УДК 004.032.26:519.65

В. В. Капланський
В. В. Мартинюк

НЕЙРОННІ МЕРЕЖІ КОЛМОГОРОВА-АРНОЛЬДА: МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ ТА ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ B-СПЛАЙНОВОЇ ПАРАМЕТРИЗАЦІЇ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

У роботі розглянуто архітектуру нейронних мереж Колмогорова-Арнольда (KAN) як альтернативу класичним багатошаровим перцептронам. Представлено математичні засади: теорему представлення Колмогорова (1957) про подання неперервних функцій багатьох змінних суперпозицією одновимірних функцій та її обчислювальну реалізацію через B-сплайнову параметризацію навчальних активаційних функцій з використанням рекурсії Кокса-де Бура. Проаналізовано програмні бібліотеки 2024–2025 рр. (pykan, EfficientKAN, FastKAN, ChebyKAN, MultKAN) та особливості їх реалізації на графічних процесорах.

Ключові слова: нейронні мережі, теорема Колмогорова-Арнольда, KAN, B-сплайни, апроксимація функцій, інтерпретованість моделей.

Abstract

The paper considers the architecture of Kolmogorov–Arnold Networks (KAN) as an alternative to classical multilayer perceptrons. The mathematical foundations are presented: the Kolmogorov representation theorem (1957) on representing continuous multivariate functions as superpositions of univariate functions, and its computational realization through B-spline parameterization of learnable activation functions using the Cox–de Boor recursion. Software libraries of 2024–2025 (pykan, EfficientKAN, FastKAN, ChebyKAN, MultKAN) and their GPU implementation features are analyzed.

Keywords: neural networks, Kolmogorov–Arnold representation theorem, KAN, B-splines, function approximation, model interpretabilityвв

Вступ

Парадигма штучних нейронних мереж протягом останніх трьох десятиліть базується переважно на архітектурі багатошарового перцептрона (MLP), теоретичним фундаментом якого є універсальна апроксимаційна теорема: для будь-якої неперервної функції на компакті та довільного $\varepsilon > 0$ існує нейронна мережа з одним прихованим шаром та сигмоїдальною активацією, яка апроксимує її із заданою точністю [1]. Формально, для функції $f : K \to \mathbb{R}$, де $K \subset \mathbb{R}^n$ — компакт, існує апроксимуюча функція виду:

$$g(x) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \cdot \sigma(w_i^T x + b_i), \ \ \|f - g\|_{\infty} < \varepsilon$$

де σ — сигмоїдальна функція, α_i, w_i, b_i — навчальні параметри. Проте практичне застосування MLP виявляє низку обмежень: фіксованість активаційних функцій (ReLU, sigmoid, tanh) на вузлах графа обчислень робить процес навчання непрозорим («чорна скринька»), кількість параметрів швидко зростає при ускладненні задачі, а отримані моделі важко інтерпретувати аналітично.

У квітні 2024 р. дослідники З. Лю та співавтори (MIT, Caltech) запропонували принципово відмінну архітектуру — мережі Колмогорова-Арнольда (Kolmogorov–Arnold Networks, KAN) [2], яка переносить навчальні параметри з вузлів на ребра графа обчислень, замінюючи фіксовані активації навчальними одновимірними функціями.

Метою роботи є аналіз математичних основ архітектури KAN, її обчислювальної реалізації через B-сплайнову параметризацію, а також огляд програмних бібліотек 2024–2025 рр. для практичного застосування цієї архітектури.

Теоретичним підґрунтям KAN є теорема А. М. Колмогорова про представлення неперервних функцій (1957), уточнена В. І. Арнольдом. Теорема стверджує, що будь-яку неперервну функцію n змінних $f : [0,1]^n \to \mathbb{R}$ можна подати у вигляді скінченної суперпозиції неперервних одновимірних функцій:

$$f(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{q=0}^{2n} \Phi_q \left(\sum_{p=1}^{n} \varphi_{q,p}(x_p) \right)$$

де $\varphi_{q,p} : [0,1] \to \mathbb{R}$ та $\Phi_q : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ — універсальні неперервні функції однієї змінної. Принципово, що функція n змінних редукується до композиції функцій однієї змінної. Класичним обмеженням теореми вважалося те, що внутрішні функції $\varphi_{q,p}$ можуть бути негладкими (зокрема, фрактальними), що тривалий час перешкоджало її обчислювальному застосуванню.

KAN-архітектура долає це обмеження двома способами: по-перше, узагальнює формулу (2) на довільну глибину L та ширину n_l (не обмежуючись фіксованими 2n+1 проміжними функціями); по-друге, параметризує функції φ через гладкі базисні B-сплайни, забезпечуючи їх диференційовність та сумісність з градієнтним методом навчання [2].

KAN-шар визначається як матриця [Φ] навчальних одновимірних функцій, які перетворюють вхідний вектор у вихідний за правилом:

$$x_{l+1,\, j} = \sum_{i=1}^{n_l} \varphi_{l,\, j,\, i}(x_{l,\, i}), \;\; j = 1, \ldots, n_{l+1}$$

де l — номер шару, n_l — кількість вузлів у шарі l, $\varphi_{l, j, i}$ — навчальна активаційна функція на ребрі, що з'єднує i-й вузол шару l з j-м вузлом шару l+1. Композиція L таких шарів утворює мережу KAN глибини L.

Кожна функція φ параметризується як зважена сума базисних B-сплайнів на сітці з G вузлів:

$$\varphi(x) = w_s \cdot silu(x) + w_b \cdot \sum_{i=0}^{G+k-1} c_i \cdot B_{i,k}(x)$$

де $B_{i,k}(x)$ — базисний B-сплайн порядку k, побудований за рекурентним співвідношенням Кокса-де Бура; c_i — навчальні коефіцієнти; w_s та w_b — масштабні параметри; silu(x) = x · σ(x) — допоміжна базова функція для прискорення збіжності. Базисні B-сплайни мають локальну підтримку, що дозволяє вдосконалювати модель у певній області вхідного простору без впливу на інші ділянки. Принципову різницю між обчислювальними графами MLP та KAN наведено на рис. 1.

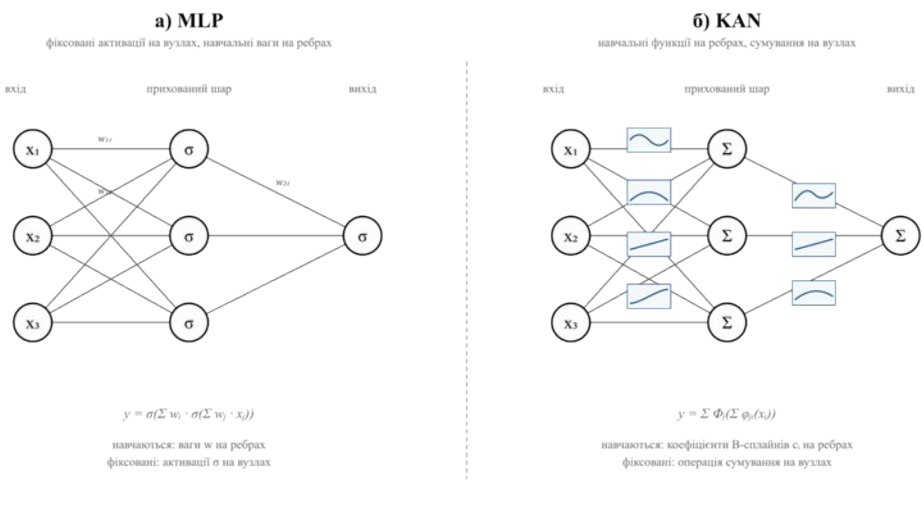

Рис. 1 – Порівняння обчислювальних графів MLP (а, фіксовані активації σ на вузлах і навчальні ваги w на ребрах) та KAN (б, навчальні функції φ на ребрах, операція сумування Σ на вузлах)

Навчання KAN здійснюється методом зворотного поширення помилки з додатковим механізмом адаптивного розширення сітки (grid extension). Сітка G_n B-сплайнів спочатку має невелику кількість вузлів (типово $G_n = 5$), а після часткової збіжності розширюється до $G_{n+1} = G_n + k$, причому коефіцієнти c_i нової сітки ініціалізуються з апроксимації функцій попередньої сітки методом найменших квадратів. Цей підхід дозволяє уникнути перенавчання на ранніх етапах та поступово підвищити роздільну здатність моделі.

Додатково застосовується L1-регуляризація на функціях φ та ентропійна регуляризація для досягнення розрідженості мережі. Розріджені KAN-моделі допускають режим символьної апроксимації (symbolic snapping): навчені функції φ замінюються найближчими аналітичними виразами з бібліотеки елементарних функцій (x^2, sin, exp, ln тощо), у результаті чого мережа повертає не вектор ваг, а інтерпретовану формулу — символьне подання навченої залежності [2, 3].

Через специфіку обчислення B-сплайнів — рекурсивний алгоритм Кокса-де Бура погано векторизується на графічних процесорах — практичне застосування KAN потребує оптимізованих програмних реалізацій. Бібліотеки, що з'явилися протягом 2024–2025 рр., наведено в таблиці 1.

Таблиця 1 – Порівняння програмних реалізацій архітектури KAN

Бібліотека	**Базис функцій φ**	**Векторизація на GPU**	**Особливості реалізації**	**Відносна швидкодія**
pykan (MIT)	B-сплайни Кокса-де Бура	часткова	symbolic snapping, grid extension	базова
EfficientKAN	B-сплайни (батч-обчислення)	повна	реструктуризація обчислень φ	висока
FastKAN	гаусові RBF	повна	заміна сплайнів на радіально-базисні функції	дуже висока
ChebyKAN	многочлени Чебишева	повна	поліноміальний базис замість сплайнового	висока
MultKAN (KAN 2.0)	B-сплайни + мультиплікативні вузли	часткова	підтримка добутків змінних, розширений symbolic-режим	нижча за базову

Експериментальні результати свідчать, що EfficientKAN та FastKAN досягають конкурентної з MLP продуктивності при значно меншій кількості параметрів на задачах символьної регресії, апроксимації спеціальних функцій математичної фізики та розв'язання диференціальних рівнянь у часткових похідних (PDE solving) [3, 4, 5]. MultKAN додатково підтримує мультиплікативні вузли, що дозволяє ефективно представляти добутки змінних без необхідності їх явної апроксимації сплайнами [3].

Висновки

Архітектура нейронних мереж Колмогорова-Арнольда демонструє фундаментально новий підхід до побудови апроксиматорів через перенесення навчальних параметрів з вузлів графа обчислень на його ребра з використанням навчальних B-сплайнових функцій. Математичною основою архітектури є теорема Колмогорова-Арнольда (1957) про представлення функцій багатьох змінних, обчислювально реалізована через гладку параметризацію B-сплайнами Кокса-де Бура. Ключові переваги архітектури — інтерпретованість моделей через механізм символьної апроксимації, менша кількість параметрів та точніша апроксимація на задачах математичної фізики — роблять KAN перспективним напрямом для застосувань, де важлива не лише точність прогнозу, а й здатність моделі надавати аналітично інтерпретовний результат.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Cybenko G. Approximation by superpositions of a sigmoidal function / G. Cybenko // Mathematics of Control, Signals, and Systems. — 1989. — Vol. 2, № 4. — P. 303–314.
2. KAN: Kolmogorov–Arnold Networks [Електронний ресурс] / Z. Liu, Y. Wang, S. Vaidya [та ін.] // arXiv preprint arXiv:2404.19756. — 2024. — 48 p. — Режим доступу : https://arxiv.org/abs/2404.19756.
3. KAN 2.0: Kolmogorov–Arnold Networks Meet Science [Електронний ресурс] / Z. Liu, P. Ma, Y. Wang [та ін.] // arXiv preprint arXiv:2408.10205. — 2024. — Режим доступу : https://arxiv.org/abs/2408.10205.

4. Li Z. Kolmogorov–Arnold Networks are radial basis function networks [Електронний ресурс] / Z. Li // arXiv preprint arXiv:2405.06721. — 2024. — Режим доступу : https://arxiv.org/abs/2405.06721.
5. Efficient-KAN: an efficient pure-PyTorch implementation of Kolmogorov–Arnold Networks [Електронний ресурс] / Blealtan. — 2024. — Режим доступу : https://github.com/Blealtan/efficient-kan.
6. Genet R. TKAN: Temporal Kolmogorov–Arnold Networks [Електронний ресурс] / R. Genet, H. Inzirillo // arXiv preprint arXiv:2405.07344. — 2024. — Режим доступу : https://arxiv.org/abs/2405.07344.
7. ChebyKAN: Kolmogorov–Arnold Networks using Chebyshev polynomials instead of B-splines [Електронний ресурс] / SynodicMonth. — 2024. — Режим доступу : https://github.com/SynodicMonth/ChebyKAN.

Капланський Віталій Вадимович - студент групи 2ПІ-25Б, факультет інформаційних технологій та комп'ютерної інженерії, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, e-mail: vkaplanskyu@gmail.com

Науковий керівник: ***Мартинюк Володимир Валерійович*** — канд. техн. наук, доцент кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця

Kaplanskyi Vitalii Vadymovych – student of group 2PI-25B, Faculty of Information Technology and Computer Engineering, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail: vkaplanskyu@gmail.com

Scientific supervisor**: Volodymyr Valeriiovych Martyniuk —** Cand. Sc. (Eng), Assistant Professor of general Physics, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia