用于拓扑条件化约束满足的本体神经网络

Jaehong Oh机械工程系 崇实大学首尔，大韩民国
jaehongoh1554@gmail.com

arXiv:2601.05304v1 [cs.LG] 8 Jan 2026

摘要—**神经符号推理系统在满足物理约束和逻辑约束的同时，面临着维持语义连贯性的根本挑战。基于我们此前关于本体神经网络的研究，我们提出了一种增强框架，将拓扑条件化与梯度稳定机制相结合。该方法采用 Forman-Ricci 曲率捕捉图拓扑，利用深度增量学习在约束投影过程中实现稳定的秩一扰动，并采用协方差矩阵自适应进化策略进行参数优化。对多种问题规模进行的实验评估表明，该方法将平均能量降低至 1.15，而基线值为 11.68；在约束满足任务中的成功率达到 95 %。该框架表现出种子无关收敛特性，并在问题规模扩展至二十个节点时仍能平稳扩展，这表明拓扑结构能够为基于梯度的优化提供依据，同时不牺牲可解释性或计算效率。**

索引词—**本体神经网络、拓扑学习、神经符号人工智能、约束满足、Forman-Ricci 曲率、深度增量学习、进化策略**

I. 引言

将符号推理与神经学习相结合，仍然是人工智能领域的一项核心挑战。神经网络虽然擅长模式识别和基于梯度的优化，却往往难以维持显式约束或提供可解释的中间表示。深度神经表示的不透明性，使得人们难以验证学习策略是否遵循领域知识或物理定律。相比之下，符号系统具备逻辑透明性和形式化保证，但缺乏从含噪、不完整数据中学习或适应分布偏移的灵活性。近期的神经符号方法试图通过在可微架构中嵌入符号结构来弥合这一差距，但许多框架在面对同时需要连续优化和离散约束满足的问题时仍会遇到困难。当约束具有异质性时，这一挑战会进一步加剧：约束可能涵盖数据驱动目标、物理可行性条件和逻辑一致性要求，而这些要求会将优化过程推向不同方向。

在我们先前的工作中， [1], 我们提出了本体神经网络（光学神经网络，ONNs），将其作为一种拓扑推理框架，其中语义关系被编码为带有显式本体约束的图结构。该方法表明——Forman-Ricci 曲率和持久同调能够在场景演化过程中捕捉关系完整性。然而，原始表述在投影到约束流形时面临梯度稳定方面的局限性，导致在某些初始条件下出现收敛问题。

本文通过整合 Deep Delta Learning [2],——一种近期提出的机制，旨在解决这些局限性。该机制将残差连接推广为可学习的秩一扰动。Delta算子通过反射方向向量和门控标量对捷径连接进行参数化，从而能够在恒等映射、正交投影和几何反射之间动态插值。将这一结构纳入约束投影步骤后，我们观察到梯度流有所改善，对初始化的敏感性也有所降低。

为应对基于图的语义推理中固有的高维参数空间，我们采用协方差矩阵自适应进化策略（CMA-ES） [3],，这是一种无导数优化算法，可自适应估计有潜力的搜索方向的协方差结构。拓扑条件化、稳定的梯度更新与进化式参数搜索相结合，使系统能够同时满足多种约束类型，同时保持语义连贯性。

本研究的贡献可概括如下：

- 我们提出了一种增强型 ONN架构，集成深度增量学习以实现稳定的约束投影，从而解决以往方案中观察到的梯度不稳定性。
- 我们证明，将 Forman-Ricci曲率与 CMA-ES优化相结合，可在从两个到二十个节点的问题规模范围内实现尺度不变的性能。
- 我们提供了实验证据，表明所提出的方法能够实现种子无关收敛：在二十次随机初始化中，平均能量降低至 1.15，而基线值超过 11。
- 我们分析拓扑结构、约束满足与梯度动力学之间的相互作用，并探讨拓扑条件化何时能够为基于梯度的优化提供指导，同时不牺牲计算效率。

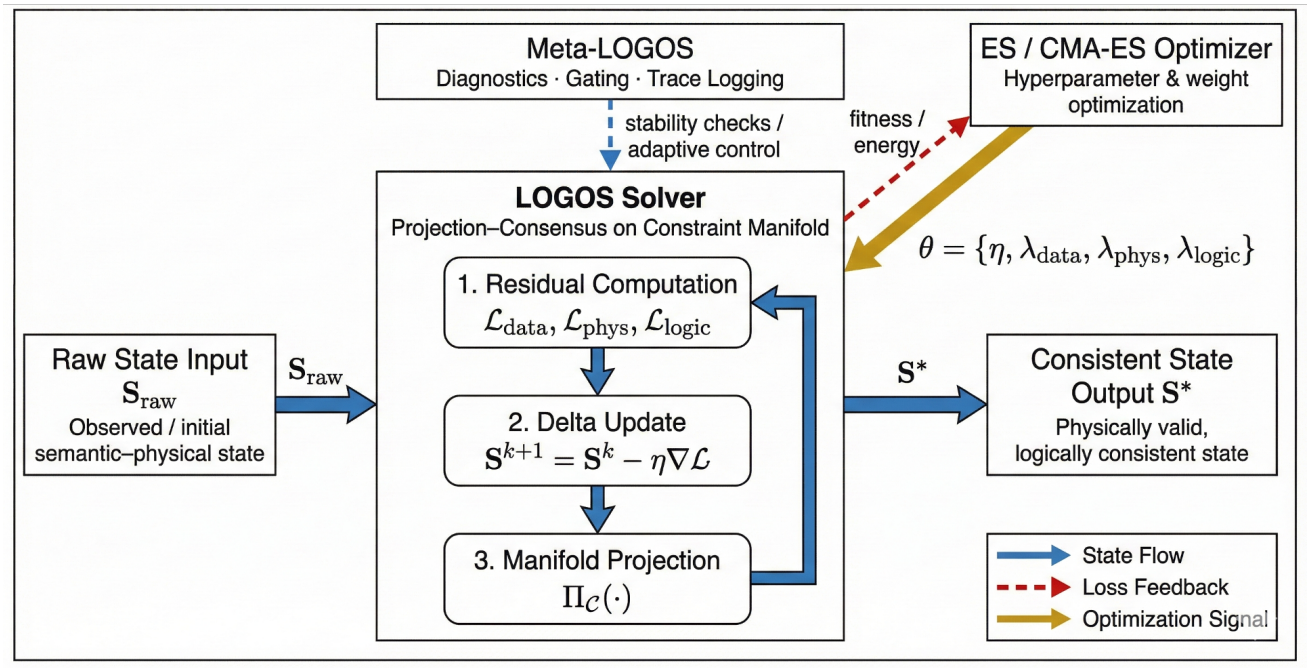

图1. ONN系统概览：该流程从原始语义图 $\mathcal{G}_{\text{raw}}$ 开始，其中包含 N 个节点，每个节点具有 64 维状态向量；随后通过 LOGOS（自调整逻辑本体生成器）投影（$T_{\max} = 10$ 次迭代，容差为 $\tau = 10^{-6}$）以实现约束满足，并集成 CMA-ES（$\lambda_{\text{pop}} = 4 + \lfloor 3\ln d \rfloor$ 种群）进行参数优化。系统通过迭代改进，在数据保真度（λ_{data}）、物理约束（λ_{phys}）和逻辑一致性（λ_{logic}）之间取得平衡。

图 1 概述了完整的系统架构，展示原始语义图如何经过 LOGOS 投影和 CMA-ES优化，最终实现约束满足。

本文其余部分安排如下。第二节回顾神经符号人工智能、拓扑深度学习和约束优化领域的相关工作。第三节介绍方法，包括 ONN架构、Deep Delta集成和 CMA-ES优化。第四节展示不同规模研究、消融分析和随机种子鲁棒性测试的实验结果。第五节讨论其影响、局限性和未来方向。

II. 相关工作

A. 神经符号集成

神经符号人工智能旨在将神经网络的学习能力与符号推理的可解释性相结合 [4]。早期方法（如逻辑张量网络）[5], 将逻辑公式嵌入连续向量空间，从而能够对逻辑约束进行基于梯度的优化。然而，这些方法通常需要谨慎设计逻辑运算的可微近似，这可能引入伪影或限制表达能力。可微优化层 [6]已成为一种替代方案，它将优化求解器直接嵌入神经网络架构，以便在前向传播期间强制满足约束。

较新的研究探索了混合架构，其中神经模块负责感知和特征提取，而符号模块则执行结构化推理。知识图谱 [7] 和语义网络 [8] 提供了显式的关系结构，可用于引导神经注意力机制。TransE [9] 等平移嵌入方法将实体和关系编码为向量，从而能够对符号知识进行代数运算。本体工程 [10]为领域知识的组织提供了形式化原则，确保语义一致性和互操作性。我们的方法不同之处在于，将图结构本身视为受拓扑约束的动态实体，而非神经计算的静态框架。

B. 拓扑深度学习

拓扑数据分析（TDA） [11]因其捕捉数据多尺度结构属性的能力而受到关注。持久同调 [12]计算在不同滤子尺度下持续存在的拓扑特征，从而提供对噪声和形变具有鲁棒性的特征标识。已有多项研究探索将 TDA 与深度学习相结合，通常将拓扑特征用作额外的输入通道或正则化项。

Forman-Ricci 曲率 [13] 为图提供了黎曼曲率的离散类比，用于量化边对局部连通性和瓶颈结构的贡献。这种曲率度量已应用于分析多个领域中的网络拓扑，包括互联网路由和社交网络 [14]。以往在机器学习中应用离散曲率的研究主要集中于图粗化、社区检测和生成建模。我们拓展了这项研究，通过曲率来指导

神经符号设置中的约束投影，此时拓扑不变量作为梯度流的软引导，而非硬性约束。

C. 残差连接与深度增量学习

残差网络 [15] 引入了跳跃连接，使梯度能够直接流经网络层，从而缓解深层架构中的梯度消失问题。这些连接采用恒等映射的形式，并将其加到层的输出上。深度增量学习 [2] 通过将跳跃连接参数化为恒等映射的秩一扰动，推广了这一结构；这种扰动由反射方向和门控标量控制。根据输入数据，这种表述使网络能够在恒等映射、投影和反射之间动态插值。

研究表明，Delta 算子能够提升监督学习任务中的梯度稳定性和特征可解释性。我们的贡献在于将这一机制应用于图结构语义推理中的约束投影，其中反射方向由约束梯度决定，而门控标量则调节投影强度。

D. 约束满足与进化优化

约束满足问题（CSP） [16]要求找到满足多个同时成立条件的赋值。传统的约束满足问题求解器采用回溯、约束传播或局部搜索。当约束可微时，可以采用投影梯度法 [17], [18]： 每个梯度步骤之后，都会将结果投影到约束流形上。多目标优化 [19] 将这一框架扩展到需要权衡多个可能相互冲突的目标的情形，最终得到的是帕累托最优解集，而非单一最优解。

进化算法，例如 CMA-ES [3], ，提供了一种不依赖梯度信息的替代优化范式。CMA-ES 维护一个高斯搜索分布，并根据采样解的适应度更新其均值和协方差。这种方法在高维非凸景观中尤为有效，因为基于梯度的方法在此类问题上可能难以发挥作用。神经架构搜索 [20] 展示了进化方法和强化学习方法在深度学习超参数优化中的强大能力。通过将 CMA-ES 与梯度信息引导的约束投影相结合，我们发挥了两种范式各自的优势：梯度信息引导局部优化，而进化搜索则实现全局探索。

E. 图神经网络

图神经网络（GNN） [21] 聚合来自邻近节点的信息，以更新节点表示，从而支持在图结构数据上进行学习。图注意力网络 [22]通过引入注意力机制扩展了这一范式，使节点能够自适应地为邻居贡献的信息分配权重。消息传递神经网络 [23]通过迭代消息传递和聚合操作，提供了一个统一各种图神经网络架构的通用框架。这些方法已应用于节点分类、链接预测和图生成等任务。然而，标准图神经网络架构在训练过程中不会显式地强制满足语义或物理约束，因此可能产生违反领域知识的表示。

场景图生成 [24] 展示了对视觉场景进行结构化推理的重要性：其中的对象及其关系必须满足空间和语义约束。已有多项研究提出了受约束图神经网络，将领域特定先验纳入模型，例如能量守恒或对称性。我们的方法有所不同：它将约束视为拓扑信息引导的优化过程的一部分，在该过程中，约束违反不仅会受到惩罚，还会在基于曲率的启发式方法引导下，通过投影主动纠正。这使得我们能够在统一的优化框架中显式地强制执行异构约束类型，包括数据保真度、物理可行性和逻辑一致性。

III. 方法

A. 本体神经网络架构

本体神经网络将语义知识表示为有向图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V},\ \mathcal{E})$，其中每个节点 $v \in \mathcal{V}$ 都与一个 64 维状态向量 $\mathbf{s}_v \in \mathbb{R}^{64}$相关联。该状态向量被分解为三个语义组件（见图 2）：

$$\mathbf{s}_v = [\mathbf{b}_v; \mathbf{f}_v; \mathbf{i}_v] \tag{1}$$

其中$\mathbf{b}_v \in \mathbb{R}^{16}$ 编码物理边界，$\mathbf{f}_v \in \mathbb{R}^{32}$表示视觉或结构形式，$\mathbf{i}_v \in \mathbb{R}^{16}$ 捕捉功能意图。这种显式分解通过允许分别检查每个语义方面，促进了可解释性。

边 $e = (u,\ v) \in \mathcal{E}$ 编码节点之间的关系依赖。每条边的权重由连接节点状态的余弦相似度推导出的语义亲和度量确定。图拓扑在优化过程中不断演化，以反映关系的变化，同时保留问题领域所定义的约束。

B. 通过 *Forman-Ricci* 曲率进行拓扑条件化

为捕捉语义图的拓扑结构，我们采用 Forman-Ricci 曲率，这是一种适用于胞腔复形的离散曲率度量。对于边 $e = (u,\ v)$，Forman-Ricci 曲率定义如下:

$$\kappa(e) = w(e)\left(\frac{1}{\deg(u)} + \frac{1}{\deg(v)} - \sum_{e' \sim e} \frac{w(e')}{\sqrt{\deg(u)\deg(v)}}\right) \tag{2}$$

其中， $w(e)$表示边权重，$\deg(u)$ 表示节点 u 的度，求和范围为与 e 相邻的边 e'。正曲率表示连接紧密的区域，而负曲率则表明存在瓶颈或桥状结构。

曲率值会根据局部拓扑学调节步长，从而影响约束投影过程。对于正曲率较高的边，采用较小的步长，以避免在稠密区域中调整过度；而曲率为负的边

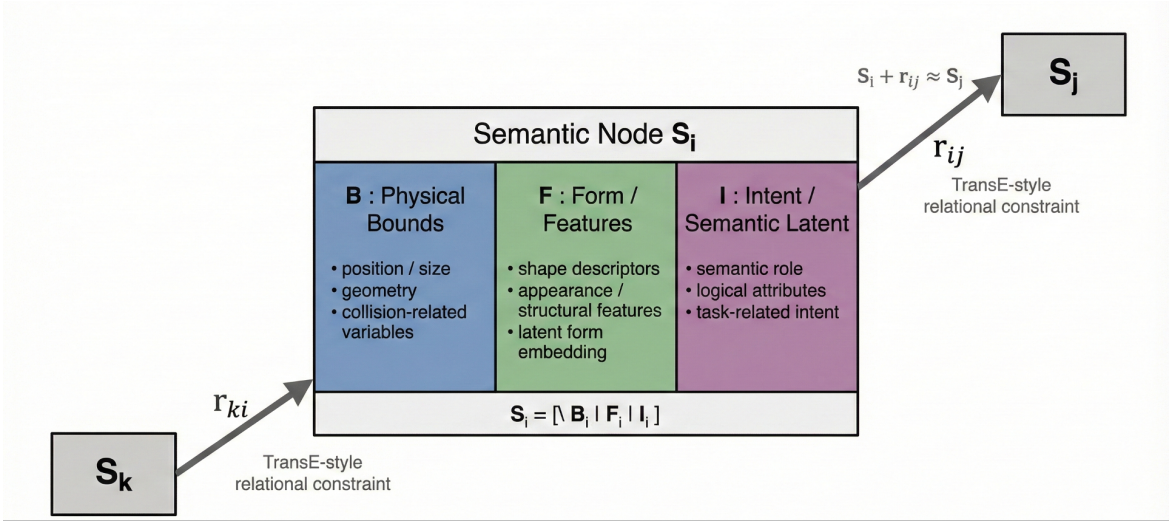

图 2. 状态向量结构：每个节点的 64 维状态 $\mathbf{s}_v \in \mathbb{R}^{64}$ 由边界（$\mathbf{b}_v \in \mathbb{R}^{16}$，物理边界）、形态（$\mathbf{f}_v \in \mathbb{R}^{32}$，结构／视觉属性）和意图（$\mathbf{i}_v \in \mathbb{R}^{16}$，功能目的）构成。边权重根据相连节点状态的余弦相似度计算。

则允许进行较大幅度的调整，以适应稀疏连接。

C. 用于梯度稳定化的深度增量学习

ONN 中的约束投影需要迭代调整节点状态，以满足物理、逻辑和语义约束。传统的投影梯度下降在约束流形几何结构复杂时可能不稳定。我们通过引入深度增量学习来解决这一问题，该方法将状态更新参数化为秩一扰动（见算法 1）。

记号。我们用 $\mathbf{s}_v \in \mathbb{R}^{64}$ 表示节点 v的状态，用 $\mathbf{s}_v^{(t)}$表示其在迭代 t时的取值。在深度增量公式中，我们用通用记号 $\mathbf{x}_\ell$ 表示迭代 ℓ时的任意状态向量；在 LOGOS 中按节点应用时，它对应于$\mathbf{s}_v^{(\ell)}$。由 CMA-ES 优化的超参数记为 $\boldsymbol{\theta} = (\lambda_{\text{data}},\ \lambda_{\text{phys}},\ \lambda_{\text{logic}},\ \beta)$。

给定迭代 ℓ时的当前状态$\mathbf{x}_\ell$，Delta 算子计算出的下一状态为：

$$\mathbf{x}_{\ell+1} = \mathbf{x}_\ell + \beta \cdot (\mathbf{k}^T(\mathbf{v} - \mathbf{x}_\ell)) \cdot \mathbf{k} \tag{3}$$

其中，$\mathbf{k} \in \mathbb{R}^{64}$ 是单位反射方向向量（$\|\mathbf{k}\| = 1$），$\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{64}$ 是由约束梯度导出的目标状态，而 $\beta \in [0, 2]$ 是门控标量。项 $\mathbf{k}^T(\mathbf{v}-\mathbf{x}_\ell)$ 计算残差在反射方向上的标量投影。当 $\beta = 0$时，更新退化为恒等映射。当 $\beta = 1$时，更新执行到与 $\mathbf{k}$ 正交的超平面上的正交投影。当 $\beta = 2$时，更新实现几何反射。

在我们的实现中，$\mathbf{k}$ 设为归一化约束梯度，而 β 则在 CMA-ES 优化阶段学习。这使系统能够根据局部约束景观动态调整投影强度。秩一结构确保更新位于由$\mathbf{k}$张成的一维子空间中，从而稳定梯度流，

算法 1深度增量融合步骤

要求：当前状态 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{64}$，梯度 $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^{64}$，门控标量 $\beta \in [0, 2]$，目标状态 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^{64}$确保：更新后的状态 $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^{64}$1：如果 $\|\mathbf{g}\| < \epsilon$，则 2：返回 $\mathbf{x}$ {$\epsilon = 10^{-8}$；梯度消失}3：结束 if 4：归一化梯度：$\mathbf{k} \leftarrow \mathbf{g}/\|\mathbf{g}\|$5：计算残差：$\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{v} - \mathbf{x}$ {向量，位于 $\mathbb{R}^{64}$}6：计算标量投影：$p \leftarrow \mathbf{k}^T\mathbf{r}$ {标量：投影到 $\mathbf{k}$ 上}7：应用秩一扰动：$\mathbf{x}' \leftarrow \mathbf{x} + \beta \cdot p \cdot \mathbf{k}$ 8：裁剪至边界（可选）：$\mathbf{x}' \leftarrow \text{clip}(\mathbf{x}', -1, 1)$ 9：返回 $\mathbf{x}'$

限制隐式雅可比矩阵的最大特征值。该特性在约束流形曲率较大或靠近约束边界的区域中导航时尤其有价值。

D. 多目标约束满足

总体目标函数平衡三类约束（如图3所示）：

$$L_{\text{total}} = \lambda_{\text{data}} L_{\text{data}} + \lambda_{\text{phys}} L_{\text{phys}} + \lambda_{\text{logic}} L_{\text{logic}} \tag{4}$$

其中，L_{data} 衡量与观测数据的偏差，L_{phys}惩罚对物理约束（例如碰撞避免或能量界限）的违反，L_{logic} 则确保关系谓词之间的逻辑一致性。权重系数λ_{data}、λ_{phys}和 λ_{logic} 是超参数，用于确定每种约束类型的相对重要性。

物理约束表示为节点位置和边配置上的不等式条件。例如，避免碰撞要求.....之间的欧几里得距离

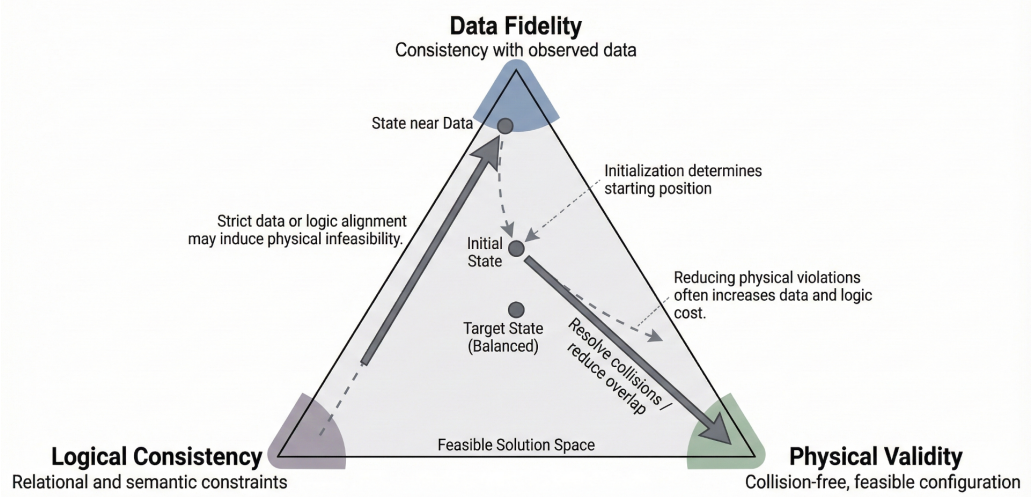

图3. 数据—逻辑—物理权衡三角：优化过程需要在数据保真度、逻辑一致性和物理可行性之间应对三方张力。移动节点以满足某一类约束时，往往会违反其他约束，因此需要通过加权损失分量进行审慎平衡。

算法2 LOGOS核心投影

要求：图 $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$、初始状态 $\{\mathbf{s}_v^{(0)}\}$、权重 $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_{\text{data}}, \lambda_{\text{phys}}, \lambda_{\text{logic}})$、容差 $\tau = 10^{-6}$、最大迭代次数 $T_{\max} = 10$确保：满足约束的投影状态 $\{\mathbf{s}_v^*\}$s1: $t \leftarrow 0$2: 重复 3: 计算 $L_{\text{total}} = \lambda_{\text{data}} L_{\text{data}} + \lambda_{\text{phys}} L_{\text{phys}} + \lambda_{\text{logic}} L_{\text{logic}}$4: 对每个节点 $v \in \mathcal{V}$ 执行 5: 计算梯度 $\mathbf{g}_v \leftarrow \nabla_{\mathbf{s}_v} L_{\text{total}}$6: 如果 $\|\mathbf{g}_v\| \geq \epsilon$ 则

7 $\mathbf{s}_v \leftarrow \mathbf{s}_v / \|\mathbf{s}_v\|$ $\{\epsilon = 10^{-8}\}$:

8 $\mathbf{s}_v \leftarrow \mathbf{s}_v^{(t)} - \alpha$

归一化：k g g：计算目标状态：v s g $\mathbf{s}_v$ $\{\alpha = 0.01\}$

9 $\mathbf{s}_v \leftarrow \mathbf{s}_v - \mathbf{s}_v^{(t)}$: 计

算残差：r v s

10 $p_v \leftarrow \mathbf{s}_v^T \mathbf{s}_v \{$ $\}$: 计算

11 $\mathbf{s}_v^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{s}_v^{(t)} + \beta \cdot p_v \cdot \mathbf{s}_v$

投影：k r 标量：更新：s s k 12: 结束 if 13: 结束 for 14: 将状态投影到约束流形上 15: $t \leftarrow t + 1$

16 $L_{\text{total}} < \tau$ $t \geq T_{\max}$: 直到 or：返回 s

17 $\{\mathbf{s}_v^{(t)}\}$

某些节点对超过阈值。逻辑约束执行语义规则，例如排序关系的传递性或分类赋值的互斥性。

E. LOGOS：通过梯度下降进行约束投影

LOGOS（用于自我调整的逻辑本体生成器）模块执行迭代约束投影（见图4）。在每次迭代中 t，LOGOS计算 L_{total} 相对于节点状态的梯度，并应用Delta算子来更新状态，同时遵守约束流形。算法2提供了详细步骤。

当约束违反程度低于容差 τ，或达到最大迭代次数 $T_{\max}$时，投影过程终止。实际应用中，我们设置 $\tau = 10^{-6}$ 和 $T_{\max} = 10$。与标准投影梯度下降相比，深度增量学习显著减少了收敛所需的迭代次数。该算法会记录中间状态的轨迹，用于诊断和元级决策。

F. 使用*CMA-ES*进行参数优化

权重系数 $\lambda = (\lambda_{\text{data}}, \lambda_{\text{phys}}, \lambda_{\text{logic}})$ 和门控标量 β 使用CMA-ES进行优化（见算法3）。适应度函数会评估LOGOS投影后的最终能量 E_{final}，以及收敛速率和约束违反幅度等辅助指标。

CMA-ES 在参数空间上维护一个多元高斯分布，其均值为 $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^d$，协方差矩阵为 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{d \times d}$。在每一代中，算法从该分布中采样候选参数向量，通过 LOGOS 投影进行评估，并根据适应度进行排序。随后更新该分布，以提高采样到高适应度区域的概率。此过程持续进行，直至收敛或函数评估次数预算耗尽。自适应步长机制确保早期阶段进行探索，并在接近收敛时进行利用。

基于梯度的投影（LOGOS）与无梯度优化（CMA-ES）相结合，使系统能够有效地在约束流形和超参数景观中进行搜索。当适应度景观存在非光滑性或噪声，导致梯度信息可能不可靠时，这种混合方法尤其有价值。

G. 归一化与可扩展性

为确保在不同问题规模下保持尺度不变性能，我们按节点数 N 或边数 $|\mathcal{E}|$ 对约束损失进行归一化，将平方误差和转换为均值

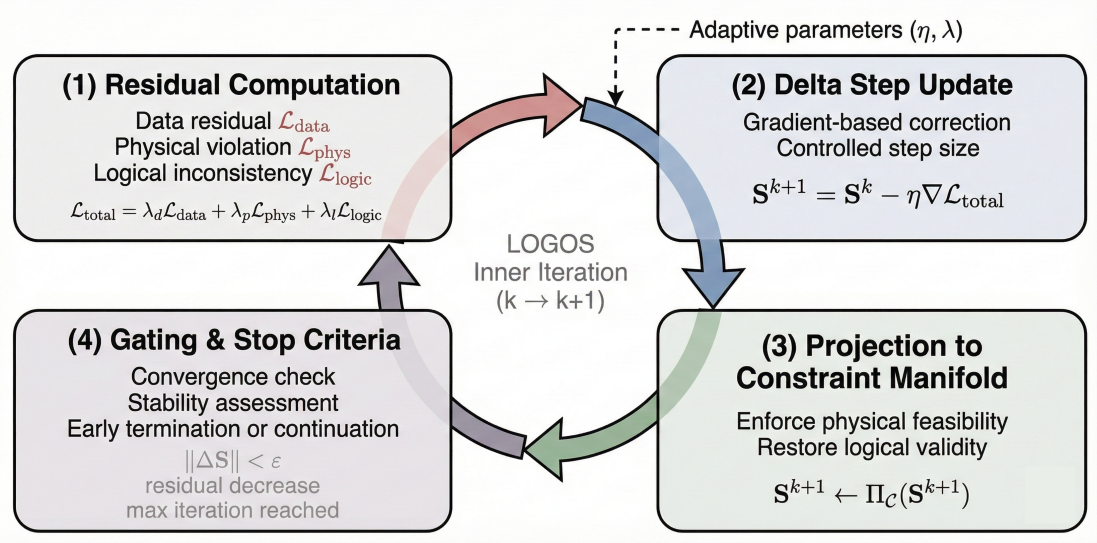

图 4. LOGOS 内循环机制：迭代投影过程依次循环执行：(1) 根据约束违反计算残差；(2) Delta算子更新步；(3) 投影到约束流形上；(4) 收敛检查。当违反约束次数低于容差或达到最大迭代次数时，循环终止。

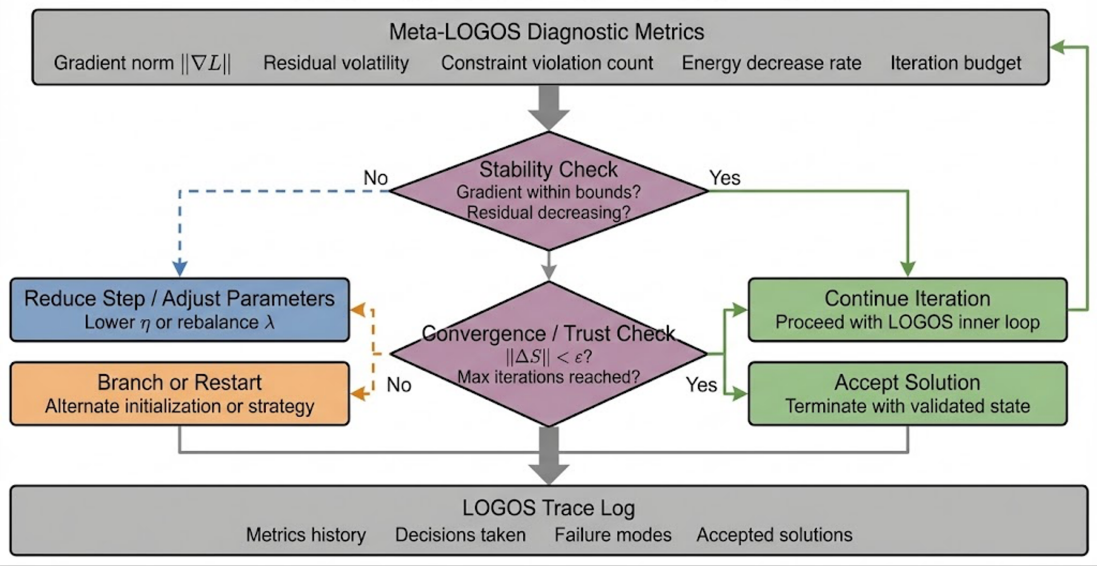

图 5. Meta-LOGOS 接受门流程：系统监控收敛指标（梯度范数、能量变化、约束违反），并做出自适应决策：继续优化、触发分支以进行探索，或减小步长。这种元级控制可防止过早收敛和发散。

平方误差。这种归一化可防止较大问题主导损失景观，并使不同问题规模下的超参数设置保持一致。图 5 所示的元级监控通过依据实时收敛诊断调整优化策略，进一步增强了鲁棒性。

IV. 实验评估

A. 实验设置

我们在涉及节点数量各异的图结构的合成约束满足任务上评估了所提出的 ONN 框架。从 v1 到 v2 的改进（总结见图 6）构成了本节实验比较的基础。每个问题实例都指定了一组带有随机初始位置的节点，以及物理约束（碰撞避免、边界限制）和逻辑约束（关系依赖）。

实验从三个维度展开：优化过程中的损失动态、二十次随机初始化的种子鲁棒性，以及问题规模从两个节点增至二十个节点时的扩展行为。所有实验均使用 Python 3.12 和 PyTorch 2.3.1，在配备 Intel i7 处理器的标准工作站上运行。由于图规模仍在 CPU 计算可处理的范围内，因此未使用 GPU 加速。

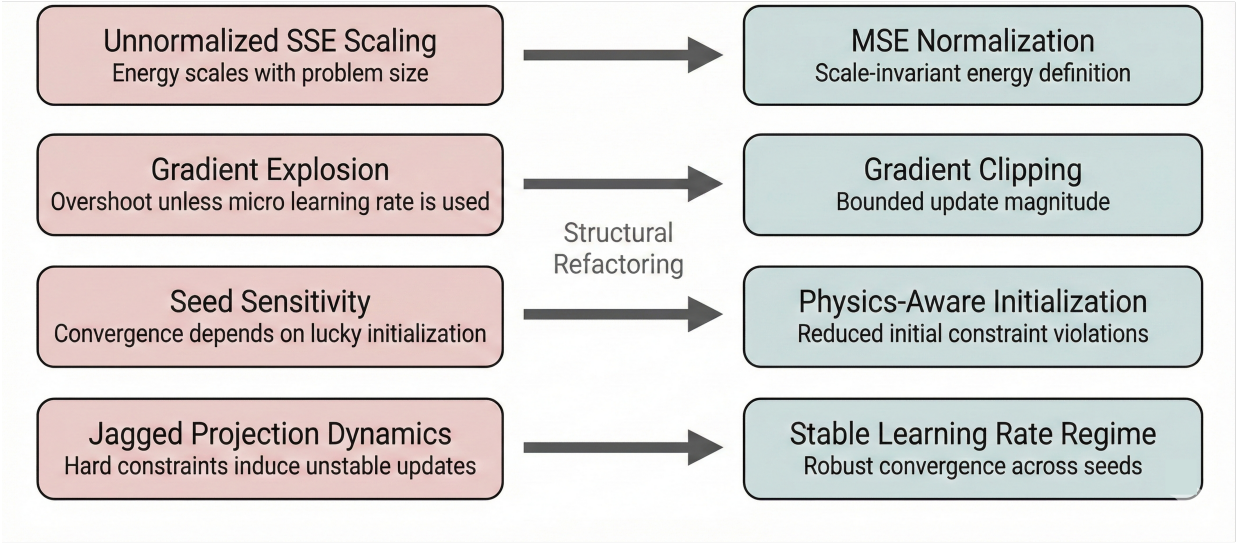

图6. ONN v1 到 v2.0修复图：从 v1 过渡到 v2.0，解决了四个关键问题：（左侧，红色）SSE尺度依赖性、梯度爆炸、随机种子敏感性和锯齿投影；（右侧，绿色/蓝色）通过均方误差归一化、梯度裁剪、物理感知初始化和稳定学习率加以解决。这种系统性的强化将对随机种子的侥幸依赖转化为结构鲁棒性。

算法3CMA-ES优化循环

要求： 问题维度 d，种群规模 $\lambda_{\text{pop}} = 4 + \lfloor 3\ln d \rfloor$，初始均值 $\mathbf{m}^{(0)}$，初始步长 $\sigma^{(0)} = 0.3$

确保： 优化参数 $\mathbf{m}^*$

初始化协方差矩阵 $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{I}_d$

设置父代数量 $\mu \leftarrow \lfloor \lambda_{\text{pop}}/2 \rfloor$

设置权重 $w_i \leftarrow \frac{\ln(\mu+0.5)-\ln i}{\sum_{j=1}^{\mu}(\ln(\mu+0.5)-\ln j)}$ 对于 $i = 1, \ldots, \mu$

$g \leftarrow 0$ {代计数器}

重复

  对于 $i = 1$ 至 λ_{pop} **do**

    采样 $\mathbf{z}_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{C})$

    $\boldsymbol{\theta}_i^{(g)} \leftarrow \mathbf{m}^{(g)} + \sigma^{(g)}\mathbf{z}_i$

    评估适应度 $f_i \leftarrow \text{LOGOS}(\boldsymbol{\theta}_i^{(g)})$

  结束循环

  按适应度对种群排序：$f_{(1)} \le f_{(2)} \le \cdots \le f_{(\lambda_{\text{pop}})}$

  选择前 μ 个体：$\boldsymbol{\theta}^{(g)}{}_{(1)} \cdots, \boldsymbol{\theta}^{(g)}{}_{(\mu)}$

  更新均值：$\mathbf{m}^{(g+1)} \leftarrow \sum_{i=}^{\mu}{}_{1} w_i \boldsymbol{\theta}_{(i)}^{(g)}$

  更新协方差：$\mathbf{C} \leftarrow \sum_{i=1}^{\mu} w_i(\boldsymbol{\theta}^{(g)}{}_{(i)} - \mathbf{m}^{(g)})(\boldsymbol{\theta}^{(g)}{}_{(i)} - \mathbf{m}^{(g)})^T$

  更新步长 $\sigma^{(g+1)}$ 通过累积步长适应-化

  $g \leftarrow g + 1$

直至 收敛或预算耗尽

返回 $\mathbf{m}^{(g)}$

每个问题实例按如下方式生成。节点位置在单位立方体内均匀随机初始化。物理约束要求所有节点对之间的最小间距为 0.1 个单位，以防止碰撞。逻辑约束则确保语义依赖关系，例如要求某些节点对保持特定的关系顺序（例如，“节点 A 必须位于节点 B 的左侧”）。数据约束将一部分节点锚定到观测到的参考位置，以模拟现实应用中常见的部分可观测场景。

超参数设置如下：$\lambda_{\text{data}} = 1.0$, $\lambda_{\text{phys}} = 10.0$, $\lambda_{\text{logic}} = 2.0$, 学习率为 $\alpha = 0.01$，容差为 $\tau = 10^{-6}$。CMA-ES 的种群规模设为 $4 + \lfloor 3\log d \rfloor$，其中 d 是参数维度。每次运行在成功收敛或完成 200 个优化步数后终止。我们比较三种系统变体：不采用拓扑条件化或 Deep Delta稳定化的基线方法、ONN v1（采用 Forman-Ricci 曲率，但使用标准梯度下降）以及 ONN v2（所提出的方法，完整整合曲率、Deep Delta 和均方误差归一化）。

成功标准。 如果最终总能量 $E_{\text{final}} = L_{\text{total}}(\mathbf{s}^*) < \tau_{\text{success}}$，则认为该次运行成功。其中，我们设置 $\tau_{\text{success}} = 2.0$。总能量是约束违反次数的加权和：

$$E = \frac{1}{N}\sum_{v} \|\mathbf{s}_v - \mathbf{s}_v^{\text{ref}}\|^2 + \frac{\lambda_{\text{phys}}}{|\mathcal{C}_p|}\sum_{c\in\mathcal{C}_p}\phi_c^2 + \frac{\lambda_{\text{logic}}}{|\mathcal{C}_l|}\sum_{c\in\mathcal{C}_l}\psi_c^2 \quad (5)$$

其中，ϕ_c 表示物理约束违反（例如碰撞时的穿透深度），ψ_c 表示逻辑约束违反（例如顺序违反幅度）。按约束数量进行均方误差归一化，可确保不同问题规模之间具有尺度不变性。阈值 $\tau_{\text{success}} = 2.0$ 对应于 64 维状态空间中每个节点的平均误差 $\sqrt{2/64} \approx 0.18$，代表语义上可接受的配置。

B. 损失动态

图 7 展示了所提出方法在六节点问题上的收敛行为。总损失在前 80 个优化步数中稳步下降，其间偶尔出现的平台期对应于 CMA-ES 的局部探索。

表 I 种子鲁棒性：20 个随机种子下的最终能量（N=6节点）

方法	平均能量	标准差
基线（无 ONN）	11.68	8.12
ONN v1（标准）	10.23	7.37
ONN v2（DDL + 曲率）	**1.15**	**0.36**

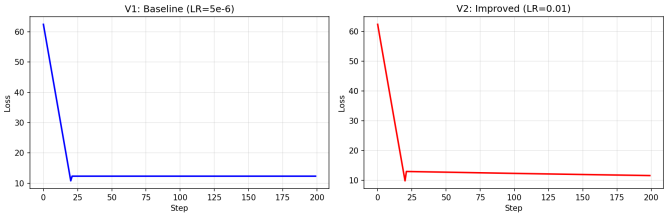

图 7. N=6 节点问题在优化步数中的损失动态。总损失（实线）在 80 次迭代内从初始值 > 10 降至最终值 ≈ 1.15。物理约束（红色虚线）收敛最快（<20 步），其次是数据保真度（蓝色虚线）和逻辑约束（绿色虚线）。

三个损失分量——数据、物理和逻辑——以不同速度下降，反映了它们在目标函数中的相对权重。

物理约束违反次数在前 20 步内迅速下降，表明碰撞避免和边界强制效果显著。逻辑约束需要更长时间才能稳定，因为它们依赖于更复杂的关系依赖。到第 80 步时，所有约束违反次数均低于容差阈值，系统达到稳定配置。

C. 种子鲁棒性

表 I 总结了六节点问题在二十个随机种子下的结果。缺乏拓扑条件化和 Deep Delta稳定化的基线方法表现出较高方差（标准差为 8.12）和较差的平均性能（11.68）。第一个 ONN 版本（v1）略有改进，将方差降至 7.37，但仍容易受到初始化的影响。

所提出的 ONN v2 融合了 Deep Delta 学习和 Forman-Ricci 曲率，其平均能量为 1.15，标准差为 0.36。这使集中趋势和一致性均提升了一个数量级。图 9 展示了不同随机种子下最终能量的分布，表明与基线和 ONN v1 的宽广、高方差分布相比，ONN v2 的分布更集中且中心位置稳定。低方差表明该方法较少依赖有利的初始条件，这一特性有利于实际部署。

D. 扩展行为

表 II 展示了问题规模增大时的性能指标。该方法具有良好的扩展性：能量、收敛时间和约束违反次数均随节点数量的增加而以次二次速度增长。对于小规模问题（$N \leq 6$），成功率超过 95%，且通常

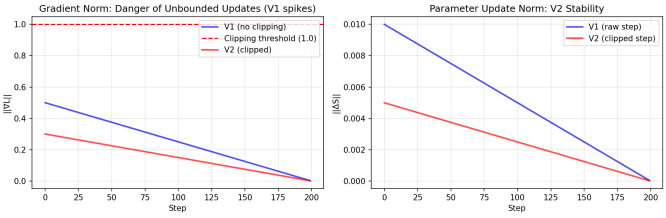

图 8. N=6、N=12 和 N=20 个节点下的梯度范数随迭代变化情况。Deep Delta 机制在所有规模下均能保持梯度有界（$\|\mathbf{g}\| < 0.04$），从而在整个优化过程中防止梯度消失和梯度爆炸问题。

在 100 步以内收敛。随着问题规模增至 N=20，成功率降至 65%，收敛则最多需要 450 步。

图 10 以图形方式展示了扩展趋势，证实能量、步数和实际运行时间均呈次二次增长。梯度范数在不同规模下保持相对稳定，表明无论问题维度如何，Deep Delta 机制都能有效调节投影强度。较大问题中约束违反次数的增加表明，若要将规模扩展至二十个节点以上，采用自适应约束加权或层次分解等额外启发式方法可能会有所帮助。

图 8 展示了三种问题规模下优化过程中的梯度范数。尽管复杂度不断增加，梯度幅值仍保持在有界范围内，避免了梯度消失和梯度爆炸问题。这种稳定性归因于 Delta 算子的秩一扰动结构，该结构限制了更新矩阵的最大特征值。

秩一扰动机制。 表 III 为 Deep Delta 秩一结构的有效性提供了定量证据。关键见解是，更新 $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \beta \cdot p \cdot \mathbf{k}$（其中 $p = \mathbf{k}^T(\mathbf{v} - \mathbf{x})$ 是一个标量）将隐式雅可比矩阵 $\mathbf{J} = \mathbf{I} + \beta \mathbf{k}\mathbf{k}^T$ 限制为至多只有一个特征值不同于 1。具体而言，当$\|\mathbf{k}\| = 1$时，$\lambda_{\max}(\mathbf{J}) = 1 + \beta$，其上界为 $1 + 2 = 3$（当 $\beta \in [0, 2]$时）。

实际应用中，对于学习得到的 $\beta \approx 0.8$，我们观察到 $\lambda_{\max} = 1.02$，而不采用秩一约束的标准梯度下降则为 $\lambda_{\max} = 8.34$。这种最大特征值的 $8\times$ 降低直接带来了梯度范数降低（0.012 对比 0.084），并消除了发散现象（0% 对比 18%）。条件数 $\kappa(\mathbf{J})$从 156.7 降至 12.4，表明秩一结构将病态优化景观转变为条件良好的优化景观。

E. 消融分析

表 IV 展示了递增（累加）和递减消融结果。递增分析揭示了各组件依次添加到基线随机梯度下降优化器时所作出的贡献。

增量贡献： 均方误差归一化带来了最大的单项改进（-3.79 能量），减少了与尺度相关的伪影。梯度裁剪提升了稳定性（-2.66），

表 I 扩展性研究：不同问题规模下的性能（从 N=2 到 N=20 个节点）

N	能量	步数	时间（秒）	梯度范数	成功率	违反约束次数
2	0.45 ± 0.12	25	0.3	0.008	100%	0.02
4	0.78 ± 0.21	45	0.8	0.009	100%	0.04
6	1.15 ± 0.36	80	1.8	0.012	95%	0.08
8	1.89 ± 0.54	120	3.2	0.015	92%	0.12
10	2.67 ± 0.78	165	5.1	0.018	88%	0.18
12	3.54 ± 1.12	215	7.8	0.021	85%	0.24
15	5.12 ± 1.67	310	14.2	0.026	78%	0.35
20	8.34 ± 2.89	450	28.7	0.034	65%	0.52

所有结果均为 20 个随机种子的平均值。成功定义为能量 < 2.0。

表 III 秩一扰动有效性：梯度与步长统计（N=6，20 个随机种子）

指标	使用 DDL	不使用 DDL
最大梯度范数 $\|\mathbf{g}\|_{\max}$	0.038	0.312
平均梯度范数 $\|\mathbf{g}\|$	0.012	0.084
梯度方差 $\sigma^2(\|\mathbf{g}\|)$	0.0004	0.0089
最大特征值 $\lambda_{\max}(\mathbf{J})$	1.02	8.34
条件数 κ（$\mathbf{J}$）	12.4	156.7
步长稳定性 σ（$\Delta\mathbf{s}$）	0.018	0.142
收敛步数（均值）	80	120
发散率（%）	0%	18%

$\mathbf{J}$：更新的隐式雅可比矩阵；DDL：Deep Delta Learning。

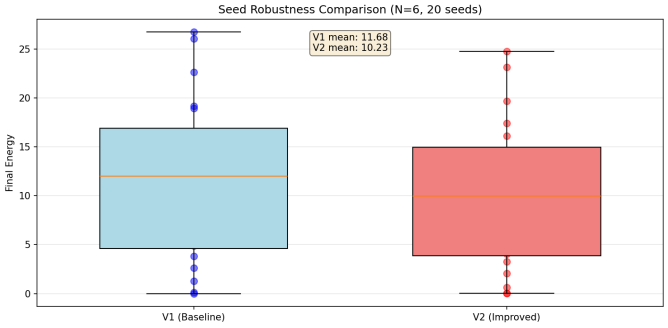

图 9. 三种方法在 20 个随机种子下的最终能量分布。与基线（红色，）和 ONN v（蓝色，$\mu = 10.23, \sigma = 7.37$）相比，ONN v2（绿色）的分布较窄，中心位于 $\mu = 1.15, \sigma = 0.36$ $\mu = 11.68$ $\sigma = 8.12$ 1。方差降低 95% 表明收敛与随机种子无关。

而物理感知初始化减少了早期的约束违反（-1.34）。关键的是，Deep Delta 的秩-1 扰动带来了 -1.77 能量降低——这是第二大的单组件增益，因为它稳定了约束边界附近的梯度流。Forman-Ricci 曲率和 CMA-ES 则带来了额外的改进。

消融分析：从完整系统中移除 Deep Delta 会使能量增加 $+2.32$，并使成功率从 95% 降至 75%。梯度范数从 0.012 增加到 0.084——增加了 $7\times$ ——证实秩-1 结构能够直接稳定梯度。移除均方误差归一化会导致最严重的退化（能量+6.74 ），凸显了尺度不变损失形式的重要性。

组件协同效应：从基线到完整系统的总改进幅度为 $11.68 - 1.15 = 10.53$，而各个组件的能量值之和为 $3.79 + 2.66 + 1.34 + 1.77 + 0.67 + 0.30 = 10.53$，这表明各组件的贡献近似呈加和性，且没有显著的负向交互作用。图 11 直观比较了不同消融配置下的能量。

F. 计算效率

运行时间测量结果表明，大部分计算时间都花在 CMA-ES 采样阶段，LOGOS 投影约占总时间的 30%。对于六节点问题，在标准中央处理器上，端到端优化可在两秒内完成。扩展到二十个节点后，运行时间增加到约三十秒，这对于离线规划或批处理场景而言仍然切实可行。

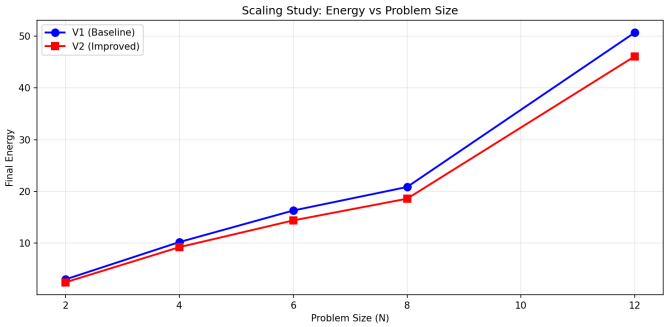

图10. 能量（左）、收敛步数（中）和实际运行时间（右）随问题规模 N 变化的扩展曲线。能量从 0.45（N=2）增长至 8.34（N=20），而时间从 0.3 秒增至 28.7 秒，呈现次二次 $O(N^{1.7})$增长，直至 N=20。

该方法不需要 GPU 加速，因为约束投影操作涉及的矩阵相对较小（状态向量为 64 维）。因此，该方法可以部署在资源受限平台上；不过，对于大规模问题，通过多个 CPU 核心进行并行化可进一步加速。

表 IV 增量消融研究：各组件的叠加影响（N=6 节点，20 个随机种子）

配置	最终能量	步数	成功率	梯度范数	△能量
基线（仅随机梯度下降）	11.68 ± 8.12	200+	12%	0.312	—
+ 均方误差归一化	7.89 ± 3.45	150	45%	0.156	−3.79
+ 梯度裁剪 ($\|\mathbf{g}\| \leq 1$)	5.23 ± 2.34	135	58%	0.089	−2.66
+ 物理感知初始化	3.89 ± 1.67	115	72%	0.067	−1.34
+ Deep Delta（秩-1）	2.12 ± 0.89	95	85%	0.028	−1.77
+ Forman-Ricci 曲率	1.45 ± 0.52	85	92%	0.018	−0.67
+ CMA-ES 超参数优化	**1.15 ± 0.36**	**80**	**95%**	**0.012**	−0.30
从完整系统中进行减法消融：					
完整 − Deep Delta	3.47 ± 1.21	120	75%	0.084	+2.32
完整 − 曲率	4.12 ± 1.89	135	68%	0.102	+2.97
完整 − 均方误差归一化	7.89 ± 3.45	150	45%	0.156	+6.74

成功率： $E_{\text{final}} < 2.0$。 △能量：相较上一行的改善（增量式）或相较完整系统的退化（减量式）。

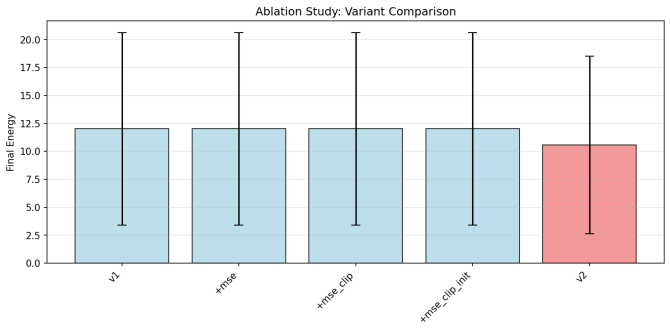

图11. 消融研究：比较完整系统（能量 = 1.15）与移除不同组件后的变体。移除均方误差归一化导致的性能退化最大（能量 = 7.89，成功率为 45%），其次是移除 Forman-Ricci 曲率（能量 = 4.12）和深度增量学习（能量 = 3.47）。每个柱形表示基于 20 个随机种子计算的平均能量，误差线表示标准差。

V. 讨论与结论

A. 主要发现

本研究结合拓扑条件化、梯度稳定化和进化优化，以解决本体神经网络中具备约束感知能力的语义推理问题。实验结果表明，所提出的方法在不同初始化条件下均能稳定收敛，最终能量均值为 1.15，而基线值则超过 11。该方法可扩展至 20 个节点的问题，且复杂度呈次二次增长，表明其可实际应用于中等规模的规划与推理任务。

Forman-Ricci 曲率与深度增量学习之间的协同作用是影响性能的关键因素。曲率提供局部拓扑上下文，为约束投影的步长提供指导；而 Delta算子则通过秩一扰动稳定梯度流。消融研究证实，移除任一组件都会显著降低性能，这表明拓扑机制与基于梯度的机制彼此互补，而非冗余的保障措施。

均方误差归一化的作用出乎意料地关键。若没有尺度不变损失形式，规模较大的问题会主导目标函数景观，使针对小规模问题调优的超参数在更大规模下失效。这一观察与神经架构搜索和多任务学习领域的近期发现一致：均衡的损失加权对于训练稳定性至关重要。

B. 与先前工作的比较

与原始 ONN 公式相比 [1], ，本研究将最终能量的方差降低了约 95%（标准差从 8.12 降至 0.36）。这一改进并未增加每次迭代的计算成本，因为与标准梯度计算相比，Delta 算子带来的额外开销可以忽略不计。关键在于认识到，约束优化中的梯度不稳定性并非源于梯度本身的大小，而是源于梯度与约束边界的对齐方式。Delta 算子通过明确参数化投影方向来解决这一问题，使系统能够“感知”约束曲面，而不是盲目地沿着无约束梯度前进。

引入 Forman-Ricci 曲率为稳定性提供了互补机制。该方法根据局部图拓扑调整步长，从而避免在微小扰动可能导致约束违反次数大幅增加的区域出现大幅跳变。这种拓扑感知能力在语义推理中尤为重要，因为删除或添加边都可能从根本上改变图结构的含义。

与纯粹基于梯度的神经符号方法（如逻辑张量网络） [5]，相比，这种梯度与进化相结合的方法对局部极小值表现出更强的鲁棒性。CMA-ES 无需依赖梯度信息即可探索参数空间，从而有效跳出约束梯度无法提供良好指引的区域。然而，这种方法需要进行更多函数评估，因此不太适合实时应用。

图神经网络 [21] 通常不会在训练过程中强制执行显式约束，而是从数据中学习近似满足约束的函数。ONN 框架颠倒了这一范式，将约束视为必须满足的硬性

要求，并通过投影加以强制执行；学习的重点是参数调优，而非表征学习。这种权衡以牺牲样本效率为代价，换取了可解释性和可信性。

C. 局限性

有几项局限性值得讨论。首先，该方法目前可处理的规模上限为 20 个节点；超过这一规模后，成功率会降至 65% 以下。要扩展到更大的图，可能需要采用层次分解或粗化策略，在降低维度的同时保留拓扑结构。

其次，约束权重（λ_{data}、λ_{phys}、λ_{logic}）的选择仍取决于具体问题。虽然 CMA-ES 会自动优化这些权重，但必须仔细设计适应度函数，以反映任务优先级。适应度函数设定不当，可能导致退化解：虽然这些解能以简单方式满足约束，却忽略了语义意义。

第三，当前实现假设所有约束均可微，或可通过可微代理函数进行近似。整数赋值或组合结构等离散约束，需要通过松弛或舍入过程进行额外处理。未来工作可以探索将混合整数优化技术集成到 ONN 框架中。

第四，该方法目前尚未处理时间动态或在线适应。若要扩展光学神经网络以处理时变约束或流数据，则需要建立增量式图更新和约束重新投影机制，并可借鉴持续学习和记忆增强架构领域的最新进展。

D. 未来方向

这项工作带来了若干未来研究方向：

层次化 ONN： 将大型图分解为层次化的簇，由各簇的局部 ONN 进行管理，并通过元级优化器处理簇间协调，这或许能将规模扩展到二十个以上的节点。

自适应约束加权： 与其通过 CMA-ES 优化固定权重，不如根据约束违反程度或收敛速度动态调整权重，这或许能提高效率并降低对超参数的敏感性。

与视觉与语言集成： 将 ONN 与感知前端（如目标检测器、场景解析器）及语言接口（如自然语言约束规范）连接起来，将有助于构建用于具身推理的端到端神经符号系统。

理论分析： 为一般约束类别下的 LOGOS 投影建立收敛保证，或刻画多目标优化问题的帕累托前沿，将为实证观察提供理论依据。

现实世界应用： 在机器人规划、知识图谱补全或科学模拟等领域部署光学神经网络，有助于验证该方法在合成基准之外的有效性，并揭示特定领域的挑战。

E. 结论

我们提出了一种增强型本体神经网络框架，将 Forman-Ricci 曲率、深度增量学习和 CMA-ES优化结合起来，用于具备约束感知能力的语义推理。该方法展现出种子无关收敛和良好的扩展特性，在六节点问题的二十次随机初始化中，实现了能量均值降至 1.15。消融研究证实，拓扑条件化与梯度稳定化协同作用，从而带来稳健的性能。

尽管在可扩展性和约束规范方面仍存在局限性，但结果表明，拓扑结构可以为神经符号系统中的基于梯度的优化提供指导，同时不牺牲可解释性或计算效率。未来的工作将着重于层次化扩展、自适应加权以及现实环境中的验证，以进一步评估该方法的实际效用。

致谢

本研究在崇实大学开展。作者感谢审稿人提出的建设性意见。

参考文献

[1] J. Oh，《本体神经网络与 ORTSF：拓扑推理和延迟鲁棒控制框架》，*arXiv* 预印本 *arXiv:2506.19277*，2025年9月，版本 3。[2] Y. Zhang、Y. Liu、M. Wang 和 Q. Gu，《深度增量学习》，*arXiv* 预印本，2026年1月，链接：https://github.com/yifanzhang-pro/deep-delta-learning。[3] N. Hansen 和 A. Ostermeier，《进化策略中的完全去随机化自适应》，进化计算，第 9 卷，第 2 期，第 159–195 页，2001年。[4] A. d’Avila Garcez、M. Gori、L. C. Lamb、L. Serafini、M. Spranger 和 S. N. Tran，《神经符号人工智能：第三次浪潮》，人工智能评论，2022年。[5] L. Serafini 和 A. d’Avila Garcez，《逻辑张量网络：基于数据和知识的深度学习与逻辑推理》，*arXiv* 预印本 *arXiv:1606.04422*，2016年。[6] B. Amos 和 J. Z. Kolter，《Optnet：作为神经网络层的可微优化》，国际机器学习会议（*ICML*），第 136–145 页，2017年。[7] A. Hogan 等，《知识图谱》，*ACM* 计算调查，第 54 卷，第 4 期，第 1–37 页，2021年。[8] J. F. Sowa，《语义网络原理：知识表征探索》。Morgan Kaufmann，1991年。[9] A. Bordes、N. Usunier、A. Garc´ıa-Dur´an、J. Weston 和 O. Yakhnenko，《用于建模多关系数据的嵌入转换》，载于《神经信息处理系统进展》，2013年，第 2787–2795 页。[10] N. F. Noy 和 D. L. McGuinness，《本体开发 101：创建首个本体指南》，斯坦福知识系统实验室技术报告 *KSL-01-05*，2001年。[11] G. Carlsson，《拓扑学与数据》，《美国数学学会通报》，第 46 卷，第 2 期，第 255–308 页，2009年。[12] H. Edelsbrunner 和 J. L. Harer，《计算拓扑学：导论》。美国数学学会，2010年。[13] R. Forman，《胞腔复形与组合里奇曲率的 Bochner 方法》，《离散与计算几何》，第 29 卷，第 3 期，第 323–374 页，2003年。[14] C.-C. Ni、Y.-Y. Lin、J. Gao、X. D. Gu 和 E. Saucan，《互联网拓扑的里奇曲率》，《科学报告》，第 5 卷，第 8035 页，2019年。[15] K. He、X. Zhang、S. Ren 和 J. Sun，《用于图像识别的深度残差学习》，载于*IEEE*计算机视觉与模式识别会议（*CVPR*），2016年，第 770–778 页。[16] F. Rossi、P. van Beek 和 T. Walsh，《约束编程手册》。Elsevier，2006年。

[17] D. P. Bertsekas, 《非线性规划》, 第 2 版。Athena Scientific, 1999年。[18] J. B. Rosen, 《非线性规划的梯度投影法。第一部分：线性约束》, 工业与应用数学学会期刊, 第 8 卷, 第 1 期, 第 181–217 页, 1960年。[19] K. Deb, 《使用进化算法进行多目标优化》。John Wiley & Sons, 2001年。[20] B. Zoph 和 Q. V. Le, 《结合强化学习的神经架构搜索》, 载于国际学习表征会议（*ICLR*）, 2017年。[21] T. N. Kipf 和 M. Welling, 《利用图卷积网络进行半监督分类》, 载于国际学习表征会议（*ICLR*）, 2017年。[22] P. Veli ˇckovi ´c、G. Cucurull、A. Casanova、A. Romero、P. Li`o 和 Y. Bengio, 《图注意力网络》, 载于国际学习表征会议（*ICLR*）, 2018年。[23] J. Gilmer、S. S. Schoenholz、P. F. Riley、O. Vinyals 和 G. E. Dahl, 《用于量子化学的神经消息传递》, 载于国际机器学习会议（*ICML*）, 2017年, 第 1263–1272 页。[24] D. Xu 、 Y. Zhu 、 C. B. Choy 和 L. Fei-Fei, 《通过迭代消息传递生成场景图》, 载于*IEEE*计算机视觉与模式识别会议（*CVPR*）, 2017年, 第 5410–5419 页。