탐색과 최적화

1. 상태 공간과 탐색

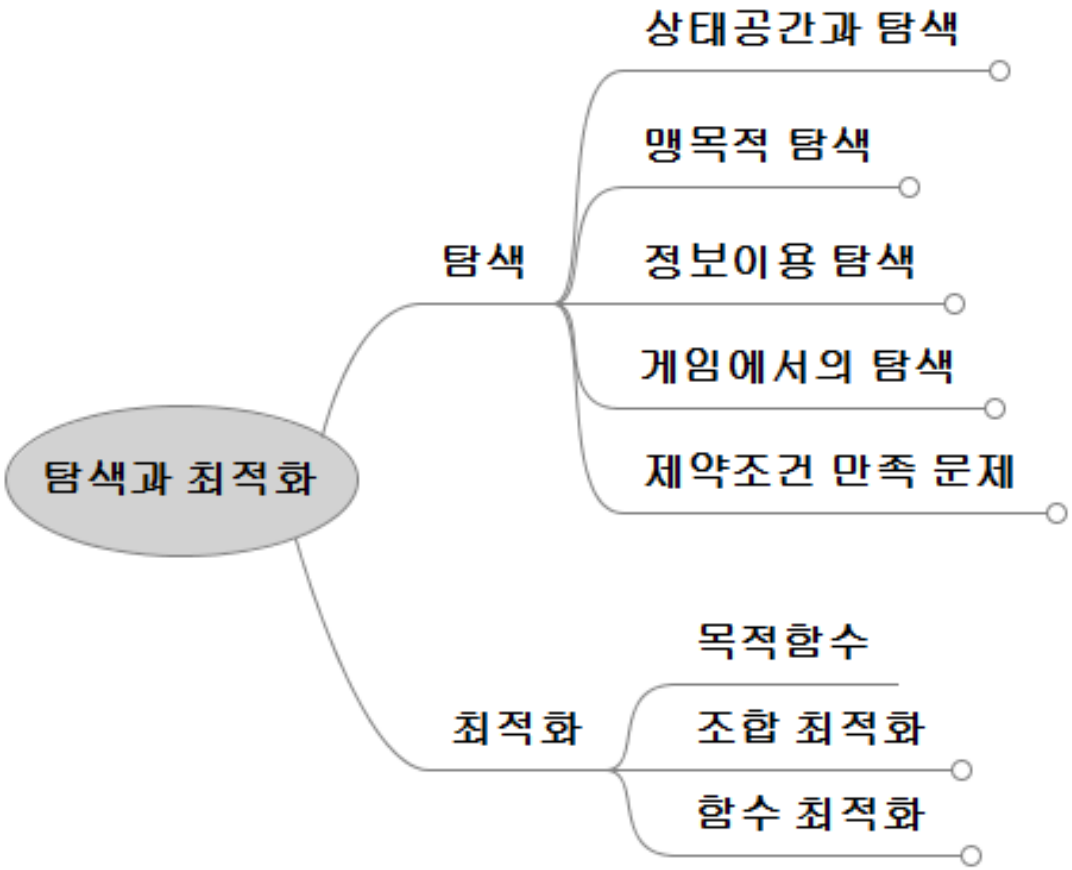
2. 맹목적 탐색

3. 정보이용 탐색

4. 게임 탐색

5. 제약조건 만족 문제

6. 최적화


탐색과 최적화
탐색
상태공간과 탐색
맹목적 탐색
정보이용 탐색
게임에서의 탐색
제약조건 만족 문제
최적화
목적함수
조합 최적화
함수 최적화

1. 상태 공간과 탐색

❖ **탐색** (探索, search)

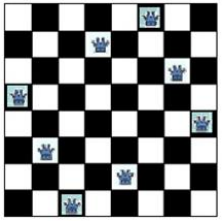
- 문제의 **해(solution)**이 될 수 있는 것들의 **집합**을 **공간**(space)으로 간주하고, 문제에 대한 **최적의 해**를 찾기 위해 공간을 **체계적으로 찾아 보는 것**

❖ **탐색문제의 예**

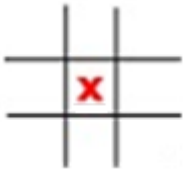
- **선교사-식인종 강건너기 문제**

- **8-퍼즐** 문제

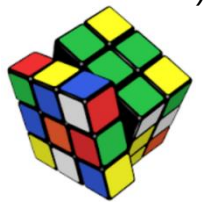
- **8-퀸**(queen) 문제



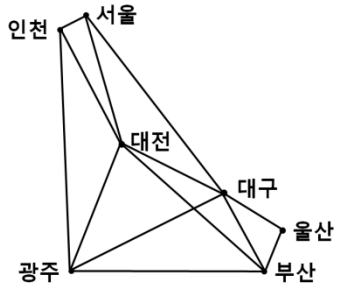
- **틱-택-토**(tic-tac-toe)



- **루빅스큐브** (Rubik's cube)



- **순회 판매자 문제 (**traveling salesperson problem, TSP**)**



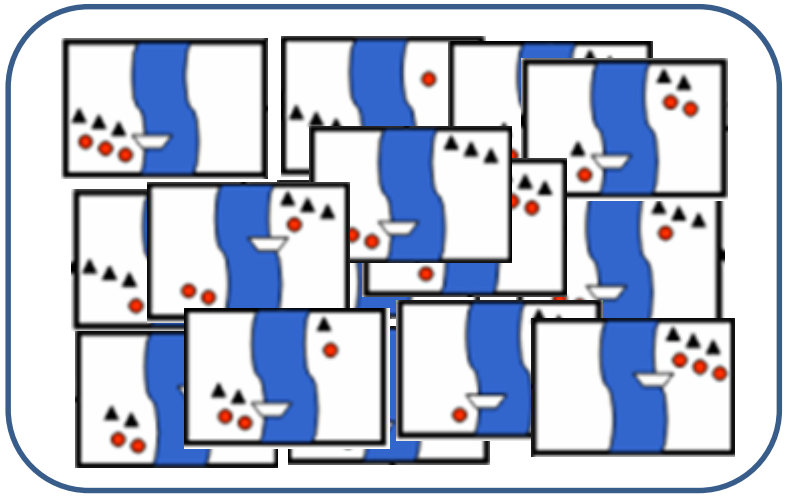
- **해(解, solution)**
  일련의 동작으로 구성되거나 **하나의 상태**로 구성

상태 공간과 탐색

❖ **상태(state)**
- 특정 시점에 **문제의 세계**가 처해 있는 모습


❖ **세계(world)**
- 문제에 포함된 **대상들**과 이들의 **상황**을 포괄적으로 지칭

❖ **상태 공간(state space)**
- 문제 해결 과정에서 **초기 상태로부터 도달할 수 있는 모든 상태들의 집합**
- 문제의 **해가 될 가능성**이 있는 **모든 상태들의 집합**



- **초기 상태(initial state)**

  - 문제가 주어진 시점의 시작 상태

- **목표 상태(goal state)**

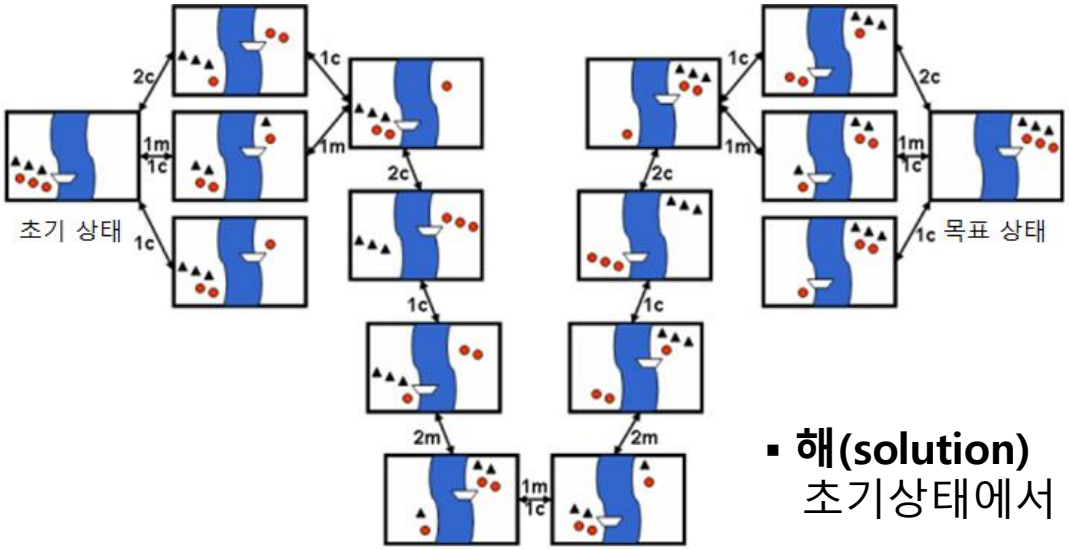
  - 문제에서 원하는 최종 상태

상태 공간과 탐색

❖ **상태 공간 그래프**(state space graph)

- **상태공간**에서 각 **행동**에 따른 **상태의 변화**를 나타낸 그래프
  - 노드 : 상태
  - 링크 : 행동

- **선교사-식인종 문제**



- **해(solution)**
  초기상태에서 목표 상태로의 경로(path)

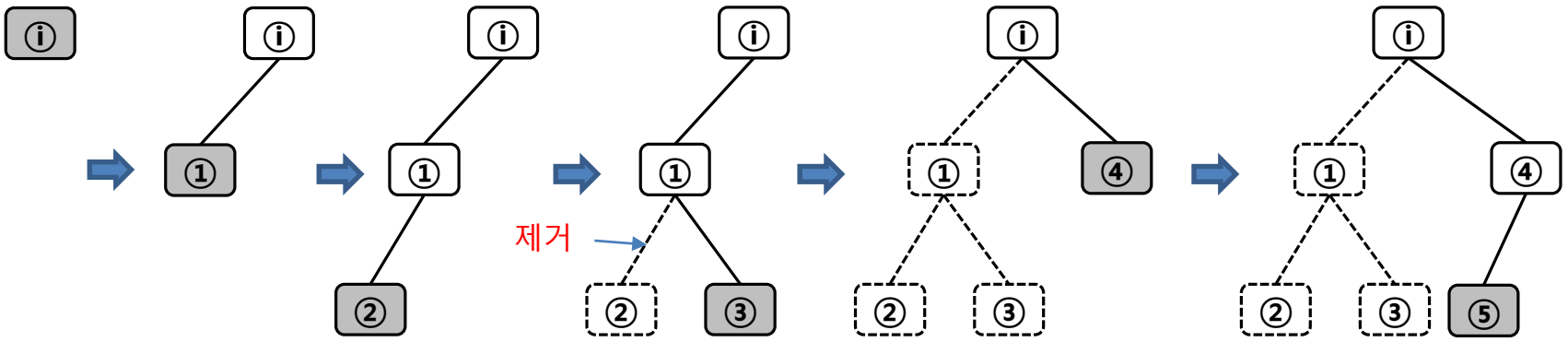
- 일반적인 문제에서는 **상태공간**이 **매우 큼**
  - 미리 상태 공간 그래프를 만들기 어려움
  - 탐색과정에서 그래프 생성

2. 맹목적 탐색

❖ **맹목적 탐색(blind search)**

- **정해진 순서**에 따라 **상태 공간 그래프**를 **점차 생성**해 가면서 해를 **탐색**하는 방법

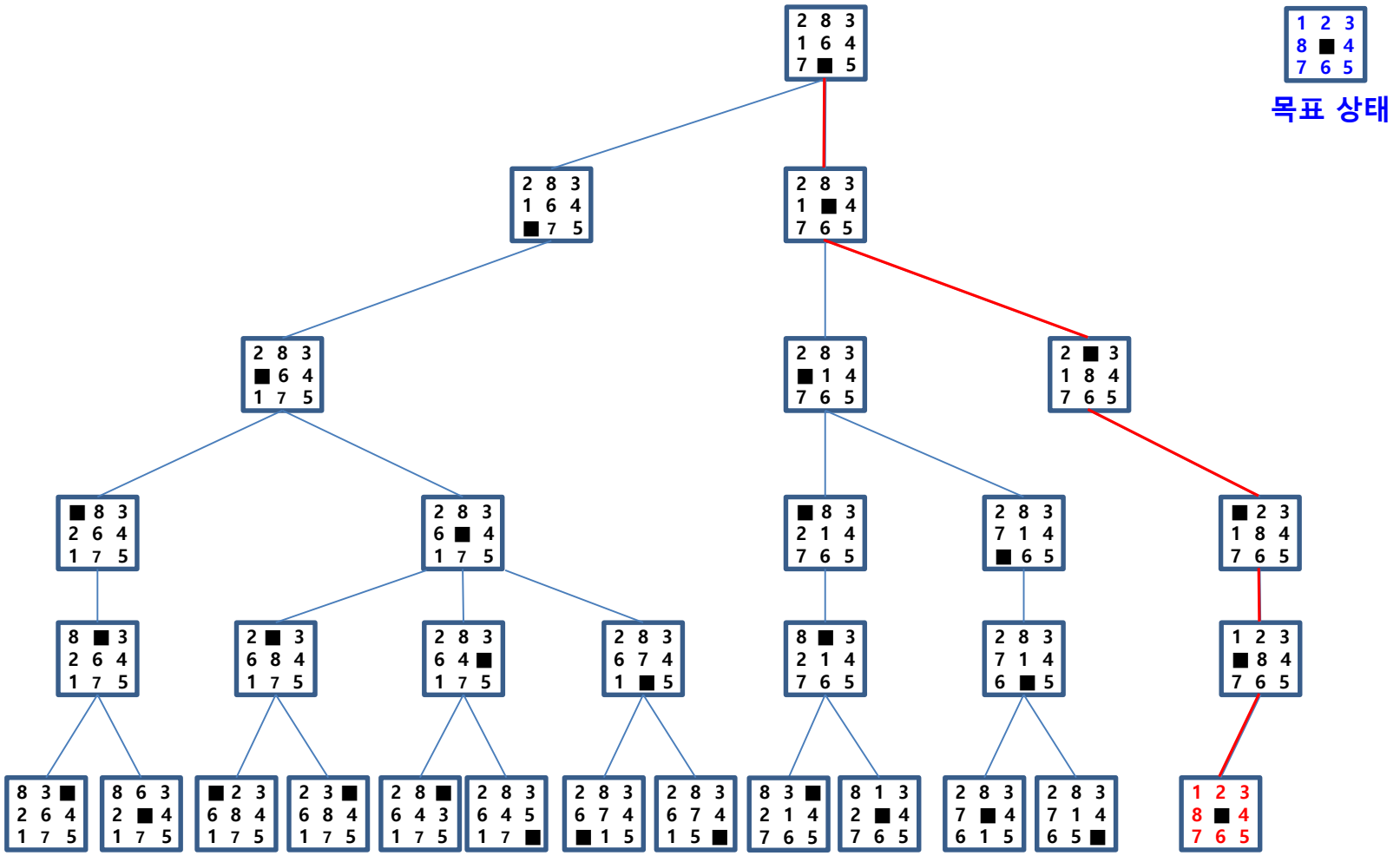
- **깊이 우선 탐색(depth-first search, DFS)**
  - 초기 노드에서 시작하여 **깊이 방향**으로 탐색
  - 목표 노드에 도달하면 종료
  - 더 이상 진행할 수 없으면, **백트랙킹**(backtracking, 되짚어가기)
  - 방문한 노드는 재방문하지 않음



맹목적 탐색

❖ **8-퍼즐 문제의 깊이 우선 탐색 트리**

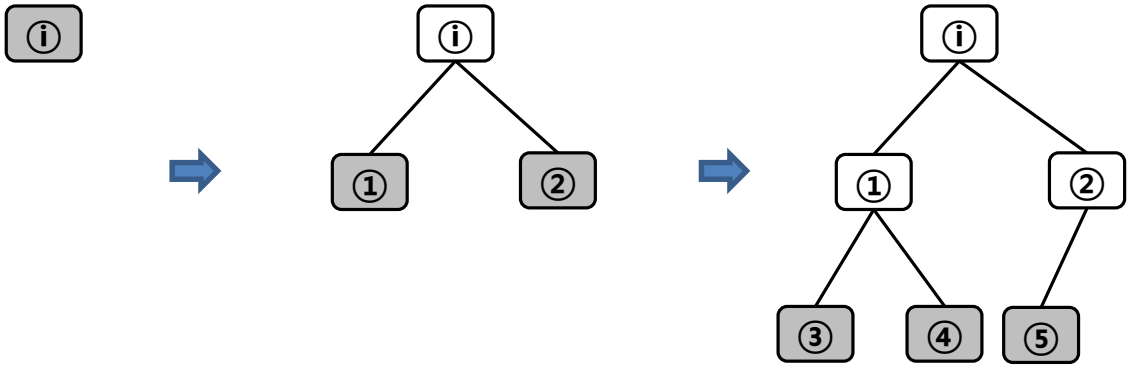
- 루트 노드에서 현재 노드까지의 **경로 하나만 유지**



맹목적 탐색

❖ **너비 우선 탐색**(breadth-first search, BFS)

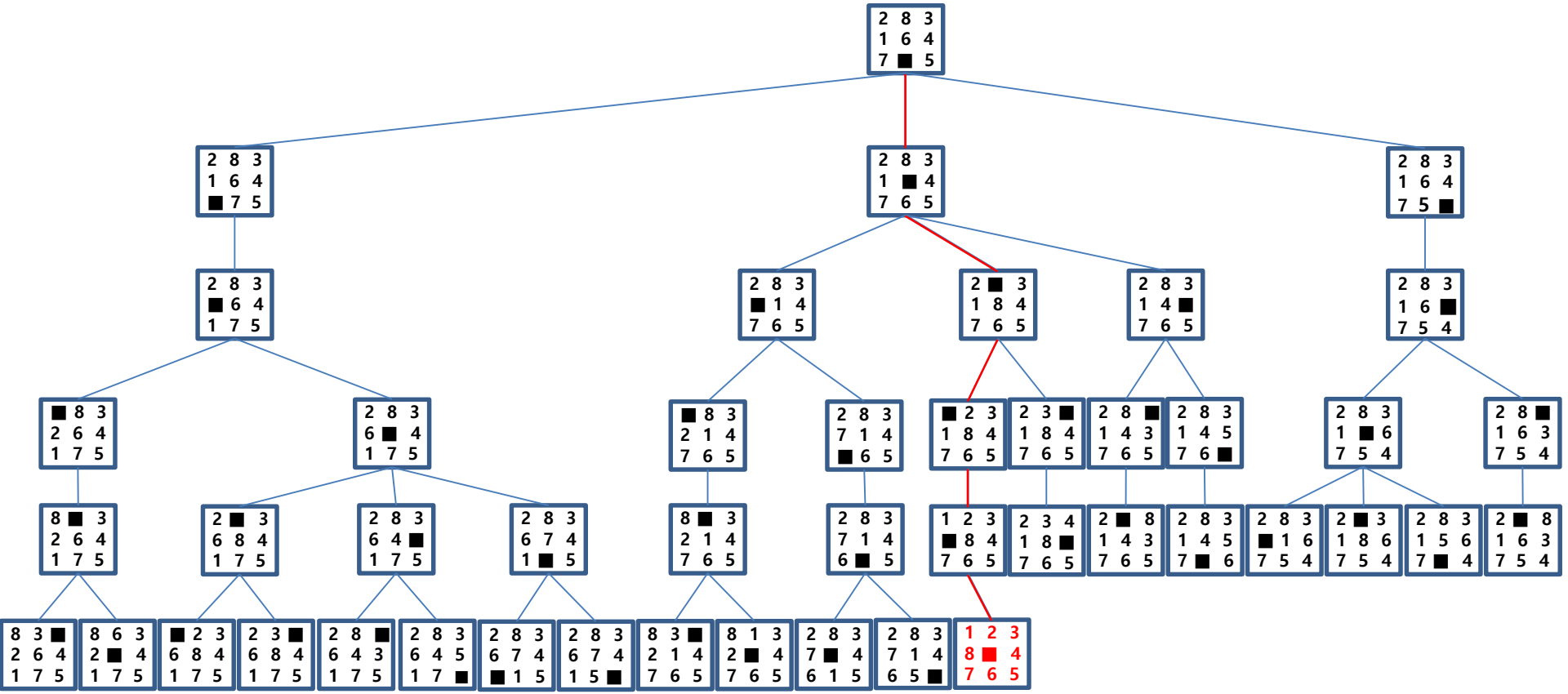
- 초기 노드에서 시작하여 **모든 자식 노드**를 **확장**하여 생성
- 목표 노드가 없으면 **단말노드**에서 다시 **자식 노드 확장**



맹목적 탐색

❖ **8-퍼즐 문제의 너비 우선 탐색 트리**

- **전체 트리**를 메모리에서 관리



맹목적 탐색

❖ **반복적 깊이심화 탐색**(iterative-deepening search)

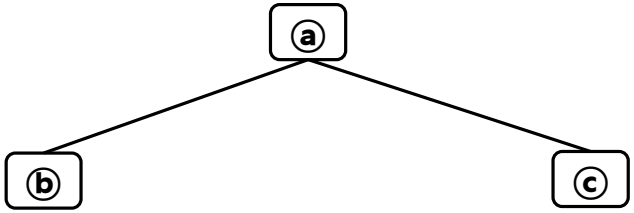
- **깊이 한계**가 있는 **깊이 우선 탐색**을 **반복적**으로 적용

깊이 0: ⓐ

맹목적 탐색

❖ **반복적 깊이심화 탐색**(iterative-deepening search)

- **깊이 한계**가 있는 **깊이 우선 탐색**을 **반복적**으로 적용

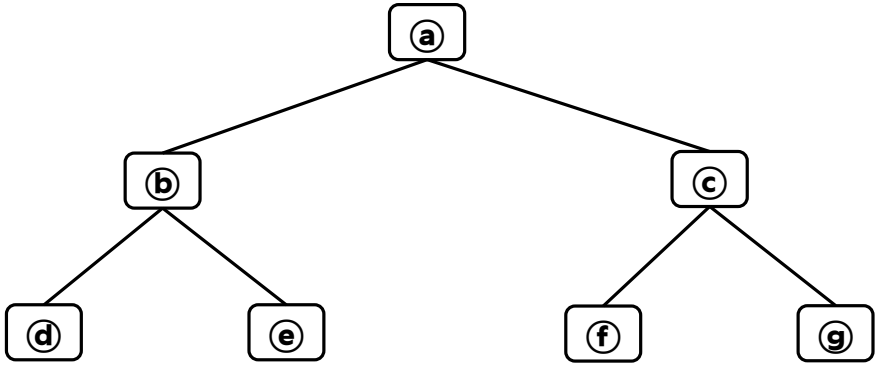


깊이 0: ⓐ
깊이 1: ⓐ,ⓑ,ⓒ

맹목적 탐색

❖ **반복적 깊이심화 탐색**(iterative-deepening search)

- **깊이 한계**가 있는 **깊이 우선 탐색**을 **반복적**으로 적용

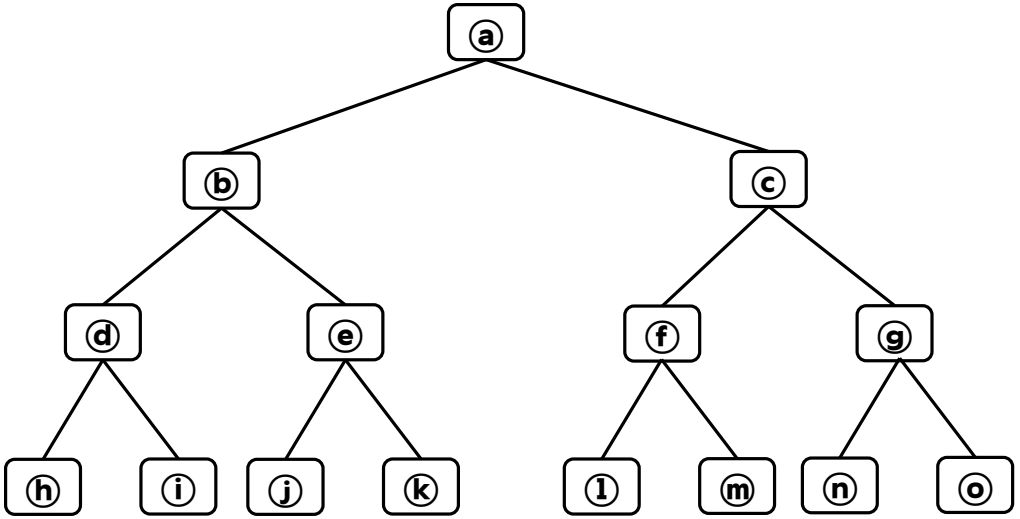


깊이 0: ⓐ
깊이 1: ⓐ,ⓑ,ⓒ
깊이 2: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓔ,ⓒ,ⓕ,ⓖ

맹목적 탐색

❖ **반복적 깊이심화 탐색**(iterative-deepening search)

- **깊이 한계**가 있는 **깊이 우선 탐색**을 **반복적**으로 적용

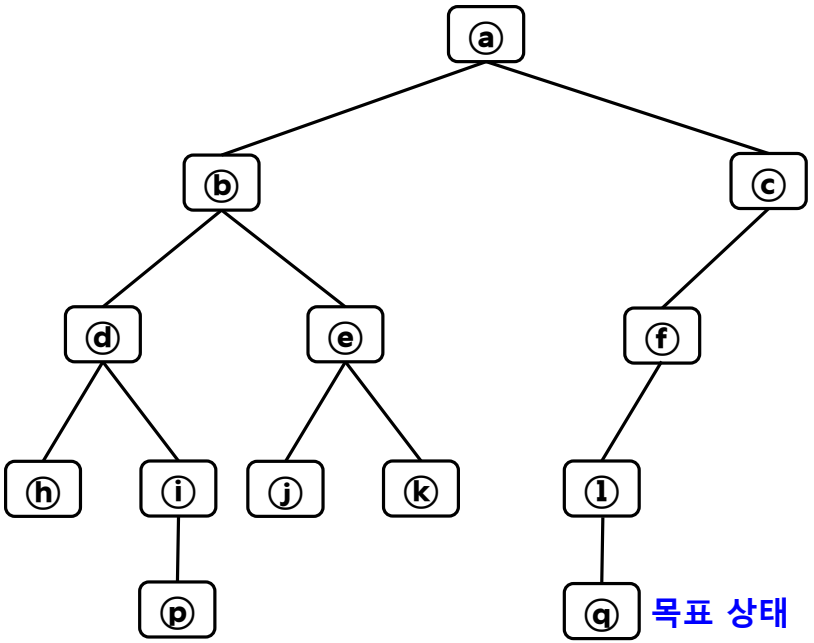


깊이 0: ⓐ
깊이 1: ⓐ,ⓑ,ⓒ
깊이 2: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓔ,ⓒ,ⓕ,ⓖ
깊이 3: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓗ,ⓘ,ⓔ,ⓙ,ⓚ,ⓒ,ⓕ,ⓛ,ⓜ,ⓖ,ⓝ,ⓞ

맹목적 탐색

❖ **반복적 깊이심화 탐색**(iterative-deepening search)

- **깊이 한계**가 있는 깊이 **우선 탐색**을 **반복적**으로 적용



깊이 0: ⓐ
깊이 1: ⓐ,ⓑ,ⓒ
깊이 2: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓔ,ⓒ,ⓕ,ⓖ
깊이 3: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓗ,ⓘ,ⓔ,ⓙ,ⓚ,ⓒ,ⓕ,ⓛ,ⓜ,ⓖ,ⓝ,ⓞ
깊이 4: ⓐ,ⓑ,ⓓ,ⓗ,ⓘ,ⓟ,ⓔ,ⓙ,ⓚ,ⓒ,ⓕ,ⓛ,ⓠ

맹목적 탐색

❖ **맹목적 탐색 방법의 비교**

- **깊이 우선 탐색**
  - 메모리 공간 사용 효율적
  - 최단 경로 해 탐색 보장 불가

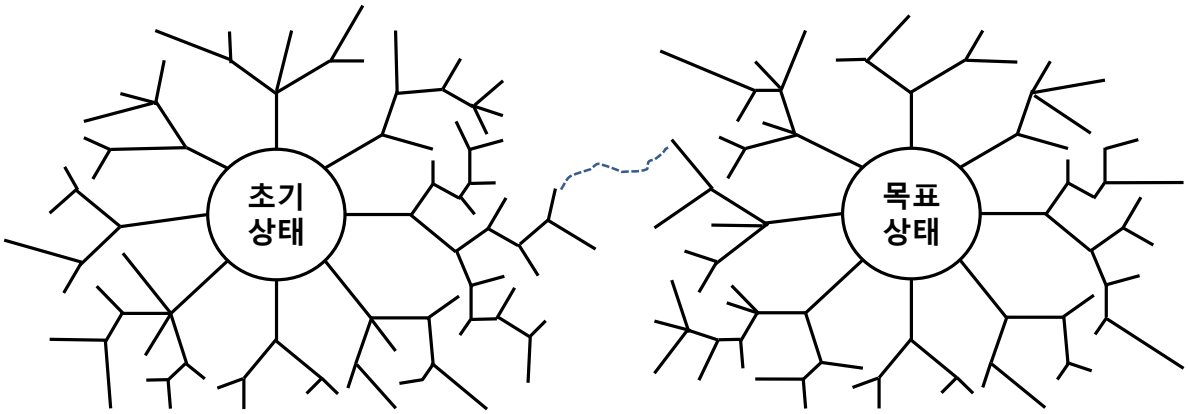
- **너비 우선 탐색**
  - 최단 경로 해 탐색 보장
  - 메모리 공간 사용 비효율

- **반복적 깊이심화 탐색**
  - 최단 경로 해 보장
  - 메모리 공간 사용 효율적
  - 반복적인 깊이 우선 탐색에 따른 비효율성
    - **실제 비용이 크게 늘지 않음**
    - 각 노드가 **10개의 자식노드**를 가질 때,
      너비 우선 탐색 대비 약 11%정도 추가 노드 생성
  - 맹목적 탐색 적용시 우선 고려 대상

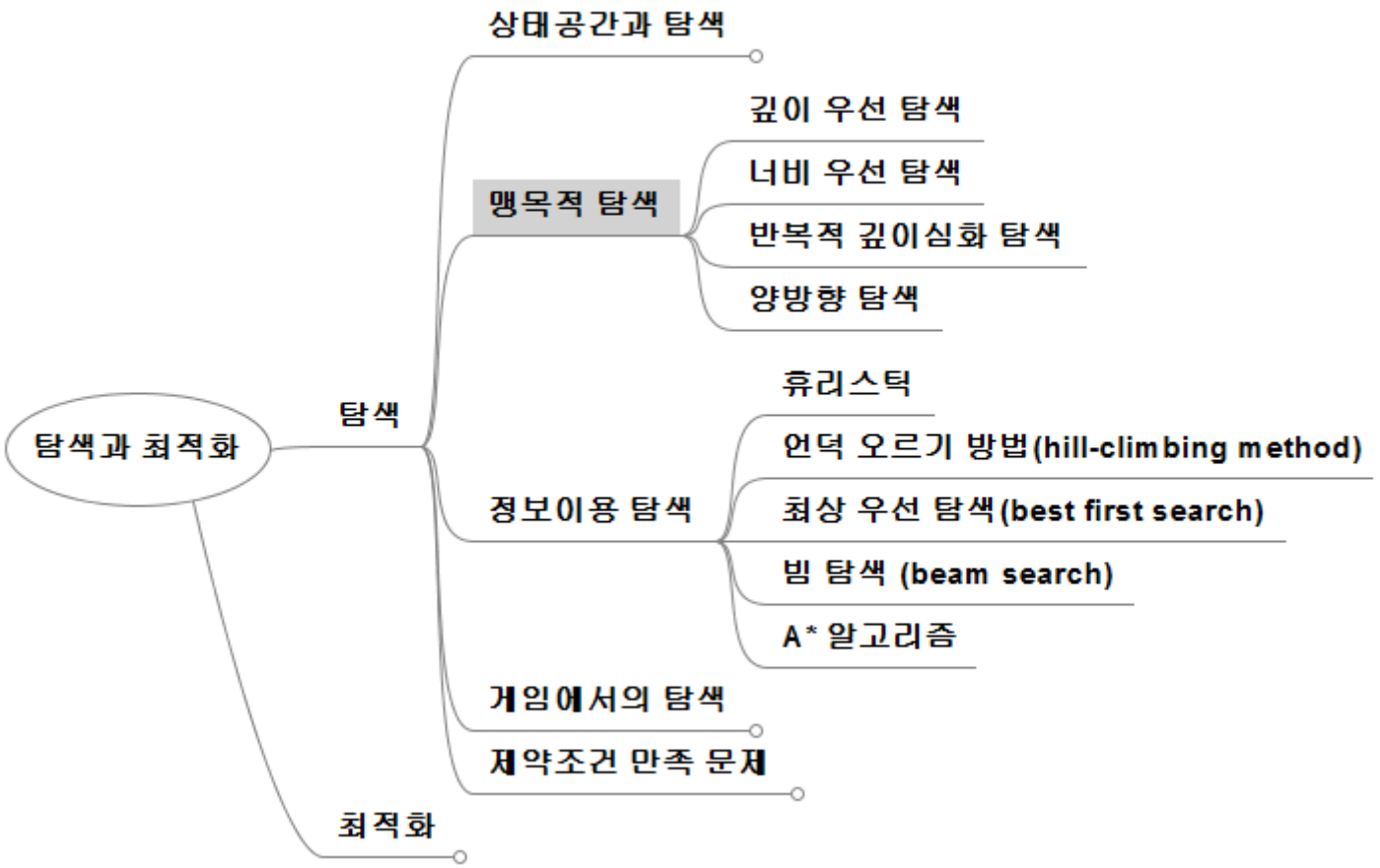
맹목적 탐색

❖ **양방향 탐색(bidirectional search)**

- **초기 노드**와 **목적 노드**에서 **동시**에 **너비 우선 탐색**을 진행
- 중간에 만나도록 하여 초기 노드에서 목표 노드로의 최단 경로를 찾는 방법



맹목적 탐색


탐색과 최적화
탐색
최적화
상태공간과 탐색
맹목적 탐색
깊이 우선 탐색
너비 우선 탐색
반복적 깊이심화 탐색
양방향 탐색
정보이용 탐색
휴리스틱
언덕 오르기 방법(hill-climbing method)
최상 우선 탐색(best first search)
빔 탐색 (beam search)
A* 알고리즘
게임에서의 탐색
제약조건 만족 문제

3. 정보이용 탐색

❖ **정보이용 탐색**(informed search)

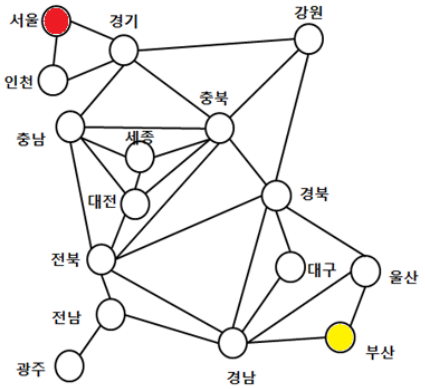
- **휴리스틱 탐색**(heuristic search)
- **언덕 오르기 방법**, **최상 우선 탐색**, **빔 탐색**, **A* 알고리즘** 등

- **휴리스틱**(heuristic)
  - 그리스어 Εὑρίσκω (Eurisko, 찾다, 발견하다)
  - 시간이나 정보가 불충분하여 합리적인 판단을 할 수 없거나, 굳이 체계적이고 합리적인 판단을 할 필요가 없는 상황에서 **신속하게 어림짐작하는 것**
  - 예.
    - **최단 경로 문제에서 목적지까지 남은 거리**
      - » 현재 위치에서 목적지(목표 상태)까지 **지도상의 직선 거리**

정보이용 탐색

❖ 휴리스틱 비용 추정의 예

- **최단경로 문제**
  - 현재 위치에서 목적지까지 직선 거리



- **8-퍼즐 문제**
  - 제자리에 있지 않는 타일의 개수

2	8	3
1	6	4
7		5

현재 상태

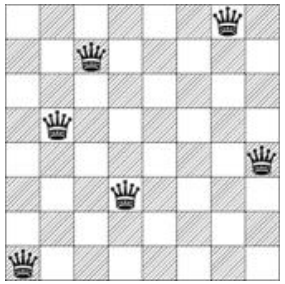
1	2	3
8		4
7	6	5

목표 상태

추정비용 : 4

- **8-퀸 문제**

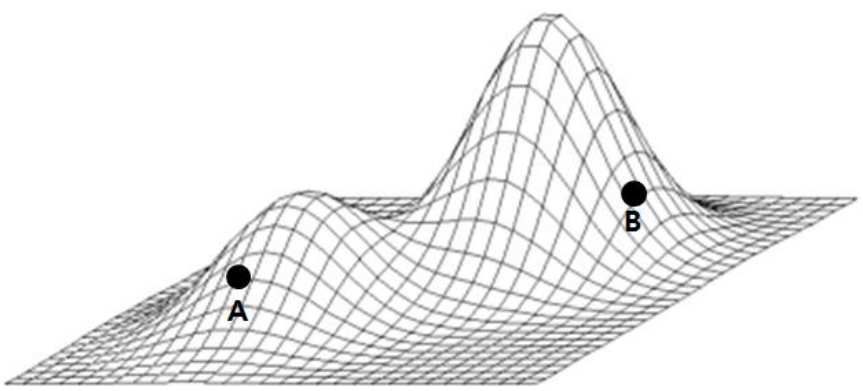
  충돌하는 회수



정보이용 탐색

❖ **언덕 오르기 방법**(hill climbing method)

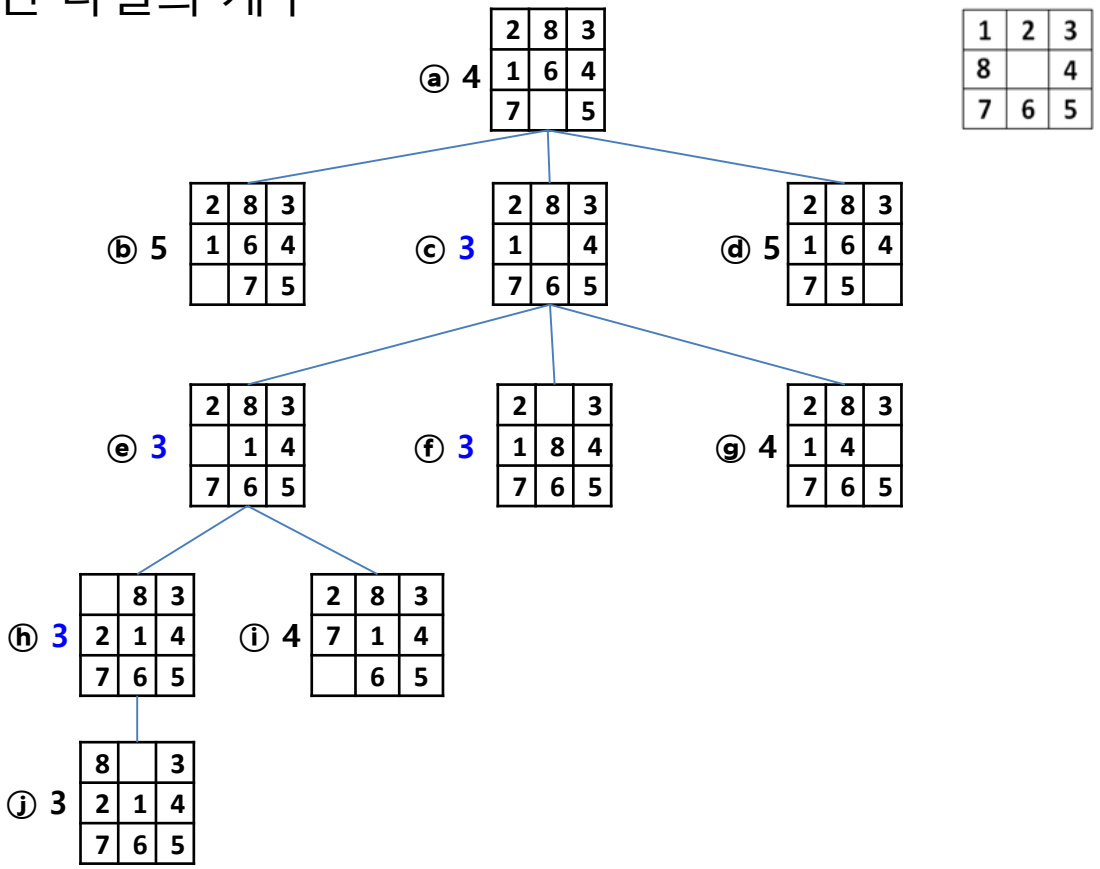
- **지역 탐색**(local search), **휴리스틱 탐색**(heuristic search)
- 현재 노드에서 휴리스틱에 의한 평가값이 **가장 좋은 이웃 노드** 하나를 **확장**해 가는 탐색 방법
- **국소 최적해**(local optimal solution)에 빠질 가능성



정보이용 탐색

❖ **최상 우선 탐색**(best-first search)

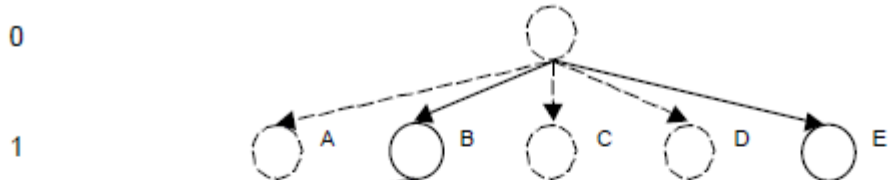
- 확장 중인 노드들 중에서 목표 노드까지 **남은 거리가 가장 짧은 노드**를 확장하여 탐색
- 남은 거리를 정확히 알 수 없으므로 **휴리스틱** 사용
  - 제자리가 아닌 타일의 개수



정보이용 탐색

❖ 빔 탐색(beam search)

- 휴리스틱에 의한 평가값이 우수한 **일정 개수의 확장 가능한 노드**만을 메모리에 **관리**하면서 **최상 우선 탐색**을 적용



정보이용 탐색

❖ A* 알고리즘

- 추정한 전체 비용 $\hat{f}(n)$을 최소로 하는 노드를 확장해 가는 방법

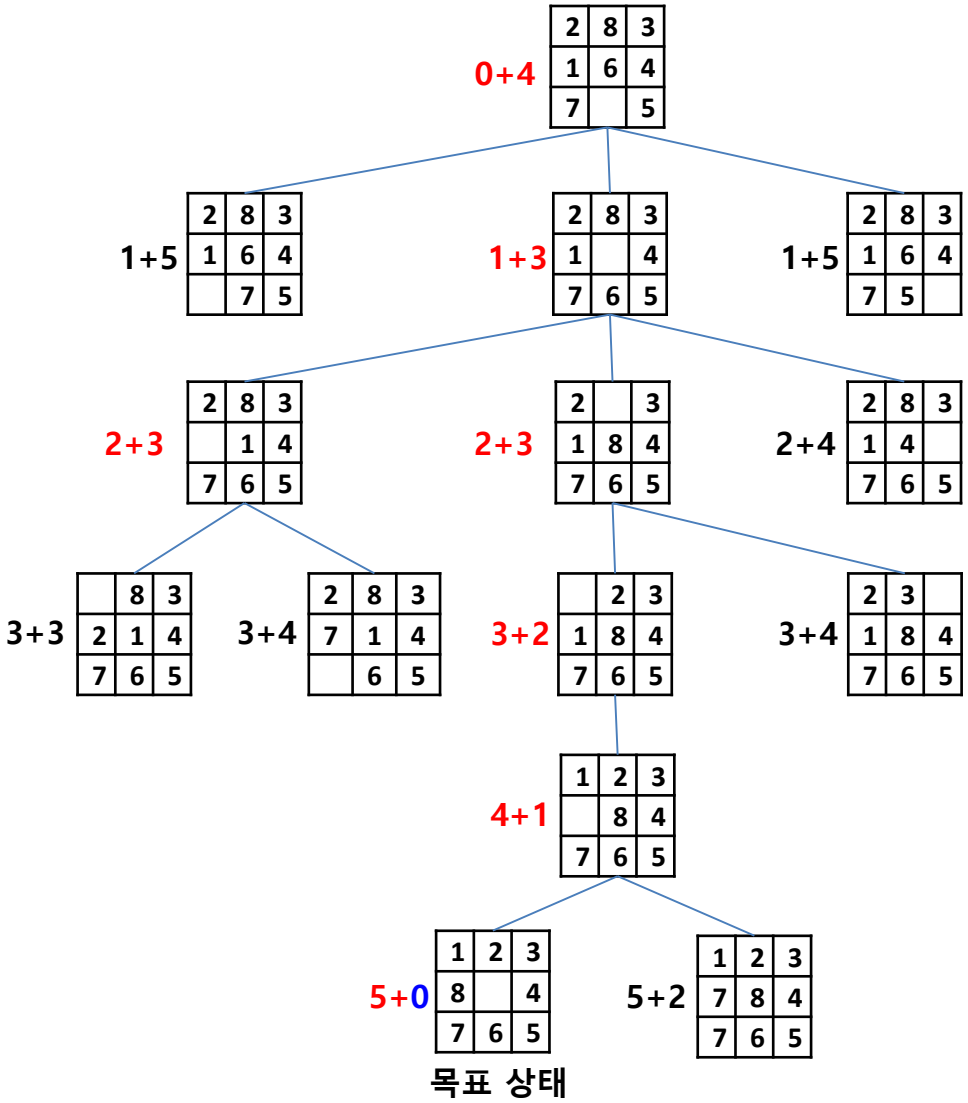
- $f(n)$: 노드 n 을 경유하는 전체 비용
  - 현재 노드 n까지 이미 **투입된 비용** $g(n)$과 목표 노드까지의 **남은 비용** $h(n)$의 합
  - $f(n) = g(n) + h(n)$

- $h(n)$: 남은 비용의 정확한 예측 불가
  - $\hat{h}(n)$: $h(n)$에 대응하는 휴리스틱 함수(heuristic function)
- $\hat{f}(n)$: 노드 n 을 경유하는 추정 전체 비용
  - $\hat{f}(n) = g(n) + \hat{h}(n)$

정보이용 탐색

❖ 8-퍼즐 문제의 A* 알고리즘 적용

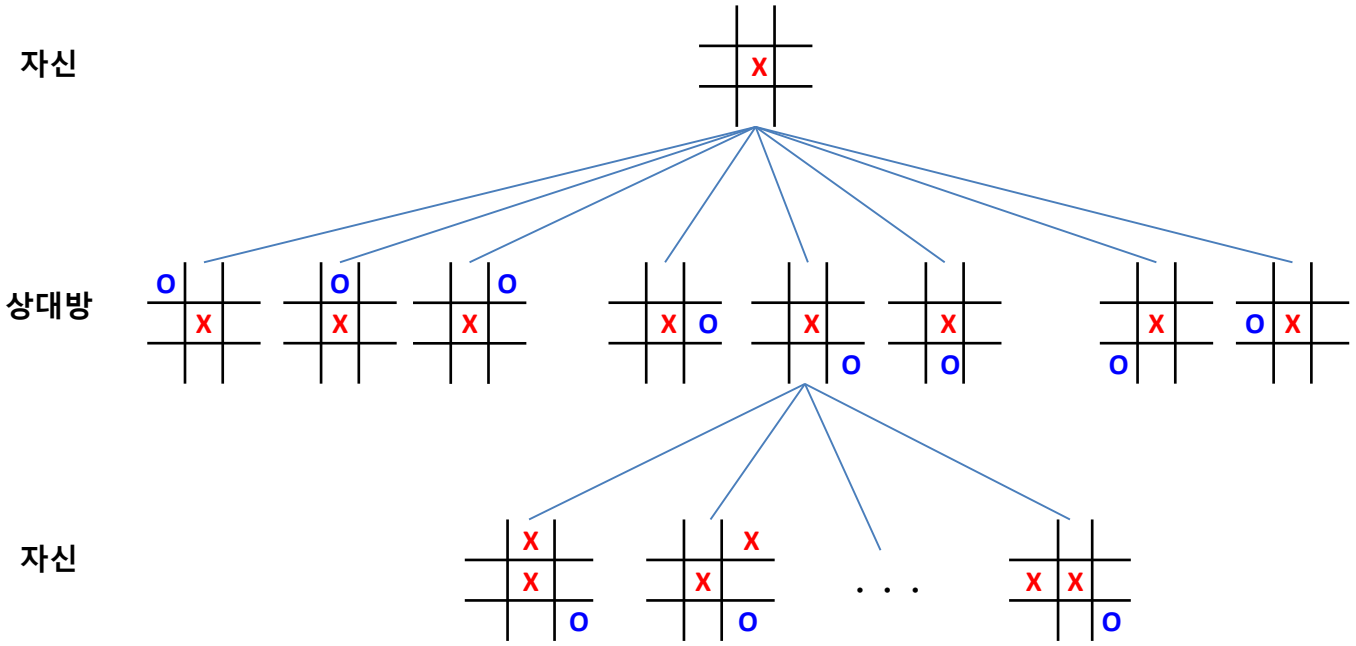
$$f(n) = g(n) + h(n)$$



4. 게임에서의 탐색

❖ **게임 트리**(game tree)

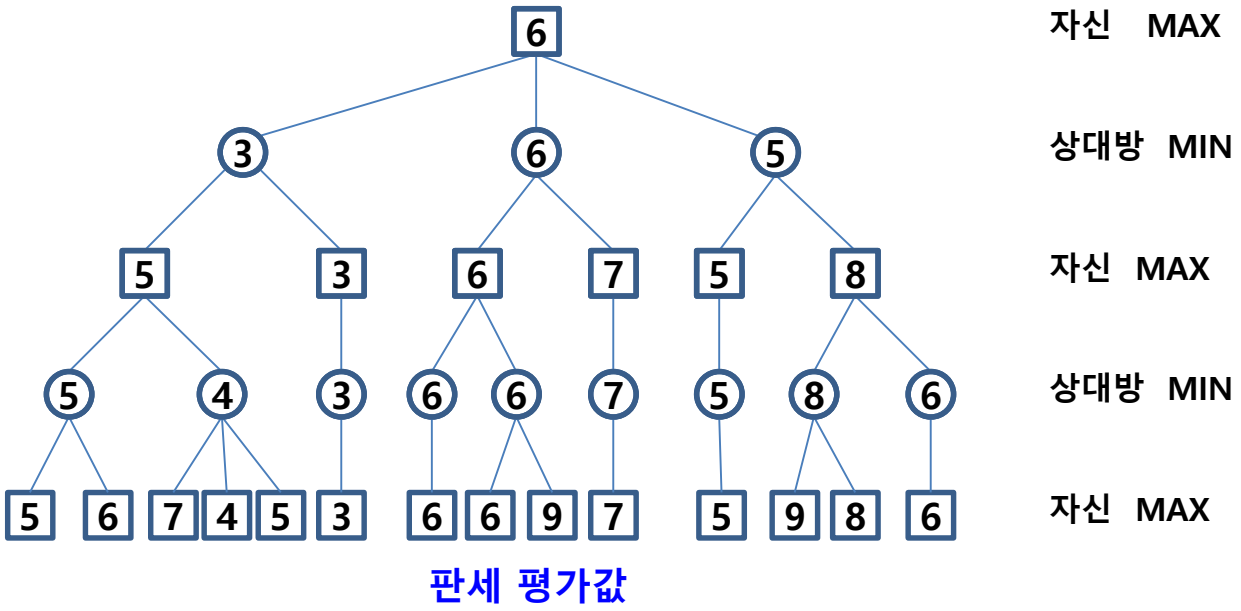
- **상대가 있는 게임**에서 자신과 상대방의 가능한 게임 상태를 나타낸 트리
  - 틱-택-톡(tic-tac-toc), 바둑, 장기, 체스 등
- 게임의 결과는 마지막에 결정
- 많은 **수**(**lookahead**)를 볼 수록 유리



게임에서의 탐색

❖ **mini-max 알고리즘**(mini-max algorithm)

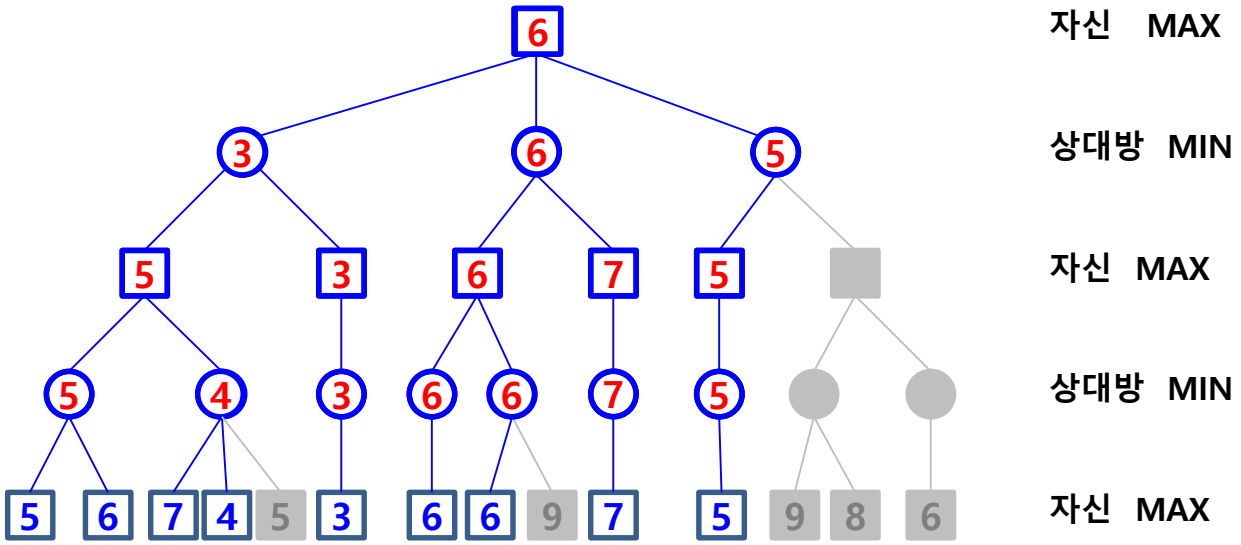
- **MAX 노드**
  - **자신**에 해당하는 노드로 자기에게 유리한 최대값 선택
- **MIN 노드**
  - **상대방**에 해당하는 노드로 최소값 선택
- 단말 노드부터 위로 올라가면서 최소(**minimum**)-**최대(maximum) 연산**을 **반복**하여 자신이 선택할 수 있는 방법 중 가장 좋은 것은 값을 결정



게임에서의 탐색

❖ α-β 가지치기 (prunning)

- 검토해 볼 필요가 없는 부분을 탐색하지 않도록 하는 기법
- 깊이 우선 탐색으로 제한 깊이까지 탐색을 하면서, MAX 노드와 MIN 노드의 값 결정
  - **α-자르기(cut-off) :** MIN 노드의 현재값이 부모노드의 현재 값보다 작거나 같으면, 나머지 자식 노드 탐색 중지
  - **β-자르기 :** MAX 노드의 현재값이 부모노드의 현재 값보다 같거나 크면, 나머지 자식 노드 탐색 중지

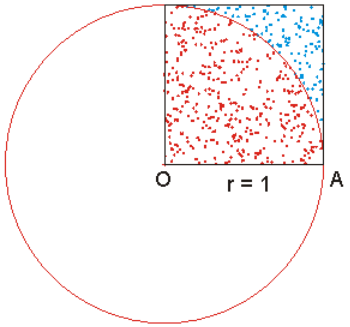


간단한 형태의 α-β 가지치기 예

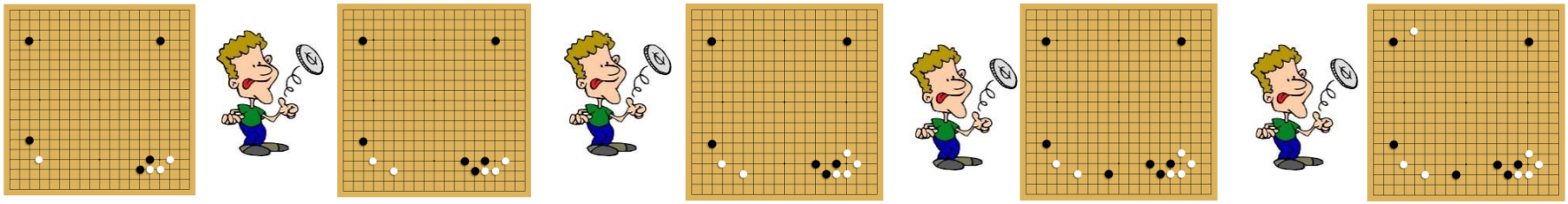
게임에서의 탐색

❖ **몬테카를로 시뮬레이션 (Monte Carlo Simulation)**

- 특정 **확률 분포**로 부터 **무작위 표본**(random sample)을 생성하고,
- 이 표본에 따라 **행동**을 하는 과정을 반복하여 결과를 확인하고,
- 이러한 결과확인 과정을 반복하여 최종 결정을 하는 것

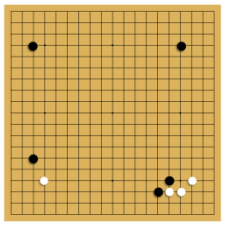


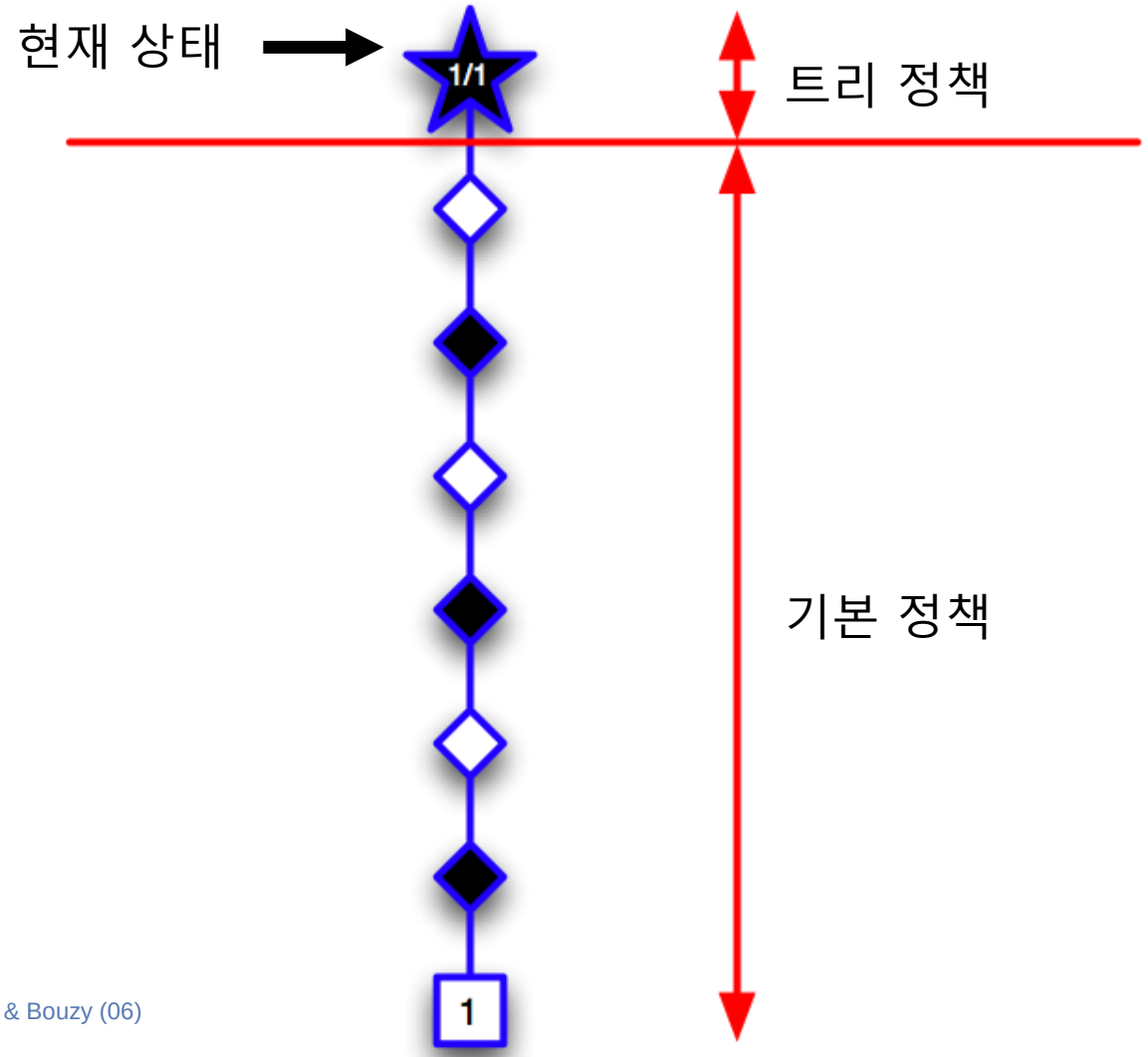
$$\frac{\text{원 안의 샘플 개수}}{\text{전체 샘플의 개수}} \rightarrow \frac{\pi}{4}$$



몬테카를로 트리 탐색

❖ **몬테카를로 트리 탐색(Monte Carlo Tree Search, MCTS)**

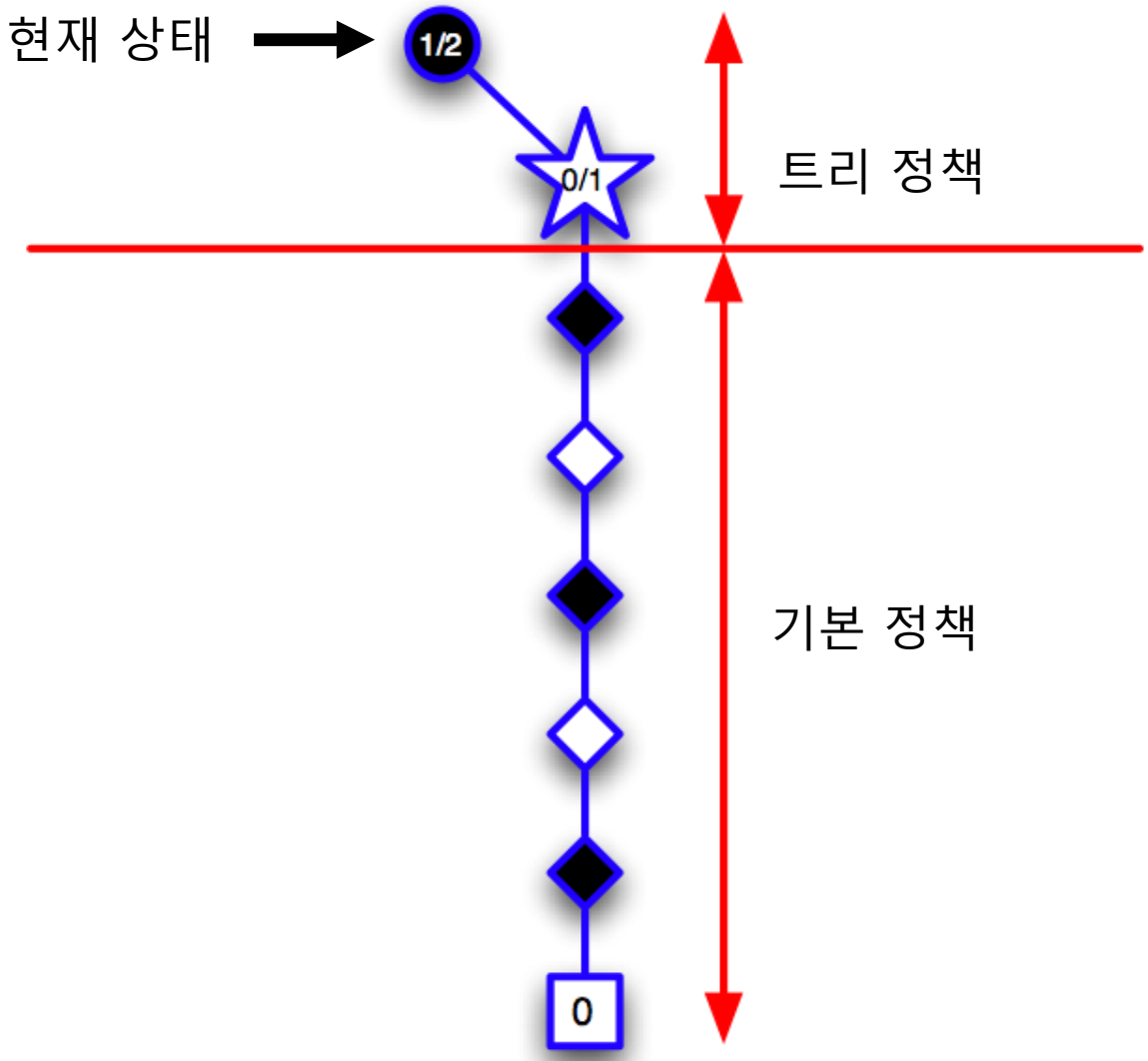




Coulom (06)
Chaslot, Saito & Bouzy (06)

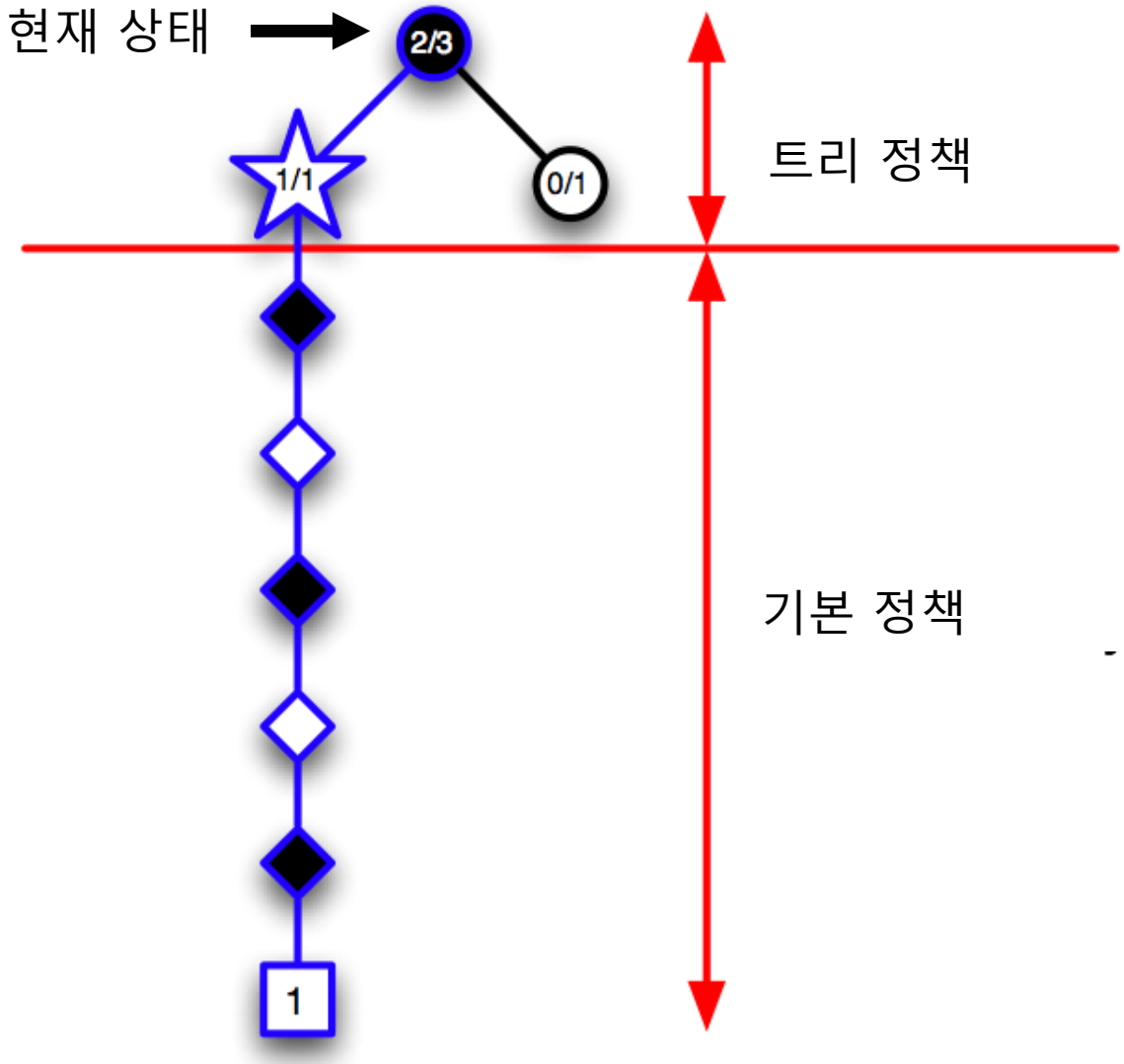
Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



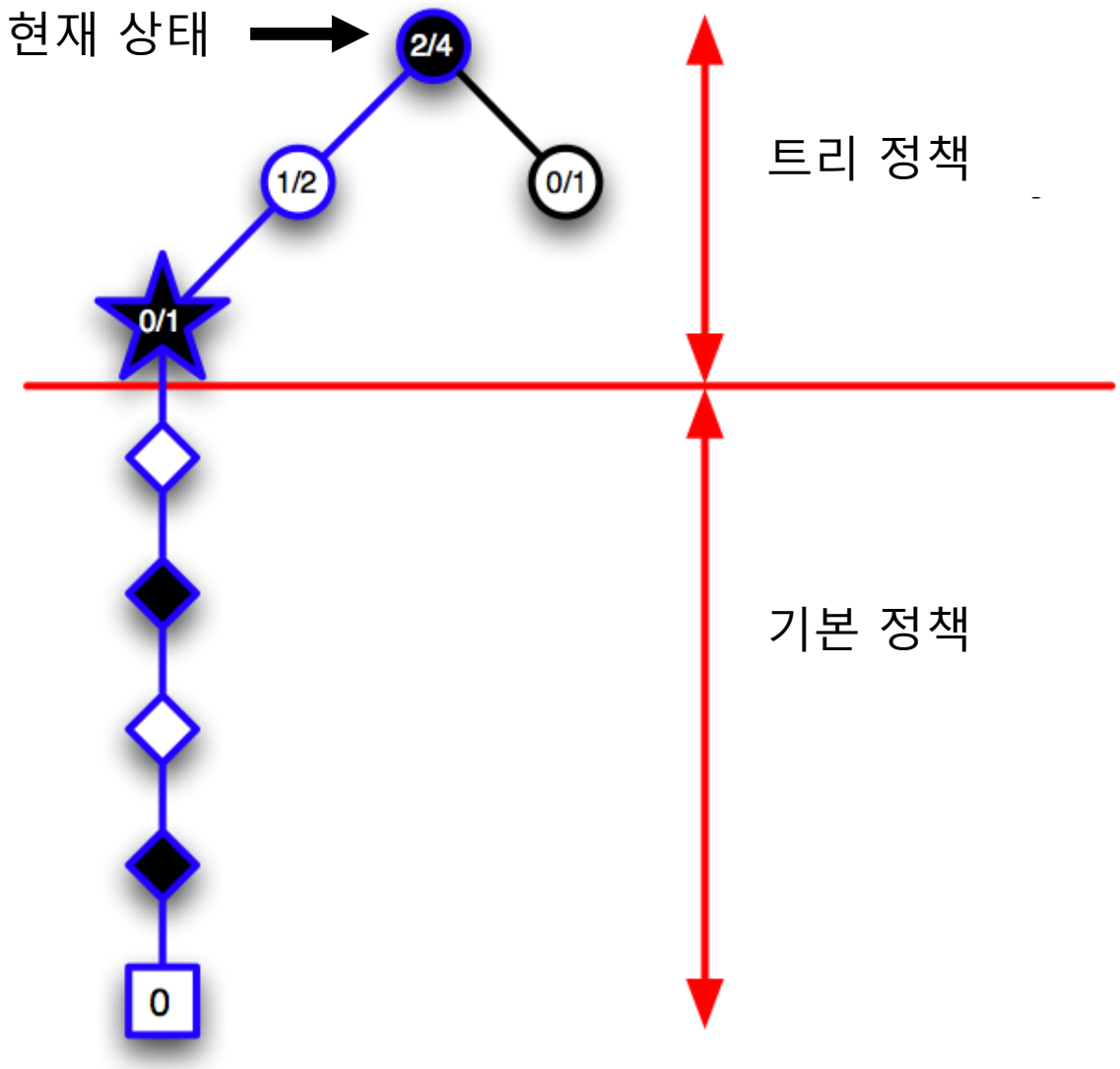
Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



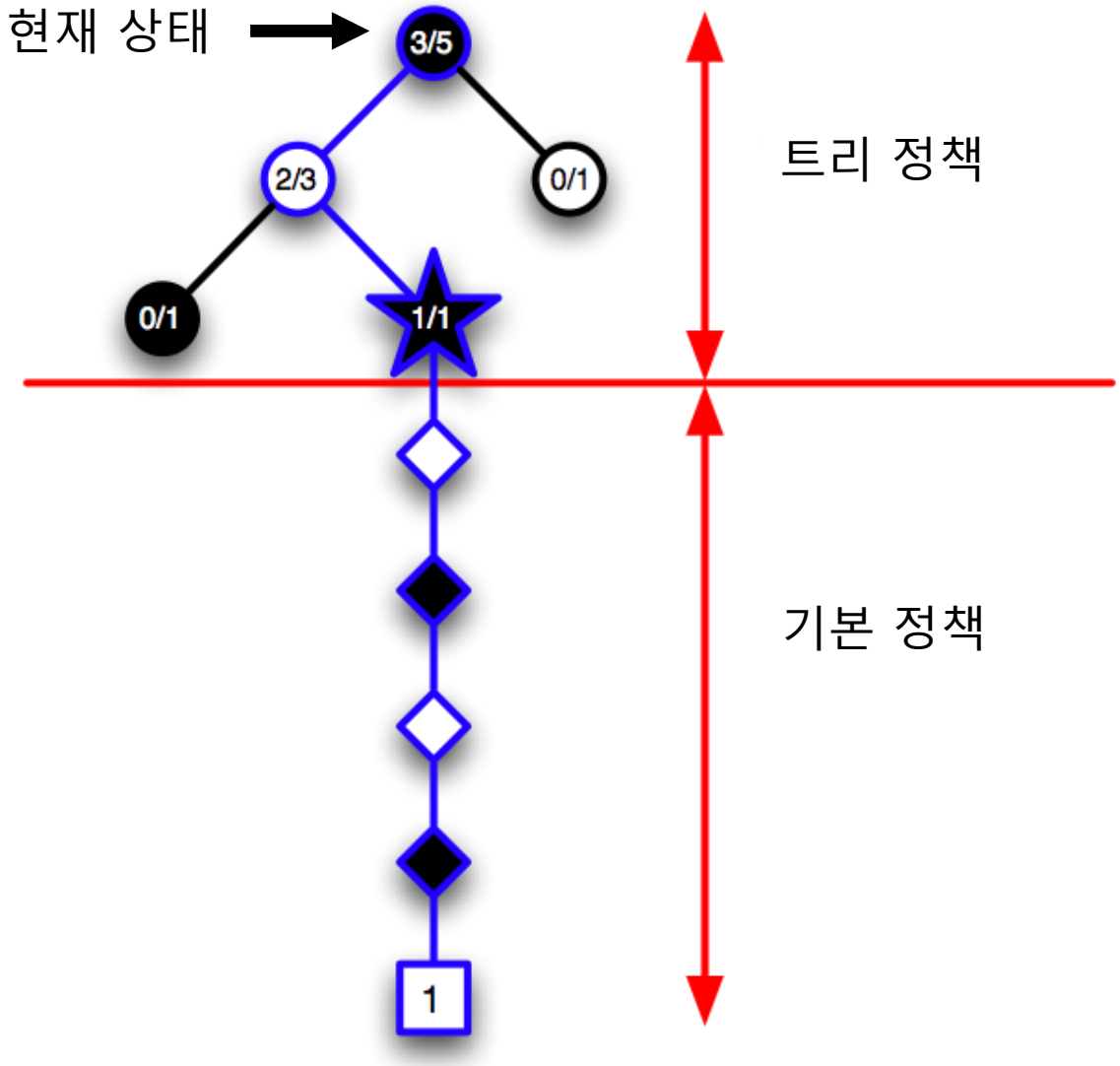
Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



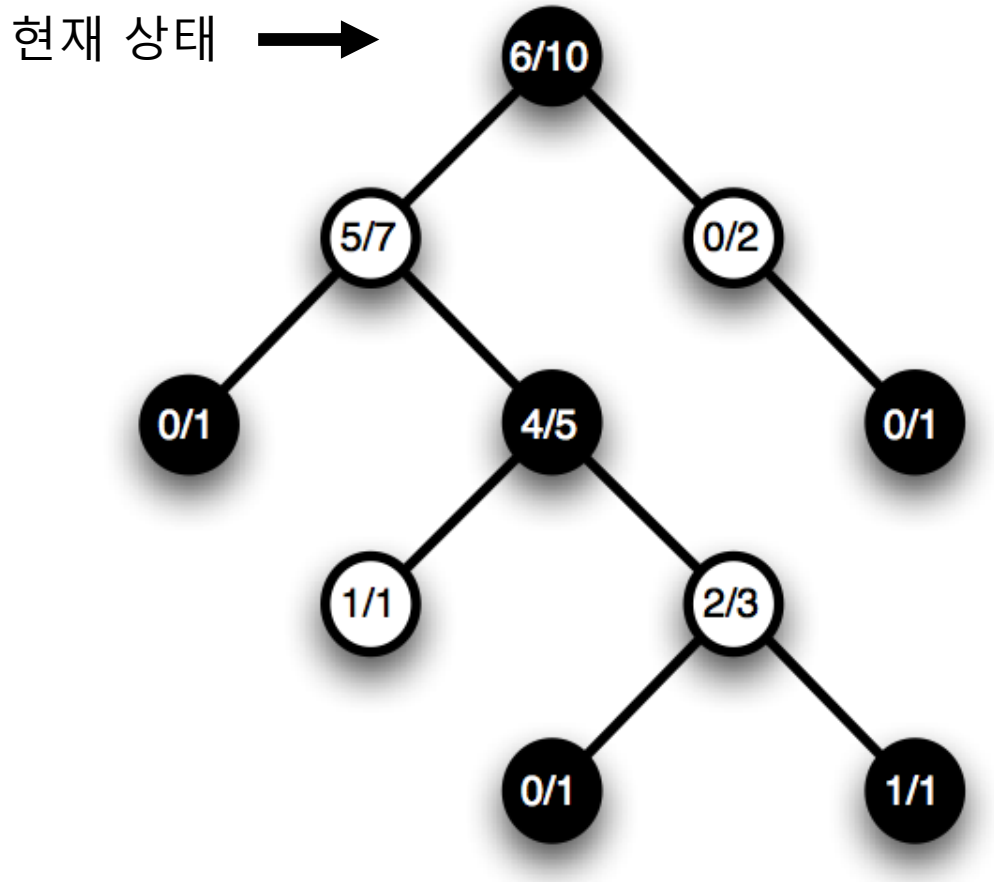
Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



Slide from Sylvain Gelly

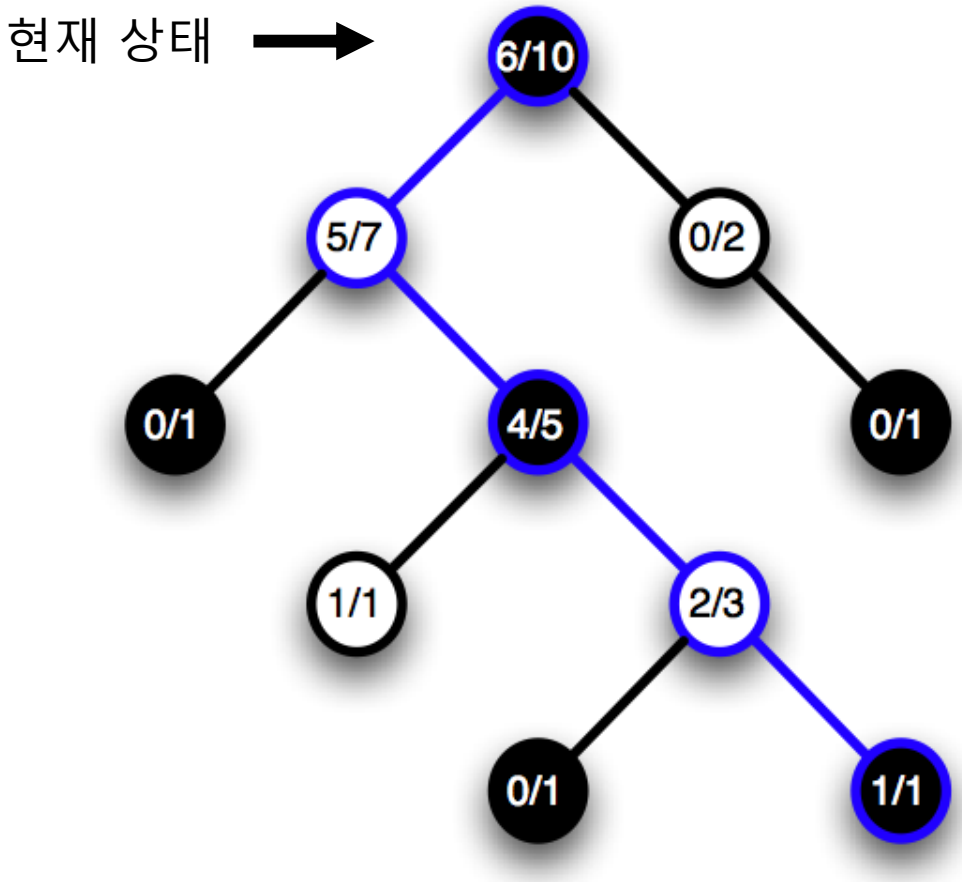
몬테카를로 트리 탐색



Kocsis & Szepesvari (06)

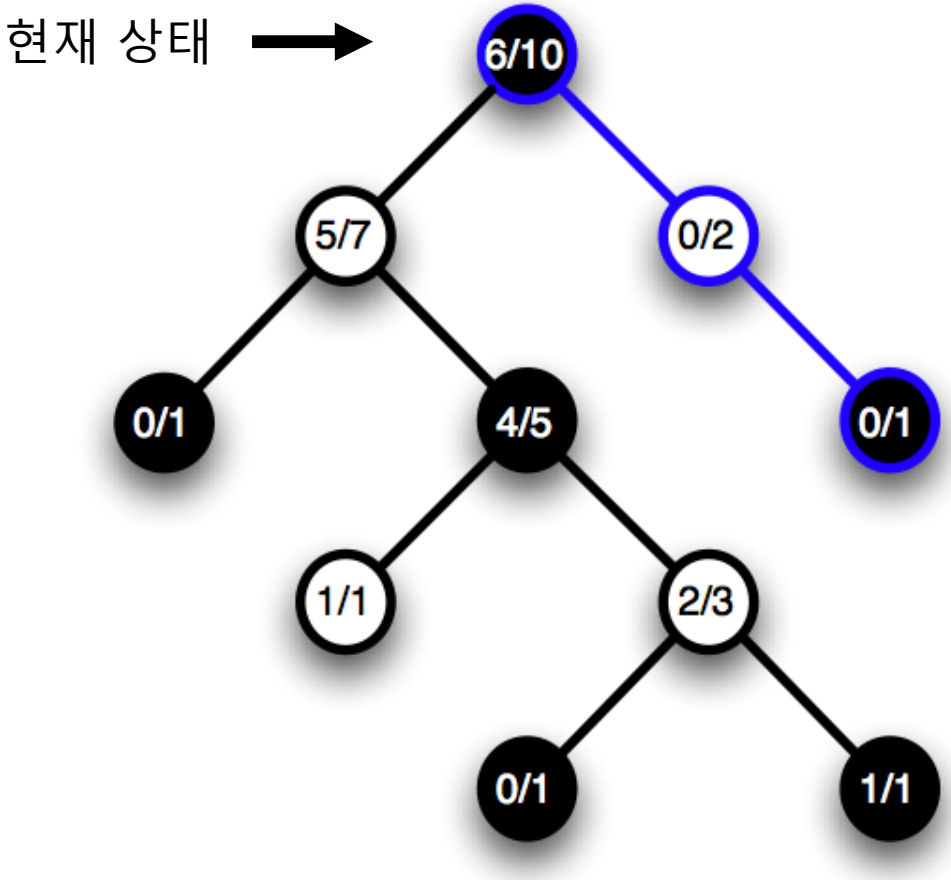
Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



Slide from Sylvain Gelly

몬테카를로 트리 탐색



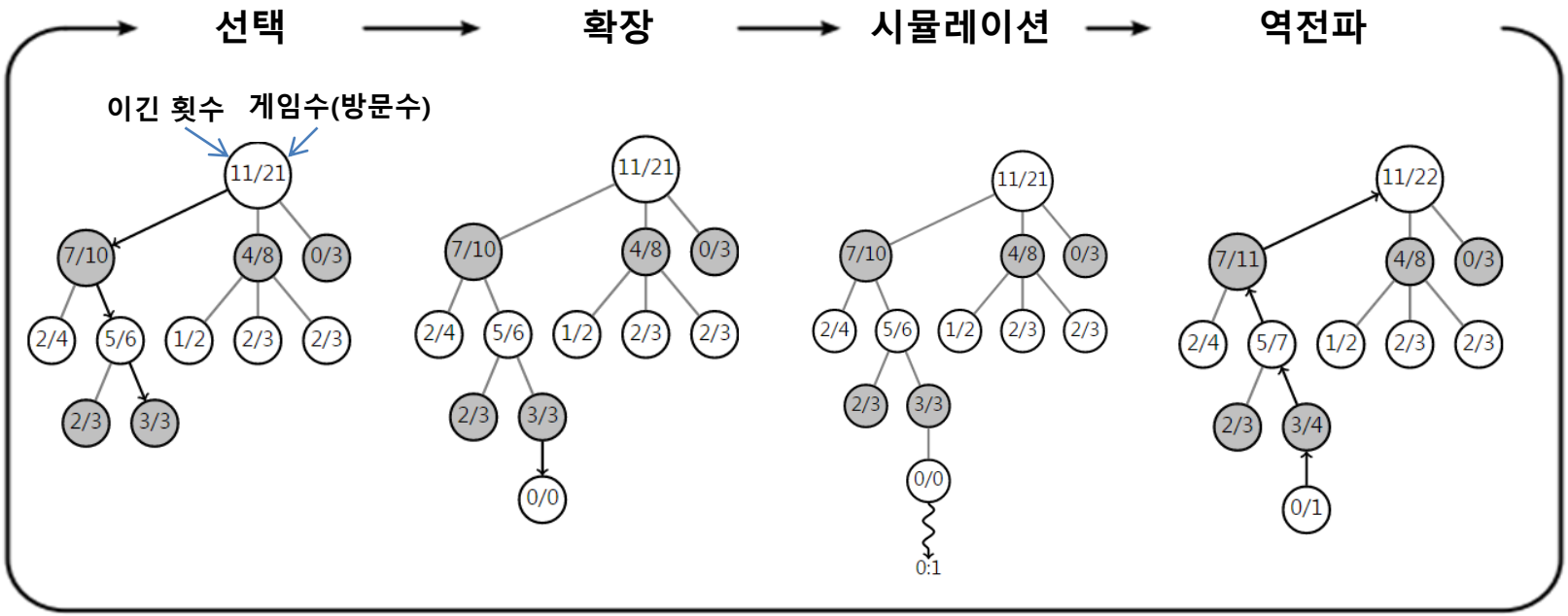
Slide from Sylvain Gelly

게임에서의 탐색

❖ 몬테카를로 트리 탐색(Monte Carlo Tree Search, MCTS)

- 탐색 공간(search space)을 **무작위 표본추출**(random sampling)을 하면서, **탐색트리**를 **확장**하여 가장 좋아 보이는 것을 선택하는 휴리스틱 탐색 방법
- 4개 단계를 반복하여 **시간이 허용하는 동안** 트리 확장 및 시뮬레이션

  선택(selection)
  → **확장(expansion)**
  → **시뮬레이션(simulation) : 몬테카를로 시뮬레이션**
  → **역전파(back propagation)**



게임에서의 탐색

❖ 몬테카를로 트리 탐색 – cont.

- **선택(selection)** : **트리 정책(tree policy)** 적용
  - 루트노드에서 시작
  - 정책에 따라 자식 노드를 선택하여 단말노드까지 내려 감
    - **승률**과 **노드 방문횟수** 고려하여 선택
    - **UCB**(Upper Confidence Bound) **정책 :** UCB가 큰 것 선택

$$\frac{Q(v')}{N(v')} + c\sqrt{\frac{2\ln N(v)}{N(v')}}$$

활용(exploitation) 탐험(exploration)

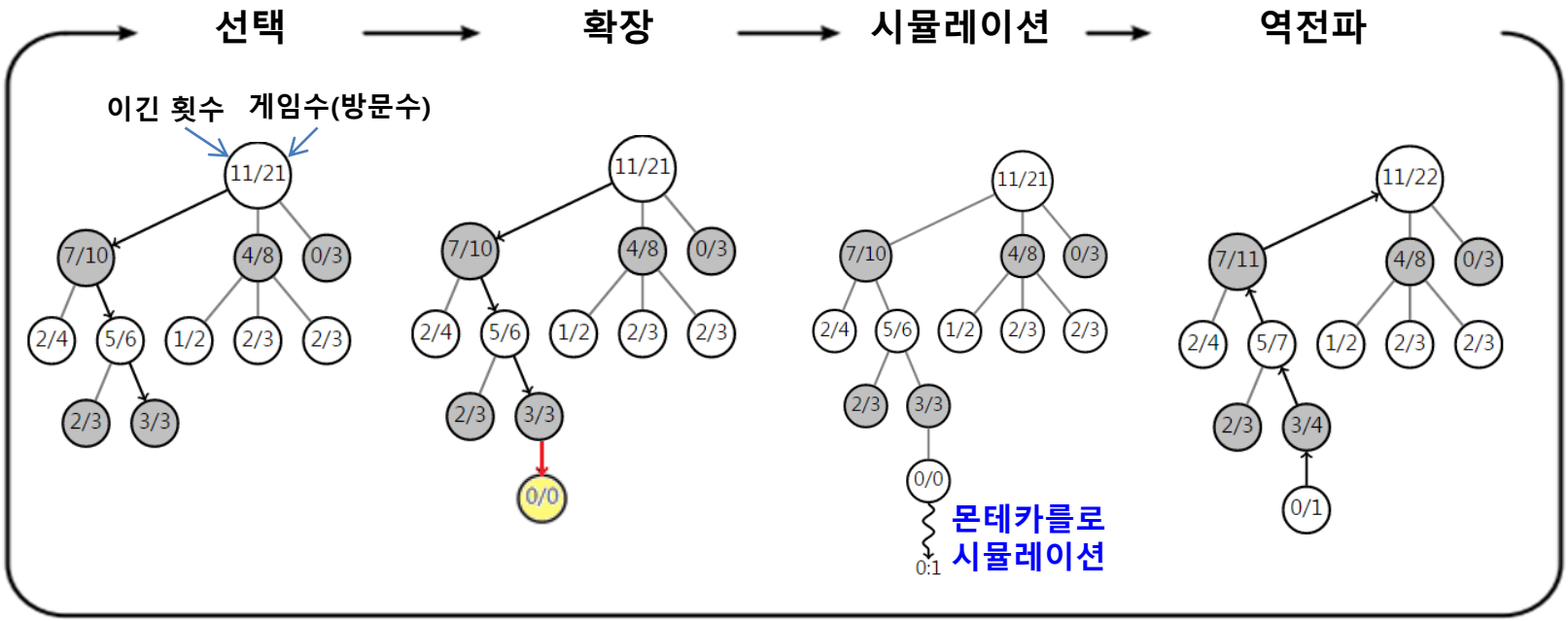
v : 부모노드, v' : 자식노드
$N(v')$: 방문 횟수
$Q(v')$: 점수 (이긴 횟수)

선택 → 확장 → 시뮬레이션 → 역전파

게임에서의 탐색

❖ 몬테카를로 트리 탐색 – cont.

- **확장(expansion)**
  - 단말노드에서 **트리 정책**에 따라 노드 추가
    - 예. **일정 횟수이상 시도된 수**(move)가 있으면 해당 수에 대한 **노드 추가**
- **시뮬레이션(simulation)**
  - **기본 정책(default policy)**에 의한 **몬테카를로 시뮬레이션** 적용
  - **무작위 선택**(random moves) 또는 **약간 똑똑한 방법**으로 **게임 끝날 때까지 진행**
- **역전파(backpropagation)**
  - 단말 노드에서 루트 노드까지 올라가면서 승점 반영

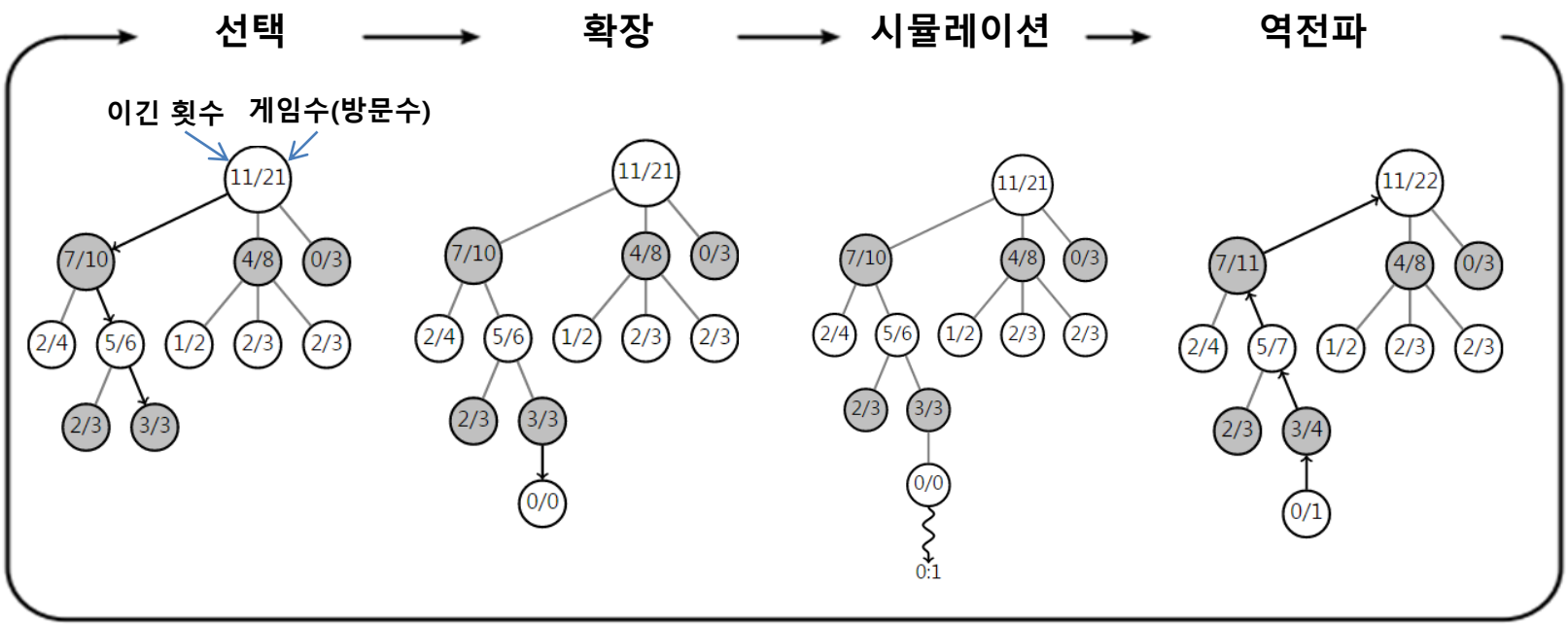


몬테카를로 트리 탐색

❖ 몬테카를로 트리 탐색 – cont.

- **동작 선택 방법**
  - 가장 **승률**이 높은, 루트의 자식 노드 선택
  - 가장 **빈번**하게 방문한, 루트의 자식 노드 선택
  - **승률**과 **빈도**가 가장 큰, 루트의 자식 노드 선택
    없으면, 조건을 만족하는 것이 나올 때까지 탐색 반복
  - 자식 노드의 **confidence bound값의 최소값이 가장 큰**, 루트의 자식 노드 선택

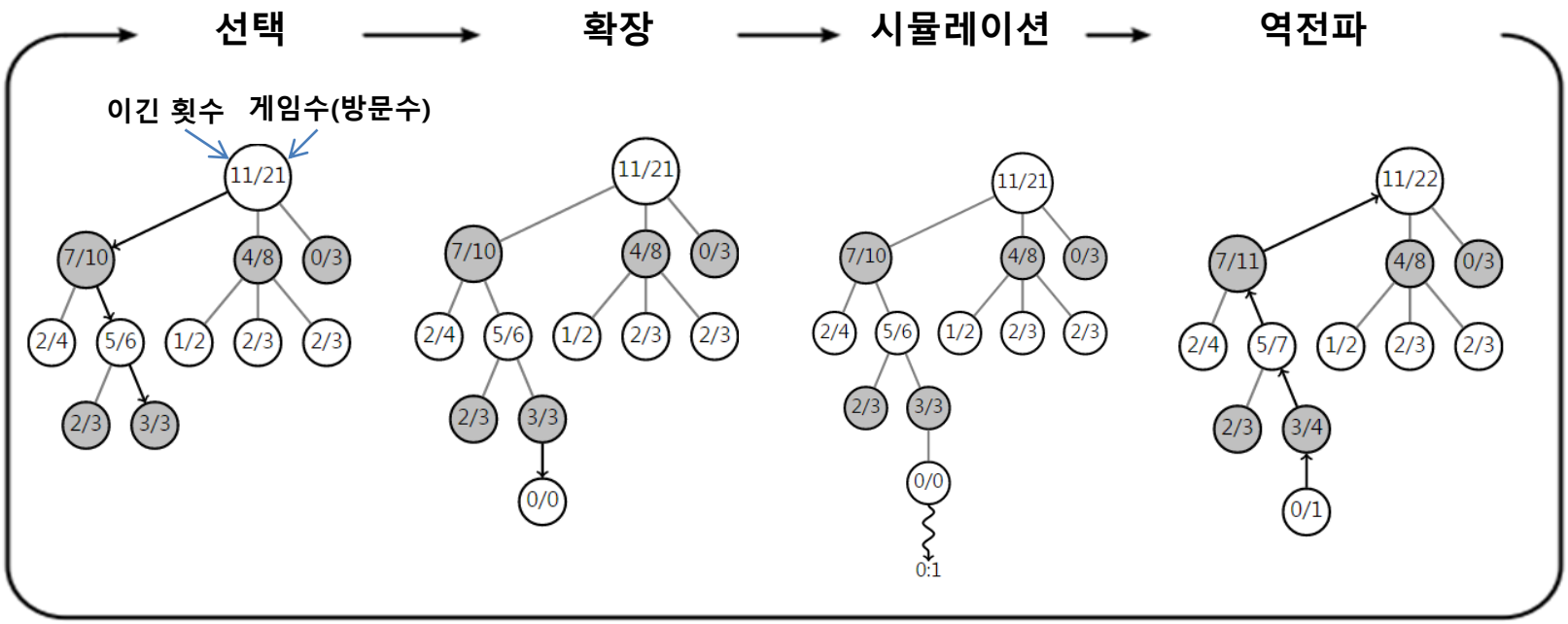
$$\frac{Q(v')}{N(v')} + c\sqrt{\frac{2\ln N(v)}{N(v')}}$$



몬테카를로 트리 탐색

❖ 몬테카를로 트리 검색 – cont.

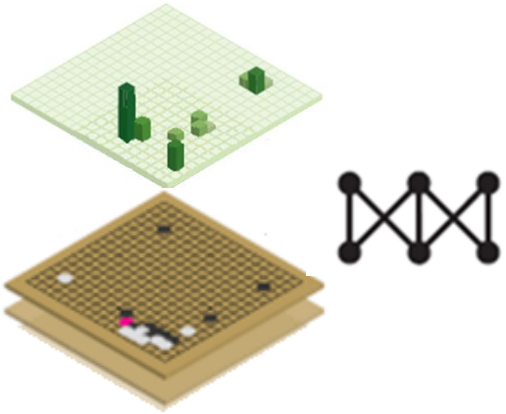
- 판의 형세판단을 위해 **휴리스틱**을 사용하는 **대신**, 가능한 많은 수의 **몬테카를로 시뮬레이션** 수행
- 일정 조건을 만족하는 부분은 **트리**로 구성하고, 나머지 부분은 **몬테카를로 시뮬레이션**
  - 가능성이 높은 수(move)들에 대해서 노드를 생성하여 트리의 탐색 폭을 줄이고, 트리 깊이를 늘리지 않기 위해 몬테카를로 시뮬레이션을 적용
  - **탐색 공간 축소**

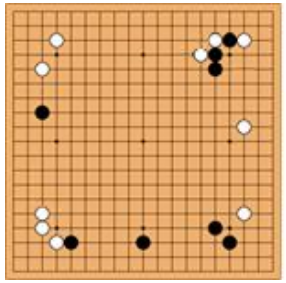


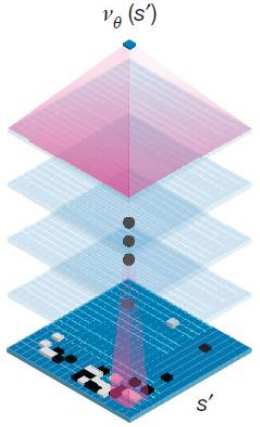
알파고의 탐색

❖ 알파고의 몬테카를로 트리 검색

- **바둑판 형세 판단**을 위한 한가지 방법으로 **몬테카를로 트리 검색** 사용
- 무작위로 바둑을 두는 것이 아니라, 프로 바둑기사들을 기보를 학습한 **확장 정책망**(rollout policy network)이라는 간단한 계산모델을 사용







정책망 : 가능한 착수(着手)들에 대한 **선호 확률분포**

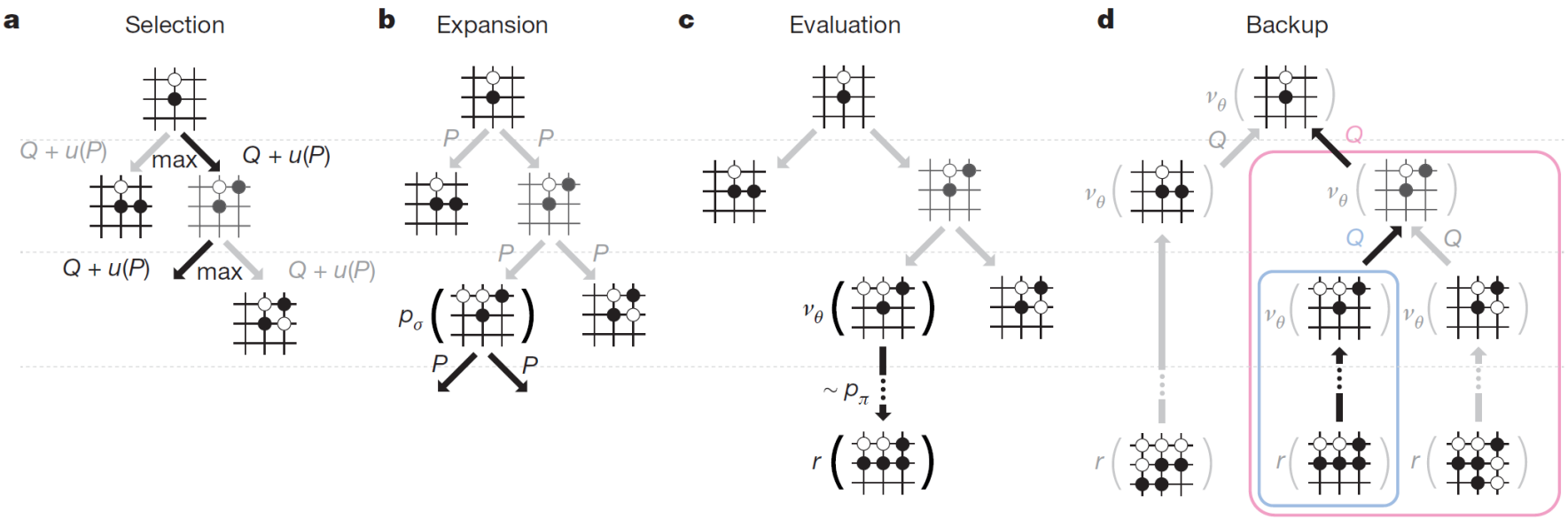
가치망 : 바둑판의 **형세 값**을 계산하는 계산모델

- 확률에 따라 착수를 하여 **몬테카를로 시뮬레이션**을 **반복**하여 해당 바둑판에 대한 **형세판단값 계산**
- 별도로 학습된 **딥러닝 신경망**인 **가치망(value network)**을 사용하여 형세판단값을 계산하여 함께 사용

알파고의 탐색

❖ **알파고의 몬테카를로 트리 검색**

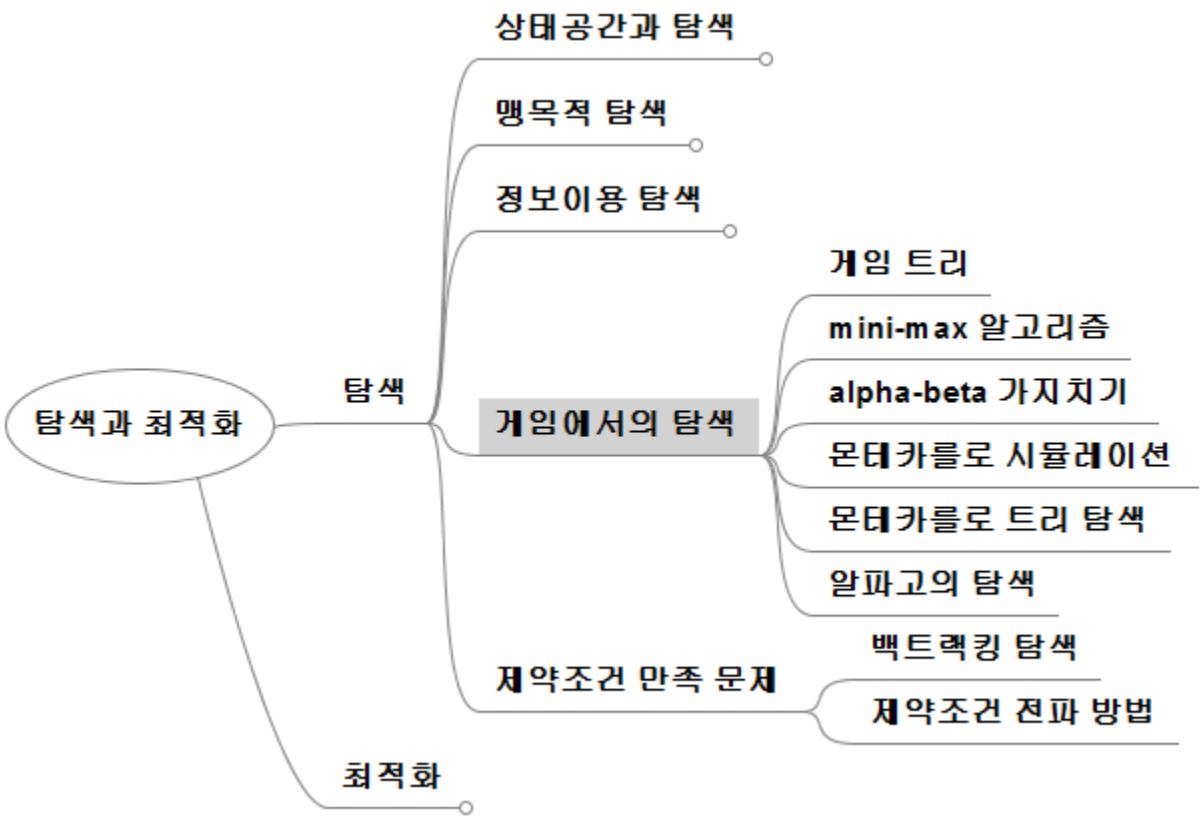
- 많은 수의 **몬테카를로 시뮬레이션**과 **딥러닝 모델**의 신속한 계산을 위해 다수의 **CPU와 GPU**를 이용한 **분산처리**



https://www.youtube.com/watch?v=94IX97APSLs

Image : Nature

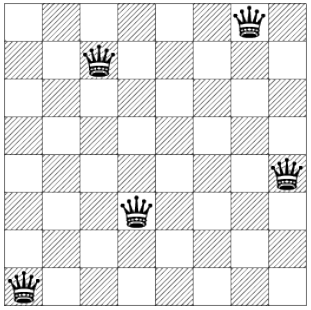
게임에서의 탐색


탐색과 최적화
탐색
상태공간과 탐색
맹목적 탐색
정보이용 탐색
게임에서의 탐색
게임 트리
mini-max 알고리즘
alpha-beta 가지치기
몬테카를로 시뮬레이션
몬테카를로 트리 탐색
알파고의 탐색
제약조건 만족 문제
백트랙킹 탐색
제약조건 전파 방법
최적화

5. 제약조건 만족 문제

❖ **제약조건 만족 문제**(constraint satisfaction problem)

- 주어진 제약조건을 만족하는 **조합 해**(combinatorial solution)를 찾는 문제
- 예. 8-퀸(queen) 문제

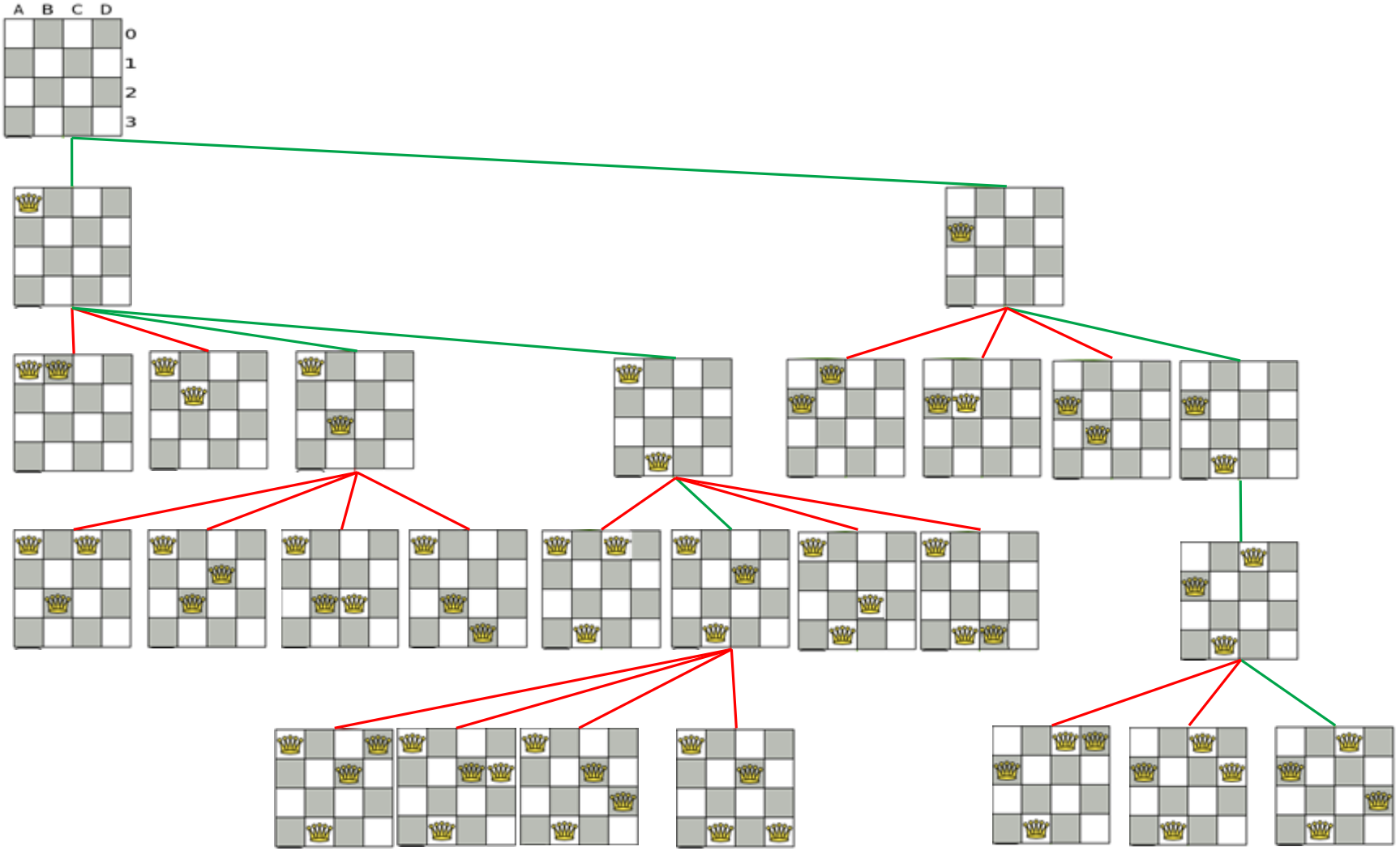


- **탐색 기반의 해결방법**
  - 백트랙킹 탐색
  - 제약조건 전파

- **백트랙킹 탐색(backtracking search)**
  - **깊이 우선 탐색**을 하는 것처럼 **변수**에 허용되는 **값**을 **하나씩 대입**
  - 모든 가능한 값을 대입해서 **만족하는 것이 없으면 이전 단계로 돌아가서** 이전 단계의 변수에 다른 값을 대입

제약조건 만족 문제

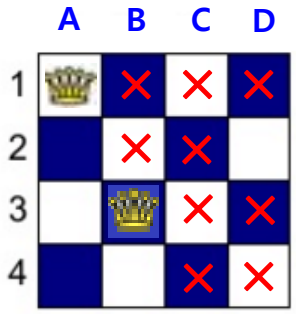
❖ 예. **백트랙킹 탐색을 이용한 4-퀸(queen) 문제**

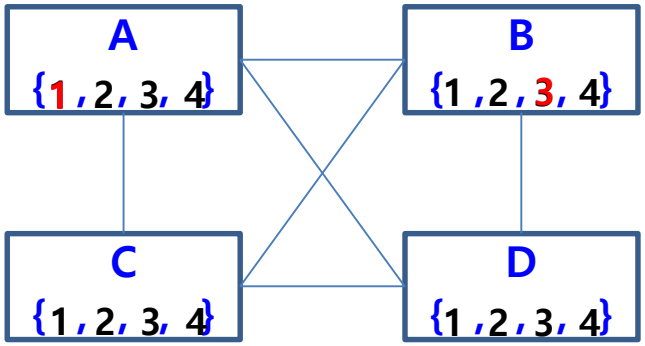


제약조건 만족 문제

❖ **제약조건 전파(constraint propagation)**

- **인접 변수 간**의 **제약 조건**에 따라 각 변수에 **허용될 수 없는 값**들을 **제거**하는 방식

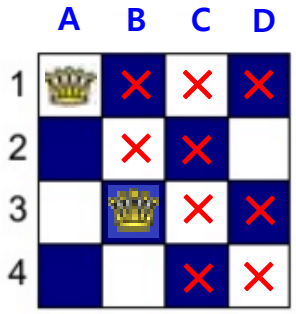


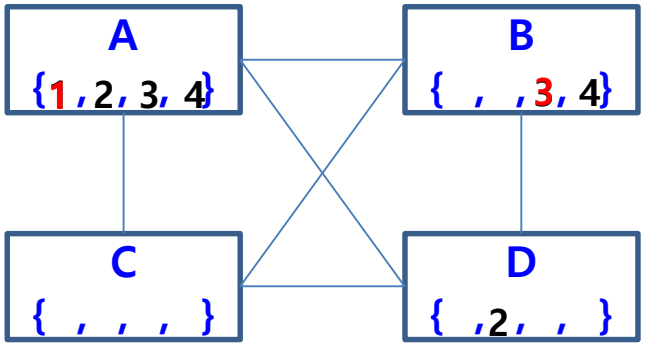


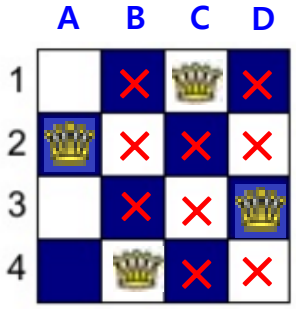
제약조건 만족 문제

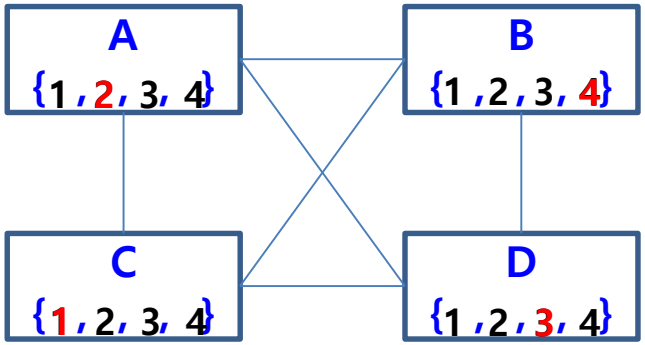
❖ **제약조건 전파(constraint propagation)**

- **인접 변수 간**의 **제약 조건**에 따라 각 변수에 **허용될 수 없는 값**들을 **제거**하는 방식

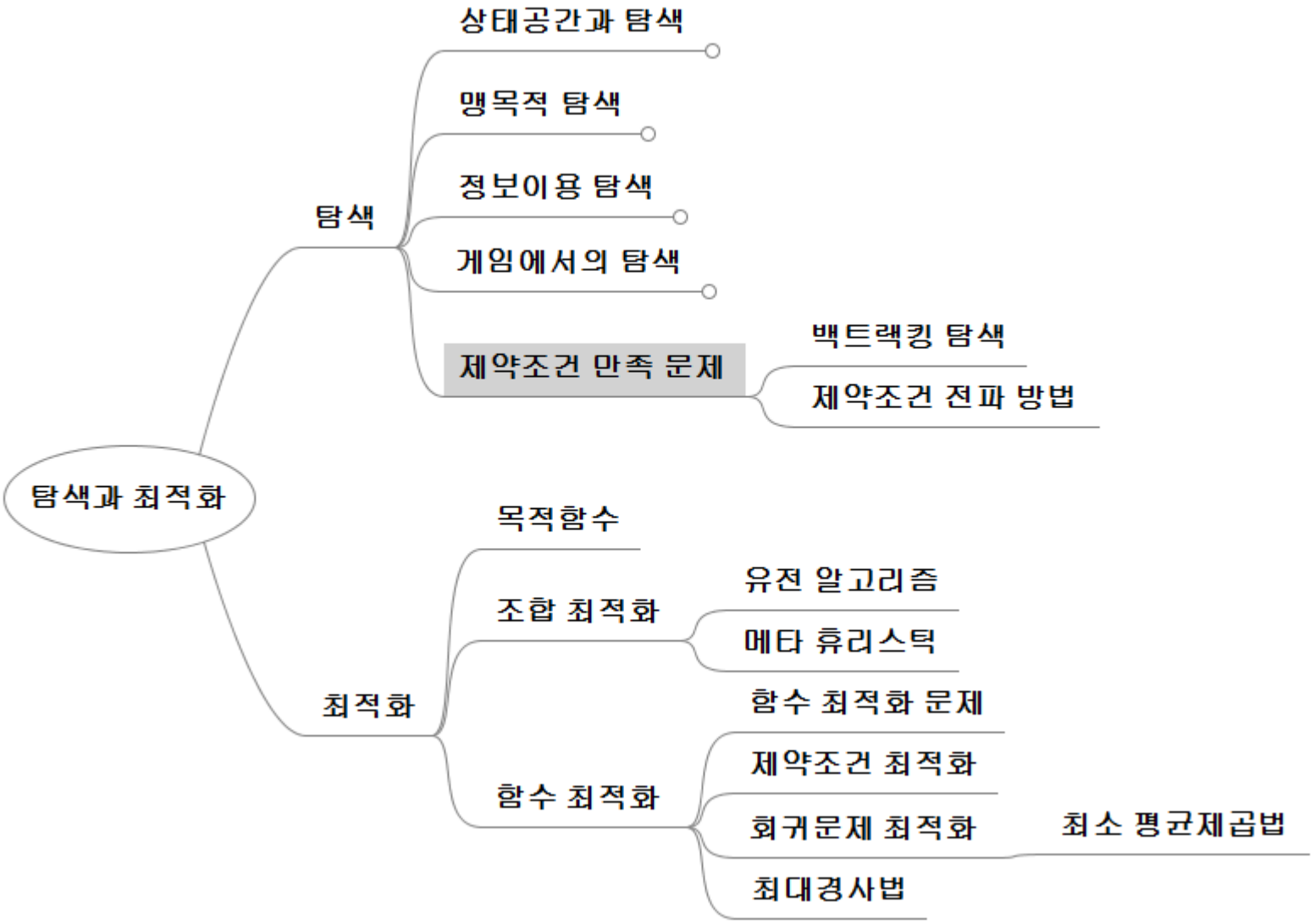








제약조건 만족 문제


탐색과 최적화
탐색
상태공간과 탐색
맹목적 탐색
정보이용 탐색
게임에서의 탐색
제약조건 만족 문제
백트랙킹 탐색
제약조건 전파 방법
최적화
목적함수
조합 최적화
유전 알고리즘
메타 휴리스틱
함수 최적화 문제
함수 최적화
제약조건 최적화
회귀문제 최적화
최소 평균제곱법
최대경사법

6. 최적화

❖ **최적화**(optimization)

- 여러 가지 **허용되는 값들 중**에서 주어진 **기준**을 **가장 잘 만족하는 것**을 선택하는 것

- **목적함수**(objective function)
  - 최소 또는 최대가 되도록 만들려는 함수

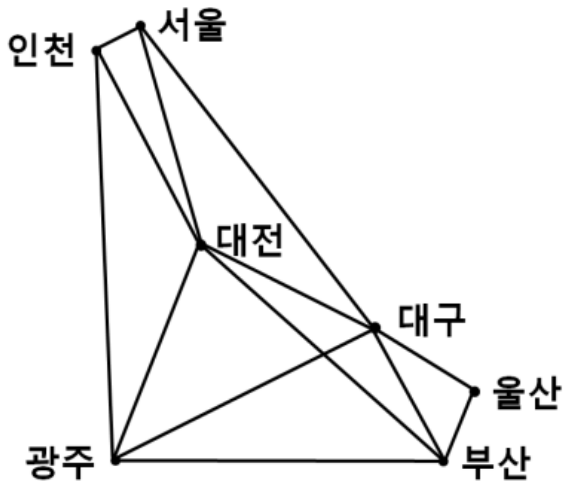
- **조합 최적화**
  - 유전 알고리즘
- **함수 최적화**
  - 최대 경사법
  - 제약 함수 최적화

조합 최적화

❖ **조합 최적화(combinatorial optimization)**

- **순회 판매자 문제**(TSP)와 같이 주어진 항목들의 조합으로 해가 표현되는 최적화 문제

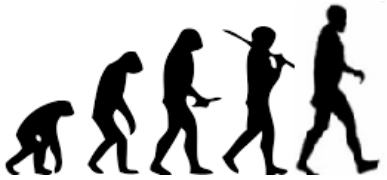
  - 순회 판매자 문제의 목적함수 : 경로의 길이



(서울,인천,광주,부산,울산,대전,서울)

(서울,인천, 대전, 광주,부산,울산, 서울)

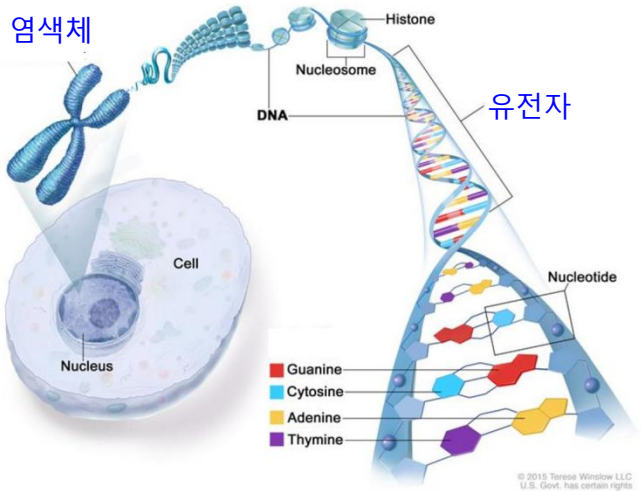
유전 알고리즘



❖ **유전 알고리즘**(genetic algorithm, **GA**)

- 생물의 **진화**를 **모방**한 **집단 기반**의 **확률적 탐색** 기법(John Holland, 1975)
- 대표적인 **진화 연산**(evolutionary computation)의 하나
  - 유전 알고리즘, 유전자 프로그래밍(genetic programming), 전화 전략(evolutionary strategy)

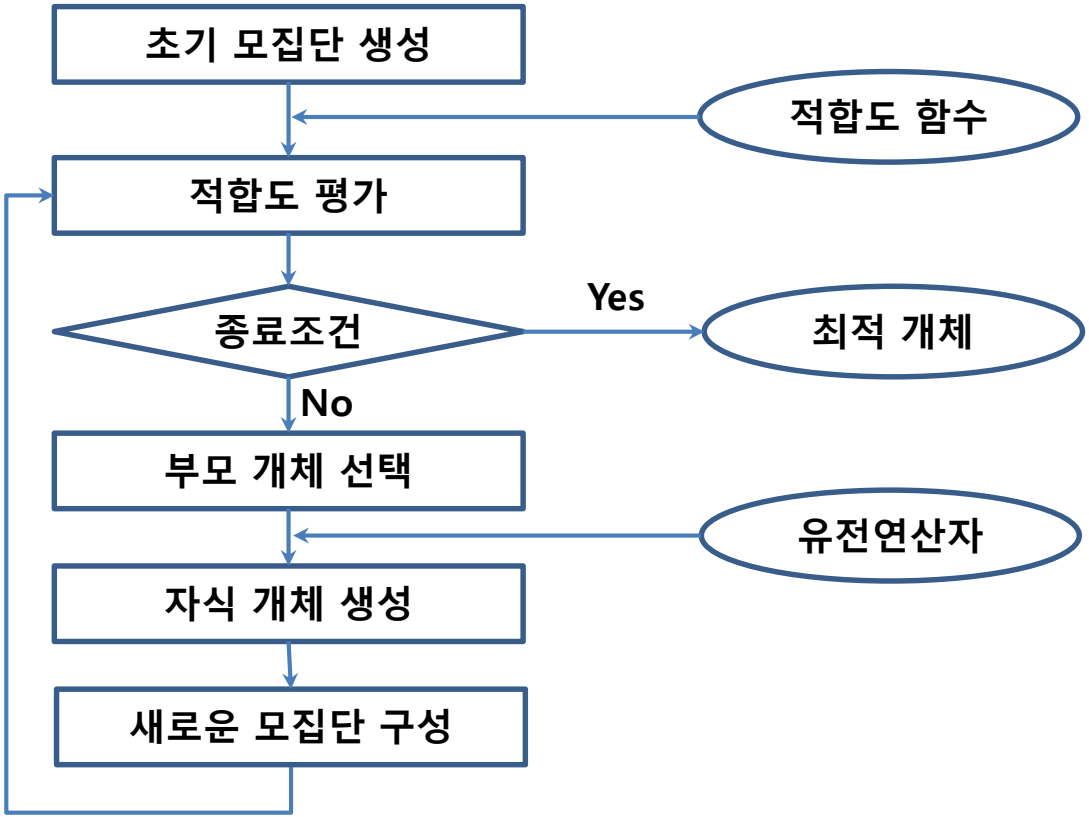
- **생물의 진화**
  - **염색체**(chromosome)의 **유전자**(gene)들이 **개체** 정보 코딩
  - **적자생존**(fittest survival)/**자연선택**(natural selection)
    - **환경**에 **적합도**가 높은 개체의 높은 생존 및 후손 번성 가능성
    - 우수 개체들의 높은 자손 증식 기회
    - 열등 개체들도 작지만 증식 기회
  - **집단**(population)의 진화
    - **세대**(generation) 집단의 변화
  - **형질 유전**과 **변이**
    - 부모 유전자들의 **교차**(crossover) 상속
    - **돌연변이**(mutation)에 의한 변이



유전 알고리즘

❖ **유전 알고리즘** – cont.

- 생물 **진화**와 **문제 해결**
  - 개체 ⇔ 후보 해(candidate solution)
  - 환경 ⇔ 문제(problem)
  - 적합도 ⇔ 해의 품질(quality)



유전 알고리즘

❖ **유전 알고리즘** – cont.

- **후보해**(candidate solution) **표현**
  - 염색체(chromosome) 표현

1	0	1	1	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	1

(0.6 0.8 . . . 1.2 0.9)

(E2 E5 E3 . . . E11 E7)

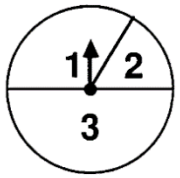
- **모집단**(population)
  - 동시에 존재하는 염색체들의 집합

- **적합도 함수**(fitness function)
  - 후보해가 **문제의 해**(solution)로서 **적합한 정도**를 평가하는 함수

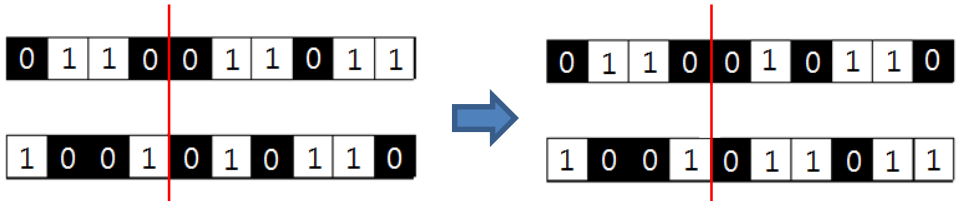
유전 알고리즘

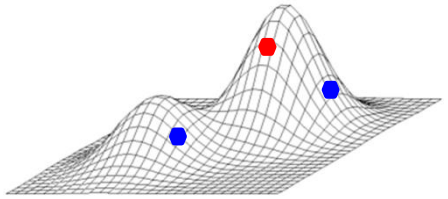
❖ **유전 알고리즘** – cont.

- **부모 개체 선택**(selection)
  - 높은 적합도의 개체가 새로운 개체를 생성할 확률이 높도록 함
  - 적합도에 비례하는 **선택확률**
    - 예. 개체 1의 적합도: 10, 개체 2의 적합도: 5, 개체 3의 적합도: 15

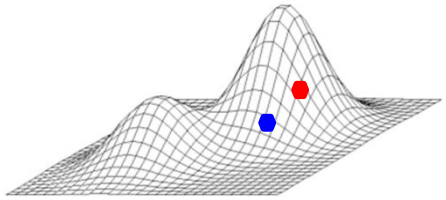


- **유전 연산자**(genetic operator) : 새로운 개체 생성
  - **교차(crossover) 연산자**





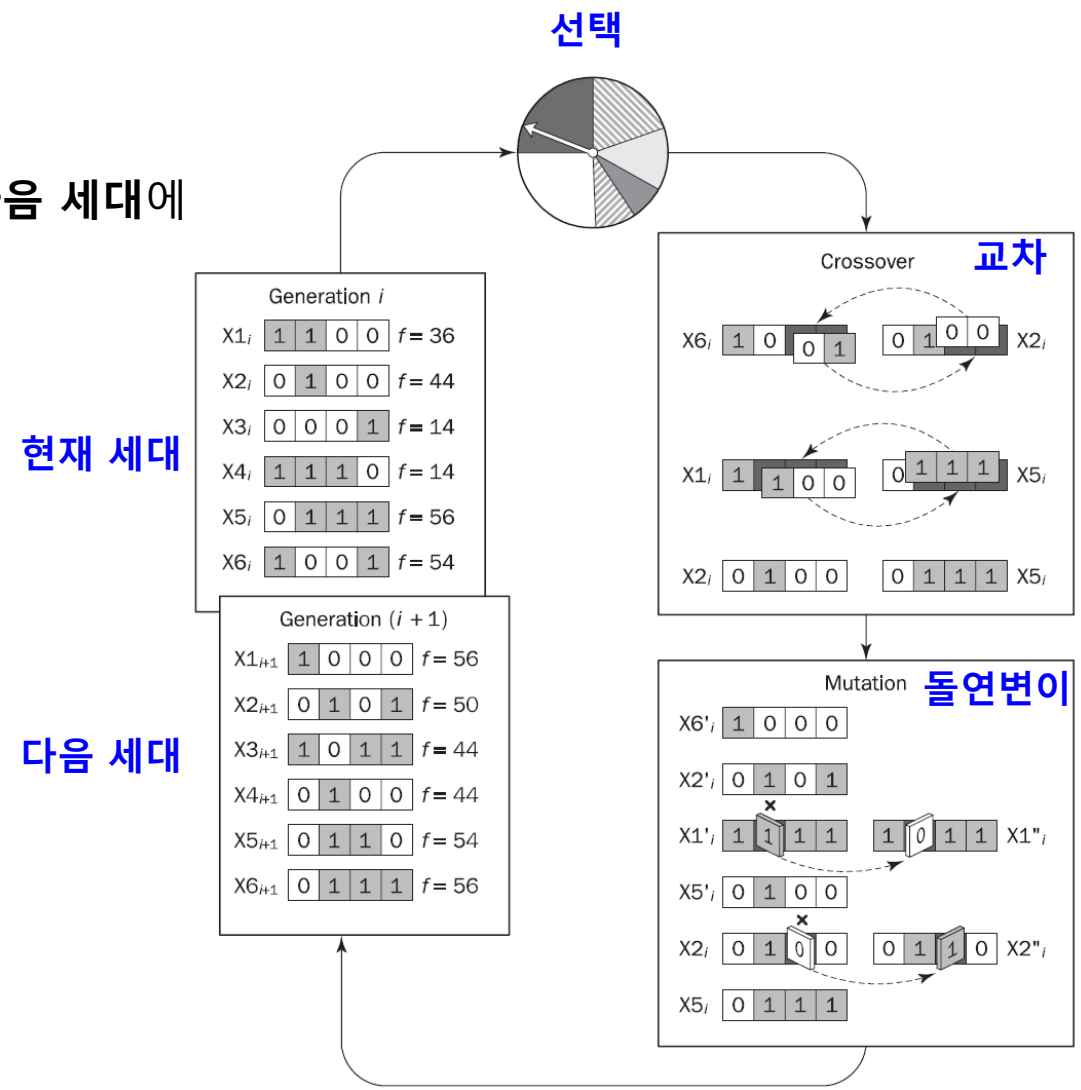
  - **돌연변이(mutation) 연산자**



유전 알고리즘

❖ **유전 알고리즘** – cont.

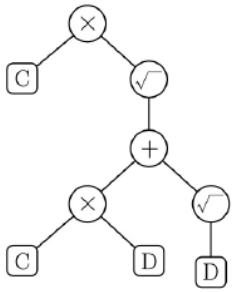
- **세대(generation) 교체**
  - **엘리트주의(elitism)**
    - **우수한 개체**를 **다음 세대**에 유지

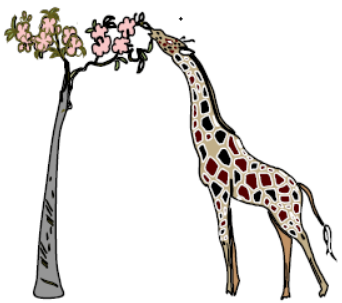


메타 휴리스틱

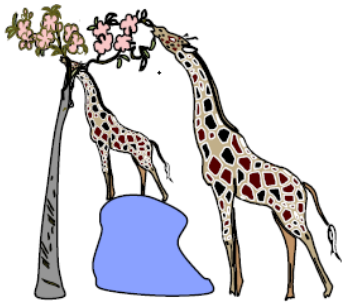
❖ **메타 휴리스틱**(meta heuristics)
- 최적해는 아니지만 우수한 해를 빠르게 찾기 위한 휴리스틱적인 문제해결 전략

- 유전 알고리즘 (genetic algorithm)
- 모방 알고리즘(memetic algorithm)
- 입자 군집 최적화(particle swarm optimization, PSO)
- 개미 집단(ant colony) 알고리즘
- 타부 탐색(Tabu search)
- 담금질 기법(simulated annealing)
- 하모니 탐색(Harmonic search)
- 유전 프로그래밍(genetic programming)



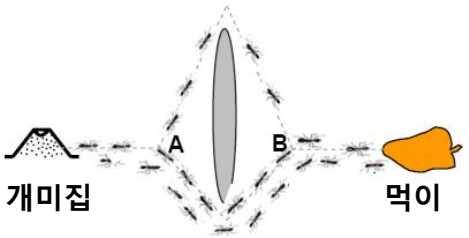


유전 알고리즘



모방 알고리즘

입자 군집 최적화



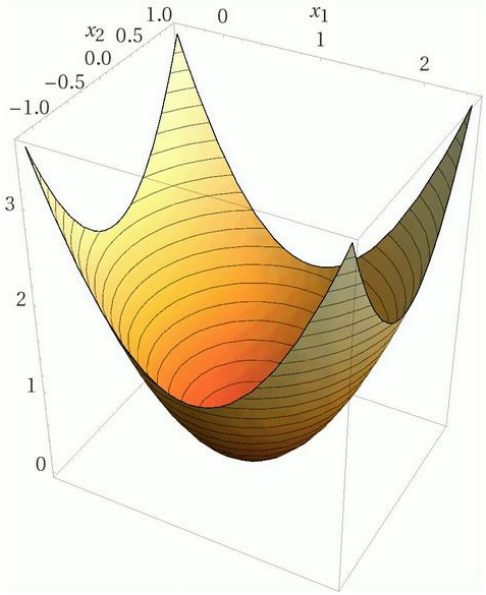
개미집단 알고리즘

image source: Tarek Hegazy

함수 최적화

❖ **함수 최적화(function optimization)**

- 어떤 **목적 함수**(objective function)가 있을 때, 이 함수를 **최대**로 하거나 **최소**로 하는 **변수 값**를 찾는 최적화 문제



Find x_1, x_2

which minimizes $f(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + {x_2}^2$

목적함수 (objective function)

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} = 2x_1 - 2 = 0 \qquad x_1 = 1$$

$$\frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} = 2x_2 = 0 \qquad x_2 = 0$$

$$({x_1}^*, {x_2}^*) = (1,0)$$

함수 최적화

❖ **제약조건 최적화**(constrained optimization)

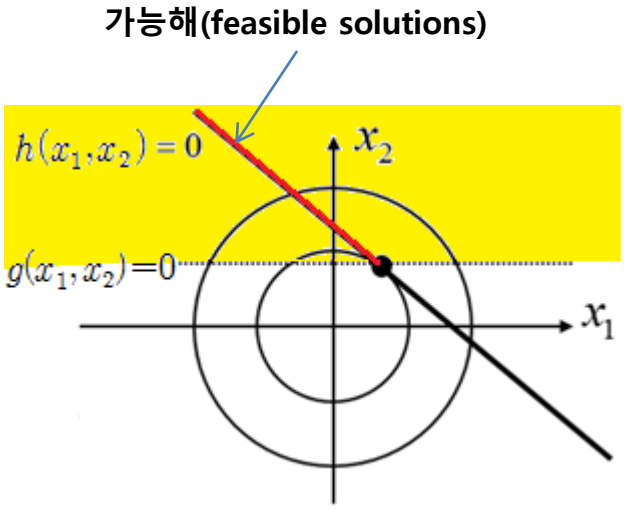
- **제약조건**(constraints)을 만족시키면서 **목적함수**를 **최적화**시키는 변수값들을 찾는 문제

Find x_1, x_2

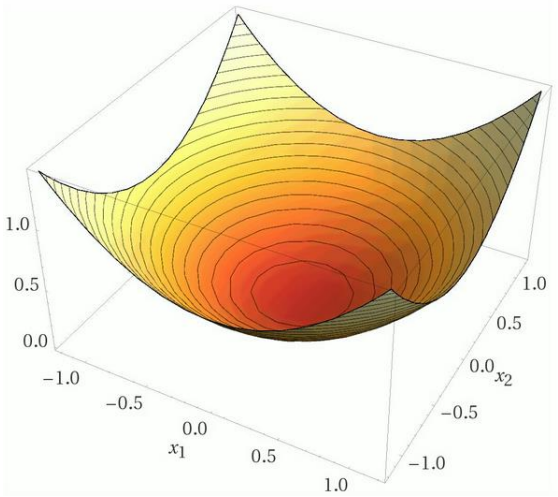
which minimizes $f(x_1,x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)$

subject to $h(x_1,x_2) = 1 - x_1 - x_2 = 0$

$$g(x_1,x_2) = \frac{3}{4} - x_2 \leq 0$$



제약조건
(constraints)



- 기계학습 방법인 SVM의 학습에서 사용

함수 최적화

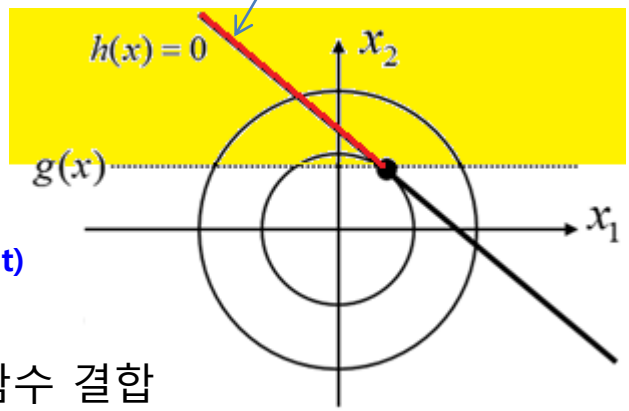
❖ 제약조건 최적화(constrained optimization)

Find x_1, x_2

which minimizes $f(x_1,x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)$

subject to $h(x_1,x_2) = 1 - x_1 - x_2 = 0$

$$g(x_1,x_2) = \frac{3}{4} - x_2 \le 0$$



- **라그랑주(Lagrange) 함수** : 제약조건들과 목적함수 결합

$$L(x_1,x_2,\lambda,\alpha) = f(x_1,x_2) + \lambda h(x_1,x_2) + \alpha g(x_1,x_2) \qquad \lambda, \alpha : \text{라그랑주 승수(Lagrange multiplier)}$$

$$= \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \lambda(1 - x_1 - x_2) + \alpha\left(\frac{3}{4} - x_2\right) \qquad (\alpha \ge 0)$$

- **최적화 방법**

$$\min_{x_1,x_2 \in FS} f(x_1,x_2) = \min_{x_1,x_2} \max_{\lambda,\alpha} L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)$$ FS : 가능해(feasible solution)의 집합

$$\min_{x_1,x_2} \max_{\lambda,\alpha} L(x_1,x_2,\lambda,\alpha) \ge \max_{\lambda,\alpha} \min_{x_1,x_2} L(x_1,x_2,\lambda,\alpha) \ge \max_{\lambda,\alpha} L_d(\lambda,\alpha)$$

$$L_d(\lambda,\alpha) = \min_{x_1,x_2} L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)$$

쌍대함수(dual function)

- 쌍대함수를 최대화하면서 상보적 여유성을 만족하는 x_1, x_2를 구함

$$\alpha g(x_1,x_2) = 0$$

상보적 여유성(complementary slackness)

함수 최적화

❖ **제약조건 최적화**(constrained optimization) – cont.

$$L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)=\frac{1}{2}(x_1^2+x_2^2)+\lambda(1-x_1-x_2)+\alpha\left(\frac{3}{4}-x_2\right)$$

$$L_d(\lambda,\alpha)=\min_{x_1,x_2}L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)$$

$$\frac{\partial L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)}{\partial x_1}=x_1-\lambda=0 \quad x_1=\lambda$$

$$\frac{\partial L(x_1,x_2,\lambda,\alpha)}{\partial x_2}=x_2-\lambda-\alpha=0 \quad x_2=\lambda+\alpha$$

$$L_d(\lambda,\alpha)=-\lambda^2-\frac{1}{2}\alpha^2-\lambda\alpha+\lambda+\frac{3}{4}\alpha$$

$$\max_{\lambda,\alpha}L_d(\lambda,\alpha)$$

$$\frac{\partial L_d(\lambda,\alpha)}{\partial\lambda}=-2\lambda-\alpha+1=0 \qquad \frac{\partial L_d(\lambda,\alpha)}{\partial\alpha}=-\alpha-\lambda+\frac{3}{4}=0$$

$$\lambda=\frac{1}{4} \quad \alpha=\frac{1}{2} \qquad \alpha\left(\frac{3}{4}-x_2\right)=0 \quad x_2=\frac{3}{4} \qquad 1-x_1-x_2=0 \quad x_1=\frac{1}{4}$$

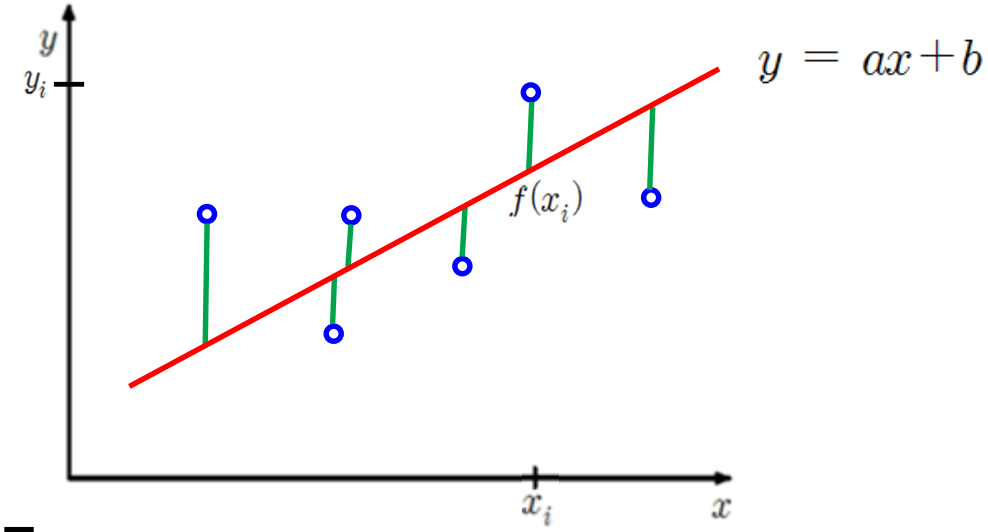
$$\therefore \; x_1=\frac{1}{4} \quad x_2=\frac{3}{4}$$

함수 최적화

❖ **회귀(regression) 문제의 최적 함수**

- 주어진 **데이터**를 가장 잘 **근사**(近似, approximation)하는 **함수**
- **최소 평균제곱법**(least mean square method)
  - **오차 함수**(error function) 또는 **에너지 함수**(energy function)를 최소로 하는 함수를 찾는 방법

$$E = \frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - f(x_i))^2$$



  - **최적화 문제**

Find a,b which minimizes $\min_{a,b} \frac{1}{2N}\sum_{i=1}^{N}(y_i - ax_i - b)^2$

함수 최적화

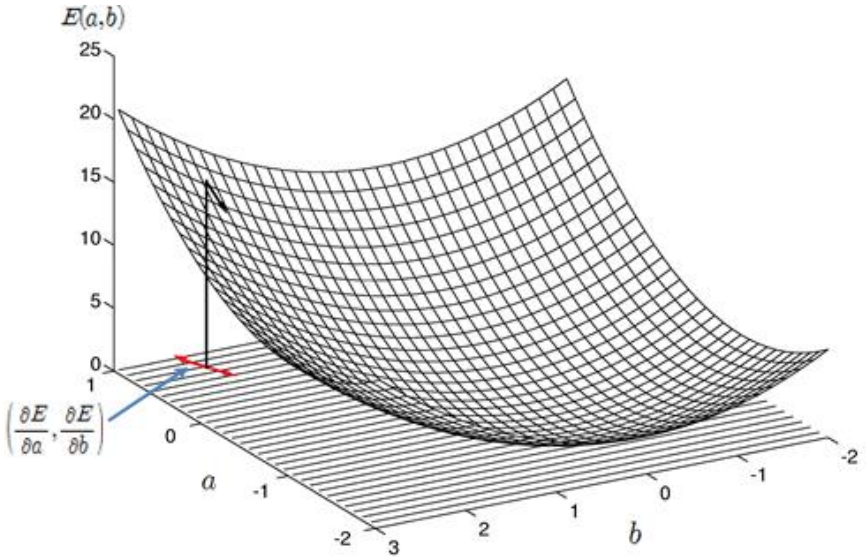
❖ **경사 하강법**(gradient descent method)

- 함수의 **최소값 위치**를 찾는 문제에서
  오차 함수의 **그레디언트**(gradient) 반대 방향으로 조금씩 움직여 가며
  최적의 파라미터를 찾으려는 방법
- **그레디언트**
  - 각 파라미터에 대해 편미분한 벡터 $\left(\frac{\partial E}{\partial a}, \frac{\partial E}{\partial b}\right)$

- 데이터의 입력과 출력을 이용하여 각 파라미터에 대한 그레디언트를 계산하여 **파라미터**를 **반복적**으로 **조금씩 조정**

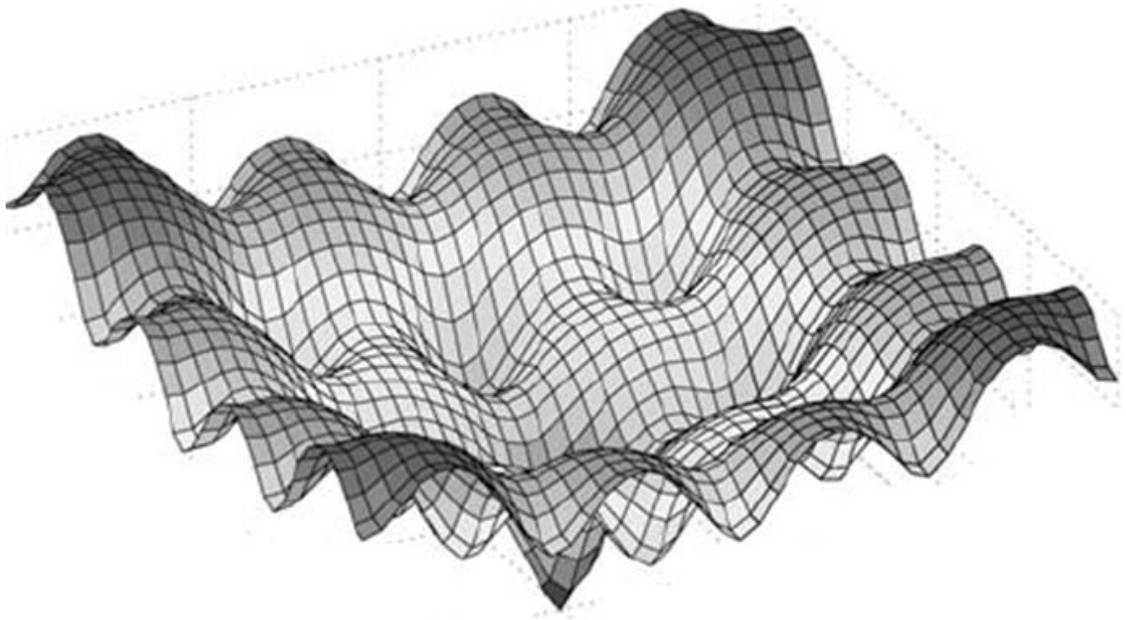
$$a^{(t+1)} = a^{(t)} - \eta \frac{\partial E}{\partial a}$$

$a^{(t)}$: 현 시점에서 파라미터 a의 값
η : 학습율 $(0 < \eta < 1)$



함수 최적화

- **최대 경사법**(gradient descent method)
  - 회귀 모델, 신경망 등의 기본 학습 방법
  - 국소해(local minima)에 빠질 위험
  - 개선된 형태의 여러 방법 존재



요 약

- 탐색
  - 상태공간과 탐색
    - 상태 공간, 상태 공간 그래프
  - 맹목적 탐색
    - 깊이 우선 탐색, 너비 우선 탐색, 반복적 깊이 심화 탐색, 양방향 탐색
  - 정보이용 탐색
    - 휴리스틱, 언덕 오르기 방법, 최상우선 탐색, 빔탐색, A* 알고리즘
  - 게임에서의 탐색
    - 게임트리, mini-max 알고리즘, α-β 가지치기, 몬테카를로 트리 탐색
  - 제약조건 만족 문제
    - 백트랙킹 탐색, 제약조건 전파 방법

- 최적화
  - 조합 최적화
    - 유전 알고리즘, 메타 휴리스틱
  - 함수 최적화
    - 함수 최적화 문제, 제약조건 최적화, 경사하강법