Max-cut problem with hybrid genetic algorithm

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 디카페인 바닐라 라떼 | | | | | | |
|  |  |  | 2019-1130 |  |  |  |
|  |  |  | 김영은 |  |  |  |

# 해의 표현 및 사용한 GA 전체 구조

## 해의 표현

A, B를 그래프 노드 수만큼 나열한 문자열로 표현한다. 문자열 인덱스와 노드 번호가 같고, 각 자리 글자가 노드가 속한 그룹을 의미한다. ‘AABB’, ‘BBAA’처럼 서로 뒤집어 동치가 되는 경우는 고려하지 않으며 서로 다른 것으로 취급한다.

## GA 구조

1. 노드 수만큼 A, B를 50% 확률로 뽑아 해를 생성하고, 유효한 해인지 검사함과 동시에 cost를 계산하고 대륙을 부여해 부모 집합을 만든다.

2. 서로 같은 대륙끼리 교배한다. female이 cost 토너먼트로 먼저 뽑히고, female의 cost에 따라 male이 선택된다. 부모의 cost 차이가 서로 일정량 이하인 경우만 교배하도록 하며, 낮은 확률로 cost 차이가 큰 부모 쌍이 생성될 수 있고, 자식도 더 많이 생성한다. female의 cost 선택 범위에 존재하는 해가 없다면 female과 같은 cost를 갖는 해 중에서 male을 선택한다. 자식은 60%의 확률로 cost가 더 큰 부모의 유전자를 선택하며 생성 직후 돌연변이를 시도하고, 생성된 자식을 검사해 유효하지 않은 것은 바로 제거한다.

3. 일정 수의 부모 쌍을 선택하여 생성된 자식들은 자신보다 cost가 약간 작은 유전자를 대체한다. 대체할 유전자가 없는 경우 높은 확률로 제거되지만 낮은 확률로 아무 조건 없이 pool에 편입될 수 있다.

4. 제한 시간 내에 대륙 내 진화가 수렴하면 대륙마다 지역 최적화를 잠깐 시도한 후 위와 같은 과정으로 대륙 통합 진화를 시작한다. 수렴 후 남은 시간동안 지역 최적화를 시도한다.

5. 진화 및 지역 최적화가 끝나거나 제한 시간이 다 되었을 때 최선의 해를 반환한다.

# Dynamic programming을 활용한 방안

\* 지역 최적화를 할 때는 비슷한 해의 cost를 자주 계산하게 된다. 지역 최적화 내에서의 cost 계산에 대해 해를 key로 하고 cost를 value로 하는 memo map을 추가해 중복된 cost 계산을 줄였다. 이후 모든 해의 validation 과정에 memo를 사용해 전체적인 cost 계산 시간을 줄였다.

\* 지역 최적화를 할 때 해를 한 자리 변경해도 cost가 유지되는 경우가 있다. 이때 바뀐 해를 이용해 최적화를 계속하는 게 더 나은지, 이전 해를 이용하는 게 더 나은지 두 가지 경우에 대해 모두 지역 최적화 함수를 다시 호출하고 결과가 더 좋은 해를 사용하고자 했었다. 다만 재귀 호출된 지역 최적화 함수 내에서도 다시 재귀 호출을 하면 스택 오버플로우가 발생하여 재귀 호출은 한 번으로 제한한다. 이 방법으로 테스트한 결과, 성능이 하락하여 지금은 폐기하였다.

# 사용한 GA 연산자에 대한 설명과 DP 알고리즘 설명

\* validate: 해의 유효성을 검사함과 동시에 해의 cost를 계산한다. 계산한 모든 해의 cost는 map으로 저장하여 이후 재사용한다.

\* selection: 전체 유전자 풀을 두 대륙으로 나누어, 서로 같은 대륙끼리 교배한다. 부모의 cost 차이를 일정 수치로 제한하나 낮은 확률로 제한되지 않은 쌍이 생성될 수 있다. female이 먼저 선택되고, 그 결과 따라 male이 선택된다.

\* crossover: 해의 각 자리를 60% 확률로 부모 중 우월한 쪽의 것으로 선택한다.

\* mutation: 해의 길이를 기준으로 변이 시도 횟수를 정하고, 랜덤하게 발생 위치를 선택한다. 선택된 각 자리마다 일정 확률로 다시 선택하며, 이전의 값과 똑같을 수 있다. 해의 길이에 비례하여 평균 약 0.8% 발생하도록 한다.

\* replacement: generational GA 방식 이용, cost가 약간 작은 것과 대체한다. 대체 실패한 해는 낮은 확률로 그대로 pool에 포함된다.

\* local optimization: 현재 보유한 해 중 가장 좋은 것을 이용한다. 해의 각 자리를 무작위 순서로 선택하고 flip하여 cost가 같거나 커지는 쪽으로 해를 바꾼다. Simulated Annealing 방식을 사용하여 cost가 낮아진 경우의 미래 가능성도 함께 고려하도록 하며, 최적화를 진행할수록 cost가 낮아지는 방향으로 나아갈 확률이 감소한다. cost가 같거나 커지면 해당 확률을 약간 증가시킨다. validation 시간을 줄이기 위해 계산한 모든 해의 cost는 map에 저장되고 재사용된다.

# 테스트 결과 분석

지난 과제에서 제공했던 세 개의 샘플 인스턴스와 weighted\_chimera\_297.txt에 대해 GA를 각각 최소 30번씩 수행하여 가장 좋은 결과, 평균 결과, 표준편차를 테이블로 기록하고, 하나의 run을 선택해 분석한다.

## Sample run 통계

[Table 1]은 지난 과제에서 제공했던 세 개의 샘플 인스턴스와 weighted\_chimera\_297.txt에 대해 GA를 각각 최소 30번씩 수행하고 기록한 결과이다. GA의 성능 향상으로 인하여 결과가 안정된 세 개의 샘플 인스턴스는 31번씩 실행하고, 그래프의 복잡도가 높아 편차가 큰 chimera 데이터는 61번 실행하였다.

mean time은 각 데이터별 평균 결과 도출 시간으로 weighted 500 데이터를 제외하면 대부분 제한 시간보다 훨씬 짧은 시간 내에 결과를 출력한 것을 볼 수 있다. 이로부터 대부분 데이터는 진화와 지역 최적화 모두 종료 조건을 충족하고 실행을 종료했다는 것을 알 수 있다. 그럼에도 아직 평균 cost가 최고의 값으로 수렴하지 못했다는 점에서 본 보고서의 GA가 아직 미숙하다고 본다.

Table 1 Sample Test 통계

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **사용 데이터** | **runs** | **mean time(s)** | **min cost** | **max cost** | **mean cost** | **cost std** |
| **unweighted 50** | 31 | 0.792258 | 96 | 99 | 98.677419 | 0.791079 |
| **unweighted 100** | 31 | 4.210355 | 352 | 358 | 355.354839 | 2.429655 |
| **weighted 500** | 31 | 178.902903 | 4541 | 4670 | 4608.709677 | 32.513785 |
| **weighted chimera 297** | 61 | 20.334902 | 7300 | 8608 | 8088.065574 | 281.369500 |

## 텍스트, 라인, 도표, 스크린샷이(가) 표시된 사진 자동 생성된 설명Sample run 세대 분석

[Figure 1]은 weighted chimera 297 데이터의 세대별 cost 변화를 나타낸 것이다. 본 보고서의 GA 구조에 따라 이 그래프는 총 세 구역으로 나뉜다. 그래프가 크게 끊어지는 지점을 기준으로 왼쪽, 가운데, 오른쪽이 각각 첫 번째와 두 번째 대륙 진화, 대륙 통합 진화에서의 세대 변화를 나타낸다. 첫 번째 대륙은 178세대, 두 번째 대륙은 202세대, 마지막 진화는 2세대를 기록하여 총 382세대가 그래프에 표현되었고, 각각의 지역 최적화가 하나의 세대로 기록되었으므로 실제로 진화를 시도한 세대는 하나씩 차감하여 총 379세대이다. 그래프의 가로축은 세대 수, 세로축은 pool을 구성한 해의 cost 값을 나타내며, 그래프는 위에서부터 max, 75%, 50%, 25%, min 값을 나타낸다. 첫 번째 대륙의 초기 pool의 cost는 -33020 ~ -25192 사이였고 마지막엔 -22028 ~ 8304로 진화가 마무리되었다. 평균은 -29116.4776에서 -10340.2236로 상승했다.

Figure 1 weighted chimera 297

generational change

각 대륙 진화가 끝나고 한 번씩 지역 최적화를 시도하여 생성된 해를 모든 대륙에 추가했기 때문에 max 값이 첫 번째 대륙 진화 이후 급상승하는 것을 볼 수 있고, 이 수치는 지역 최적화가 아닌 진화만으로는 메꿀 수 없는 차이를 보인다. 두 번째 대륙 진화에서는 지역 최적화의 영향으로 순수하게 대륙에서 생성된 해의 최댓값을 알 수 없지만, 첫 번째 대륙 진화의 추이로 미루어 보건대, 75% 값과 큰 차이가 나지 않았을 것이라 짐작할 수 있다. 이 그래프에 나타난 세 번의 진화 중 두 번의 진화에서는 공통적으로 75%, 50%, 25% 값이 max 값을 향해 수렴할 때 min 값은 잘 수렴하지 않는 것을 관찰할 수 있는데, 이는 세대 교체 시 자식의 cost와 일정량 이하의 차이가 나는 해만 교체할 수 있도록 했기 때문에 품질 좋은 자식이 늘어날수록 cost가 낮은 해가 교체될 기회를 적게 받아 끝까지 교체되지 못하고 남기 때문인 것으로 볼 수 있다. 또한 앞서 두 대륙이 이미 진화가 수렴한 상태로 통합되어 마지막의 대륙 통합 진화에서는 사실상 진화라고 할 만한 과정이 없었던 것을 볼 수 있는데, 이 또한 본 보고서의 GA에 개선이 필요한 점이라고 할 수 있다.

# 시도해본 개선안

\* 지역 최적화를 추가하면서 다양한 방식으로 해의 품질을 높이려 해봤는데, 제한 시간이 있기 때문에 짧고 여러 번 실행되는 지역 최적화 보다는 길게 한 번에 실행되는 지역 최적화가 훨씬 효과가 좋았다.

\* 지난 과제 피드백에서, 세대 교체 과정을 좀 더 개선할 수 있을 것 같아 보인다는 말에 랜덤성을 줄이고 cost가 가장 나쁜 것부터 차례로 대체하게 해봤는데 오히려 결과 품질이 떨어졌다. 이후 원래의 방법을 유지하되 큰 의미가 없는 랜덤성만 제거하는 것으로 수정했다. 교체 대상 cost는 랜덤으로 뽑되 구체적인 교체 대상은 벡터의 맨 마지막 요소로 고정한다. cost가 다르면 유의미한 차이지만 cost가 같은 해끼리는 그다지 유의미한 차이가 나지 않는다고 생각했다.

\* 토너먼트 승률을 두 대상의 cost 차이에 비례하게 해봤는데, 해의 품질이 떨어져서 다시 고정수치로 바꿨다.

\* 지역 최적화 중 변이 전후 cost가 동일한 경우에 대해 재귀 호출을 이용해 더 전망이 좋은 것을 선택하면 결과도 더 좋아질 줄 알았는데 의외로 결과의 평균이 떨어졌다.

\* 초기 풀 크기가 100일 때 결과가 의외로 잘 나와서 50으로 줄여봤는데, 평균은 떨어지고 표준편차는 상승해서 다시 100으로 되돌렸다. 초기 풀이 클수록 결과가 잘 나오는 경향이 있는 건 맞는 것 같지만, 그래프의 크기가 클수록 수렴과 진화에 걸리는 시간이 길어져 시간 내에 충분한 결과를 내지 못해 100을 상한으로 잡기로 했다. 이후 여러 번의 수정을 거쳐 최종 제출본은 초기 pool 크기의 최솟값만을 보장하도록 되어 있다. 보장된 최솟값은 20이고, 그래프의 크기에 비례해 노드 수가 적을수록 큰 pool을 생성한다. 그래프 크기가 클 경우 진화에 시간이 더 오래 걸리는 점을 감안해 작은 그래프는 다양한 해를 이용하여 수렴에 더 집중하고 큰 그래프는 작은 pool에서 빠르게 수렴한 후 지역 최적화에 더 집중하게 했다. 교배 및 진화보다 지역 최적화로 개선되는 cost 변화량이 훨씬 큰 것 같아 이렇게 했다.

\* cost가 같은 해들의 공통된 부분을 모아 스키마로 삼고 교배 시 이 부분을 보호하게 해보려고 했는데, 막상 디버깅해보니 보호되는 글자 수는 지극히 적었고, cost는 있지만 스키마는 생성되지 않는 오류가 발생해 이 방안은 폐기했다.

\* 위의 스키마를 구현하는 부분에서, 스키마가 거의 나오지 않은 이유로 AABB와 BBAA처럼 글자는 정 반대지만 실제로는 동일한 해가 pool에 함께 존재하여 단순히 공통된 글자를 찾는 것만으로는 스키마를 만들 수 없었기 때문이라는 결론을 내렸었다. 그러므로 뒤집으면 서로 같아지는 해를 배제하기 위해 모든 해의 첫 글자를 A로 고정하고 보호해봤는데, 가능한 해의 다양성이 절반으로 줄어서 그런지 성능이 떨어졌다. 스키마 파악과 더불어 그래프에 존재하는 노드의 A 집단과 B 집단의 구분 방향이 고정되면 그 안에서 최적의 해를 찾는 데 도움이 될 거라 생각해서 시도한 것인데 결과는 그렇지 않았다.

\* 토너먼트 참가자 수를 2의 거듭제곱으로 맞추려다 보니 참가자 수를 정하는 코드가 복잡해져서 구현 방식을 큐로 바꿨다.

\* 지역 최적화에 Simulated Annealing 도입. 복잡도가 큰 그래프 데이터를 사용하면 결과 편차가 너무 크게 나오는 문제가 있었는데, 이 방법으로 weighted chimera 297 데이터의 테스트 편차가 1300대에서 200 중후반으로 줄었다. 평균도 약 2000가량 상승했다. 처음엔 cost가 나빠지면 온도를 감소시키기만 했는데, 그래도 수렴 속도가 너무 빠른 것 같아 cost가 같거나 좋아지면 약간 증가시키는 코드를 추가했고, 도움이 되었다. 이후엔 cost를 증가시키는 비율을 조정하면서 결과 편차를 줄이려고 했다. 이 알고리즘에 대해서는 chatGPT에게 배웠다. 온도와 그 변동폭은 그래프의 복잡도를 반영하기 위해 pool에 존재하는 최대 cost와 최소 cost의 차이 및 지역 최적화 전후 cost 차이에 비례하게 했다.

# discussion - 프로젝트 리뷰

프로젝트 진행 중 느낀 점, 잘 안 되는 점, 의외의 현상, 예상대로 된 점 등을 서술한다.

## 프로젝트 후기

\* 대륙을 분리하여 따로 진화시켜 수렴한 후에 다시 섞어서 교배하면 좀 좋은 해가 나올까 했는데 순수 GA와 크게 다르지 않아 약간 실망했다. 뭐가 문제인지는 잘 모르겠지만, 지역 최적화가 해의 품질을 상당히 높여서 다행이었다.

\* 지난 과제부터 비주얼 스튜디오의 빠른 실행을 위해 Release 상태로 실행을 해왔는데, 이 경우 실행 도중 오류가 나서 중단되었을 때 오류를 보여주지 않고 꺼진다는 것을 알게 되었다. 디버깅 모드가 따로 존재하는 이유가 있었다.

\* 돌연변이가 구현만 되어 있고 사용되지 않고 있었다. 확인 즉시 수정했다.

\* 여러 가지 하이퍼 파라미터들을 그래프 크기에 비례하는 랜덤 숫자로 해보니까, 랜덤성이 과하면 오히려 품질이 떨어지는 것 같다.

\* 지역 최적화에 시간을 많이 투자하는 게 좋다고 생각해 여러 자잘한 과정에서 시간을 줄이려는 고민을 많이 했다.

\* 지역 최적화 과정 중 Simulated Annealing의 온도를 다시 높이는 부분에서, 해의 cost가 높아지면 온도를 조금 높이고 그대로이면 온도를 더 올리는 게 좋은 해를 찾는 데 도움이 될 거라 생각했는데 실제로는 반대로 하는 게 평균도 좋고 표준편차도 작았다.

## 더 할 수 있는 것

\* 대륙마다 진화를 끝낸 후 대륙을 통합할 때, 새로운 자식들을 무작위로 대거 생성해서 편입시키면 pool의 수렴 정도는 떨어뜨리고 해의 다양성은 높일 수 있지 않을까? 가장 처음 순수 GA를 구상할 때 했던 생각인데, 그때는 프로젝트 요건에 안 맞기도 했고, 처음 써본 알고리즘이라 능력의 한계로 구현하지 못했고, 이번에는 하이브리드 GA 구상을 크게 개편하여 잊고 있다가 프로젝트 기한이 다 되어서야 생각나서 실천해보지 못했다.