

## KAN 拟合能力简报

### 初等函数

直接导入/声明：六大基本初等函数都可以固定，无需训练，精准度高

单独拟合：在 default dtype = float32 时拟合效果远优于 float64，六大基本初等函数基本可以做到拟合出公式。

加减乘除：在三层范围内（两层中间节点，三层公式）基本可以做到拟合，其中加减收敛最稳定，乘除需要更多训练才可以行程预期结构。

### 潜在问题

KAN 的优化函数只有 LBFGS 和 Adam 两种，其中前者在一些时候无法跳出局部最优解从而达到全局最优解，后者则是使高度跳跃，虽然能跳出局部最优但无法有效固定函数和进一步拟合参数。

局部最优解一般由两种原因导致。一是停留于实际函数的泰勒级数的一阶项，二是拟合函数在数据的定义域内精准但在定义域外不再具有推广性。

对于第一种情况，解决方案为在固定符号函数时使用第二甚至第三选择，有时可以选中真实函数而非泰勒展开。对于第二种情况，可以通过扩大数据采样范围来尝试解决，但不保证一定能成功。

最后，模型的复杂程度的提升对收敛难度有正向的影响，但影响大小和具体的待拟合函数的复杂程度相关。

### 通用拟合器

在 NKN 模型的构想中，KAN 作为单层网络提供非线性函数。

初步尝试：是在一层中预先设定六大基本初等函数，再加入适量的加法和乘法节点。

问题：可能需要使用到多个相同的初等函数

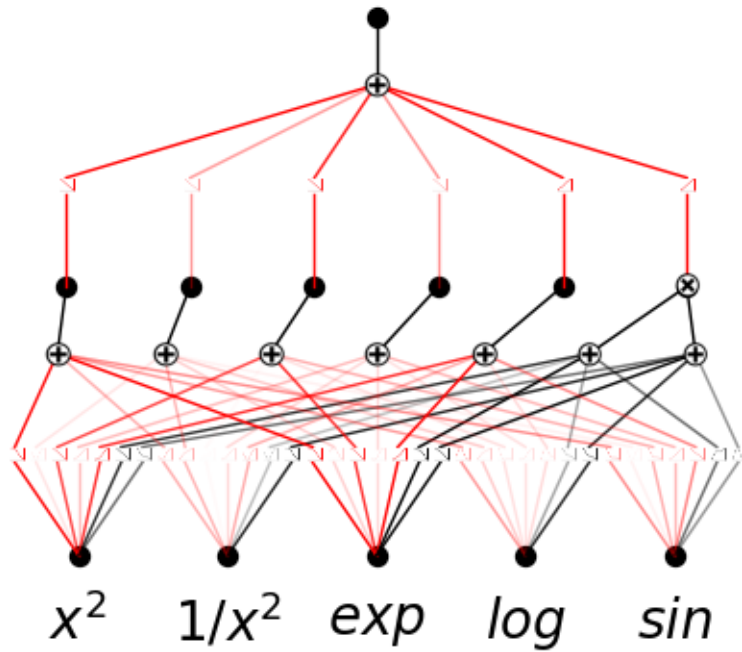
解决方案：加入更多未训练的 SiLU 函数节点，在训练中进一步拟合

问题 2：反三角函数和 log 函数存在定义域问题

解决方案：移除反三角函数和 log 函数，确定数据均为正值时加入 log 函数

问题 3：单层无法解决函数复合问题

解决方案：扩展 NKN 为 NKKN 甚至 NKKKN 结构，每层的节点数量以对数形式递减或许可以缓解由于网络过于复杂导致的不收敛问题



单层拟合器结构如图所示

第二层都被固定为  $y=x$ ，因此不起到非线性拟合的作用。令  $(L, i, j)$  代表  $L$  层从  $i$  节点到  $L+1$  层  $j$  节点的函数，编号从 0 开始，所有  $(0, 0, j)$  的函数均被固定为  $x^2$ ，所有  $(0, 1, j)$  的函数均被固定为  $1/x^2$ ，以此类推。因此所有输入变量接口均是对称的，即任何接口都满足任一初等函数的调用。

多层通用拟合器的结构为单层拟合器的堆叠。