No problem can withstand the assault of sustained thinking.

— Voltaire

Genifer 4.1 理论笔记

YKY (甄景贤)

July 8, 2015

现在来 recap 一下，我想做的是什么…

首先，我们有一个原子概念的集合 $A = \{男人, 女人, 爱, 恨, 足球, ...\}$，在抽象代数中这个集通常叫作 alphabet，它的元素叫字母 (letters)。

2013 年，Tomáš Mikolov 等人在 Google 研究出 Word2Vec，引起了广泛影响。基本上它将离散的词汇集合映射到连续的向量空间（需要某种近似），这个近似是基於所谓的分布性原理 (Distributional Hypothesis)，即是说：两个词如果分布相似，即经常出现在相似的句子中，它们的语义也会相近。

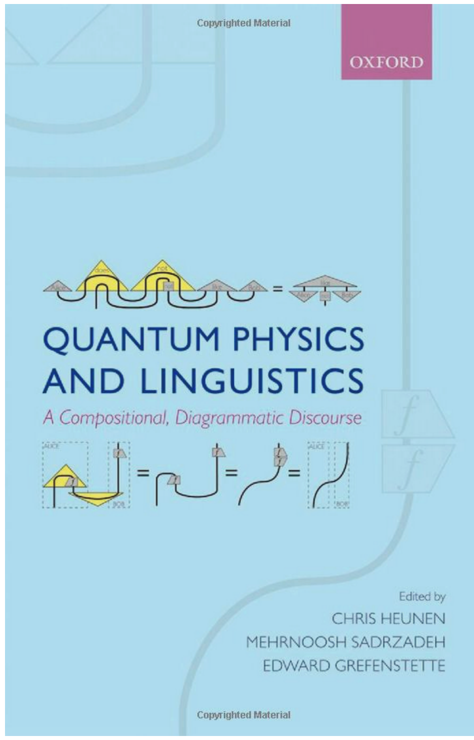
我们的目的不是探讨如何计算词汇的 distributive representation，而是假设在原始概念的层次上，这份工作已经做好，不管是用 Word2Vec 或其他的方法。

我们要处理的问题是：由**词语**过渡到**句子**，进而从事**推理**和**学习**。

表达句子的方法：

- 最简单可以只是 3 个元素构成的 $a\,R\,b$。
- Smolensky 提出的 tensor 方法，可以表达任何树状结构。

- 最新的研究方向，人们发现句子的结构和抽象代数的结构是一样的，所以注意力转移到抽象的範畴的研究，例如这本书：



其中最一般的範畴是 monoidal categories，或者叫 tensor categories。在向量空间里的 tensor product 是这个範畴中的一个例子。换句话说，我们基本上是用 tensor product 来表达句子；範畴论只是将这一点说得更一般化和抽象化而已。

1 命题空间的 dimension

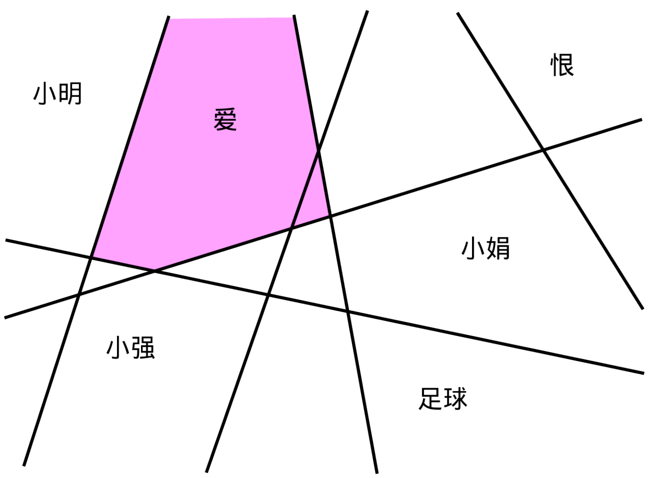
在知识空间中，如果 v_1, v_2, v_3 是三个互不相关的命题，那么它们的线性相关 $a_1 v_1 + a_2 v_2 = a_3 v_3$ 是不容许的，否则会出现谬误。结论是：要么知识空间的 dimension 等於命题的总数（那会很大，可能无限大），要么放弃 a_i 是真假值的做法。

人的词汇 (vocabulary) 的个数大约在 3,000 至 10,000's 之间。暂时假设我们可以用 dimensionality reduction 把原始概念的个数缩小到 3000，那么概念空间 C 的维数就是 3000。

> 如果只考虑像 $a\,R\,b$ 那样的关系，则命题空间是 $C \times C \times C$，维数是 $3000 \times 3 = 9K$。但如果是 $C \otimes C \otimes C$ 则维数是 $3000^3 = 9G$。现时的电脑记忆（例如 GPU）似乎可以处理后者。

2 Distributive representation (分布式表示法)

如果每个概念是向量空间中的一个独立分量，似乎很浪费空间。在神经网络中通常用**分布式**的表示法：



一粒神经元的公式是：$y = (w^T x \leq b)$

（但如果只有一层神经元）那非线性函数可以不理（它不影响 decision boundary）。

$(w^T x \leq b)$ 表示一个 hyperplane 的切割。

一个概念就是一组 hyperplanes 切割而成的多面体 (polyhedron)，

$c : (Wx \le B)$。

矩阵 W 对应於一层神经网络中的 weights。

问题：在这个表示法中，「线性无关」代表什么？

3 「连续性」

第二个问题是「连续」指的是什么。例如命题 $P_1 =$「小明爱小娟」，$P_2 =$「小强爱踢足球」，那么由 P_1 变化到 P_2 必然会有 discrete jump，那是无可置疑的。除非我们重新定义命题是像 $k_1 P_1 + k_2 P_2$ 那样的东西，才可以有「连续变化」；这一点需要再加以精确化。

我发觉「连续空间」不是一个严谨的术语，因为在 discrete 空间中也可以定义"continuous" 这概念，例如在 computer science 的 functional programming 里有 domain theory、denotational semantics 等，常常谈到离散空间中的连续函数。而且「可微分」的概念也有一些 generalizations，例如 Fréchet derivatives（在泛函空间中）。

有个方法可以表示我想说的「连续空间」的性质：在两点 $x \neq y$ 之间，总可以找到第三点 z，位置介乎 x 与 y 之间，换句话说：

$$d(x, z) < d(x, y) \wedge d(y, z) < d(x, y).$$

似乎 Hausdoff 性质就是我想说的「连续空间」的性质：A Hausdorff space is a topological space in which distinct points have disjoint neighbourhoods.

4 近似

那些算子或许可以合写成一个:

$$T_1 v + T_2 v + ... + T_n v = \mathcal{T} v$$

然后合写后用 function approximation 来近似。

但这种近似必须有代价，否则违反了两项原则：

1. Turing 已经很有远见地意识到，逻辑推导的普适算法是不存在的，因为它违反了停机原理 (halting problem)。后者是用 Cantor 的集合论中的 diagonal argument 证明的。如果我们的优化算法必然会给出答案，而答案又可以转换回逻辑，那是不可能的。所以在近似过程中必然会有某些误差。

2. 如果 $P \neq NP$，我们的算法也不可能总是在 polynomial time 之内回覆正确答案。

5 "Second-order"

还有一个"second-order" 的想法。在 first-order 我们的算子是这个形式：

$$T : V \to V$$

但 second-order 的做法是将所有**物体**都看成是算子，算子可以作用在算子之上，这似乎是一种 duality。

如果我们简单地将 $\mathcal{T}$ 近似，那些逻辑推导就会有错误。或者应用某个 duality 或二次形式后，近似的做法会有较好结果？

从另一个角度看，详细一点分析那**推导**和**学习**的过程。推导的过程是：

$$K_0 \xrightarrow{R} K_1 \xrightarrow{R} \cdots\cdots \xrightarrow{R} K_\infty$$

可以将它简写，并加上反向的 L map：

$$\begin{array}{c} \qquad L \\ K_0 \xrightarrow[\infty]{R} K_\infty \end{array}$$

L 是由结论 K_∞ 到法则 R 的映射，可以叫 L 做 learning map。这个 map 比较复杂，它相当於学习的过程，通常要用 iteration 逼近。而且，有无限多个 R

可以符合条件，我们通常选取长度短的 R，这是 minimum description length 原理，又或者选取资讯**压缩比**最高者。

上面的 map 可以再简化，因为 K_0 是常项，可以省略。写成垂直形式：

$$\begin{tikzcd} K_\infty \arrow[d, shift left, "L"] \\ R \arrow[u, shift left] \end{tikzcd}$$

现在如果我们改变推导的结果 K^*，亦即改变 K_∞，那么 R 亦要改变成 R'，但 L 未必要改变。学习这个 L 是一种**二次形式**的学习。

$$\begin{tikzcd} K_\infty \arrow[r] \arrow[d, shift left, "L"] & K'_\infty \arrow[d, shift left, "L"] \\ R \arrow[u, shift left] \arrow[r] & R' \arrow[u, shift left] \end{tikzcd}$$

问题是 R 的空间太大... 但 R 是所有有意识的知识... 不想直接近似 R，但如何间接地近似它？

6 Metric 从何而来？

现在概括一下**逻辑系统**是什么。$\mathcal{L} = \{C, P, +, \rightarrow, d(\cdot,\cdot), \subseteq\}$ 包含以下元素：

1. 原子概念集 $C \ni c_1, c_2, ...$
2. 命题集 $P \ni p_1, p_2, ...$ （可以限制在简单关系 $a\,R\,b$）
3. 连结词 (conjunction) $p_1 \wedge p_2$ 或 $p_1 + p_2$
4. 箭头 $p_1 + p_2 + ... \rightarrow p_0$
5. 概念之间的距离 $d(c_1, c_2)$

6. 概念之间的偏序 (partial order) $c_1 \subseteq c_2$

但其实 $d(\cdot,\cdot)$ 和 $\subseteq$ 并不是逻辑**内在**的，它们是从资料中 induce 出来的。其原理是基於 Liebniz extensionality：

$$f = g \quad \Leftrightarrow \quad \forall x.\ f(x) = g(x).$$

它原本是描述两个函数的相等，但我们可以将它普及到任何概念的乘积：

$$c_1 \approx c_2 \quad \Leftrightarrow \quad \forall_{\#} P, P'.\ P[c_1], P'[c_2].$$

这是说：概念 c_1 和 c_2 相似，如果它们经常出现在相似的命题之中。$\forall_{\#}$ 是 probabilistic quantification，它计算所有命题中相似者的比例。$d(\cdot,\cdot)$ 是 $\approx$ 的量度。

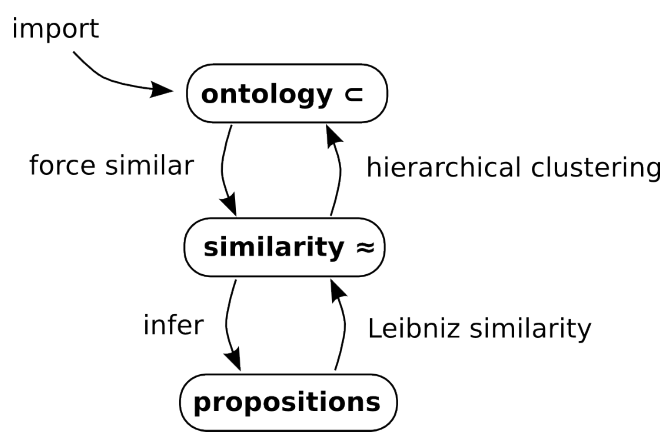
有了 $\approx$ 关系，可以用 hierarchical clustering 建立 $\subseteq$ 关系（注意这里的 $\subseteq$ 包含我们平时所说的 $\subseteq$ 和 $\in$ 关系）。

其实 $\subseteq$ 和 $\approx$ 基本上是**等价**的。例如，学习过程中我们观察到猫和狗有相似的句子：

$$\forall_{\#} P : P[\text{猫}], P[\text{狗}]$$

於是我们可以归纳出「猫 $\approx$ 狗」，但我们也可以新增一个类别：「动物 $\supseteq$ 猫，狗」。换句话说，我们说某些物体**相似**，也可以说它们是**同类**。

$\approx$ 和 $\subseteq$ 之间的关系是：



我们想把这个结构映射到 Banach 空间。

虽然这个 metric 很难计算，但它可能是我们的学习问题里唯一比较合理的结构，除了用它之外可能没有其他选择。

这个 metric 其实不是良好定义的，因为它可能不会 converge。举例来说，Reimann hypothesis 原来和质数的分布有关，但这关系在 1859 年以前人们还不知道。在逻辑上我们可以推导出很深的关系，这似乎是永无止境的。但如果我们假设可以得到近似的 metric，这个 heuristic 也许还不错。

7 Neural Tensor Network

Andrew Ng 是香港人，Coursera 的 machine learning 教授，他在 Stanford，最近加入了百度。他和合作者提出了 NTN 模型 [5]：

$$\top(a\,R\,b) = u^T \, (a^T\,U\,b + W \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + c)$$

$\top(a\,R\,b)$ 表示 $a\,R\,b$ 这个关系的**强度**。
U 是一个 tensor，取两个向量 a, b 给出第三个向量 $a^T\,U\,b$（它服从张量的双线性性质）。
W 是一个矩阵，$W\binom{a}{b}$ 是一层传统的神经网络， 是一个非线性函数。
u^T 是一粒神经元，作用是把各个分量加起来，得出一个数。

8 Paul Smolensky's tensor representation

Paul Smolensky 的书是《The harmonic mind》(2006) [4]，第一卷是 AI 理论，第二卷是语言学理论。

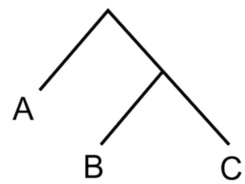
他提出用张量来表示关系，一般而论：

$$\begin{aligned} father(john, pete) &\quad\Leftrightarrow\quad father \otimes john \otimes pete \\ Var_1 : val_1, Var_2 : val_2 &\quad\Leftrightarrow\quad Var_1 \otimes val_1 + Var_2 \otimes val_2 \end{aligned}$$

第二句的意思是，$variable_1$ 的值是 $value_1$，$variable_2$ 的值是 $value_2$。

他引入了 “role” 和 “filler” 的概念：$variable_i$ 是 role，$value_i$ 是 filler。用这个方法来做 variable binding，好处是可以避免 $A \cdot B = B \cdot A$ 的问题。

举例来说，在自然语言中可以有这个句子结构：

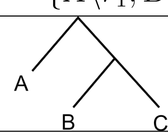
$s =$ 

r_0 和 r_1 分别是树的左右孩子的 roles。用张量积表示：

$$
\begin{aligned}
s &= A \otimes r_0 + q \otimes r_1 \\
q &= B \otimes r_0 + C \otimes r_1 \\
\therefore\ s &= A \otimes r_0 + B \otimes r_0 \otimes r_1 + C \otimes r_1 \otimes r_1
\end{aligned}
$$

张量积的好处是，r_0 和 $r_0 \otimes r_1$ 是不同的元素，它们彼此不会「相撞」。坏处是当乘积的长度增加时，dimension 也增加得很快。

下表是 Smolensky 表示法的总结：

	Example	Vector representation
Set element	$\{c_1, c_2\}$	$c_1 + c_2$
Filler-role binding	$AB = \{A\backslash r_1, B\backslash r_2\}$	$A \otimes r_0 + B \otimes r_1$
Recursive structure		$A \otimes r_0 + [BC] \otimes r_1$

我在博客[1]上解释过，tensor 是所有 bi-linear forms 的 universal form。如果有向量空间 U 和 V，

$$
\begin{aligned}
T :&\quad U \otimes V \to W \\
t :&\quad u \otimes v \mapsto w
\end{aligned}
$$

[1]blog post

那么在 U, V 中线性无关的 $\{u_1, ..., u_m\}$ 和 $\{v_1, ..., v_n\}$，它们的乘积 $\{u_i \otimes v_i\}$ 在 W 中仍然是线性无关的。这是 tensor product 的一个 defining property，换句话说：

$$\text{线性无关集} \otimes \text{线性无关集} \mapsto \text{线性无关集}$$

而这正是我们需要的，因为根据「scalar = 逻辑命题真假值」的诠释，这正是命题之间不「相撞」的条件。

Antony Browne & Ron Sun 的较早的论文《Connectionist inference models, 2001》[1] 有讲述更多 neural-symbolic integration 的做法。

9 Coecke-Sadrzadeh-Clark representation

这是 Coecke, Sadrzadeh, Clark (2010) [2] 提出的表示法。

它首先是基於 categorial grammar（类型语法），那是一种有「左右除法」的文法，例如在 *"John likes Mary"* 这句子中，*"likes"* 的类型是：

$$likes := (S \backslash NP)/NP$$

意思是当 *"likes"* 这个字，在左边乘一个 noun phrase，右边乘另一个 noun phrase，之后便可得到一个句子 S。这种文法由 Lambek 1958 年开创。

换成 tensor product，*"likes"* 表示成一支 vector：

$$\overrightarrow{likes} \in N \otimes S \otimes N$$

这是很合理的，因为这个 tensor product space，它的元素就是那些 multi-linear functions：

$$f : N \times N \to S.$$

10 Metric embedding

最近有一本新书：[Mikhail Ostrovskii 2013] *Metric embeddings: bi-Lipschitz and coarse embeddings into Banach spaces* [3]，它似乎正正讲述了我们将 logic 嵌入到「连续空间」的问题。

What is the bi-Lipschitz condition? A map $f : X \to Y$ is called a *C-bi-Lipschitz embedding* if there exists $r > 0$ such that

$$\forall u, v \in X, \;\; r\, d_X(u, v) \leq d_Y(f(u), f(v)) \leq rC\, d_X(u, v)$$

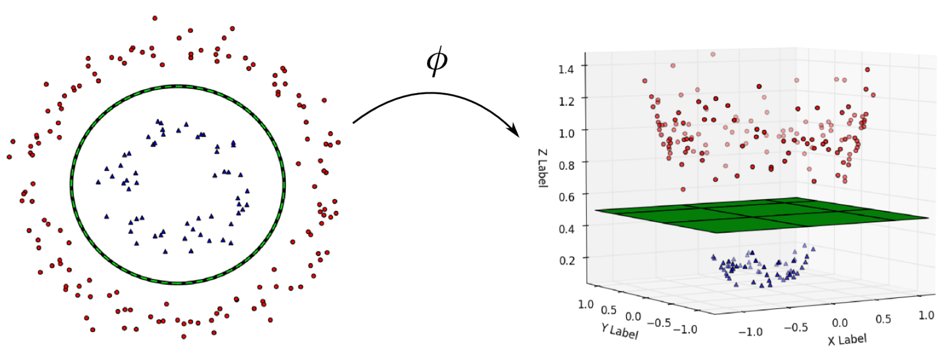
for some $C < \infty$. The smallest constant C for which there exists $r > 0$ such that the above is satisfied is called the *distortion* of the map f. 这似乎定义了「远的保持远、近的保持近」的意思。

11 SVMs and the kernel trick

印象中 **SVM** (support vector machine) 似乎可以将非凸的问题转化成凸优化的问题；可不可以将这个想法应用到我们的问题上呢？

SVM 的算法，首先用 kernel trick 将 data points 转换到高维空间，然后在高维空间中进行线性的 hyperplane 分割。

所谓 **kernel trick** 是指：给定一个 inner product，它暗含了一个到高维空间的转换 ϕ （但这个转换不需要真的计出来）。



而，在高维空间中用线性分割，那 error term 是一些正交距离，所以是 **quadratic form**，所以这问题是**凸优化**。

我们的问题是性质不同的，但两者似乎有些相似...

Acknowledgments

最近在香港认识了两个朋友，Dr 陈启良 (CUHK) 和 Dr 譚志斌 (HSMC)，和他们谈过我的 AI 理论之后获益良多。

References

[1] Browne and Sun. Connectionist inference models. *Neural networks 14*, 2001.

[2] Coecke, Sadrzadeh, and Clark. Mathematical foundations for distributed compostional model of meaning. *Linguistic Analysis 36, 345-384*, 2010.

[3] Ostrovskii. *Metric embeddings: bi-Lipschitz and coarse embeddings into Banach spaces*. De Gruyter, 2013.

[4] Smolensky and Legendre. *The harmonic mind, vol 1: cognitive architecture*. MIT Press, 2006.

[5] Socher, Chen, Manning, and Ng. Reasoning with neural tensor networks for knowledge base completion. *NIPS*, 2013.