

图神经网络应用于知识图谱推理的研究综述

孙水发^{1,2},李小龙^{1,3},李伟生⁴,雷大江⁴,李思慧^{1,2},杨 柳⁵,吴义熔⁶⁺

- 1. 智慧医疗宜昌市重点实验室,湖北 宜昌 443002
- 2. 三峡大学 计算机与信息学院,湖北 宜昌 443002
- 3. 三峡大学 经济与管理学院,湖北 宜昌 443002
- 4. 重庆邮电大学 计算机科学与技术学院,重庆 400065
- 5. 北京师范大学 心理学部,广东 珠海 519087
- 6. 北京师范大学 人文和社会科学高等研究院,广东 珠海 519087
- + 通信作者 E-mail: yrwu@bnu.edu.cn

摘 要:知识推理(KR)作为知识图谱构建的一个重要环节,一直是该领域研究的焦点问题。随着知识图谱应用研究的不断深入和范围的不断扩大,将图神经网络(GNN)应用于知识推理的方法能够在获取知识图谱中实体、关系等语义信息的同时,充分考虑知识图谱的结构信息,使其具备更好的可解释性和更强的推理能力,因此近年来受到广泛关注。首先梳理了知识图谱和知识推理的基本知识及研究现状,简要介绍了基于逻辑规则、基于表示学习、基于神经网络和基于图神经网络的知识推理的优势与不足;其次全面总结了基于图神经网络的知识推理最新进展,将基于图神经网络的知识推理按照基于递归图神经网络(RecGNN)、卷积图神经网络(ConvGNN)、图自编码网络(GAE)和时空图神经网络(STGNN)的知识推理进行分类,对各类典型网络模型进行了介绍和对比分析;然后介绍了基于图神经网络的知识推理在医学、智能制造、军事、交通等领域的应用;最后提出了基于图神经网络的知识推理的未来研究方向,并对这个快速增长领域中的各方向研究进行了展望。

关键词:知识图谱;知识推理(KR);图神经网络(GNN);语义信息;结构信息

文献标志码:A 中图分类号:TP391

Review of Graph Neural Networks Applied to Knowledge Graph Reasoning

SUN Shuifa^{1,2}, LI Xiaolong^{1,3}, LI Weisheng⁴, LEI Dajiang⁴, LI Sihui^{1,2}, YANG Liu⁵, WU Yirong⁶⁺

- 1. Yichang Key Laboratory of Intelligent Medicine, Yichang, Hubei 443002, China
- 2. College of Computer and Information Technology, China Three Gorges University, Yichang, Hubei 443002, China
- 3. College of Economics and Management, China Three Gorges University, Yichang, Hubei 443002, China
- College of Computer Science and Technology, Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China
- 5. Faculty of Psychology, Beijing Normal University, Zhuhai, Guangdong 519087, China
- Institute of Advanced Studies in Humanities and Social Sciences, Beijing Normal University, Zhuhai, Guangdong 519087, China

Abstract: As an important element of knowledge graph construction, knowledge reasoning (KR) has always been a hot topic of research. With the deepening of knowledge graph application research and the expanding of its scope,

基金项目:国家社会科学基金(20BTQ066)。

This work was supported by the National Social Science Foundation of China (20BTQ066).

收稿日期:2022-07-18 修回日期:2022-09-16

graph neural network (GNN) based KR methods have received extensive attention due to their capability of obtaining semantic information such as entities and relationships in knowledge graph, high interpretability, and strong reasoning ability. In this paper, firstly, basic knowledge and research status of knowledge graph and KR are summarized. The advantages and disadvantages of KR approaches based on logic rules, representation learning, neural network and graph neural network are briefly introduced. Secondly, the latest progress in KR based on GNN is comprehensively summarized. GNN-based KR methods are categorized into knowledge reasoning based on recurrent graph neural networks (RecGNN), convolutional graph neural networks (ConvGNN), graph auto-encoders (GAE) and spatial-temporal graph neural networks (STGNN). Various typical network models are introduced and compared. Thirdly, this paper introduces the application of KR based on graph neural network in health care, intelligent manufacturing, military, transportation, etc. Finally, the future research directions of GNN-based KR are proposed, and related research in various directions in this rapidly growing field is discussed.

Key words: knowledge graph; knowledge reasoning (KR); graph neural network (GNN); semantic information; structural information

知识图谱(knowledge graph, KG)最早可以追溯 到 Richens^[1]在 1956年提出的以图结构进行知识表示 的语义网络(semantic net)。随后,语义网络经过了 本体论(ontology)、万维网(Web)、语义网(semantic Web)、链接数据(linked data)等一系列发展[2]。直到 2012年,谷歌正式提出知识图谱,并将知识图谱的知 识定义为由实体、关系和语义描述组成的结构化三元 组事实,其中实体代表现实世界中的对象或者是抽象 的概念,关系是定义的类型或者属性,用来表示实体 之间的关联或者实体属性。知识图谱技术已迅速成 为数据挖掘、数据库和人工智能等领域的研究热点[3]。

知识图谱推理(下述简称"知识推理",knowledge graph reasoning)即面向知识图谱的知识推理, 它是从已有的知识出发,推断出新的或未知的知识, 从而拓展、补充和丰富知识库,最早可以追溯到1959 年 Newell 等人^[4]提出的一般问题解决库(general problem solver)。随着知识图谱构建技术的不断发 展、规模的不断扩大、应用场景的不断推广以及深度 学习和自然语言处理技术的不断成熟,知识推理技

术也在不断演变创新,学术界和工业界对知识推理 领域进行了大量深入研究,也有较多关于知识推理 的综述文献。相关综述文献可以归纳为三类(如 表 1): 第一类是关于知识推理任务类的综述文献,包 括"知识图谱补全任务[2,5-9]""知识推理问答任务[10-11]" 和"知识图谱推荐系统任务[12-16]"等,该类综述侧重利 用知识推理方法解决某一类具体任务;第二类是关于 知识图谱领域应用类的综述文献,包括从临床医疗[17-19]、 风险管理[20]、智能制造[21]、安全情报[22]等方面的应用 进行综述,侧重讨论将知识推理方法应用于某一类 领域的研究综述;第三类是知识推理方法类的综述 文献[3,23-29]等,该类综述侧重对知识推理原理的分析, 以及方法的解读、分类和改进。

综上所述,关于知识推理的综述文献要么是基 于知识推理某一类任务或某领域应用类的综述,要 么是基于知识图谱推理方法类的综述。这些综述主 要是基于传统算法、深度学习或强化学习算法的知 识图谱综述,而基于最新相关研究方法的知识推理 类综述文章还相当缺乏。

表1 知识图谱推理综述文献分类(近三年)

Table 1 Classification of knowledge graph reasoning survey articles (the latest three years)

分类	子类	文献及发表年
사는 커피 / 저 사 사	知识图谱补全任务	[2](2021) \[5](2020) \[6](2020) \[7](2020) \[8](2022) \[9](2022)
推理任务类 综述	知识图谱问答任务	[10](2021),[11](2022)
	知识图谱推荐系统任务	[12](2020) [13](2021) [14](2021) [15](2022) [16](2022)
领域应用类 综述	临床医疗、风险管理、智能制 造、安全情报等	[17] (2021),[18] (2022),[19] (2022),[20] (2022),[21] (2021),[22] (2021)
推理方法类综述		[3](2022),[23](2020),[24](2022),[25](2022),[26](2022),[27](2022),[28](2022),[29](2022)

近年来,图神经网络(graph neural network,GNN) 因其对图结构数据强大的编码能力,被广泛用于知识 图谱的构建。知识图谱以节点和边的图结构存储数据,图神经网络可以有效整合知识图谱结构特征及属性特征[30],通过节点的邻域信息聚合并更新节点,利用其强大的信息传播能力学习数据间的语义关系和潜在信息[16],使其可以很好地学习知识图谱中的节点信息、节点间关系信息以及全局结构信息。由于准确地学习知识图谱中有效的语义信息和结构信息是开展知识推理的关键[31],图神经网络在知识图谱数据加载、数据处理,特别是在知识推理上都具有明显的优势。尽管已有诸多的知识推理方法类综述文献,但仍缺乏对将知识推理和图神经网络相结合的研究进行系统梳理和总结的文献。与现有综述类工作相比,本文的创新主要体现在以下三方面:

- (1)对知识推理文献进行了系统的分类整理,类别包括基于逻辑规则、基于表示学习、基于神经网络和基于图神经网络的推理,阐述并比较了不同知识推理方法的原理及优缺点。
- (2)调研了基于图神经网络的知识推理相关文献,总结了基于图神经网络的知识推理的最新研究进展,首次将基于图自编码网络和基于时空图神经网络的知识推理进行了综述分析。
- (3)总结了基于图神经网络的知识推理方法在理 论、算法和应用方面的现状、问题和未来发展前景。

1 知识推理研究进展

1.1 知识图谱

知识图谱是一种比较通用的语义知识的形式化描述框架,用节点表示语义符号,用边表示符号之间的语义关系,形式化的表述用事实三元组(头实体,关系,尾实体)来记录^[32]。相比传统的语义网络,知识图谱因为简易的数据表征方式、多样化的知识表示和多层次的语义表达等优点,使得其能够在数据量大、场景复杂的情况下有效运用于挖掘关联知识和复杂关系。

然而,由于结构化的知识仅仅在特定的时间段内成立,时序信息是非常重要的,而事实的演化也会遵循一个时间序列。时序知识图谱除了描述语义关系外,还需要考虑与时间关系的描述。它不单单是一个"增强型"的开放域知识图谱,而是需要结合业务场景和领域知识,并针对时序知识自身的特点,对知识的概念、实体和关系进行语义化和时空化拓

展。因此,把提供了关于事实何时成立的时序信息 嵌入在事实三元组中,将三元组拓展成时序四元组 (头实体,关系,尾实体,时序),这种带有时序信息的 知识图谱被称为"时序知识图谱(temporal knowledge graph,TKG)^[33]"。而现有的知识图谱研究大多数都 关注的是静态知识图谱。

1.2 知识推理

知识推理就是根据初步构建的知识图谱中实体 和关系所蕴含的信息,利用相关算法,推理出知识图 谱中缺失的实体或者缺失的关系。本质上就是利用 已经存在的知识推出未知的或者新知识的过程[26],其 核心都是针对三元组中的实体和关系进行预测,具 体可分为实体预测和关系预测。实体预测是指利用 已有事实的关系及一个实体,推理出另一个实体并 由此构成完整三元组;关系预测是推理给定的头尾 实体之间的关系[34]。无论实体预测还是关系预测,最 后都转化为选择与给定元素更有可能形成有效三元 组的实体或关系,并将其作为推理预测结果,这种有 效性可以通过规则的方式推理或通过基于特定假设 的得分函数计算得到[35]。从结构上讲,知识推理工作 主要包括局部任务和全局任务。局部任务即节点分 类、链接预测、知识补全等任务;全局任务即子图匹 配、子图分类、图趋势预测等[36]。子图匹配简单来说 就是给定一个查询图Q,在数据图G中找到与图Q结 构相同的图;子图分类是指给定多张图以及每张图 对应的标签,通过学习得出一个由图到相应标签的 图分类模型;图趋势预测是通过现有图谱,有效挖 掘、预测数据中的规律和知识[37]。

目前,关于知识推理方法类的综述较多(如表 1),但大多都只包括了部分推理方法和有限的文献调研,尤其是对于近年兴起的基于图神经网络的知识推理内容缺少梳理,还没有专门基于图神经网络的知识推理的综述。因此,本文总结了当前与知识图谱和图神经网络相关的研究,在 Chen 等人[23]提出的框架和基础上,将知识推理方法分为基于逻辑规则、基于表示学习、基于神经网络和基于图神经网络四大类(如表 2),并对各类知识推理方法进行简明阐述和对比,在此基础上重点总结了基于图神经网络的知识推理的最新研究进展。

(1)基于逻辑规则的推理。早期的知识推理主要是基于逻辑规则的推理,其基本思想是借鉴传统知识推理中的规则推理方法,在知识图谱上运用简单规则或统计特征进行推理。主要包括基于一阶谓

表 2 知识推理方法分类和典型算法

Table 2 Classification of KG reasoning methods and their typical algorithms

分类	子类	典型算法			
	基于一阶谓词逻辑	DL (description logic) ^[38] , FOIL ^[39] , AMIE ^[40]			
基于逻辑规	基于规则	$NELLs^{\scriptscriptstyle [41]}, ProPPR^{\scriptscriptstyle [42]}, MLNs^{\scriptscriptstyle [43]}, ProbKB^{\scriptscriptstyle [44]}, PSL^{\scriptscriptstyle [45]}, HL-MRFs^{\scriptscriptstyle [46]}$			
则的推理	基于本体	$OWL-EL^{[47]}$, $OP^{[48]}$, $KGRL^{[49]}$			
	基于随机游走	$PRA^{[50]}$, $SFE^{[51]}$, $CPRA^{[52]}$			
	基于张量分解	RESCAL ^[53] \RESCAL-Logit ^[54] \PRESCAL ^[55] \MF-TF ^[56]			
基于表示学	基于距离模型	$TransE^{\scriptscriptstyle{[57]}}, TransH^{\scriptscriptstyle{[58]}}, TransR^{\scriptscriptstyle{[59]}}, PTransE^{\scriptscriptstyle{[60]}}, TransD^{\scriptscriptstyle{[61]}}, TranSparse^{\scriptscriptstyle{[62]}}, TransG^{\scriptscriptstyle{[63]}}, Know-Evolve^{\scriptscriptstyle{[64]}}, HyTE^{\scriptscriptstyle{[65]}}, UGKE^{\scriptscriptstyle{[66]}}$			
习的推理	基于语义匹配	$SME^{[67]}$ 、 $DistMult^{[68]}$ 、 $HolE^{[69]}$ 、 $ComplEx^{[70]}$			
	基于多源信息	$KALE^{[71]}$, $TEKE^{[72]}$, $pLogicNet^{[73]}$, $IterE^{[74]}$			
基于神经网	基于卷积神经网络	$DKRL^{\tiny{[75]}},ConMask^{\tiny{[76]}},MT\text{-}KGNN^{\tiny{[77]}},ConvE^{\tiny{[78]}},ConvKG^{\tiny{[79]}}$			
,	基于循环神经网络	$Path-RNN^{[80]}\backslash IRNs^{[81]}\backslash DSKG^{[82]}$			
络的推理	基于强化学习	$DeepPath^{[83]} \backslash MINERVA^{[84]} \backslash MARLPaR^{[85]} \backslash GRL^{[86]} \backslash DAPath^{[87]}$			
	递归图神经网络	$GNN^{[88]}$, $Graph ESN^{[89]}$, $GGNN^{[90]}$, $SSE^{[91]}$			
基于图神经	卷积图神经网络	$GCN^{^{[92]}} \backslash GraphSAGE^{^{[93]}} \backslash RGCN^{^{[94]}} \backslash SACN^{^{[95]}} \backslash CompGCN^{^{[96]}} \backslash GAT^{^{[97]}} \backslash GaAN^{^{[98]}} \backslash GENI^{^{[99]}} \backslash NAKGR^{^{[100]}}$			
网络的推理	图自编码网络	$DNGR^{{\scriptscriptstyle [101]}} \backslash SDNE^{{\scriptscriptstyle [102]}} \backslash GAE^{{\scriptscriptstyle [103]}} \backslash ARGA^{{\scriptscriptstyle [104]}} \backslash DGMG^{{\scriptscriptstyle [105]}} \backslash NetGAN^{{\scriptscriptstyle [106]}} \backslash M2GNN^{{\scriptscriptstyle [107]}}$			
	时空图神经网络	$DCRNN^{_{[108]}},ST\text{-}GCN^{_{[109]}},GWN^{_{[110]}},GMAN^{_{[111]}},TFGAN^{_{[112]}}$			

词逻辑[38-40]、基于规则[41-46]、基于本体[47-49]和基于随机 游走算法[50-52]。基于逻辑规则的推理算法优点是:有 坚实的数学基础,可解释性强;当结合大规模解析语 料库和背景知识时,可模拟人类的推理能力,捕捉知 识图谱中隐藏的语义信息,这使得结合先验知识来 辅助推理成为可能。然而,知识图谱中的节点往往 服从长尾分布,即只有少数实体和关系的出现频率 较高,而大多数实体和关系出现的频率较低,故基于 逻辑规则的推理无法解决数据稀疏性问题,无法很 好处理多跳推理问题,也严重影响推理性能;加之基 于逻辑规则的推理对逻辑背景知识和规则定义的依 赖度较高,因此泛化能力十分有限,并不适用于包含 大量潜在推理模式的大规模知识图谱(表3)。

(2)基于表示学习的推理。基于表示学习推理 算法的中心思想是找到一种映射函数,将语义网络 中的实体、关系和属性映射到低维实值向量空间以 获得分布式表示,进而捕获实体和关系之间的隐式 关联。研究人员提出了大量基于表示学习的推理方 法,包括基于张量分解[53-56]、距离模型[57-66]、语义匹配[67-70] 和多元信息模型[71-74]。表示学习发展迅速,在大规模 知识图的知识表示和推理中显示出巨大的潜力。该 算法可以解决基于逻辑规则算法无法解决的数据稀 疏性问题,具有较强的泛化能力,且能在大规模知识 图谱上取得一定的效果。但也存在实体和关系向量 值缺乏明确的物理意义及可解释性较差的问题。另

外,基于表示学习的推理只考虑满足知识图谱事实 的约束,没有考虑更深层次的成分信息,限制了其推 理能力(表3)。

(3)基于神经网络的推理。深度学习模型的构 建一定程度上参考了人类大脑多层生物神经网络的 结构,模拟人脑通过对低层特征进行组合以形成更 加抽象的高层特征。基于神经网络的推理具备更强 的泛化能力和学习能力,将前文所述的表示学习方 法通过多个非线性表示层组合起来,再对其深度特 征进行表示,进而开展知识推理。主要包括基于卷 积神经网络[75-79]、基于循环神经网络[80-82]和基于强化 学习[83-87]的神经网络。基于神经网络的知识图谱推 理可以把已有的知识图谱中存在的关系保存到神经 网络中。因此,基于神经网络的方法具备更高的学 习能力、推理能力和泛化能力,不仅能够学习海量的 文本语料,缓解大规模知识图谱带来的数据爆炸问 题,并且可以直接建模知识图谱事实元组,降低了计 算难度,甚至还能通过合理设计和使用辅助存储单 元,在一定程度上模拟人脑推理和思考问题的过 程。但随着模型复杂度相对较高,也导致了可解释 性较差的问题(表3)。

(4)基于图神经网络的推理。随着知识图谱规 模的不断扩大和应用场景的不断深化,传统的基于 逻辑规则、基于表示学习的模型始终存在效率低下、 规则覆盖率低的问题,无法满足对大规模知识图谱

表3 各类知识图谱推理方法的原理、优势及不足

T 11 2	D 1	1 4	1 1' 1 4	CIZO	. 41 1
Table 4	Princinies	advantages and	i disadvantages	$\Omega T K I \tau$	reasoning methods
I a o i c J	I I III CIPICS,	au vantages and	i disadvantaços	OZ IZO	reasoning methods

知识图谱推理分类	原理	优势	不足
基于逻辑规则的推理[38-52]	运用简单规则或统计特征进行推理	可解释性强,可以捕捉知识图谱中隐藏的语义信息	无法解决数据稀疏性问题,无法 很好处理多跳推理问题,泛化能 力有限
基于表示学习的推 理 ^[53-74]	将语义网络中的实体、关系和属性映射到低维 实值向量空间以获得分布式表示,进而捕获实 体和关系之间的隐式关联进行推理	解决了数据稀疏性问题,具 有较强的泛化能力	可解释性较差,没有考虑更深层次 的成分信息,推理能力有限
基于神经网络的推 理 ^[75-87]	利用多个非线性表示层组合起来,提取知识图谱的深度特征进行表示,进而开展知识推理	具备更高的学习能力、推理 能力和泛化能力,缓解大规 模知识图谱带来的数据爆炸 问题,降低了计算难度	严重依赖文本的数量及质量;存在稀疏奖励、难以适应动态增长的知识图谱;模型复杂度相对较高,可解释性较差
基于图神经网络的 推理 ^[88-112]	通过图卷积的方式来聚合相邻节点的信息(包括语义信息和结构信息),得到节点表示进行推理	可以同时学习语义信息和结 构信息,推理能力强	模型的复杂度高

进行推理的要求;基于传统神经网络的推理技术则 欠缺解释性。以上大多数模型的核心都在提高图谱 语义信息获取能力,较少考虑图谱的结构信息。

图神经网络的优势在于:一是图神经网络采用图数据的表征方式,这与知识图谱图数据结构相契合;二是图神经网络在信息传播和计算过程中是在已有图的节点和关系上进行优化计算,不再添加新的信息节点;三是虽然图上的计算量也较大,但是相比线性神经网络中的计算传导,这使得计算的传播更具针对性;四是节点上的信息计算方式考虑了该节点的隐层信息和邻节点信息及图数据所携带的结构信息,在预测过程中也更具解释性(表3)。因此,基于图神经网络的知识推理,可以较好地将知识图谱的结构信息同时考虑,尤其是能够捕捉知识图谱的结构信息,已逐渐成为当下主流的研究方法。

2 基于图神经网络的知识推理研究

近年来,人们对深度学习方法在图上的扩展越来越感兴趣。在多方因素的成功推动下,研究人员借鉴了卷积网络、循环网络和深度自动编码器的思想,定义和设计了用于处理图数据的神经网络结构——图神经网络(GNN)。图神经网络是一组复杂的神经网络模型,可用于多类任务^[37]。图1为图神经网络基本模型,主要包括输入层、图卷积层、激活函数层和输出层。图卷积层通过聚合相邻节点的特征信息得到每个节点的隐藏表示,然后通过激活函数层进行非线性变换,得到新的图的表示,通过多次图卷积层和激活函数层,得到每个节点的最终表示。基于图神

经网络的知识推理,可以较好地将知识图谱语义信 息和结构信息同时考虑,尤其是能够捕捉知识图谱 的结构信息,已逐渐成为知识推理热门研究方法。 在输入上,基于图神经网络的知识推理模型将图形 结构和节点内容信息作为输入。在训练框架上,可 以在端到端学习框架内以(半)监督或无监督的方式 训练,具体取决于学习任务和可用的标签信息。在 输出上,可以根据不同推理任务来制定输出机制,通 过激活函数将知识图谱节点的表示作为输出,可以 执行知识推理的节点分类、节点标签预测等节点级 任务(如图1)。同理,将GNN中两个节点的隐藏表 示作为输出,可利用相似性函数或神经网络来预测 边的标签或连接强度等,执行边分类和链接预测等 任务(如图2)。通过在模型中加入多层感知器和 Softmax 层,可处理图分类、子图匹配、图趋势预测等 知识推理全局任务(如图3)。

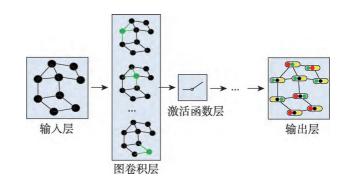


图1 图神经网络模型

Fig.1 Graph neural network model

现有的基于图神经网络的知识推理文献较少, 且一般只概述了递归图神经网络(recurrent graph

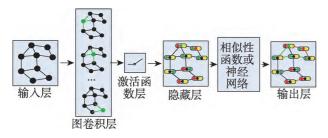


图2 基于图神经网络的知识推理模型(边级任务)

Fig.2 GNN based KG reasoning model (side-level task)

neural networks, RecGNN)和卷积图神经网络(convolutional graph neural networks, ConvGNN)相关内 容,缺少对图自编码网络(graph auto-encoders,GAE) 和时空图神经网络(spatial-temporal graph neural network, STGNN) 在知识推理中应用的归纳。图自编码 网络和时空图神经网络已广泛用于知识推理任务中, 故本文结合最新的算法更新和领域应用,在Wu等人[37]

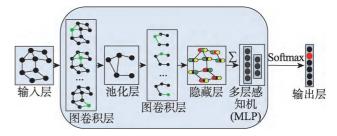


图3 基于图神经网络的知识推理模型(全局任务)

Fig.3 GNN based KG reasoning model (global task)

对图神经网络分类的基础上,将基于图神经网络的知 识推理分为基于递归图神经网络[88-91]、卷积图神经网 络[92-100]、图自编码网络[101-107]和时空图神经网络[108-112]的 知识推理,全面总结了基于图神经网络的知识推理 最新进展。表4为各类基于图神经网络的知识图谱 推理方法的原理、优势及不足。本文也是首次尝试 将基于图自编码网络和基于时空图神经网络纳入知 识推理中进行综述。

表 4 各类基于图神经网络的知识推理方法对比

Table 4 Comparison of GNN based KG reasoning methods

推理方法	原理	典型算法	年份	优势	不足
基于 RecGNN 的知识推理	用相邻节点信息来表示节点, 通过不断地迭代传播邻接节点 信息,得到图谱中节点的最终	GNN ^[88] GraphESN ^[89] GGNN ^[90]	2008 2010 2015	相比传统算法,模型同时考虑知识 图谱的语义信息和结构信息,具备 更好的可解释性和更强的推理能力	由于在每个时间步 都需要展开图中所 有的节点,模型的收
117年671年7五	表示,进而开展知识推理	SSE ^[91]	2018	文对 时 的 所作	敛速度和效率较差
基于 ConvGNN 的 知识推理	将传统的卷积算子转移到图结构数据上,有效地聚集了邻接,通过计算中心单一节点与邻节点之间的卷积来表示邻节点间信息的传递和聚合,用于知识推理任务	GCN ^[92] GraphSAGE ^[93] RGCN ^[94] SACN ^[95] CompGCN ^[96] GAT ^[97] GaAN ^[98]	2013 2017 2018 2019 2019 2017 2018 2019	模型直接对图域的邻接节点进行聚合,可以处理大型图;还可以通过节点采样技术提高效率;通过注意力机制可实现邻域对中心贡献程度的自适应调节	网络层数决定了网络处理效率,对于不同的图结构泛化能力较差
		NAKGR ^[100]	2021		
基于 GAE 的知识推理	利用多层感知机作为编码器,获得节点的低维表示,然后解码器重构节点的邻域统计信息,进而开展知识推理任务	DNGR ^[101] SDNE ^[102] GAE ^[103] ARGA ^[104] DGMG ^[105] NetGAN ^[106] M2GNN ^[107]	2016 2016 2016 2018 2018 2018 2018	无监督学习框架,既适用于无属性 信息的普通图,还适用于有属性图	受限于无监督学习 的应用场景,整体性 能有待提升
基于 STGNN 的知识推理	引入了时间序列特征,同时提取时域和空间域信息,可用于开展时序知识图谱推理任务	DCRNN ^[108] ST-GCN ^[109] GWN ^[110] GMAN ^[111] TFGAN ^[112]	2017 2017 2019 2020 2022	同时考虑空间依赖性和时间依赖性,可以处理高度非线性和复杂性问题	模型复杂程度高,在 时间序列中的应用 效果有待提升

Table 5 RecGNN based KG reasoning algorithms							
典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足		
GNN ^[88]	子图匹配、节点分类	随机图数据/诱变数 据集	2008	可以将图数据映射为向量表示,进 而开展应用	计算成本高,迭代效率低;要保证迭代 收敛,会限制模型的处理能力		
GGNN ^[90]	关系预测、节点分类	Facebook bAbI	2015	消除了必须迭代收敛的约束,模型 泛化能力更强;解决过深层的图神 经网络导致过度平滑的问题	计算量较大,不适合处理大规模图数据;对较远路径的信息会有所丢失		
SSE ^[91]	节点分类	Amazon product	2018	随机采样,学习效率高;可以处理大规模图数据	不能保证一定收敛		

表5 基于递归图神经网络的知识推理算法归纳

注:表中"知识推理任务"栏只罗列了算法涉及知识推理的任务。如GNN算法^[88]中包括子图匹配、化合物诱变活性分析和网页排序3个任务,但图中只列出了与知识推理相关的子图匹配任务以及对应数据库。

2.1 基于递归图神经网络 RecGNN 的知识推理

递归图神经网络(RecGNN)是图神经网络的先驱(如表5)。RecGNN的目标是学习递归神经架构的节点表示,通过图中节点不断地与其邻接交换信息,直到达到稳定的平衡。递归图神经网络的概念最早由 Gori 等人[113]于2005年提出,Scarselli等人[88]对此模型进行了更详细的阐述,每个节点的定义是由该节点的属性特征(或标签特征)以及邻接节点来共同表示(如图4),参数函数 f_{u} 称为局部变换函数,描述了顶点 n 和其邻域顶点的依赖性。 g_{u} 称为局部输出函数,刻画了输出值的生成过程。

$$x_n = f_w(l_n, l_{co[n]}, x_{ne[n]}, l_{ne[n]}) \tag{1}$$

$$o_n = g_w(x_n, l_n) \tag{2}$$

其中, l_n 、 $l_{co[n]}$ 、 $x_{ne[n]}$ 、 $l_{ne[n]}$ 分别表示顶点 n 的属性、关 联边的属性、所有邻接节点的状态和属性,因此,每 个节点 n 的状态 $x_n \in \mathbf{R}_s$,该状态 x_n 包含节点 n 的邻

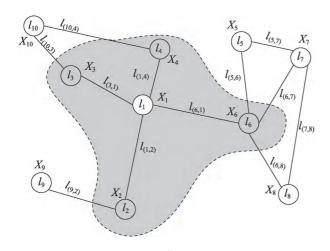


图4 图和节点的邻域

Fig.4 Domains of graphs and nodes

域所包含的信息。RecGNN的目标是通过不断迭代传播邻接节点信息 f_{xx} ,直到模型达到稳定状态,进而得到节点的最终表示 g_{xx} [114]。

Scarselli 等人[88]提到 GNN 可以直接处理大多数 现实世界中的图问题,包括有向、无向、循环和非循 环的图,且成功实现了将图数据映射到几何空间,并 开展了子图匹配、化合物诱变活性分析和网页排序 等任务,这是首次利用图神经网络处理图数据推理 任务——子图匹配。其实验结果表明 GNN 对于结构 化数据的建模十分有效,但也存在着数据计算量大、 迭代效率低等诸多的不足。Li等人[90]提出了GGNN (gated graph neural network), GGNN 是基于 GRU (gated recurrent unit)的经典空间域模型,可以理解为 GNN+Gate。相比GNN, GGNN的特点在于使用了 GRU单元更新节点状态,解决了过深层的图神经网 络导致过度平滑的问题。但由于在每个时间步都需 要展开图中所有的节点,每个节点还需要使用向量 进行表示,当图很大且向量表示维度很高时,模型的 效率会出现较大问题。GGNN实际上是以损失图中 较长路径信息的代价换取了模型可建模的问题空间。

在此基础上,Dai等人^[91]提出了SSE(stochastic steady-state embedding)算法。SSE算法提出了一种随机学习框架,可有效利用学习算法中的模型参数,其主要思想是随机采样一批节点用于状态更新,随机采样一批节点用于梯度计算,以随机和异步的方式周期性更新节点隐藏状态。由于算法是随机训练的,在收敛速度和执行时间方面对于大规模图是非常有效的,且在多个知识推理任务中得到了验证。

综上所述,RecGNN旨在学习具有递归神经架构的节点表示。它们假设图中的节点不断与其邻接(包括邻接节点和关联边)交换信息,直到达到稳

态。RecGNN在理论上很重要,它启发了后来学者们 对卷积图神经网络的研究,基于空间的卷积图神经 网络继承了信息传递的思想。

2.2 基于卷积图神经网络 ConvGNN 的知识 推理

卷积图神经网络(ConvGNN)将卷积运算从网格 数据(欧几里德数据,如图像数据)推广到了图形数 据(非欧几里德数据,如知识图谱)。2013年,Bruna 等人[92]提出了基于谱域的图卷积网络(spectral-based GCN)和基于空间域的图卷积网络(spatial-based GCN)两种模型,开创性地引入傅里叶变换,将图结 构信息由拉普拉斯矩阵特征向量表示,可以理解为 第一代卷积图神经网络。表6对上述两类卷积神经 图网络进行了比较分析。基于空间域的图卷积网络 直接对图的邻接节点进行聚合,可以较好反映图数 据的结构关系,更适合处理有向图和大型图数据。 因此,目前利用卷积图神经网络的知识推理方法都 是基于空间域方法进行研究。

与RecGNN不同,基于空间的ConvGNN通过多 层卷积来得到高阶节点表示,进而通过这些表示特 征对图数据进行节点分类、链接预测、图分类等任 务。Henaff等人[115]在文献[92]的基础上定义了核,利

用局部连接来减少学习参数,将卷积图神经网络扩 展到大规模图数据分类问题上。Defferrard等人[116]设 计了图的快速局部卷积滤波器,其大大降低了计算 复杂度和学习复杂度,可以被运用到任何图结构数 据,可以理解为第二代卷积图神经网络。在此基础 上,Levie等人[117]设计了更高效的卷积滤波器。为了 减少计算量并提高性能,研究者们探索出了不同的邻 域聚合方法,如均匀邻接采样[93]、顶点重要性采样[118] 和基于随机行走的重要性采样[119]。Kipf和 Welling[120] 提出的 GCN (graph convolutional network)利用 Chebyshev 多项式拟合卷积核,可以学习图上局部结构特 征并进行编码,较好地解决半监督任务,可理解为第 三代卷积图神经网络(如图5)。图5(a)是用于半监 督学习的多层卷积图神经网络(GCN)示意图,输入 通道为C,输出层为F特征图。图结构(边显示为黑 线)在层上共享,标签用Y_i表示。图5(b)为两层 GCN在Cora数据集上训练的隐藏层激活的可视化, 不同颜色表示不同标签类型。

卷积图神经网络传播规则可表示为:

$$\boldsymbol{H}^{(L+1)} = \sigma(\tilde{\boldsymbol{D}}^{-\frac{1}{2}}\tilde{\boldsymbol{A}}\tilde{\boldsymbol{D}}^{-\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}^{(l)}\boldsymbol{W}^{(l)})$$
 (3)

其中, $\tilde{A} = A + I_N$ 为图 G 的带自环邻接矩阵; I_N 为单 位矩阵; $\mathbf{W}^{(l)}$ 为可训练权重向量; $\sigma(\cdot)$ 为激活函数;

表6 基于谱域的和空间域的卷积图神经网络比较

Table 6 Comparison of spectral domain and spatial domain based ConvGNN

比较分析	基于谱域的卷积图神经网络方法	基于空间域的卷积图神经网络方法
效率	模型在前向传播过程中,需要用到所有节点的拉普拉斯矩阵,计算开销大,难以处理大型图	直接对图的邻接节点进行聚合,可以处理大型图数据;还可以通过节点采样技术提高效率
灵活性	因需利用拉普拉斯矩阵的对称性实现,故只能处理无向图 (有向图只能转换为无向图来处理)	可直接处理各种图(包括有向、无向、有环、无环、异构图等), 更加灵活
通用性	只能处理固定的图,不能处理动态图,不能对图进行修改, 泛化能力差	在每个节点执行局部图卷积,可以在不同位置和结构之间共享权值,泛化能力强

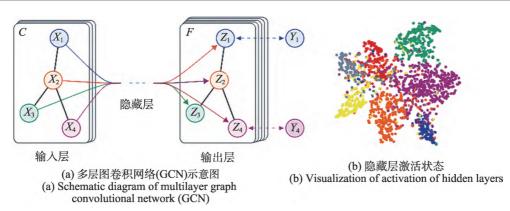


图5 卷积图神经网络(ConvGNN)

Fig.5 Convolutional graph neural networks (ConvGNN)

 $H^{(l)} \in \mathbb{R}^{N \times D}$ 为第 l^{th} 层的激活矩阵, $H^{(l)} = X$ 。其核心思想是学习一个函数映射,通过该映射图中的节点可以聚合自身的信息、邻接节点信息和结构信息来生成节点的表示[121]。ConvGNN 在建立许多其他复杂的 GNN 模型中起着核心作用。

2.2.1 基于空间域的卷积图神经网络

基于空间域的 ConvGNN 的知识推理,将知识图谱视作无向图,利用 ConvGNN 分析拓扑结构,实现邻域向中心实体的语义聚合,典型方法包括 Graph-SAGE (graph sample and aggregate) [93]、R-GCN (relational graph convolutional network) [94]、SACN (structure-aware convolutional networks) [96]、RGHAT (relational graph neural network with hierarchical attention) [15]、H-GCN (hierarchical graph convolutional network) [122] 等 (如表7)。

GCN^[120]的基本思想是把图数据中节点的高维邻接信息降维到低维的向量表示,其本质是"直推式(transductive learning)",即需要知道图数据的全部信息进行训练,且模型无法快速得到新节点的表示。GraphSAGE^[93]提出了一种新的方法,相比GCN捕捉图的全局信息、保存映射结果的方法,该算法属于"归纳式(inductive learning)",即聚合邻接信息得到图数据表示的映射函数,因此也可以对图谱中新增的节点进行表示(如图6)。因此,GraphSAGE更具有泛化能力,也解决了GCN模型训练节点时必须知道

全部数据且训练出来的表示唯一的短板。Graph-SAGE实现了在大型图数据上的归纳表示学习,可扩展性更强,对于节点分类和链接预测问题的表现也比较突出。

在知识图谱实体分类或链接预测任务中,许多 丢失的信息都可能存在于邻域结构编码的图中,即 可以通过三元组中的任意两个推测出第三个元素。 据此,Schlichtkrull等^[94]提出了R-GCN,R-GCN为图 谱中的实体生成隐性特征表示,可理解为知识图谱 中的实体属性标签,并将其应用于两个任务中。对 于实体分类任务,R-GCN参考GCN^[120]算法,对图中 的每个节点使用Softmax分类器进行节点分类;对于 关系预测任务,R-GCN提取每个节点的表示,通过两 个节点的表示来预测节点间关系。R-GCN的主要贡 献在于:显示了GCN的框架可以应用于关系数据建 模,特别是关系预测和实体分类任务;引入了参数共 享和实现稀疏约束的技术,并将其应用于具有大量 关系的多图分析中。

Vashishth等人[95]设计了一种针对多关系有向图的图神经网络CompGCN(composition-based multi-relational graph convolutional networks)来同时学习节点和关系的表示。另外,为了降低大量不同类型关系带来的大量参数的影响,设计了一种分解操作,将所有关系都用一组基的加权组合来表示。模型在多个数据集上进行了链路预测、节点分类、子图分类等

表7 基于空间域的卷积图神经网络的知识推理算法

Table 7 Spatial domain based GCN network KG reasoning algorithms

GraphSAGE ^[93] 节点分类 任务 1; Citation 任务 2; Reddit 任务 3; PPI 2017 力强; 批量训练, 节省内存, 可应用 于大规模的图结构数据; 可用于新 增节点的表示 多边关系信息进行学习; 训练 时间较长, 内存占用大, 效率 不高 R-GCN ^[94] 节点分类、链 接预测 任务 1; AIFB/MUTAG/BGS/ AM 任务 2; WN18/FB15K/ FB15K-237 2018 聚合了节点间的关系信息; 节点的 更新用共享参数并行计算, 效率更高; 可能出现过拟合现象 实体的权重矩阵固定, 灵活性不够; 参数与关系的数量有关可能出现过拟合现象 FastGCN ^[118] 节点预测、分 类 Cora/Pubmed/Reddit 2018 复杂度低, 效率更高; 使用重要性 采样减少了对数据的过度依赖 够; 会引人估计偏差 固定采样节点个数, 灵活性不够; 会引人估计偏差 H-GCN ^[122] 节点分类 Cora/Citeseer/Pubmed/NELL 2019 模型深度更深, 可以捕获更多全局 信息;避免了重复邻域聚合中过度 平滑问题 对少样本节点识别性能更好 平滑问题 CompGCN ^[95] 节点分类、链接 预测、图分类 FB15K-237 /WN18RR 2019 同时学习节点和关系编码;解决了 多关系图表示参数过载问题 计算量增加 SACN ^[96] 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237- Aftr 2019 利用权重信息增加同类型节点间 强度;同时学习三元组结构信息和 模型更复杂;不适用开放式的 知识图谱	典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足
R-GCN ^[94] 节点分类、链接预测 AM 任务 2: WN18/FB15K/ FB15K-237 2018 聚合了节点间的关系信息;节点的 更新用共享参数并行计算,效率更高;可以运用到异构图 实体的权重矩阵固定,灵活性不够;参数与关系的数量有关可能出现过拟合现象 FastGCN ^[118] 节点预测、分类 Cora/Pubmed/Reddit 2018 复杂度低,效率更高;使用重要性采样或少了对数据的过度依赖。 够;会引人估计偏差 固定采样节点个数,灵活性不够;会引人估计偏差 H-GCN ^[122] 节点分类 Cora/Citeseer/Pubmed/NELL 2019 信息;避免了重复邻域聚合中过度平滑问题 对少样本节点识别性能更好平滑问题 CompGCN ^[95] 节点分类、链接预测。图分类 FB15K-237 /WN18RR 2019 同时学习节点和关系编码;解决了多关系图表示参数过载问题 计算量增加 SACN ^[96] 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237-Attr 2019 利用权重信息增加同类型节点间强度;同时学习三元组结构信息和知识图谱 模型更复杂;不适用开放式的知识图谱	GraphSAGE ^[93]	节点分类	任务2:Reddit	2017	力强;批量训练,节省内存,可应用 于大规模的图结构数据;可用于新	** * * * * * * * * * * * * * * * * * * *
FastGCN ^[118] 类 Cora/Pubmed/Reddit 2018 采样减少了对数据的过度依赖 够;会引入估计偏差 H-GCN ^[122] 节点分类 Cora/Citeseer/Pubmed/NELL 2019 信息;避免了重复邻域聚合中过度 平滑问题 对少样本节点识别性能更好平滑问题 CompGCN ^[95] 节点分类、链接预测、图分类 FB15K-237 /WN18RR 2019 同时学习节点和关系编码;解决了多关系图表示参数过载问题 计算量增加 SACN ^[96] 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237-Attr 2019 利用权重信息增加同类型节点间强度;同时学习三元组结构信息和知识图谱 模型更复杂;不适用开放式的知识图谱	R-GCN ^[94]		AM 任务 2: WN18/FB15K/	2018	更新用共享参数并行计算,效率更	实体的权重矩阵固定,灵活性 不够;参数与关系的数量有关, 可能出现过拟合现象
H-GCN ^[122] 节点分类 Cora/Citeseer/Pubmed/NELL 2019 信息;避免了重复邻域聚合中过度 平滑问题 对少样本节点识别性能更好 平滑问题 CompGCN ^[95] 节点分类、链接 预测、图分类 FB15K-237 /WN18RR 2019 同时学习节点和关系编码;解决了 多关系图表示参数过载问题 计算量增加 SACN ^[96] 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237- Aftr 2019 利用权重信息增加同类型节点间 强度;同时学习三元组结构信息和 知识图谱 模型更复杂;不适用开放式的知识图谱	FastGCN ^[118]		Cora/Pubmed/Reddit	2018		固定采样节点个数,灵活性不够;会引入估计偏差
CompGCN ⁹⁶¹ 预测、图分类 FB15K-237 /WN18RR 2019 多关系图表示参数过载问题 计算量增加 SACN ⁹⁶¹ 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237-Aftr 2019 利用权重信息增加同类型节点间强度;同时学习三元组结构信息和强度;同时学习三元组结构信息和强度;同时学习三元组结构信息和强度 模型更复杂;不适用开放式的知识图谱	H-GCN ^[122]	节点分类	Cora/Citeseer/Pubmed/NELL	2019	信息;避免了重复邻域聚合中过度	对少样本节点识别性能更好
SACN ^[96] 链接预测 WN18/FB15K/FB15K-237- 2019 强度;同时学习三元组结构信息和 模型更复杂; 个适用升放式的 知识图谱	CompGCN ^[95]		FB15K-237 /WN18RR	2019		计算量增加
711/0EH007E99119	SACN ^[96]	链接预测		2019		模型更复杂;不适用开放式的 知识图谱

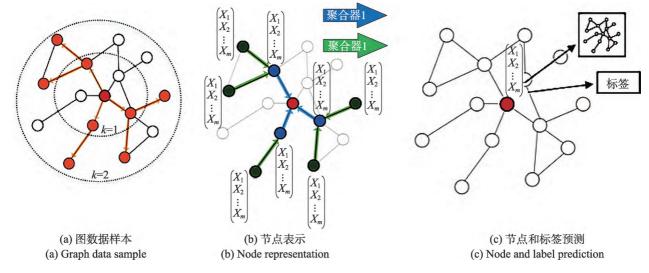


图 6 Graph SAGE 核心思想

Core idea of GraphSAGE

实验,验证了CompGCN的有效性。为解决知识图谱 中三元组不完整问题,Shang等人[%]结合加权卷积图 神经网络(weighted graph convolutional neural network, WGCN)和Conv-TransE两个模块,提出了SACN (structure-aware convolutional network)模型。模型 使用WGCN作为编码器,将节点结构、节点属性、关 系类型作为输入,WGCN中的可学习权值有助于从 相邻图节点中收集自适应量的信息;将 Conv-TransE 作为解码器,在Conv-TransE的节点嵌入表示保留了 实体和关系之间属性信息,并可以较好用于知识图 谱补全任务。SACN通过 WGCN来建模 KG中的实 体和关系,提取实体特征,然后输入至Conv-TransE 中使实体满足KG三元组约束,得到实体的嵌入表 示,进而开展知识图谱补全任务(如图7)。

2.2.2 基于图注意力机制的卷积图神经网络

2017年, Veličković等人[97]提出了GAT (graph attention network), GAT 是一种基于空间结构的图神 经网络,在聚合邻域特征信息时,通过注意力机制确 定采样节点权重信息,比GCN多了一个自适应的边权 重系数[123],从而实现邻域对中心贡献程度的自适应调 节。GAT无需提前知道整个网络的结构,即可通过局 部信息获取到网络的整体信息,避免了大量矩阵运 算。本质上,GAT是将原本GCN的标准化函数替换 为使用注意力权重的邻接节点特征聚合函数。因此 模型可以直接应用到归纳推理的问题中,包括知识 图谱的节点分类、链接预测等任务。典型方法包括

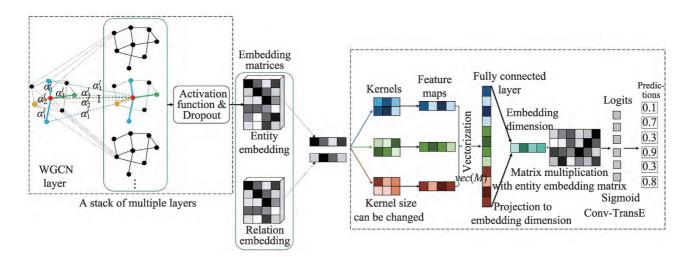


图7 知识推理局部任务(SACN)

Fig.7 Knowledge reasoning local task (SACN)

MGAT (multi-view graph attention network) [124]、TGAT (temporal graph attention) [125]、NAKGR (neighborhood attention knowledge graph reasoning) [100] 等,图 8 为利用 MGAT 算法开展链接预测和节点分类模型框架图。

2019年Nathani等人[126]提出了基于图注意力网络(GAT)的知识图谱关系推理模型KBGAT(knowledge bases GAT),该模型使用多头注意力机制来进行目标节点周围信息的收集,以解决隐藏信息获取困难的问题,提升了关系预测的准确率。Zhang等人[98]提出了基于门控注意力机制的GaAN(gated attention networks)模型,不同于传统的多头注意机制(均衡地消耗所有的注意头),门控注意机制可以通过引入的门控单元来调节参与内容的数量,使用一个卷积子网络来控制每个注意头的重要性。由于在门控单元的构造中只引入了一个简单的、轻量级的子网,计算开销可以忽略不计,而且模型易于训练。Zhang等人[7]提出了一个用于知识图谱补全任务的具有分

层注意的关系图神经网络 Encoder-Decoder 框架。 Xu 等人[127]提出 DPMPN(dynamically pruned message passing networks)模型,以同时编码完整的图数据表 示和由注意力模块学习的局部图数据表示,实现推 理过程中子图的动态构建。Xie等人[128]提出ReInceptionE (relation-aware inception network with joint localglobal structural information for knowledge graph embedding)模型,结合ConvE和KBGAT[127],利用关系感 知注意力(relation-aware attention, RAATT)机制实现 对图谱结构信息的深入理解。康世泽等人[129]提出 HE-GAN (heterogeneous information network embedding framework via graph attention network)模型,通 过堆叠图注意力网络,有效学习实体的高阶邻接特 征,实现对知识图谱语义的完整表达[130]。已有较多 的模型较好地将基于GAT的图神经网络引入到知 识图谱领域,并开展节点分类、关系预测等推理任 务[131-133](表8)。

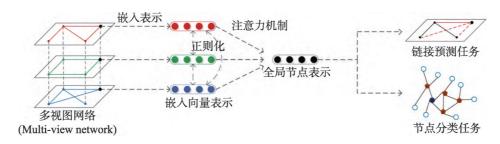


图8 MGAT模型框架图

Fig.8 Framework of MGAT model

表8 基于GAT的卷积图神经网络的知识推理算法

Table 8 Graph attention mechanism based GCN reasoning algorithms

典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足
GAT ^[97]	节点分类	Cora/Citeseer/Pubmed/PPI	2017	利用注意力机制分配节点权重,表达能力更强	多个注意头的贡献相等, 忽略了边的特征信息
GaAN ^[98]	节点分类	PPI/Reddit	2018	利用门控注意力机制调节各头的聚合范围和 重要性权重,表示更准确;可扩展至时空预测	模型复杂度更高
KBGAT ^[126]	关系预测	WN18RR/FB15K-237/ NELL-995	2019	考虑了边的信息特征,可捕获实体的多跳邻域的实体和关系	无法处理实体间多边 关系嵌入表达
MGAT ^[124]	链接预测、节点 分类	CKM/LAZEGA/Citeseer/ Cora/DBLP/Twitter	2020	能够捕获隐藏的更复杂的关系模式,有较好 的泛化能力	无法处理开放式知识 图谱
ATTH ^[133]	链接预测	WN18RR/FB15K-237/ YAGO3-10	2020	利用双曲模型同时捕获层次信息和逻辑关系	嵌入维度较高时效果 较差
NAKGR ^[100]	知识推理	WN11/FB13/WN18/ FB15K	2021	同时获取实体和关系特征,同样适用开放式的知识图谱	不能较好学习多跳邻 接信息
HE- GAN ^[129]	链接预测、节点 分类	链接预测:WN18RR/ FB15K-237 节点分类:DBLP/IMDB	2021	融合知识图谱高阶邻居信息,可较好处理节点间多关系知识图谱	模型的通用性不够

2.3 基于图自动编码GAE的知识推理

图自动编码神经网络是一种无监督的学习框架, 它将节点/图编码到潜在向量空间中,并从编码的信 息中重建图数据。GAE^[103]用于学习网络嵌入和生成 新的图形(如图9)。编码器使用图卷积层来获得每个 节点的网络嵌入表示,解码器计算给定网络嵌入的成 对距离。在应用非线性激活函数后,解码器重建图邻 接矩阵。网络通过真实邻接矩阵与重构邻接矩阵之 间的最小化差异来训练。图自动编码网络又分为基 于网络嵌入的图自动编码方法和基于图生成的图自 动编码方法。基于网络嵌入的图自编码方法利用神 经网络结构将图的顶点表示为低维向量,可以用于知 识图谱节点分类或链接预测任务[104];基于图生成的图 自动编码方法是在给定一组观察到的图的情况下生 成新的图,可以很好地应用到知识推理的知识补全任 务中。

2.3.1 基于网络嵌入的图自编码方法

基于网络嵌入的图自动编码方法的目的是利用

神经网络结构将图的节点映射到潜在空间特征表示 为低维向量,并从潜在的表示中解码图形信息,进而 开展节点分类、链接预测等任务。在网络嵌入方法 中,GAE通过重构邻接矩阵等图结构信息来学习潜 在节点表示,它保留了节点的结构信息。图自编码 器的挑战是邻接矩阵的稀疏性,这使得解码器的正 条目数远远小于负条目数。典型的解决方案是利用 多层感知机作为编码器来获取节点嵌入,利用解码 器重建节点的邻域统计信息[134-135]。利用网络嵌入的 图自编码方法开展知识推理的典型方法包括 DNGR (deep neural networks for learning graph representation)[101], SDNE (structural deep network embedding)[102], VGAE (variational graph auto-encoder)[103] 和 ARVGA (adversarially regularized variational graph autoencoder)[104]等(表9)。

DNGR 用深度神经网络的随机冲浪(random surfing model) 替代采样(conventional sampling)的方 式为每个顶点生成一个低维向量表示,方便更准确、

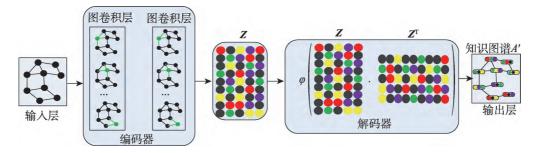


图9 GAE模型

Fig.9 GAE model

表9 基于网络嵌入的图自编码网络知识推理算法

Table 9 Network embedding based graph auto-encoders network KG reasoning algorithms

典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足
DNGR ^[101]	节点分类	20-NewsGroup/ Wine/Wikipedia	2016	解决了采样序列长度有限的问题,更直接捕获 图的结构信息;可处理数据稀疏性问题,有效 地降低噪声并增强鲁棒性;时间复杂度更低	未考虑节点特征信息;使用固定 步长传播信息,可伸缩性不强;训 练不稳定,耗时较长
SDNE ^[102]	节点分类、链接预测	BlogCatalog/ Flickr/Youtube/ 20-NewsGroup	2016	分别用一阶、二阶相似性,有效捕获高度非线性网络局部特征和全局特征;通过带权重采样,可有效挖掘非一阶节点间的关系	未考虑节点特征信息;只考虑了 节点的一阶、二阶相似性,网络表 现不够好;对新添加孤立点无法 很好表示
GAE、 VGAE ^[103]	链接预测	Cora/Citeseer/ Pubmed	2016	可同时学习图的结构信息和节点内容特征;学 习到的隐表示的维数可以远远小于输入数据 的维数,实现降维的目的	浅层模型,无法捕捉高度非线性的网络结构,导致网络表现不够好
DRNE ^[135]	节点分类	Jazz/BlogCatalog	2018	学习具有规则等价节点的网络嵌入;重建一些 顶点的隐藏状态,而不是整个图形;可以更好 捕捉图的结构信息	通过反复迭代更新,效率较慢
ARGA \ ARVGA ^[104]	节点分类、链接 预测	Cora/Citeseer/ Pubmed	2018	可同时学习图的结构信息和节点内容特征,模 型鲁棒性更好	复杂度更高

快速获取图的结构信息,进而开展下游任务。SDNE 用一阶、二阶相似度有效捕获高度非线性网络局部 特征和全局特征,实验表明,所得到的表示可以有效 地作用于节点分类等下游任务。但 DNGR 和 SDNE 只考虑节点结构信息,即节点之间的连通性,忽略了 节点可能包含描述节点本身属性的特征信息。Kipf 等人[103]结合图数据结构的特点,参考自编码器(autoencoders, AE)和变分自动编码器(variational autoencoders, VAE),提出了图自动编码器(GAE)和变分图 自动编码器VGAE。VGAE是基于VAE的无监督学 习图结构数据的框架,该模型利用了潜在变量学习 无向图的潜在表示,在链接预测任务上取得了较好 的效果。Pan等人[104]提出的ARGA(adversarially regularized graph autoencoder)和ARVGA算法将生成对 抗网络(generative adversarial network, GAN)加入到 GAT中。网络主要分为三部分:编码器(生成)、解码 器和判定器。判定器的任务就是训练一个二分类 器,使它能够判别模型的输入到底是真实分布还是 虚假分布。而编码部分则作为生成,其目的是要骗 过判定器,由此循环迭代,就使得编码器的输出能够 尽可能地接近真实分布。

2.3.2 基于图生成的图自编码方法

基于图生成的图自动编码方法是在给定一组观察到的图的情况下,使用图神经网络来表示图的节点和边之间的依赖关系生成新的图,构建图生成模型。在自然语言处理中,生成语义图或知识图谱通常以给定的句子为条件,生成新的图。通过将给定条件下的新生成图与原图进行对比,即可开展知识推理的知识补全任务,如实体分类、关系预测等。通过设计合理的推荐条件或问答条件,新生成的图可用于开展知识推理的知识推荐和知识问答任务[136]。利用网络嵌入的图自编码方法开展知识推理的典型方法包括DGMG(deep generative models of graphs)[105]、

GraphRNN (graph recurrent neural network) [137]、NetGAN (generating graphs via random walk) [106] 和 M2GNN (mixed-curvature multi-relational graph neural network) [107] 等(表 10)。

Li等人[105]提出了DGMG,利用基于空间的卷积 图神经网络来实现对现有图的隐藏表示。DGMG生 成节点和边的决策过程是以整个图的表示为基础 的,具体取决于由RecGNN更新的生长图的节点状态 和图状态。DGMG 递归地在一个图中产生一个节 点,在添加新节点后的每一步,DGMG通过做出一系 列决策来生成图,即是否添加节点、添加哪个节点、 是否添加边以及哪个节点连接到新节点,因此,可以 利用DGMG模型开展知识图谱的节点分类和链接预 测任务。You等人[137]提出的GraphRNN是两级(图级 和边级)循环神经网络的深度图生成模型。图级的 RNN 每次向节点序列添加一个新节点,而边级的 RNN 生成一个二进制序列,为新添加的节点生成 边。Bojchevski 等人[106]提出的NetGAN将LSTM(long short-term memory network)与 Wasserstein-GAN 结合 在一起,使用基于随机行走的方法来捕获图的拓扑 结构(如图 10)。GAN 框架由两个模块组成,一个生 成器和一个鉴别器。生成器尽最大努力在LSTM网 络中生成合理的随机行走序列,而鉴别器则试图区 分伪造的随机行走序列和真实的随机行走序列。训 练完成后,对一组随机行走中节点的共现矩阵进行 正则化,可以得到一个新的图,可以用于知识图谱的 链接预测任务。

2.4 基于时空图神经网络STGNN的知识推理

一般的GCN方法可以较好地捕捉知识图谱中节点之间的连接关系,保留网络中的空间关系的信息,但缺乏捕捉时间关系的能力。时空图神经网络(STGNN)^[109]将卷积图神经网络扩展到时空图模型,旨在从时空图中学习隐藏模式,其基本假设是节点

表10 基于图生成的图自编码网络的知识推理算法

Table 10 Graph generation based graph auto-encoders networks KG reasoning algorithms

典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足
$\mathrm{DGMG}^{\scriptscriptstyle{[105]}}$	图生成模型、节点分类、 链接预测	Cycles/Trees/B-A Graphs	2018	考虑了图的全局信息	时间复杂度高,效率较低
GraphRNN ^[137]	图生成模型、节点分类 (聚合)	Community/Grid/B-A/ Protein/Ego	2018	具有可扩展性和对噪声的鲁棒性	图形较大时耗时长,无法 有效处理条件限制的图 生成模型
NetGAN ^[106]	图生成模型、链接预测	Cora/DBLP/Citeseer/POL/ Pubmed/Polblogs	2018	保留了重要的拓扑信息,链接预 测能力较好	可解释性差;耗时长,效率偏低
M2GNN ^[107]	知识图谱补全、链接预测	WN18RR/FB15K-237/ YAGO3-10	2021	更好地保留图的复杂的异构信 息,扩展性更强	对于多空间曲率权重的 分配,缺乏可解释性

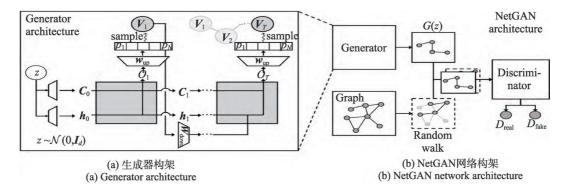


图10 NetGAN模型 Fig.10 NetGAN model

的未来信息取决于其历史信息及其邻接的历史信 息,其核心思想是同时考虑空间依赖和时间依赖。 时空图神经网络中的空间依赖关系即对应知识图谱 的拓扑结构信息,时间依赖即对应知识图谱的时序 信息,节点的信息即为实体属性信息。例如,在交通 网络中,每个传感器连续记录道路的交通速度作为 顶点,传感器对之间的距离作为交通网络的边。将 交通网络看作一个时序知识图谱,节点的属性即为 路口的交通速度,边即表示不同路口的距离信息,节 点的属性随时间的变化而变化,也会受其他节点和 边的影响。

传统时序知识图谱推理往往是对一般知识推理 模型的扩展,将时间信息嵌入到关系信息中,这些方 法往往很难捕获远距离依赖关系,对潜在实体和关 系的表现较差,也难以有效编码时序知识图谱复杂 的时空关系。基于时空图神经网络的时空预测方 法,通过将节点在图结构上进行时空关系的模拟,较 好地保留了图数据的空间关系(拓扑结构)和时间关 系,与时序知识图谱的知识推理任务不谋而合,在 复杂的空间关系中,能取得比传统方法更好的预测 效果。

图 11 描述了一种时空图神经网络模型,图卷积 层后是一维 CNN 层。图卷积层对时序知识图谱 A 进 行运算捕捉知识的空间相关性(图数据的拓扑结构 关系),一维CNN层沿着时间轴变化来捕捉知识的时 间相关性。输出层通过多层感知机的线性变换,为 每一个节点生成预测,比如下个时间步长内的节点 值,进而可以有效开展时序知识图谱的知识推理任 务。目前,利用时空图神经网络主要集中在开展知 识发现相关任务,较多的时序知识图谱推理任务主 要集中在基于时空图神经网络的交通流预测以及军 事领域,未来也一定会扩展到更多领域。

基于时空图神经网络开展知识推理的典型方法 包括 DCRNN(diffusion convolutional recurrent neural network)[108] ST-GCN (spatio-temporal graph convolutional network) [109], GWN (graph wavenet) [110], T-GCN (temporal graph convolutional network) [138], GCRN (graph convolutional recurrent network) [139] ASTGCN (attention based spatial-temporal graph convolutional network)[140] MTGNN (multivariate time series forecasting with graph neural network) [141] 和 TFGAN (traffic forecasting using generative adversarial network)[112]等

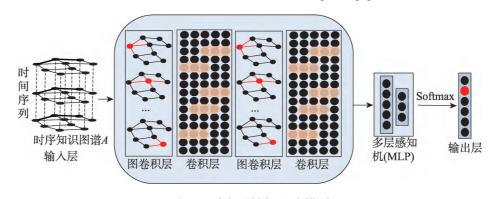


图11 时空图神经网络模型

Fig.11 Spatial-temporal graph neural networks model

				88.	
典型算法	知识推理任务	涉及数据集	年份	优势	不足
DCRNN ^[108]	时空预测:交通预测	METR-LA/PeMS-BAY	2017	可同时捕获空间特征和时间依赖性	效率较低,不能很好地 捕获长时间依赖
ST-GCN ^[109]	时空预测:交通预测	BJER4/PeMSD7	2017	首次提出了GCN和TCN分别捕获空间依赖和时间依赖信息,可捕获长期的时间依赖关系	无法捕获动态事件在 多时间、多关系上的依 赖性
GWN ^[110]	时空预测:交通预测	METR-LA/PEMS-BAY	2019	可以精确地捕捉数据中隐藏的空间依赖, 可捕获长期的时间依赖关系	忽略了不同节点在不 同时间间隔之间的依 赖关系
T-GCN ^[138]	时空预测:交通预测	自制交通数据集(SZ-taxi)、Los环路数据集	2019	图卷积网络用于捕获道路网络的拓扑结构,门控递归单元捕获时间相关性	无法处理复杂关系;节 点只包括单一信息,缺 少更多属性信息融合
TFGAN ^[112]	时空预测:交通预测	Travel time datasets/ Traffic speed datasets/ Traffic flow datasets	2022	不仅可以学习历史数据的局部复杂空间相 关性和动态时间依赖性,还可以学习不同 时间步长与网络中其他节点的全局相关性	模型复杂度高

表 11 基于时空图神经网络的知识推理算法 Table 11 Spatial-temporal graph neural networks based KG reasoning algorithms

(表11)。Wu等人[110]提出了一种新的用于时空图建模的图神经网络结构 GWN。它可以自适应依赖矩阵并通过节点嵌入进行学习,故可以捕获数据中隐藏的空间依赖。GWN具有一个堆叠的可扩展的一维卷积组件,整个框架以端到端的方式学习,其感受野随着层数的增加呈指数增长,能够有效处理大型时序知识图谱。T-GCN 图形卷积网络除了能够捕获交通信息和属性之间的知识结构和语义关系之外,还能够捕获交通的时空特征。

图卷积网络用于捕获道路网络的拓扑结构,以 对空间依赖性进行建模。门控递归单元用于捕获道 路上交通数据的动态变化,以模拟时间相关性。受 最近生成对抗网络(GAN)和图卷积网络(GCN)在处 理非欧数据方面发展的启发,Khaled等人[112]提出了 一种对抗多卷积图神经网络模型,命名为TFGAN(如 图 12)。图 12(a)为 TFGAN 生成器结构,图 12(b)为 TFGAN判別器结构,图12(c)为TFGAN模型框架。 TFGAN模型将非监督模型的弹性优势与监督训练提 供的监督优势相结合,以帮助GAN生成器模型生成 准确的流量预测。为了改进表示并有效地对隐式相 关性建模,在生成器内构建多个GCN。同时,在每个 图之后应用GRU和自我注意力机制来捕获跨节点的 动态时间依赖性。该算法对六个真实世界的交通数 据集的三个交通变量(交通流量、速度和旅行时间) 进行实验,结果表明,TFGAN优于相关的最新模型, 并取得了显著的推理效果。

3 基于图神经网络知识推理的应用

描述常识和事实的知识图谱是学术界和工业界广泛使用的知识表示方式,采用图构建知识和数据之间的关联,是一种直接且有效的将知识和数据结合的方式。受益于图神经网络技术在信息传播和推理上的优势,知识图谱中的先验知识被有效地引入到应用任务中。知识图谱是互联网世界的数据基石,其高效的数据整合能力和数据关联能力使其在众多领域展示出越来越丰富的实际应用价值。目前,基于图神经网络的知识推理技术主要集中在常用的FB15K、YAGO、WN18、NELL-995、Cora、Citeseer、Pubmed、BlogCatalog等知识图谱数据集上开展,但也逐渐应用于医疗、智能制造、军事、交通、金融风险等众多生产生活实际领域中。

3.1 医学领域

在医学领域,随着医学信息系统和医学大数据的发展,医院积累了海量的医疗数据,如何从这些异构数据中筛选提炼信息,并加以整合、共享及应用,是推进智能医疗的关键问题。Vretinaris等人[142]对图神经网络(GNN)模型进行了改进,将来自医学知识库的领域知识引入到查询图中,并在负采样过程引入了生成对抗网络(GAN),以避免梯度消失的问题,从而获得更好的性能,有效解决了医学领域的实体分类和实体消岐问题;Agrawal等人[143]利用R-GCN[94]模型作为编码器,并使用张量分解作为解码器,使用知识图谱推理的方法来推断药物-蛋白质、蛋白质-蛋白质、

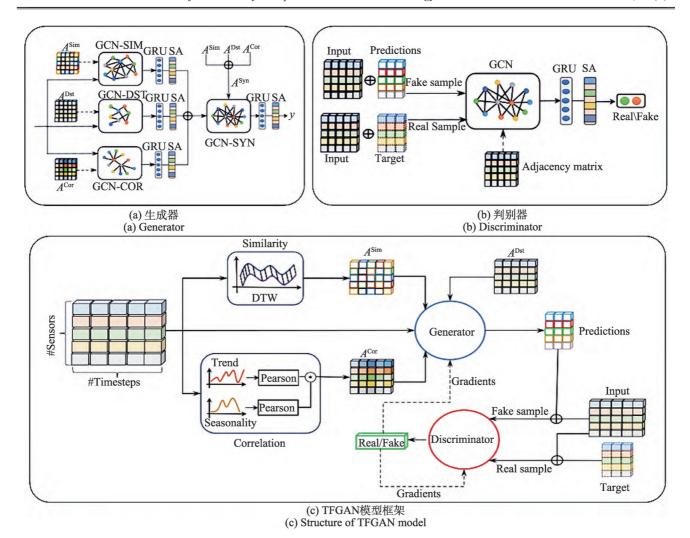


图 12 TFGAN 网络模型

Fig.12 TFGAN network model

药物-药物、药物-副作用等方面的相互作用;Ioannidis 等人[144]将蛋白质函数预测看作多关系图上的半监督学 习任务,并采用图神经网络(GNN)方法进行求解,利 用图神经网络实现了蛋白质功能预测任务。

目前,基于图神经网络的知识图谱推理在医学领 域的探索和工作还不够深入。文献[7]总结了医学知 识推理目前面对的一些挑战和重要问题,并展望了其 发展前景和研究趋势,推进知识图谱、知识推理在医 疗领域尤其是临床决策支持的、医疗智能语义检索的、 医疗推荐[145]等方面的应用已成为了人们迫切的需求。

3.2 智能制造领域

在智能制造领域,数据和知识是实现制造业与 新一代信息技术融合的基础,是实现智能制造的保 障。知识图谱本质上是基于语义网络的思想,可以 实现对现实世界的事物及其相互关系的形式化描 述。该技术为智能制造领域数据及知识的关联性表

达和相关性搜索推理问题的解决带来了可能性[9]。 由于知识图谱具有强大的知识表示和推理能力,知 识推理作为流程工业知识处理的重要环节一直备受 关注[146]。黄超[147]利用 Graph SAGE 结合多头注意力 机制方法开展知识推理任务,完成了石墨烯知识图 谱补全和关系预测等任务。Ma等人[148]探索了电子自 动化设计(electronic design automation, EDA)中应用 R-GCN^[94]的场景,利用知识图谱推理技术提升智能化 管理水平。基于图时空神经网络的知识推理对于智 能制造的人机协同交互、物流配送、在线监控等方面 也有较好的契合,未来定将在智能制造中扮演着越 来越重要的角色。

3.3 军事领域

构建基于军事信息库的知识图谱,可以为作战 指挥人员提供更加精确的情报,极大地提高部队作 战效率。基于军事知识图谱,建立军事武器问答系

统和联合作战信息服务系统,可以实现军事辅助决策[149]。张清辉等人[150]定义了模型中概念之间的语义关系和时序关系,提出了军事信息服务知识推理方法,为任务驱动的军事信息服务领域知识的推理提供了理论基础。随着信息化战争加速向智能化战争演化,如何系统规范地存储和表示作战知识,使无人系统能够根据高层任务指令自主完成任务规划,并基于不断更新的战场知识进行重规划和智能决策,也是一个新的研究领域[151]。未来,军事知识图谱以及高效能的知识推理技术能够提供大规模自主知识约束空间内的解决方案及智慧指挥决策解决方案,在虚拟情报参谋、隐含知识发现、情报智能关联等场景中发挥重要作用,提升部队作战能力。

3.4 交通领域

随着时空图神经网络(STGNN)的快速发展,将 图卷积网络扩展到时空图模型,能从时空图中学习 隐藏模式[109-110,141]。交通知识图谱可以实现交通流量 分析建模、航空交通管理以及公共场景挖掘等。交 通知识图谱可以实现同乘人员识别提取、公交站点 群出行量和运力挖掘、最大公交客流提取识别、线路 站点上下车客流提取等,为公共交通领域提供了有 效的决策和参考。基于时序知识图谱和时空模型, 有学者提出了动态时空图神经网络的知识推理。例 如,文献[152]设计了一个动态图递归卷积神经网络 (dynamic graph recurrent convolutional neural network, Dynamic-GRCNN)用于城市交通客流量的预测任 务。动态自我注意力网络(dynamic self-attention network, DySAT)[153]在结构邻域和时间动力学两个维度联合 自我注意力来生成动态节点表示,实现了链路预测的 功能。基于动态时空图神经演化的图卷积网络 (evolving graph convolutional network, EvolveGCN)[154] 模型,使用RNN演化GNN参数来捕获图序列的动态 性。其将时间信息引入交通领域知识图谱[111-112,142],并 融合深度学习技术,整合多源数据的语义相关性,实 现更贴合需求的智能化知识服务模型,在交通预测 时空知识推理上将大有可为。

3.5 其他领域

除此以外,知识图谱在教育、通信等领域也有广泛应用,比如学科问答机器人、通信故障定位分析、网络安全监测等。赵振兵等人[155]运用基于门控图神经网络(GGNN)[90]的知识图谱推理,完成了输电线路螺栓缺陷分类任务。Wang等人[156]将知识推理与图像识别相结合,探讨了一个有趣的社交关系推理问

题。该方法训练了一个图推理模型(graph reasoning model, GRM),该模型结合 GGNN^[90]可以对照片中人物的社会关系进行推理。另外,一种新的模型 SR-GNN(session-based recommendation with graph neural networks)^[157]将会话序列建模为有向会话图,通过门控图神经网络获得每个图中所有节点的潜在向量。接着,每个会话用一个注意力网络表示为全局偏好和当前兴趣的组合,最后预测每个项目在一次会话中成为下次点击的概率。从知识图谱应用发展趋势来看,当前正值通用知识图谱应用转向领域知识图谱应用的阶段。目前,大规模知识图谱在智能语义搜索、知识问答、演化分析、对话理解等方面的应用处于初级阶段,潜在应用领域广泛,推广前景广阔^[150]。

4 总结与展望

4.1 总结

知识图谱推理的核心是针对三元组中的实体和关系进行预测,因此,需要对图数据的结构信息以及实体的属性信息进行表示,进而开展推理任务。GNN 依靠其强大的点和边来对非欧几里德数据建模,高效地解决了在实际应用中遇到的图结构数据问题。图神经网络可以很好地学习知识图谱中的节点信息、节点间关系信息以及全局结构信息,本文分别从递归图神经网络、卷积图神经网络、图自编码网络和时空图神经网络等方面对基于图神经网络的知识推理的研究进行了综述,介绍了各类图神经网络的知识推理的研究进行了综述,介绍了各类图神经网络的原理、特点及优势,并就基于图神经网络的知识推理在医学、智能制造、军事、交通等领域的应用进行了归纳。

基于RecGNN的知识推理通过不断地迭代传播邻接节点信息,得到图谱中节点的最终表示,进而开展知识推理。相比传统算法,模型同时考虑知识图谱的语义信息和结构信息,具备更好的可解释性和更强的推理能力;但由于在每个时间步都需要展开图中所有的节点,使得模型的收敛速度和效率较差。基于ConvGNN的知识推理通过中心节点与邻接节点之间的卷积来表示节点间信息。模型可以通过节点采样技术提高效率;通过注意力机制可实现邻域对中心贡献程度的自适应调节,实现了在大型知识图谱上开展推理任务;但浅层的网络结构往往使得推理的能力受到限制,不同模型的泛化能力也相对较差。基于GAE的知识推理利用多层感知机作为编码器,以获得节点的低维表示,然后利用解码器

重构节点的邻域信息,进而开展知识推理任务;但受 限于无监督学习的应用场景,整体性能有待提升。 基于STGNN的知识推理引入了时间序列特征,同时 考虑知识图谱的空间信息(结构信息)和时序信息, 可用于开展时序知识图谱推理任务。但模型复杂程 度较高,且在时间序列中的应用效果有待提升。

总体而言,基于图神经网络的知识推理可以较 好地将知识图谱语义信息和结构信息同时考虑,尤 其是能够捕捉知识图谱的结构信息。图神经网络的 信息传播机制相较传统深度学习模型更具有可解释 性,利用图神经网络模型在知识图谱中实现知识推 理,从而显式地生成基于知识图谱的推理路径,或许 可以期待打开深度学习的黑盒。

4.2 展望

未来面向图神经网络的知识推理方法仍将以各 类知识图谱下游任务作为依托,可应用到众多场景 中。与此同时,知识推理需要向自动化、智能化发 展,需要关注大规模(时序)知识图谱中知识推理的 可扩展性,大数据流处理中的推理效率、自动或半自 动的推理实现。最后从以下几个重点技术展望未来 基于图神经网络的知识推理的发展前景。

一是融合多源信息和多种方法的知识推理技 术。随着文本、视频、音频数据的大量出现,众多知 识以不同的形式被表达,因此基于多模态的知识推 理技术将应运而生。从不同类型的数据中推理获得 关联更符合客观世界规律的模型,也更容易被各类 工业任务所应用。融合基于图神经网络的知识推理 与其他方法的知识推理,通过在更深层次混合,实现 优势互补,提升推理性能将成为未来研究的热点。

二是动态知识推理技术。目前,GNN处理的图 结构基本上都是静态图,基于时空图神经网络模型 虽然能处理时序知识图谱,目前针对GNN处理动态 图结构的研究还比较少。传统基于静态图谱的推理 技术不能很好地表达时序信息,在众多工业应用场 景中无法进行动态建模,也无法对时序信息进行处 理。随着算力水平的提升,利用图时空神经网络,将 时序信息加入知识推理技术将逐渐成为未来研究方 向之一。

三是面向大规模知识图谱的快速推理。信息时 代,随着数据的增长,知识图谱的规模越来越大将成 为未来的发展趋势,致使图中的节点数量变得巨大, 这就给图神经网络的计算带来了不小的挑战。因 此,如何充分发挥图神经网络在知识推理中快速捕

捉语义和结构信息的优势,优化推理模型,提高推理 速度,扩展到大规模知识图谱,保证推理的时效性, 将成为未来需要致力解决的问题。针对将图神经网 络应用到大规模图上的研究同样是将来研究的热点 问题,在这方面,引入摘要数据结构,构造局部图数 据,并能适当地融合局部图结构,形成整体图神经网 络的表示是可能的途径之一。

四是开发有效的深度图神经网络。GNN的本质 是通过聚合邻接节点信息来表征中心节点,现有的 图神经网络模型大多还是只限于浅层的结构。一般 来讲,深度图神经网络能更加捕获知识图谱的全局 信息和结构信息,但当构造多层的神经网络之后,中 心节点和邻接节点的差异就会变得微乎其微,实验 结果反而变差,这是由过平滑现象造成的。如何解 决深度图神经网络过平滑现象,使图神经网络能够 应用于更多层的结构,从而发挥出深度学习与图神 经网络的强大优势,构建更深的图神经网络模型仍 是值得深入研究的问题。

五是挖掘和探索知识图谱中更多有用的信息。 在当前对于图神经网络模型的研究中,诸多学者将 较多的精力放在了图数据中节点之间有无连接这一 拓扑结构信息(即知识图谱关系信息)。但知识图谱 除了节点间关系信息,里面还涉及较多的实体信息、 实体属性信息,以及距离中心节点的远近不同的关 系信息对中心节点的影响程度等。如果能够探索出 知识图谱中更多有用信息的表示和利用,必会将基 于图神经网络的知识推理性能提升一个层次。

六是图神经网络的工业落地。当前基于图神经 网络的知识图谱研究大多还只停留在理论层面,亦 或者在实验数据集、公开知识图谱数据等进行测试 验证,实际应用还非常有限。虽然基于图神经网络 的知识推理在部分领域(如医学领域、智能制造领 域、军事领域、交通领域等)已有一小部分的实际应 用,但远没有达到大规模应用的程度。任何研究只 有真正地在工业界落地,才能发挥它的应用价值,反 之也会促进其进一步的研究发展。尽快将图神经网络 应用到实际的工业场景中是一个亟需解决的问题。

参考文献:

- [1] RICHENS R H. Preprogramming for mechanical translation [J]. Mechanical Translation, 1956, 3(1): 20-25.
- [2] JI S, PAN S, CAMBRIA E, et al. A survey on knowledge graphs: representation, acquisition, and applications[J]. IEEE Tran-

- sactions on Neural Networks and Learning Systems, 2021, 33(2): 494-514.
- [3] 马昂, 于艳华, 杨胜利, 等. 基于强化学习的知识图谱研究 综述[J]. 计算机研究与发展, 2022, 59(8): 1694-1722. MA A, YU Y H, YANG S L, et al. Survey of knowledge graph based on reinforcement learning[J]. Journal of Computer Research and Development, 2022, 59(8): 1694-1722.
- [4] NEWELL A, SHAW J C, SIMON H A. Report on a general problem solving program[C]//Proceedings of the 1st International Conference on Information Processing, Jun 15-20, 1959. Paris: UNESCO, 1959: 256-264.
- [5] CHEN Z, WANG Y, ZHAO B, et al. Knowledge graph completion: a review[J]. IEEE Access, 2020, 8: 192435-192456.
- [6] ARORA S. A survey on graph neural networks for knowledge graph completion[J]. arXiv:2007.12374, 2020.
- [7] ZHANG Z, ZHUANG F Z, ZHU H S, et al. Relational graph neural network with hierarchical attention for knowledge graph completion[C]//Proceedings of the 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 32nd Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 10th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, New York, Feb 7-12, 2020. Menlo Park: AAAI, 2020: 9612-9619.
- [8] CAI B, XIANG Y, GAO L, et al. Temporal knowledge graph completion: a survey[J]. arXiv:2201.08236, 2022.
- [9] ZEB A, SAIF S, CHEN J, et al. Complex graph convolutional network for link prediction in knowledge graphs[J]. Expert Systems with Applications, 2022, 200: 116796.
- [10] 陈子睿, 王鑫, 王林, 等. 开放领域知识图谱问答研究综述 [J]. 计算机科学与探索, 2021, 15(10): 1843-1869. CHEN Z R, WANG X, WANG L, et al. Survey of opendomain knowledge graph question answering[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2021, 15 (10): 1843-1869.
- [11] 萨日娜, 李艳玲, 林民. 知识图谱推理问答研究综述[J]. 计算机科学与探索, 2022, 16(8): 1727-1741.

 SA R N, LI Y L, LIN M. Survey of question answering based on knowledge graph reasoning[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2022, 16(8): 1727-1741.
- [12] GUO Q, ZHUANG F, QIN C, et al. A survey on knowledge graph- based recommender systems[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2022, 34(8): 3549-3568.
- [13] 朱冬亮, 文奕, 万子琛. 基于知识图谱的推荐系统研究综 述[J]. 数据分析与知识发现, 2021, 5(12): 1-13.

- ZHU D L, WEN Y, WAN Z C. Review of recommendation systems based on knowledge graph[J]. Data Analysis and Knowledge Discovery, 2021, 5(12):1-13.
- [14] LIU J, DUAN L. A survey on knowledge graph-based recommender systems[C]//Proceedings of the 2021 IEEE 5th Advanced Information Technology, Electronic and Automation Control Conference, Xi'an, Oct 15-17, 2021. Piscataway: IEEE, 2021: 2450-2453.
- [15] 程章桃, 钟婷, 张晟铭, 等. 基于图学习的推荐系统研究综述[J]. 计算机科学, 2022, 49(9): 1-13.
 CHENG Z T, ZHONG T, ZHANG S M, et al. Survey of recommendation systems based on graph learning[J]. Computer Science, 2022, 49(9): 1-13.
- [16] 田萱, 陈杭雪. 推荐任务中知识图谱嵌入应用研究综述 [J]. 计算机科学与探索, 2022, 16(8): 1681-1705.

 TIAN X, CHEN H X. Survey on applications of knowledge graph embedding in recommendation tasks[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2022, 16 (8): 1681-1705.
- [17] 乔凯, 陈可佳, 陈景强. 基于知识图谱与关键词注意机制的中文医疗问答匹配方法[J]. 模式识别与人工智能, 2021, 34(8): 733-741.

 QIAO K, CHEN K J, CHEN J Q. Chinese medical question answering matching method based on knowledge graph and keyword attention mechanism[J]. Pattern Recognition and Artificial Intelligence, 2021, 34(8): 733-741.
- [18] 范媛媛, 李忠民. 中文医学知识图谱研究及应用进展[J]. 计算机科学与探索, 2022, 16(10): 2219-2233. FAN Y Y, LI Z M. Research and application progress of Chinese medical knowledge graph[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2022, 16(10): 2219-2233.
- [19] 董文波, 孙仕亮, 殷敏智. 医学知识推理研究现状与发展 [J]. 计算机科学与探索, 2022, 16(6): 1193-1213.

 DONG W B, SUN S L, YIN M Z. Research and development of medical knowledge graph reasoning[J]. Journal of Frontiers of Computer Science and Technology, 2022, 16 (6): 1193-1213.
- [20] 袁俊, 刘国柱, 梁宏涛, 等. 知识图谱在商业银行风控领域的研究与应用综述[J]. 计算机工程与应用, 2022, 58(19): 37-52.
 - YUAN J, LIU G Z, LIANG H T, et al. Summary of research and application of knowledge graphs in risk management field of commercial banks[J]. Computer Engineering and Applications, 2022, 58(19): 37-52.
- [21] 张栋豪, 刘振宇, 郏维强, 等. 知识图谱在智能制造领域的

- 研究现状及其应用前景综述[J]. 机械工程学报, 2021, 57 (5): 90-113.
- ZHANG D H, LIU Z Y, JIA W Q, et al. A review on knowledge graph and its application prospects to intelligent manufacturing[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2021, 57 (5): 90-113.
- [22] 丁兆云, 刘凯, 刘斌, 等. 网络安全知识图谱研究综述[J]. 华中科技大学学报(自然科学版), 2021, 49(7): 79-91. DING Z Y, LIU K, LIU B, et al. Survey of cyber security knowledge graph[J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2021, 49 (7): 79-91.
- [23] CHEN X, JIA S, XIANG Y. A review: knowledge reasoning over knowledge graph[J]. Expert Systems with Applications, 2020, 141: 112948.
- [24] TIAN L, ZHOU X, WU Y P, et al. Knowledge graph and knowledge reasoning: a systematic review[J]. Journal of Electronic Science and Technology, 2022: 100159.
- [25] YE Z, KUMAR Y J, SING G O, et al. A comprehensive survey of graph neural networks for knowledge graphs[J]. IEEE Access, 2022, 10: 75729-75741.
- [26] 宋浩楠, 赵刚, 孙若莹. 基于深度强化学习的知识推理研 究进展综述[J]. 计算机工程与应用, 2022, 58(1): 12-25. SONG H N, ZHAO G, SUN R Y. Developments of knowledge reasoning based on deep reinforcement learning[J]. Computer Engineering and Applications, 2022, 58(1): 12-25.
- [27] 张宇, 郭文忠, 林森, 等. 深度学习与知识推理相结合的研 究综述[J]. 计算机工程与应用, 2022, 58(1): 56-69. ZHANG Y, GUO W Z, LIN S, et al. Review on combination of deep learning and knowledge reasoning[J]. Computer Engineering and Applications, 2022, 58(1): 56-69.
- [28] ZHANG W, CHEN J, LI J, et al. Knowledge graph reasoning with logics and embeddings: survey and perspective [J]. arXiv:2202.07412, 2022.
- [29] 马瑞新, 李泽阳, 陈志奎, 等. 知识图谱推理研究综述[J]. 计算机科学, 2022, 49(S1): 74-85. MARX, LIZY, CHENZK, et al. Review of reasoning on knowledge graph[J]. Computer Science, 2022, 49(S1): 74-85.
- [30] CAI H, ZHENG V W, CHANG K C C. A comprehensive survey of graph embedding: problems, techniques, and applications[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2018, 30(9): 1616-1637.
- [31] CAO S S, LU W, XU Q K. GraRep: learning graph representations with global structural information[C]//Proceedings of the 24th ACM International Conference on Information and Knowledge Management, Melbourne, Oct 19-

- 23, 2015. New York: ACM, 2015: 891-900.
- [32] 赵军. 知识图谱[M]. 北京: 高等教育出版社, 2018. ZHAO J. Knowledge graph[M]. Beijing: Higher Education Press, 2018.
- [33] ZHU C C, CHEN M H, FAN C J, et al. Learning from history: modeling temporal knowledge graphs with sequential copy-generation networks[C]//Proceedings of the 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 33rd Conference on Innovative Applications of Artificial Intelligence, the 11th Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence. Menlo Park: AAAI, 2021: 4732-4740.
- [34] 张仲伟, 曹雷, 陈希亮, 等. 基于神经网络的知识推理研究 综述[J]. 计算机工程与应用, 2019, 55(12): 8-19. ZHANG Z W, CAO L, CHEN X L, et al. Survey of knowledge reasoning based on neural network[J]. Computer Engineering and Applications, 2019, 55(12): 8-19.
- [35] 官赛萍, 靳小龙, 贾岩涛, 等. 面向知识图谱的知识推理研 究进展[J]. 软件学报, 2018, 29(10): 2966-2994. GUAN S P, JIN X L, JIA Y T, et al. Knowledge reasoning over knowledge graph: a survey[J]. Journal of Software, 2018, 29(10): 2966-2994.
- [36] 翁金塔, 仇晶, 张光华. 面向推理的知识图谱表示学习方 法综述[J]. 广州大学学报(自然科学版), 2021, 20(3): 80-89. WENG J T, QIU J, ZHANG G H. The representation learning method of a knowledge graph for reasoning: a review [J]. Journal of Guangzhou University (Natural Science Edition), 2021, 20(3): 80-89.
- [37] WU Z, PAN S, CHEN F, et al. A comprehensive survey on graph neural networks[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2020, 32(1): 4-24.
- [38] LEE T W, LEWICKI M S, GIROLAMI M, et al. Blind source separation of more sources than mixtures using overcomplete representations[J]. IEEE Signal Processing Letters, 1999, 6(4): 87-90.
- [39] SCHOENMACKERS S, DAVIS J, ETZIONI O, et al. Learning first-order horn clauses from web text[C]//Proceedings of the 2010 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Cambridge, Oct 9-11, 2010. Stroudsburg: ACL, 2010: 1088-1098.
- [40] GALÁRRAGA L A, TEFLIOUDI C, HOSE K, et al. AMIE: association rule mining under incomplete evidence in ontological knowledge bases[C]//Proceedings of the 22nd International Conference on World Wide Web, Rio de Janeiro, May 13-17, 2013. New York: ACM, 2013: 413-422.
- [41] MITCHELL T, COHEN W, HRUSCHKA E, et al. Neverending learning[J]. Communications of the ACM, 2018, 61

- (5): 103-115.
- [42] WANG W Y, MAZAITIS K, COHEN W W. Programming with personalized pagerank: a locally groundable first-order probabilistic logic[C]//Proceedings of the 22nd ACM International Conference on Information and Knowledge Management, San Francisco, Oct 27- Nov 1, 2013. New York: ACM, 2013: 2129-2138.
- [43] RICHARDSON M, DOMINGOS P. Markov logic networks [J]. Machine Learning, 2006, 62(1): 107-136.
- [44] CHEN Y, WANG D Z. Knowledge expansion over probabilistic knowledge bases[C]//Proceedings of the 2014 ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, Snowbird Utah, Jun 22-27, 2014. New York: ACM, 2014: 649-660.
- [45] KIMMIG A, BACH S, BROECHELER M, et al. A short introduction to probabilistic soft logic[C]//Proceedings of the 2012 NIPS Workshop on Probabilistic Programming: Foundations and Applications, Lake Tahoe, Dec 8, 2012. Cambridge: MIT Press, 2012: 1-4.
- [46] BACH S H, BROECHELER M, HUANG B, et al. Hingeloss Markov random fields and probabilistic soft logic[J]. Journal of Machine Learning Research, 2017, 18: 1-67.
- [47] PUJARA J, MIAO H, GETOOR L, et al. Ontology-aware partitioning for knowledge graph identification[C]//Proceedings of the 2013 Workshop on Automated Knowledge Base Construction, San Francisco, Oct 27-28, 2013. New York: ACM, 2013: 19-24.
- [48] CHEN Y, GOLDBERG S, WANG D Z, et al. Ontological pathfinding[C]//Proceedings of the 2016 International Conference on Management of Data, San Francisco, Jun 26-Jul 1, 2016. New York: ACM, 2016: 835-846.
- [49] WEI Y Z, LUO J, XIE H Y. KGRL: an OWL2 RL reasoning system for large scale knowledge graph[C]//Proceedings of the 12th International Conference on Semantics, Knowledge and Grids, Beijing, Aug 15-17, 2016. Washington: IEEE Computer Society, 2016: 83-89.
- [50] LAO N, COHEN W W. Relational retrieval using a combination of path-constrained random walks[J]. Machine Learning, 2010, 81(1): 53-67.
- [51] GARDNER M, MITCHELL T. Efficient and expressive know-ledge base completion using subgraph feature extraction [C]//Proceedings of the 2015 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Lisbon, Sep 17-21, 2015. Stroudsburg: ACL, 2015: 1488-1498.
- [52] WANG Q, LIU J, LUO Y F, et al. Knowledge base completion via coupled path ranking[C]//Proceedings of the

- 54th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, Berlin, Aug 7-12, 2016. Stroudsburg: ACL, 2016: 1308-1318.
- [53] NICKEL M, TRESP V, KRIEGEL H P. A three-way model for collective learning on multi-relational data[C]//Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning, Bellevue, Jun 28-Jul 2, 2011. Madison: Omnipress, 2011: 809-816.
- [54] NICKEL M, TRESP V, KRIEGEL H P. Factorizing YAGO: scalable machine learning for linked data[C]//Proceedings of the 21st International Conference on World Wide Web, Lyon, Apr 16-20, 2012. New York: ACM, 2012: 271-280.
- [55] WU Y, ZHU D, LIAO X, et al. Knowledge graph reasoning based on paths of tensor factorization[J]. Pattern Recognition and Artificial Intelligence, 2017, 30(5): 473-480.
- [56] JAIN P, MURTY S, CHAKRABARTI S. Joint matrix-tensor factorization for knowledge base inference[J]. arXiv:1706. 00637, 2017.
- [57] BORDES A, USUNIER N, GARCÍA-DURÁN A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data [C]//Proceedings of the 27th Annual Conference on Neural Information Processing Systems 2013, Dec 5-8, 2013. Red Hook: Curran Associates, 2013: 2787-2795.
- [58] WANG Z, ZHANG J W, FENG J L, et al. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes[C]//Proceedings of the 14th AAAI Conference on Artificial Intelligence Québec, Jul 27-31, 2014. Menlo Park: AAAI, 2014: 1112-1119.
- [59] LIN Y, LIU Z, SUN M, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion[C]//Proceedings of the 15th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Austin, Jan 25-30, 2015. Menlo Park: AAAI, 2015: 2181-2187.
- [60] LIN Y, LIU Z, LUAN H, et al. Modeling relation paths for representation learning of knowledge bases[J]. arXiv:1506. 00379, 2015.
- [61] JI G, HE S, XU L, et al. Knowledge graph embedding via dynamic mapping matrix[C]//Proceedings of the 53rd Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 7th International Joint Conference on Natural Language Processing, Beijing, Jul 26-31, 2015. Stroudsburg: ACL, 2015: 687-696.
- [62] JI G L, LIU K, HE S Z, et al. Knowledge graph completion with adaptive sparse transfer matrix[C]//Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, Feb 12-17, 2016. Menlo Park: AAAI, 2016: 985-991.
- [63] XIAO H, HUANG M, HAO Y, et al. TransG: a generative

- mixture model for knowledge graph embedding[C]//Proceedings of the 54th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, Berlin, Aug 7-12, 2016. Stroudsburg: ACL, 2016: 2316-2325.
- [64] TRIVEDI R, DAI H J, WANG Y C, et al. Know-evolve: deep temporal reasoning for dynamic knowledge graphs [C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning, Sydney, Aug 6-11, 2017: 3462-3471.
- [65] DASGUPTA S S, RAY S N, TALUKDAR P. HyTE: hyperplane-based temporally aware knowledge graph embedding [C]//Proceedings of the 2018 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Brussels, Oct 31-Nov 4, 2018. Stroudsburg: ACL, 2018: 2001-2011.
- [66] CHEN X, CHEN M, SHI W, et al. Embedding uncertain knowledge graphs[C]//Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence, Honolulu, Jan 27-Feb 1, 2019. Menlo Park: AAAI, 2019: 3363-3370.
- [67] BORDES A, GLOROT X, WESTON J, et al. A semantic matching energy function for learning with multi-relational data[J]. Machine Learning, 2014, 94(2): 233-259.
- [68] YANG B, YIH W, HE X, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases[J]. arXiv:1412.6575, 2014.
- [69] NICKEL M, ROSASCO L, POGGIO T. Holographic embeddings of knowledge graphs[C]//Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, Feb 12-17, 2016. Menlo Park: AAAI, 2016: 1955-1961.
- [70] TROUILLON T, DANCE C R, WELBL J, et al. Knowledge graph completion via complex tensor factorization[J]. Journal of Machine Learning Research, 2017, 8: 1-38.
- [71] GUO S, WANG Q, WANG L, et al. Jointly embedding knowledge graphs and logical rules[C]//Proceedings of the 2016 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Austin, Nov 1-4, 2016. Stroudsburg: ACL, 2016: 192-202.
- [72] WANG Z, LI J, LIU Z, et al. Text-enhanced representation learning for knowledge graph[C]//Proceedings of the 25th International Joint Conference on Artificial Intelligence, New York, Jul 9-15, 2016. Palo Alto: AAAI, 2016: 4-17.
- [73] QU M, TANG J. Probabilistic logic neural networks for reasoning[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 32, Vancouver, Dec 8-14, 2019: 7710-7720.
- [74] ZHANG W, PAUDEL B, WANG L, et al. Iteratively learning embeddings and rules for knowledge graph reasoning [C]//Proceedings of the World Wide Web Conference, San Francisco, May 13-17, 2019. New York: ACM, 2019: 2366-

2377.

- [75] XIE R, LIU Z, JIA J, et al. Representation learning of knowledge graphs with entity descriptions[C]//Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, Feb 12-17, 2016. Menlo Park: AAAI, 2016: 2659-2665.
- [76] SHI B, WENINGER T. Open-world knowledge graph completion[C]//Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence, New Orleans, Feb 2-7, 2018. Menlo Park: AAAI, 2018: 1957-1964.
- [77] TAY Y, TUAN L A, PHAN M C, et al. Multi-task neural network for non-discrete attribute prediction in knowledge graphs[C]//Proceedings of the 2017 ACM Conference on Information and Knowledge Management, Singapore, Nov 6-10, 2017. New York: ACM, 2017: 1029-1038.
- [78] DETTMERS T, MINERVINI P, STENETORP P, et al. Convolutional 2D knowledge graph embeddings[C]//Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence, New Orleans, Feb 2-7, 2018. Menlo Park: AAAI, 2018: 1811-1818.
- [79] LI S J, CHEN S D, OUYANG X Y, et al. Joint learning based on multi-shaped filters for knowledge graph completion[J]. High Technology Letters, 2021, 27(1): 43-52.
- [80] NEELAKANTAN A, ROTH B, MCCALLUM A. Compositional vector space models for knowledge base inference [C]//Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Austin, Jan 25-30, 2015. Menlo Park: AAAI, 2015: 31-34.
- [81] SHEN Y, HUANG P S, CHANG M W, et al. Traversing knowledge graph in vector space without symbolic space guidance[J]. arXiv:1611.04642, 2016.
- [82] GUO L B, ZHANG Q H, GE W Y, et al. DSKG: a deep sequential model for knowledge graph completion[C]//Proceedings of the 3rd China Conference on Knowledge Graph and Semantic Computing, Tianjin, Aug 14-17, 2018. Cham: Springer, 2018: 65-77.
- [83] XIONG W, HOANG T, WANG W Y. DeepPath: a reinforcement learning method for knowledge graph reasoning[J]. arXiv:1707.06690, 2017.
- [84] DAS R, DHULIAWALA S, ZAHEER M, et al. Go for a walk and arrive at the answer: reasoning over paths in knowledge bases using reinforcement learning[J]. arXiv: 1711.05851, 2017.
- [85] LI Z, JIN X, GUAN S, et al. Path reasoning over knowledge graph: a multi-agent and reinforcement learning based method[C]//Proceedings of the 2018 IEEE International Conference on Data Mining, Singapore, Nov 17-20, 2018.

- Piscataway: IEEE, 2018: 929-936.
- [86] WANG Q, JI Y, HAO Y, et al. GRL: knowledge graph completion with GAN-based reinforcement learning[J]. Knowledge-Based Systems, 2020, 209: 106421.
- [87] TIWARI P, ZHU H, PANDEY H M. DAPath: distance-aware knowledge graph reasoning based on deep reinforcement learning[J]. Neural Networks, 2021, 135: 1-12.
- [88] SCARSELLI F, GORI M, TSOI A C, et al. The graph neural network model[J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 2008, 20(1): 61-80.
- [89] GALLICCHIO C, MICHELI A. Graph echo state networks [C]//Proceedings of the 2010 International Joint Conference on Neural Networks, Barcelona, Jul 18-23, 2010. Piscataway: IEEE, 2010: 1-8.
- [90] LI Y, TARLOW D, BROCKSCHMIDT M, et al. Gated graph sequence neural networks[J]. arXiv:1511.05493, 2015.
- [91] DAI H J, KOZAREVA Z, DAI B, et al. Learning steady-states of iterative algorithms over graphs[C]//Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning, Stockholmsmässan, Jul 10-15, 2018: 1114-1122.
- [92] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs[J]. arXiv: 1312.6203, 2013.
- [93] HAMILTON W L, YING Z T, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 30, Long Beach, Dec 4-9, 2017. Red Hook: Curran Associates, 2017: 1024-1034.
- [94] SCHLICHTKRULL M S, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks [C]//LNCS 10843: Proceedings of the 15th European Semantic Web Conference, Heraklion, Jun 3-7, 2018. Cham: Springer, 2018: 593-607.
- [95] VASHISHTH S, SANYAL S, NITIN V, et al. Composition based multi-relational graph convolutional networks[J]. arXiv:1911.03082, 2019.
- [96] SHANG C, TANG Y, HUANG J, et al. End-to-end structure-aware convolutional networks for knowledge base completion[C]//Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 31st Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 9th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, Honolulu, Jan 27-Feb 1, 2019. Menlo Park: AAAI, 2019: 3060-3067.
- [97] VELIČKOVIĆ P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph attention networks[J]. arXiv:1710.10903, 2017.
- [98] ZHANG J, SHI X, XIE J, et al. GaAN: gated attention

- networks for learning on large and spatio-temporal graphs [J]. arXiv:1803.07294, 2018.
- [99] PARK N, KAN A, DONG X L, et al. Estimating node importance in knowledge graphs using graph neural networks [C]//Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, Anchorage, Aug 4-8, 2019. New York: ACM, 2019: 596-606.
- [100] CHEN X, DING L, XIANG Y. Neighborhood aggregation based graph attention networks for open-world knowledge graph reasoning[J]. Journal of Intelligent & Fuzzy Systems, 2021, 41(2): 3797-3808.
- [101] CAO S, LU W, XU Q. Deep neural networks for learning graph representations[C]//Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, Feb 12-17, 2016. Menlo Park: AAAI, 2016: 1145-1152.
- [102] WANG D, CUI P, ZHU W. Structural deep network embedding[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, San Francisco, Aug 13-17, 2016. New York: ACM, 2016: 1225-1234.
- [103] KIPF T N, WELLING M. Variational graph auto-encoders [J]. arXiv:1611.07308, 2016.
- [104] PAN S, HU R, LONG G, et al. Adversarially regularized graph autoencoder for graph embedding[J]. arXiv:1802. 04407, 2018.
- [105] LI Y, VINYALS O, DYER C, et al. Learning deep generative models of graphs[J]. arXiv:1803.03324, 2018.
- [106] BOJCHEVSKI A, SHCHUR O, ZÜGNER D, et al. Net-GAN: generating graphs via random walks[C]//Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning, Stockholm, Jul 10-15, 2018: 610-619.
- [107] WANG S, WEI X, NOGUEIRADOS SANTOS C N, et al. Mixed-curvature multi-relational graph neural network for knowledge graph completion[C]//Proceedings of the 30th Web Conference 2021, Ljubljana, Apr 19-23, 2021. New York: ACM, 2021: 1761-1771.
- [108] LI Y, YU R, SHAHABI C, et al. Diffusion convolutional recurrent neural network: data-driven traffic forecasting [J]. arXiv:1707.01926, 2017.
- [109] YU B, YIN H, ZHU Z. Spatio-temporal graph convolutional networks: a deep learning framework for traffic forecasting[J]. arXiv:1709.04875, 2017.
- [110] WU Z, PAN S, LONG G, et al. Graph wavenet for deep spatial-temporal graph modeling[J]. arXiv:1906.00121, 2019.
- [111] ZHENG C P, FAN X L, WANG C, et al. GMAN: a graph multi-attention network for traffic prediction[C]//Procee-

- dings of the 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 32nd Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 10th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, New York, Feb 7-12, 2020. Menlo Park: AAAI, 2020: 1234-1241.
- [112] KHALED A, ELSIR A M T, SHEN Y. TFGAN: traffic forecasting using generative adversarial network with multigraph convolutional network[J]. Knowledge-Based Systems, 2022: 108990.
- [113] GORI M, MONFARDINI G, SCARSELLI F. A new model for learning in graph domains[C]//Proceedings of the 2005 IEEE International Joint Conference on Neural Networks, Montreal, Jul 31- Aug 4, 2005. Piscataway: IEEE, 2005: 729-734.
- [114] LI J H, XU W B, JIN Y W, et al. Applying of graph neural network in relationship prediction in knowledge graph reasoning[C]//Proceedings of the 2021 IEEE 23rd International Conference on High Performance Computing & Communications; the 7th International Conference on Data Science & Systems; the 19th International Conference on Smart City; the 7th International Conference on Dependability in Sensor, Cloud & Big Data Systems & Application, Haikou, Dec 20-22, 2021. Piscataway: IEEE, 2021: 2206-2210.
- [115] HENAFF M, BRUNA J, LECUN Y. Deep convolutional networks on graph-structured data[J]. arXiv:1506.05163, 2015.
- [116] DEFFERRARD M, BRESSON X, VANDERGHEYNST P. Convolutional neural networks on graphs with fast localized spectral filtering[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 29, Barcelona, Dec 5-10, 2016. Red Hook: Curran Associates, 2016: 3837-3845.
- [117] LEVIE R, MONTI F, BRESSON X, et al. CayleyNets: graph convolutional neural networks with complex rational spectral filters[J]. IEEE Transactions on Signal Processing, 2018, 67(1): 97-109.
- [118] CHEN J, MA T, XIAO C. FastGCN: fast learning with graph convolutional networks via importance sampling[J]. arXiv:1801.10247, 2018.
- [119] HUR A, JANJUA N, AHMED M. A survey on state-of-theart techniques for knowledge graphs construction and challenges ahead[C]//Proceedings of the IEEE 4th International Conference on Artificial Intelligence and Knowledge Engineering, Laguna Hills, Dec 1-3, 2021. Piscataway: IEEE, 2021: 99-103.
- [120] KIPF T N, WELLING M. Semi-supervised classification

- with graph convolutional networks[J]. arXiv:1609.02907,
- [121] DAI H, DAI B, SONG L. Discriminative embeddings of latent variable models for structured data[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning, New York, Jun 19-24, 2016: 2702-2711.
- [122] HU F, ZHU Y, WU S, et al. Hierarchical graph convolutional networks for semi-supervised node classification[J]. arXiv:1902.06667, 2019.
- [123] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 30, Long Beach, Dec 4-9, 2017. Red Hook: Curran Associates, 2017: 5998-6008.
- [124] XIE Y, ZHANG Y, GONG M, et al. MGAT: multi-view graph attention networks[J]. Neural Networks, 2020, 132: 180-189.
- [125] XU D, RUAN C, KORPEOGLU E, et al. Inductive representation learning on temporal graphs[J]. arXiv:2002. 07962, 2020.
- [126] NATHANI D, CHAUHAN J, SHARMA C, et al. Learning attention-based embeddings for relation prediction in knowledge graphs[J]. arXiv:1906.01195, 2019.
- [127] XU X, FENG W, JIANG Y, et al. Dynamically pruned message passing networks for large-scale knowledge graph reasoning[J]. arXiv:1909.11334, 2019.
- [128] XIE Z, ZHOU G, LIU J, et al. ReInceptionE: relationaware inception network with joint local-global structural information for knowledge graph embedding[C]//Proceedings of the 58th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics. Stroudsburg: ACL, 2020: 5929-5939.
- [129] 康世泽, 吉立新, 张建朋. 一种基于图注意力网络的异质 信息网络表示学习框架[J]. 电子与信息学报, 2021, 43 (4): 915-922.
 - KANG S Z, JI L X, ZHANG J P. Heterogeneous information network representation learning framework based on graph attention network[J]. Journal of Electronics & Information Technology, 2021, 43(4): 915-922.
- [130] 田玲, 张谨川, 张晋豪, 等. 知识图谱综述——表示、构 建、推理与知识超图理论[J]. 计算机应用, 2021, 41(8): 2161-2186.
 - TIAN L, ZHANG J C, ZHANG J H, et al. Knowledge graph survey: representation, construction, reasoning and knowledge hypergraph theory[J]. Journal of Computer Applications, 2021, 41(8): 2161-2186.
- [131] SHANG C, LIU Q, CHEN K S, et al. Edge attention-based

- multi-relational graph convolutional networks[J]. arXiv: 1802.04944, 2018.
- [132] ZHANG Y, CHEN X, YANG Y, et al. Efficient probabilistic logic reasoning with graph neural networks[J]. arXiv:2001.11850, 2020.
- [133] CHAMI I, WOLF A, JUAN D C, et al. Low-dimensional hyperbolic knowledge graph embeddings[J]. arXiv:2005. 00545, 2020.
- [134] YU W, ZHENG C, CHENG W, et al. Learning deep network representations with adversarially regularized autoencoders[C]//Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, London, Aug 19-23, 2018. New York: ACM, 2018: 2663-2671.
- [135] TU K, CUI P, WANG X, et al. Deep recursive network embedding with regular equivalence [C]//Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, London, Aug 19-23, 2018. New York: ACM, 2018: 2357-2366.
- [136] DE CAO N, KIPF T. MolGAN: an implicit generative model for small molecular graphs[J]. arXiv:1805.11973, 2018.
- [137] YOU J, YING R, REN X, et al. GraphRNN: generating realistic graphs with deep auto-regressive models[C]//Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning, Stockholm, Jul 10-15, 2018: 5708-5717.
- [138] ZHAO L, SONG Y, ZHANG, et al. T-GCN: a temporal graph convolutional network for traffic prediction[J]. IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, 2019, 21(9): 3848-3858.
- [139] SEO Y, DEFFERRARD M, VANDERGHEYNST P, et al. Structured sequence modeling with graph convolutional recurrent networks[C]//LNCS 11301: Proceedings of the 25th International Conference on Neural Information Processing, Siem Reap, Dec 13-16, 2018. Cham: Springer, 2018: 362-373.
- [140] GUO S, LIN Y, FENG N, et al. Attention based spatial-temporal graph convolutional networks for traffic flow forecasting[C]//Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 31st Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 9th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, Honolulu, Jan 27-Feb 1, 2019. Menlo Park: AAAI, 2019: 922-929.
- [141] WU Z, PAN S, LONG G, et al. Connecting the dots: multivariate time series forecasting with graph neural networks[C]//Proceedings of the 26th ACM SIGKDD

- International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York: ACM, 2020: 753-763.
- [142] VRETINARIS A, LEI C, EFTHYMIOU V, et al. Medical entity disambiguation using graph neural networks[C]// Proceedings of the 2021 International Conference on Management of Data. New York: ACM, 2021: 2310-2318.
- [143] ZITNIK M, AGRAWAL M, LESKOVEC J. Modeling polypharmacy side effects with graph convolutional networks[J]. Bioinformatics, 2018, 34(13): i457-i466.
- [144] IOANNIDIS V N, MARQUES A G, GIANNAKIS G B. Graph neural networks for predicting protein functions [C]//Proceedings of the 2019 IEEE 8th International Workshop on Computational Advances in Multi-Sensor Adaptive Processing, Le Gosier, Dec 15-18, 2019. Piscataway: IEEE, 2019: 221-225.
- [145] LI L, WANG P, YAN J, et al. Real-world data medical knowledge graph: construction and applications[J]. Artificial Intelligence in Medicine, 2020, 103: 101817.
- [146] ZHANG Y. Knowledge reasoning with graph neural networks[D]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 2021.
- [147] 黄超. 基于图神经网络的知识推理研究与应用[D]. 成都: 电子科技大学, 2021.

 HUANG C. Research and application of knowledge reasoning based on graph neural network[D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2021.
- [148] MA Y, HE Z, LI W, et al. Understanding graphs in EDA: from shallow to deep learning[C]//Proceedings of the 2020 International Symposium on Physical Design, Taipei, China, Sep 20-23, 2020. New York: ACM, 2020: 119-126.
- [149] 林旺群, 汪森, 王伟, 等. 知识图谱研究现状及军事应用 [J]. 中文信息学报, 2020, 34(12): 9-16.

 LIN W Q, WANG M, WANG W, et al. A survey to knowledge graph and its military application[J]. Journal of Chinese Information Processing, 2020, 34(12): 9-16.
- [150] 张清辉, 杨楠, 梁政. 任务驱动的军事信息服务知识推理研究[J]. 火力与指挥控制, 2021, 46(5): 64-70.

 ZHANG Q H, YANG N, LIANG Z. Study on knowledge reasoning of task driven military information service[J]. Fire Control & Command Control, 2021, 46(5): 64-70.
- [151] 庞维建, 李辉, 黄谦, 等. 基于本体的无人系统任务规划研究综述[J]. 系统工程与电子技术, 2022, 44(3): 908-920. PANG W J, LI H, HUANG Q, et al. Review on ontology-based task planning for unmanned systems[J]. System Engineering and Electronics, 2022, 44(3): 908-920.
- [152] PENG H, WANG H, DU B, et al. Spatial temporal incidence dynamic graph neural networks for traffic flow

forecasting[J]. Information Sciences, 2020, 521: 277-290.

- [153] SANKAR A, WU Y, GOU L, et al. DySAT: deep neural representation learning on dynamic graphs via self-attention networks[C]//Proceedings of the 13th International Conference on Web Search and Data Mining, Houston, Feb 3-7, 2020. New York: ACM, 2020: 519-527.
- [154] PAREJA A, DOMENICONI G, CHEN J, et al. Evolve-GCN: evolving graph convolutional networks for dynamic graphs[C]//Proceedings of the 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 32nd Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 10th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, New York, Feb 7-12, 2020. Menlo Park: AAAI, 2020: 5363-5370.
- [155] 赵振兵, 段记坤, 孔英会, 等. 基于门控图神经网络的栓母 对知识图谱构建与应用[J]. 电网技术, 2021, 45(1): 98-106. ZHAO Z B, DUAN J K, KONG Y H, et al. Construction and application of bolt and nut pair knowledge graph based on GGNN[J]. Power System Technology, 2021, 45 (1): 98-106.
- [156] WANG Z, CHEN T, REN J, et al. Deep reasoning with knowledge graph for social relationship understanding[J]. arXiv:1807.00504, 2018.
- [157] WU S, TANG Y, ZHU Y, et al. Session-based recommendation with graph neural networks[C]//Proceedings of the 33rd AAAI Conference on Artificial Intelligence, the 31st Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference, the 9th AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence, Honolulu, Jan 27- Feb 1, 2019. Menlo Park: AAAI, 2019: 346-353.



孙水发(1977--),男,江西黎川人,博士,教授, 博士生导师,主要研究方向为智能信息处理、 图像处理等。

SUN Shuifa, born in 1977, Ph.D., professor, Ph.D. supervisor. His research interests include intelligent information processing, image processing, etc.



李小龙(1989—),男,湖北公安人,博士研究 生,讲师,主要研究方向为自然语言处理、知识 图谱、知识推理等。

LI Xiaolong, born in 1989, Ph.D. candidate, lecturer. His research interests include natural language processing, knowledge graph, knowledge reasoning, etc.



李伟生(1975-),男,四川安岳人,博士,教授, 主要研究方向为智能信息处理、模式识别等。

LI Weisheng, born in 1975, Ph.D., professor. His research interests include intelligent information processing, pattern recognition, etc.



雷大江(1979一),男,湖北汉川人,博士,教授, 主要研究方向为数据挖掘、机器学习等。

LEI Dajiang, born in 1979, Ph.D., professor. His research interests include data mining, machine learning, etc.



李思慧(1999—),女,河北石家庄人,硕士研究 生,主要研究方向为知识图谱推理。

LI Sihui, born in 1999, M.S. candidate. Her research interest is knowledge graph reasoning.



杨柳(1981一),女,陕西咸阳人,硕士研究生,主 要研究方向为数据质量、心理与行为大数据等。 YANG Liu, born in 1981, M.S. candidate. Her research interests include data quality, psychological and behavioral big data, etc.



吴义熔(1970-),男,湖北荆州人,博士,教授, 博士生导师,主要研究方向为自然语言处理、 图像处理、信息管理系统等。

WU Yirong, born in 1970, Ph.D., professor, Ph.D. supervisor. His research interests include natural language processing, image processing, information management system, etc.