深層学習によるナレッジグラフの実体の推定手法の検証

1 はじめに

近年,人工知能技術は急速な発展を遂げている. その中でも,ナレッジグラフが注目を集めており,人工知能の実用的な基盤技術としてさまざまな分野で活用されている. ナレッジグラフを用いることにより,自然文や SNS の投稿,音声などの非構造化データに対して高度な知識処理が可能となった. そのため,さまざまな分野の知識を表現するナレッジグラフが開発されている.

また, 推理小説における凶器や犯人を推定する「ナレッジグラフ推論チャレンジ」¹ というコンテストが開催されている. 本コンテストでは, ナレッジグラフを用いて人物の関係や行動の意図, 時系列などの情報を基に, 凶器や犯人の推定の結果を競っている.

本実験では、ナレッジグラフ推論チャレンジにおいて小説の内容のナレッジグラフとして公開されているデータに関して、深層学習の手法のひとつである TransE を用いてナレッジグラフの実体を推定し、その精度を検証する.

2 要素技術

2.1 ナレッジグラフ

ナレッジグラフ(Knowledge Graph)[1]とは、さまざまな知識を体系的に連結し、その関係をグラフ構造で表した知識のネットワークのことである。Googleにより実世界のオブジェクトの検索を可能にする基盤技術として紹介され、さまざまな研究や産業分野に普及された。

図1にナレッジグラフの例を示す.ナレッジグラフは、それぞれが意味をもつエンティティ集合(Entity)と、そのエンティティ同士の関係性を表現するリレーション集合(Relation)によって構成されており、図1のようにエンティティ集合の各要素をノード、リレーション集合の各要素をエッジとする有向グラフとして表される.2つのエンティティ間に複数の関係がある場合はそこに複数のリレーションが付与されるため、多重グラフとなる.なお、Relation

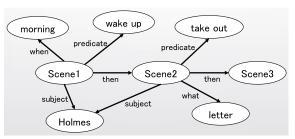


図 1: ナレッジグラフの例

はリレーションの種類の集合であり, Relation の総数はグラフのエッジの総数と一致しない.

また、ナレッジグラフにはグラフと異なる表現方法があり、2つのエンティティとそれらを結ぶリレーションを 1 つにまとめた 3 つ組構造(triple)として表すことができる. triple は、 $head \in Entity$ と $tail \in Entity$ が $relation \in Relation$ で結ばれていることを表す (head, relation, tail) として表現される. ナレッジグラフはさまざまな種類のデータを統合的にグラフとして扱うことにより、データ間の複数のつながりを学習することが可能である.

2.2 TransE

ナレッジグラフの代表的な埋込み(Embedding) 手法として TransE [2] が挙げられる. TransE では、 $D = \{(h_i, r_i, t_i)\}_{i=1}^n$ という triple の集合 (ナレッジグラフ) に対して、以下の式を満たすように学習する.

$$\mathbf{v}(h) + \mathbf{v}(r) \simeq \mathbf{v}(t)$$
 (1)

v(x) は x をベクトル化したものである. 入力としてナレッジグラフを与えると, すべてのエンティティ, リレーションに対してそれぞれ k 次元のベクトルを出力する.

 $v(h), v(r), v(t) \in \mathbb{R}^k$ を $h, t \in$ Entity, $r \in$ Relation の Embedding として、下記の目的関数を最小化する.

$$Loss(V) = \sum_{(h,r,t) \in D} \max(0, f(h,r,t) + \gamma - f(h',r,t'))$$
(2)

ここで, $\gamma \geq 0$ はハイパーパラメータのマージンである. また, f(h,r,t) は triple (h,r,t) の結びつきの良さを表すスコア関数であり,

$$f(h, r, t) = ||\boldsymbol{v}(h) + \boldsymbol{v}(r) - \boldsymbol{v}(t)|| \tag{3}$$

¹https://challenge.knowledge-graph.jp/2021/

表 1: 配布データ例

| head | relation | tail |
|--------|-----------|---------|
| Scene1 | subject | Holmes |
| Scene1 | predicate | wake up |
| Scene1 | when | morning |
| Scene1 | then | Scene2 |
| : | : | : |

表 2: 加工データ例

| | , , , | |
|--------|----------|---------|
| head | relation | tail |
| Holmes | wake up | morning |
| Holmes | wake up | Scene2 |
| : | : | : |

として定義される. 右辺はノルムを表している. また, (h', r, t') は与えられた (h, r, t) に対して, h または t を入れ替えて得られる triple のことである.

このように、TransE はデータとして与えられた triple (h, r, t) が (1) 式を満たすように Embedding し、 $\boldsymbol{v}(h), \boldsymbol{v}(r), \boldsymbol{v}(t)$ を学習するモデルである.

2.3 データセット

ナレッジグラフ推論チャレンジにおいて、シャーロック・ホームズの8作品の推理小説をナレッジグラフとして表現したデータセット²が公開されている。本実験ではこのデータセットを使用する。表1に配布されているナレッジグラフデータの例を示す。本データに関して、エンティティとしてストーリーシーン、登場するキャラクター、オブジェクトの名前、属性名、自然言語文、数値情報をもち、リレーションはそれらの関係を表している。

また、triple 集合はストーリーの展開を説明するものと登場するキャラクターやオブジェクトを説明するものに分類される. ストーリーの展開を説明するtriple では、head としてストーリーシーンをもっている. ストーリーシーンとは物語上の順番ごとにidが割り振られたものであり、同一のストーリーシーンごとに triple 集合を分割すると triple の系列データとしてとらえることができる. また、同一のストーリーシーンには複数の triple が存在し、そのシーンに対する主語や述語は relation と tail によって関係別に表されている.

3 実験

3.1 データの加工

本実験では、ナレッジグラフ推論チャレンジにおいて配布されたデータを加工して使用する. 加工

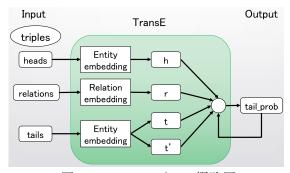


図 2: TransE モデルの概略図

データは主にシーンについて説明された triple 集合 に対して, 以下の処理を施すことで得られる.

- 1. head にあるストーリーシーンごとに triple 集合を分割する.
- relation が "subject" の triple の tail, relation が "predicate" の triple の tail を抽出することでストーリーシーンにおける主語と述語を得る.
- 3. 得た主語と述語をそれぞれ head, relation とし, tail に他の tail をもつ新たな triple を作成する.

以上の処理によって SVO 形式の triple 集合を作成する. 表 2 に, 表 1 の配布データを加工した例を示す.

3.2 TransE モデル

図 2 に本実験で使用する TransE モデルの概略図を示す。本モデルの入力は triple を複数並べたデータである。入力された各 triple の head, relation, tailを Embedding したあと、それらを結合して推定した tail のベクトルを出力する。この推定した tail のベクトルを深層学習により正解の tail のベクトルに近づけていく。つまり、(1) 式を満たすように学習していく。

3.3 実験概要

本実験では、加工したデータのナレッジグラフに関して、TransE を用いて Embedding し、その tail の推定の精度を検証した. 扱う triple 集合のデータを 9:1 に分割し、それぞれを訓練データ、テストデータとした. なお、データ数は 5843 である. また、交差検証として 5 種類のデータを作成し、それぞれに対

²https://github.com/KnowledgeGraphJapan/KGRC-RDF/tree/ikgrc2023

| 表 | 3: | 本実験の | パラ | メー | - タ |
|---|----|------|-------|----|-----|
| 1 | υ. | | · · / | | |

| パラメータ | 値 |
|---------------|----------------------|
| データ数 | 5843 |
| エンティティ数 | 2487 |
| リレーション数 | 583 |
| 埋め込み次元 | 32 |
| バッチサイズ(訓練時) | 5259 |
| バッチサイズ (テスト時) | 584 |
| 学習率 | 1.0×10^{-2} |
| エポック数 | 15000 |

してモデルの学習をし、精度を評価した.表3に本 実験のパラメータを示す.

4 実験結果

図 3,4 に訓練データ、テストデータにおける学習 時の loss の推移を示す. 縦軸は正解の tail とどれだけ離れているかを表すランクの平均値、横軸は epoch 数を表している.

図 3 より, 交差検証として用いた 5 種類のデータにおいて, どれも epoch 数に対して loss が減少していることがわかる. しかし, 5000 epoch あたりで lossが約 700 に収束し始めていることから, 訓練データ内に推定した tail と正解の tail との距離が 700 を超えるものが多く存在することがわかる.

また、図 4 より、5 種類のデータにおいて、訓練データと同様に、どれも epoch 数に対して loss が減少していることがわかる。 さらに、5000 epoch あたりで loss が約 1000 に収束し始めており、推定した tail と正解の tail との距離が 1000 を超えるものが多く存在することがわかる。

図 5 に累積 top 数に対するデータ数の割合の変動を示す. 縦軸は累積 top 数、横軸は累積 top 数に対する triple の割合を表している. 累積 top 数とは、例えば「top3」において、推定した tail と正解の tail との距離が 3 未満であるデータの個数を表している. つまり、「top1」は tail の推定が成功したデータの個数となる. なお、top1 で数えられるデータは top3 にも含まれている. 図 4 より、5 種類のデータにおいてどのグラフも似た形をしている. また、累積 top 数が 500 のときに約 30 % となっていることから、推定した tail と正解の tail との距離であるランクが 500 以内にあるものは約 175 (= テストデータ数×0.3)程度であることがわかる.

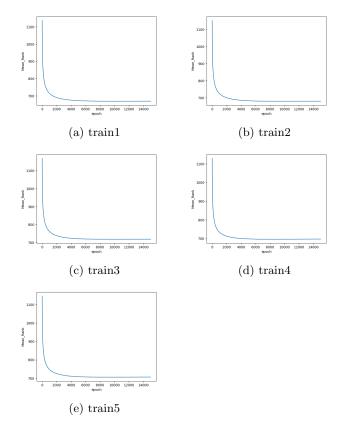


図 3: 訓練データにおける学習時の loss の推移

表 4: 累積 top 数

| (a) train テータ | | | (t | o) test | デー: | Ø | |
|---------------|------|------|-------|---------|------|------|-------|
| | top1 | top3 | top10 | | top1 | top3 | top10 |
| train1 | 6 | 30 | 102 | test1 | 3 | 7 | 20 |
| train2 | 12 | 41 | 131 | test2 | 0 | 4 | 15 |
| train3 | 8 | 34 | 140 | test3 | 1 | 6 | 20 |
| train4 | 8 | 37 | 159 | test4 | 3 | 6 | 18 |
| train5 | 17 | 43 | 151 | test5 | 2 | 5 | 13 |

表 4 にそれぞれ訓練データ、テストデータに対して 5 種類のデータにおける累積 top 数である top1, top3, top10 を示す. 訓練データにおいて、5 つ目のデータが top1 = 17 で他のデータと比べると最も良い結果が得られている. 一方、テストデータにおいてはどのデータも似た結果になっていることがわかる.

表5に5種類のテストデータに対する tail の推定において正解した例を示す.表5より, head もしくは tail に "Holmes" をもつ triple において正しく推定できていることがわかる. また, 正しく推定できた triple の head, tail はどれも小説の登場人物の名前となっている. これは, 小説において人物の名前は一般的な単語より多く登場しており, そのデータ数が比較的多くなったためであると考えられる.

| 表: | : tai | しの推定 | におい | て正解 | した例 |
|----|-------|------|-----|-----|-----|
|----|-------|------|-----|-----|-----|

| test | head | relation | tail |
|------|-------------------|-----------|-----------------|
| | Jack_Croker | believe | Holmes |
| 1 | Holmes | ask | Percy_Trevelyan |
| | Gregory_Inspector | arrest | Fitzroy_Simpson |
| 2 | - | - | - |
| 3 | Holmes | sympathy | Jack_Croker |
| | Henry | help | Holmes |
| 4 | Blessington | invite in | Holmes |
| | Windibank | greet | Holmes |
| 5 | Abe_Slaney | pull out | Elsie |
|)) | Cubitt | visit | Holmes |

以上のことから、本実験における TransE モデルを 用いて tail の推定の精度を良くするためには、登場 の少ない単語が head や tail となる triple において も考慮する必要がある. そのため、そのようなデー タに対して新たな情報を triple として付加すること でデータ数を増やせばよいと考えられる.

5 まとめと今後の課題

本実験では、推理小説を題材としたナレッジグラフに対して TransE を用いて tail を推定し、その精度を検証した.実験の結果、小説内に多く登場する"Holmes" などの人物名を head、tail にもつ triple の推定の精度が良くなることがわかった.今後の課題として、小説に登場する回数が比較的少ない単語がhead や tail となる triple を考慮して、そのような単語に triple として情報を付加することでデータ数を増やすことで、より良い精度での推定を目指すことが挙げられる.

参考文献

- [1] 川村隆浩, 江上周作, 田村光太郎, 外園康智, 鵜飼孝典, 小柳佑介, 西野文人, 岡嶋成司, 村上勝彦, 高松邦彦, 杉浦あおい, 白松俊, 張翔宇, 古崎晃司. 第1回ナレッジグラフ推論チャレンジ 2018 開催報告 一説明性のある人工知能システムを目指して一. 人工知能 34 巻 3 号, 2019.
- [2] Bordes A., Usunier N., Garcia-Duran A., Weston J., and Yakhnenko O. Translating embeddings for modeling multirelational data. Advances in Neural Information Processing Systems, pp. 2787-2795, 2013.

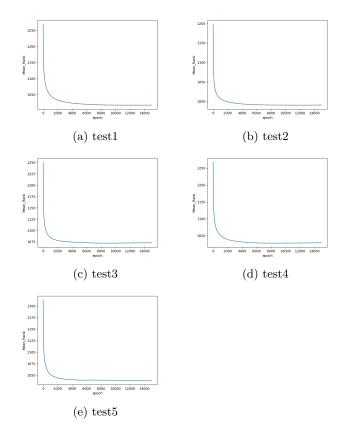


図 4: テストデータにおける学習時の loss の推移

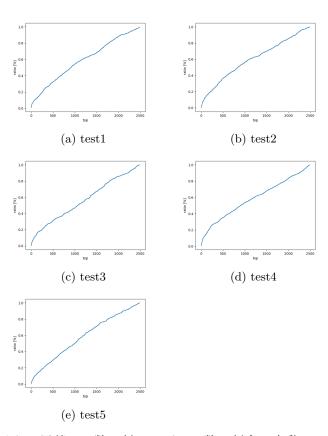


図 5: 累積 top 数に対するデータ数の割合の変動