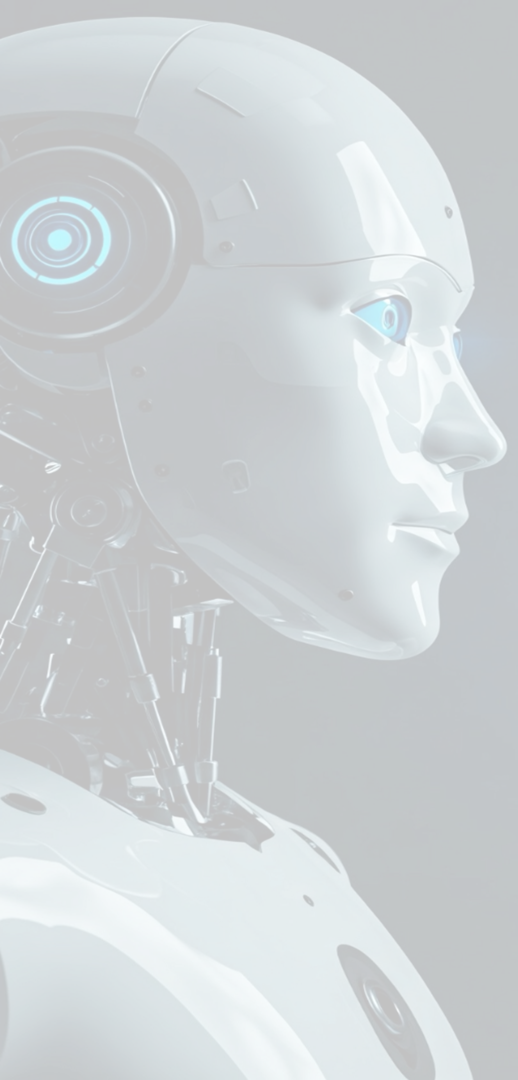


TRƯỜNG ĐẠI HỌC GIAO THÔNG VẬN TẢI TP.HCM

VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ ĐIỆN, ĐIỆN TỬ

PHƯƠNG PHÁP TOÁN CHO MÁY HỌC

CHƯƠNG IV: MỘT SỐ VẤN ĐỀ VỀ TỐI ƯU HOÁ

TS. Trần Thế Vinh

TỐI ƯU HOÁ TRONG MÁY HỌC

Vai trò của tối ưu hoá trong máy học là cực kỳ quan trọng, nó gần như là trái tim của mọi thuật toán học máy, gần như mọi thuật toán máy học đều có một bài toán tối ưu "ẩn bên trong".

- Huấn luyện mô hình: Tối ưu hoá được dùng để tìm tập tham số tối ưu của mô hình sao cho hàm mất mát (loss function) là nhỏ nhất có thể
- Điều chỉnh siêu tham số (Hyperparameter tuning): Sử dụng các thuật toán tối ưu như Grid Search, Bayesian, Optimization, Random Search để tìm: learning rate, số lớp, số node (neural net), C, gamma (SVM), số cây (Random Forest),…
- Giảm chiều dữ liệu: PCA là bài toán tìm ma trận chiếu sao cho giữ lại phương sai lớn nhất.
- Học tăng cường (Reinforcement Learning): Agent phải tối đa hoá phần thưởng (reward) tích luỹ trong môi trường → Đây là bài toán tối ưu trong không gian hành động.
- Deep Learning: Các mô hình CNN, RNN, Transformer đều được huấn luyện bằng thuật toán gradient descent, một kỹ thuật tối ưu để cập nhật trọng số theo đạo hàm của hàm mất mát.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Bài toán tối ưu tổng quát :

Xét f: $X \to \mathbb{R}$, X là một không gian nào đó. Tìm $x^* \in D \subset X$: $f(x^*) = (\max)\min\{f(x): x \in D\}$,

$$\text{hay: } \begin{cases} f(x) \to \max\ (\min) \\ \quad x \in D \end{cases} \qquad (1)$$

Hay: Tìm: $x^* = \arg\max\limits_{x \in D} f(x)$ (hoặc: $x^* = \arg\min\limits_{x \in D} f(x)$)

- Gọi f(x) là hàm mục tiêu, tập xác định X kí hiệu là *dom*(f) (*dom*: *domain*)
- Điều kiện: $x \in D$ là điều kiện ràng buộc, D là miền ràng buộc hay tập phương án chấp nhận được, x^* là phương án (hay nghiệm) tối ưu toàn cục, $f(x^*)$ là giá trị tối ưu toàn cục.
- Nếu D = X thì (1) được gọi là bài toán tối ưu không ràng buộc
- Nếu $X \setminus D \neq \emptyset$ thì (1) được gọi là bài toán tối ưu có ràng buộc
- Nếu $x^{(*)} = \arg\max\limits_{x \in C} f(x)$ (hoặc: $x^{(*)} = \arg\min\limits_{x \in C} f(x)$) $(C \subset D)$ thì $x^{(*)}$ gọi là phương án tối ưu địa phương của (1)

- Điều kiện ràng buộc $x \in D$ thường xuất hiện ở các dạng sau:
  - ✓ Ràng buộc đẳng thức: F(x) = 0 (F là hàm xác định trên X)
  - ✓ Ràng buộc bất đẳng thức: $f_i(x) \geq (\leq) 0, i = \overline{1, m}$ $\left(f_i: X \to \mathbb{R}, i = \overline{1, n}\right)$
  - ✓ Ràng buộc $x \in D$, với D là tập hợp cho trước trong X.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Ví dụ:

1. Huấn luyện mô hình hồi quy tuyến tính:

   Mục tiêu: Tìm vector hệ số θ sao cho mô hình dự đoán ít sai số nhất

   Hàm mục tiêu:

   Hàm mất mát bình phương trung bình (Mean Squared Error - MSE):

$$f(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \theta^T x_i)^2$$

   Tập xác định: Toàn bộ không gian $\mathbb{R}^d$ (vì không ràng buộc) → Đây là bài toán tối ưu không ràng buộc

2. Regularized Logistic Regression (với ràng buộc):

   Mục tiêu: Tìm tham số $\theta \in \mathbb{R}^d$ sao cho mô hình dự đoán chính xác nhất (minimize loss), đồng thời không bị overfitting (tối ưu có ràng buộc norm của θ)

   Ràng buộc: Đây là ràng buộc bất đẳng thức dạng hình cầu: $\|\theta\| \leq C$ (với C > 0 là hằng số) → điều này yêu cầu tất cả vector hệ số θ nằm trong hình cầu bán kính C (không được quá phức tạp để tránh overfitting)

   Hàm mục tiêu: Hàm loss là Logistic Loss + L2 Regularization.

$$\min_{\theta \in \mathbb{R}^d} f(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} log\left(1 + e^{-y_i\theta^T x_i}\right) + \lambda\|\theta\|^2$$

$$\|\theta\| \leq C$$

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Phân loại các bài toán tối ưu:

Quy hoạch tuyến tính (Linear Programming):

Định nghĩa:

Giải bài toán tối ưu có hàm mục tiêu và ràng buộc tuyến tính

$$\min c^T x \text{ Subject to } Ax \leq b$$

Thuật toán chính:

- Simplex: hiệu quả trong thực tế, di chuyển trên các đỉnh của đa diện nghiệm.
- Interior-Point Method: tiếp cận từ bên trong miền nghiệm.

Tính chất:

- Lồi: Bài toán LP là bài toán lồi ⇒ mọi nghiệm cực tiểu cục bộ cũng là cực tiểu toàn cục.
- Tập nghiệm là đa diện lồi.
- Nghiệm tối ưu nằm ở đỉnh (corner point) của tập nghiệm.

Quy hoạch phi tuyến tính(Nonlinear Programming)

Định nghĩa:

Tối ưu hoá với hàm mục tiêu hoặc ràng buộc phi tuyến.

$$\min f(x) \;\; subject\ to\ g(x) \leq 0, h(x) = 0$$

Thuật toán chính:

- Gradient Descent / Ascent
- Newton’s Method / Quasi-Newton (BFGS, L-BFGS)
- Sequential Quadratic Programming (SQP)
- Interior-point cho NLP

Tính chất:

- Có thể không lồi, dễ gặp cực tiểu cục bộ.
- Phụ thuộc vào khởi tạo ban đầu.
- Có thể có nhiều nghiệm.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Phân loại các bài toán tối ưu:
Quy hoạch rời rạc(Integer / Combinatorial Programming)

Định nghĩa:
Tối ưu với các biến rời rạc, số nguyên, hoặc nhị phân.

Thuật toán chính:
- Branch and Bound
- Branch and Cut
- Dynamic Programming (với cấu trúc con)
- Backtracking / Heuristics / Metaheuristics (GA, SA)

Tính chất:
- Là bài toán NP-Hard trong nhiều trường hợp.
- Không thể giải chính xác trong thời gian đa thức cho bài toán lớn.
- Thường dùng xấp xỉ hoặc tối ưu hoá heuristic.

Quy hoạch động
Định nghĩa:
Tối ưu chuỗi quyết định theo thời gian, với quan hệ hồi quy.

Thuật toán chính:
- Bellman Equation
- Bottom-up / Top-down (memoization)

Tính chất:
- Phù hợp cho bài toán có cấu trúc con tối ưu.
- Hiệu quả nếu trạng thái và hành động nhỏ.
- Thường được dùng trong Reinforcement Learning (ví dụ: Value Iteration, Policy Iteration).

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Phân loại các bài toán tối ưu:
Quy hoạch đa mục tiêu

Định nghĩa:
Tối ưu nhiều mục tiêu cùng lúc (mâu thuẫn nhau).

Thuật toán chính:
- Pareto Optimization (tìm tập nghiệm không bị chi phối)
- Weighted Sum Method
- NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm)
- ε-constraint Method

Tính chất:
- Không có duy nhất một nghiệm tối ưu, mà là tập nghiệm Pareto.
- Phân tích đánh đổi (trade-off) giữa các mục tiêu.

Quy hoạch ngẫu nhiên
Định nghĩa:
Bài toán tối ưu có chứa biến ngẫu nhiên.
Thuật toán chính:
- Sample Average Approximation (SAA)
- Stochastic Gradient Descent (SGD) – rất phổ biến trong Deep Learning
- Monte Carlo Methods

Tính chất:
- Dùng kỳ vọng toán học trong mục tiêu.
- Cần nhiều dữ liệu mẫu hoặc mô phỏng.
- Có thể hội tụ chậm (do nhiễu).

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Ví dụ:

(Bài toán Nhà xuất bản) Một NXB nhận được 2 đơn hàng về một cuốn sách: 800 cuốn tới tỉnh A, 600 cuốn tới tỉnh B. NXB hiện có 1000 cuốn ở địa điểm C và 800 cuốn ở địa điểm D. Đơn giá chuyển một cuốn từ C tới A là 50 ngàn đồng, tới B là 80 ngàn đồng. Đơn giá chuyển một cuốn từ D tới A là 100 ngàn đồng, tới B là 40 ngàn đồng. Tìm phương án vận chuyển 2 đơn hàng nói trên sao cho tổng chi phí chuyển phát là ít nhất.

Với ví dụ trên, ta thiết lập MH toán học cho bài toán như sau:

- ✓ *Các biến cần thiết*: x_1 là số lượng cuốn sách cần chuyển phát từ C đến A, x_2 là số lượng cuốn sách cần chuyển phát từ C đến B, x_3 là số lượng cuốn sách cần chuyển phát từ D đến A, x_4 là số lượng cuốn sách cần chuyển phát từ D đến B. Mỗi phương án chuyển phát là: $x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{R}^4$
- ✓ Hàm mục tiêu: Tổng chi phí chuyển phát là:

$$f(x) = 50.x_1 + 80.x_2 + 100.x_3 + 40.x_4$$

- ✓ Điều kiện ràng buộc

Ràng buộc hàm: Số cuốn chuyển phát đến A: $x_1 + x_3 = 800$

Số cuốn chuyển phát đến B: $x_2 + x_4 = 600$

Số cuốn chuyển phát từ C: $x_1 + x_2 \le 1000$

Số cuốn chuyển phát từ D: $x_3 + x_4 \le 800$

Ràng buộc biến: $x_1, x_2, x_3, x_4 \in \mathbb{N}$

- ✓ Mô hình toán học của bài toán là: Tìm $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ sao cho:

$$f(x) = 50.x_1 + 80.x_2 + 100.x_3 + 40.x_4 \to \min \begin{cases} x_1 + x_3 = 800 \\ x_2 + x_4 = 600 \\ x_1 + x_2 \le 1000 \\ x_3 + x_4 \le 800 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 \in \mathbb{N} \end{cases}$$

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Ứng dụng:
Nhiều bài toán thực tế có thể được giải quyết bằng phương pháp tối ưu toán học. Điều quan trọng là từ bài toán thực tế cần xây dựng một mh tối ưu để áp dụng các phương pháp tối ưu toán học và quy trình tính toán thích hợp để tìm ra lời giải.

Các bước thực hiện là:

- ✓ Khảo sát bài toán thực tế và vấn đề cần giải quyết;
- ✓ Lựa chọn các biến quyết định, biểu diễn các điều kiện ràng buộc thông qua các ràng buộc đối với các biến, biểu diễn hàm mục tiêu theo các biến và các định mục tiêu (min/max) và chỉ ra mô hình toán học;
- ✓ Chọn phương pháp giải thích hợp;
- ✓ Xác định quy trình giải/thuật toán;
- ✓ Kiểm tra lại quy trình giải (phương pháp lựa chọn, thuật toán,...) để nếu có sai sót thì điều chỉnh;
- ✓ Kiểm tra sự phù hợp giữa lời giải với thực tế, so sánh hiệu quả của phương án tìm được với các phương án đưa ra trước đây.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Tập lồi và hàm lồi:
Trong toán tối ưu, chúng ta đặc biệt quan tâm tới những bài toán mà hàm mục tiêu là một hàm lồi, và miền ràng buộc là một tập lồi.
Điểm $x^0 \in S$ được gọi là điểm cực biên của tập lồi S, nếu nó không là điểm trong của bất kỳ đoạn thẳng nào nối 2 điểm phân biệt trong S

Các khái niệm về tập lồi
ĐN. Tập $D \subset \mathbb{R}^n$ được gọi là một tập lồi nếu mọi đoạn thẳng nối 2 điểm bất kỳ của D đều nằm trọn trong D, tức là:

$$\forall x, y \in D \text{ thì: } \boldsymbol{\lambda}.x + (1 - \boldsymbol{\lambda}).y \in D, \forall \boldsymbol{\lambda} \in [0, 1]$$

Minh họa:

D là tập lồi

D’ không phải tập lồi

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Các ví dụ:

Cho $a, b \in \mathbb{R}^n, a = (a_1\ a_2 \dots a_n)^T, b = (b_1\ b_2 \dots b_n)^T, r > 0$

Các tập hợp sau là các tập lồi:

$D_1 = \{x = (x_1\ x_2 \dots x_n)^T \in \mathbb{R}^n\colon\ a^T.x = b\}$**:** Siêu phẳng trong $\mathbb{R}^n$ (*Hyerplane*)

$D_2 = \{x = (x_1\ x_2 \dots x_n)^T \in \mathbb{R}^n\colon\ a^T.x \le (\ge) b\}$**:** Nửa không gian trong $\mathbb{R}^n$ (*Halfspace*)

$B(a, r) = \{x = (x_1\ x_2 \dots x_n)^T \in \mathbb{R}^n\colon\ \|x - a\|_2 \le r\}$**:** Hình cầu đóng tâm a, bán kính r

Tổ hợp lồi, đa diện lồi:

Trong $\mathbb{R}^n$ cho k điểm $x^1, x^2, \dots, x^k$ và k số không âm: $t_1, t_2, \dots, t_k$ với: $t_1 + t_2 + \dots + t_k = 1$, khi đó:

$x = t_1.x^1 + t_2.x^2 + \dots + t_k.x^k$ gọi là một tổ hợp lồi của k điểm $x^1, \dots, x^k$

Tập tất cả các tổ hợp lồi của k điểm $x^1, x^2, \dots, x^k$ được gọi là đa diện lồi sinh bởi hệ k điểm $x^1, x^2, \dots, x^k$.

Chú ý:

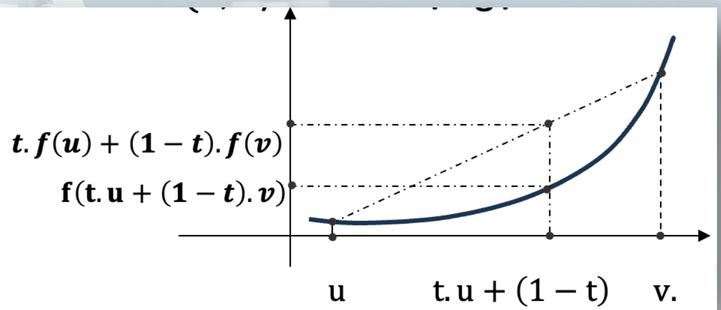
- ✓ Giao của một họ các tập lồi là một tập lồi;
- ✓ Nếu S là một tập lồi thì S chứa mọi tổ hợp lồi của một họ điểm bất kỳ trong S;
- ✓ Mỗi đa diện lồi là một tập lồi.

  ** Trong thực tế, tập lồi rất được quan tâm bởi tính chất ưu việt của nó: Với một căn phòng là hình lồi thì khi đặt bóng đèn ở bất kỳ điểm nào trong phòng thì mọi vị trí của căn phòng đều được chiếu sáng; trong một đất nước có bản đồ hình lồi thì hai thành phố bất kỳ đều có thể kết nối bởi một tuyến đường thẳng, nó cho phép thiết lập các tuyến đường bay nội địa là các đường bay thẳng (tiết kiệm được thời gian và chi phí cho mỗi chuyến bay),...*

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Hàm lồi
Định nghĩa:
Hàm số f: $X(\subset \mathbb{R}^n) \to \mathbb{R}$ được gọi là một hàm lồi (lõm), nếu thỏa các đ/k:
dom(f) = X là một tập lồi (1)
$f(t.u + (1-t).v) \leq (\geq)\ t.f(u) + (1-t).f(v), \forall u, v \in X, \forall t \in [0,1]$ (2)
Nếu trong bất đẳng thức (2) không có dấu "= " $\forall t \in (0,1)$ thì f được gọi là hàm lồi (lõm) chặt.

Ý nghĩa hình học:
Xét hàm lồi một biến số: $y = f(x)$.
Khi đó: với mọi dây cung thì cung đồ thị tương ứng luôn nằm phía dưới dây cung.
Nếu f(x) là hàm số lồi chặt và có điểm cực thì điểm cực trị đó là duy nhất và do đó là cực trị toàn cục.



Các tính chất: Cho $f(x), f_1(x), f_{2(x)} \ldots, f_m(x)$ là các hàm lồi và số thực a. Khi đó:
- Với a > 0 thì a. f(x) là hàm lồi và với a < 0 thì a. f(x) là hàm lõm.
- $F(x) = f_1(x) + f_2(x) + \cdots + f_m(x)$ là một hàm lồi.
- $h(x) = \max\{ f_1(x), f_{2(x)} \ldots, f_m(x)\}$ là một hàm lồi.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Hàm lồi
Phương pháp kiểm tra tính lồi của hàm số nhờ đạo hàm:

Xét hàm lồi f(x) xác định và có đạo hàm trên tập lồi $X \subset \mathbb{R}^n$

- f(x) là hàm lồi $\Leftrightarrow f(u) \geq f(v) + \nabla f(v)^T.(u - v), \forall u, v \in dom(f) = X$
- f(x) là hàm lồi chặt $\Leftrightarrow f(u) > f(v) + \nabla f(v)^T.(u - v), \forall u, v \in X, u \neq v$
- f(x) có đạo hàm cấp 2 là hàm lồi (hoặc lồi chặt) nếu Hesse tại mọi điểm là ma trận bán xác định dương (hoặc xác định dương), tức là: $\nabla^2 f(x) \geq 0 (> 0), \forall x \in dom(f)$

Ý nghĩa hình học: Hàm f(x) là lồi khi và chỉ khi đồ thị của nó không nằm dưới mọi siêu phẳng tiếp xúc.

Một số ví dụ quan trọng:

Một số hàm lồi một biến:

- y = a.x + b (a, b là các hằng số)
- $y = ax^2 + b.x + c \ (a > 0)$
- $y = e^{\alpha.x}$ (α là hằng số bất kỳ)
- $y = x^\alpha, x > 0$ (α là hằng số $\notin (0, 1)$)
- $y = x.\log x$ (hàm entropy âm)

Một số hàm lồi nhiều biến:

1. Các hàm affin:

- $f(x) = a^T.x + b, x \in \mathbb{R}^n$ (a cho trước $\in \mathbb{R}^n$, b là hằng số)
- $f(X) = trace(A^T.X) + b, X \in \mathbb{R}^{m\times n}$ (A cho trước $\in \mathbb{R}^{m\times n}$, b là hằng số)

2. Các dạng toàn phương:

$$f(x) = x^T.A.x + b^T.x + c, x \in \mathbb{R}^n$$

(A cho trước $\in \mathbb{R}^{n\times n}$, b cho trước $\in \mathbb{R}^n$, c là hằng số)

3. Các chuẩn trong các không gian định chuẩn.

Một số hàm lõm:

- f(x) = a.x + b;
- $y = ax^2 + b.x + c \ (a < 0)$;
- $y = x^\alpha, x > 0$ (α là hằng số: $0 \leq \alpha \leq 1$);
- $y = \log x,\ x > 0$.

Các ví dụ về các hàm không lồi, không lõm:

- $y = ax^3 + bx^2 + c.x + d, a \neq 0$ (a, b, c, d là các hằng số);
- $z = x^2 - y^2$ (hàm hyperbolic); ...

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Bài toán tối ưu lồi (Quy hoạch lồi).
Các khái niệm
Định nghĩa: Bài toán tối ưu lồi là bài toán tối ưu có dạng:

$$x^* = \arg\min_x f(x)$$

$$\begin{cases} f_i(x) \le 0, i = \overline{1, m} \\ h_j(x) = a_j^T.x - b_j = 0, j = \overline{1, n} \end{cases}$$

Trong đó $f, f_1, \dots, f_m$ là các hàm lồi
Nhận xét: Trong bài toán tối ưu lồi, hàm mục tiêu được tối ưu trên một tập lồi (trong các bất đẳng thức ràng buộc: các hàm $f_1, \dots, f_m$ là các hàm lồi, trong các đẳng thức ràng buộc: các hàm h_j là các hàm affine).

Các tính chất của bài toán tối ưu lồi
Cực trị địa phương của bài toán tối ưu lồi là cực trị toàn cục (t/c quan trọng nhất của bài toán tối ưu lồi)
Điều kiện tối ưu cho hàm mục tiêu khả vi: Phương án $x_0 \in D$ (tập tất cả các phương án) là phương án tối ưu cho bài toán tối ưu lồi $\Leftrightarrow \nabla f(x_0)^T(x - x_0) \ge 0, \forall x \in D$.

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Một số dạng bài toán tối ưu lồi.

Quy hoạch tuyến tính:

Hàm mục tiêu f và các hàm ràng buộc $f_1, \ldots, f_m$ đều là các hàm affine

Quy hoạch tuyến tính dạng tổng quát:

$$x^* = \arg\min_x (c^T.x + d)$$

$$\begin{cases} G.x \preccurlyeq h \\ A.x = b \end{cases}$$

Trong đó: $G \in \mathbb{R}^{m \times n}, A \in \mathbb{R}^{k \times n}, b \in \mathbb{R}^k, c, x \in \mathbb{R}^n, d \in \mathbb{R}$

Quy hoạch tuyến tính dạng tổng quát có thể đưa về dạng chuẩn sau đây.

Quy hoạch tuyến tính dạng chuẩn:

$$x^* = \arg\min_x (c^T.x + d)$$

$$\begin{cases} A.x = b \\ x \succcurlyeq 0 \end{cases}$$

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Ví dụ 1 (Bài toán cắt vật liệu):
Cần mua những thanh vật liệu có cùng độ dài L để cắt thành: n_1 đoạn có độ dài L_1, n_2 đoạn có độ dài L_2, ..., n_k đoạn có độ dài L_k ($L_i \leq L, \forall i = \overline{1,k}$). Hãy lập phương án cắt vật liệu sao cho tổng số vật liệu dư thừa là ít nhất.

Thiết lập mô hình toán học: Gọi n là số cách cắt một thanh thành các đoạn con theo yêu cầu trên (để xác định n, cần lập bảng liệt kê các cách cắt cho từng bài toán cụ thể). Gọi x_j là số thanh được cắt theo cách thứ j , d_j là độ dài phần dư của một thanh được cắt theo cách thứ j, $j = \overline{1,n}$ ($d_j \leq \min\{L_1, L_2, \ldots, L_k\}$), a_{ij} là số đoạn có độ dài L_i cắt ra từ một thanh được cắt theo cách thứ j, $i = \overline{1,k}$, $j = \overline{1,n}$.
Khi đó mỗi $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$ là một phương án cắt và tổng độ dài của các đoạn dư thừa là $\sum_{j=1}^{n} d_j . x_j$;.
Mô hình toán học có dạng:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} d_j . x_j \rightarrow \min$$

$$\begin{cases} a_{i1} . x_1 + a_{i2} . x_2 + \cdots + a_{in} . x_n = n_i, i = \overline{1,n} \\ x_j \geq 0, j = 1,2, \ldots, n \end{cases}$$

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Ví dụ (Bài toán vận tải):
Trong một khu vực kinh tế có m điểm A1, A2,..., Am cung cấp một loại hàng với khối lượng tương ứng là S1, S2,..., Sm (tấn) tương ứng và có n điểm tiêu thụ loại hàng này là B1, B2,..., Bn với nhu cầu tương ứng là R1, R2, ..., Rn (tấn). Hãy lập kế hoạch vận chuyển hàng hóa sao cho các điểm cung giao hết hàng, nếu S1 + S2 +... + Sm ≤ R1 + R2 + ... + Rn, hoặc các điểm tiêu thụ nhận đủ hàng nếu S1 + S2 +... + Sm ≥ R1 + R2 + ... + Rn, với tổng chi phí vận chuyển là thấp nhất.

- Gọi A1, A2,..., Am là các điểm phát, B1, B2,..., Bn là các điểm thu, S1 + S2 +... + Sm = S là tổng phát, và R1 + R2 + ... + Rn = R là tổng thu. Nếu S = R, ta có bài toán vận tải cân bằng thu – phát. Nếu S ≠ R, ta có bài toán vận tải không cân bằng thu – phát
- Thiết lập MH cho BTVT: Kí hiệu c_{ij} là chi phí vận chuyển một tấn hàng nói trên từ điểm phát Ai đến điểm thu Bj, ta có ma trận C = (c_{ij}) gọi là ma trận cước phí. Kí hiệu x_{ij} (tấn) là lượng hàng vận chuyển từ Ai đến Bj, ta có ma trận $x = (x_{ij})$ là phương án vận chuyển.

Khi đó tổng lượng hàng chuyển đi từ điểm phát Ai là $\sum_j x_{ij}$, tổng lượng hàng chuyển tới Bj là $\sum_i x_{ij}$ và tổng chi phí vận chuyển là: $f(x) = \sum_i \sum_j c_{ij}.x_{ij}$ (hàm mục tiêu)

1. ***Mô hình toán học cho bài toán vận tải đóng* (S = R):**

$$f(x) = \sum_i \sum_j c_{ij}.x_{ij} \to \min$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} x_{ij} = S_i, i = 1,2,\dots,m \\ \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = R_j, j = 1,2,\dots,n \\ x_{ij} \geq 0, \forall i = \overline{1,m}, \forall j = \overline{1,n} \end{cases}$$

Chú thích: BTVT đóng có thể được giải bằng phương pháp thế vị.

2. ***Mô hình toán học cho BTVT mở khi* S < R:** Bổ sung thêm một điểm phát giả thứ (m + 1) với lượng hàng phát: $S_{m+1} = R - S$, và mọi cước phí vận chuyển từ điểm phát giả đều = 0, tức là: $c_{m+1,j} = 0, \forall j = \overline{1,n}$, nhận được BTVT đóng.
3. ***Mô hình toán học cho BTVT mở khi* S > R:** Bổ sung thêm một điểm thu giả thứ (n + 1) với lượng hàng thu: $R_{n+1} = S - R$, và mọi cước phí vận chuyển đến điểm thu giả đều = 0, tức là: $c_{i,n+1} = 0, \forall i = \overline{1,m}$, nhận được BTVT đóng

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Dạng toàn phương:

Sự khác biệt của dạng toàn phương so với quy hoạch tuyến tính là hàm mục tiêu có dạng toàn phương.

✓ *Mô hình toán học*:

$$x^* = \arg\min_{x\in\mathbb{R}^n}\left(\frac{1}{2}x^T.P.x + q^T.x + c\right)$$

$$\begin{cases} G.x \preccurlyeq h \\ A.x = b \end{cases}$$

(Trong đó: cho trước P là ma trận vuông cấp n, bán xác định dương, các ma trận $G \in \mathbb{R}^{m\times n}, A \in \mathbb{R}^{k\times n}, q \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^k, h \in \mathbb{R}^m$ và c là một hằng số).

Như vậy quy hoạch dạng toàn phương là một dạng toàn phương được tối thiểu trên một đa diện lồi D trong $\mathbb{R}^n$.

✓ *Ví dụ (Bài toán tìm đường đi ngắn nhất từ một điểm tới một đa diện lồi)*

Cần xác định hướng đi của một con thuyền đang ở ngoài biển tới một hòn đảo có hình tiếp nước là đa giác lồi sao cho đường đi ngắn nhất.

Gọi a là vị trí hiện tại của con thuyền trên biển, x là điểm trên thiết diện tiếp nước D của hòn đảo (D là đa giác lồi: xác định bởi: $G.x \preccurlyeq h$ với G là một ma trận vuông cấp 2, $h \in \mathbb{R}^2$).

Bình phương hoảng cách từ a tới x là:

$$\|x - a\|_2^2 = (x - a)^T.(x - a) = x^T.I.x - a^T.x + a^T.a.$$

Vậy mô hình toán học của bài toán là:

$$x^* = \arg\min_{x\in\mathbb{R}^n}\left(\frac{1}{2}x^T.I.x - \frac{1}{2}a^T.x + \frac{1}{2}a^T.a\right)$$

$$G.x \preccurlyeq h$$

BÀI TOÁN TỐI ƯU

Dạng quy hoạch hình học:

Mô hình toán học:

$$x^* = \arg\min_{x} f(x)$$

$$\begin{cases} f_i(x) \leq 1, i = \overline{1, m} \\ h_j(x) = 1, j = \overline{1, k} \\ x \succ 0 \end{cases}$$

(với: $f(x), f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$là các đa thức, $h_1(x), \dots, h_k(x)$ là các đơn thức)

Hàm số $f: \mathbb{R}^n_{++} \to \mathbb{R}$ được gọi là một đơn thức (*monomial*), nếu:

$$f(x) = c.x_1^{s_1}.x_2^{s_2} \dots .x_n^{s_n}, \forall x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n_{++}$$

trong đó: hằng số $c > 0$, $s_1, s_2, \dots, s_n$ là các hằng số bất kỳ, $\mathbb{R}^n_{++}$ gồm các véc tơ của $\mathbb{R}^n$có tất cả các tọa độ đều > 0: $\mathbb{R}^n_{++} = \{x \in \mathbb{R}^n : x \succ 0\}$.

Hàm số f(x) có dạng là tổng các đơn thức:

$f(x) = \sum_{j=1}^{k} c_j.x_1^{s_{1j}}.x_2^{s_{2j}} \dots .x_n^{s_{nj}}$ được gọi là một đa thức (*posynomial*).

Chú thích: Có thể đưa mh trên về bài toán tối ưu lồi, bằng cách đặt $x_i = \exp(y_i)$

Chú ý:

- Bài toán tối ưu lồi nằm trong bài toán chung: Tìm cực trị có điều kiện của hàm nhiều biến, điều kiện là các ràng buộc hàm và ràng buộc biến.
- Bài toán tối ưu lồi có thể giải theo phương pháp nhân tử Lagrange, phương pháp xấp xỉ (Thuật toán Gradient descent, thuật toán Newton, thuật toán Frank-Wolfe)