

13주차 3차시 해 탐색 알고리즘의 이해 III

【학습목표】

1. 모의 담금질 기법을 이해할 수 있다.
2. 모의 담금질 기법 교환을 이해할 수 있다.

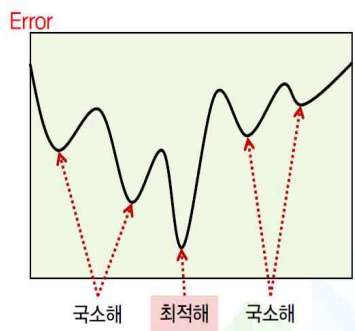
지난 강의 정리

1. 해 탐색 알고리즘이란

NP-완전 문제의 해를 탐색하기 위한 방법 중에서 가장 대표적인 알고리즘으로 백트래킹 (Backtracking) 기법, 분기한정 기법, 유전자 알고리즘, 모의 담금질 알고리즘을 통해 적절한 해를 탐색하는 것을 해 탐색 알고리즘이라 한다.

▶ 탐색 공간

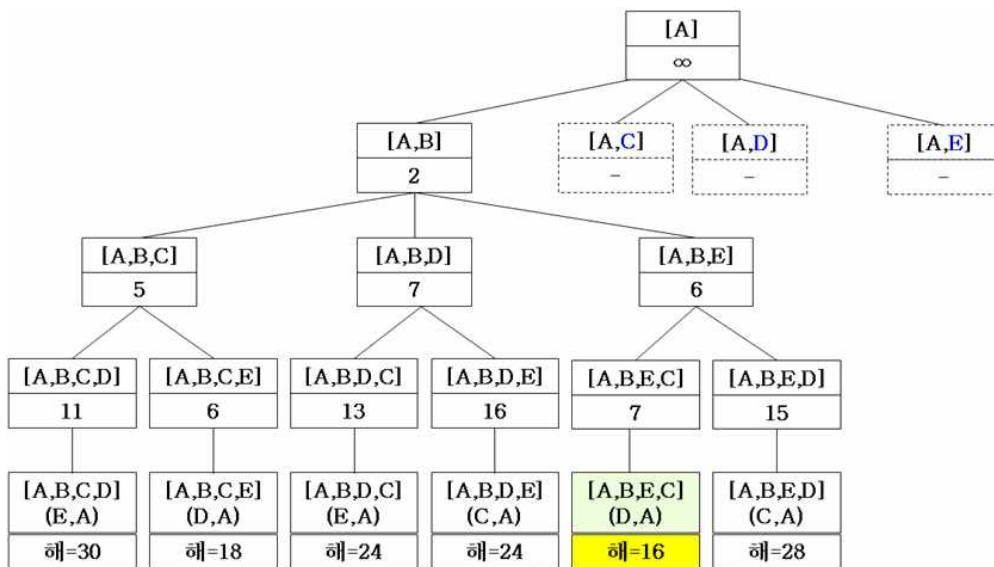
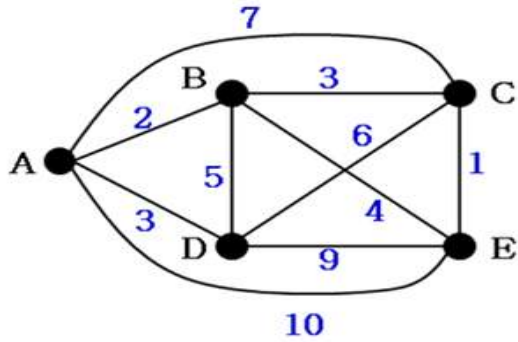
- 모든 가능한 해의 공간



2. 백 트래킹 기법

- 백트래킹(Backtracking) 기법은 해를 찾는 도중에 ‘막히면’ (즉, 해가 아니면) 되돌아가서 다시 해를 찾아 가는 기법으로 상태 공간 트리에서 깊이 우선 탐색 (Depth First Search) 방법으로 해를 찾는 알고리즘이다.
- 백트래킹 기법은 최적화 (optimization) 문제와 결정 (decision) 문제를 해결할 수 있다.
- 결정 문제: 문제의 조건을 만족하는 해가 존재하는지의 여부를 ‘yes’ 또는 ‘no’가 답하는 문제이다.

- ☞ 미로 찾기
- ☞ 해밀토니안 사이클 (Hamiltonian Cycle) 문제
- ☞ 서양 장기 여왕 말(n-Queens)문제
- ☞ 부분 집합의 합 (Subset Sum) 문제 등



따라서 최종해= [A,B,E,C,D,A]이고, 거리=16이다.

3. 분기 한정 기법

- 백트래킹 기법은 깊이 우선 탐색수행
- 최적화 문제에 대해서는 최적해가 상태 공간 트리의 어디에 있는지 알 수 없으므로, 트리에서 대부분의노드를 탐색하여야 함
- 입력의 크기가 커지면 해를 찾는 것은 거의 불가능
- 분기 한정(Branch-and-bound) 기법은 이러한 단점을 보완하는 탐색 기법
- 분기 한정 기법은 상태 공간 트리의 각 노드 (상태)에 특정한 값 (한정값)을 부여
- 노드의 한정값을 활용하여 가지치기를 함으로서 백트래킹기법 보다 빠르게 해를 찾음
- 분기 한정 기법에서는 가장 우수한 한정값을 가진 노드를 먼저 탐색하는 최선 우선 탐색 (Best First Search)으로 해를 찾음

◎ 분기 한정 기법의 효율적인 탐색 원리

- ① 최적해를 찾은 후에, 탐색하여야 할 나머지 노드의 한정값이 최적해의 값과 같거나 나쁘면 더 이상 탐색하지 않는다.
- ② 상태 공간 트리의 대부분의 노드가 문제의 조건에 맞지 않아서 해가 되지 못한다.
- ③ 최적해가 있을만한 영역을 먼저 탐색한다.

- Line 1: 초기 상태 [A]의 한정값 계산
- 초기 상태는 경로를 시작하기 전이므로, 각 점에 인접한 선분의 가중치 중에서 가장 작은 2개의 가중치의 합을 구한 다음에, 모든 점의 합의 1/2을 한정값으로 정한다.

점 A: 2, 3

점 B: 2, 3

점 C: 1, 3

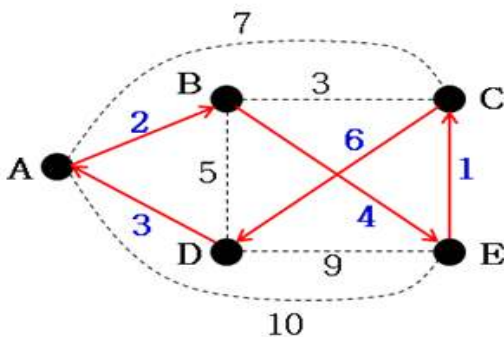
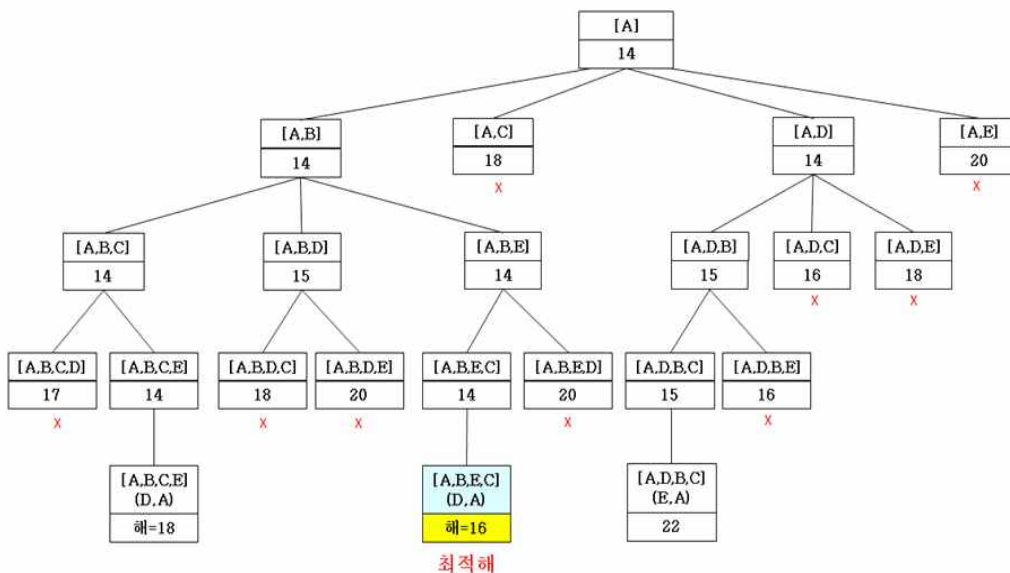
점 D: 3, 5

점 E: 1, 4

- 따라서 초기 상태의 한정값은 다음과 같이 계산 된다.

A B C D E

- $[(2+3) + (2+3) + (1+3) + (3+5) + (1+4)] \times 1/2 = 27/2 = 14$



- 백트래킹 알고리즘이 방문한 상태 공간 트리의 노드 수는 총 51개
- 분기 한정 알고리즘은 22개
- 이처럼 최적화 문제의 해를 탐색하는 데는 분기 한정 기법이 백트래킹 기법보다 훨씬 우수한 성능을 보임
- 분기 한정 알고리즘은 한정값을 사용하여 최적해가 없다고 판단되는 부분은 탐색을 하지 않고 최선 우선 탐색을 하기 때문이다.

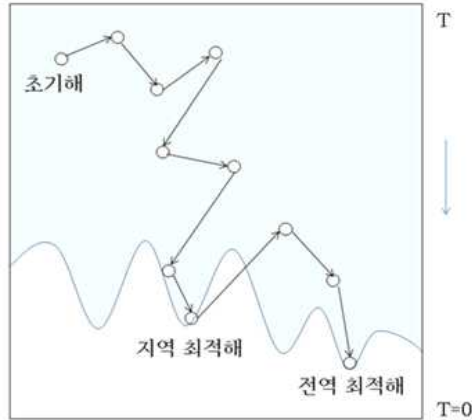
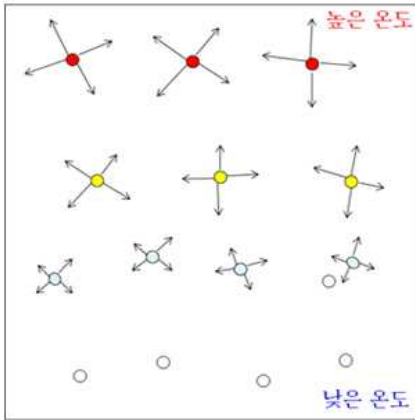
4. 유전자 알고리즘

- 유전자 알고리즘 (Genetic Algorithm, GA)은 다윈의 진화론으로부터 착안된 해 탐색 알고리즘이다.
- 즉, '적자생존'의 개념을 최적화 문제를 해결하는데 적용한 것이다.
- 유전자 알고리즘은 여러 개의 해를 임의로 생성하여 이들에 대해 선택, 교차 돌연변이 연산을 반복 수행하여 마지막에 가장 우수한 해를 리턴한다.
- 유전자 알고리즘은 문제의 최적해를 알 수 없고, 기존의 어느 알고리즘으로도 해결하기 어려운 경우에, 최적해에 가까운 해를 찾는데 매우 적절한 알고리즘이다.

학습내용1 : 모의 담금질 기법 이란

1. 모의 담금질 (Simulated Annealing) 기법

- 모의 담금질 (Simulated Annealing) 기법은 높은 온도에서 액체 상태인 물질이 온도가 점차 낮아지면서 결정체로 변하는 과정을 모방한 해 탐색 알고리즘이다.
- 용융 상태에서는 물질의 분자가 자유로이 움직이는데 이를 모방하여, 해를 탐색하는 과정도 특정한 패턴 없이 이루어진다.
- 그러나 온도가 점점 낮아지면 분자의 움직임이 점점 줄어들어 결정체가 되는데, 해 탐색 과정도 이와 유사하게 점점 더 규칙적인 방식으로 이루어진다.
- 이러한 방식으로 해를 탐색하려면, 후보해에 대해 이웃 하는 해(이웃해)를 정의하여야 한다.
- 아래의 오른쪽 그림에서 각 점은 후보해이고 아래쪽에 위치한 해가 위쪽에 있는 해보다 우수한 해이다. 또한 2개의 후보해 사이의 화살표는 이 후보 해들이 서로 이웃하는 관계임을 나타낸다.



- 앞의 그림은 모의 담금질 기법이 최솟값을 탐색하는 과정을 보이고 있다.
- 높은 T에서의 초기 탐색은 최솟값을 찾는데도 불구하고 확률 개념을 도입하여 현재해의 이웃해 중에서 현재해 보다 '나쁜' 해로(위 방향으로) 이동하는 자유로움을 보인다.
- 그러나 T가 낮아지면서 점차 탐색은 아래 방향으로 향한다.
- 즉, T가 낮아질수록 위 방향으로 이동하는 확률이 점차 작아진다.
- 앞의 그림에서 처음 도착한 골짜기 (지역 최적해, local optimum)에서 더 이상 아래로 탐색할 수 없는 상태에 이르렀을 때 '운 좋게' 위 방향으로 탐색하다가 전역 최적해 (global optimum)를 찾은 것을 보여준다.
- 그러나 유전자 알고리즘과 마찬가지로 모의 담금질 기법도 항상 전역 최적해를 찾아 준다는 보장은 없다.
- 모의 담금질 기법의 또 하나의 특징은 하나의 초기 해로부터 탐색이 진행된다는 것이다.
- 반면에 유전자 알고리즘은 여러 개의 후보해를 한 세대로 하여 탐색을 진행한다.
- 다음은 모의 담금질 기법의 기본적인 알고리즘이다.

SimulatedAnnealing

```

1. 임의의 후보해 s를 선택한다.
2. 초기 T를 정한다.
3. repeat
4.   for i = 1 to  $k_T$  { //  $k_T$ 는 T에서의 for-루프 반복 횟수이다.
5.     s의 이웃해 중에서 랜덤하게 하나의해 s'를 선택한다.
6.      $d = (s'의\ 값) - (s의\ 값)$ 
7.     if ( $d < 0$ )      // 이웃해인 s'가 더 우수한 경우
8.        $s \leftarrow s'$ 
9.     else            // s'가 s보다 우수하지 않은 경우
10.       $q \leftarrow (0,1)$  사이에서 랜덤하게 선택한수
11.      if ( $q < p$ )  $s \leftarrow s'$  // p는 자유롭게 탐색할 확률이다.
    }
12.   $T \leftarrow \alpha T$  // 1보다 작은 상수를 T에 곱하여 새로운 T를 계산
13. until (종료 조건이 만족될 때까지)
14. return s

```

- Line 1: 임의의 해 s를 선택하여 탐색을 시작한다.
- Line 2: 충분히 높은 값의 T를 실험을 통해 정한다.
- Line 3~12의 repeat-루프는 종료 조건이 만족될 때까지 수행된다. repeat-루프 내에서는 for-루프가 k_T 만큼 반복 수행된다.

→ k_T 는 현재 T에서 for-루프가 수행되는 횟수인데, 일반적으로 T가 작아질수록 k_T 가 커지도록 조절한다.

→ k_T 는 입력의 크기와 이웃하는 해의 수 등에 따라 실험하여 정한다.

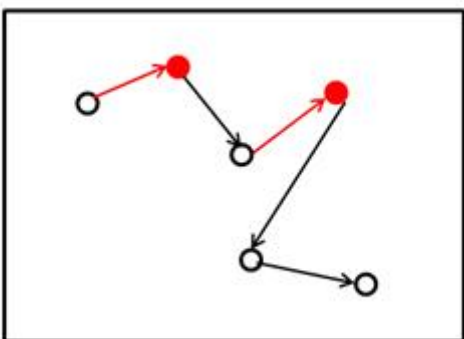
- Line 5: 현재 해인 s에 이웃하는 해 중에서 임의로 s'를 선택
- Line 6: s'와 s의 값의 차이인 d를 계산한다.

해의 값은 유전자 알고리즘에서의 적합도와 같다.

- Line 7의 if-조건에서는 s'가 s보다 우수한 해이면 다음 탐색을 위해 s'가 현재 해인 s가 된다.
- Line 9~11: s'가 s보다 우수하지 않더라도 0~1사이에서 랜덤하게 선택한 수 q가 확률 p보다 작으면, s'가 현재 해인 s가 될 기회를 준다.

→ 즉, 이 기회가 그림에서 최소값을 찾는에도 불구하고 위쪽에 위치한 이웃해로 탐색을 진행하는 것이다.

→ 여기서 p는 자유롭게 탐색할 확률이다.



- Line 12: T를 일정 비율 α 로 감소시킨다. 실제로 $0.8 \leq \alpha \leq 0.99$ 범위에서 미리 정한 냉각율 α (cooling ratio)를 T에 곱하여 새로운 T를 계산한다.

일반적으로 α 를 0.99에 가까운 수로 선택하여, T가 천천히 감소되도록 조절한다.

- Line 13의 종료 조건은 더 이상 우수한 해를 찾지 못하거나, 미리 정한 repeat-루프의 최대 반복 횟수의 초과 여부로 정한다.

- 마지막으로 repeat-루프가 끝나면 line 14에서 현재 해인 s를 리턴 한다.

- 모의 담금질 기법은 T가 높을 때부터 점점 낮아지는 것을 확률 p에 반영시켜서 초기에는 탐색이 자유롭다가 점점 규칙적이 되도록 한다.

- 그러므로 확률 p는 T에 따라서 변해야 한다.

→ T가 높을 땐, p도 크게 하여 자유롭게 탐색할 수 있도록 하고,

→ T가 0이 되면, p를 0으로 만들어서 line 11에서 나쁜 이웃해 s'가 s가 되지 못하도록 한다.

- p에 반영시켜야 할 또 하나의 요소는 s'와 s의 값의 차이 d이다.

→ d 값이 크면, p를 작게 하고,

→ d 값이 작으면, p를 크게 한다.

- 이렇게 하는 이유는 값의 차이가 클수록 p를 크게 하면 그 동안 탐색한 결과가 무시되어 랜덤하게 탐색하는 결과를 낳기 때문이다.

- 이 2가지 요소를 종합하여 확률 p는 다음과 같이 정의된다.

$$p = 1 / e^{d/T} = e^{-d/T}$$

- 위의 식에서 T는 큰 값으로부터 0까지 변하고, d는 s'와 s의 값의 차이이다.

학습내용2 : 모의 담금질 기법 삽입, 교환

- 모의 담금질 기법으로 해를 탐색하려면, 먼저 후보해에 대한 이웃해를 정의 하여야 한다.

- 여행자 문제의 이웃 해 정의 3가지 예

1. 삽입 (Insertion)

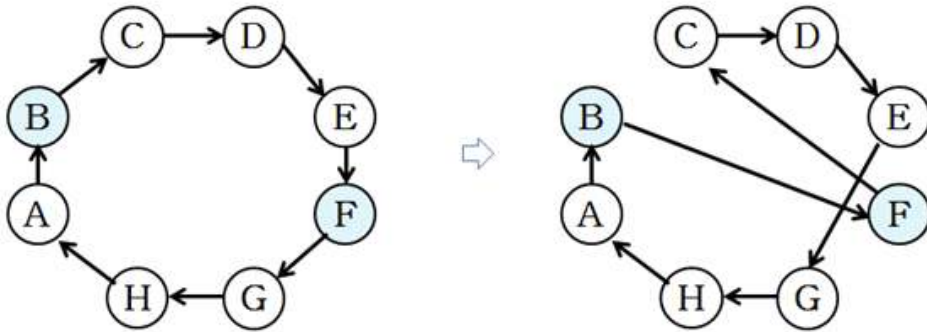
2. 교환 (Switching)

3. 반전 (Inversion)

1. 삽입 (Insertion)

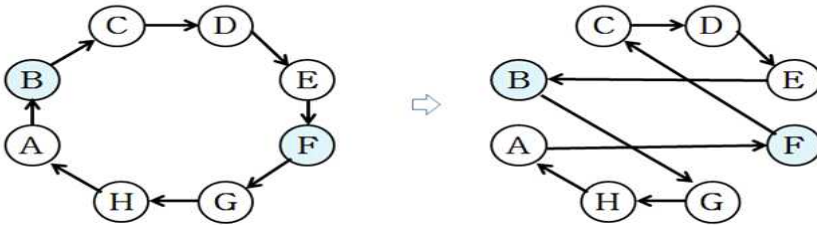
- 삽입 (Insertion): 2개의 도시를 랜덤하게 선택한 후에, 두 번째 도시를 첫 번째 도시 옆으로 옮기고, 두 도시 사이의 도시들은 오른쪽으로 1칸씩 이동한다.

- 아래의 예제에서 도시 B와 F가 랜덤하게 선택되었다고 하면, F가 B의 바로 오른쪽으로 이동한 후, B와 F 사이의 C, D, E를 각각 오른쪽으로 1칸씩 이동한다.



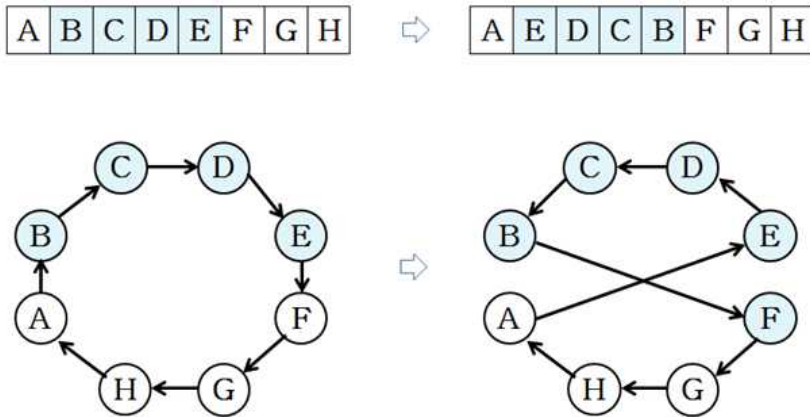
2. 교환 (Switching)

- 교환 (Switching): 2개의 도시를 랜덤하게 선택한 후에, 그 도시들의 위치를 서로 바꾼다.
- 아래의 예제에서 도시 B와 F가 랜덤하게 선택되었다면, B와 F의 자리를 서로 바꾼다.



3. 반전 (Inversion)

- 반전 (Inversion): 2개의 도시를 랜덤하게 선택한 후에, 그 두 도시 사이의 도시를 역순으로 만든다. 단, 선택된 두 도시도 반전에 포함시킨다.
- 아래의 예제에서는 도시 B와 E가 랜덤하게 선택 되었다면, [B C D E]가 역순으로 [E D C B]로 바뀐다.



4. SimulatedAnnealing 알고리즘

• SimulatedAnnealing 알고리즘은 line 5에서 현재 해 s에 이웃하는 해 중 하나를 랜덤하게 하나를 선택 하는데, 이때 위에 소개된 이웃해 정의 중의 하나를 이용하여 여행자 문제를 해결한다.

5. 응용

- 반도체 회로 설계
- 유전자 배열
- 단백질 구조 연구
- 경영 분야의 재고 계획
- 원자재 조달
- 상품의 생산 및 유통
- 운송 분야의 스케줄링
- 건축 분야의 빌딩 구획 및 배치 (Building Layout)
- 항공기 디자인
- 복합 물질 모델링
- 금융 분야의 은행의 재무 분석 등 매우 광범위하게 활용된다.

요약_백 트래킹 기법

- 백트래킹 (Backtracking) 기법은 해를 찾는 도중에 ‘막히면’ 되돌아가서 다시 해를 찾아 가는 기법으로 상태 공간 트리에서 깊이 우선 탐색 (Depth First Search) 방법으로 해를 찾는 알고리즘이다.
- 백트래킹 기법의 시간복잡도는 상태 공간 트리의 노드 수에 비례하고, 이는 모든 경우를 다 검사하여 해를 찾는 완전 탐색 (Exhaustive Search)의 시간복잡도와 같다. 그러나 일반적으로 백트래킹 기법은 ‘가지치기’를 하므로 완전 탐색보다 훨씬 효율적이다.

요약_분기 한정 기법

- 분기 한정 기법은 상태 공간 트리의 각노드(상태)에 특정한 값(한정값)을 부여하고, 노드의 한정값을 활용하여 가지치기를 함으로서 백트래킹 기법보다 빠르게 해를 찾는다.
- 분기 한정 기법에서는 가장 우수한 한정값을 가진노드를 먼저 탐색하는 최선 우선 탐색 (Best First Search)으로 해를 찾는다. 또한 분기 한정 기법은 최적화 문제를 해결하는데 적절하다.

요약_유전자 알고리즘

- 유전자 알고리즘 (Genetic Algorithm, GA)은 다윈의 진화론으로부터 창안된 해 탐색 알고리즘이다. 즉, '적자생존'의 개념을 최적화 문제를 해결하는데 적용한 것이다.
- 유전자 알고리즘은 여러 개의 해를 임의로 생성하여 이들에 대해 선택, 교차 돌연변이 연산을 반복 수행하여 마지막에 가장 우수한 해를 리턴한다
- 유전자 알고리즘은 문제의 최적해를 알수없고, 기존의 어느 알고리즘으로도 해결하기 어려운 경우에, 최적해에 가까운 해를 찾는데 매우 적절한 알고리즘이다.

요약_모의 담금질 기법

- 모의 담금질 (Simulated Annealing) 기법은 높은 온도에서 액체 상태인 물질이 온도가 점차 낮아지면서 결정체로 변하는 과정을 모방한 해 탐색 알고리즘이다.
- 유전자 알고리즘과 마찬가지로 모의 담금질 기법도 항상 전역 최적해를 찾아 준다는 보장은 없다.

【학습정리】

1. 모의 담금질 기법 이란

- 모의 담금질 (Simulated Annealing) 기법은 높은 온도에서 액체 상태인 물질이 온도가 점차 낮아지면서 결정체로 변하는 과정을 모방한 해 탐색 알고리즘이다.
- 용융 상태에서는 물질의 분자가 자유로이 움직이는데 이를 모방하여, 해를 탐색하는 과정도 특정한 패턴 없이 이루어진다.
- 그러나 온도가 점점 낮아지면 분자의 움직임이 점점 줄어들어 결정체가 되는데, 해 탐색 과정도 이와 유사하게 점점 더 규칙적인 방식으로 이루어진다.

2. 모의 담금질 기법 삽입, 교환

- 모의 담금질 기법으로 해를 탐색하려면, 먼저 후보해에 대한 이웃해를 정의 하여야 한다.
- 여행자 문제의 이웃 해 정의 3가지 예
 - ① 삽입 (Insertion)
 - ② 교환 (Switching)
 - ③ 반전 (Inversion)