Towards a Categorical Foundation of Deep Learning: A Survey

Una rassegna di approcci categorici al *deep learning*

Francesco Riccardo Crescenzi

Relatore: Fabio Zanasi

23 settembre 2024

Alma mater studiorum - Università di Bologna

CdL in Matematica

We are in an AI summer, but is winter coming?

Problemi con il deep learning

Mancano fondamenta teoriche:

- **design ad hoc** (Gavranović, 2024)

Problemi con il deep learning

Mancano fondamenta teoriche:

- **design ad hoc** (Gavranović, 2024)
- **complessità fine a se stessa** (Rahimi, 2017)

Problemi con il deep learning

Mancano fondamenta teoriche:

- **design ad hoc** (Gavranović, 2024)
- **complessità fine a se stessa** (Rahimi, 2017)
- **fragilità** (Gavranović, 2024)

Problemi con il deep learning

La ricerca viene rallentata da:

- **research debt** (Olah e Carter, 2017)

Problemi con il deep learning

La ricerca viene rallentata da:

- **research debt** (Olah e Carter, 2017)
- **mancata replicabilità** (Raff, 2019)

Teoria delle categorie:

una lingua franca della matematica e delle scienze

Teoria delle categorie applicata

La teoria delle categorie studia strutture e relazioni, e può essere vista come un'estensione del celebre *Erlangen Programme*.

La teoria delle categorie può essere applicata con successo anche in fisica, informatica, chimica... ovunque ci sia **composizionalità** (Fong e Spivak, 2018).

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)
- **functor learning** (Gavranović, 2019, Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)
- **functor learning** (Gavranović, 2019, Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024)
- **compositional distributional model of meaning** (Clark e Pulman, 2007, Coecke et al., 2010, Lewis, 2019)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)
- **functor learning** (Gavranović, 2019, Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024)
- **compositional distributional model of meaning** (Clark e Pulman, 2007, Coecke et al., 2010, Lewis, 2019)
- **neural circuit diagrams** (Abbott, 2023)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)
- **functor learning** (Gavranović, 2019, Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024)
- **compositional distributional model of meaning** (Clark e Pulman, 2007, Coecke et al., 2010, Lewis, 2019)
- **neural circuit diagrams** (Abbott, 2023)
- **string diagrams with universal approximators** (Khatri et al., 2024)

Teoria delle categorie applicata

- **lenti parametriche** (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- **categorical deep learning** (Gavranović et al., 2024)
- **integral transforms** (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)
- **functor learning** (Gavranović, 2019, Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024)
- **compositional distributional model of meaning** (Clark e Pulman, 2007, Coecke et al., 2010, Lewis, 2019)
- **neural circuit diagrams** (Abbott, 2023)
- **string diagrams with universal approximators** (Khatri et al., 2024)

Lenti parametriche

per modellare il gradient-based learning

Gradient-based learning con lenti parametriche

Il gradient-based learning segue tre principi fondamentali:

- **parametricità**

Gradient-based learning con lenti parametriche

Il gradient-based learning segue tre principi fondamentali:

- **parametricità**
- **bidirezionalità**

Gradient-based learning con lenti parametriche

Il gradient-based learning segue tre principi fondamentali:

- **parametricità**
- **bidirezionalità**
- **differenziabilità**

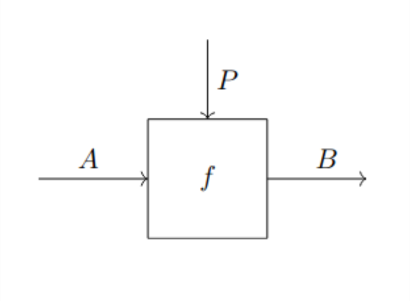
DEFINIZIONE: Il costrutto Para

Sia $(\mathcal{C}, I, \otimes)$ una categoria monoidale strettamente simmetrica. Allora, $\mathbf{Para}_{\otimes}(\mathcal{C})$ è la 2-categoria definita come segue.

- Le 0-celle sono oggetti di $\mathcal{C}$.
- Le 1-cells sono coppie $(P, f) : A \to B$, dove $P : \mathcal{C}$ e $f : P \otimes A \to B$.
- The 2-celle sono $r : (P, f) \Rightarrow (Q, g)$, dove $r : P \to Q$ è un morfismo in $\mathcal{C}$ che rispetta certe condizioni di naturalità.

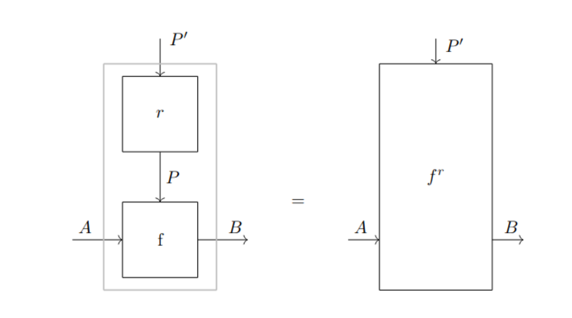
Vedasi Gavranović, 2024.

Gradient-based learning con lenti parametriche



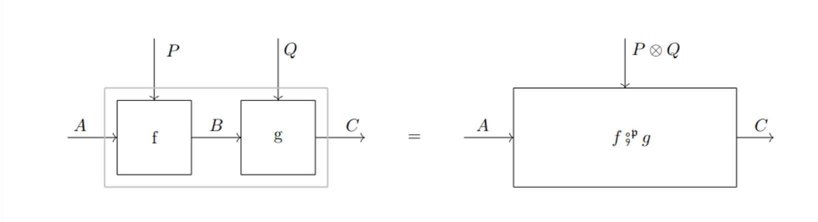
Gavranović, 2024

Gradient-based learning con lenti parametriche



Gavranović, 2024

Gradient-based learning con lenti parametriche



Gavranović, 2024

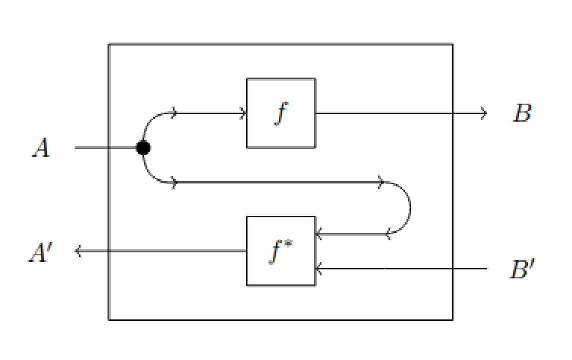
DEFINIZIONE: Il costrutto Lens

Sia $(\mathcal{C}, 1, \times)$ una categoria Cartesiana. Allora, **Lens**$(\mathcal{C})$ è la categoria definita come segue.

- Un oggetto di **Lens**$(\mathcal{C})$ è una coppia $\binom{A}{A'}$ di oggetti di $\mathcal{C}$.
- Un morfismo $\binom{A}{A'} \to \binom{B}{B'}$ (anche chiamato lente) è una coppia $\binom{f}{f'}$ di morfismi di $\mathcal{C}$ tali che $f : A \to B$ and $f' : A \times B' \to A'$. La mappa f è nota come *forward pass* della lente, mentre la mappa f' è nota come *backward pass*.

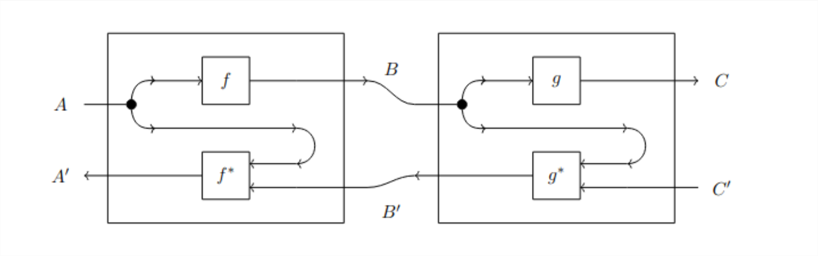
Vedasi Cruttwell et al., 2022.

Gradient-based learning con lenti parametriche



Cruttwell et al., 2022

Gradient-based learning con lenti parametriche



Cruttwell et al., 2022

Gradient-based learning con lenti parametriche

DEFINIZIONE: Cartesian reverse differential category

Una *Cartesian reverse differential category* (CRDC) $\mathcal{C}$ è una categoria Cartesiana con una struttura additiva dove è definito un operatore differenziale R che ha le proprietà di una *reverse derivative*. Si vedano Cockett et al., 2019 e Gavranović, 2024.

ESEMPIO: Smooth

Consideriamo **Smooth**, ovvero la categoria degli spazi Euclidei e delle funzioni liscie. **Smooth** è una CRDC rispetto all'operatore

$$\mathrm{R}[f] : (x, y) \mapsto \mathcal{J}_f(x)^T y.$$

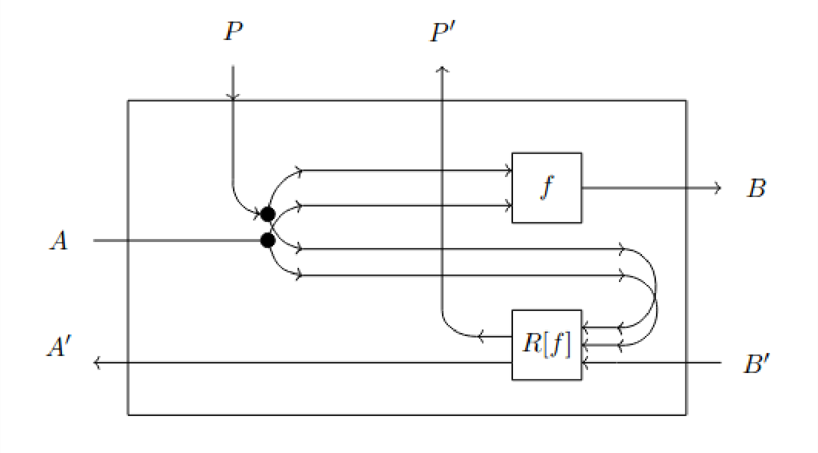
Gradient-based learning con lenti parametriche

TEOREMA: Lenti parametriche con backward pass additivo

Sia $\mathcal{C}$ una CRDC. Consideriamo la sottocategoria $\mathbf{Lens}_A(\mathcal{C})$ di $\mathbf{Lens}(\mathcal{C})$ costuituita da lenti nella forma $\begin{pmatrix} f \\ \mathrm{R}[f] \end{pmatrix}$. È possibile applicare il costrutto **Para** a $\mathbf{Lens}_A(\mathcal{C})$.

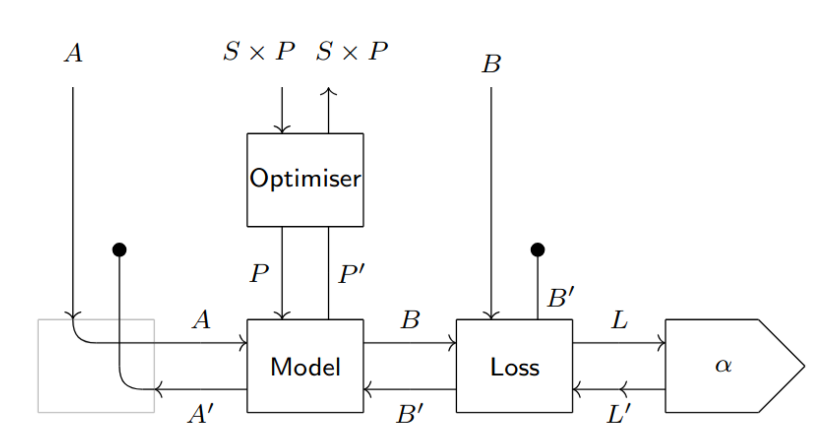
$\mathbf{Para}_{\otimes}(\mathbf{Lens}_A(\mathcal{C}))$ è una categoria di lenti parametriche il cui *backward pass* contiene informazioni necessarie e sufficienti per implementare la *backpropagation*.

Gradient-based learning con lenti parametriche



Cruttwell et al., 2022

Gradient-based learning con lenti parametriche



Cruttwell et al., 2022

Categorical deep learning:

(co)algebre categoriche
come teoria delle architetture

Categorical deep learning

Geometric deep learning

Il *geometric deep learning* è una teoria delle architetture di reti neurali che imita l'*Erlangen Programme*, organizzando le architetture in base al concetto di equivarianza rispetto ad azioni di gruppi (Bronstein et al., 2021).

DEFINIZIONE: Funzione equivariante

Sia G be un gruppo e siano $(S, \cdot)$ e $(T, *)$ azioni di G. Una funzione $f : S \to T$ è equivariante rispetto a tali azioni se

$$f(g \cdot s) = g * f(s),$$

per ogni $s \in \mathcal{S}$ e per ogni $g \in \mathcal{G}$.

ESEMPIO

I *convolutional layers* rappresentano mappe invarianti rispetto a traslazioni.

Categorical deep learning

Il *categorical deep learning* è una teoria delle architetture di reti neurali che generalizza il GDL, organizzando le architetture in base al concetto di omomorfismo di (co)algebre categoriche (Gavranović et al., 2024).

DEFINIZIONE: Algebra su un endofuntore

Sia $F : \mathcal{C} \to \mathcal{C}$ un endofuntore. Un'algebra su F è una coppia (A, a) dove A è un oggetto di $\mathcal{C}$ e $a : F(A) \to A$ è un morfismo in $\mathcal{C}$.

DEFINIZIONE: Omomorfismo di algebre

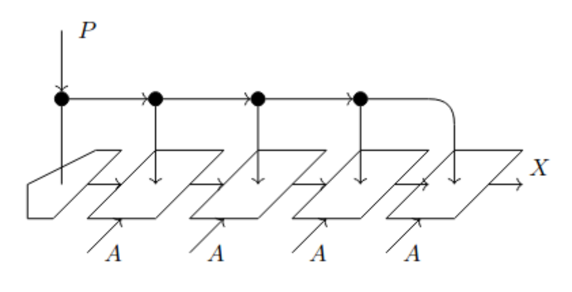
Siano (A, a) e (B, b) algebre sollo stesso endofuntore $F : \mathcal{C} \to \mathcal{C}$. Un omomorfismo di algebre $(A, a) \to (B, b)$ è un morfismo $f : A \to B$ in $\mathcal{C}$ tale che $F(f) \fatsemi b = a \fatsemi f$.

Categorical deep learning

$$
\begin{tikzcd}
T(A) \arrow[r, "T(f)"] \arrow[d, "a"] & T(B) \arrow[d, "b"] \\
A \arrow[r, "f"] & B
\end{tikzcd}
$$

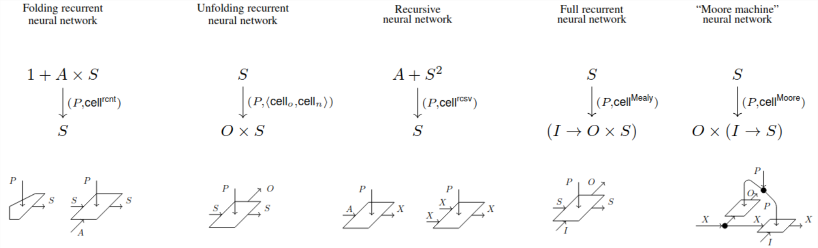
Categorical deep learning

Il *categorical deep learning* getta un ponte tra informatica classica e machine learning identificando architetture neurali come generalizzazioni parametriche di strutture dati note.



Gavranović et al., 2024

Categorical deep learning



Gavranović et al., 2024

Brevi accenni

agli altri approcci trattati nella tesi

Integral transform

$$\begin{tikzcd}
{[X,R]} \arrow[r, "p_\otimes"] & {[Y,R]} \arrow[d, "o_\oplus"] \\
{[W,R]} \arrow[u, "i^*"] & {[Z,R]}
\end{tikzcd}$$

Dudzik e Veličković, 2022

L'*integral transform* è un costrutto categorico che agisce come struttura fondamentale condivisa da GNNs e da algoritmi di programmazione dinamica. Individuare questa struttura comune è utile per aumentare l'*algorithmic alignment* (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024).

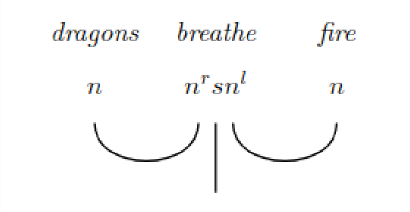
Functor learning

Il *functor learning* è un paradigma di machine learning che consiste nell'apprendere un funtore tra categorie invece che un semplice morfismo tra oggetti.

Apprendere un funtore permette di sfruttare la struttura categorica dei dati per ridurne la complessità e per imporre condizioni di invarianza (Sheshmani e You, 2021, Chytas et al., 2024).

Compositional distributional model

Il *compositional distributional model of natural language* utilizza il concetto di categoria compatta chiusa per unire un modello simbolico della lingua (*pregroup grammar*) a un modello distribuzionale (*word embedding*), ottenendo i vantaggi di entrambi (Clark e Pulman, 2007, Coecke et al., 2010, Lewis, 2019).

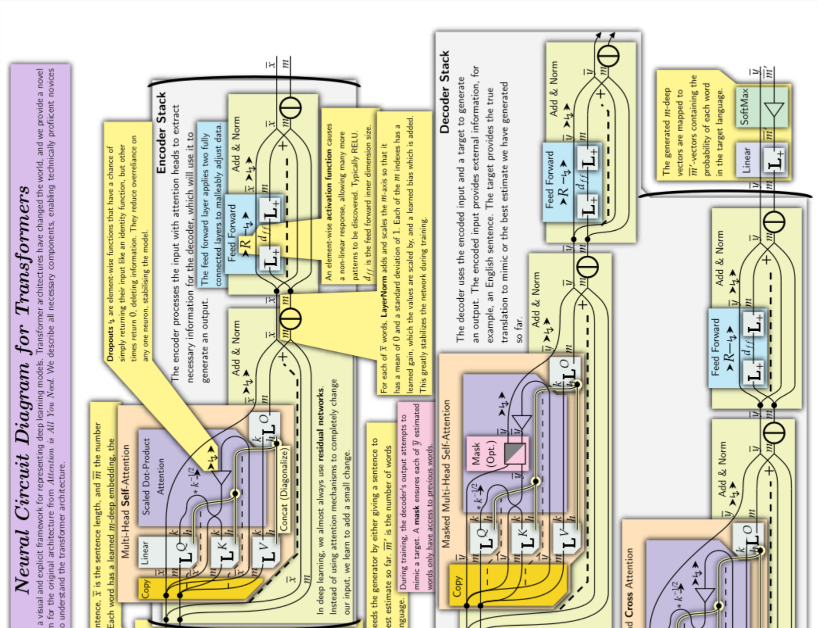


Lewis, 2019

Neural circuit diagrams

I *neural circuit diagrams* sono diagrammi con semantica categorica utili per rappresentare in modo dettagliato archittetture neurali (Abbott, 2023).

Neural circuit diagrams

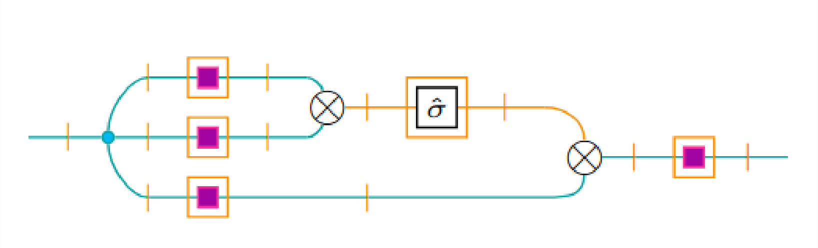


String diagrams with universal approximators

Gli *string diagrams with universal approximators* sono diagrammi con semantica categorica utili per rappresentare architetture neurali (Khatri et al., 2024).

A differenza dei *neural circuit diagrams*, gli *string diagrams with universal approximators* usano il concetto di *unversal approximator* per consentire astrazione tramite *rewrite*.

String diagrams with universal approximators



Khatri et al., 2024

Prospettive future

Prospettive future

C'è una competizione in corso tra varie discipline che puntano a spiegare il deep learning utilizzando ciascuna i propri strumenti:

- **fisica matematica** (e.g. Roberts et al., 2022),

Prospettive future

C'è una competizione in corso tra varie discipline che puntano a spiegare il deep learning utilizzando ciascuna i propri strumenti:

- **fisica matematica** (e.g. Roberts et al., 2022),
- **topologia** (e.g. Hensel et al., 2021),

Prospettive future

C'è una competizione in corso tra varie discipline che puntano a spiegare il deep learning utilizzando ciascuna i propri strumenti:

- **fisica matematica** (e.g. Roberts et al., 2022),
- **topologia** (e.g. Hensel et al., 2021),
- **probabilità** (e.g. Patel et al., 2015),

Prospettive future

C'è una competizione in corso tra varie discipline che puntano a spiegare il deep learning utilizzando ciascuna i propri strumenti:

- **fisica matematica** (e.g. Roberts et al., 2022),
- **topologia** (e.g. Hensel et al., 2021),
- **probabilità** (e.g. Patel et al., 2015),
- e così via...

Prospettive future

La teoria delle categorie, oltre a offrire strumenti propri, potrebbe creare un ponte tra queste discipline e potrebbe unificare i loro approcci in una teoria generale del deep learning.

Riferimenti bibliografici

- Abbott, V. (2023). **Robust Diagrams for Deep Learning Architectures: Applications and Theory [Tesi di dottorato, Honours Thesis, The Australian National University, Canberra].**
- Bronstein, M. M., Bruna, J., Cohen, T., & Veličković, P. (2021).**Geometric deep learning: Grids, groups, graphs, geodesics, and gauges.** *arXiv preprint arXiv:2104.13478*.
- Chytas, S. P., Lokhande, V. S., Li, P., & Singh, V. (2024).**Pooling Image Datasets With Multiple Covariate Shift and Imbalance.** *arXiv preprint arXiv:2403.02598*.

Clark, S., & Pulman, S. (2007).**Combining symbolic and distributional models of meaning.** *American Association for Artificial Intelli- gence*.

Cockett, R., Cruttwell, G., Gallagher, J., Lemay, J.-S. P., MacAdam, B., Plotkin, G., & Pronk, D. (2019).**Reverse derivative categories.** *arXiv preprint arXiv:1910.07065*.

Coecke, B., Sadrzadeh, M., & Clark, S. (2010).**Mathematical foundations for a compositional distributional model of meaning.** *arXiv preprint arXiv:1003.4394*.

Cruttwell, G. S., Gavranović, B., Ghani, N., Wilson, P., & Zanasi, F. (2022).**Categorical foundations of gradient-based learning.** *European Symposium on Programming*.

Dudzik, A. J., & Veličković, P. (2022). **Graph neural networks are dynamic programmers.** *Advances in neural information processing systems*.

Dudzik, A. J., von Glehn, T., Pascanu, R., & Veličković, P. (2024). **Asynchronous algorithmic alignment with cocycles.** *Learning on Graphs Conference*.

Fong, B., & Spivak, D. I. (2018). **Seven sketches in compositionality: An invitation to applied category theory.** *arXiv preprint arXiv:1803.05316*.

Gavranović, B. (2019). **Compositional deep learning.** *arXiv preprint arXiv:1907.08292*.

Gavranović, B. (2024). **Fundamental Components of Deep Learning: A category-theoretic approach.** *arXiv preprint arXiv:2403.13001*.

Gavranović, B., Lessard, P., Dudzik, A. J., von Glehn, T., Araújo, J. G. M., & Veličković, P. (2024).**Position: Categorical Deep Learning is an Algebraic Theory of All Architectures.** *Forty-first International Conference on Machine Learning*.

Hensel, F., Moor, M., & Rieck, B. (2021).**A survey of topological machine learning methods.** *Frontiers in Artificial Intelligence*.

Khatri, N., Laakkonen, T., Liu, J., & Wang-Maścianica, V. (2024).**On the Anatomy of Attention.** *arXiv preprint arXiv:2407.02423*.

Lewis, M. (2019).**Compositionality for recursive neural networks.** *arXiv preprint arXiv:1901.10723*.

Olah, C., & Carter, S. (2017).**Research Debt [https://distill.pub/2017/research-debt].** *Distill*.

Patel, A. B., Nguyen, T., & Baraniuk, R. G. (2015).**A probabilistic theory of deep learning.** *arXiv preprint arXiv:1504.00641*.

Raff, E. (2019).**A step toward quantifying independently reproducible machine learning research.** *Advances in Neural Information Processing Systems*.

Rahimi, A. (2017). **Machine Learning has become alchemy [https://www.youtube.com/watch?v=x7psGHgatGM].**

Roberts, D. A., Yaida, S., & Hanin, B. (2022). **The principles of deep learning theory.** Cambridge University Press Cambridge, MA, USA.

Sheshmani, A., & You, Y.-Z. (2021).**Categorical representation learning: morphism is all you need.** *Machine Learning: Science and Technology*.