

导读:

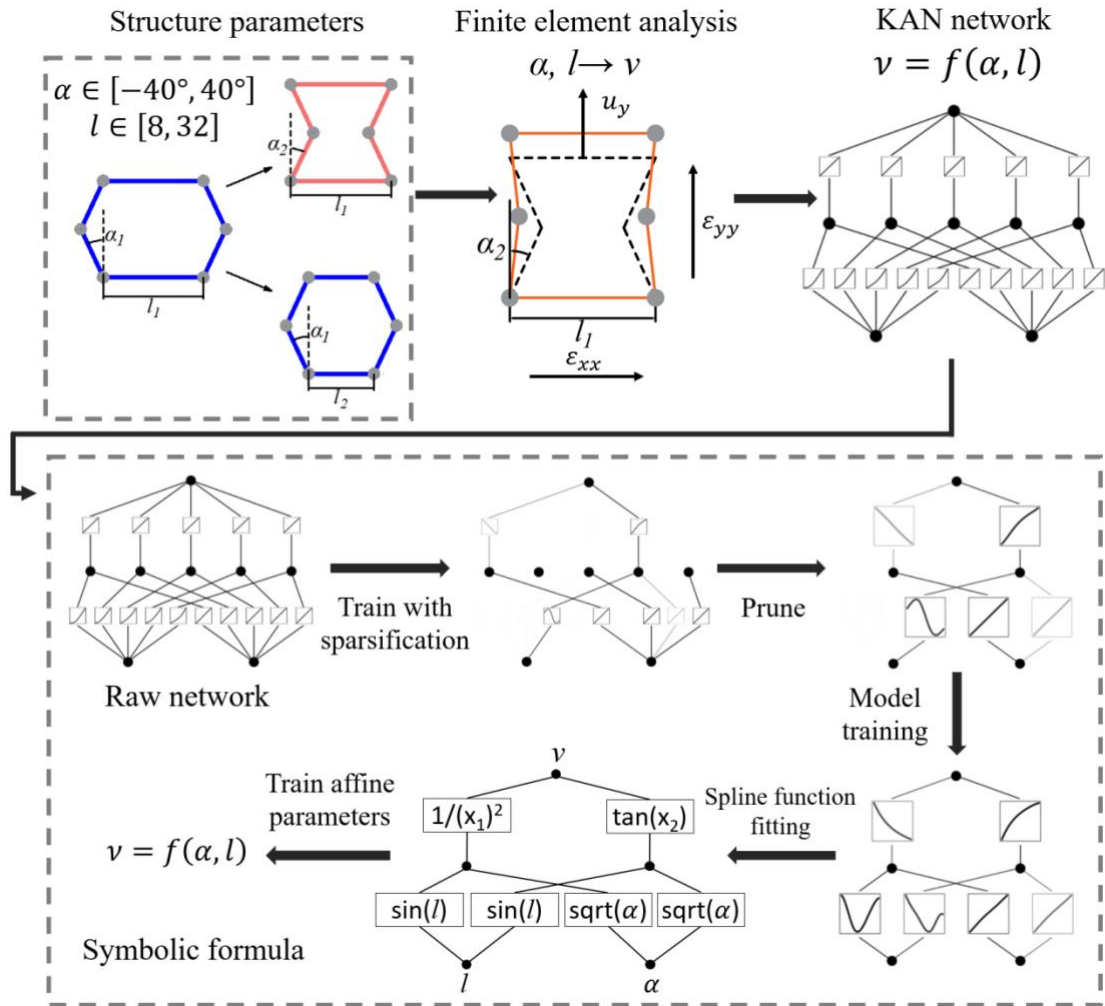
近日, 课题组丁向东教授、高志斌特聘研究员团队与南方科技大学沈翔瀛副教授/朱桂妹副研究员/李保文教授团队合作, 在 Kolmogorov-Arnold (KAN) 网络预测结构力学性质研究方面取得重要进展。他们使用 KAN 网络精确预测六角晶格结构从几何参数变化时网络泊松比从正到负的转变, 建立了泊松比与六角晶格几何参数之间的数学表达式。研究成果主要体现以下方面: 使用 KAN 网络不仅可以高精度地预测物理特性, 还可以提供清晰、可解释的数学表达式, 描述几何参数与相关性质之间的关系, 这使研究人员能够更深入地了解其中的物理机制。上述成果以“Accurately Models the Relationship between Physical Response and Structure Using Kolmogorov-Arnold Network”为题发表于一区期刊杂志 *Advance Science*, 2413805 (2025) (IF=14.3)。论文的通讯作者为高志斌特聘研究员、朱桂妹副研究员与沈翔瀛副教授, 第一单位是金属材料强度国家重点实验室, 第一作者为西安交通大学硕士生王洋和南方科技大学博士后朱昌良。

研究背景:

人工智能在科学研究中揭示现象的物理机制代表了未来研究的重要趋势。人工智能增强了科学家解决复杂问题, 提高研究效率的能力。深度学习在科学领域中广泛使用, 从而实现了诸如数据降维, 维度扩张, 超材料设计和蛋白质结构的预测等。此外, 也发展了包括图形神经网络 (GNN), 卷积神经网络 (CNN), 生成对抗的网络 (GAN) 和物理学神经网络 (PINN) 等许多深度学习模型。但现有的深度学习模型普遍缺乏可解释性, 限制了其在揭示物理机制方面的能力。许多传统神经网络模型虽然能够精准预测材料和结构的物理特性, 但其计算结果往往难以转化为可理解的表达式, 使得研究人员难以掌握潜在的物理规律。此外, 深度学习模型通常依赖于特定的计算环境, 限制了研究成果的可传播性和可复现性。因此, 如何构建既能提供高精度预测, 又具备物理可解释性的深度学习模型是当前的关键挑战之一。柯尔莫哥洛夫—阿诺德网络 (KAN) 是一种基于柯尔莫哥洛夫—阿诺德网络定理的算法, 该定理指出多元连续函数可以表示为由单变量连续函数和二元加法运算组成的有限复合函数。KAN 网络将此定理扩展到任意宽度和深度, 从而提高了准确性和解释性。KAN 结合了多层感知器 (MLP) 和样条函数拟合功能的优势, 与使用固定激活函数的 MLP 不同, KAN 用边缘上的非线性参数样条函数代替节点处的权重参数, 从而使节点只能执行求和操作, 这种修改提高了准确性和可解释性。

研究亮点:

他们选取六角晶格弹性网络作为研究对象, 探索其泊松比随结构变化的变化规律。通过有限元分析仿真, 获得了六角晶格弹性网络的角度和底边长度与泊松比之间的关系数据。借助 KAN 网络, 揭示了六角晶格结构从凸多边形变为凹多边形时, 泊松比从正到负的转变机制, 实现了高精度预测 ($R^2=0.986$)。同时, 构建了一个可解释的数学表达式揭示了几何参数与泊松比的关系。该研究展示了 KAN 网络在解析物理机制、优化工程结构设计和提升 AI 研究可解释性方面的巨大潜力。



图一. 使用有限元仿真和 KAN 网络预测六角晶格网络中泊松比变化的过程。首先，通过改变六角晶格的几何参数生成数据集。进而通过正则化训练、剪枝、样条函数拟合等步骤训练 KAN 网络以得出数学表达式，实现精确预测六角晶格从凸多边形转变为凹多边形时网络泊松比从正到负的转变。

研究总结:

在本文我们利用了一种新型深度学习框架—Kolmogorov-Arnold 网络（KAN）来预测结构对物性的影响，旨在提升科学研究中神经网络的解释性。传统神经网络虽广泛应用于材料设计和蛋白质预测等领域，但因“黑箱”特性影响物理机制的理解和知识传播，而数学公式则是科学知识的重要载体。因此，该研究基于 Kolmogorov-Arnold 定理，设计 KAN 模型，通过可学习的样条函数替代传统激活函数，并结合 MLP 特征学习能力，给出了结构与物性的关系，缓解维度灾难问题。研究以六边形晶格弹性网络的泊松比为案例，利用有限元分析生成结构参数与泊松比的关联数据，并通过 KAN 建模，给出包含三角和幂函数的符号公式，准确预测了泊松比由正到负变化的物理机制。结果表明，KAN 模型在预测精度上表现优异，且计算效率高，仅需小规模数据即可训练。KAN 的核心贡献在于以符号化公式表征复杂物理关系，提升科学 AI 的解释性，并促进研究成果的传播。然而，在高维参数空间下，其计算效率仍受限于样条函数复杂度，需进一步优化。该研究展示了“AI for science”的潜力，却仍然只是抛砖引玉。KAN 虽然给出了反

映结构-物性的数学公式，但这种类似泰勒展开一样的多项式逼近结果究竟能给我们什么样的启示，是否真的有助于我们揭示现象背后的物理本质还有待未来继续探索。