

AGI 大统一理论

0 综述

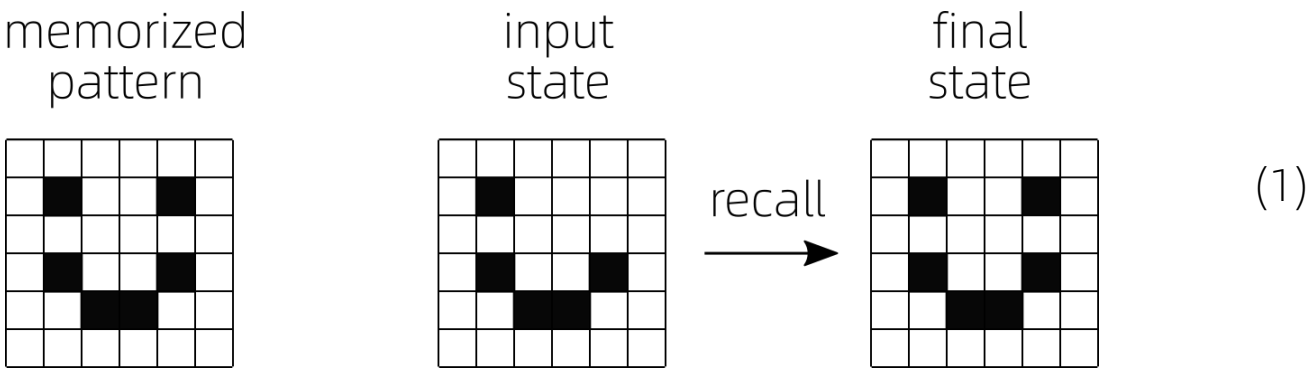
- 大统一理论是在 **强化学习** 的框架下进行的，这是以 Richard Sutton 为代表人物 提出的理论框架。
- 在 强化学习里 最棘手的一个问题，就是如何 储存和计算 所有 **状态** 之上的 **概率分布**。对 AGI 来说，状态 = 思维空间。我们需要的是 所有可能的思维之上的概率分布，而这是 AGI 的一个硬性需求，无法避免。由于思维空间是高维的向量空间，它上面的概率分布是一个庞大的 mathematical object，很难在计算机上表示。如果用 神经网络 表示，则问题是如何对这个概率分布进行 **采样** (sampling)，在神经网络里，这是很困难的。
- **Hopfield 网络** 的权重 定义了一个 能量地势 (energy landscape)，它可以看成是一个 implicit 的 **概率分布**。透过 Hopfield 网络的 learning，可以改变这个概率分布。但这需要修改 Hopfield 网络的算法，将 能量 诠释成 概率，而这正是 **Boltzmann machine**，也称作 EBM (Energy-Based Models)。
- 根据 “Hopfield Network is All You Need” 论文¹，现代 Hopfield 网络的 state update rule 跟 **Transformer** 重合²。换句话说，每执行一次 Transformer，就会趋向 Hopfield 的能量最低点。
- Transformer 的 softmax 可以看成是 **大脑** 中某种 “winner-takes-all” 机制。从这个角度，可以类比大脑思考的机制，互相参考以获取更多灵感。
- 我最新的论文 提出，Transformer 具有 **逻辑结构**，可以在逻辑基础上建立 AGI。

¹感谢 Eric Zeng 给我推荐这篇论文。

²注意这是 state update rule 而不是 learning update rule. 前者 更改 Hopfield 网络的 激活 状态；后者 更改 Hopfield 网络的权重 / 记忆。

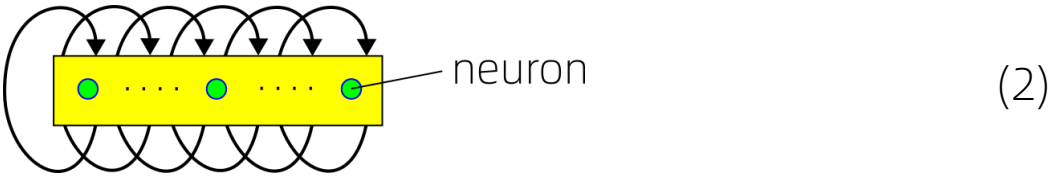
1 Hopfield 网络

Hopfield 网络是一种 特别简单的 fully-connected 神经网络，它具有 **associative memory** 的特性，可以凭部分 pattern 回忆整个 pattern:



记忆由神经元之间的 **连接权重** 决定，而这些权重定义了一个 **能量函数**。Hopfield 网络就是统计物理学里面的 **Ising model** 应用到了神经网络上。

可以将一个 Hopfield 网络 铺平 画成这样:



注意它不是 feed-forward 网络，它的 输入 和 输出 在同一地方。

1.1 经典 Hopfield 网络

我们的符号跟随 *Hopfield Network is All You Need*.

\mathbf{x}^i = 需要记忆的 **patterns** (有 N 个), x_s^i 是它的 s -th bit.

$\mathbf{X} = (\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^N)$ 是所有 patterns 的矩阵。

$\boldsymbol{\xi}$ = 网络的 **状态**, ξ_s = s -th 神经元的 激活状态。

连接权重 between s -th and t -th neurons:

Weights

$$T_{s,t} = \sum_i x_s^i x_t^i$$

(3)

总能量 (Hamiltonian):

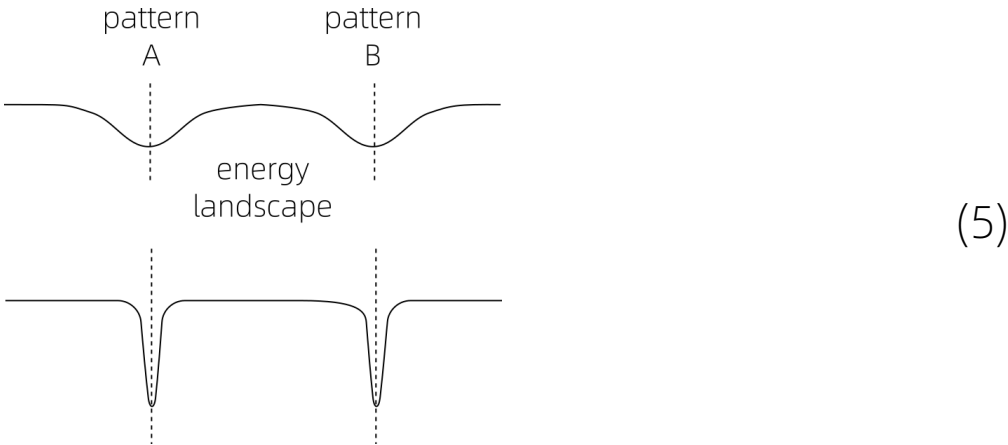
Energy

$$E = -\frac{1}{2} \sum_s \sum_{t \neq s} \xi_s T_{s,t} \xi_t$$

(4)

1.2 Modern Hopfield 网络

在经典 Hopfield 网络里，当 A 和 B 两个 patterns 太靠近的时候，它们会互相干扰，导致可以储存的 patterns 数量不大。现代 Hopfield 网络 改变 Hamiltonian 能量函数，令干扰减弱，可以储存数量更多的 patterns:



新的能量函数:

New Energy

$$E = - \sum_i F(\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{x}^i)$$

(6)

注: $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{x}^i = \sum_s \xi_s x_s^i$, F = interaction function.

[Demircigil et al 2017] 提出 F 用 exponential 函数。

State update rule:

$$\boldsymbol{\xi}^{\text{new}} = \mathbf{X} \text{softmax}(\beta \mathbf{X}^T \boldsymbol{\xi})$$

(7)

1.3 Hopfield-Transformer 对应

传统 Transformer's state update rule:

$$\mathbf{Z} = \text{softmax} \left(\frac{1}{\sqrt{d_k}} \mathbf{Q} \mathbf{K}^T \right) \mathbf{V}$$

(8)

Modern Hopfield network's state update rule:

$$\mathbf{Z} = \text{softmax} \left(\beta \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{Y}}^T \right) \hat{\mathbf{Y}}^T$$

(9)

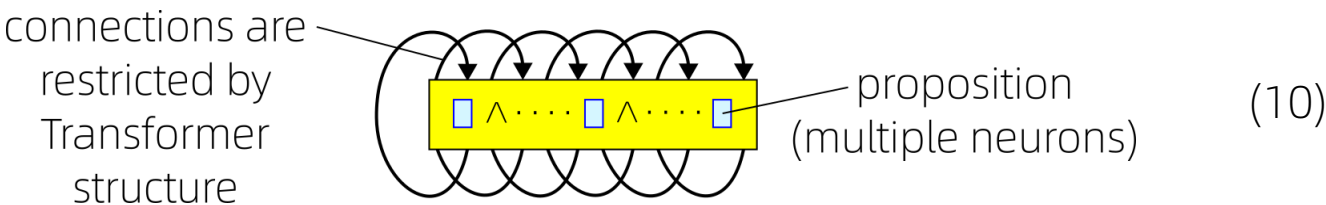
这里 $\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{X}}$ 是 $\mathbf{R}, \mathbf{Y}, \mathbf{X}$ 分别乘上了适当的 \mathbf{W} 's 矩阵，但为了数式的简洁，使用了代号。

Query patterns = $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_M)$ 是网络的**状态**。之所以有 M 个状态，是因为他们将 Transformer 的 M 个输入 **摊开**来，才构成一个大的 Hopfield 网。不这样做根本无法将 Hopfield 网和 Transformer 等同起来。

\mathbf{Y} 就是 Hopfield 记忆里的 patterns，它们担任 Transformer 里 **keys** 的角色。

在 Self-Attention 里， $\mathbf{R} = \mathbf{Y}$ 。

跟图 (2) 比较，这个是 受 Transformer 结构 约束的 Hopfield 网络:



2 Boltzmann 机

注意：以下是 Boltzmann machine 跟 **经典** Hopfield network 的对应。

Let $O = (O_1, \dots, O_n)$ be the **state vector**.

$W = \{W_{s,t}\}$ are connection **weights**.

State update rule: i -th unit is set to 1 with probability

$$\frac{1}{1 + e^{-S_i/T}} \quad (11)$$

where T is a temperature.

如果用以上的 update rule, 则 Hopfield 能量 变成 **概率分布**:

$$P(O) = P(O|W) = \frac{e^{-\mathcal{E}(O)/T}}{Z} \quad \boxed{\text{Boltzmann distribution}} \quad (12)$$

where partition function $Z = \sum_U e^{-\mathcal{E}(U)/T}$

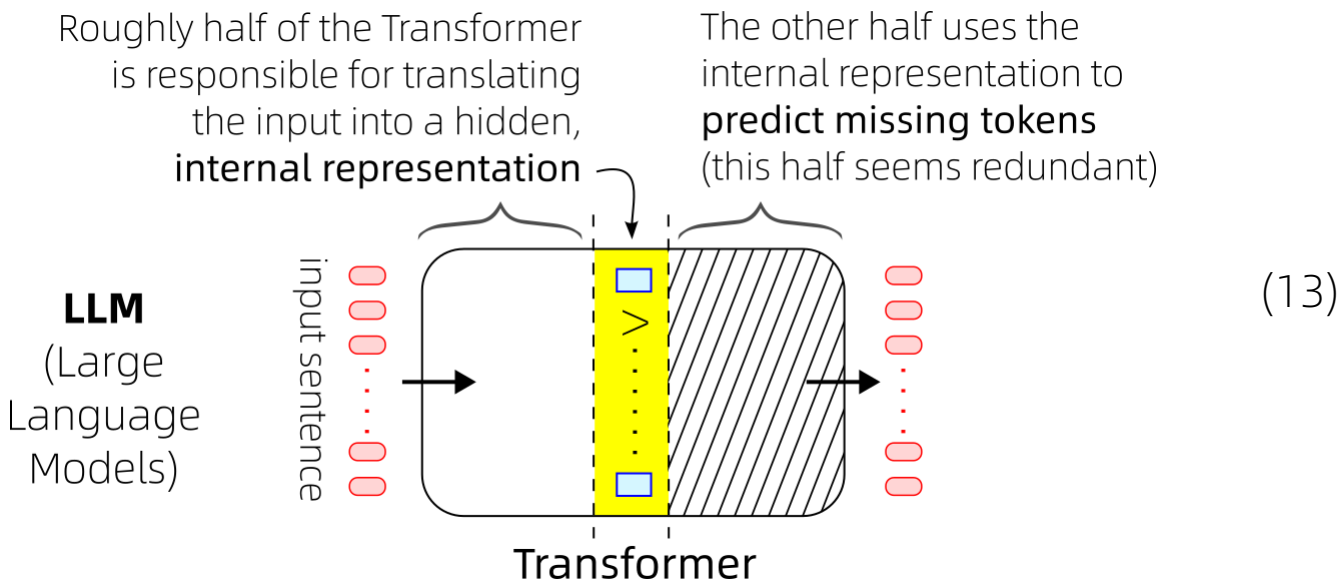
TO-DO: 求出 现代版的 Hopfield network 的 Boltzmann state update rule.

TO-DO: 求出 Hopfield-Boltzmann machine 的 **learning** update rule. 但它似乎是根据 **记忆** 而 update ??

3 与强化学习 结合

3.1 LLM 内部很可能存在冗余

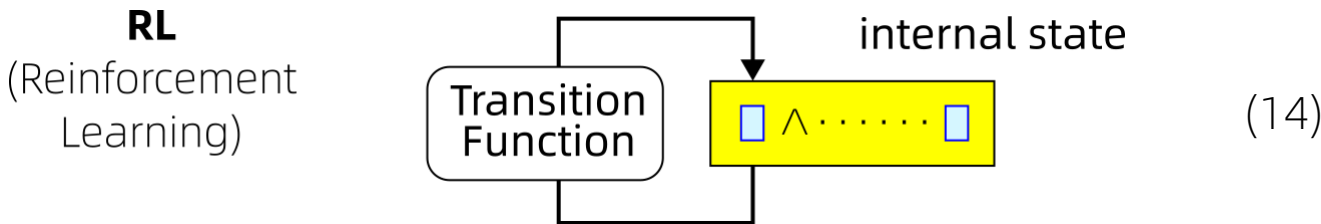
LLM (大型语言模型) 是根据 自回归 (auto-regression, 强迫模型的输出跟输入一样) 的原理训练。在这种模式下，Transformer 用大约一半的资源，将输入句子转化成一个 具有高度抽象语义的 内在表示。它的后半部 利用这个抽象表示 去预测掩盖了的词语：



在一个智能系统里面，其实我们最需要的是 中间的那个 hidden representation，用来做「下游」的工作，但不一定是预测词语，所以后半部对智能系统来说，构成了一种**冗余**。

有两个做法：一是接受这个冗余，继续将整个 AGI 系统做出来。二是改变系统架构，重新训练一个更合乎直观 的模型。

个人认为 强化学习 模型 更为直观，可以省却很多理解上的「拐弯抹角」，令 AGI 的设计更清晰：



这个 transition function 就是一个类似 Transformer 的函数。

3.2 Transformer → Hopfield → Boltzmann

在强化学习里，系统需要 **储存** 并 **学习** 一个分布在所有状态或动作（包括 思维动作，即「思维空间」）之上的 **概率分布**。由于思维空间是一个庞大的 高维向量空间，在计算机上很难处理。（数学家们很轻松就写下这种空间，但我们必需考虑实践的可行性。有人打趣说：「计算机学家就是赶时间的数学家」）

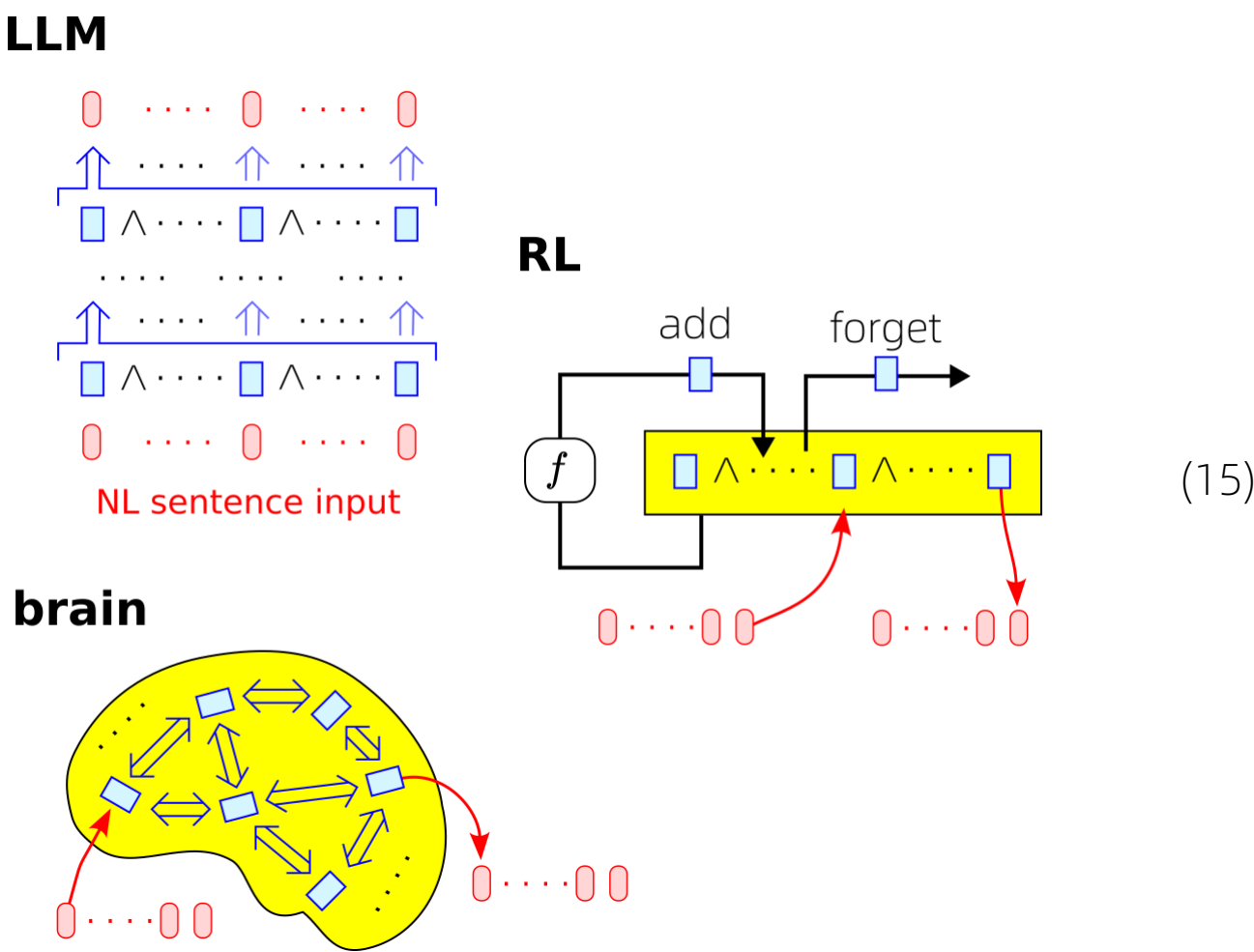
不能简单地用 Transformer 输出这个 概率分布。目前习惯是，Transformer 输出的 token，会乘上一个矩阵，让输出转换成一支很长的向量，它代表 词典里每个词的概率分布。但这个 trick 转到 思维空间上就不管用了，因为将所有的思维枚举出来 不切实际。

于是我们想到一个办法就是，用「隐式」的方法表示这个概率分布。关键是一篇名为 “Hopfield Network is All You Need” 的论文。Hochreiter et al 论证，Transformer 是 Hopfield 网络的一个特例。

Hopfield 网络的能量函数可以转变为 概率，那就是 Boltzmann machine. 这个东西在深度学习里占有举足轻重的地位；Hinton、Bengio、LeCun 等人都深入地研究过它，特别是因为它适用于 强化学习。它也叫作 EBM (energy-based models)。

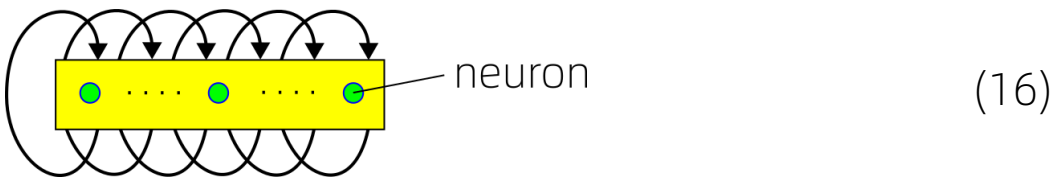
Transformer 可以轻易地转变为 Hopfield 网络，然后变成 EBM. 那么，根据强化学习的 Bellman 方程，必然可以找到它的 learning update rule, 于是可以建立 AGI 的最基本模型。

这里还有一点细节需要想明白：在 RL 的「状态」里面有很多逻辑命题，它们互相激活，导致下一个结论命题的出现。这情况跟大脑里的 “areas” 互相激活 很相似。或许大脑 可以给我们一些启发，如何更有效率地组织 大量 神经元之间的连接？



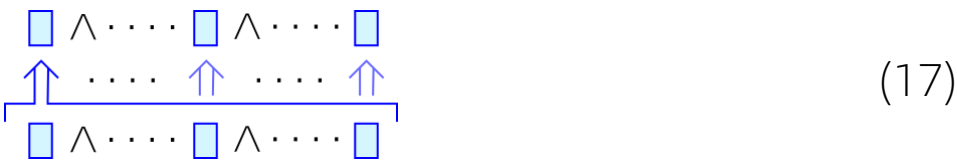
3.3 结合 Transformer + RL : Road Map

如果我没理解错，Hopfield 网络 是 fully-connected, 可以这样表示：



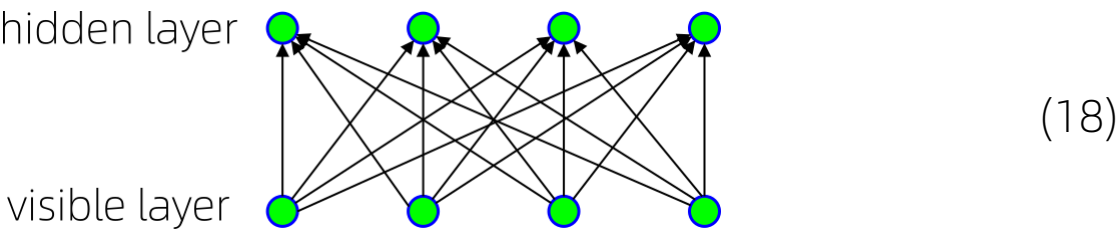
第 1 步

根据《Hopfield Network Is All You Need》，图 (16) 代表 一层的 Transformer 的 forward inference（但在 Hopfield 网络里，输入和输出的神经元是同一组）：



第 2 步

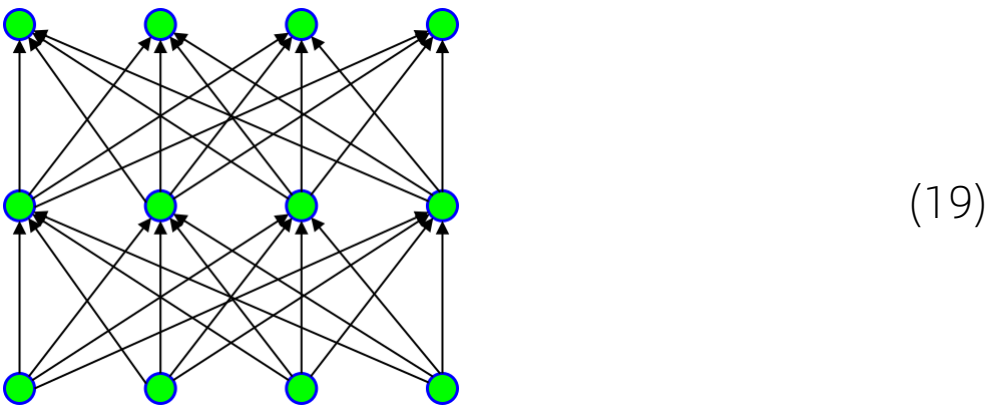
我们希望 将 Hopfield \rightarrow Boltzmann，让输出符合 概率分布。但 Boltzmann machine 一般来说是 intractable 的，需要 restricted Boltzmann machine, 也就是一个 bipartite graph, 这个 结构 让概率分布函数可以 factorize：



换句话说，图 (18) 是 概率化 了 的一层 Transformer。

第 3 步

然后，我们可以将 Boltzmann machine 叠起来，这类似于 传统的多层 Transformer，但是 概率化了：

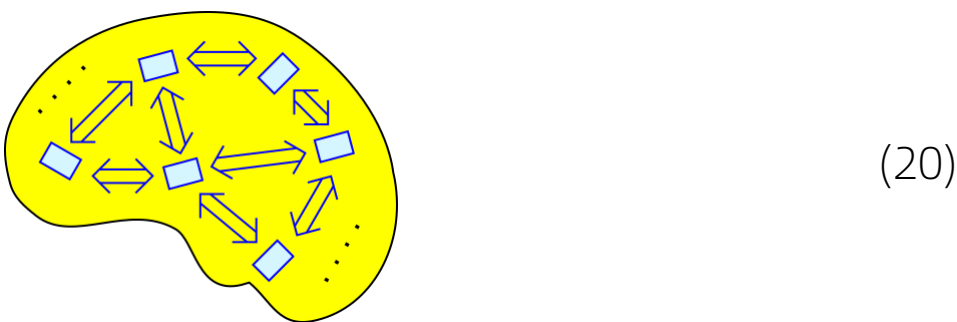


到这一步以后，可以直接将这个网络嵌入 强化学习里，造成最简单的 AGI 模型。

第 4 步

(这步非必需，但可以作为参考，获得灵感)

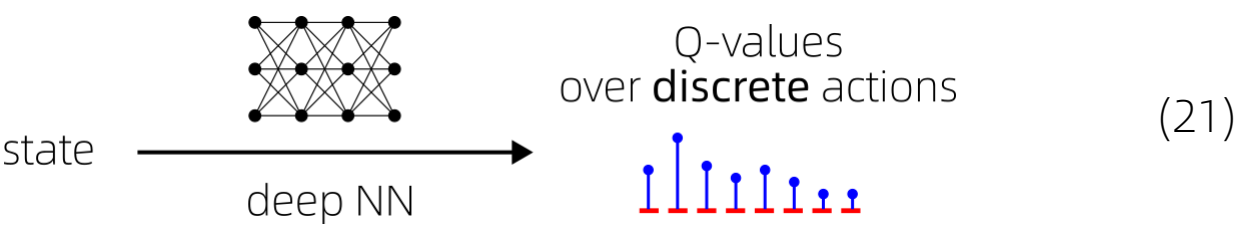
图 (19) 有点类似大脑的 “areas” 结构：



但不同于 图 (19) 的是，大脑 areas 之间的连接是 双向 的。但我们可以根据这一点启发，设计更有效率的 AGI 网络结构：分成很多个 areas，areas 之间以 Transformer 连接。新的 Transformer 或许可以是 双向 的，但细节未弄清楚。

3.4 RL update rule

首先，Deep Q Learning (DQN) 的问题是它无法处理 连续的 action space (例如高维向量空间)：



所谓 Q-value 就是 $Q(s, a)$ = 在状态 s 做动作 a 的**价值**。大家想想：如果状态 s 包含所有可能的思维状态，动作 a 包含所有可能的思维动作，则 $Q(s, a)$ 的讯息就包含了一个智能系统的所有智慧！

(s,a) 是连续空间 这个问题可以用 **Energy-Based Model** (EBM) 解决，最早提出的似乎是 Hinton & Sallans 2004 [1], 而在那篇论文里，他们正正是为了解决 RL 问题¹。中心思想就是 用 free energy² F 近似 Q-value: $Q(s, a) \approx -F(s, a)$ 。

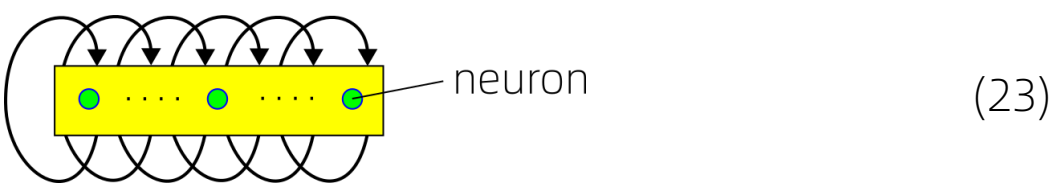
强化学习的 **Bellman update** 根据 状态 s 的奖励 $R(s, a)$ 更新某价值函数，例如我比较熟悉的 Q-Learning 的 temporal difference update:

$$Q(s, a) += \eta \left[R(s, a) + \gamma \max_{a'} Q'(s', a') - Q(s, a) \right] \tag{22}$$

(η = learning rate, γ = discount factor, s = state, a = action)
 Q 就是系统选择某行动的预期价值，系统（带有随机性地）选择 Q 最大的那些动作。这跟 Hopfield 或 Boltzmann 模型 里面的 状态转移 $s \rightarrow s'$ 的概率 或 能量 F 是异曲同工的。

Q 的 update rule 基本上就是 Hopfield 或 Boltzmann 模型的权重的 update rule. 这些初步工作已经被 Hinton & Sallans 做了。但这个 naïve 的做法 可能不够计算效率，它甚至丧失了 back-prop，我们目前最强的武器！

(没有受限的) Boltzmann machine 只是一块扁平的东西：



对比于 图 (21) 它缺少了「深度」，虽然 强化学习的 loop 也可以看成是一种深度，但它跟 back-prop 好像不一样。这样会不会丧失了深度学习的优势呢？必需详细分析.....

有某些问题：

1. Hopfield / Boltzmann spin 出了 set of next propositions.
2. 想知道这些 propositions 的 $P(x_i|\mathbf{X})$, 但似乎不易。
- 3.

References

[1] Brian Sallans and Geoffrey E. Hinton. "Reinforcement Learning with Factored States and Actions". In: J. Mach. Learn. Res. 5 (Dec. 2004), pp. 1063-1088. ISSN: 1532-4435.

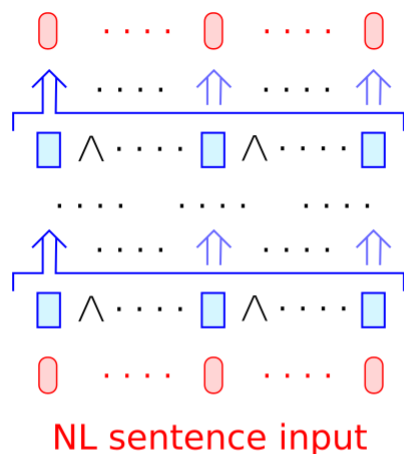
¹大家可参看《Quantum Enhancements for Deep Reinforcement Learning in Large Spaces》[2021]，此文的目标虽然是 量子计算，但它考察了 deep RL 的最新研究。
²所谓 free energy 是指，在 Hopfield 或 Boltzmann 模型里，有 visible (v_i) 和 hidden (h_i) 神经元之分。Energy E 的表达式包含 v_i 和 h_i 。Free energy 是 E 对 h_i 的求和，即 marginalization: $F(v) = \sum_h E(v, h)$ 。

4 Personal Notes

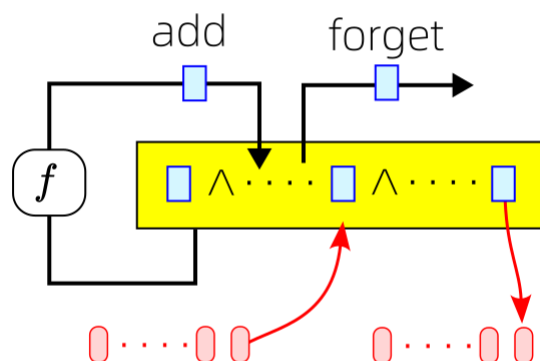
于是 Ngiam *et al* 2011 (在 Andrew Ng 为导师下) 提出了 **Deep Energy Models** (DEMs).

下图中, 我们比较 LLM, RL 和 大脑。它们的**状态**有什么对应关系?

LLM

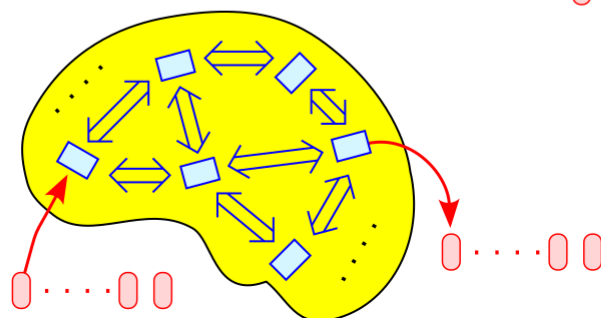


RL



(24)

brain



从 model-based RL 的角度看 (例如 PILCO), 需要 预测世界。但这不包括预测自己的思想。但基于感觉资料的思想 包括对世界的预测。模型就是对世界的思想。究竟 model-based 跟 model-free 有什么分别? 对 世界的预测 帮助寻找最佳的对策。但我说 对世界的预测 是 sensory-based inference 而已。

在状态之中 某些命题 update, 但其他命题 可以不变。

RL 里面, weights 决定 next state, utility 决定 next state, weights 决定 utility = energy = probability distribution over next states. 但 current state 的 utility value 似乎很难获得?

State 跟 action 的分别, 似乎就是 新命题 跟 命题集合 的分别。

在大脑中, 命题似乎有 位置的固定性。



这部分暂时仍未想清楚....

5 大脑