Нейронные сети архитектуры KAN

Введение

Нейронные сети играют ключевую роль в современном искусственном интеллекте, обеспечивая прорывы в таких областях, как компьютерное зрение, обработка естественного языка и научные вычисления. Среди наиболее распространённых архитектур выделяются многослойные персептроны (MLP), которые, несмотря на свою эффективность, сталкиваются с ограничениями в интерпретируемости и вычислительной эффективности, особенно при решении сложных задач с высокой размерностью.

В последние годы была предложена новая архитектура — Kolmogorov-Arnold Networks (KAN), основанная на теореме Колмогорова-Арнольда, доказанной в середине XX века Андреем Колмогоровым и Владимиром Арнольдом. Эта теорема утверждает, что любая непрерывная многомерная функция может быть представлена как суперпозиция конечного числа непрерывных функций одной переменной. KAN используют этот принцип, заменяя фиксированные функции активации традиционных нейронных сетей на обучаемые унивариатные функции на рёбрах сети, полностью исключая линейные веса. Обычно эти функции параметризуются сплайнами, что, как показывают исследования, позволяет KAN достигать высокой точности с меньшим количеством параметров по сравнению с MLP.

Преимущества KAN включают не только улучшенную точность, но и повышенную интерпретируемость. Их структура позволяет интуитивно визуализировать модель и взаимодействовать с ней, что делает KAN особенно ценными для научных приложений. Например, исследования показывают, что KAN эффективны в задачах аппроксимации данных, решении уравнений с частными производными (УЧП) и анализе данных высокой размерности, таких как временные ряды, графовые данные и классификация гиперспектральных изображений ([A Comprehensive Survey on Kolmogorov Arnold Networks (KAN)](https://arxiv.org/html/2407.11075v1)). Более того, KAN могут выступать в роли "сотрудников" для учёных, помогая (пере)открывать математические и физические законы, что является неожиданным применением для нейронных сетей, обычно рассматриваемых как "чёрные ящики".

Постановка задачи

Данная дипломная работа направлена на всестороннее исследование архитектуры KAN, охватывающее как теоретические, так и практические аспекты. Основной целью является понимание, как KAN могут решать текущие вызовы в области нейронных сетей, такие как недостаточная интерпретируемость и высокие вычислительные затраты традиционных архитектур.

Конкретные задачи включают:

**Теоретические основы**: Изучение теоремы Колмогорова-Арнольда и её применения в проектировании нейронных сетей, включая анализ, как KAN используют суперпозицию унивариатных функций для представления многомерных функций.

**Архитектурный дизайн**: Подробное описание структуры KAN, включая использование сплайнов для параметризации функций, отсутствие линейных весов и сравнение с MLP. Например, исследования указывают, что KAN заменяют веса на функции, параметризованные сплайнами, что, вероятно, улучшает адаптивность модели ([KAN: Kolmogorov-Arnold Networks](https://arxiv.org/abs/2404.19756)).

**Оценка производительности**: Анализ эффективности KAN в различных приложениях, таких как аппроксимация данных, решение УЧП и обработка данных высокой размерности, с сравнением с традиционными MLP и другими архитектурами. Исследования показывают, что KAN могут достигать сопоставимой или лучшей точности с меньшими сетями, что может снизить вычислительные затраты ([Kolmogorov-Arnold Network](https://www.geeksforgeeks.org/kolmogorov-arnold-network/" \t "_blank)).

**Интерпретируемость**: Исследование, как KAN улучшают прозрачность модели, и обсуждение их потенциального влияния на научные открытия. Например, KAN могут быть полезны для извлечения научных правил из данных, что особенно важно в физике и математике ([A Beginner-friendly Introduction to Kolmogorov Arnold Networks (KAN)](https://www.dailydoseofds.com/a-beginner-friendly-introduction-to-kolmogorov-arnold-networks-kan/)).

**Вызовы и будущие направления**: Обсуждение текущих ограничений, таких как повышенные требования к вычислительным ресурсам и сложности в настройке гиперпараметров, а также предложения по их преодолению. Исследования указывают на возможные проблемы с переобучением и длительным временем обучения, что требует дальнейших исследований ([Kolmogorov-Arnold Networks: a Critique](https://medium.com/@rubenszimbres/kolmogorov-arnold-networks-a-critique-2b37fea2112e" \t "_blank)).

Основная часть

# Математическая теорема Колмагорова – Арнольда

На втором Международном конгрессе математиков в Париже в 1900 году математик Давид Гильберт представил список из 23 задач, охватывающие многие области математики: [алгебру](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%BB%D0%B3%D0%B5%D0%B1%D1%80%D0%B0), [теорию чисел](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A2%D0%B5%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%8F_%D1%87%D0%B8%D1%81%D0%B5%D0%BB), [геометрию](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%93%D0%B5%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%8F), [топологию](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A2%D0%BE%D0%BF%D0%BE%D0%BB%D0%BE%D0%B3%D0%B8%D1%8F), алгебраическую геометрию, [группы Ли](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%93%D1%80%D1%83%D0%BF%D0%BF%D0%B0_%D0%9B%D0%B8), вещественный и комплексный анализ, [дифференциальные уравнения](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%94%D0%B8%D1%84%D1%84%D0%B5%D1%80%D0%B5%D0%BD%D1%86%D0%B8%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D0%BE%D0%B5_%D1%83%D1%80%D0%B0%D0%B2%D0%BD%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5), математическую физику, [теорию вероятностей](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A2%D0%B5%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%8F_%D0%B2%D0%B5%D1%80%D0%BE%D1%8F%D1%82%D0%BD%D0%BE%D1%81%D1%82%D0%B5%D0%B9), а также [вариационное исчисление](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%92%D0%B0%D1%80%D0%B8%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D0%BE%D0%B5_%D0%B8%D1%81%D1%87%D0%B8%D1%81%D0%BB%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5). Проблемы должны были определить вектор развития математики в XX веке. Опубликованы задачи на английском были в 1902 годе и на тот момент все не были решены. Гильберт считал выдвинутые проблемы наиболее актуальными в математическом сообществе и по сей день решены не все.

В контекст всех задач погружаться не имеет никакого смысла, так как нас интересует только **Тринадцатая проблема из списка задач Гильберта.** Формулируется она следующим образом: можно ли решить общее уравнение седьмой степени с помощью функций, зависящих только от двух переменных?

В 1956 году советский математик Андрей Колмагоров доказал промежуточный результат, показывающий что любую непрерывную функцию через суперпозицию функций трёх переменных, но это не опровергало гипотезу Гильберта, так как функции трёх переменных не сводились к функциям двух переменных.

В 1957 году ученик Колмогорова, Владимир Арнольд, в возрасте всего 19 лет, усовершенствовал результат своего учителя. Арнольд доказал, что непрерывные функции трёх переменных можно представить через суперпозицию функций двух переменных. Его работа показала, что для любой непрерывной функции на компактном множестве существует представление вида:

где ​ - непрерывные функции двух переменных, а ​ - непрерывные функции двух переменных. Это доказательство опровергло предположение Гильберта, показав, что даже сложные функции трёх переменных (включая корни септического уравнения) могут быть выражены через суперпозицию функций меньшей размерности.

В том же 1957 году Колмогоров обобщил результаты, доказав свою знаменитую теорему, которая утверждает, что любая непрерывная функция представима через суперпозицию функций одной переменной:

Этот результат стал ещё более сильным опровержением гипотезы Гильберта, так как он показал, что даже функции двух переменных не являются необходимыми — достаточно одномерных функций.

# Универсальная аппроксимационная теорема

Идея нейронных сетей зародилась с работ Уоррена Мак-Каллока и Уолтера Питтса (1943), которые предложили модель искусственного нейрона. В 1960-х годах Фрэнк Розенблатт разработал перцептрон, но его ограничения, указанные Марвином Мински и Сеймуром Папертом в книге Perceptrons (1969), показали, что однослойные сети не могут решать задачи с нелинейно разделимыми данными (например, XOR). Это вызвало временный спад интереса к нейронным сетям.

В 1980-х годах начался ренессанс нейронных сетей благодаря разработке многослойных перцептронов (MLP) и алгоритма обратного распространения ошибки (backpropagation), что позволило обучать сети с скрытыми слоями. Формулировка теоремы (1989): В 1989 году Джордж Цыбенко опубликовал статью [Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function](https://www.sci-hub.ru/10.1007/bf02551274) в журнале Mathematics of Control, Signals, and Systems. Он доказал, что нейронная сеть с одним скрытым слоем, использующая сигмоидальную функцию активации, может аппроксимировать любую непрерывную функцию на компактном подмножестве с любой точностью, если количество нейронов в скрытом слое достаточно велико. Независимо от Цыбенко, Курт Хорник, Максвелл Стинчкомб и Хэлберт Уайт в 1989 году опубликовали похожий результат в статье [Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators](https://www.sci-hub.ru/10.1016/0893-6080(89)90020-8) в журнале Neural Networks. Они расширили теорему, показав, что многослойные сети также обладают этой способностью, и уточнили условия на функции активации.

**Универсальная аппроксимационная теорема** (Universal Approximation Theorem, UAT), или теорема Цыбенко — это фундаментальный результат в теории искусственных нейронных сетей, который объясняет, почему нейронные сети способны моделировать широкий класс функций. Она утверждает, что нейронная сеть с одним скрытым слоем и достаточным количеством нейронов может аппроксимировать любую непрерывную функцию на компактном подмножестве с любой заданной точностью, при условии, что функция активации является нелинейной и удовлетворяет определённым условиям (например, сигмоида или ReLU).

**Математическая суть** теоремы: Формально, теорема Цыбенко гласит: для любой непрерывной функции f : [ 0 , 1 ] n → R f:[0,1] n →R и любого ϵ > 0 ϵ>0 существует нейронная сеть с одним скрытым слоем, сигмоидальной функцией активации и конечным числом нейронов, такая, что sup ⁡ x ∈ [ 0 , 1 ] n ∣ f ( x ) − f ^ ( x ) ∣ < ϵ sup x∈[0,1] n ​ ∣f(x)− f ^ ​ (x)∣<ϵ, где f ^ f ^ ​ — аппроксимация, выдаваемая сетью. Доказательство опирается на теорию аппроксимации функций, в частности на теорему Вейерштрасса и результаты о разложении функций в суперпозиции сигмоид.

**Последующие обобщения**: В 1990-х годах теорема была обобщена на другие функции активации, такие как ReLU, которые стали популярны в современных глубоких сетях. Например, Лесхно и Шаудер (1993) показали, что любая нелинейная функция активации, которая не является полиномом, обеспечивает универсальную аппроксимацию. Исследования также распространились на глубокие нейронные сети (deep neural networks), где было показано, что добавление слоёв может экспоненциально уменьшать количество необходимых нейронов для аппроксимации сложных функций.