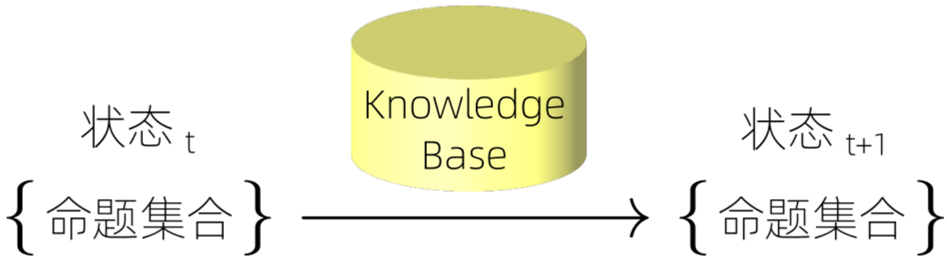
①

逻辑与深度学习的关系

这是经典逻辑 AI 的最基本运作模式：



(1)

它其实包含了两个算法：

- matching (unification):
  逻辑 rules 是包含变量的条件命题，
  例如 $\forall x.\text{是人}(x) \Rightarrow \text{会死}(x).$
  Unification 判定一条 rule 是否可以 apply 到某逻辑命题上，
  例如：$\text{是人}(\text{苏格拉底})$ 可以跟上式的左边 unify.
  Matching 的结果是得到一推 instantiated（特例化，即不包含变量）的命题。
- forward- or backward-chaining (resolution):
  由已知事实 推导出新结论，或反过来，判断某给定的新结论是否成立。
  例如：$\text{是人}(\text{苏格拉底}) \Rightarrow \text{会死}(\text{苏格拉底}) \;\; \wedge \text{是人}(\text{苏格拉底})$
  可以推出：$\text{会死}(\text{苏格拉底})$。

深度学习的特点，就是将

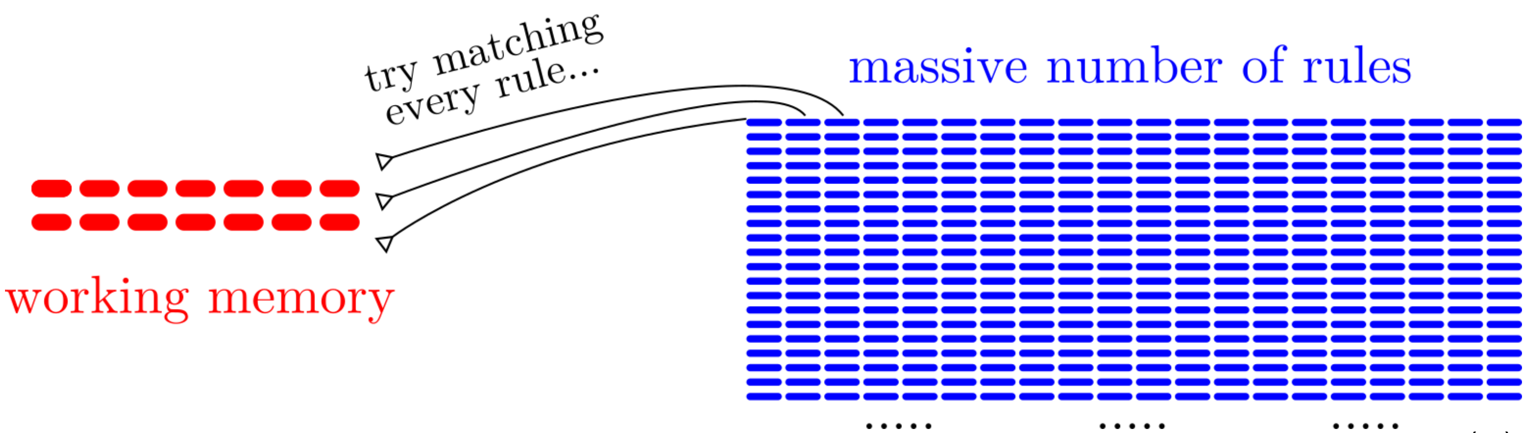
$$\text{状态}_t \vdash \text{状态}_{t+1} \tag{2}$$

的逻辑推导过程，通通纳入进去一个非常复杂的非线性函数（= 深度神经网络）里面。这样做以后，上述的逻辑结构被 “mingled” 在一起，以至于很难分辨了。但也正是由于这种「大杂烩」，深度神经网络 将一套复杂的组合算法 压缩成数量不算太多的一层层的参数。它同时可以做 learning 和 inference 这两个动作。这种简单粗暴的方法，其实非常有效率，要超越它的速度并不容易！

我们知道（或推测）一个智能系统 应该具有 符号逻辑的结构。这点知识可不可以用来 约束/加速 深度神经网络？答案似乎是有可能的。现时 state-of-the-art 处理 视觉的 CNN 和 处理文字的 BERT，它们都有内部结构，**而不是 fully-connected**，而且 这内部结构 对应于 被处理的资料的结构。因此我们有理由相信，逻辑结构 可以用来约束 深度神经网络的结构，达到加速。

接下来我们详细一点看逻辑系统的结构：

Knowledge Base 里面有很多 rules，系统要将这些 rules 逐一 match with 系统状态 (= working memory) 里面的命题：



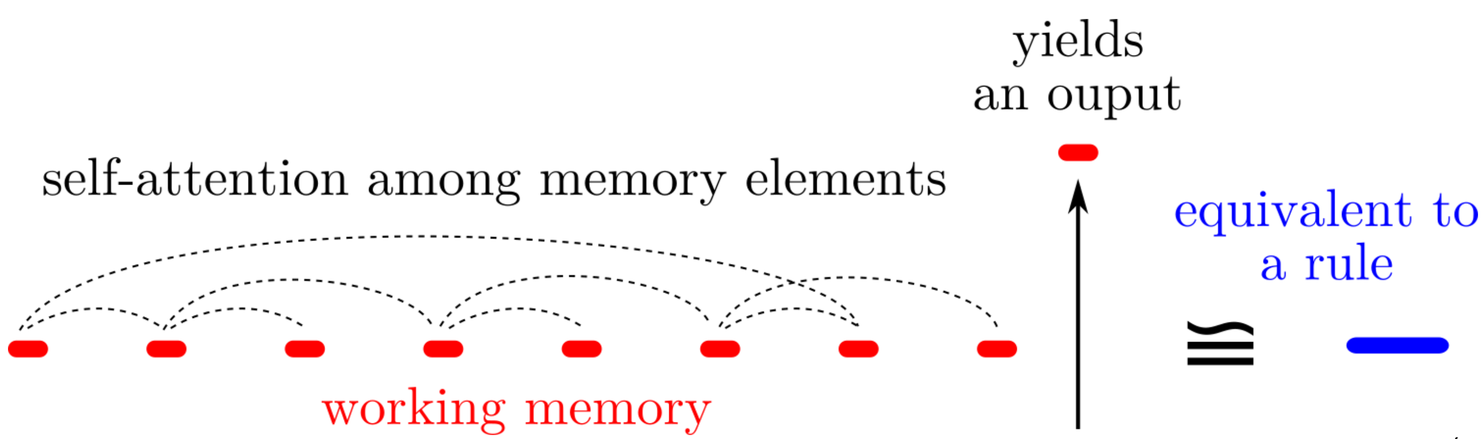
(3)

成功 matched 的 rules 可以导出新的结论，加进 working memory 的状态 里面。

这个复杂的操作，完全被一个神经网络取代。或者可以更抽象地说：

$$\text{状态}_t \longrightarrow \boxed{?\ \text{某种记忆}?} \longrightarrow \text{状态}_{t+1} \qquad (4)$$

而以 Transformer 来说，它是一种 输入元 **之间** 的记忆体（这记忆就储存在 Q, K, V 矩阵里），而它 **implicitly** 做到了 rules 的作用：



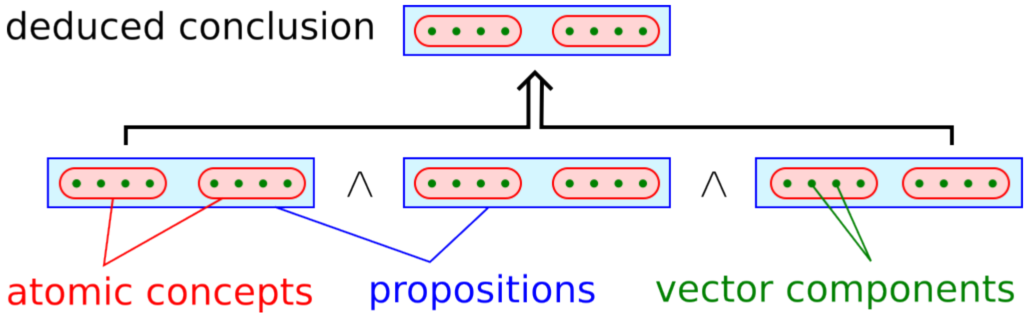
(5)

换句话说，Transformer 内部有某种（扭曲了的）逻辑 rules 的结构。那么很自然的问题就是：能否发掘更多 逻辑 / 逻辑系统 的结构？也就是说，公式 (4) 可以有怎样的代数结构约束？这个问题 可以参考 范畴逻辑 的理论，还有 经典 logic-based AI 系统的理论。

我们希望 勾画出公式 (4) 需要具备的代数约束，但暂时先用文字描述比较容易：

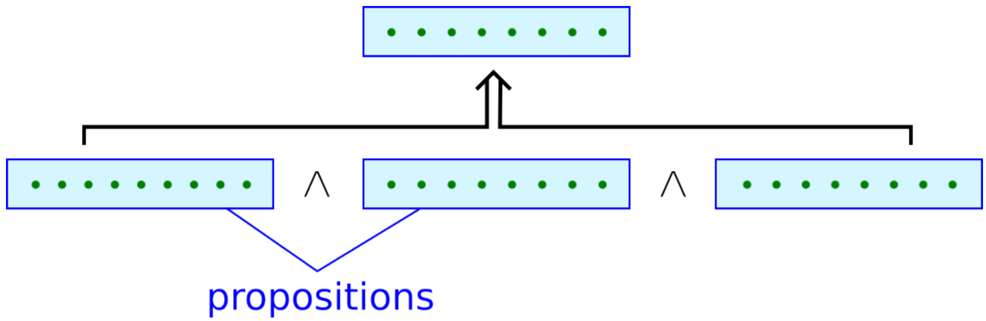
- 状态是 **颗粒化** 的，它是某集合的元素，元素之间可交换，也就是 Transformer 的 equivariance. （注意：Transformer 有 equivariance，但 equivariance 未必一定要用 Transformer 实现）
- **深度结构**：例如多层网络，每层是函数的复合 (composition). Transformer 也用了深度结构。
- 逻辑 包括了 **命题**层次 和 **命题内部**层次 的 颗粒化。后者是**谓词** (predicate) 逻辑的结构，例如：*loves(John, Mary)*，也可以简单地将它视为**代数元**之间的**乘积**，例如：*John • loves • Mary*, 后者也叫做 "word". （不同类别的代数元之间不一定容许乘积，因此有 groupoid 的概念，但暂时来说这细节不重要。）现时重点是如何将 这两层的 颗粒化 结构 施加到深度神经网络上。
- 逻辑推导 每步只产生**一个**新的结论（或其概率分布），然后这个新的结论，再加入到旧的状态中，作为一个命题集合的元素，而旧状态也要 **遗忘** 一些命题，否则需要无限记忆。这跟 Transformer 每次输出**一列**的 tokens 有点不同（虽然我们不太肯定 Transformer tokens 究竟对应于 命题 还是 谓词 / 原子概念）。
- 逻辑 rule 通常只跟某几个前提有关，其它前提是**无关**的，例如：眼睛好看 $\wedge$ 鼻子好看 $\wedge$ 嘴巴好看 $\Rightarrow$ 帅，跟 有钱 或 穷 无关。Transformer 的 **softmax** 结构似乎也可以排除一些无关的 tokens 的影响。
- (可能还有其他的结构特征.....)

根据我的理论，理想的逻辑形式是这样的（各种元素的个数纯粹示意）：

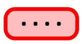


(6)

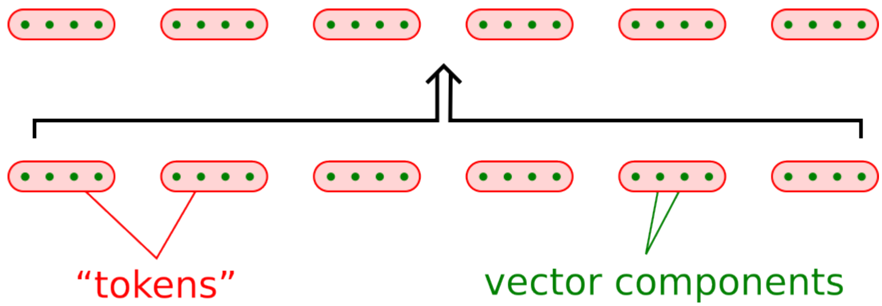
相比之下，我们目前可以写出来的 代数关系 $p \wedge q = p \wedge q$ 只表达了这种结构：



(7)

相比于 图 (7)，图 (6) 添加了  的约束，但这约束怎样用代数表示？

而 Transformer 处理 命题 和 概念 的方式是这样：

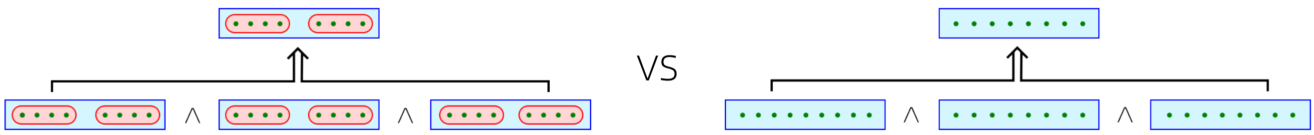


(8)

它没有 explicit 的命题结构，而是用特别的 token 表示句子的**终结**，当然还有 positional encoding 这些「伎俩」。所以，Transformer 是一种比较 *ad hoc* 的设计，我们应该可以改进它。

现在我们企图回答那最重要的问题：怎样用代数形式表达「命题是由概念原子组成的」?

亦即是说，以下这两个结构的分别在哪里？如何用代数表达这不同?



(9)

这就像问 $0...9 \times 0...9$ 跟 $00...99$ 的分别（基本上没有分别，它们是 isomorphic)。

类似地，

$$\{\text{ John, Mary }\} \times \{\text{ human, god, worm }\} \tag{10}$$

跟

$$\{\text{ John is human , Mary is human , ...}\} \tag{11}$$

等 $2 \times 3 = 6$ 个命题 也是同构的。但前者是由两组不同的概念结合而成，它的成分可以被 $\forall$ 或 $\exists$ 量化；后者是 命题逻辑，命题是不可分割的，也不可以拆开来量化。

但由于 $\boxed{\cdots\cdot}$ $\in$ 非交换自由群（最少结构的群），它没有像 $a \cdot b = b \cdot a$ 那样的对称性公式。

经过一番分析之后 我得到了「命题是由概念原子构成的」以下条件：

Atomic Condition (AC). *Each proposition P is made up of K atoms:*

$$P_i = a_{i1} \cdot ... \cdot a_{iK} \tag{12}$$

where optionally some atoms are **copied** *to other locations (with a non-linear transformation τ, if they are copied to the output layer) via:*

$$a_{ih} = a_{jk} \quad \text{or} \quad a_{ih} = \tau(a_{jk}) \tag{13}$$

and the transformation τ has to accord with $\forall$ or $\exists$ as adjunctions to a substitution functor.

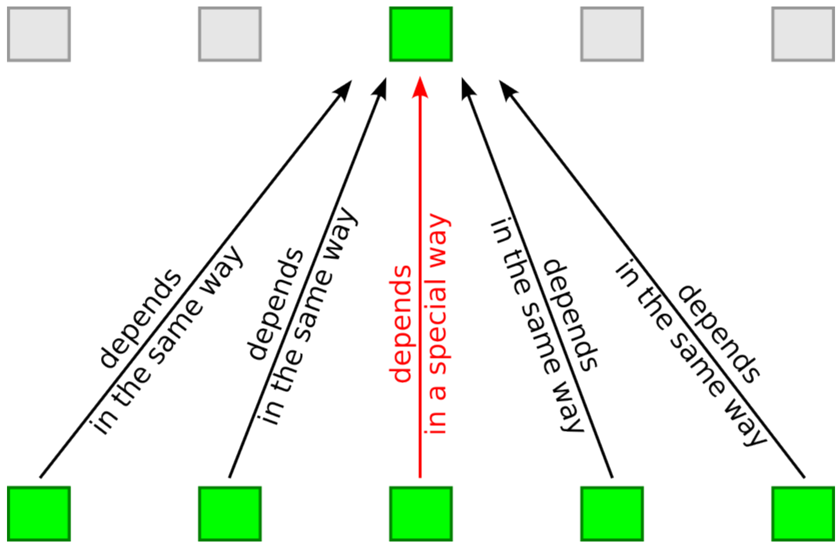
其实 τ 只需要是连续函数，就可以符合上述条件。所以 Atomic condition 的重点在于 (12) 和 (13) 这两个**等式**，其实是非常简单的。$\forall$ 和 $\exists$ 作为伴随函子的范畴论描述 比较复杂，我们会在附录里解释。

那么 等式 (13) 里面的 "=" 是来自哪里？其实太明显了，它就是逻辑 rule 里面将变量「syntactically 搬动」的动作：

$$\forall X, Y, Z.\ \text{grandfather}(X, Z) \leftarrow \text{father}(X, Y) \wedge \text{father}(Y, Z) \tag{14}$$

正是 这些「搬动」，构成了 命题由概念组成的结构。

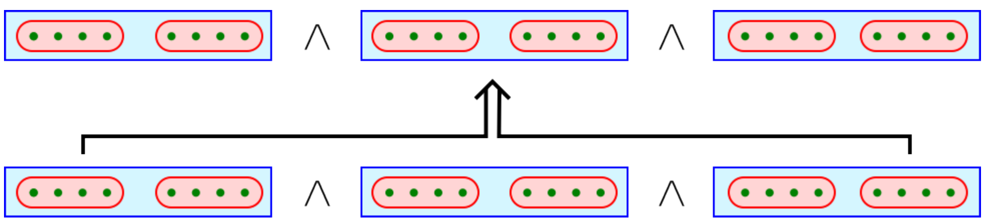
Self-Attention 的本质 可以这样理解：



(15)

这垂直的「軸」结构 (红色)，重复在每一个轴上。所以，当 输入的元素 **交换**时，输出也随着交换。这就是 self-Attention 能达到 **equi-variant** 效果的原因。

而我们想用 类似以上 self-Attention 的方法，解决 逻辑结构 的问题：



(16)

在 范畴逻辑 里面有 Beck-Chevalley 条件和 Frobenius 条件，或许是我们所需的对称性？但细看之后，发觉还是不能解决问题..... For completeness，我还是描述一下，没兴趣的可以略过。

首先考虑比较容易明白的 Frobenius 条件。在逻辑上，它等于说：

$$\exists x.[\phi \wedge \psi(x)] \equiv \phi \wedge \exists x.\psi(x). \tag{17}$$

由于 经典逻辑 AI 普遍使用 ∀ 而忽略 ∃，我将上式改写成：

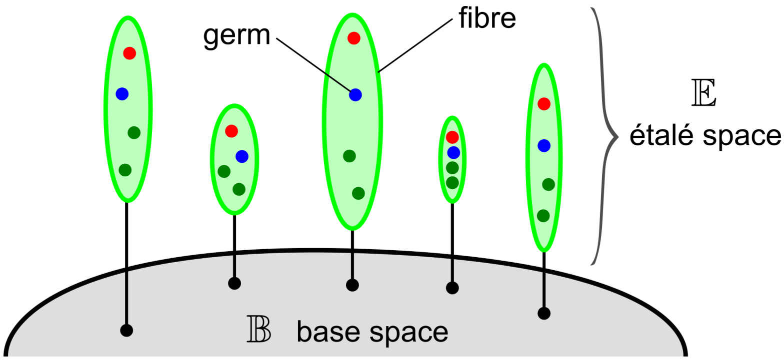
$$\forall x.[\phi \vee \psi(x)] \equiv \phi \vee \forall x.\psi(x). \tag{18}$$

但问题是，(18) 式的左边和右边，其对应的神经网络 (6) 是一样的（看不出有分别）。也就是说这个差别可能太 subtle 了，它并不影响我们实际 implement 的神经网络。

在逻辑里，任何变量 例如 x, y 等，必须被 ∀ 或 ∃ quantify，否则不成为合法的句子。所以 表达 谓词结构的对称性，也很可能要涉及 ∀ 或 ∃.

以前说过，谓词逻辑 带来 fibration 或 indexing 结构。Beck-Chevalley 和 Frobenius 条件 基本上是说，这 纤维结构 是 “preserved by re-indexing functors”.

这是 fibration 结构的示意图：



(19)

这整个结构 叫 bundle，而 sheaf 是 bundle 加上某个特殊的 拓扑结构。

在 (A, f) 和 (B, g) 两个 bundle 之上可以定义 fibred product of A and B over I, 记作 $A \times_I B$:

$$\begin{tikzcd}
A \times B \arrow[r, "q"] \arrow[d, "p"'] \arrow[dr, "h"] & B \arrow[d, "g"] \\
A \arrow[r, "f"'] & I
\end{tikzcd} \tag{20}$$

其中 $h = f \circ p = g \circ q$. 这也是一个 pullback.

Beck-Chevalley 条件是说 下面这幅图 commute：

$$\begin{tikzcd}
K \times J \arrow[r, "u \times id"] \arrow[d, "\pi"'] & I \times J \arrow[d, "\pi"] \\
K \arrow[r, "u"'] & I
\end{tikzcd} \tag{21}$$

其中 π 就是代表 量词 $\forall$ 或 $\exists$ 的 投影，它们是 weakening map π^* 的伴随映射。

Beck-Chevalley 条件并不完全是空洞的；它有可能不成立。有一个反例是 Pitts 提出的：考虑 $X \times Y$，其中 $X = Y = \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ 亦即 自然数加上 ∞ 作为 top element；但 Y 是用 discrete order，亦即所有 order 都是 =. A 是 $X \times Y$ 上的关系：$A = \{(x, y) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} \mid x \leq y\}$. 那么 $\exists y.(x, y) \in A$ 会是整个 X 集合。如果考虑 DCPO 范畴，我们要求 fibration of Scott-closed subsets (ordered by inclusion) over DCPO. $\exists y.A$ 的 Scott closure 的条件是 它是一个 lower set closed under directed joins；而这个 Scott closure 条件似乎不成立，因而导致 图 (21) 不 commute.（我对 Scott closure 的细节不太理解）

Lawvere 的工作将 Beck-Chevalley 条件变得更一般化：「简单」的 $\forall$ 和 $\exists$ 量词 是 weakening functor π^*（基于笛卡尔积）的伴随函子，但 Lawvere 将它扩充到任何 substitution functor u^*.