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?

Mancano fondamenta teoriche:

• design ad hoc (Gavranović, 2024)

Mancano fondamenta teoriche:

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

Mancano fondamenta teoriche:

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

La ricerca viene rallentata da:

• research debt (Olah e Carter, 2017)

La ricerca viene rallentata da:

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

una lingua franca della matematica

Teoria delle categorie:

Teoria delle categorie

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

Teoria delle categorie:

una lingua franca delle scienze

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

• ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (Gavranović et al., 2024)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (Gavranović et al., 2024)
- integral transforms (Dudzik e Veličković, 2022, Dudzik et al., 2024)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (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)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (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)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (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)

- ottiche parametriche (Gavranović, 2024, Cruttwell et al., 2022)
- (co)algebre categoriche (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

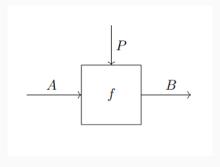
per modellare il gradient-based learning

DEFINIZIONE: II costrutto Para

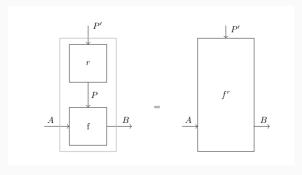
Sia $(\mathcal{C}, I, \otimes)$ una categoria monoidale strettamente simmetrica. Allora, $\mathbf{Para}_{\otimes}(\mathcal{C})$ è la 2-categoria definita come segue.

- Le 0-celle sono oggetti di C.
- Le 1-cells sono coppie $(P, f) : A \rightarrow B$, dove P : C e $f : P \otimes A \rightarrow B$.
- 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.

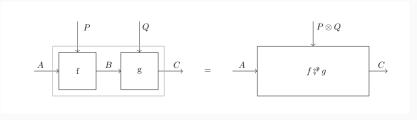
Vedasi Gavranović, 2024.



Gavranović, 2024



Gavranović, 2024



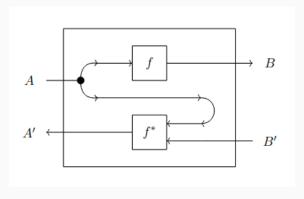
Gavranović, 2024

DEFINIZIONE: II costrutto Lens

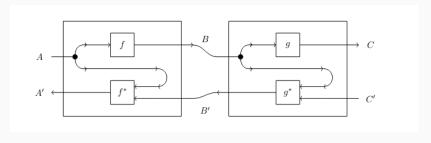
Sia $(C, 1, \times)$ una categoria Cartesiana. Allora, **Lens**(C) è la categoria definita come segue.

- 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.



Cruttwell et al., 2022



Cruttwell et al., 2022

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

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

DEFINIZIONE: Lenti con backward pass additivo

Sia $\mathcal C$ una CRDC. Allora, definiamo la sottocategoria $\mathbf{Lens}_A(\mathcal C)$ di $\mathbf{Lens}_A(\mathcal C)$, i cui oggetti sono coppie $\binom{A}{A'}$ e i cui morfismi hanno la forma $\binom{f}{\mathbb R[f]}$. Vedasi Cruttwell et al., 2022.

TEOREMA: Struttura cartesiana di Lens $_A(C)$

La struttura

$$I = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} A \\ A \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} B \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \times B \\ A \times B \end{pmatrix}$$

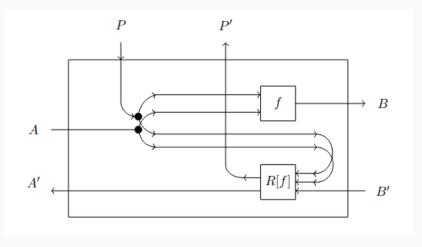
definita su **Lens** $_A(\mathcal{C})$ è Cartesiana. Vedasi Cruttwell et al., 2022.

DEFINIZIONE: Lenti parametriche

Sia $\mathcal C$ una CRDC. Allora, definiamo la categoria delle lenti parametriche su $\mathcal C$ come

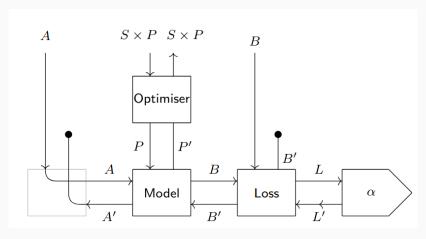
$$\mathsf{Para}_{\otimes}(\mathsf{Lens}_{\mathcal{A}}(\mathcal{C})).$$

Vedasi Gavranović, 2024.

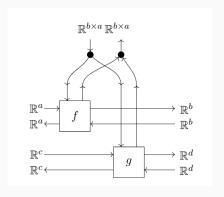


Cruttwell et al., 2022

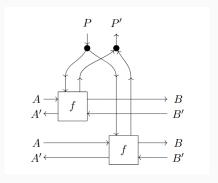
Le lenti parametriche in $\mathbf{Para}_{\otimes}(\mathbf{Lens}_{\mathcal{A}}(\mathcal{C}))$ supportano la *automatic* differentiation e possono essere utilizzate per implementare il gradient-based learning (Cruttwell et al., 2022, Gavranović, 2024).



Cruttwell et al., 2022



Cruttwell et al., 2022



Cruttwell et al., 2022

Categorical deep learning:

(co)algebre categoriche come teoria delle architetture

Dal GDL al CDL

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 delle reti neurali rappresentano mappe invarianti rispetto a traslazioni.

Categorical deep learning

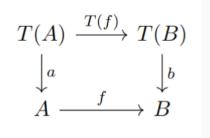
Il categorical deep learning è una teoria delle architetture di reti neurali che generalizza il GDL, organizzando le architetture in base al concetto di omomorfismo di (co)algebre categoriche (Gavranović et al., 2024).

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) $\begin{subarray}{l} b=a\begin{subarray}{l} f \end{subarray}$.



Il CDL generalizza il GDL poiché le azioni di un grouppo G si possono definire come algebre su una monade, e le mappe invarianti si recuperano come omomorfismi tra queste algebre.

DEFINIZIONE: Monade delle azioni di G

Consideriamo l'endofuntore $G \times -:$ **Set** \to **Set** che mappa $A \mapsto G \times A$ e $f \mapsto G \times f$. La monade delle azioni di G è definita dotando l'endofuntore delle transformazioni naturali di $\mu_A : (g,h,a) \mapsto (gh,a)$ e $\eta_A : a \mapsto (e,a)$. (Vedasi Gavranović et al., 2024.)

Il CDL costruisce collega algoritmi e strutture dell'informatica classica con le reti neurali.

ESEMPIO: Liste

Sia A un insieme. Consideriamo l'endofuntore $1+A\times-$ su **Set**. Sia $\mathsf{List}(A)$ l'insieme delle liste di elementi di A. Allora, se $\mathsf{Nil}: 1 \to \mathsf{List}(A)$ mappa l'unico oggetto di 1 alla lista vuota e $\mathsf{Cons}: A \times \mathsf{List}(A) \to \mathsf{List}(A)$ aggiunge un elemento a una lista, $(\mathsf{List}(A), [\mathsf{Nil}, \mathsf{Cons}])$, è un algebra su $1+A\times-$. (Esempio da Gavranović et al., 2024.)

ESEMPIO: List folds

Consideriamo due algebre (List(A), [Nil, Cons]) e (Z, [r_0 , r_1]) su $1 + A \times -$. Un omomorfismo f: List(A) $\rightarrow Z$ tra queste due algebre deve soddisfare

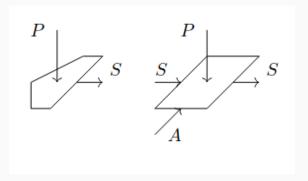
$$f(NiI) = r_0,$$

$$f(Cons(a, I)) = r_1(a, f(I)).$$

Hence, f è necessariamente un fold che riduce liste di elementi di A a singoli elementi di Z. (Esempio da Gavranović et al., 2024.)

ESEMPIO: Una cella di un folding RNN

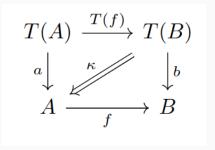
Consideriamo l'endofuntore $1 + A \times - :$ e la struttura cartesiana $(1, \times)$ su **Set**. Su questo funtore, può essere costruito un 2-funtore $\operatorname{Para}(1+A\times -): \operatorname{Para}(\operatorname{Set}) \to \operatorname{Para}(\operatorname{Set}).$ Consideriamo un algebra (S, (P, Cell)) su tale funtore. Tramite l'isomorfismo $P \times (1 + A \times -) \cong P + P \times A \times X$, deduciamo che $Cell = [Cell_0, Cell_1], dove Cell_0 : P \rightarrow S e Cell_1 : P \times A \times S \rightarrow S.$ Le funzioni Cell₀ e Cell₁ si possono interpretare come celle di un folding recurrent neural network. (Esempio da Gavranović et al., 2024.)



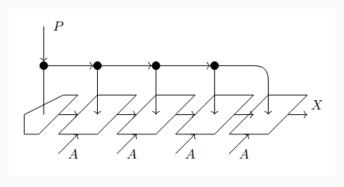
Gavranović et al., 2024

ESEMPIO: Unrolling di un folding RNN

Consideriamo le due algebre (List(A), [Nil, Cons]) e (S, (P, Cell)) sull'endofuntore $\mathbf{Para}(1+A\times-)$. Ora consideriamo un omomorfismo di algebre (P, f, Δ_P) : (List(A), [Nil, Cons]) \to (S, (P, Cell)). Si può dimostrare che una funzione f così definita è l'unrolling di un folding recurrent neural network. L'algebra (List(A), [Nil, Cons]) fornisce gli input della rete neurale, mentre l'algebra (S, (P, Cell)) fornisce le celle. (Esempio da Gavranović et al., 2024.)



Gavranović et al., 2024



Gavranović et al., 2024

Folding recurrent neural network	Unfolding recurrent neural network	Recursive neural network	Full recurrent neural network	"Moore machine" neural network
$1 + A \times S \\ \downarrow^{(P, cell^ricnt)} S$	$S \ igg (P, \langle cell_a, cell_n \rangle) \ O imes S$	$A + S^2 \\ \downarrow^{(P, cell^rcsv)} \\ S$	$S \\ \downarrow^{(P, cell^Mealy)} \\ (I \to O \times S)$	$S \\ \downarrow^{(P,cell^Moore)} \\ O \times \left(I \to S\right)$
$S \xrightarrow{P} S$	$s \xrightarrow{P} s$	$X \longrightarrow X$	$S \xrightarrow{P} O \xrightarrow{S} S$	X X X X X X X X X X

Gavranović et al., 2024

modelli come funtori che sfruttano la struttura dei dati

Functor learning:

Categorical representation learning

Il categorical representation learning consiste nell'immergere funtorialmente una categoria $\mathcal C$ di dati in una categoria $\mathcal R$ di vettori latenti (Sheshmani e You, 2021).

Grazie alla funtorialità dell'embedding, il categorical representation learning consente di preservare la struttura dei dati nello spazio latente.

DEFINIZIONE: Struttura categorica dello spazio latente tegoria i cui oggetti sono i vettori di \mathbb{R}^n and tale che, per ogni u,v in \mathcal{R} , i morfismi $u\to v$ sono le matrici $M\in\mathbb{R}^{n\times n}$ tali che v=Mu. La composizione è l'ordinario prodotto riga per colonna e l'identità relativa a un generico $v\neq 0$ è $\mathrm{id}_v=\frac{vv^T}{|v|^2}$. L'identià relativa al vettore nullo è la matrice nulla. (Vedasi Sheshmani e You, 2021.)

Data una categoria $\mathcal C$ di dati, il funtore di *embedding* $\mathcal C \to \mathcal R$ è realizzato da due **neural embedding layers**: il primo produce rappresentazioni degli elementi di $\mathcal C$ come vettori, mentre il secondo produce rappresentazioni dei morfismi di $\mathcal C$ come matrici. (Vedasi Sheshmani e You, 2021.)

DEFINIZIONE: Negative sampling loss

La *objective function* utilizzata per addestrare i due *layers* è la *negative sampling loss*

$$\mathcal{L} = -\mathbb{E}_{(a,b)\sim p(a,b)} \left(\log P(a \to b) + \mathbb{E}_{b' \sim p(b')} \log(1 - P(a \to b')) \right),$$

dove la probabilità che sussista una relazione $a \rightarrow b$ è misurata come

$$P(a \to b) = \text{sigmoid}\left(F\left(\bigoplus_{f} v_a^T M_f v_b\right)\right).$$

(Vedasi Sheshmani e You, 2021.)

ESEMPIO: Traduzione non supervisionata

Se \mathcal{C} e \mathcal{D} sono database di formule chimiche in inglese e cinese, rispettivamente, possiamo usare il CRL per immergere le due categorie in \mathcal{R} funtorialmente. Poi si può imparare un funtore $\mathcal{F}:\mathcal{R}\to\mathcal{R}$ che preservi la struttura categorica. Tale funtore opererà la traduzione. (Esempio da Sheshmani e You, 2021.)

ESEMPIO: Traduzione non supervisionata

Se \mathcal{C} e \mathcal{D} sono database di formule chimiche in inglese e cinese, rispettivamente, possiamo usare il categorical representation learning per immergere le due categorie in \mathcal{R} funtorialmente. Poi si può imparare un funtore $\mathcal{F}:\mathcal{R}\to\mathcal{R}$ che preservi la struttura categorica. Tale funtore effettuerà la traduzione. \mathcal{F} può essere implementato come una matrice $V_{\mathcal{F}}$ che mappa

$$v\mapsto V_{\mathcal{F}}v,$$

$$M_f\mapsto V_{\mathcal{F}}M_f.$$

(Esempio da Sheshmani e You, 2021.)

ESEMPIO: Traduzione non supervisionata

La matrice può essere imparata minimizzando la loss function

$$\mathcal{L}_{\mathrm{struc}} = \sum_{f} \| V_{\mathcal{F}} M_f - M_{\mathcal{F}(f)} V_{\mathcal{F}} \|^2,$$

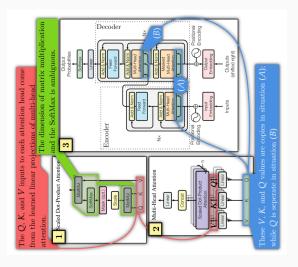
a cui si può aggiungere anche la loss

$$\mathcal{L}_{\mathrm{align}} = \sum_{a \in A} \| V_{\mathcal{F}} v_a - v_{\mathcal{F}(a)} \|,$$

per dare parziale supervisione. (Esempio da Sheshmani e You, 2021.)

rappresentazioni dettagliate di architetture neurali

Neural circuit diagrams:



Abbott, 2024

I diagrammi di deep learning models generalmente utilizzati nella letteratura scientifica sono inadeguati in quanto non riportano molti dettagli importanti ai fini dell'implementazione (Abbott, 2024; Khatri et al., 2024).

I monoidal string diagrams usati in teoria delle categorie applicata sono inadeguati poiché non riescono a rappresentare funtori e trasformazioni naturali (Abbott e Zardini, 2024).

I functor string diagrams prendono ispirazione dai monoidal string diagrams e li adattano per rappresentare funtori e trasformazioni naturali (Abbott e Zardini, 2024).

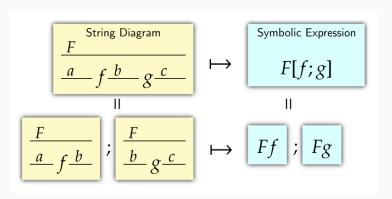
PRINCIPIO di decomposizione verticale

Uno *string diagram* può essere diviso in colonne verticali. Una singola colonna deve contenere solo oggetti o solo morfismi. Colonne con oggetti e colonne con morfismi devono alternarsi.

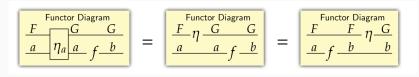
PRINCIPIO dell'espressione equivalente

Deve essere possibile sostituire ogni diagramma che segue una nuova notazione grafica con uno diagramma equivalente che segue la vecchia notazione.

Vedasi Abbott e Zardini, 2024.

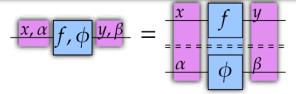


Abbott e Zardini, 2024

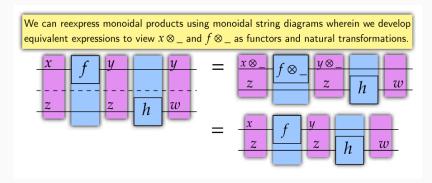


Abbott e Zardini, 2024

We develop double-dashed lines as an equivalent expression to represent product categories $C \times D$, where objects and morphisms are tuples.

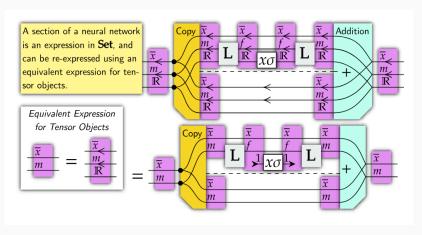


Abbott e Zardini, 2024

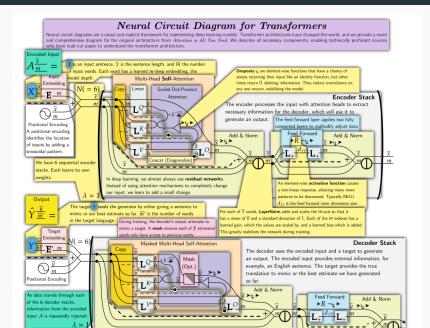


Abbott e Zardini, 2024

I neural circuit diagrams sono functor string diagrams specializzati nel rappresentare architetture di reti neurali (Abbott e Zardini, 2024).



Abbott e Zardini, 2024



C'è una competizione in corso tra varie discipline, che puntano a spiegare le reti neurali utilizzando ciascuna i propri strumenti:

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

C'è una competizione in corso tra varie discipline, che puntano a spiegare le reti neurali utilizzando ciascuna i propri strumenti:

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

C'è una competizione in corso tra varie discipline, che puntano a spiegare le reti neurali 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),

C'è una competizione in corso tra varie discipline, che puntano a spiegare le reti neurali 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...

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].
- Abbott, V. (2024). **Neural Circuit Diagrams: Robust Diagrams** for the Communication, Implementation, and Analysis of Deep Learning Architectures. *arXiv* preprint *arXiv*:2402.05424.
- Abbott, V., & Zardini, G. (2024). Functor String Diagrams: A Novel Approach to Flexible Diagrams for Applied Category Theory. arXiv preprint arXiv:2404.00249.

- 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., 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.