Towards a Categorical Foundation of Deep Learning: A Survey

Una rassegna di approcci categorici al *deep learning*

Francesco Riccardo Crescenzi

12 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)
- **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**
- **categorical deep learning**
- **integral transforms**
- **functor learning**
- **compositional distributional model of meaning**
- **neural circuit diagrams**
- **string diagrams with universal approximators**

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**

Gradient-based learning con lenti parametriche

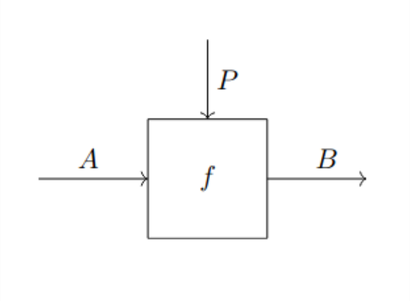
DEFINIZIONE: Il costrutto Para

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

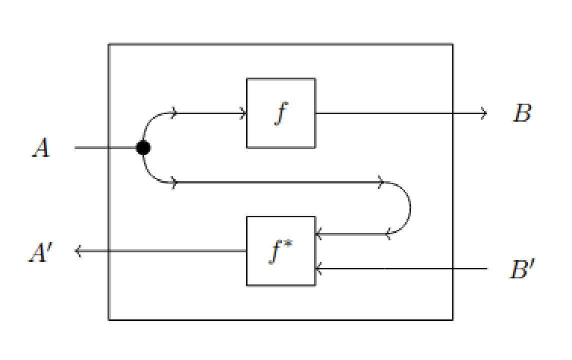
DEFINIZIONE: Il costrutto Lens

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

DEFINIZIONE: Cartesian reverse differential category

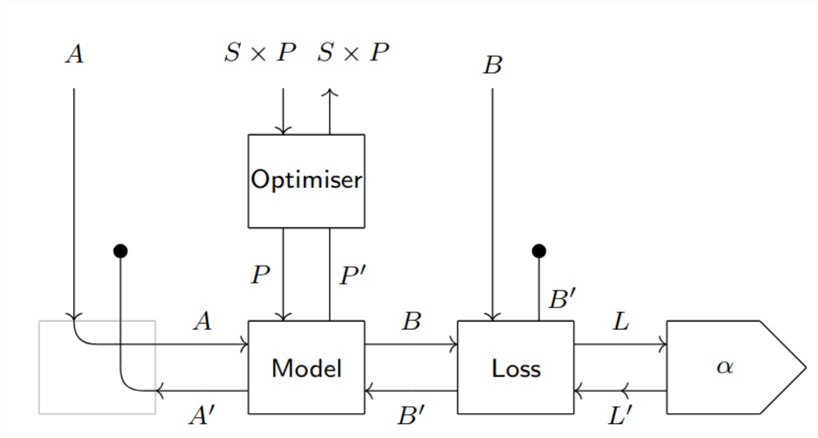
Una *Cartesian reverse differential category* (CRDC) $\mathcal{C}$ è una categoria Cartesiana con una struttura additiva dove è definito un operatore differenziale R che ha le proprietà di una *reverse derivative*. Si vedano Cockett et al., 2019 e Gavranović, 2024.

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



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).

Dal GDL al CDL

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).

Dal GDL al CDL

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 $F(f) \fatsemi b = a \fatsemi f$.

Dal GDL al CDL

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

ESEMPIO: Liste

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

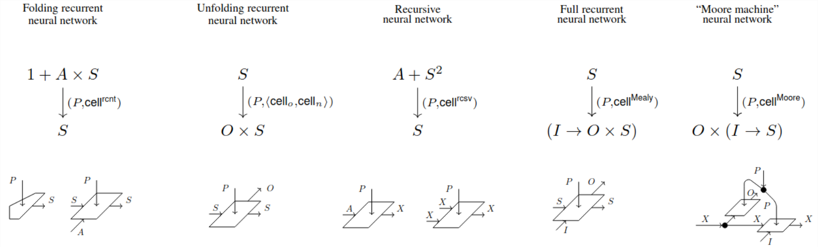
ESEMPIO: List folds

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

$$f(\mathrm{Nil}) = r_0,$$
$$f(\mathrm{Cons}(a, l)) = r_1(a, f(l)).$$

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

Dal GDL al CDL



Gavranović et al., 2024

Prospettive future

Prospettive future

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),

Prospettive future

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),

Prospettive future

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),

Prospettive future

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...

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].**

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. (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*.