Подбор гиперпараметров

Рассматривалась следующая задача:

$$iq_{t} + q_{xx} + |q|^{2}q(1 - \alpha|q|^{2} + \beta|q|^{4}) = 0, \ x \in [x_{L}, x_{R}], \ t \in [0, t_{max}],$$

$$q(x, 0) = q_{0}(x),$$

$$q(x_{L}, t) = q(x_{R}, t),$$

$$q_{x}(x_{L}, t) = q_{x}(x_{R}, t),$$
(1)

имеющая решение в виде светлого солитона:

$$q(x,t) = \sqrt{\frac{\mu e^{(x-2kt-x_0)\sqrt{\mu}}}{(\frac{1}{2}e^{(x-2kt-x_0)\sqrt{\mu}}+1)^2 - \frac{\alpha_0\mu}{3}e^{2(x-2kt-x_0)\sqrt{\mu}}}}e^{i(kx-\omega t + \theta_0)},$$

$$\mu = 4(k^2 - \omega).$$
(2)

В данной части работы осуществлялся подбор гиперпараметров модели.

Определялись оптимальные значения для количества точек коллокации, точек для начальных и граничных условий, скорости обучения, числа слоёв, числа нейронов, определялся также вид функции активации.

На каждой итерации случайным образом выбиралось новое сочетание гиперпараметров из заданного пространства поиска:

- num_domain выбиралось случайным образом из равномерного целочисленного распределения в диапазоне от 10 000 до 30 000;
- num_boundary выбиралось случайным образом из равномерного целочисленного распределения в диапазоне от 1 до 1 000;
- num_initial выбиралось случайным образом из равномерного целочисленного распределения в диапазоне от 1 до 5 000;
- learning_rate выбиралось случайным образом из логарифмически равномерного распределения в диапазоне от 1×10^{-4} до 5×10^{-2} ;
- num_layers выбиралось случайным образом из равномерного целочисленного распределения в диапазоне от 1 до 4;
- num_nodes выбиралось случайным образом из равномерного целочисленного распределения в диапазоне от 5 до 100;
- activation выбиралось случайным образом из категориального распределения с возможными значениями: sin, sigmoid и tanh.

Затем эти параметры использовались для обучения модели нейронной сети, и ошибка оценивалась на тестовом наборе данных.

Область определения осталась прежней: $x \in [-25, 25]$. В качестве параметров для отладки были взяты: $\alpha = 0, \ \beta = 0, \ t_{max} = 1, \ \alpha_0 = 0, \ k = 1, \ \omega = 0.88, \ x_0 = 0, \ \theta_0 = 0$. Обучение проводилось на протяжении 10000 итераций, использовался отпимизатор Adam.

Входные и выходные данные не подвергались дополнительной обработке.

Были получены следующие результаты:

num_domain	num_boundary	num_initial	learning_rate	num_layers	num_nodes	activation
19953	818	3061	0.0121	4	19	\sin

Таблица 1: Подобранные гиперпараметры

	Lw_{1_max}	Lw_{1_mean}	Lw_{2_max}	Lw_{2_mean}	Rel_h
Старые гиперпараметры	2.3954	1.8832	3.2085	2.3782	0.0408
Новые гиперпараметры	0.0754	0.0376	0.1124	0.0588	0.0039

Таблица 2: Прирост точности при применении новых гиперпараметров