

# Estudo de caso: Grupo D 3

*Gilmar Pereira, Maressa Tavares e Victor Ruela*

*30 de Setembro, 2019*

## 1 Summary

O presente trabalho realizou o delineamento e executou os testes estatísticos para avaliar o desempenho médio do algoritmo conhecido como Evolução Diferencial [1]. O algoritmo foi desenvolvido no ano de 1997 por Storn e Price e é um algoritmo simples de otimização multimodal, primeiramente desenvolvido para otimização de funções contínuas e variáveis numéricas discretas [2].

Para este trabalho o algoritmo DE (Differential Evolution) é equipado com duas configurações alterando a forma de recombinação e mutação dos algoritmos. As classes de funções para este experimento foi composta por funções Rosenbrock [3] de dimensões entre 2 e 250. Para se analisar os dados utilizou-se da técnica de blocagem determinando a quantidade de blocos e seus tamanhos, assim como o número de amostras por instância.

Realizou-se cálculo do número de blocos de acordo com [4] e o número de instâncias de acordo com [5]. Para teste das premissas de normalidade utilizou-se a ferramenta qqplot e o teste de shapiro-wilk. Para o teste da variância utilizou-se o teste Friedman.

## 2 Planejamento do Experimento

Nesta seção é apresentado o planejamento do experimento, descrevendo os objetivos e o delineamento do experimento.

### 2.1 Objetivo do Experimento

O objetivo deste experimento é analisar se existe alguma diferença entre duas configurações do algoritmo DE dentre as classes de funções, determinando a configuração de melhor desempenho ressaltando as magnitudes das diferenças encontradas.

### 2.2 Delineamento

Para o seguinte experimento serão realizados as seguintes etapas:

- Formulação das hipóteses de teste;
- Cálculo dos tamanhos amostrais, determinando a quantidade de instâncias e número de iterações do algoritmo;
- Coleta e tabulação dos dados;
- Realização dos testes de hipóteses;
- Estimativa da magnitude das diferenças;
- Validação das premissas;
- Resultados e Conclusões.

### 2.3 Hipóteses

Para a análise comparativa entre as configurações do algoritmo DE, determinou-se as seguintes hipóteses a serem testadas.

$$\begin{cases} H_0 : \mu_1 = \mu_2 \\ H_1 : \mu_1 \neq \mu_2 \end{cases}$$

Onde  $\mu_1$  e  $\mu_2$  são as médias amostras das configurações 1 e 2, respectivamente.

Além disso, foram definidos os seguintes parâmetros experimentais:

- Significância desejada:  $\alpha = 0.05$ .
- Mínima diferença de importância prática (padronizada):  $d^* = \delta^* / \sigma = 0.5$
- Potência mínima desejada  $\pi = 1 - \beta = 0.8$

## 2.4 Coleta dos Dados

Neste trabalho, cada amostra consiste em uma execução do algoritmo DE, para cada instância (dimensão da função objetivo) e configuração do algoritmo em questão (níveis). Foram escolhidas  $N = 30$  repetições de cada par instância-configuração, conforme recomendado como suficiente em [5]. A coleta de dados foi dividida em duas etapas, descritas nas seções a seguir. O código utilizado para a coleta de dados está disponível no apêndice deste trabalho.

### 2.4.1 Geração de arquivo de configuração do experimento

Esta etapa consiste em permitir que seja gerada um arquivo .csv contendo a configuração descrita a seguir. As rotinas foram implementadas de forma a permitir que seja criada a configuração para qualquer número de repetições  $N$ , instâncias  $I$ , grupos  $b$  e níveis  $a$ . Um último passo consiste em randomizar o arquivo de configuração e dividi-lo em 3 arquivos separados, a serem executados por cada membro do grupo. Isso garante que as amostras geradas são independentes e que o experimento seja completamente randomizado. Como o algoritmo demora um tempo considerável para sua execução, a divisão entre os participantes permitiu a sua execução em paralelo para otimizar o tempo necessário para gerar todos os dados. A tabela abaixo exibe um exemplo de arquivo de configuração gerado.

Table 1: Exemplo de arquivo de configuração

|   | X | algorithm | replicate | instance | group | result |
|---|---|-----------|-----------|----------|-------|--------|
| 5 | 5 | 1         | 30        | 94       | 28    | -1     |
| 6 | 6 | 1         | 29        | 140      | 42    | -1     |
| 7 | 7 | 2         | 8         | 113      | 34    | -1     |
| 8 | 8 | 2         | 16        | 7        | 3     | -1     |
| 9 | 9 | 1         | 5         | 118      | 35    | -1     |

### 2.4.2 Execução de arquivo de configuração

Com o arquivo de configuração disponível, o experimento está pronto para ser executado. A rotina desenvolvida carrega um arquivo informado e executa cada linha em sequência, para os seus respectivos parâmetros. À medida em que uma amostra é finalizada, o resultado é salvo no próprio arquivo de configuração, na coluna **result**. Isso garante com que seja possível continuar a execução do arquivo sem perder as amostras realizadas anteriormente, caso ocorra algum problema.

## 3 Análise Exploratória dos Dados

Nesta seção é apresentado uma análise exploratória dos dados, verificando normalidade, homocedasticidade, independência e realizando a validação das premissas.

Como o estudo consiste na comparação entre resultados da execução de um algoritmo de otimização, a dimensão da função objetivo é um fator importante. Logo, a análise exploratória será feita considerando exemplos de instâncias de baixa, média e alta dimensão. Inicialmente, os dados do experimento são carregados, sendo as instâncias 4, 50 e 100 escolhidas para avaliação, e um gráfico boxplot é criado para uma análise preliminar.

```

sample.all <- read.csv('data.all.instances.csv', header = TRUE)
sample.all$configuration <- as.factor(sample.all$algorithm)
sample.all <- sample.all %>% mutate(logresult = log(result))

sample.all.eda <- sample.all %>% filter(instance == 100 | instance == 50 | instance == 4)

```

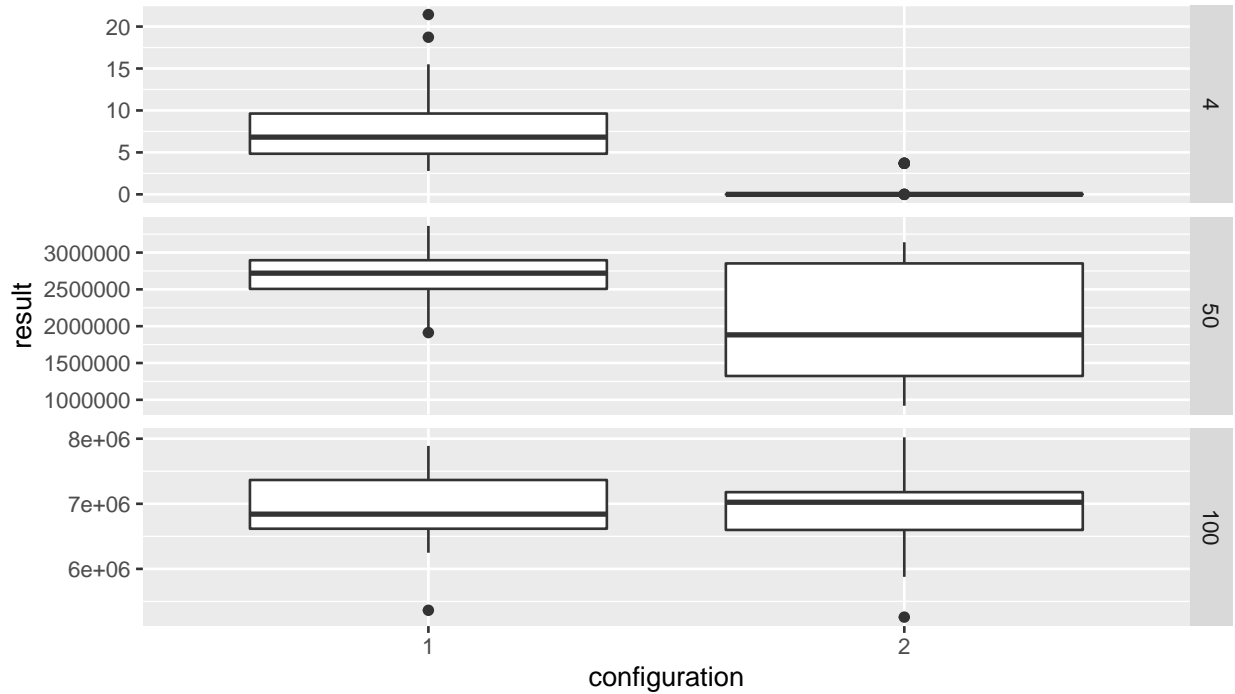


Figure 1: Boxplot dos dados

Através deste gráfico, as seguintes observações podem ser feitas:

- Os valores da função objetivo final possuem magnitudes muito diferentes dependendo da dimensão. Portanto, uma normalização dos dados para uma escala comum pode ser necessária para correta análise dos experimentos.
- Há algumas repetições do algoritmo que poderiam ser considerados outliers. Elas devem ser removidas de forma a não prejudicar os testes de hipótese e validação das premissas.
- A configuração 2 parece obter melhores resultados para dimensões baixas, quase sempre chegando o mínimo da função. Entretanto, o mesmo não pode ser afirmado para dimensões maiores.

### 3.1 Cálculo do número de blocos

De acordo com [4], o número de blocos ideal é calculado variando a quantidade de blocos enquanto a relação

$$F(1 - \alpha) \leq F(\beta, \phi)$$

é respeitada. Onde  $\phi$  é o parâmetro de não-centralidade, definido por:

$$\phi = \frac{b \sum_{i=1}^a \tau_i}{a\sigma^2}$$

De acordo com a definição do experimento, temos que  $a = 2$ , tamanho de efeito normalizado  $d = 0.5$ , potência desejada de  $\pi = 0.8$  e significância  $\alpha = 0.05$ . Logo, é possível calcular o número de blocos  $b$  de acordo com a rotina abaixo.

```
a <- 2
d <- 0.5
alpha <- 0.05
beta <- 0.2

tau <- c(-d, d, rep(0, a - 2)) # define tau vector
b <- 5

tb <- data.frame(b = rep(-1, 50), ratio = rep(-1,50), phi = rep(-1,50))

for(i in seq(1,40,by=2)){

  b <- i + 5
  f1 <- qf(1 - alpha, a - 1, (a - 1)*(b - 1))
  f2 <- qf(beta, a - 1, (a - 1)*(b - 1), (b*sum(tau^2)/a))
  phi <- b*sum(tau^2)/a

  tb[i, ] = c(b, f1/f2, phi)
}
```

Portanto, o número mínimo de blocos necessários  $b$  é de 34. As iterações podem ser vistas na tabela abaixo.

Table 2: Iterações para cálculo do número de blocos

| Blocos | Razão      | Phi  |
|--------|------------|------|
| 6      | 22.3119377 | 1.5  |
| 10     | 8.3089036  | 2.5  |
| 14     | 4.3118995  | 3.5  |
| 18     | 2.7150544  | 4.5  |
| 22     | 1.9226732  | 5.5  |
| 26     | 1.4656488  | 6.5  |
| 30     | 1.1734386  | 7.5  |
| 34     | 0.9725686  | 8.5  |
| 38     | 0.8269777  | 9.5  |
| 42     | 0.7171273  | 10.5 |

Portanto, devemos escolher  $b$  blocos aleatoriamente das instâncias disponíveis. A figura 3 exibe o gráfico de ridge para as instâncias selecionadas.

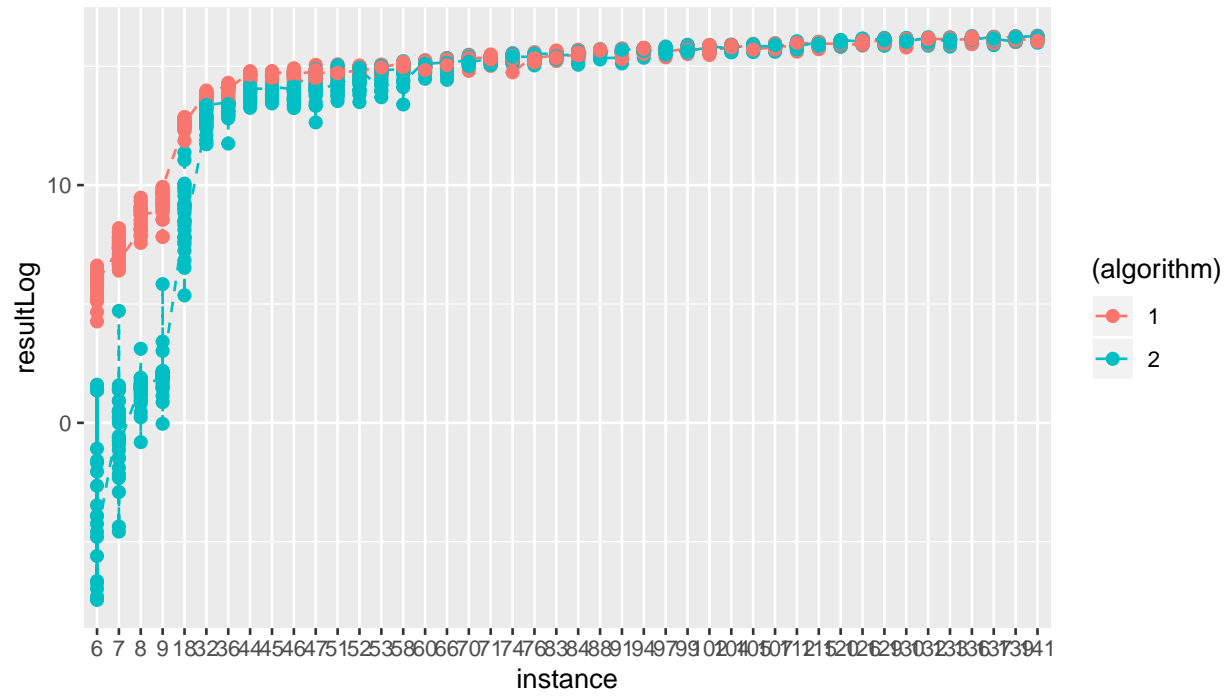


Figure 2: Ridge plot dos dados

```
## Picking joint bandwidth of 0.0939
## Picking joint bandwidth of 0.0939
```

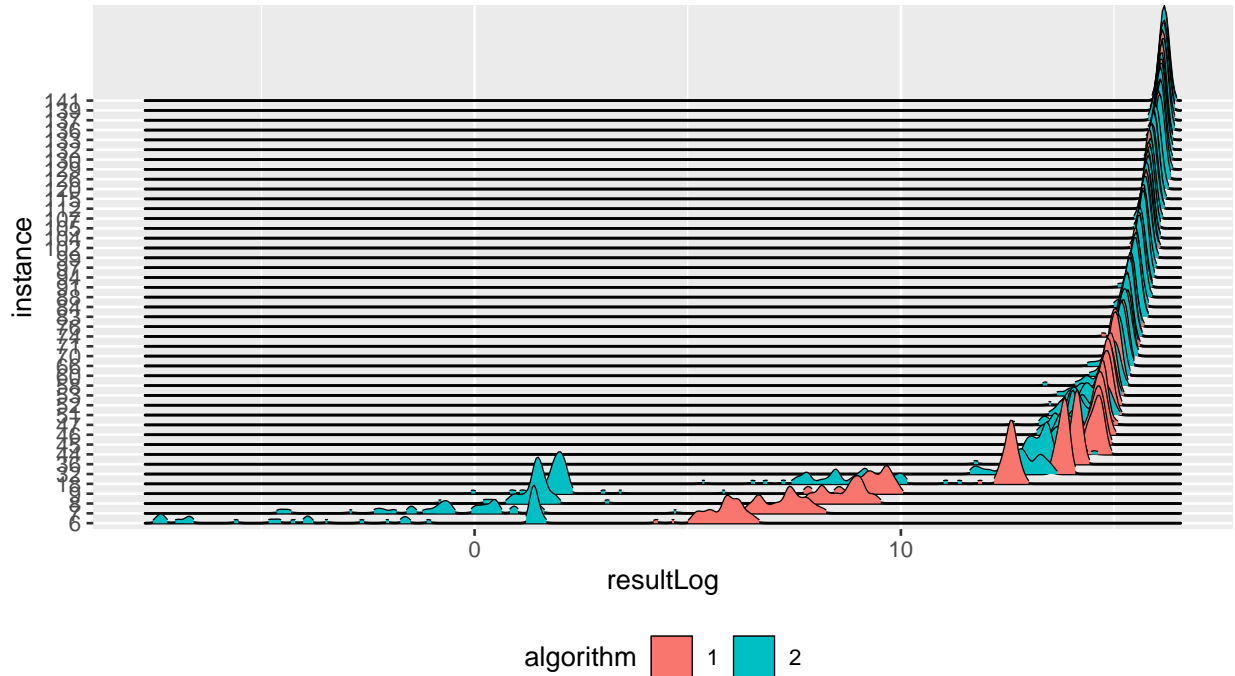


Figure 3: Ridge plot dos dados

### 3.2 Validação das premissas

Para realizar as inferências estatísticas sobre as duas configurações do algoritmo de otimização é necessário validar as premissas antes de executar o teste. Neste caso, como trata-se de duas configurações em um espectro amplo de dimensões, existe um fator conhecido e controlável que pode influenciar no resultado do teste. Então, para eliminar o efeito desse fator indesejável uma opção é realizar a blocagem [6]. A seguir são apresentados os testes realizados para validar as premissas exigidas pelo teste.

#### A - Normalidade dos Resíduos

Para a validação desta premissa, aplica-se o teste ANOVA aos dados e depois avalia-se os resíduos obtidos pelo modelo. O gráfico quantil-quantil e teste de shapiro-wilk serão utilizados nessa validação.

```
##          Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## algorithm    1     539    539.1   369.3 <2e-16 ***
## instance    43   30891    718.4   492.2 <2e-16 ***
## Residuals  2595    3787     1.5
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

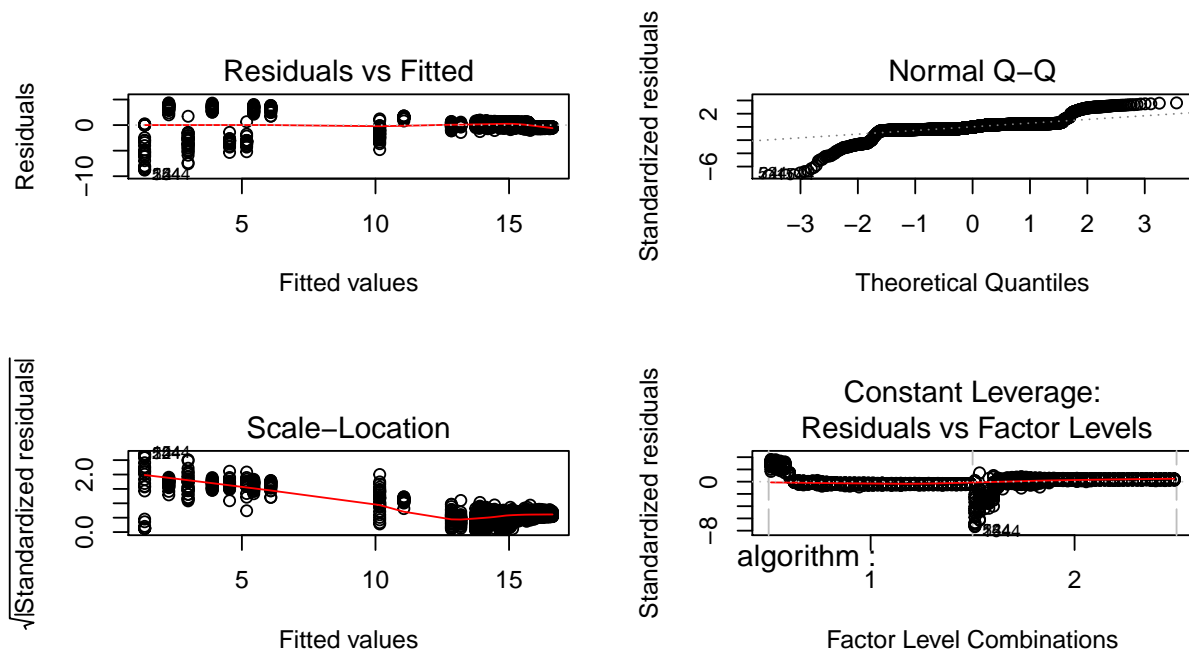


Figure 4: QQ-plot dos resíduos

```
##
##  Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  res.aov$residuals
## W = 0.73488, p-value < 2.2e-16

Conforme pode ser visto, a premissa de normalidade dos resíduos é violada.

##              Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## algorithm      1    539    539.1    369.3 <2e-16 ***
## instance      43   30891    718.4    492.2 <2e-16 ***
## Residuals    2595    3787      1.5
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

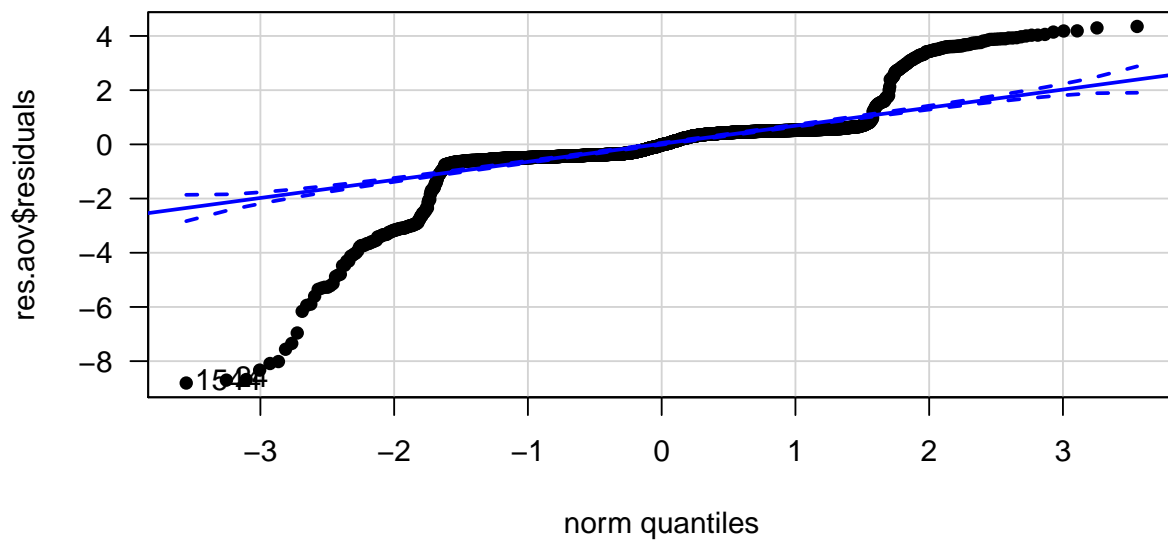


Figure 5: QQ-plot dos resíduos

```
##
## Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  res.aov$residuals
## W = 0.73488, p-value < 2.2e-16
```

Para se ter uma idéia inicial da normalidade dos dados, o histograma para as instâncias em avaliação é gerado a seguir.



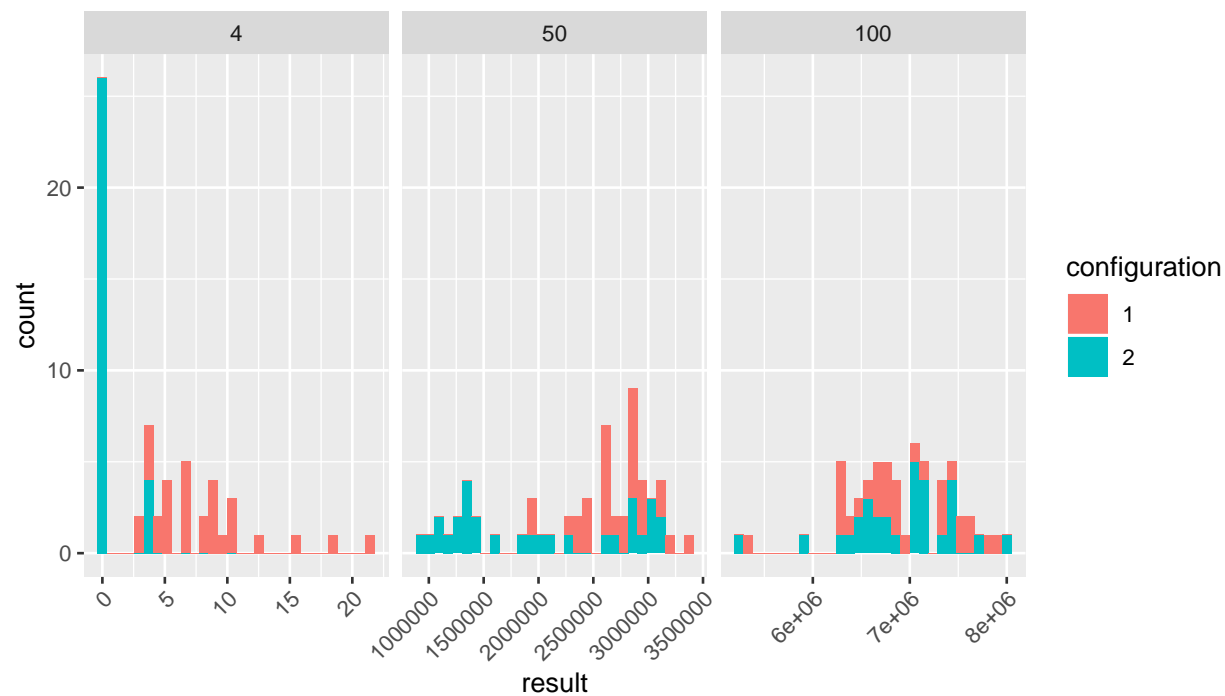


Figure 6: Histograma dos dados

Pelo histograma apresentado, é possível notar que os dados não apresentam uma distribuição visivelmente normal. Os gráficos quantil-quantil e os testes de Shapiro-Wilk são apresentados para se comprovar essa observação.

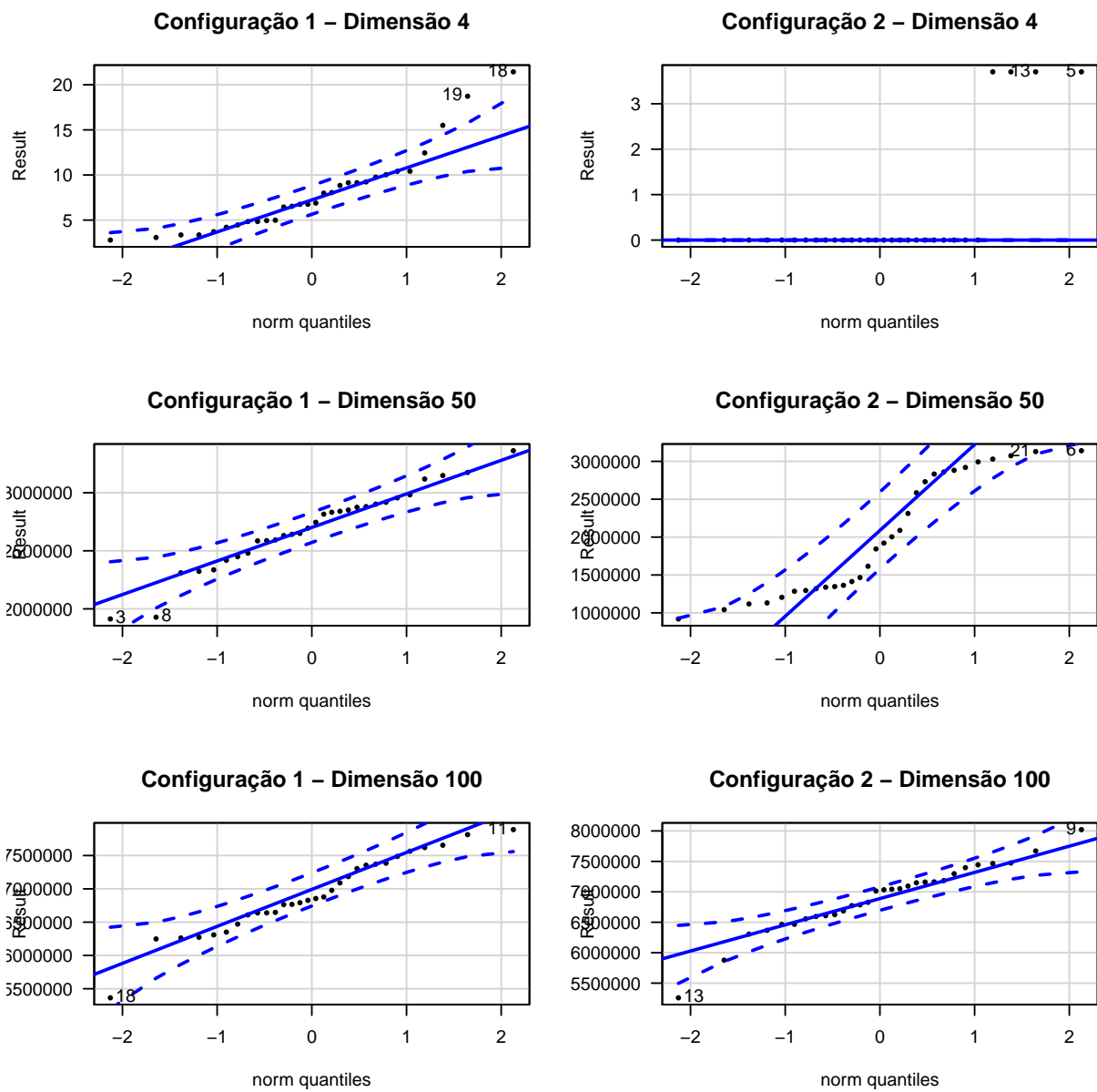


Figure 7: Gráfico quantil-quantil das instâncias avaliadas

Table 3: Resultados dos testes de shapiro-wilk

| Instância | Configuração | p-valor   |
|-----------|--------------|-----------|
| 4         | 1            | 0.0016068 |
| 4         | 2            | 0.0000000 |
| 50        | 1            | 0.5191989 |
| 50        | 2            | 0.0019100 |
| 100       | 1            | 0.3923896 |
| 100       | 2            | 0.3056838 |

Table 4: p-valores dos testes de shapiro-wilk

| Instância | Configuração 1 | Configuração 2 |
|-----------|----------------|----------------|
| 6         | 0.0000009      | 0.9309204      |
| 7         | 0.0000000      | 0.0952691      |
| 8         | 0.0000000      | 0.2117700      |
| 9         | 0.0000000      | 0.7507335      |
| 18        | 0.0000001      | 0.2972384      |
| 32        | 0.3125588      | 0.0530113      |
| 36        | 0.5390465      | 0.0031382      |
| 44        | 0.0823744      | 0.2327750      |
| 45        | 0.0036558      | 0.3650279      |
| 46        | 0.0044446      | 0.9161466      |
| 47        | 0.0839617      | 0.0385525      |
| 51        | 0.0753235      | 0.1364449      |
| 52        | 0.0758525      | 0.0354189      |
| 53        | 0.0091924      | 0.3830805      |
| 58        | 0.0697282      | 0.5604240      |
| 60        | 0.0924252      | 0.2159456      |
| 66        | 0.0265610      | 0.2110943      |
| 70        | 0.9623741      | 0.0620700      |
| 71        | 0.0599036      | 0.7153322      |
| 74        | 0.3792093      | 0.0002792      |
| 76        | 0.1354236      | 0.3168043      |
| 83        | 0.7307143      | 0.2537269      |
| 84        | 0.0918314      | 0.4150641      |
| 88        | 0.1073720      | 0.3586552      |
| 91        | 0.0045456      | 0.4032497      |
| 94        | 0.0153487      | 0.0844764      |
| 97        | 0.7951191      | 0.1495584      |
| 99        | 0.7449118      | 0.3043869      |
| 102       | 0.2267074      | 0.0152054      |
| 104       | 0.0496420      | 0.4028618      |
| 105       | 0.0278883      | 0.3291645      |
| 107       | 0.0139989      | 0.4737125      |
| 112       | 0.9846658      | 0.0167655      |
| 115       | 0.1981531      | 0.0518414      |
| 120       | 0.3541607      | 0.3607403      |
| 126       | 0.0810109      | 0.4095614      |
| 129       | 0.0014765      | 0.6469189      |
| 130       | 0.7114775      | 0.3090016      |
| 132       | 0.0181213      | 0.0913901      |
| 133       | 0.0096410      | 0.0048931      |
| 136       | 0.0155369      | 0.2518921      |
| 137       | 0.0189678      | 0.1159964      |
| 139       | 0.3062163      | 0.3744098      |
| 141       | 0.2011834      | 0.4393923      |

Pelas tabelas 3 e 4, é possível notar que após a aplicação da transformação logarítmica, há resultados que deixam de ser normais. Portanto, não podemos afirmar que para todas as dimensões e configurações testadas os dados seguem uma distribuição normal.

B - Igualdade de Variância

Para o teste de

```
## Levene's Test for Homogeneity of Variance (center = median)
##      Df F value  Pr(>F)
## group    1  8.1584 0.00432 **
##      2638
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

## Levene's Test for Homogeneity of Variance (center = median)
##      Df F value    Pr(>F)
## group   43 12.525 < 2.2e-16 ***
##      2596
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

##
## Friedman rank sum test
##
## data:  result and algorithm and instance
## Friedman chi-squared = 11, df = 1, p-value = 0.0009111
```

Table 5: Resultados dos testes de variância

| Instância | p-valor   |
|-----------|-----------|
| 4         | 0.0000000 |
| 50        | 0.0000212 |
| 100       | 0.8607916 |

Table 6: p-valores dos testes de shapiro-wilk

| Instância | p-valor   |
|-----------|-----------|
| 6         | 0.0000000 |
| 7         | 0.0000000 |
| 8         | 0.0000000 |
| 9         | 0.0000000 |
| 18        | 0.0000011 |
| 32        | 0.0037336 |
| 36        | 0.4383798 |
| 44        | 0.6960527 |
| 45        | 0.1921058 |
| 46        | 0.0229743 |
| 47        | 0.0975879 |
| 51        | 0.0008317 |
| 52        | 0.0026071 |
| 53        | 0.0010530 |
| 58        | 0.0000169 |
| 60        | 0.0517480 |
| 66        | 0.1617131 |
| 70        | 0.3310122 |
| 71        | 0.7763353 |
| 74        | 0.2420485 |
| 76        | 0.6605738 |
| 83        | 0.2707051 |

| Instância | p-valor   |
|-----------|-----------|
| 84        | 0.1903662 |
| 88        | 0.3409592 |
| 91        | 0.6956770 |
| 94        | 0.4077931 |
| 97        | 0.9429186 |
| 99        | 0.5718182 |
| 102       | 0.0403736 |
| 104       | 0.3576964 |
| 105       | 0.3539264 |
| 107       | 0.1641992 |
| 112       | 0.7748390 |
| 115       | 0.9801664 |
| 120       | 0.9651509 |
| 126       | 0.6185635 |
| 129       | 0.6617235 |
| 130       | 0.1419264 |
| 132       | 0.2281559 |
| 133       | 0.0343971 |
| 136       | 0.6794527 |
| 137       | 0.1266789 |
| 139       | 0.8289963 |
| 141       | 0.8248179 |

1 - Replicação por bloco:

2- Independência dos blocos:

3 - Randomização dos blocos:

## 4 Resultados

Nesta seção são apresentados os resultados realizando os testes de hipóteses e a determinação da melhor configuração juntamente com a estimação das magnitudes das diferenças.

## 5 Discussão e Conclusões

Neste trabalho foi feito um estudo estatístico ...

## 6 Divisão das Atividades

- Victor - coordenador
- Maressa - verificadora e monitora
- Gilmar - Relator

## 7 Apêndice

### 7.1 Geração de configuração

```
# Load packages -----
if (!require(ExpDE, quietly = TRUE)){
```

```

install.packages("ExpDE")
}

if (!require(smoof, quietly = TRUE)){
  install.packages("smoof")
}

if (!require(CAISer, quietly = TRUE)){
  install.packages("CAISer")
}

# RCBD functions -----
set.seed(15632) # set a random seed
instances <- seq(2, 150) # number of instances
N <- 30 # number of replicates per instance

rcbd.configuration.generator <- function(level, b, instances, N){
  nrows <- length(instances) * N
  n.instances <- length(instances)
  instance <- sort(rep(instances, N))
  groups <- sapply(instance, function(i){ ceiling(i/(n.instances/b)) })

  X <- data.frame("algorithm" = rep(level, nrows),
                  "replicate" = rep(seq(1,N), n.instances),
                  "instance" = instance,
                  "group" = groups,
                  "result" = rep(-1, nrows))

  return(X)
}

x.config.1 <- rcbd.configuration.generator(1, b, instances, N)
x.config.2 <- rcbd.configuration.generator(2, b, instances, N)
x.config.all <- rbind(x.config.1, x.config.2)
x.config.all.shuffled <- x.config.all[sample(nrow(x.config.all)), ]

split.size <- (nrow(x.config.all.shuffled)/3)
x.config.all.shuffled$member <- ceiling((1:nrow(x.config.all.shuffled))/split.size)

x.config.all.shuffled.victor <- x.config.all.shuffled[x.config.all.shuffled$member == 1,1:5]
x.config.all.shuffled.gilmar <- x.config.all.shuffled[x.config.all.shuffled$member == 2,1:5]
x.config.all.shuffled.maressa <- x.config.all.shuffled[x.config.all.shuffled$member == 3,1:5]

write.csv(x.config.all.shuffled.victor, 'rcbd.config.victor.csv', row.names=FALSE)
write.csv(x.config.all.shuffled.gilmar, 'rcbd.config.gilmar.csv', row.names=FALSE)
write.csv(x.config.all.shuffled.maressa, 'rcbd.config.maressa.csv', row.names=FALSE)

```

## 7.2 Execução de configuração

```
# Load packages -----
if (!require(ExpDE, quietly = TRUE)){
  install.packages("ExpDE")
}

if (!require(smoof, quietly = TRUE)){
  install.packages("smoof")
}

# Execute a RCBD test configuration -----

# Define a class to store the levels configuration
level.config <- function(mp, rp, id) {
  value <- list(mutparsX = mp, recparsX = rp, id = id)
  class(value) <- append(class(value), "level.config")
  return(value)
}

## Equipe D
## Config 1
recpars1 <- list(name = "recombination_blxAlphaBeta", alpha = 0.4, beta = 0.4)
mutpars1 <- list(name = "mutation_rand", f = 4)

## Config 2
recpars2 <- list(name = "recombination_eigen", othername = "recombination_bin", cr = 0.9)
mutpars2 <- list(name = "mutation_best", f = 2.8)

config.1 <- level.config(mutpars1, recpars1, 1)
config.2 <- level.config(mutpars2, recpars2, 2)

fname = 'rcbd.config.victor.csv'
Z <- read.csv(fname)
set.seed(15632) # set a random seed

my.ExpDE <- function(mutp, recp, dim){

  fn.current <- function(X){
    if(!is.matrix(X)) X <- matrix(X, nrow = 1) # <- if a single vector is passed as Z

    Y <- apply(X, MARGIN = 1, FUN = smoof::makeRosenbrockFunction(dimensions = dim))
    return(Y)
  }

  assign("fn", fn.current, envir = .GlobalEnv)

  selpars <- list(name = "selection_standard")
  stopcrit <- list(names = "stop_maxeval", maxevals = 5000 * dim, maxiter = 100 * dim)
  probpars <- list(name = "fn", xmin = rep(-5, dim), xmax = rep(10, dim))
  popsize = 5 * dim
}
```

```

out <- ExpDE(mutpars = mutp,
            recpars = recp,
            popsize = popsize,
            selpars = selpars,
            stopcrit = stopcrit,
            probpars = probpars,
            showpars = list(show.iters = "none"))

return(list(value = out$Fbest))
}

for (row in 1:nrow(Z)){

  if(Z[row, "result"] == -1){ # start from the last execution
    dim <- Z[row, "instance"]
    algo <- Z[row, "algorithm"]
    replicate <- Z[row, "replicate"]

    if(algo == 1)
      algo.config <- config.1
    else
      algo.config <- config.2

    print(paste("Started Instance:", dim, "; Algo:", algo, "; Repetition:", replicate))

    out <- my.ExpDE(algo.config$mutparsX, algo.config$recparsX, dim)

    Z[row, "result"] <- out$value
    print(paste("Finished. Instance:", dim, "; Algo:", algo, ";
                Repetition:", replicate, "; Result=", out$value))
    print(paste("Progress = ", 100 * row / nrow(Z) , "%"))
    write.csv(Z, fname)

  }
}

```

## Referências

- [1] R. Storn and K. Price, “Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces,” *Journal of global optimization*, vol. 11, no. 4, pp. 341–359, 1997.
- [2] K. V. Price, “Differential evolution,” in *Handbook of optimization*, Springer, 2013, pp. 187–214.
- [3] H. Rosenbrock, “An automatic method for finding the greatest or least value of a function,” *The Computer Journal*, vol. 3, no. 3, pp. 175–184, 1960.
- [4] F. Campelo, “Lecture notes on design and analysis of experiments.” <https://github.com/fcampelo/Design-and-Analysis-of-Experiments>, 2018.
- [5] F. Campelo and F. C. Takahashi, “Sample size estimation for power and accuracy in the experimental comparison of algorithms,” *CoRR*, vol. abs/1808.02997, 2018.
- [6] D. C. Montgomery and G. C. Runger, *Applied statistics and probability for engineers, (with cd)*. John Wiley & Sons, 2007.