

# ROTATE: KNOWLEDGE GRAPH EMBEDDING BY RELATIONAL ROTATION IN COMPLEX SPACE

## 摘要

介绍一种新的模型可以，对多种关系模式进行建模。包括 对称/非对称、倒置 和 组合  
具体的，RotatE 把每种关系定义为一个从原实体到目标实体在复数空间的旋转  
同时，我们也介绍一个自我对立的产生负样本的技术，来更是模型的训练更加有效率和有效性。

## 介绍

对于低维表示实体和实体预测，现在的方法有一种大体上的直觉是对图谱中连接的模式进行建模和推断。许多目前的模型都在努力地对其中一或几个的关系模式进行隐式或显示的建模。

但现在没有任何一个方法可以对所有的关系模式进行建模。因此我们提出RotatE来进行知识图谱的嵌入。

RotatE 基于 欧拉定理  $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ : 一个单一的复数可以别看作在复数平面上的旋转。

RotatE 把实体和关系映射到复数空间然后定义每种关系是原实体到目标实体的转换。

- 一个关系是对称的当且仅当r的嵌入的每一个元素  $r_i$  都满足  $r_i = e^{0/i\pi} = \pm 1$
- 两个关系是倒置的当且仅当  $r_1 = \overline{r_2}$   $r_1$ 和 $r_2$ 是共轭的
- 一个关系  $r_3 = e^{i\theta_3}$  是由其他两个关系  $r_1 = e^{i\theta_1}$  和  $r_2 = e^{i\theta_2}$  组合成的当且仅当  $r_3 = r_1 \circ r_2$   $i.e. \theta_3 = \theta_1 + \theta_2$

同时由于RotatE在时间和内存上是线性的，所以它可以应对很大的知识图谱

## 相关工作

- TransE 对倒置和组合建模
- DisMult 对 对称性建模
- ComplEX 对 非对称建模
- TorusE 基于李群 一种特殊的RotatE
- 显示建模关系路径的模型

## RotatE

**Definition 1.** A relation  $r$  is **symmetric** (**antisymmetric**) if  $\forall x, y$

$$r(x, y) \Rightarrow r(y, x) \quad (r(x, y) \Rightarrow \neg r(y, x))$$

A clause with such form is a **symmetry** (**antisymmetry**) pattern.

**Definition 2.** Relation  $r_1$  is **inverse** to relation  $r_2$  if  $\forall x, y$

$$r_2(x, y) \Rightarrow r_1(y, x)$$

A clause with such form is a **inversion** pattern.

**Definition 3.** Relation  $r_1$  is **composed** of relation  $r_2$  and relation  $r_3$  if  $\forall x, y, z$

$$r_2(x, y) \wedge r_3(y, z) \Rightarrow r_1(x, z)$$

A clause with such form is a **composition** pattern.

#####

$$\mathbf{t} = \mathbf{h} \circ \mathbf{r}, \quad \text{where } |r_i| = 1,$$

◦ 是哈德马积（元素相乘）  $t_i = h_i r_i, r \in \mathbb{C}^k$  i.e.  $r_i = \mathbb{C}$

距离函数：

$$d_r(\mathbf{h}, \mathbf{t}) = \|\mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t}\|$$

从表2可以看出，TransE能够推断和建模除对称模式之外的所有其他关系模式。原因是，在TransE中，任何对称关系都将由一个0平移向量表示。因此，这将推动具有对称关系的实体在嵌入空间中彼此接近。旋转解决了这个问题，并且能够建模和推断对称模式。满足  $r_i = \pm 1$  的任意向量  $r$  可用于表示旋转中的对称关系，从而可区分具有对称关系的实体。不同的对称关系也可以用不同的嵌入向量表示。

我们还提出了一种得到负样本的新方法。然后，负抽样损失对负三元组进行均匀抽样。由于许多样本在训练过程中明显是错误的，因此这种统一的负抽样存在没有效率的问题，这并不能提供任何有意义的信息。因此，我们提出了一种自对抗负抽样的方法，根据当前嵌入模型对负三元组样本进行抽样。具体来说，我们从以下分布中提取负三倍：

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

where  $\alpha$  is the temperature of sampling.

此外，由于采样过程可能成本高昂，因此我们将上述概率视为负样本的权重。因此，自我对抗训练的最终负抽样损失形式如下：

$$L = -\log \sigma(\gamma - d_r(\mathbf{h}, \mathbf{t})) - \sum_{i=1}^n p(h'_i, r, t'_i) \log \sigma(d_r(\mathbf{h}'_i, \mathbf{t}'_i) - \gamma)$$

## 实验

数据集：

- FB15K 对称/非对称 和 倒置
- WN18 对称/非对称 和 倒置
- FB15K - 237 对称/非对称 组合
- WN18RR 对称/非对称 和组合

## Baseline :

$$|h_i| = |t_i| = C$$

$$\text{距离函数} : 2C \left\| \sin \frac{\theta_h + \theta_r - \theta_t}{2} \right\|$$

通过这个我们可以分析没有模数信息的RotatE如何工作。

	FB15k		FB15k-237		Countries (AUC-ROC)		
	MRR	H@10	MRR	H@10	S1	S2	S3
TransE	.735	.871	.332	.531	<b>1.00 ± 0.00</b>	<b>1.00 ± 0.00</b>	<b>0.96 ± 0.00</b>
ComplEx	.780	<b>.890</b>	.319	.509	<b>1.00 ± 0.00</b>	0.98 ± 0.00	0.88 ± 0.01
RotatE	<b>.797</b>	.884	<b>.338</b>	<b>.533</b>	<b>1.00 ± 0.00</b>	<b>1.00 ± 0.00</b>	0.95 ± 0.00

Table 8: Results of TransE and ComplEx with self-adversarial sampling and negative sampling loss on FB15k, FB15k-237 and Countries datasets.

Relation Category	1-to-1	1-to-N	N-to-1	N-to-N	1-to-1	1-to-N	N-to-1	N-to-N
Tasks	Prediction Head (Hits@10)				Prediction Tail (Hits@10)			
TransE	.437	.657	.182	.472	.437	.197	.667	.500
TransH (bern)	.668	.876	.287	.645	.655	.398	.833	.672
KG2E-KL (bern)	.923	.946	.660	.696	.926	.679	.944	.734
TransE	.894	<b>.972</b>	.567	.880	.879	.671	<b>.964</b>	.910
ComplEx	<b>.939</b>	.969	<b>.692</b>	<b>.893</b>	<b>.938</b>	<b>.823</b>	.952	.910
RotatE	.922	.967	.602	<b>.893</b>	.923	.713	.961	<b>.922</b>
Tasks	Prediction Head (MRR)				Prediction Tail (MRR)			
TransE	.701	.912	.424	.737	.701	.561	.894	.761
ComplEx	.832	.914	<b>.543</b>	.787	.826	<b>.661</b>	.869	.800
RotatE	<b>.878</b>	<b>.934</b>	.465	<b>.803</b>	<b>.872</b>	.611	<b>.909</b>	<b>.832</b>

Table 9: Experimental results on FB15k by relation category. The first three rows are taken from (He et al., 2015). The rest of the results are from RotatE trained with the self-adversarial negative sampling technique.