬间隔支持向量机

超平面方程: $h(x) = w^T x + b = 0$

x 到超平面的距离:

$$r = \frac{|w^T x + b|}{\|w\|}$$



- 支持向量: 距离超平面最近的几个训练样本;
- 间隔: 两个不同类支持向量到超平面的距离之和 $r = \frac{2}{\|w\|}$

硬间隔支持向量机

线性可分二分类硬间隔支持向量机

- 优化目标：寻找参数 ω 和 b ，以最大化间隔 $r = \frac{2}{\|\omega\|}$ 。

$$\max_{\omega, b} \frac{2}{\|\omega\|}$$

$$\text{s. t. } y_i(\omega^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, m$$

等价于



$$\min_{\omega, b} \frac{1}{2} \|\omega\|^2$$

$$\text{s. t. } y_i(\omega^T x_i + b) \geq 1, i = 1, 2, \dots, m$$

- 这就是支持向量机的基本型；
- 凸二次规划问题，能用优化计算包求解，但可以有更高效的办法。

硬间隔支持向量机

线性可分二分类硬间隔支持向量机

● 拉格朗日乘子法

- 第一步：引入拉格朗日乘子 α_i ，得到拉格朗日函数：

$$L(\omega, b, a) = \frac{1}{2} \|\omega\|^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i (y_i (\omega^T x_i + b) - 1)$$

- 第二步：令 $L(\omega, b, a)$ 对 ω 和 b 的偏导为零，可得：

$$w = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i x_i, \quad 0 = \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i$$

- 第三步：将第二步中的公式回代入第一步，可得：

$$\begin{aligned} \text{(对偶问题)} \quad & \max_{\alpha} \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^m \alpha_i y_i = 0, \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned}$$

硬间隔支持向量机

线性可分二分类硬间隔支持向量机

- 先最小化（找到最优超平面），再最大化（找到约束最紧的点，即支持向量）

$$\max_{\alpha} \min_{w, b} L(w, b, \alpha)$$

- KKT条件：最优解的必要条件（在凸问题中也是充分条件）

$$\begin{cases} a_i \geq 0 \\ y_i(\omega^T x_i + b) - 1 \geq 0 \\ a_i(y_i(\omega^T x_i + b) - 1) = 0 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} &\text{必有 } a_i = 0, \\ &\text{或 } y_i(\omega^T x_i + b) = 1 \end{aligned}$$

解的稀疏性：训练完成后，最终模型仅与支持向量有关

支持向量机（SVM）因此而得名。

硬间隔支持向量机

例：给出标签为+1的的两个点 $x_1 = (0,0)^T$ 和 $x_2 = (1,1)^T$ ，以及标签为-1的一个点 $x_3 = (0,2)^T$ ，求硬间隔线性支持向量机。

解：记 x_1, x_2, x_3 对应的标签分别为 y_1, y_2, y_3 ，得 $y_1 = y_2 = 1, y_3 = -1$

代入公式：

$$\max_{\alpha} \sum_{i=1}^m \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \alpha_i \alpha_j y_i y_j x_i^T x_j$$

$$\begin{aligned} \text{得： } L(a_1, a_2, a_3) &= a_1 + a_2 + a_3 - \frac{1}{2} (a_2^2 y_2^2 x_2^T x_2 + 2a_2 a_3 y_2 y_3 x_2^T x_3 + a_3^2 y_3^2 x_3^T x_3) \\ &= a_1 + a_2 + a_3 - \frac{1}{2} (2a_2^2 - 4a_2 a_3 + 4a_3^2) \\ &= a_1 + a_2 + a_3 - \frac{1}{2} (2a_2^2 - 4a_2 a_3 + 4a_3^2) \end{aligned}$$

$$\text{约束条件： } \sum_{i=1}^3 a_i y_i = a_1 + a_2 - a_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad a_1 + a_2 = a_3$$

$$\text{代入上式： } L(a_1, a_2) = 2a_1 + 2a_2 - 2a_1^2 - a_2^2 - 2a_1 a_2$$

习题8

硬间隔支持向量机

例：给出标签为+1的两个点 $x_1 = (0,0)^T$ 和 $x_2 = (1,1)^T$ ，以及标签为-1的一个点 $x_3 = (0,2)^T$ ，求硬间隔线性支持向量机。

解： $L(a_1, a_2) = 2a_1 + 2a_2 - 2a_1^2 - a_2^2 - 2a_1a_2$

求偏导，并令其为0：

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial a_1} = 2 - 4a_1 - 2a_2 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial a_2} = 2 - 2a_2 - 2a_1 = 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{matrix} a_1 = 0 \\ a_2 = 1 \end{matrix} \quad \Rightarrow \quad a_3 = 1$$

分离超平面和偏置分别为：

$$\omega = \sum_{i=1}^3 a_i y_i x_i = (1, -1)^T, \quad b = \frac{(y_2 - \omega^T x_2) + (y_3 - \omega^T x_3)}{2} = 1$$