

# Search and Iteration Algortihm

laofu

陈江伦

Institute for Interdisciplinary Information Sciences  
Tsinghua University

August 4, 2020



# 自我介绍？

参见去年课件“模拟费用流问题”



# 自我介绍？

参见去年课件“模拟费用流问题”

注意：去年的 Bonus 仍然没有被解决



# Topics to talk about?

总而言之，有关优化的问题。

## ① Search

- Basic Search model
- A\* search
- Adversarial search
- Monte Carlo Tree Search(MCTS)

## ② Iteration Algorithm

- Zero-order Optimization
- First-order Optimization
- Graph Iteration



# 计算问题



# What is Optimization?

minimize  $f(\mathbf{x})$   
subject to constraints on  $\mathbf{x}$

- 连续空间
- 离散空间
- 递归: Search
- 迭代: Do-While



# What is search problem?

A **search problem** consists of:

- $S$ : 状态空间
- $S_{start}$ : 初始态
- $Action(s)$ : 可行动作
- $Succ(s, a)$ : 后继
- $Cost(s, a)$ : 动作费用
- $IsEnd(s)$ : 目标函数

一个 **解** 是一个从初始态出发到达一个终止态的可行动作序列

# DFS

```
1: function DFS( $s$ )
2:   if IsEnd( $s$ ) then
3:     return True
4:   end if
5:   for  $a \in \text{Action}(s)$  do
6:     if DFS(Succ( $s, a$ )) then
7:       return True
8:     end if
9:   end for
10:  return False
11: end function
```



## DFS(non-recursive)

```
1: function DFS(s)
2:   St  $\leftarrow$  an empty stack
3:   St.push (s)
4:   if St is not empty then
5:     v  $\leftarrow$  St.pop()
6:     if IsEnd(v) then
7:       return True
8:     end if
9:     for a  $\in$  Action(v) do
10:      St.push(Succ(v, a))
11:    end for
12:  end if
13:  return False
14: end function
```

## BFS

```
1: function DFS( $s$ )
2:    $Q \leftarrow$  an empty queue
3:    $Q.\text{push}(s)$ 
4:   if  $Q$  is not empty then
5:      $v \leftarrow Q.\text{pop}()$ 
6:     if IsEnd( $v$ ) then
7:       return True
8:     end if
9:     for  $a \in \text{Action}(v)$  do
10:       $Q.\text{push}(\text{Succ}(v, a))$ 
11:    end for
12:  end if
13:  return False
14: end function
```

A\*



A\*

- 用一个启发式函数  $h(x) = x$  到达终点的估测距离



# A\*

- 用一个启发式函数  $h(x) = x$  到达终点的估测距离
- 一个启发式函数  $h$  是 **admissible**(Optimistic) 当且仅当：

$$0 \leq h(n) \leq h^*(n)$$

其中  $h^*(n)$  是到达终点的真实距离

## A\*

- 用一个启发式函数  $h(x) = x$  到达终点的估测距离
- 一个启发式函数  $h$  是 **admissible**(Optimistic) 当且仅当:

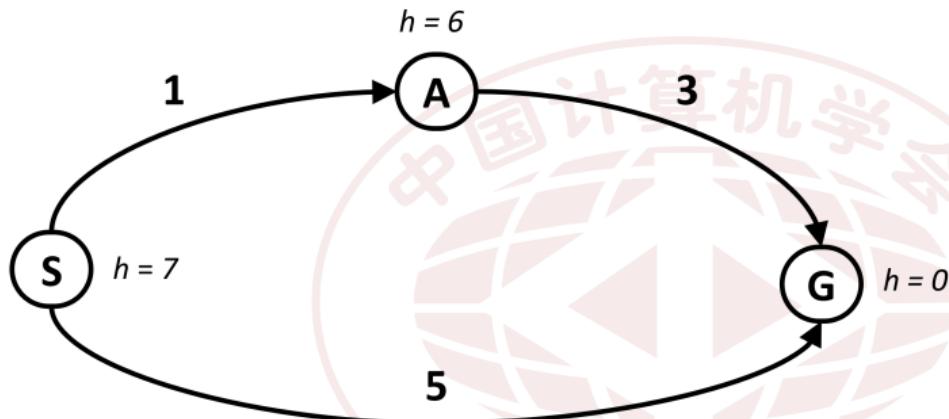
$$0 \leq h(n) \leq h^*(n)$$

其中  $h^*(n)$  是到达终点的真实距离

- Consistency:

$$h(A) - h(C) \leq w_{a,c}$$

# Is A\* Optimal?



- 问题在哪?
- 真实距离 < 估测距离
- 所以估测距离必须  $\leq$  真实距离

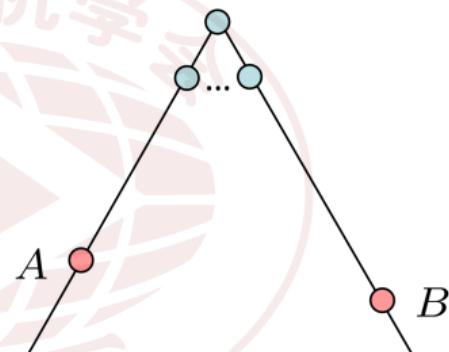
# Optimality of A\* Tree Search

假设:

- $A$  是最优解
- $B$  是一个非最优解
- $h$  满足 admissible

结论:

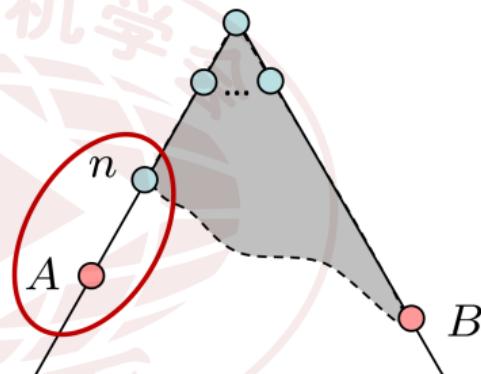
- $A$  将比  $B$  先访问到



# Optimality of A\* Tree Search: Blocking

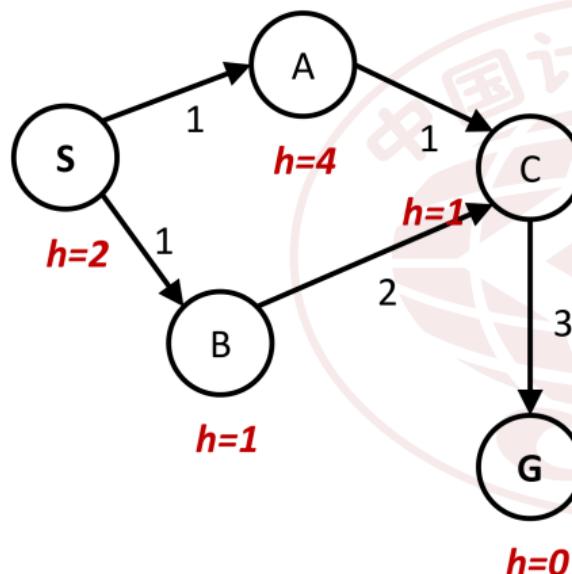
证明:

- $n$  为  $A$  的某一个祖先 (可以是  $A$  自己)
- 结论:  $n$  将比  $B$  先访问
- 令  $g(n)$  为到达  $n$  已经走过的费用总和
- $f(n) = g(n) + h(n)$
- $f(n) \leq g(A)$ : Admissibility
- $g(A) = f(A)$
- $g(A) < g(B)$
- $f(A) < f(B)$

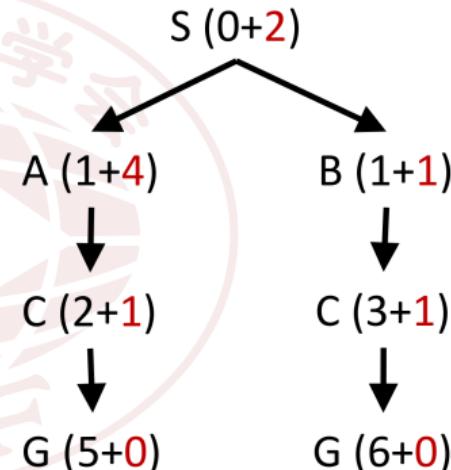


## How about A\* in Graph Search?

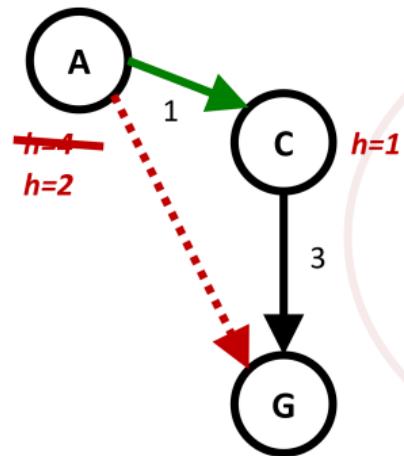
状态图



搜索树



## Consistency of Heuristics



• 首先，估价函数必须  $\leq$  最小费用

$$h(A) \leq w_{a,G}$$

• Consistency:

$$h(A) - h(C) \leq w_{A,C}$$

• 所以：

$$h(A) \leq w_{a,c} + h(C)$$

# K-shortest path

## Problem

找到  $S$  到  $T$  的第  $k$  短路

## Algorithm

启发式函数:  $h(x)$

一直迭代直到  $x$  被取出  $x$  次为止

# IDA\*

## Problem

找到深度最浅的节点

DFS? 节省空间，但是无法限制搜索深度

BFS? 按深度搜索，但是消耗过多的空间

两者结合: IDA\*

# IDA\*

## Algorithm

从低到高枚举答案

按照 DFS 序进行搜索.

# Adversarial search

MinMax Values

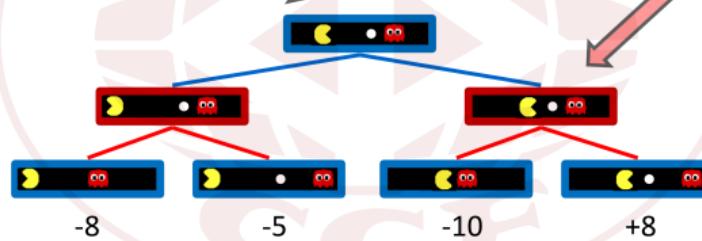
## Description

States Under Agent's Control:

$$V(s) = \max_{s' \in \text{successors}(s)} V(s')$$

States Under Opponent's Control:

$$V(s') = \min_{s \in \text{successors}(s')} V(s)$$



Terminal States:  
 $V(s) = \text{known}$

# MinMax Search

```
1: function MAX-VALUE(state)
2:    $v \leftarrow -\infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \max(v, \text{Min-Value}(\text{succ}))$ 
5:   end for
6:   return  $v$ 
7: end function
```

```
1: function MIN-VALUE(state)
2:    $v \leftarrow \infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \min(v, \text{Max-Value}(\text{succ}))$ 
5:   end for
6:   return  $v$ 
7: end function
```

# MinMax Search

```
1: function MAX-VALUE(state)
2:    $v \leftarrow -\infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \max(v, \text{Min-Value}(\text{succ}))$ 
5:   end for
6:   return  $v$ 
7: end function
```

时间复杂度  $O(b^m)$   
空间复杂度  $O(m)$

```
1: function MIN-VALUE(state)
2:    $v \leftarrow \infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \min(v, \text{Max-Value}(\text{succ}))$ 
5:   end for
6:   return  $v$ 
7: end function
```

# Alpha-Beta Pruning

```
1: function MAX-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow -\infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \max(v, \text{Min-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \geq \beta$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\alpha \leftarrow \max(\alpha, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

```
1: function MIN-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow \infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \min(v, \text{Max-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \leq \alpha$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\beta \leftarrow \min(\beta, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

# Alpha-Beta Pruning

```
1: function MAX-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow -\infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \max(v, \text{Min-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \geq \beta$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\alpha \leftarrow \max(\alpha, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

```
1: function MIN-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow \infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \min(v, \text{Max-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \leq \alpha$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\beta \leftarrow \min(\beta, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

最优时间复杂度?

# Alpha-Beta Pruning

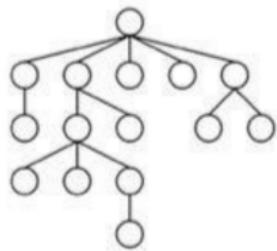
```
1: function MAX-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow -\infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \max(v, \text{Min-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \geq \beta$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\alpha \leftarrow \max(\alpha, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

```
1: function MIN-VALUE(state, $\alpha$ , $\beta$ )
2:    $v \leftarrow \infty$ 
3:   for each successor of state do
4:      $v \leftarrow \min(v, \text{Max-Value}(\text{succ}, \alpha, \beta))$ 
5:     if  $v \leq \alpha$  then
6:       return  $v$ 
7:     end if
8:      $\beta \leftarrow \min(\beta, v)$ 
9:   end for
10:  return  $v$ 
11: end function
```

最优时间复杂度?  $O(b^{m/2})$

# MCTS Overview

- 在树上采样搜索
- 迭代
  - 找一条采样路径
  - 更新权值函数



# Meeting the Middle

## Problem

有  $n$  个数，要求你找到一个和为 0 的非空子集。

$$n \leq 40$$

# Meeting the Middle

NOI2001 方程的解数

已知  $1 \leq x_i \leq m$ , 求方程  $\sum_{i=1}^n k_i x_i^{p_i} = 0$  有多少组整数解  
 $n \leq 6, m \leq 160, |\sum_{k_i} m^{p_i}| < 2^{31}$



# Dancing Links

- 精确覆盖问题
- 一个  $n \times m$  的 01 矩阵，要求选出一个行的子集，使得在这些选出的行中，每一列都恰好有一个 1。
- 数据结构：双向十字链表
- 固定一列，枚举选择使用哪一行
- 把这一列所有行全部删除

# Iteration

搜索：一般定义在树/图空间上

迭代：可以定义在树/图空间上，也可以定义在欧式空间/离散欧式空间上



爬山

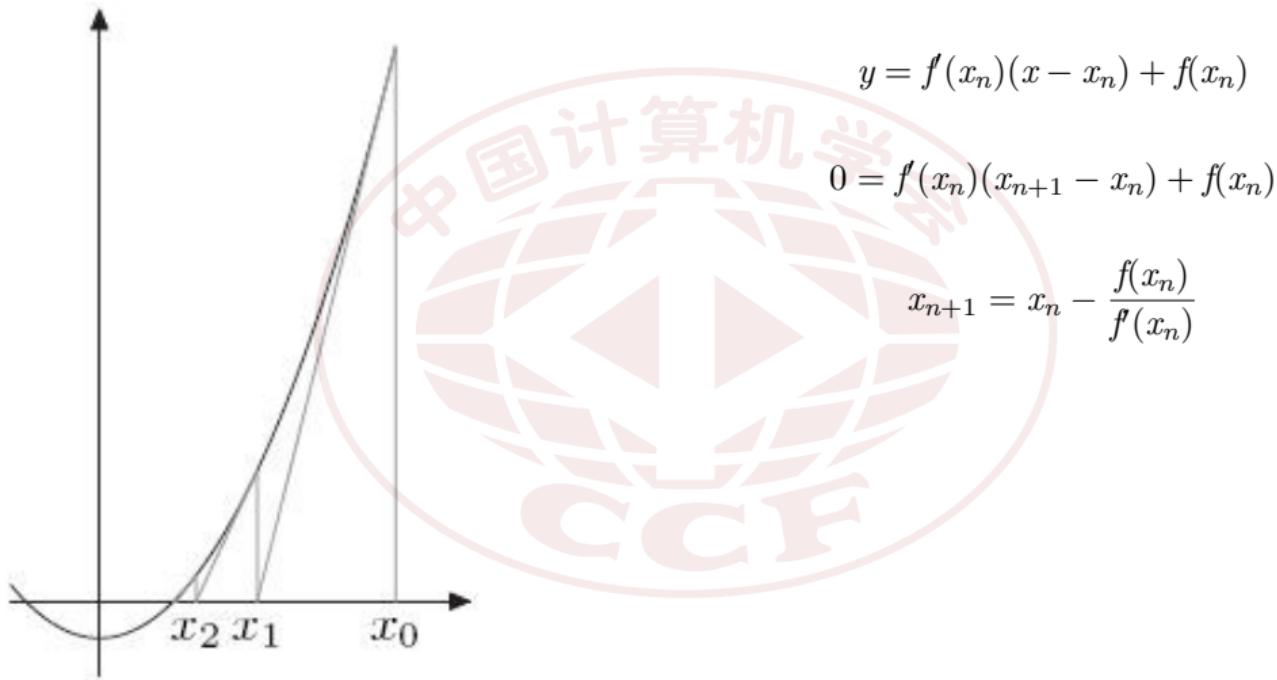
$$x_{n+1} = \operatorname{argmin}_{x' \in \text{Neighbor}(x_n)} (f(x'))$$

从一个点出发，每次按照最近的邻居走

# 模拟退火

$$P(x_n \rightarrow x') = \begin{cases} 1 & f(x') < f(x_n) \\ e^{\frac{f(x_n) - f(x')}{t}} & f(x') \geq f(x_n) \end{cases}$$

## Newton-Raphson method



# Failure Analysis

错误的初始点

$$x_0 = 0, f'(0) = 0.$$

循环的初始点

$$f(x) = 1 - x^2$$

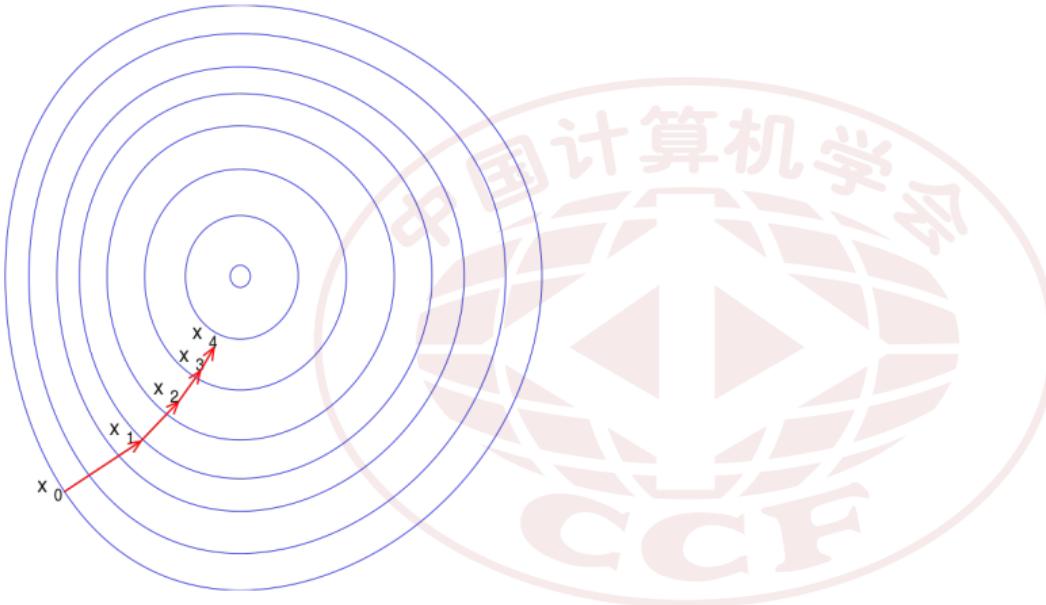
$$f(x) = x^3 - 2x + 2$$

Start from  $x_0 = 0$ .

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = -\frac{2}{-2} = 1$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 1 - \frac{1}{1} = 0$$

# Gradient descent(GD)



$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \alpha \nabla F(\mathbf{x}_n)$$

# Graph Iteration

## 赌徒问题

有一个赌徒，初始有  $k$  元，每次他有  $p$  的概率赢一元钱，有  $1 - p$  的概率输一元钱，当他赢到  $m$  元时就会离开，当手上没有钱时就会破产，问赌徒一直玩下去离开的概率

# Graph Iteration

## 赌徒问题

有一个赌徒，初始有  $k$  元，每次他有  $p$  的概率赢一元钱，有  $1 - p$  的概率输一元钱，当他赢到  $m$  元时就会离开，当手上没有钱时就会破产，问赌徒一直玩下去离开的概率

迭代做法：

随机一个函数  $f_0 : [m] \rightarrow [0, 1]$

$$\forall n \in \mathbb{N}^+, f_n(x) = pf_n(x - 1) + (1 - p)f_n(x + 1)$$

# Graph Iteration

## 赌徒问题 2

有一个赌徒，初始有  $k$  元，每次他可以押注  $t$  元，然后有  $p$  的概率再赢  $t$  元钱，有  $1 - p$  的概率输掉这  $t$  元，当他赢到  $\geq m$  元时就会离开，当手上没有钱时就会破产，问赌徒一直玩下去离开的概率

# Graph Iteration

## 赌徒问题 2

有一个赌徒，初始有  $k$  元，每次他可以押注  $t$  元，然后有  $p$  的概率再赢  $t$  元钱，有  $1 - p$  的概率输掉这  $t$  元，当他赢到  $\geq m$  元时就会离开，当手上没有钱时就会破产，问赌徒一直玩下去离开的概率

迭代做法：

随机一个函数  $f_0 : [m] \rightarrow [0, 1]$

$$\forall n \in \mathbb{N}^+, f_n(x) = \max_{y \in [1, x]} pf_n(x - y) + (1 - p)f_n(x + y)$$

# MDP Problem

MDP 问题：

- 状态集  $S$
- 可行动作  $A$
- 转移函数  $P(s, a, s') \rightarrow [0, 1]$
- 收益函数  $R(s)$
- 衰减系数  $\gamma \in (0, 1]$

如果一个样本的状态序列为  $s_0, s_1, \dots, s_n$ , 则总收益为  $\sum_{i=0}^n R(s_i)\gamma^i$

# Topological Graph?

动态规划问题

$$V(s) = R(s) + \max_{a \in A} \sum_{s' \in S} \gamma P(s, a, s') V(s')$$



# General Graph?

迭代做法：

随机一个初始分布  $V_0$

$$\forall n \in \mathbb{N}^+ V_n(s) = R(s) + \max_{a \in A} \gamma \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_{n-1}(s)$$



## 收敛性

$$\begin{aligned} & V_{n+1}(s) - V_n(s) \\ = & \gamma \left| \max_{a \in A} \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_n(s') - \max_{a \in A} \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_{n-1}(s') \right| \\ \leq & \gamma \max_{a \in A} \left| \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_n(s') - \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_{n-1}(s') \right| \\ \leq & \gamma \max_{s \in S} |V_n(s) - V_{n-1}(s)| \end{aligned}$$

# Policy Iteration

另一种迭代做法：

初始一个策略  $\pi_0$  和权值  $V_0$

$\forall n \in \mathbb{N}^+$ :

$$\pi_n(s) = \operatorname{argmax}_{a \in A} \gamma \sum_{s' \in S} P(s, a, s') V_{n-1}(s)$$

$$V_n(s) = R(s) + \gamma \sum_{s' \in S} P(s, \pi_n(s), s') V_{n-1}(s)$$

# HNOI2013

一场足球赛共  $N$  支球队参加，比赛规则如下：

- 每两只球队之间踢一场比赛
- 平局各得一分
- 胜利得三分，败者不得分

给定每个球队的最终得分，求有多少种可能的比赛结果， $N \leq 10$

Thanks



Thanks

- €€£? (Awesome salary)



GL & HF

记得去年的 Bonus 哟！

