

Universitatea de Vest din Timișoara
Școala Doctorală de Științe Exacte și Științe Naturale
Domeniul: Informatică

**Analysis of population dynamics for
difference-based evolutionary algorithms**

**Analiza dinamicii populației pentru algoritmi evolutivi
bazați pe diferențe**

Student doctorand: Mădălina-Andreea Mitran

Conducător științific: **Prof. Daniela Zaharie**

Comisia de Îndrumare și Integritate Academică:

Prof. Eva Kaslik - Universitatea de Vest din Timișoara
Conf. Flavia Micota - Universitatea de Vest din Timișoara
Conf. Mădălina Erașcu - Universitatea de Vest din Timișoara

1 Introducere

Algoritmii evolutivi, inspirați din procesele evolutive naturale, sunt tehnici puternice de optimizare. Printre aceștia, Differential Evolution (DE) s-au dovedit eficienți pentru problemele de optimizare continuă în diverse domenii (Qing 2009; Chen et al. 2017) de la introducerea lor de către Storn și Price (Storn and Price 1997). În ciuda cercetărilor extinse privind strategiile și proprietățile DE (Peng et al. 2017; Tian and Gao 2018; Mousavirad and Rahnamayan 2020; Tanabe and Fukunaga 2013; Tanabe and Fukunaga 2014; Stanovov et al. 2018; Dasgupta et al. 2009; Rudolph 1999), un aspect critic, metodele de gestionare a restricțiilor de tip cutie fezabilă (BCHMs), a fost în mare parte trecut cu vederea. BCHMs sunt esențiale pentru gestionarea soluțiilor care încalcă limitele spațiului de căutare, un fenomen frecvent în DE din cauza operatorului de mutație (Arabas et al. 2010; Kononova et al. 2022). Modul în care aceste încălcări sunt tratate influențează semnificativ dinamica căutării, diversitatea și convergența. Această teză abordează această lacună prin investigarea sistematică a rolului și impactului BCHMs în DE, tratându-le nu doar ca detalii de implementare, ci ca și componente algoritmice active.

Obiectivele principale ale tezei sunt:

- Dezvoltarea unui cadru teoretic care analizează modul în care BCHMs influențează proprietățile DE, cum ar fi direcția de căutare, probabilitatea de încălcare a limitelor și varianța populației.
- Proiectarea și evaluarea strategiilor adaptive BCHMs care selectează dinamic metodele adecvate pentru a îmbunătăți performanța DE.
- Stabilirea unui cadru de monitorizare geometric pentru caracterizarea dinamicii populației DE și a efectelor BCHMs, utilizând măsuri aliniate cu axele și bazate pe ACP (Analiza Componentelor Principale).
- Evaluarea impactului BCHMs într-un context din lumea reală: optimizarea hiperparametrilor rețelelor neuronale.

Această cercetare își propune să ridice statutul BCHMs la componente recunoscute ce necesită proiectare și adaptare atentă. Cercetarea este ghidată de patru grupuri principale de întrebări:

- **RQ_A:** Cum influențează BCHMs proprietățile teoretice și comportamentul empiric al DE (direcția de căutare, probabilitatea de încălcare, distribuția populației)? Întrebarea este abordată în Capitolul 3, unde este împărțită în patru întrebări mai specifice: **(RQ_A1):** Cum influențează teoretic alegerea BCHMs probabilitatea de generare a soluțiilor infeasibile? **(RQ_A2):** În ce măsură diferitele

BCHMs păstrează sau modifică direcția de căutare canonică a DE?; **(RQ_A3):** Cât de precis modelele teoretice pentru probabilitatea de încălcare a limitelor prezic probabilitățile observate empiric?; **(RQ_A4):** Cum se abate distribuția reală a populației de la populația inițializată uniform inițial?

- **RQ_B:** Pot strategiile adaptive BCHMs să îmbunătățească performanța DE și cum ar trebui proiectate (compoziția mulțimii de metode BCHM, mecanismele de selecție)? Capitolul 4 abordează întrebarea principală descompunând-o în trei cercetări mai focalizate: **(RQ_B1):** Ce BCHMs ar trebui incluse în mulțimea de selecție? **(RQ_B2):** Cum poate fi proiectat procesul de selecție pentru a alege eficient metodele adecvate în diferite faze de optimizare? **(RQ_B3):** Ce măsuri ar trebui să ghideze procesul de adaptare pentru a asigura atât eficacitatea pe termen scurt cât și succesul optimizării pe termen lung?
- **RQ_C:** Cum poate fi caracterizată dinamica spațială și geometrică a populației DE și cum o afectează BCHMs? Capitolul 5 oferă o examinare detaliată a acestei întrebări abordând patru aspecte mai specifice ale problemei: **(RQ_C1):** Cum putem caracteriza eficient distribuția spațială a populației DE în timpul procesului de optimizare? **(RQ_C2):** Cum influențează diferitele BCHMs caracteristicile geometrice ale populației?; **(RQ_C3):** Ce corelații există între măsurile legate de populație și performanța algoritmului?; **(RQ_C4):** Ce informații despre dinamica populației pot fi extrase prin analiza propusă și cum pot fi utilizate pentru a ghida selecția BCHMs adecvate pentru scenarii specifice de optimizare.
- **RQ_D:** Care este impactul BCHMs asupra eficacității DE într-o problemă din lumea reală, de exemplu, optimizarea hiperparametrilor? Capitolul 6 abordează această întrebare structurând investigația în jurul a cinci întrebări de cercetare mai granulare: **(RQ_D1):** Cum influențează diferitele BCHMs calitatea finală a soluției (măsurată prin pierderea de validare, acuratețe, regret) obținută de DEHB în timpul optimizării hiperparametrilor rețelelor neuronale pe seturi de date de clasificare din lumea reală? **(RQ_D2):** Care este relația dintre strategia de corecție utilizată și frecvența încălcărilor de limite care necesită reparare, cuantificată prin Probabilitatea de Reparare (PORS)? **(RQ_D3):** Există un compromis observabil între eficacitatea performanței (calitatea soluției) și frecvența reparației (PORS) asociate cu diferite strategii de corecție în cadrul DEHB? **(RQ_D4):** Strategiile de corecție care încorporează informații derivate din populație demonstrează avantaje de performanță discernabile față de strategiile mai simple, non-adaptive pentru optimizarea hiperparametrilor utilizând DEHB? **(RQ_D5):** Cât de consistentă este clasificarea relativă a performanței

strategiilor de corecție evaluate pe setul divers de seturi de date de clasificare investigate?

2 Rezultate Principale

Această secțiune rezumă principalele rezultate incluse în această teză.

2.1 Particularitățile restricțiilor de limite și metodelor de corecție (Capitolul 3)

Capitolul 3 se bazează pe lucrările publicate (Mitran 2021; Mitran 2023; Kononova et al. 2024) și oferă o analiză sistematică a BCHMs, depășind tratarea acestora ca simple detalii de implementare. S-a stabilit că alegerea BCHMs influențează semnificativ comportamentele cheie ale DE. Rezultatele pot fi grupate în două categorii:

- **Influența teoretică (RQ_A1, RQ_A2):** Au fost dezvoltate modele matematice pentru a analiza modul în care diferitele BCHMs afectează probabilitatea încălcărilor ulterioare ale limitelor (de exemplu, pentru strategiile Saturation și Exponential Confined), conservarea direcției de căutare intenționate (arătând că strategiile de Saturation și Mirroring pot conserva direcția de căutare mai bine decât Toroidal în anumite condiții) și varianța populației (sugerând impacturi diferite asupra diversității).
- **Validarea empirică (RQ_A3, RQ_A4):** Experimentele au validat în mare parte constatările teoretice, în special în ceea ce privește conservarea direcției de căutare (măsurată prin similaritatea cosinus, confirmând conservarea ridicată a Saturation și perturbarea specifică Toroidal). Acuratețea modelului de probabilitate de încălcare a limitelor pentru Exponential Confined a fost confirmată în condiții specifice (de exemplu, poziția de referință este $R=0,5$ și nu există presiune de selecție), dar a arătat limitări în alte situații. Analiza distribuției populației folosind divergența Kullback-Leibler a cuantificat abaterile de la uniformitate, arătând că, deși ipoteza uniformității este valabilă în etapa inițială a evoluției, ea devine mai puțin precisă ulterior, în special cu BCHMs perturbatoare.

În ansamblu, acest capitol a demonstrat că BCHMs sunt componente active cu proprietăți teoretice distincte și cu impact verificabil empiric asupra dinamicii DE.

2.2 Strategii adaptive pentru restricțiile de limite (Capitolul 4)

Capitolul 4, bazat pe lucrările (Mitran et al. 2023; Mitran 2024b), a abordat necesitatea strategiilor adaptive BCHMs, având în vedere că nicio metodă BCHM nu este universal mai bună decât restul.

- **Proiectarea unei colecții de metode (RQ_B1):** A fost dezvoltată o metodă pentru construirea unei colecții de metode BCHMs pe baza mai multor aspecte comportamentale (modele de încălcare a limitelor, impact asupra diversității, comportament de convergență) și utilizarea clusterizării ierarhice pentru identificarea metodelor complementare. Aceasta asigură că baza acoperă diferite dinamici de căutare.
- **Strategii de selecție (RQ_B2):** Pornind de la lucrările existente, au fost proiectate mecanisme adaptive de selecție. Au fost propuse și evaluate o abordare de combinație liniară cu un coeficient de inerție și o metodă mai robustă bazată pe modelarea probabilităților de selecție cu distribuția Beta. Abordarea cu distribuția Beta a arătat o performanță mai bună pe unele funcții din setul de test BBOB. Modelele de eficacitate dependente de fază, așa cum sunt ilustrate în figurile 1, 2, au sugerat beneficii potențiale pentru adaptare explicită conștientă de fază.
- **Ghidarea adaptării (RQ_B3):** În timp ce ratele de succes oferă ghidare pe termen scurt, analiza a sugerat că succesul pe termen lung ar putea necesita incorporarea unor măsuri precum diversitatea populației și progresul convergenței, potențial informat de detectarea fazelor folosind analiza divergenței eroare-varianță ilustrată în figura 3.

Acest capitol a stabilit rațiunea pentru BCHMs adaptive și a oferit metodologii pentru proiectarea bazelor eficiente și a mecanismelor de selecție robuste, potențial conștiente de fază.

2.3 Monitorizarea dinamicii populației (Capitolul 5)

Capitolul 5, bazat pe lucrarea (Mitran 2024a), a introdus un cadru nou pentru monitorizarea dinamicii populației DE, concentrându-se pe caracteristicile geometrice și influența BCHMs.

- **Cadrul de monitorizare geometrică (RQ_C1):** A fost dezvoltat un cadru de analiză care combină măsuri statistice tradiționale cu măsuri de tip Cutie de Delimitare a Populației (Population Bounding Box, PBB) aliniate cu axele

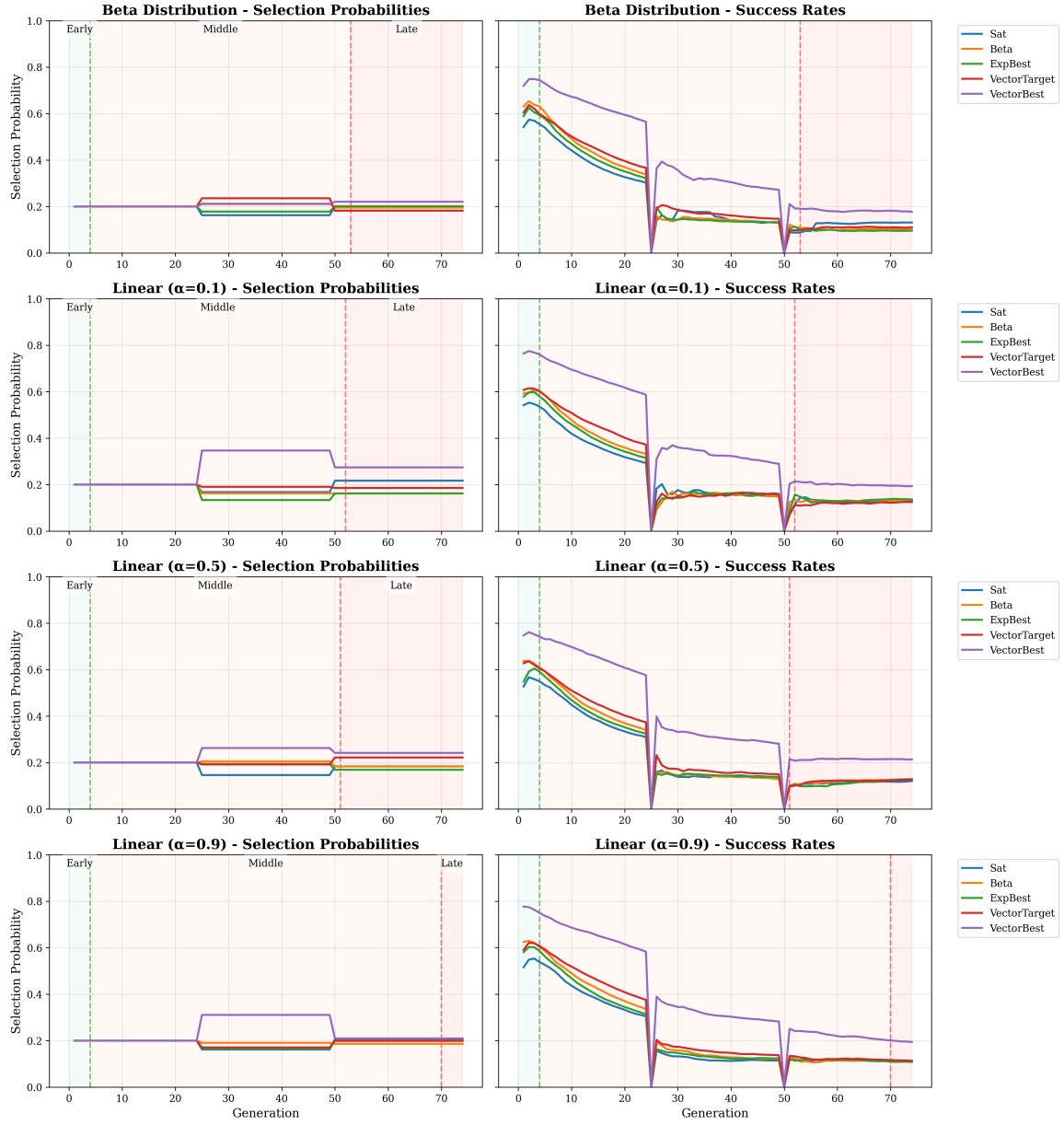


Figure 1: Probabilitățile de selecție și ratele de succes pentru funcția f_4 din BBOB. Liniile verticale împart procesul de optimizare în fazele timpurie, mijlocie și târzie.

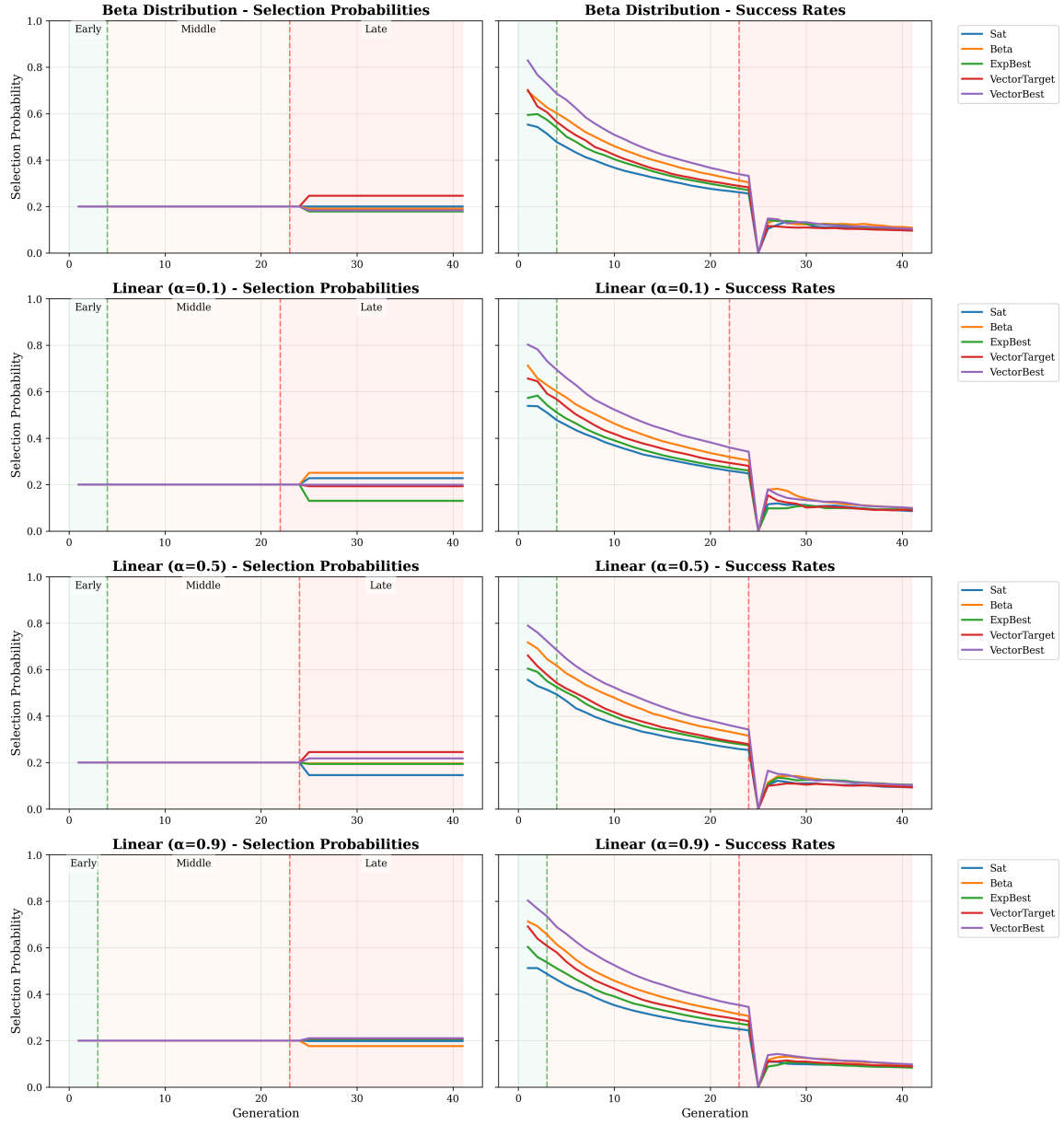


Figure 2: Probabilitățile de selecție și ratele de succes pentru funcția f_{19} din BBOB. Liniile verticale împart procesul de optimizare în fazele timpurie, mijlocie și târzie.

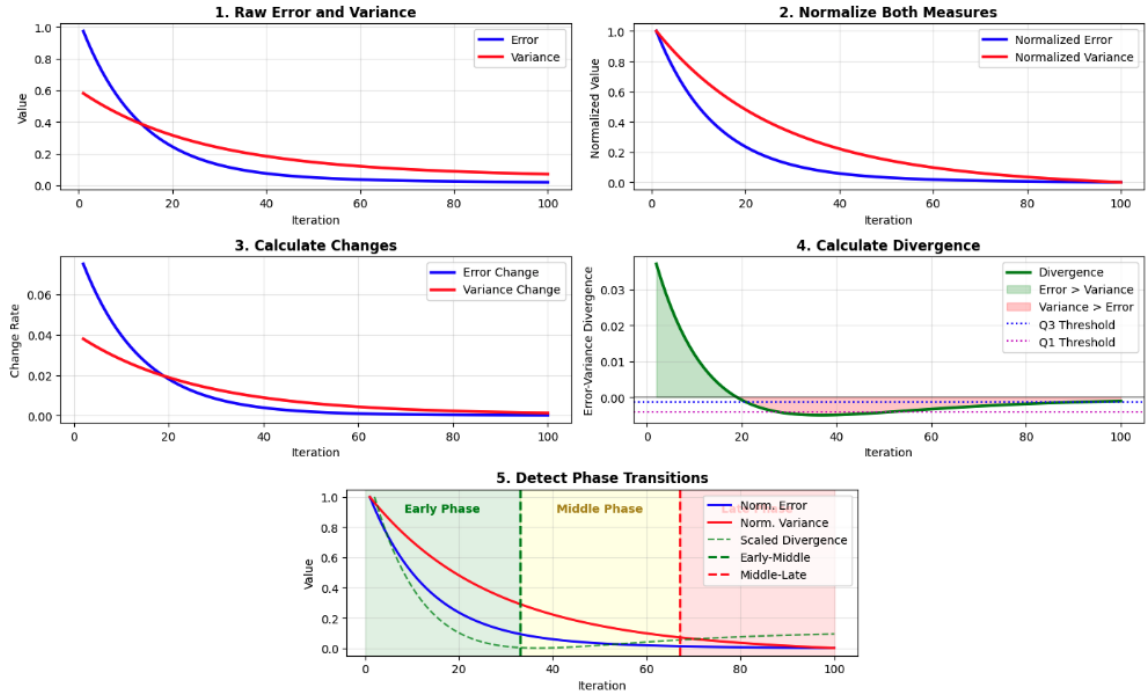


Figure 3: Prezentare generală a metodologiei de detectare a fazelor bazată pe eroare-varianță. Panoul 1: Eroare și varianță brută. Panoul 2: Măsuri scalate min-max la $[0, 1]$. Panoul 3: Modificări generație cu generație în măsurile scalate. Panoul 4: Măsura de divergență d_t și pragurile sale statistice (Q_1, Q_3). Panoul 5: Fazele evolutive identificate Timpurie, Mijlocie și Târzie. Tranzițiile de fază sunt determinate de traversarea curbei de divergență a acestor praguri.

(extensie, formă, excentricitate) și măsuri geometrice noi bazate pe ACP (formă-ACP, excentricitate-ACP, densitate-ACP) pentru a oferi o vedere cuprinzătoare a distribuției spațiale a populației, ilustrată în figurile 4 și 5.

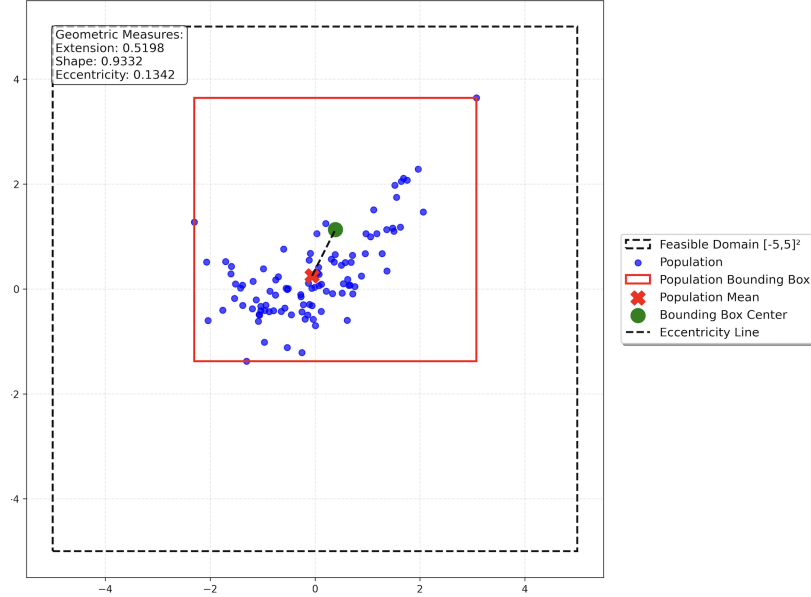


Figure 4: Vizualizarea PBB (caseta roșie), pentru o populație (puncte albastre) distribuită în interiorul domeniului fezabil $[-5, 5]^2$, cu media populației (X roșu), centrul PBB (cerc verde) și linia de excentricitate (linie neagră punctată). Excentricitatea (0, 13) reflectă distribuția asimetrică în interiorul PBB, iar valoarea ridicată a formei (0, 933) indică faptul că PBB este aproape un pătrat.

- **Valoarea măsurilor ACP:** Măsurile bazate pe ACP s-au dovedit esențiale pentru a dezvălui structura intrinsecă a populației (formă, orientare, densitate) independent de alinierea axelor, captând detalii care sunt ratate de PBB sau de măsurile statistice izolate. Acestea au ajutat la distingerea alungirii intrinseci de întinderea aliniată pe axe și a coalescenței reale de simpla contracție.
- **Influența BCHMs asupra geometriei populației (RQ_C2):** Experimentele au arătat că BCHMs modelează activ geometria populației. Metodele bazate pe vectori au indus dinamici distincte comparativ cu metodele pe componente. Discrepanțele dintre măsurile PBB și ACP au evidențiat impacturile specifice BCHMs asupra orientării și structurii interne.
- **Corelații și perspective (RQ_C3, RQ_C4):** Au fost confirmate corelații puternice între eroare și indicatorii fundamentali de convergență (contracție,

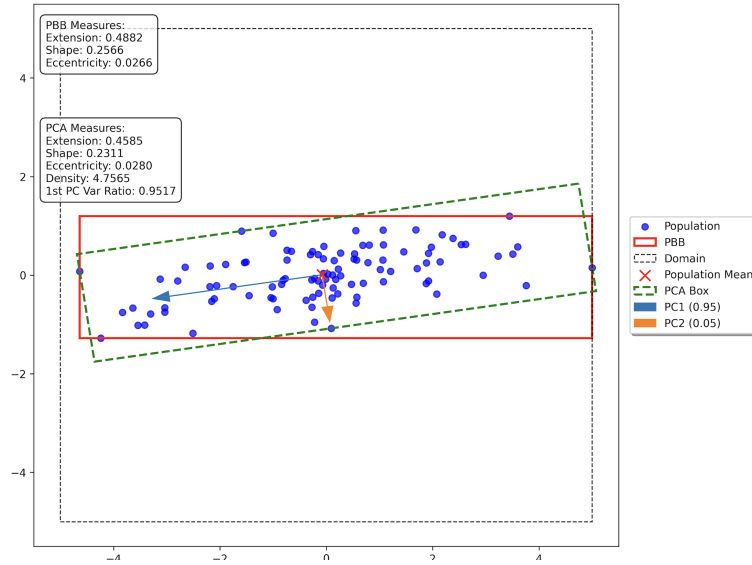


Figure 5: Vizualizarea unei distribuții alungite a populației cu caracterizări geometrice aliniate atât pe axe, cât și pe varianță. PBB (dreptunghiul roșu solid) oferă reprezentarea limitelor aliniate pe axe, în timp ce Caseta ACP (poligonul verde punctat) se aliniază cu direcțiile principale ale variației. Componentele principale sunt afișate ca săgeți care pornesc din media populației (X roșu), cu PC1 (albastru) explicând 95,1% din varianța totală și PC2 (portocaliu) explicând restul de 4,83%. Compararea ilustrează modul în care măsurile geometrice bazate pe ACP captează mai bine forma intrinsecă a distribuțiilor anizotropice.

densificare, pierderea diversității). Relațiile care implică forma, simetria, distribuția internă (divergența KL) și parametrii de control au fost mai complexe și dependente de context. Măsurile ACP au oferit perspective mai profunde, de exemplu, arătând concentrarea varianței în mai puține dimensiuni efective în timpul convergenței. Cadrul oferă potențial de diagnosticare pentru practicieni.

Acest capitol a stabilit utilitatea monitorizării geometrice, în special cu ACP, pentru o înțelegere nuanțată a dinamicii ED și a efectelor BCHMs.

2.4 Impactul strategiilor de corecție asupra optimizării cu restricții în probleme reale (Capitolul 6)

Capitolul 6 a investigat impactul BCHMs într-o aplicație practică: optimizarea hiperparametrilor (OHP) pentru rețele neuronale folosind algoritmul DEHB (Awad et al. 2021).

- **Performanța OHP (RQ_D1):** Alegerea BCHMs a afectat semnificativ performanța DEHB. Strategiile care utilizează cea mai bună soluție de până acum (`expCB`, `vectB`, `midB`) și strategia `mir` au depășit în general metodele mai simple precum `sat` și `midT` în ceea ce privește pierderea de validare și acuratețea. `sat` a performant constant slab.
- **Frecvența reparării (PORS) (RQ_D2, RQ_D3):** A existat o relație inversă între performanță și probabilitatea de reparare (PORS). Metoda cu cel mai scăzut PORS (`midT`) a avut performanțe slabe, în timp ce mai mulți performeri de top au avut valori PORS mai mari. Acest lucru sugerează că minimizarea reparațiilor nu este obiectivul principal; explorarea eficientă ar putea implica încălcări tranzitorii tratate bine de BCHMs.
- **Valoarea informațiilor despre populație (RQ_D4):** Încorporarea informațiilor despre cea mai bună soluție de până acum (de exemplu, `expCB`, `vectB`, `midB`) a dus în mod constant la rezultate mai bune decât cele care utilizează informații despre vectorul țintă (`expCT`, `vectT`, `midT`) sau strategii non-adaptive, evidențiind beneficiul ghidării corecției către regiuni promițătoare.
- **Consecvența între seturi de date (RQ_D5):** Deși tendințele generale s-au menținut (de exemplu, metodele bazate pe 'Best' sunt robuste, în timp ce `sat` se comportă destul de slab), clasamentul exact al metodelor de top a variat între seturile de date, indicând o anumită dependență de problemă. Cu toate acestea, `expCB` și `vectB` au avut în mod constant un clasament bun, sugerând că acestea sunt opțiuni implicite rezonabile.

Acest studiu de caz a confirmat semnificația practică a selecției BCHMs în OHP și a validat eficacitatea strategiilor de corecție ghidate de informații.

3 Concluzii și direcții de cercetare viitoare

Această teză a demonstrat că metodele de gestionare a restricțiilor de tip cutie fezabilă (BCHMs) sunt componente critice ale DE, influențând semnificativ proprietățile teoretice, comportamentul empiric, geometria populației și performanța în lumea reală. Contribuțiile cheie includ o analiză sistematică a proprietăților BCHMs, un cadru nou de monitorizare geometrică utilizând măsuri PBB și ACP, proiectarea și evaluarea strategiilor adaptive BCHMs și validarea impactului BCHMs în Optimizarea Hiperparametrilor.

Cercetarea contestă practica selecției arbitrare a BCHMs și oferă instrumente (monitorizare geometrică, cadre adaptive) pentru o proiectare mai informată. Măsurile geometrice bazate pe ACP oferă perspective mai profunde asupra structurii și dinamicii populației decât cele disponibile anterior. Studiul OHP a evidențiat consecințele practice și beneficiul corectărilor ghidate de informații, avertizând în același timp împotriva simplei minimizări a încălcărilor de limite.

Limitările includ dependența de ipoteze simplificatoare în modelele teoretice și utilizarea doar a unor algoritmi/benchmark-uri specifice în studiile empirice.

Cercetările viitoare ar putea implica:

- Rafinarea modelelor teoretice pentru distribuții non-uniforme și când presiunea de selecție este luată în considerare.
- Studii empirice mai ample pe mai multe variante DE, probleme (cu restricții, multi-obiectiv, la scară largă) și alți algoritmi metaeuristici.
- Dezvoltarea mecanismelor adaptive avansate (auto-adaptare, conștientizare de fază, feedback informat geometric).
- Utilizarea măsurilor geometrice pentru controlul algoritmului online (adaptarea diversității, mutației, dimensiunii populației).
- Investigarea BCHMs în alte aplicații din lumea reală.

Referințe

Arabas, J., A. Szczepankiewicz, and T. Wroniak (Jan. 2010). “Experimental Comparison of Methods to Handle Boundary Constraints in Differential Evolution.” In: pp. 411–420.

- Awad, N., N. Mallik, and F. Hutter (2021). “DEHB: Evolutionary Hyperband for Scalable, Robust and Efficient Hyperparameter Optimization”. In: *Proceedings of the Thirtieth International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-21)*, pp. 2147–2153.
- Chen, X. H., X. X. Guo, J. M. Pei, and W. Y. Man (2017). “A hybrid algorithm of differential evolution and machine learning for electromagnetic structure optimization”. In: *2017 32nd Youth Academic Annual Conference of Chinese Association of Automation (YAC)*. IEEE, pp. 755–759.
- Dasgupta, S., S. Das, A. Biswas, and A. Abraham (2009). “On stability and convergence of the population-dynamics in differential evolution”. In: *Ai Communications* 22.1, pp. 1–20.
- Kononova, A. V., D. Vermetten, F. Caraffini, M.-A. Mitran, and D. Zaharie (2022). *The importance of being constrained: dealing with infeasible solutions in Differential Evolution and beyond*. arXiv: 2203.03512 [cs.NE].
- Kononova, A. V., D. Vermetten, F. Caraffini, M. Mitran, and D. Zaharie (2024). “The Importance of Being Constrained: Dealing with Infeasible Solutions in Differential Evolution and Beyond”. In: *Evol. Comput.* 32.1, pp. 3–48. DOI: 10.1162/EVCO_A_00333. URL: https://doi.org/10.1162/evco%5C_a%5C_00333.
- Mitran, M. A. (2024a). “Correlation-based Analysis of the Influence of Bound Constraint Handling Methods on Population Dynamics in Differential Evolution”. In: *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*. GECCO ’24 Companion. Melbourne, VIC, Australia: Association for Computing Machinery, pp. 1502–1510. ISBN: 9798400704956. DOI: 10.1145/3638530.3664180. URL: <https://doi.org/10.1145/3638530.3664180>.
- Mitran, M.-A. (2023). “A Theoretical Analysis on the Bound Violation Probability in Differential Evolution Algorithm”. In: *Numerical Methods and Applications*. Springer Nature Switzerland, pp. 233–245. ISBN: 978-3-031-32412-3.
- (2024b). “Towards Autonomous Bound Constraint Handling: Study on an Adaptive Correction in Differential Evolution”. In: *2024 International Conference on INnovations in Intelligent SysTems and Applications (INISTA)*, pp. 1–6. DOI: 10.1109/INISTA62901.2024.10683842.
- Mitran, M. (2021). “Analysis of the Influence of Bound Constraint Handling Strategies on the Search Direction in Differential Evolution Algorithms”. In: *23rd International Symposium on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing, SYNASC 2021, Timisoara, Romania, December 7-10, 2021*. IEEE, pp. 291–298. DOI: 10.1109/SYNASC54541.2021.00055. URL: <https://doi.org/10.1109/SYNASC54541.2021.00055>.
- Mitran, M.-A., A. Kononova, F. Caraffini, and D. Zaharie (2023). “Patterns of Convergence and Bound Constraint Violation in Differential Evolution on SBOX-COST Benchmarking Suite”. In: *Proceedings of the Companion Conference on Genetic*

- and Evolutionary Computation*. GECCO '23 Companion. Lisbon, Portugal: Association for Computing Machinery, pp. 2337–2345. ISBN: 9798400701207. DOI: 10.1145/3583133.3596410. URL: <https://doi.org/10.1145/3583133.3596410>.
- Mousavirad, S. j. and S. Rahnamayan (July 2020). “A Novel Center-based Differential Evolution Algorithm”. In: pp. 1–8. DOI: 10.1109/CEC48606.2020.9185622.
- Peng, H., Z. Guo, C. Deng, and Z. Wu (July 2017). “Enhancing differential evolution with random neighbors based strategy”. In: *Journal of Computational Science* 26. DOI: 10.1016/j.jocs.2017.07.010.
- Qing, A. (2009). *Differential evolution: fundamentals and applications in electrical engineering*. John Wiley & Sons.
- Rudolph, G. (1999). “Self-adaptation and global convergence: A counter-example”. In: *Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation-CEC99 (Cat. No. 99TH8406)*. Vol. 1. IEEE, pp. 646–651.
- Stanovov, V., S. Akhmedova, and E. Semenko (2018). “LSHADE algorithm with rank-based selective pressure strategy for solving CEC 2017 benchmark problems”. In: *2018 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. IEEE, pp. 1–8.
- Storn, R. and K. Price (1997). “Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces”. In: *Journal of global optimization* 11.4, pp. 341–359.
- Tanabe, R. and A. Fukunaga (2013). “Success-history based parameter adaptation for Differential Evolution”. In: *2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, pp. 71–78. DOI: 10.1109/CEC.2013.6557555.
- Tanabe, R. and A. S. Fukunaga (2014). “Improving the search performance of SHADE using linear population size reduction”. In: *2014 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, pp. 1658–1665. DOI: 10.1109/CEC.2014.6900380.
- Tian, M. and X. Gao (Nov. 2018). “Differential evolution with neighborhood-based adaptive evolution mechanism for numerical optimization”. In: *Information Sciences* 478. DOI: 10.1016/j.ins.2018.11.021.