神经网络中直接注入知识

甄景贤 (King-Yin Yan)

General.Intelligence@Gmail.com

September 4, 2017

Abstract. 在人工智能历史上，迄今为止仍未有一个快速的学习算法，可以同时「像教孩子那样」直接注入知识。经典逻辑 AI 可以直接写入知识，但其学习算法太慢。深度神经网络的学习算法很快，但它是「黑盒」。本文提出一个解决方案：让神经网络直接作用在它自身的 weights 上。

0 Introduction

智能系统需要有能力读 / 写它内部的知识。例如说，一个比较蠢的智能系统可以用 sequence-to-sequence 的方式将中文翻译成英文：

$$\text{“}\boxed{\text{中文句子}}\text{”} \xrightarrow{\boldsymbol{F}} \text{“}\boxed{\text{英文句子}}\text{”} \tag{1}$$

$\boldsymbol{F}$ 代表系统的函数。但系统并不真的明白句子的意义，句子只是「水过鸭背」地流过系统。一个更聪明的系统是：句子可以**进入**到 $\boldsymbol{F}$ 里。

1 Applications

DKI (direct knowledge injection) is useful in:

- learning by instructions, or “learn by being told”
  (a technique crucial to accelearating the learning of human knowledge)
- belief revision / truth maintenance
  (the most challenging and highest-level task in logic-based AI)

举例来说，小孩子的行为是由他内部的知识决定的，「知识决定行为」。

- 当小孩子看到一个成人做的动作，他会模仿那动作。

(2)

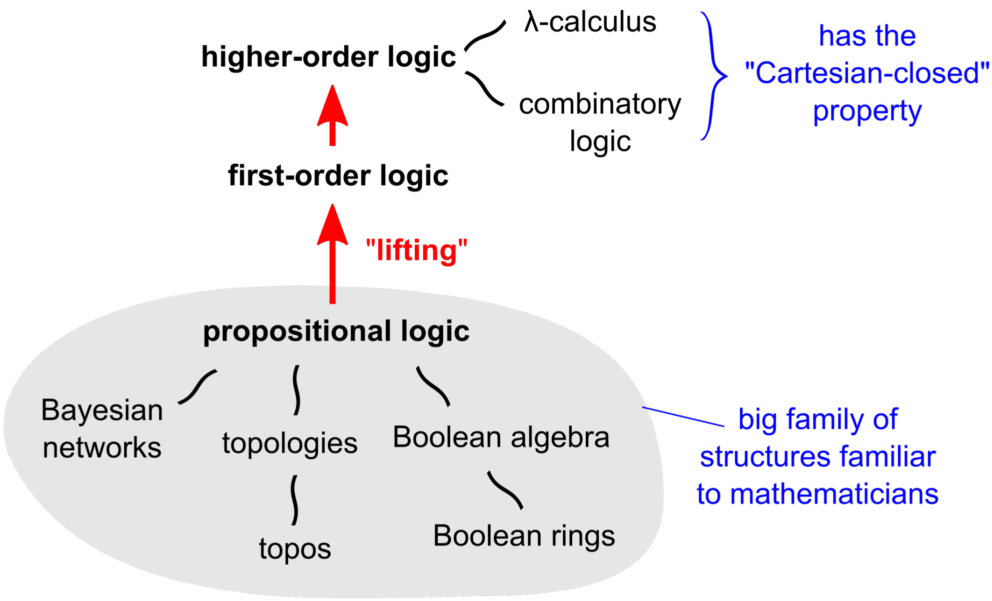
- 或者小孩子听到一句说话：「不要吃污糟食物」，他明白了那句说话的意思而改变行为。
- 或者「今天高考放榜了，这本教科书可以丢进垃圾桶」，这句话应该由 working memory $\boldsymbol{x}$ 进入到 KB 里面，影响日后的行为（eg，以后不会再见到那本书）。

这些例子都涉及到将「感觉资料」放进 $\boldsymbol{F}$ 里面：

$$\boxed{\text{sensory data}} \hookrightarrow \boldsymbol{F} \tag{3}$$

2 Cartesian closure

在数理逻辑中，**命题逻辑**和**一阶逻辑**、**高阶逻辑**之间存在一个 gap。一般来说，数学家比较熟悉命题逻辑，因为它等价於很多在传统数学中常见的结构例如 Boolean algebra 等。在**拓樸**中，$\cup$ 和 $\cap$ 对应於 $\vee$ 和 $\wedge$，所以拓扑也可以看成是逻辑的一种形式。另外，我们熟悉的 **Bayesian network** 也是命题逻辑的扩充，亦即在命题上附加了 **概率**。然而，一阶逻辑的结构比较麻烦，在数学上是较偏门的课题。用计算机科学的术语，将命题逻辑的技巧转移到一阶逻辑，这动作叫 “lifting”，於是会产生例如 first-order Bayesian network 这类较复杂的东西，而高阶逻辑则更复杂。注意：命题逻辑的复杂性是 NP-complete 的范围，但高阶逻辑的复杂性是 undecidable 的，因为高阶逻辑可以做 Turing machine 的所有工作，而 halting problem 是 undecidable 的。



(4)

在人工智能中，我们必须用到一阶逻辑或以上，因此 lifting 是一个很头痛的问题。高阶逻辑的 “power” 似乎来自於一个特性，即 Cartesian-closure，它是高阶逻辑的本质。

Cartesian-closed 是指在某个範畴内，对任意的 A, B，都必然可以找到它们的：

$$\boxed{\text{product}}\ A \times B \quad 和 \quad B^A\ \boxed{\text{exponentiation}} \tag{5}$$

在逻辑中这对应於：

$$A \wedge B \quad 和 \quad A \rightarrow B \tag{6}$$

DKI requires the functional closure $\mathbb{X} \simeq \mathbb{X}^{\mathbb{X}}$ which yields a **Cartesian-closed category** (CCC).

举例来说，「吃了污糟的食物会肚痛」是一个句子，它经由 👁 进入 mental state $\boldsymbol{x}$ ，变成 proposition。但我们希望这逻辑命题变成 KB 的一部分。$\boldsymbol{F}$ is the state-transition function:

$$\boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n) \tag{7}$$

where

$\boldsymbol{F}$ = KB =

$\boldsymbol{x}$ = state

An individual logic rule is a restriction of $\boldsymbol{F}$ to a specific input; Perhaps I could call such elements "micro-functions".

$\boldsymbol{F} \equiv$ KB is the "union" of micro-functions:

$$\text{KB} = \biguplus \boldsymbol{f}_i \tag{8}$$

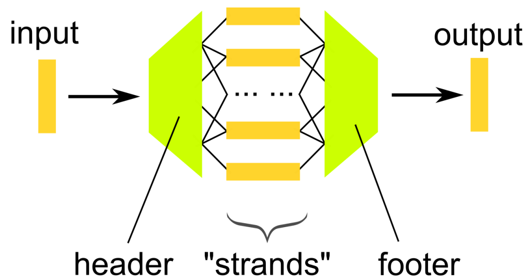
At this point the meaning of $\biguplus$ is unspecified yet. $\boldsymbol{F}$ is the sum total of objects like $\boldsymbol{x}$:

$$\boldsymbol{F} = \biguplus \boldsymbol{x}_i \tag{9}$$

但 $\boldsymbol{F}$ 是一个神经网络，它的一般形式是：

$$\boxed{\text{output}}\ \boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n) = \overset{1}{W}\ \overset{2}{W}\ \ldots..\ \overset{L}{W}\ \boldsymbol{x}_n \tag{10}$$

L = total number of layers. 由於各层的非线性「纠缠在一起」，表面上无法将神经网络「分解」。直到笔者受了 David Ha *et al* 提出的 PathNet [1] 理论所启发，PathNet 是由一些较小的神经网络 modules 组成，所以或许可以建构如下形式的「丝状神经网络」：



(11)

这些「丝条 」可以是简单的神经网络，例如每个的宽度或深度很小，因而可以用较短的 weights vector 描述。正是因为这原因，一个 本身可以作为神经网络的输入。但整个神经网络 $\boldsymbol{F}$ 无法输入自己，因为根据 Cantor's theorem，$\mathbb{X} = \mathbb{X}^{\mathbb{X}}$ 是不可能的。

Let $\overline{\boldsymbol{F}} =$ header, $\underline{\boldsymbol{F}} =$ footer, $\boldsymbol{f}_i =$ strands, then (abusing the $\biguplus$ notation):

$$\boldsymbol{F} = \overline{\boldsymbol{F}} \circ \biguplus \boldsymbol{f}_i \circ \underline{\boldsymbol{F}} \tag{12}$$

每个 大约对应於逻辑上的一个**命题**（proposition, 可以是条件命题或普通命题）。

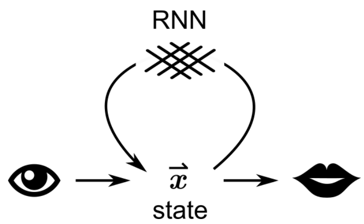
读者或许会质疑，这个「条状」结构为什么一定要设计成这样？其实我也觉得这个设计不够 elegant，甚至不太肯定它会不会 work。在 §4 - §5.2 我们会介绍一个数学上更优美的做法。

3 Overall architecture

For reference, the architecture for **visual recognition** is:


(13)

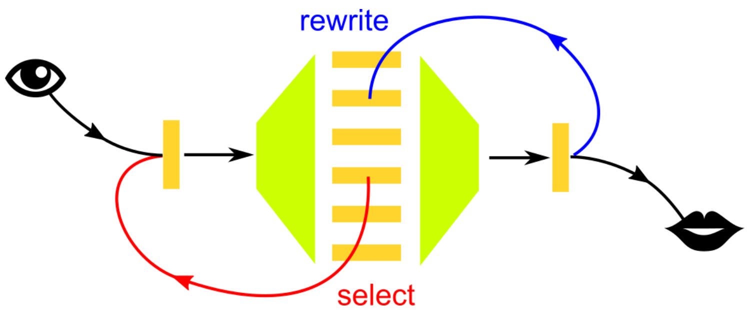
Our basic AGI architecture is:



(14)

= [deep] neural network, trained via **reinforcement learning**

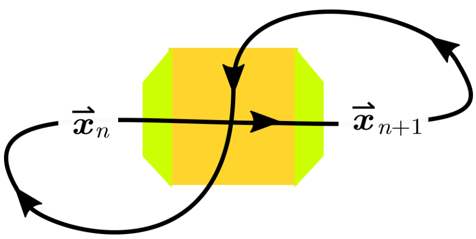
The overall **recurrent** setup operates like this:



(15)

注意： 的原始输入不可以直接写入 ，因为 会变成 = weights，而直接写 weights 的后果当然是灾难性的。换句话说， 的结构是要用 emergent（涌现）的方法 learn 出来，不能被外界的输入干扰。 和 的输入 / 输出要透过某些神经网络的 mapping 间接地做。

Viewing the "information flow" in a simplified way, we notice a "second" pass through the network's internal weights:



(16)

这种操作上的结构在经典逻辑 AI 是「免费赠品」，但似乎还未有人提出过神经网络的做法。

对应於经典逻辑 AI：

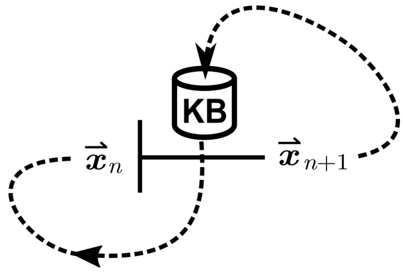
(17)

- The **horizontal pass** represents using the KB for logical inference (thinking), ie:

$$\boldsymbol{x}_n \cup \text{KB} \vdash \boldsymbol{x}_{n+1} \tag{18}$$

- The **vertical pass** represents reading/writing information to/from KB:
  - **Update:** $\boldsymbol{x}$ 是 KB 的一部分，所以 $\boldsymbol{x}_{n+1}$ 改变了，KB 也要 update。
  - **Read:** $\boldsymbol{x}$ = working memory 会因为 **注意力** (attention) 而改变，所以 $\boldsymbol{x}_{n+1}$ 并不直接进入下一轮的 iteration，而是先经过 KB 的 **attentional change**。

In logic-based AI this workflow has always been standard (but not made explicit):



(19)

4 What is required of $\boldsymbol{F}$?

We now try to explain the meaning of

$$\boldsymbol{F} = \biguplus \boldsymbol{x}_i \tag{20}$$

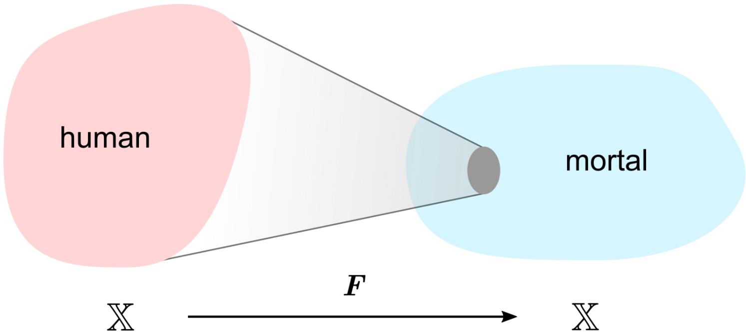
Our goal is to organize the ’s into a deep network. What are the most general *desiderata* for such a function $\boldsymbol{F}$?

1. $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ is a function of $\boldsymbol{x}$ parametrized by $\boldsymbol{\theta}$.
2. the parameters $\boldsymbol{\theta}$ is organized hierarchically with the “deep” property,
   ie, high-level $\boldsymbol{\theta}_i$’s have higher “degree”.
3. $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ is capable of universal function approximation.
4. $\boldsymbol{x}$ can be put into $\boldsymbol{\theta}$, ie, $\boldsymbol{\theta}$ is a collection of $\boldsymbol{x}$’s.
5. $\boldsymbol{F}$ encodes **logical consequence**.

The last condition (F5) is hardest to satisfy, but there is an informal argument that may justify it. For example, suppose:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{x} = \text{“\textit{all men are mortal}”} && \text{is put into } \boldsymbol{F} = \text{KB}. \\
&\boldsymbol{x}_0 = \text{“\textit{Socrates is a man}”} && \text{is the new input.} \\
&\text{Then the expected output should be:} \\
&\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_0) = \text{“\textit{Socrates is mortal}”}
\end{aligned} \tag{21}$$

凭什么认为 $\boldsymbol{F}$ 能满足类似上面的要求？可以将一个 conditional proposition 看成是一个 mapping，它将 source domain $\mathbb{X}$ 的某个区域映射到 target domain（也是 $\mathbb{X}$）的某个区域，例如：



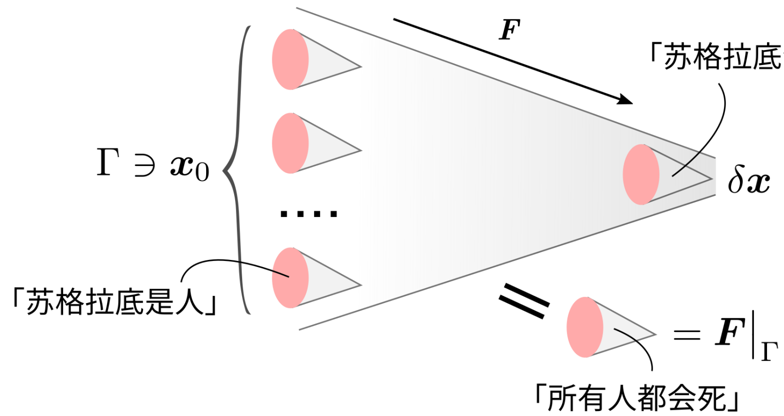
(22)

而我们有信心 $\boldsymbol{F}$ 能够表达这个 mapping 的原因，正如在机器视觉中，类似的 $\boldsymbol{F}$ 里面有些神经元可以辨认「眼、耳、口、鼻」等 features，原理是一样的。换句话说，「X 是人 → X 会死」这句条件命题，其实和负责辨认「眼」这个 feature 的那些神经元，本质上是没有分别的。

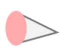
5 Decomposition of $\boldsymbol{F}$

回顾一下：经典 AI 中，KB 装著一堆 logic formulas，我们可以直接写入 / 读出它们。但现在 KB 变成了一个函数 $\boldsymbol{F}$，那些逻辑法则隐藏在 $\boldsymbol{F}$ 这个 mapping 里面，需要某种方法将它「分解」。

换句话说，我们需要的是将 $\boldsymbol{F}$ 分拆成一些小部分，亦即是 $\boldsymbol{F}$ 对於某个输入 $\boldsymbol{x}$（及其邻域）的 **截面** (section, or restriction)。假设获得了这些截面函数之后，我们再需要一个方法，将一个截面「放进」$\boldsymbol{F}$ 里面。



(23)

$\boldsymbol{x_0}$ = current state，它由若干个  = 命题构成。

（要透彻理解上面这幅图，需要熟悉命题逻辑和谓词逻辑的几何化，这在我较早前的论文 [2] 有讲述。那篇论文有些细节需要更新，但基本要点没变。）

$\delta\boldsymbol{x}$ 的意思是指，将当前状态由 $\boldsymbol{x}$ 改写成 $\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}$。换句话说，原本设定的是 $\boldsymbol{F} : \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}'$，但实际上我们 implement 的是 $\boldsymbol{F} : \boldsymbol{x} \mapsto \delta\boldsymbol{x}$。因为逻辑中 $\vdash$ 的特性是它 <u>每次只改变一个（或少数的）命题</u>。这也是一种 restriction，即原本 “free” 的函数空间变成某个 subspace。

经过 update：$\boldsymbol{x}_0' = \boldsymbol{x}_0 + \delta\boldsymbol{x}$ 之后，$\boldsymbol{x}_0'$ 也会「忘记」它里面的一个 / 几个命题，保持 $\boldsymbol{x}$ 的长度不变。

更重要的是：$\boldsymbol{F}$ 的 restriction 也是一个命题。换句话说，图中的大三角形也是一个 。它将 $\boldsymbol{x}_0$ 的**邻域** Γ 映射到 $\delta\boldsymbol{x}$，而 $\boldsymbol{x}_0$ 本身也是由其他 组成的。这 restriction 记作 $\boldsymbol{F}|_\Gamma$。

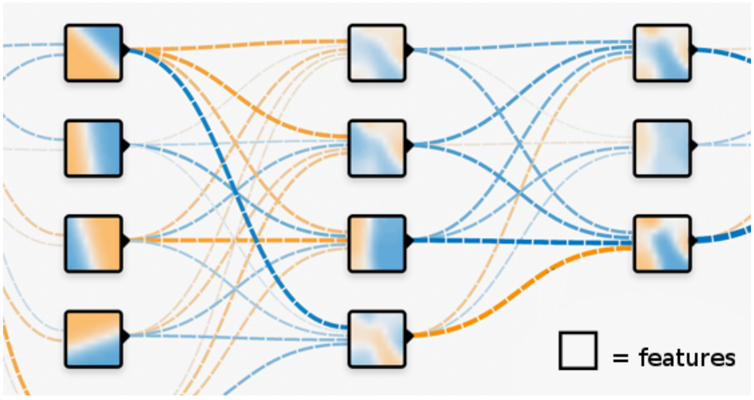
（下一步会将 $\delta\boldsymbol{x}$ 放进 $\boldsymbol{F}$ 里，但 $\delta\boldsymbol{x}$ 这个函数的 source 邻域并不是 Γ。这些细节初读时可以不理。）

5.1 「责任集」(“responsible set”)

但是，当 $\boldsymbol{F}$ 是一个神经网络时，怎样获得「截面」?

$\boldsymbol{F}$ 这个 mapping 是由它的 parameters 决定，亦即 weights。当输入 = 某个 $\boldsymbol{x}_0$ 时，每个 weights 的贡献不同，只有一个 subset of weights「负责」这个截面的输出，我将这个 subset 称作「责任集」(responsible set)。

我的想法是受到 TensorFlow Playground 的这图片启发的：



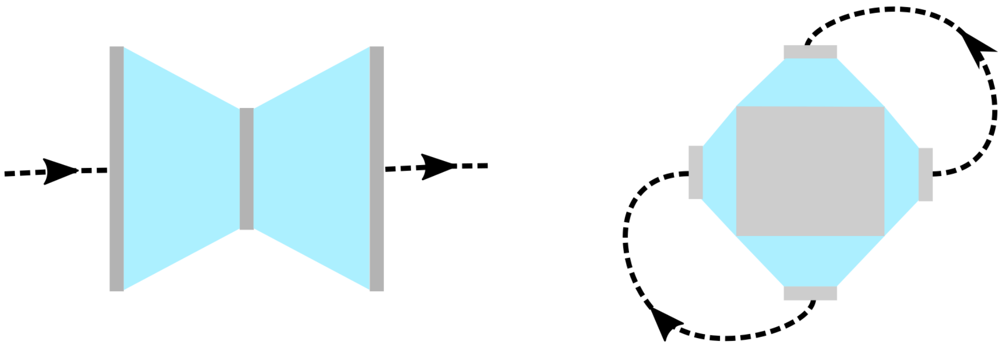
(24)

可以看到 weights 的大小不同，它们对函数 $\boldsymbol{F}$ 在输入 $\boldsymbol{x}_0$ 的贡献也不同。What we need is the set of weights activated by the specific input $\boldsymbol{x}_0$, in other words, they are the set of **outputs** (or “activities”) of all neurons. Let’s denote it as $\boldsymbol{W}(\boldsymbol{x})$.

后来我发现了 [Courbariaux, Bengio, & David 2015] 提出的 “BinaryConnect: training deep neural networks with binary weights” [3]，他们指出，可以将 weights 限制为 $\{-1, 1\}$ 两个值，但 gradients 仍然保持 precision，这种神经网络仍然有 state-of-the-art 的表现。

5.2 Spectral compression

现在问题是怎样压缩那责任集里面的 weights。Joseph Cheng 提议用 auto-encoder，似乎是一个很好的解决办法。左图是典型的 auto-encoder，它的 hidden layer 较小，特徵「被逼」压缩到较小的空间。在我们的 architecture 上加上 auto-encoder，则变成右图的「8 字形 architecture」：



(25)

但有个技术上问题：垂直方向的那个 网络需要连接到中央网络的所有 weights，但这些 weights 数目太多。

Now we need a way to **compress** $\boldsymbol{W}(\boldsymbol{x})$ to prune out the low-contribution (ie, small) weights. The Fourier (or wavelet) transform is a good candidate because it can compress $\boldsymbol{W}(\boldsymbol{x})$ to a fixed-length vector, which can then be used as inputs to the neural network $\boldsymbol{F}$.

The compression (which is a projection, P) is performed via:

$$P\ \boldsymbol{F} = \sum_{i=1}^{N} \langle \boldsymbol{F}, \Psi_i \rangle \Psi_i \tag{26}$$

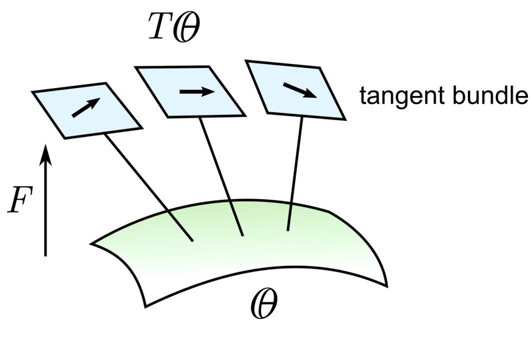
where $\{\Psi_i\}_1^N$ is the basis set.

The Fourier sequence basis set tends to 0: I think the implication is that, for sufficiently smooth functions, the high-frequency contributions of a Fourier sequence would tend to 0. This means that if we chop off the sequence at some number n, we get an approximation, ie, compression. However, this form of compression is weak because the error does not decay fast enough. A better scheme is to choose the first k-largest coefficients; This way, the error decays exponentially. The price we pay is that the compression scheme is no longer **linear**, in the sense that if $\hat{f}$ and $\hat{g}$ approximate 2 signals f and g, then the sum of the signals $(f+g)$ may no longer be approximated by $(\hat{f}+\hat{g})$.

6 几何结构

[此段对熟悉微分几何的人或许有帮助，否则可以略过。]

首先我们有一个很 standard 的 Hamiltonian 力学系统 / 控制系统的结构：



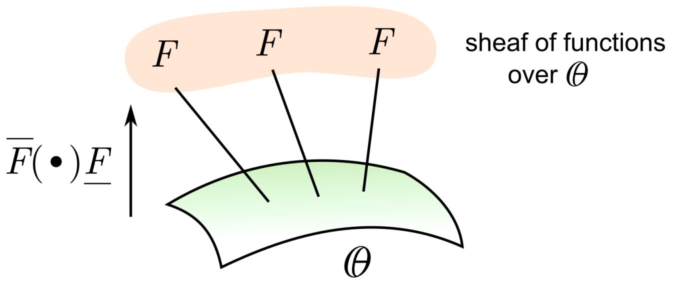
(27)

$\boldsymbol{x}$ = working memory $\subset \boldsymbol{\theta}$，$\boldsymbol{\theta}$ 代表整个 KB 的状态，而 $\boldsymbol{\theta} \in \Theta$，后者是所有可能 KB 的空间。

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \tag{28}$$

是系统的**状态方程**。换句话说，在思维空间 Θ 中的一个点就是思维状态 $\boldsymbol{x} \subset \boldsymbol{\theta} \in \Theta$，而 F 给出的是这个点在**思考**过程中的的「运动速度」$= \dot{\boldsymbol{x}}$。换句话说，$\boldsymbol{F}$ 定义了一个 vector field，它是思维空间中思维的 “flow”，或者可以叫作「理性流」。每个点的速度属於流形 Θ 上的 tangent space，他们的总和就是 tangent bundle。而 tangent bundle + base manifold（亦即「位置 & 动量」）构成系统的「相空间」(phase space)。

另外，特别地，有这个 sheaf of functions 的结构：



(29)

换句话说，给定 $\boldsymbol{x} \in \mathit{\Theta}$ ，我们可以透过

$$\boldsymbol{F} = \overline{\boldsymbol{F}} \circ (\boldsymbol{x} \subset \boldsymbol{\theta}) \circ \underline{\boldsymbol{F}} \tag{30}$$

得出 $\boldsymbol{F}$，而这个 $\boldsymbol{F}$ 再给出对应於这点的 $\dot{\boldsymbol{x}}$。

注意 (27) 和 (29) 是两个不同的结构，只是它们的 base manifold 相同。

特别之处在於 $\boldsymbol{F}$ 是由参数 $\boldsymbol{x} \subset \boldsymbol{\theta} \in \mathit{\Theta}$ 确定的（因为 $\boldsymbol{x}$ 是 $\boldsymbol{\theta} =$ KB 的一部分，而所有可能的 KB 属於思维空间 $\mathit{\Theta}$ ），换句话说：

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \equiv \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) \equiv \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}) \tag{31}$$

这和经典控制并没有抵触，因为经典理论中，$\boldsymbol{F}$ 也是位置 $\boldsymbol{x}$ 的函数。更确切地说，位置空间其实是由 $\boldsymbol{\theta} \in \mathit{\Theta}$ 决定的，$\boldsymbol{x}$ 只是 $\boldsymbol{\theta}$ 的一部分。

In general, the differential version seems to be a bad idea, as the increments of $\boldsymbol{x}$ is small, and the KB may be overwhelmed by recent memories of $\boldsymbol{x}$, which is a wasteful usage of weights.

7 Conclusion

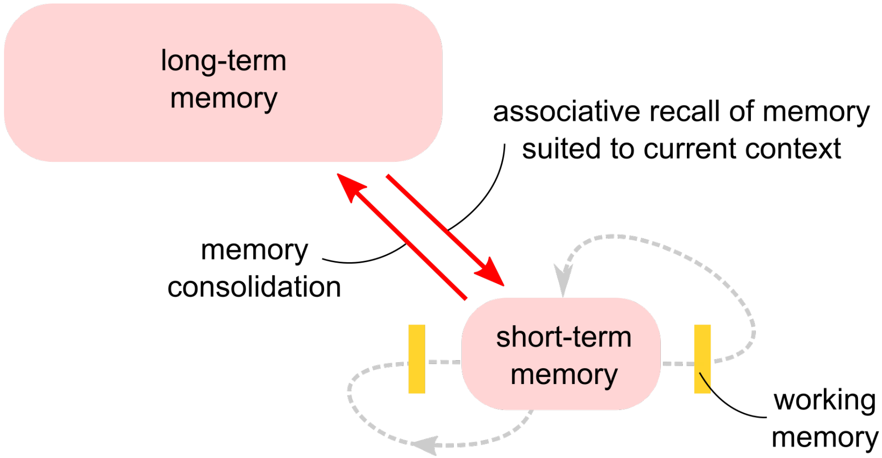
其实我自己也怀疑，这个 architecture 是否太复杂了，究竟值不值得做？而暂时我只能说，它符合了两项非常难达到的要求：

- KB is represented as a neural network (that admits a fast learning algorithm);
- Symbolic knowledge can be directly **injected** into KB.

8 Future direction

There may exist some variations and improvements under this general architecture.

Another problem is the design of the **memory system**, in particular **episodic memory**. This is the general idea, but details are still undecided:



(32)

Acknowledgements

Thanks to David Ha and his co-authors for their PathNet idea.

Bibliography

[1] Chrisantha Fernando, Dylan Banarse, Charles Blundell, Yori Zwols, David Ha, Andrei A. Rusu, Alexander Pritzel, and Daan Wierstra. Pathnet: Evolution channels gradient descent in super neural networks. *CoRR*, abs/1701.08734, 2017. URL `http://arxiv.org/abs/1701.08734`.

[2] King Yin Yan. A bridge between logic and neural. (to be submitted AGI-2017).

[3] Matthieu Courbariaux, Yoshua Bengio, and Jean-Pierre David. Binaryconnect: Training deep neural networks with binary weights during propagations. *CoRR*, abs/1511.00363, 2015. URL `http://arxiv.org/abs/1511.00363`.