

# 基于知识图谱的空间语义链路预测

孟繁琛

(大连海事大学 信息科学技术学院, 辽宁省大连市 中国 116026)

**摘 要** 知识图嵌入技术是一种有效的知识图缺失链预测技术, 其目的是将实体和关系表示为低维向量(或矩阵、张量等)。现有的知识图嵌入模型主要集中在对称/反对称、反转和合成等关系模式的建模上。然而, 现有的许多方法都忽略了现实中常见的语义层次结构, 且不能够对多元关系进行有效建模。为了解决这一问题, 我们提出了一种新的知识图嵌入模型, 即空间语义知识图嵌入模型(SSKE), 它将实体映射到三维空间, 并将关系定义为从头实体到尾实体的旋转。利用三维空间中旋转的非交换合成性质, SSE 可以自然地保持关系合成的顺序。

**关键词** 知识图嵌入; 语义感知; 链路预测; 关系模式; 层级感知

中图分类号 \*\*\*\*\* DOI 号 \*\*\*\*\*

## Spatial semantic link prediction based on Knowledge Map

Meng Fanchen

(School of Information Science and Technology, Dalian maritime university, Liaoning Dalian 116026 China)

**Abstract** Knowledge graph embedding technology is an effective knowledge graph missing chain prediction technology. Its purpose is to represent entities and relationships as low-dimensional vectors (or matrices, tensors, etc.). The existing knowledge graph embedding models mainly focus on the modeling of relational patterns such as symmetry / antisymmetry, inversion and synthesis. However, many existing methods ignore the common semantic hierarchy in reality, and can not effectively model multivariate relationships. In order to solve this problem, we propose a new knowledge graph embedding model, namely spatial semantic knowledge graph embedding model (SSKE), which maps entities to three-dimensional space and defines the relationship as the rotation from head entity to tail entity. Using the non commutative synthesis property of rotation in three-dimensional space, SSE can naturally maintain the order of relationship synthesis.

**Key words** knowledge graph embedding; semantic perception; link prediction; relational model; level perception

## 1 介绍

知识图(KGS)由三元组组成, 每个三元组(head, relation, tail)由两个实体和它们之间的关系组成, 例如, (David, Wife, Sophia)。像 Freebase<sup>[1]</sup>和 Wordnet<sup>[2]</sup>这样的大规模 KGS 对许多应用都很有用, 例如问答和关系抽取。然而, 一个主要问题是, 这些 KG 是不完整的, 这可能会对下游的任务产生不利影响。因此, KGS 的完备性引起了人们的极大关注。KGS 补全, 也被称为链接预测, 目的是预测 KGS 中的缺失环节, 即回答查询: head→relation→? 、 ?→relation→tail 或者

head→?→tail。

大多数知识图的嵌入方法通过不同的形式(向量、矩阵、张量)将实体和关系映射到低维空间。此外, 强大的知识图嵌入模型能够反映实体之间的相似性和相关性, 这都会有助于知识图补全任务的完成。TransE<sup>[3]</sup>作为知识图嵌入模型之一, 它是基于距离函数  $\mathbf{h} + \mathbf{r} \approx \mathbf{t}$ , 是所有翻译模型的基础。TransE 模型虽然具有计算复杂度低、参数少的优点, 但在处理 1-to-N、N-to-1、N-to-N 等复杂关系时效果不佳。在 TransE 之后, 提出了 TransH<sup>[4]</sup>, TransR<sup>[5]</sup>和 TransA<sup>[6]</sup>来优化 TransE。语义匹配模式是通过对实体和关系的潜在语义进行匹配, 判断一个三元组(h, r, t)是否为真。目前, 随着深度学习的不断发展, 许

多神经网络方法被用来从知识图中学习更多的非线性信息,包括 ConvE<sup>[7]</sup>, ConvKB<sup>[8]</sup>, CapsE<sup>[9]</sup>等。

本文提出了一种新的知识图嵌入模型——空间语义嵌入模型(SSE)。为了对语义层次结构建模, SSE 需要区分两个类别的实体:

- (a) 在层次结构中不同层级的实体;
- (b) 在层次结构中同一层级的实体。

由于具有层次结构属性的实体可以被视为一棵树,我们可以使用节点(实体)的深度来为层次结构的不同级别建模。因此,我们使用模量信息对(a)类中的实体进行建模,因为模量的大小可以反映深度。在上述设置下,类别(b)中的实体将具有大致相同的模数,这很难区分。由于同一个圆上的点可能具有不同的阶段,我们使用相位信息和空间位置对类别(b)中的实体进行建模。结合模量信息、相位信息以及空间位置信息, SSE 将实体映射到空间坐标中,其中向量的模对应模量信息,向量平行投影直线的斜率对应相位信息,向量垂直投影的长度对应空间位置信息。

## 2 相关工作

### 2.1 链路预测

我们将链接预测模型大致分为两类: 平移距离模型和语义匹配模型。前者使用距离为基础的评分函数, 后者使用相似性为基础的评分函数。

#### 2.1.1 翻译距离模型

TransE<sup>[3]</sup>是这一类中最具代表性的模型。给定一个三元组(head, relation, tail), 假定对应的实体和关系嵌入满足  $\text{head} + \text{relation} \approx \text{tail}$ 。然而, TransE 在处理 1-N, N-1 和 N-N 关系时有局限性。克服这个问题的一个方法是允许实体在给定不同关系时使用不同的表示。为了实现这个目标, TransH<sup>[4]</sup>引入了特定于关系的超平面, 而 TrantR<sup>[5]</sup>引入了特定于关系的空间。另一种方法是放松要求  $\text{head} + \text{relation} \approx \text{tail}$ 。TransM<sup>[10]</sup>通过给 1-N, N-1 和 N-N 关系赋予较低的权重来达到这个目的。ManifoldE<sup>[11]</sup>将  $\text{head} + \text{relation} \approx \text{tail}$  放松到  $\|\text{head} + \text{relation} - \text{tail}\|_2^2 \approx \theta^2$ , 这样候选实体就不再位于某个精确点上, 而是位于一个流形上。受各种关系模式(如对称/反对称、逆和组合)建模的启发, RotatE<sup>[12]</sup>将每个关系定义为复空间中从头实体到尾实体的旋转。HAKE<sup>[13]</sup>将实体映射到极坐标系中, 以建立语义层次结构模型。它使用模部分对层次结

构的不同层次的实体进行建模, 使用相位部分对层次结构的同一层次的实体进行建模。

#### 2.1.2 语义匹配模型

RESICAL<sup>[14]</sup>用方形矩阵表示每个关系, 用向量表示每个实体。然后定义了一个双线性得分函数来捕捉实体和关系之间的交互。RESICAL 的缺点是关系矩阵参数较多, 容易导致模型过拟合。DistMult<sup>[15]</sup>通过将关系矩阵限制为对角矩阵来简化 RESICAL。但是, DistMult 只能对对称关系进行建模。Complex<sup>[16]</sup>通过引入复值嵌入来扩展 DistMult, 以便更好地建模非对称关系。QuatE<sup>[17]</sup>作为 DistMult 和 Complex 的推广, 利用四元数表示法来实现实体和关系之间的丰富交互。DihEdral<sup>[18]</sup>将关系矩阵限制为块对角矩阵, 并用二面体群中的一个元素表示每个块。ConvE<sup>[7]</sup>使用多层卷积架构来定义分数函数。SACN<sup>[19]</sup>通过引入加权的图卷积网络作为编码器来利用图的结构来改进 ConvE。InteractE<sup>[20]</sup>使用三种操作: 特征置换、方格特征整形和循环卷积来增强 ConvE 的表达能力。

### 2.2 建模语义结构的方法

另一个相关问题是如何对知识图中的层次结构建模。最近的一些研究从不同的角度来考虑这个问题。李等<sup>[21]</sup>将实体和类别联合嵌入语义空间, 设计了概念分类和无数据层次分类任务的模型。张等人<sup>[22]</sup>使用聚类算法对层次关系结构建模。谢、刘和孙等人<sup>[23]</sup>提出了将类型信息嵌入到知识图嵌入中的 TKRL<sup>[23]</sup>。也就是说, TKRL 需要实体的额外层次类型信息。

## 3 SSKE 的提出

在这一节, 我们介绍我们提出的模型 SSE。我们首先介绍了两类实体, 它们反映了知识图中的语义层次。然后, 我们介绍我们提出的可以建模这两类实体的模型 SSE。

### 3.1 两类实体

为了对知识图的语义层次结构进行建模, 知识图嵌入模型必须能够区分以下两类实体。

- (a) 不同层级的实体。例如, “哺乳动物”和“狗”, “跑”和“移动”。
- (b) 相同层级的实体。例如“玫瑰”和“牡丹”、“卡车”和“货车”。

### 3.2 空间语义知识图嵌入模型

为了对上述两类实体进行建模，我们提出了一种空间语义知识图嵌入模型——SSKE 模型。SSKE 包括模量、相位以及空间位置信息三部分，分别对两个不同类别的实体进行建模。为了区分不同部分的嵌入，我们用  $e_m$  ( $e$  可以是  $h$  或  $t$ ) 和  $r_m$  表示模量部分的实体嵌入和关系嵌入，用  $e_p$  ( $e$  可以是  $h$  或  $t$ ) 和  $r_p$  表示相位部分的实体嵌入和关系嵌入，用  $e_s$  ( $e$  可以是  $h$  或  $t$ ) 和  $r_s$  表示空间位置部分的实体嵌入和关系嵌入。

### 3.2.1 模量部分

目的是为不同层次的实体建模。由于具有层次属性的实体可以被视为一棵树，我们可以使用节点(实体)的深度来为层次结构的不同层级建模。因此，我们使用模量信息对类别(a)中的实体建模，因为模量可以反映树中的深度。具体来说，我们把  $h_m$  和  $t_m$  的每个条目，也就是  $[h_m]_i$  和  $[t_m]_i$  看作模，把  $r_m$  的每个条目，也就是  $[r_m]_i$ ，看作两个模之间的缩放变换。我们可以使用如下公式表示模量部分：

$$h_m \circ r_m = t_m, \text{ where } h_m, t_m \in \mathbb{R}^k, \text{ and } r_m \in \mathbb{R}_+^k$$

相应的距离函数如下：

$$d_{r,m}(h_m, t_m) = \|h_m \circ r_m - t_m\|_2$$

在此处我们允许实体嵌入的条目为负，限制关系嵌入的条目为正。因为实体嵌入的符号可以帮助我们预测两个实体间是否存在关系。

另外，我们希望在层级结构中较高级别的实体具有更小的模量，因为这些实体更接近树根。如果我们只使用模量部分来嵌入知识图，那么类别 (b) 中的实体将具有相同的模量，这将会很难区分这些实体，因此需要一个新的模块来建模类别 (b) 中的实体。

### 3.2.2 相位部分

目的是在语义层次结构的同一级别为实体建模。由于同一圆上的点(即具有相同的模)可以有不同的相位，我们使用相位信息来区分类别(b)中的实体。具体来说，我们把  $h_p$  和  $t_p$  的每个条目，即  $[h_p]_i$  和  $[t_p]_i$  看作一个相位，把  $r_p$  的每个条目，即  $[r_p]_i$ ，看作一个相变。我们将相位部分表示如下：

$$(h_p + r_p) \bmod 2\pi = t_p, \text{ where } h_p, r_p, t_p \in [0, 2\pi)^k.$$

相应的距离函数表示为：

$$d_{r,p}(h_p, t_p) = \|\sin((h_p + r_p - t_p)/2)\|_1$$

其中  $\sin()$  表示对每一个输入元素进行的函数运算。在此我们使用  $\sin()$  函数来测量距离是因为相位信息

具有周期性。

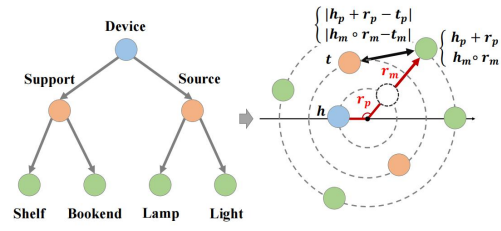


图 1 SSKE 模量及相位图示：实体距离原点的距离表示模量，向量水平投影与 x 轴夹角表示相位。

### 3.2.3 空间位置部分

目的是为相同层次的近似实体建模。由于具有相同层级的实体间会存在语义相似性，我们可以使用节点(实体)的空间位置来为层次结构中相同层级的近似实体建模。因此，我们使用空间位置信息对类别(b)中的近似实体建模。具体来说，我们把  $h_s$  和  $t_s$  的每个条目，也就是  $[h_s]_i$  和  $[t_s]_i$  看作空间位置信息，把  $r_s$  的每个条目，也就是  $[r_s]_i$ ，看作两个模之间的缩放变换。

### 3.3 损失函数

我们采用自对抗负采样最小化损失函数：

$$\begin{aligned} L = & -\log \sigma(\gamma - d_r(h, t)) \\ & - \sum_{i=1}^n p(h'_i, r_i, t'_i) \log \sigma(d_r(h'_i, t'_i) - \gamma) \\ & + \lambda (\|h_s\|_2^2 + \|t_s\|_2^2) \end{aligned}$$

其中  $\gamma$  是固定边际， $\sigma$  是激活函数， $\lambda$  是自学习权重参数， $(h'_i, r_i, t'_i)$  是第  $i$  个负三元组。

$$p(h'_j, r, t'_j | \{(h_i, r_i, t_i)\}) = \frac{\exp \alpha f_r(h'_j, t'_j)}{\sum_i \exp \alpha f_r(h'_i, t'_i)}$$

是负样本三元组的概率分布，其中  $\alpha$  是样本温度。

## 4 与其他模型的比较

我们将我们的模型与 TKRL 模型进行了比较，后者也旨在建模层次结构。关于 SSKE 和 TKRL 之间的差异，请参考相关工作部分。TKRL 的最佳性能是由 WHE+STC 版本获得的。结果表明，SSKE 明显优于 TKRL，但它不需要额外的信息。

## 5 总结

为了对知识图中的语义层次结构进行建模，我们提出了一种新的空间语义知识图嵌入模型

—SSKE, 该模型将实体映射到空间坐标系中。实验结果表明, 我们提出的链路预测方法在基准数据集上的性能明显优于现有的几种最新方法。进一步的研究表明, SSKE 能够在语义层次结构中对不同层次和相同层次的实体进行建模。

## 参考文献

- [1] Kurt D. Bollacker, Colin Evans, Praveen Paritosh, Tim Sturge, and Jamie Taylor. 2008. Freebase: a collaboratively created graph database for structuring human knowledge. In *SIGMOD*. 1247–1250.
- [2] George A. Miller. 1995. WordNet: A Lexical Database for English. *Commun. ACM* 38, 11 (1995), 39–41.
- [3] A. Bordes, N. Usunier, A. García-Durán, J. Weston, O. Yakhnenko, Translating embeddings for modeling multi-relational data, in: C.J.C. Burges, L. Bottou, Z. Ghahramani, K.Q. Weinberger (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems 26: 27th Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2013. Proceedings of a meeting held December 5-8, 2013, Lake Tahoe, Nevada, United States, 2013*, pp. 2787–2795. URL: <http://papers.nips.cc/paper/5071-translating-embeddings-for-modeling-multi-relational-data>.
- [4] Z. Wang, J. Zhang, J. Feng, Z. Chen, Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes, in: C.E. Brodley, P. Stone (Eds.), *Proceedings of the TwentyEighth AAAI Conference on Artificial Intelligence*, July 27–31, 2014, Québec City, Québec, Canada, AAAI Press, 2014, pp. 1112–1119. URL: <http://www.aaai.org/ocs/index.php/AAAI/AAAI14/paper/view/8531>.
- [5] Y. Lin, Z. Liu, M. Sun, Y. Liu, X. Zhu, Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion, in: B. Bonet, S. Koenig (Eds.), *Proceedings of the Twenty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence*, January 25-30, 2015, Austin, Texas, USA, AAAI Press, 2015, pp. 2181–2187. URL: <http://www.aaai.org/ocs/index.php/AAAI/AAAI15/paper/view/9571>.
- [6] H. Xiao, M. Huang, Y. Hao, X. Zhu, Transa: An adaptive approach for knowledge graph embedding, *CoRR* abs/1509.05490. arXiv:1509.05490. URL: <http://arxiv.org/abs/1509.05490>.
- [7] T. Dettmers, P. Minervini, P. Stenetorp, S. Riedel, Convolutional 2d knowledge graph embeddings, in: S.A. McIlraith, K.Q. Weinberger (Eds.), *Proceedings of the Thirty-Second AAAI Conference on Artificial Intelligence, (AAAI-18), the 30th innovative Applications of Artificial Intelligence (IAAI-18), and the 8th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence (EAAI-18)*, New Orleans, Louisiana, USA, February 2–7, 2018, AAAI Press, 2018, pp. 1811–1818. URL: <https://www.aaai.org/ocs/index.php/AAAI/AAAI18/paper/view/17366>.
- [8] D.Q. Nguyen, T.D. Nguyen, D.Q. Nguyen, D.Q. Phung, A novel embedding model for knowledge base completion based on convolutional neural network, in: M. A. Walker, H. Ji, A. Stent (Eds.), *Proceedings of the 2018 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, NAACL-HLT, New Orleans, Louisiana, USA, June 1–6, 2018, Volume 2 (Short Papers)*, Association for Computational Linguistics, 2018, pp. 327–333. doi:10.18653/v1/n18-2053. URL: <https://doi.org/10.18653/v1/n18-2053>.
- [9] D.Q. Nguyen, T. Vu, T.D. Nguyen, D.Q. Nguyen, D.Q. Phung, A capsule networkbased embedding model for knowledge graph completion and search personalization, in: J. Burstein, C. Doran, T. Solorio (Eds.), *Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, NAACL-HLT 2019, Minneapolis, MN, USA, June 2–7, 2019, Volume 1 (Long and Short Papers)*, Association for Computational Linguistics, 2019, pp. 2180–2189. doi:10.18653/v1/n19-1226. URL: <https://doi.org/10.18653/v1/n19-1226>.
- [10] Miao Fan, Qiang Zhou, Emily Chang, and Thomas Fang Zheng. 2014. Transitionbased Knowledge Graph Embedding with Relational Mapping Properties. In *PACLIC*. 328–337.
- [11] Han Xiao, Minlie Huang, and Xiaoyan Zhu. 2016. From One Point to a Manifold: Knowledge Graph Embedding for Precise Link Prediction. In *IJCAI*. 1315–1321.
- [12] Zhiqing Sun, Zhi-Hong Deng, Jian-Yun Nie, and Jian Tang. 2019. RotatE: Knowledge Graph Embedding by Relational Rotation in Complex Space. In *ICLR*.
- [13] Zhanqiu Zhang, Jianyu Cai, Yongdong Zhang, and Jie Wang. 2019. Learning Hierarchy-Aware Knowledge Graph Embeddings for Link Prediction. arXiv preprint arXiv:1911.09419 (2019).
- [14] Maximilian Nickel, Volker Tresp, and Hans-Peter Kriegel. 2011. A Three-Way Model for Collective Learning on Multi-Relational Data. In *ICML*. 809–816.
- [15] Bishan Yang, Wen-tau Yih, Xiaodong He, Jianfeng Gao, and Li Deng. 2015. Embedding Entities and Relations for Learning and Inference in Knowledge Bases. In *ICLR*.
- [16] Théo Trouillon, Johannes Welbl, Sebastian Riedel, Éric Gaussier, and Guillaume Bouchard. 2016. Complex Embeddings for Simple Link Prediction. In *ICML*. 2071–2080.
- [17] Shuai Zhang, Yi Tay, Lina Yao, and Qi Liu. 2019. Quaternion Knowledge Graph Embeddings. In *NeurIPS*. 2731–2741.

- [18] Canran Xu and Ruijiang Li. 2019. Relation Embedding with Dihedral Group in Knowledge Graph. In ACL. 263–272.
- [19] Chao Shang, Yun Tang, Jing Huang, Jinbo Bi, Xiaodong He, and Bowen Zhou. 2019. End-to-end structure-aware convolutional networks for knowledge base completion. In AAAI. 3060–3067.
- [20] Shikhar Vashishth, Soumya Sanyal, Vikram Nitin, Nilesh Agrawal, and Partha Talukdar. 2019. InteractE: Improving Convolution-based Knowledge Graph Embeddings by Increasing Feature Interactions. arXiv preprint arXiv:1911.00219 (2019).
- [21] Li, Y.; Zheng, R.; Tian, T.; Hu, Z.; Iyer, R.; and Sycara, K. 2016. Joint embedding of hierarchical categories and entities for concept categorization and dataless classification. In COLING.
- [22] Zhang, Z.; Zhuang, F.; Qu, M.; Lin, F.; and He, Q. 2018. Knowledge graph embedding with hierarchical relation structure. In EMNLP.
- [23] Xie, R.; Liu, Z.; and Sun, M. 2016. Representation learning of knowledge graphs with hierarchical types. In IJCAI.