Графы знаний

Лекция 2 - Представление знаний в графах

М. Галкин, Д. Муромцев

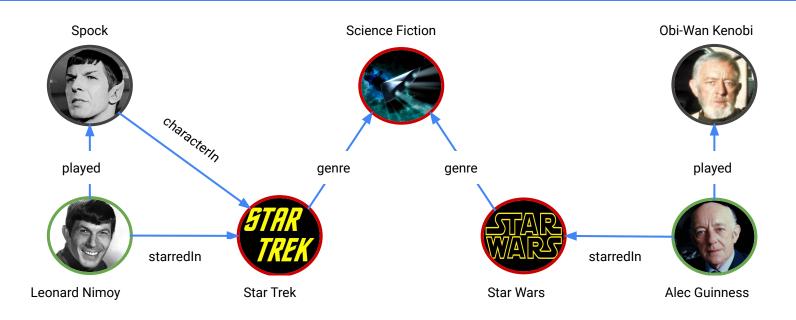
Сегодня

- 1. Introduction
- 2. Представление знаний в графах RDF & RDFS & OWL
- 3. Хранение знаний в графах SPARQL & Graph Databases
- 4. Однородность знаний Reification & RDF* & SHACL & ShEx
- 5. Интеграция данных в графы знаний Semantic Data Integration
- 6. Векторные представления графов Knowledge Graph Embeddings
- 7. Введение в теорию графов Graph Theory Intro
- 8. Машинное обучение на графах Graph Neural Networks & KGs
- 9. Некоторые применения Question Answering & Query Embedding

Содержание

- Графы знаний = графы + знания
- Как представлять знания? Логика и семантика
- Модель RDF и RDFS
- Сериализации RDF
- OWL, классы, экземпляры, аксиомы
- Онтологии как схемы графов знаний

Представление знаний - онтологическое



LeonardNimoy

Spock

starredIn played

characterIn

StarTrek; Spock.

StarTrek .

AlecGuinness

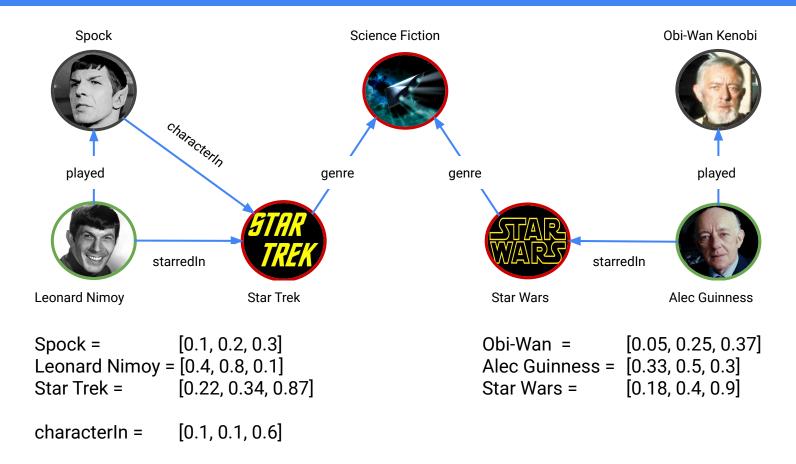
StarWars

starredIn played

genre

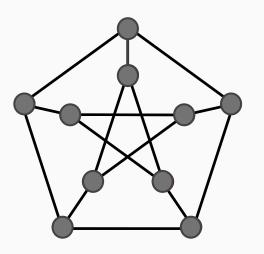
StarWars; Obi-Wan. SciFi .

Представление знаний - статистическое



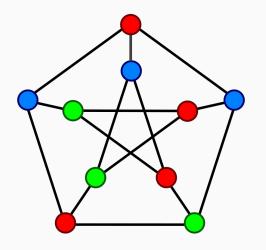
Граф знаний

$$G = (V,E) \mid E \subseteq \mathbb{R}^{|V|\times |V|}$$



Граф знаний

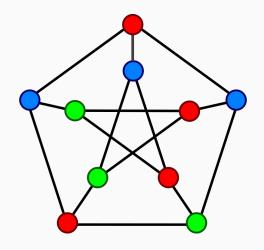
$$G = (V,E) \mid E \subseteq \mathbb{R}^{|V|x|V|}$$



$$\tau(v) = \gamma$$
, $v \in V$
 $\tau(e) = \delta$, $e \in E$

Граф знаний

$$G = (V, E) \mid E \subseteq \mathbb{R}^{|V|x|V|}$$



$$\tau(v) = \gamma$$
, $v \in V$
 $\tau(e) = \delta$, $e \in E$

- Вершины и ребра имеют типы (классы)
- Ребра (отношения) могут иметь разную значимость
- Классы и отношения имеют логический смысл
- Сетевая структура графа более естественный способ представлять знания о мире
- Формальная семантика

I(Musician writes songs)

 Семантика передает смысл символов некоторого формального или естественного языка

I(Musician writes songs)

 Семантика передает смысл символов некоторого формального или естественного языка

Musician ⊑ ∃writes.Song •

 Формальная семантика передает смысл языков в математических терминах

- I(Musician writes songs)
- Семантика передает смысл символов некоторого формального или естественного языка
- Musician □ ∃writes.Song
 - Формальная семантика передает смысл языков в математических терминах
- C(x), \subseteq , \forall , \exists , \sqcap , \sqcup , \exists R.C, \forall R.C
- Формальная логика предоставляет математический аппарат для интерпретации языков

- I(Musician writes songs)
- Семантика передает смысл символов некоторого формального или естественного языка
- Musician ⊑ ∃writes.Song
 - Формальная семантика передает смысл языков в математических терминах
- C(x), \subseteq , \forall , \exists , \sqcap , \sqcup , \exists R.C, \forall R.C
- Формальная логика предоставляет математический аппарат для интерпретации языков
 - Пропозициональная логика
 - Логика предикатов
 - Модальная логика
 - Логика первого порядка
 - Дескрипционные логики

- I(Musician writes songs)
- Семантика передает смысл символов некоторого формального или естественного языка
- Musician ⊑ ∃writes.Song ●
- Формальная семантика передает смысл языков в математических терминах
 - Теоретико-модельная семантика (семантика Тарского)

- C(x), \subseteq , \forall , \exists , \square , \sqcup , \exists R.C, \forall R.C
- Формальная логика предоставляет математический аппарат для интерпретации языков
 - о Пропозициональная логика
 - Логика предикатов
 - Модальная логика
 - Логика первого порядка
 - Дескрипционные логики

Выразительность vs Сложность

Высокая выразительность

- ✓ Комплексные утверждения
- ✓ Богатая логика
- Часто алгоритмически неразрешимы



Выразительность vs Сложность

Высокая выразительность

- Комплексные утверждения
- ✓ Богатая логика
- Часто алгоритмически неразрешимы



Низкая выразительность

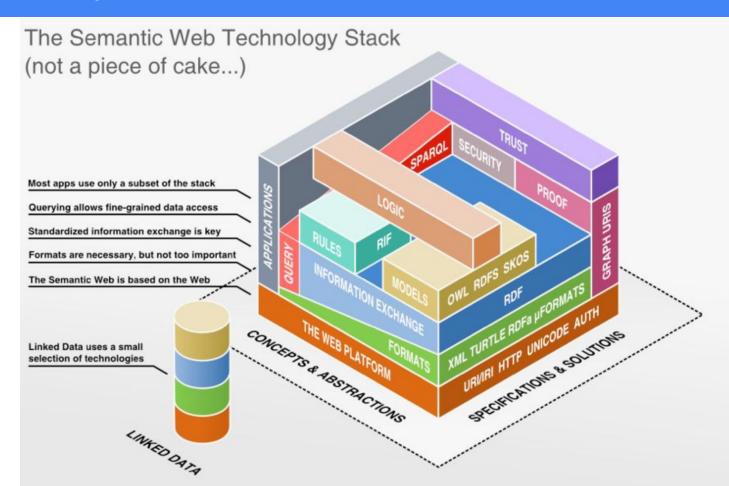
- ✓ Для простых задач
- ✓ Полиномиальная сложность
- Сложные утверждения недоступны

First-order logic (FOL)

Description logics (DL)

Propositional logic (PL)

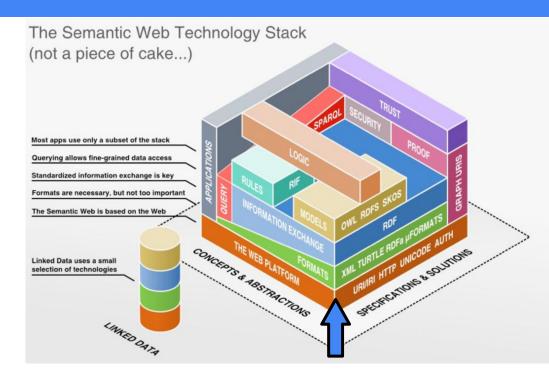
Идея логического представления знаний в Сети легла в основу концепции Semantic Web



The Web Platform

- URI / IRI
- HTTP
- Unicode
- Auth

Базовые средства передачи информации в сети. Все сущности являются URI



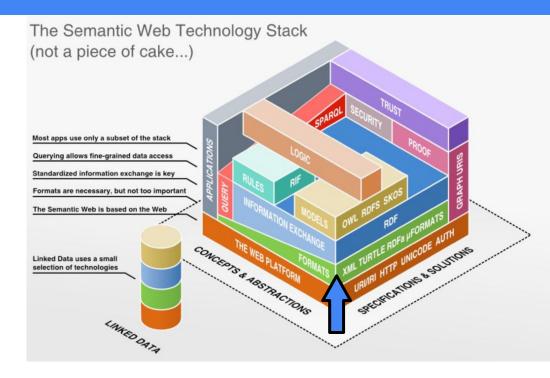
http://example.com/ITMO_University

https://www.wikidata.org/wiki/Q1342013

Formats

- XML
- Turtle
- JSON-LD
- RDFa

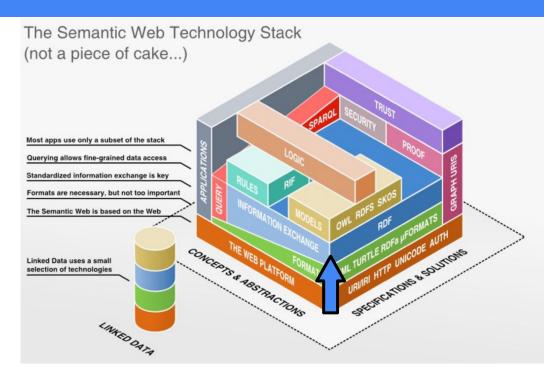
Форматы сериализации моделей высших уровней



Information Exchange

RDF (Resource Description Framework)

Вводит базовую графовую модель представления знаний в виде триплетов

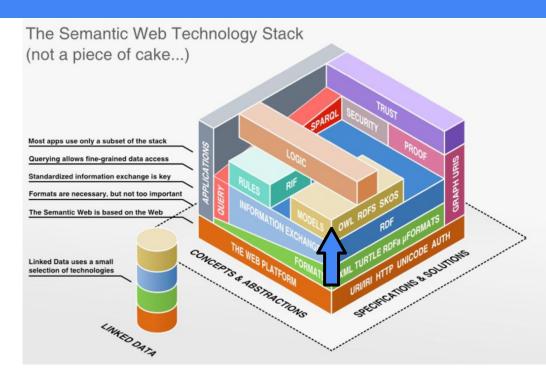


<subject> ct>

Models & Rules & Logic

- RDFS
- OWL
- SKOS
- RIF, SWRL, SPIN
- Description Logics SROIQ(D), SHOIN(D)

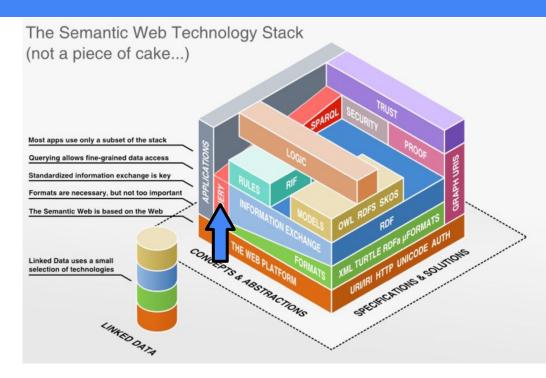
Логические расширения RDF с большей выразительностью



Querying

- SPARQL
- Cypher
- Gremlin

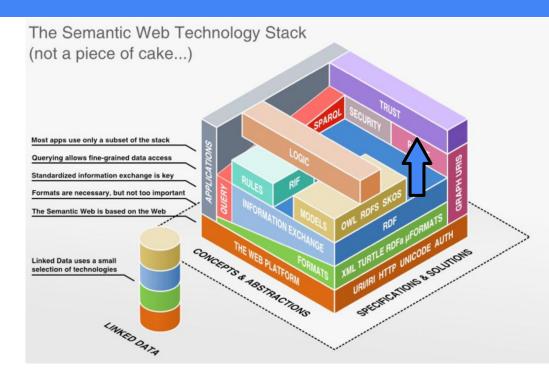
Язык запросов к RDF графам



Security & Proof & Trust

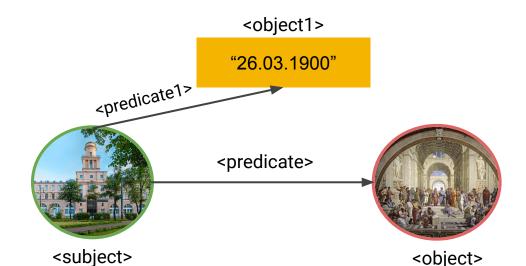
- SHACL, ShEx
- VoID
- ProvO

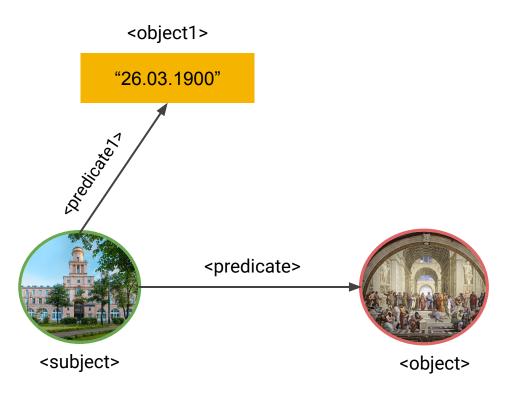
Средства обеспечения достоверности и корректности знаний



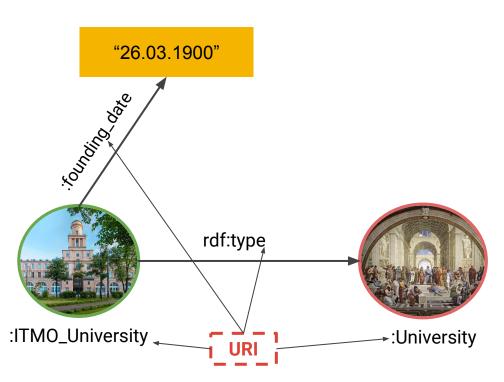
RDF Triple

Definition 2.1.1 *Let* $\mathcal{U}, \mathcal{B}, \mathcal{L}$ *be disjoint infinite sets of URIs, blank nodes, and literals, respectively.* A tuple $(s, p, o) \in (\mathcal{U} \cup \mathcal{B}) \times (\mathcal{U}) \times (\mathcal{U} \cup \mathcal{B} \cup \mathcal{L})$ *is denominated as an RDF triple, where s is called the subject, p the predicate, and o the object.* (s,p,o) *is a generalized RDF triple when* $(s,p,o) \in (\mathcal{U} \cup \mathcal{B}) \times (\mathcal{U}) \times (\mathcal{U} \cup \mathcal{B} \cup \mathcal{L})$. *An element* $\mathcal{U} \cup \mathcal{B} \cup \mathcal{L}$ *is called an RDF term.*



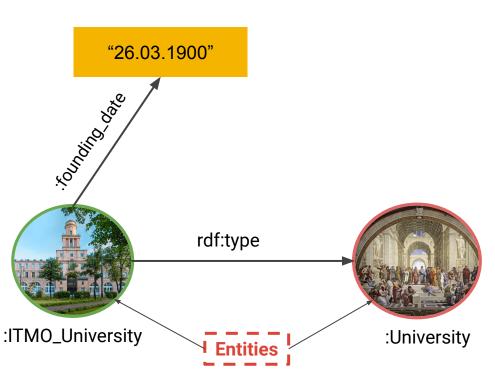


- Модель описания ресурсов
- Ресурсы уникально идентифицируются URI или литералами



URIs:

- :ITMO_University
- :University
- rdf:type
- :founding_date



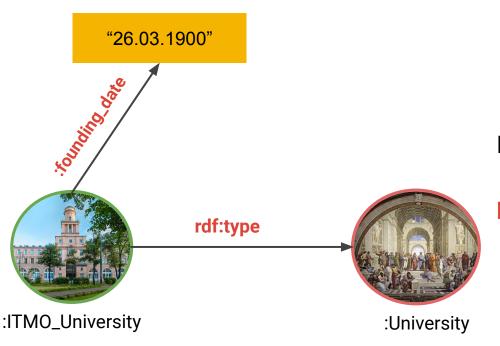
URIs:

- :ITMO_University
- :University
- rdf:type
- :founding_date

Entities:







URIs:

- :ITMO_University
- :University
- rdf:type
- :founding_date

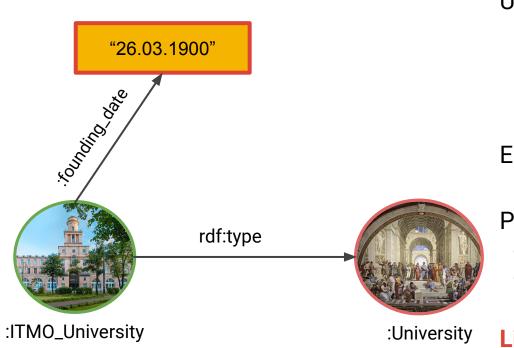
Entities:





Predicates:

- rdf:type
- :founding_date



URIs:

- :ITMO_University
- :University
- rdf:type
- :founding_date

Entities:





Predicates:

- rdf:type
- :founding_date

Literals:

"26.03.1900"

RDF: URI

- Uniform Resource Identifier способ назначения уникальных идентификаторов абстрактным и реальным сущностям и предикатам (RFC 3986)
- URL-подобные идентификаторы для Content Negotiation
- Префиксы для сокращения строк (http://prefix.cc)

```
https://en.ifmo.ru/en
http://example.org/ITMO_University
http://dbpedia.org/resource/ITMO_University
https://www.wikidata.org/wiki/Q1342013
```

ifmo:ITMO

ex:ITMO_University

dbr:ITMO_University

wd:Q1342013



• Одна и та же сущность может быть по-разному представлена в разных графах (interlinking & alignment problem)

RDF: Literals

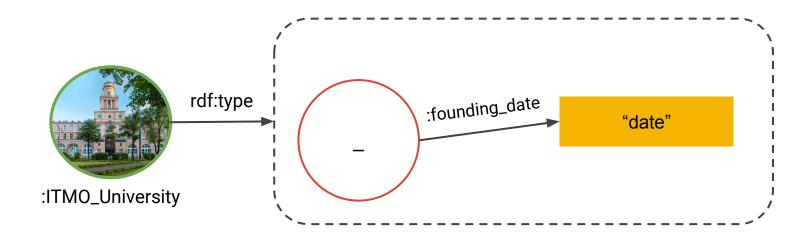
Литералы - строки, числа и XSD-определенные типы



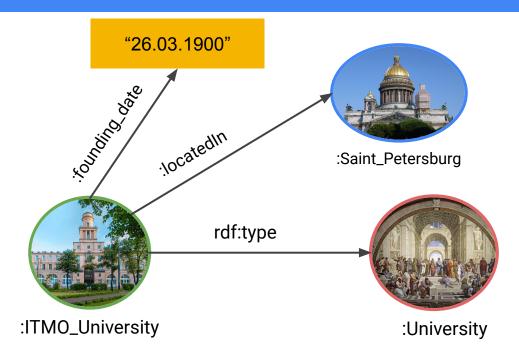
- В расширениях RDF можно создавать собственные литеральные типы ("числа, делящиеся на 2")
- Литералы не могут быть субъектом RDF-триплета

RDF: Blank Nodes

- Неименованные вершины анонимно заданные сущности без URI или литерала
- Используются в т.ч. для логических аксиом и реификации



RDF Graph



```
<http://example.org/ITMO_University> <http://example.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#type> <http://example.org/University> .
<http://example.org/ITMO_University> <http://example.org/founding_date> "26.03.1900" .
<http://example.org/ITMO_University> <http://example.org/locatedIn> <http://example.org/Saint_Petersburg> .
```

RDF Vocabulary

RDF Vocabulary

rdf:type
rdf:property
rdf:subject
rdf:predicate
rdf:object
rdf:first
rdf:rest
rdf:value
rdf:nil
rdf:list

RDF позволяет:

- Делать утверждения о принадлежности ресурса к множеству
- Назначать ресурсам атрибуты-литералы
- Набор ключевых слов предикатов (RDF vocabulary)
 - Формальная семантика определена в стандарте
- Логическая модель, не зависящая от синтаксиса
 - Но есть популярные сериализации
 - Turtle (.ttl)
 - JSON-LD (.jsonId)
 - XML/RDF (.rdf)
 - N-Triples (.nt)
 - N3 (.n3)
 - TriG (.trig), TriX (.trix)

Сериализации RDF: Turtle

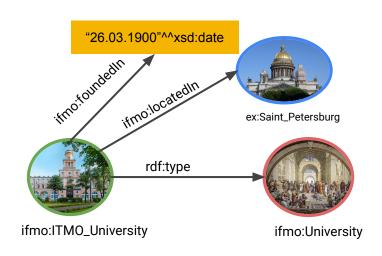
```
@prefix ifmo: <http://en.ifmo.ru/> .
@prefix ex: <http://example.org/> .
@prefix xsd: <http://www.w3.org/2001/XMLSchema#> .
ifmo:ITMO University
                         rdf:type
                                               ifmo:University ;
                          ifmo:locatedIn
                                              ex:Saint Petersburg ;
                          ifmo:foundedIn
                                               "26.03.1900"^\xsd:date .
                          "26.03.1900"^^xsd:date
                           ifmo:foundedIn
                                                 ex:Saint_Petersburg
                                      rdf:type
```

ifmo:University

ifmo:ITMO_University

Сериализации RDF: JSON-LD

```
"@graph" : [ {
  "@id" : "ifmo:ITMO University",
  "@type" : "ifmo:University",
  "foundedIn": "26.03.1900",
  "locatedIn" : "ex:Saint Petersburg"
} ],
"@id" : "urn:x-arq:DefaultGraphNode",
"@context" : {
  "foundedIn" : {
    "@id" : "http://en.ifmo.ru/foundedIn",
    "@type" : "http://www.w3.org/2001/XMLSchema#date"
  "locatedIn" : {
    "@id" : "http://en.ifmo.ru/locatedIn",
    "@type" : "@id"
  "ex" : "http://example.org/",
  "rdf": "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#",
  "xsd" : "http://www.w3.org/2001/XMLSchema#",
  "ifmo" : "http://en.ifmo.ru/"
```



RDF Schema (RDFS)

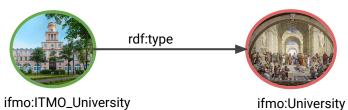
RDFS Vocabulary

rdfs:Class

RDFS позволяет:

- Объявлять классы с помощью rdfs:Class
- Создавать экземпляры классов с помощью rdf:type

```
:University rdf:type rdfs:Class .
:ITMO rdf:type :University .
```



RDFS Vocabulary

rdfs:Class

rdf:Property

rdfs:range

rdfs:domain

RDFS позволяет:

- Объявлять классы с помощью rdfs:Class
- Создавать экземпляры классов с помощью rdf:type

```
:University rdf:type rdfs:Class.
:ITMO rdf:type :University.

rdf:type :University.
```

 Объявлять предикаты, их область определения и область значений с помощью rdf:Property, rdfs:domain, rdfs:range

```
:locatedIn rdf:type rdf:Property .
:locatedIn rdfs:range :Place .
:locatedIn rdfs:domain :University .
```

RDFS Vocabulary

rdfs:Class

rdf:Property

rdfs:range
rdfs:domain

RDFS позволяет:

- Объявлять классы с помощью rdfs:Class
- Создавать экземпляры классов с помощью rdf:type

```
:University rdf:type rdfs:Class.
:ITMO rdf:type :University.

rdf:type :University.
```

 Объявлять предикаты, их область определения и область значений с помощью rdf:Property, rdfs:domain, rdfs:range

```
:locatedIn rdf:type rdf:Property .
:locatedIn rdfs:range :Place .
:locatedIn rdfs:domain :University .
```



RDFS Vocabulary

rdfs:Class

rdf:Property

rdfs:range

rdfs:domain

rdfs:subClassOf

rdfs:subPropertyOf

RDFS позволяет:

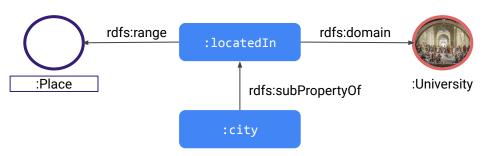
Создавать иерархию классов с помощью rdfs:subClassOf
 :University rdfs:subClassOf :Institution .



Создавать иерархию предикатов с помощью

rdfs:subPropertyOf

:city rdfs:subPropertyOf :locatedIn .



RDFS Vocabulary

rdfs:Class

rdf:Property

rdfs:range

rdfs:domain

rdfs:subClassOf
rdfs:subPropertyOf

rdfs:label

rdfs:comment

rdfs:seeAlso

rdfs:isDefinedBy

 RDFS позволяет создавать аннотации (не участвуют в логическом выводе):

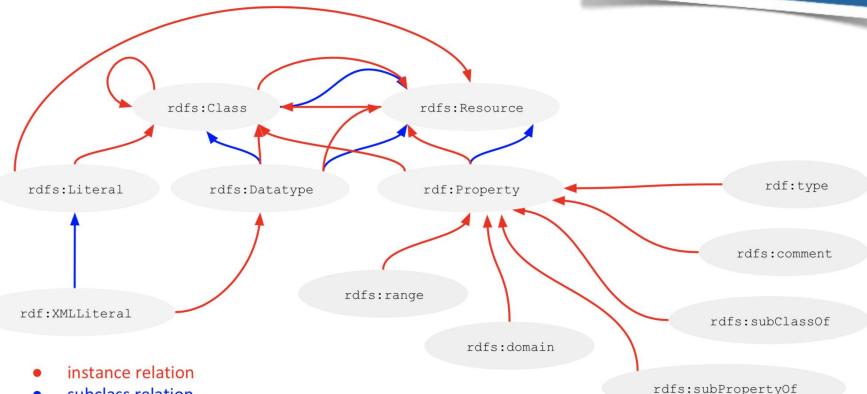
```
    rdfs:label - человекочитаемое имя ресурса
        :ITMO rdfs:label "ITMO University"@en .
        :ITMO rdfs:label "Университет ИТМО"@ru .

    rdfs:comment - текстовый комментарий
        :ITMO rdfs:comment "A university in Russia" .

    rdfs:seeAlso - ссылка на объясняющий ресурс
        :ITMO rdfs:seeAlso :Universities_in_Russia .
```

RDFS Language Model





http://www.w3.org/TR/rdf-schema/#ch_classes

subclass relation

OWL - Web Ontology Language



- Основан на дескрипционных логиках
- \circ OWL 1 (2004) $\mathcal{SHOIN}(\mathcal{D})$
- \circ OWL 2 (2009) $\mathcal{SROIQ}(\mathcal{D})$
- Классы, предикаты и экземпляры классов (почти как в RDFS)
- о ее истинности или ложности

:Alice :knows :Bob .

Не значит, что только Алиса знает Боба

 Гипотеза уникальных имен не выполняется - различия нужно указывать отдельно





Description Logics

- Логика первого порядка алгоритмически полуразрешима
 - Существует алгоритм, способный за *конечное время* подтвердить истинность некоторого высказывания в данной теории, а иначе может работать бесконечно долго.
- Экспрессивность ↑ разрешимость ↓
- Получение разрешимых логик хотя бы **O(eⁿ)** требует уменьшать экспрессивность
- Дескрипционные логики позволяют получить довольно экспрессивные, но алгоритмически разрешимые теории

Description Logics

- Логика первого порядка алгоритмически полуразрешима
 - Существует алгоритм, способный за *конечное время* подтвердить истинность некоторого высказывания в данной теории, а иначе может работать бесконечно долго.
- Экспрессивность ↑ разрешимость ↓
- Получение разрешимых логик хотя бы **O(eⁿ)** требует уменьшать экспрессивность
- Дескрипционные логики позволяют получить довольно экспрессивные, но алгоритмически разрешимые теории

```
OWL EL, OWL RL, OWL QL \subseteq OWL 2 DL \subseteq OWL 2 Full \subseteq FOL
```

OWL 1 $\mathcal{SHOIN}(\mathcal{D})$

• Аксиомы

```
    ТВох: подклассы С ⊆ D (H)
    RВох: иерархия предикатов R ⊆ S (H),
    инверсные предикаты R⁻ (I), транзитивность предикатов ⊑⁺ (S)
```

- **ABox**: факты о классах C(a), предикатах R(a, b), эквивалентность (a=b), различие $(a \neq b)$
- Составные классы
 - Конъюнкция С □ D, дизъюнкция С □ D, отрицание ¬С классов
 - \circ Кванторы существования $\exists R.C$ и всеобщности $\forall R.C$
 - \circ Ограничения на количество предикатов \leq n R, \geq n R (N)
 - \circ Номинальные классы $C = \{a\}$ (0)
- Типы данных (D)

OWL 2 $\mathcal{SROIQ}(\mathcal{D})$

- Составные классы
 - Имена классов A, В
 - ∘ Конъюнкция С □ D,
 - Дизъюнкция С □ D,
 - ∘ Отрицание ¬С классов
 - Кванторы существования ∃ R.C
 - Кванторы всеобщности ∀R.С
 - Self ∃S.Self
 - Количество предикатов ≤n R.C (Q)
 - Количество предикатов ≥n R.C (Q)
 - Номинальные классы С = {a} (0)
- Предикаты
 - ∘ Имена предикатов R, S, T
 - Простые предикаты S, Т
 - Инверсные предикаты R⁻
 - Универсальные предикаты U

- Аксиомы о классах (**TBox**)
 - о Подклассы С ⊑ D
 - \supset Эквивалентность $C \equiv D$
- Аксиомы о предикатах (**RBox**)
 - Иерархия предикатов R₁ ⊆ R₂
 - \circ Цепи $R^{(-)}_{1} \square R^{(-)}_{2} \square ... \square R^{(-)}_{n} \sqsubseteq R$
 - Транзитивность ⊑ (S)
 - Симметричность
 - Рефлексивность (R)
 - Иррефлексивность (R)
 - Несовместность
- Факты (ABox)
 - Факты о классах С(а),
 - Факты о предикатах R(a, b),
 - \circ Негативные факты о предикате $\neg R(a, b)$
 - Эквивалентность (a=b),
 - Различие (a ≠ b)

OWL 2 Manchester Syntax

Musician ≡ ∃writes.Song □ ∀writes.Song

OWL 2 Turtle

```
Musician ≡ ∃writes.Song □ ∀writes.Song
:Musician rdf:type owl:Class ;
         owl:equivalentClass [ owl:intersectionOf
                       rdf:type owl:Restriction ;
                       owl:onProperty :writesSongs ;
                                                           Blank node
                       owl:someValuesFrom :Song ]
                       rdf:type owl:Restriction ;
                       owl:onProperty :writesSongs ;
                       owl:allValuesFrom :Song] );
                   rdf:type owl:Class ] .
```

Классы в OWL



Простые или сложные (задаются аксиомой)
 :University rdf:type owl:Class

```
T≡ C ⊔ ¬C
```

• Два уже определенных класса

owl:Thing - все экземпляры всех классов

owl:Nothing - пустое множество

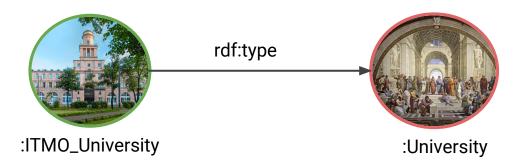
• Сложные классы

Musician ≡ ∃writes.Song □ ∀writes.Song

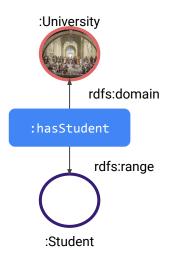
Экземпляры в OWL

• Задаются через owl:NamedIndividual

```
:ITMO_University rdf:type :University .
:ITMO_University rdf:type owl:NamedIndividual .
```



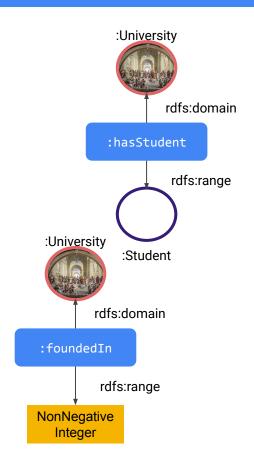
Предикаты в OWL



• Объектные: значение - ресурс

```
:hasStudent rdf:type owl:ObjectProperty;
    rdfs:range :Student;
    rdfs:domain :University .
```

Предикаты в OWL



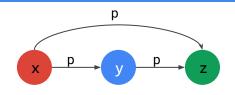
• Объектные: значение - ресурс

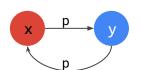
```
:hasStudent rdf:type owl:ObjectProperty;
    rdfs:range :Student;
    rdfs:domain :University .
```

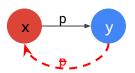
Литеральные: значение - литерал

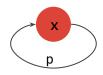
```
:foundedIn rdf:type owl:DatatypeProperty;
    rdfs:range xsd:NonNegativeInteger;
    rdfs:domain :University .
```

Объектные предикаты в OWL



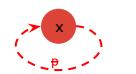


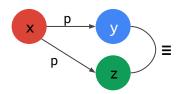


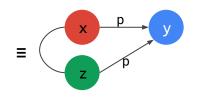


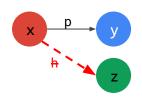
- Транзитивность owl:TransitiveProperty TransitiveProperty(р), p(x,y) □ p(y,z) ⊨ p(x,z)
- Симметричность owl:SymmetricProperty SymmetricProperty(p), p(x,y) ⊨ p(y,x)
- Асимметричность owl:AsymmetricProperty AsymmetricProperty(p), p(x,y) ⊭ p(y,x)
- Peфлексивность owl:ReflexiveProperty
 ReflexiveProperty(p) ⊨ p(x,x)

Объектные предикаты в OWL



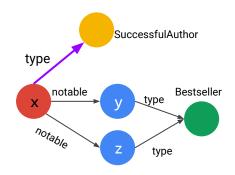






- Иррефлексивность owl:IrreflexiveProperty
 IrreflexiveProperty(p) ⊭ p(x,x)
- Функциональность owl:FunctionalProperty FunctionalProperty(p), $p(x,y) \sqcap p(x,z) \models y \equiv z \text{ [sameAs}(y,z) \text{]}$
- Инверсная функциональность owl:InverseFunctionalProperty
 InverseFunctionalProperty(p),
 p(x,y) □ p(z,y) ⊨ x≡z [sameAs(x,z)]
- Несовместность owl:propertyDisjointWith propertyDisjointWith(p,h), $p(x,y) \sqcap h(x,z) \equiv \bot$

OWL Restrictions & Rules

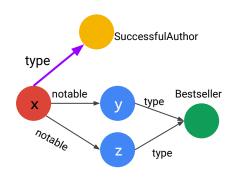


• Квалифицированные ограничения

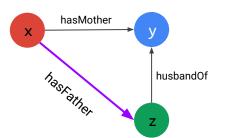
SuccessfulAuthor ⊑ ≥1 notableWork.Bestseller

```
:SuccessfulAuthor a owl:Class;
    rdfs:subClassOf [
        a owl:Restriction;
        owl:onProperty :notableWork;
        owl:minQualifiedCardinality 1;
        owl:onClass :Bestseller ] .
```

OWL Restrictions & Rules



Квалифицированные ограничения

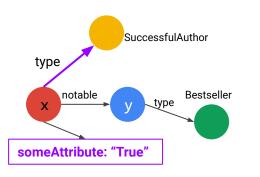


• Отношения над предикатами

```
hasMother(x,y) \quad \Box \quad husbandOf(z,y) \quad \vdash \quad hasFather(x,z)
```

- Правила "если-то" (продукции)
 - Стандарты SWRL, SPIN

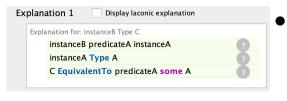
Reasoning - логический вывод новых фактов



Вход: RDF-граф

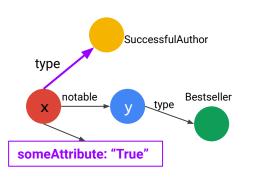
Выход: RDF-граф с новыми триплетами

- Новые атрибуты вершин
- Новые ребра между вершинами



Логическое обоснование каждому выведенному факту (чего не может статистическо-вероятностный ML)

Reasoning - логический вывод новых фактов



• Вход: RDF-граф

Выход: RDF-граф с новыми триплетами

- Новые атрибуты вершин
- Новые ребра между вершинами



- Логическое обоснование каждому выведенному факту (чего не может статистическо-вероятностный ML)
- Время работы быстро растет от размера графа
- Актуальный ресерч:
 Объединить объяснимость символьных вычислений и скорость вероятностных

Граф знаний

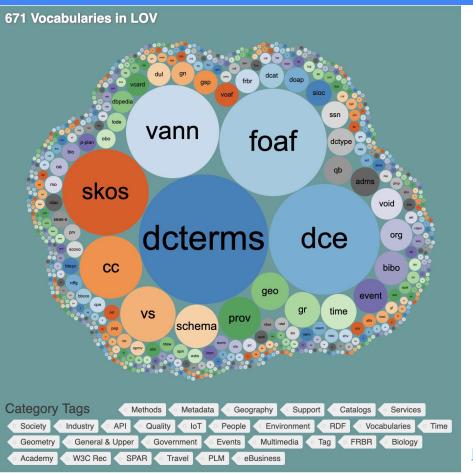
ABox (Assertion Box) Наполнение графа Факты графа знаний

→ Создание как правило через семантическую интеграцию существующих источников (СУБД, неструктурированные данные) с помощью схемы графа TBox (Terminology Box) Схема данных графа Модель предметной области

Онтология:

- → "формализованная модель некоторой области знаний, согласованная с экспертами этой области"
- → Итеративное (вручную) или автоматизированное создание

Онтологии в Linked Open Data



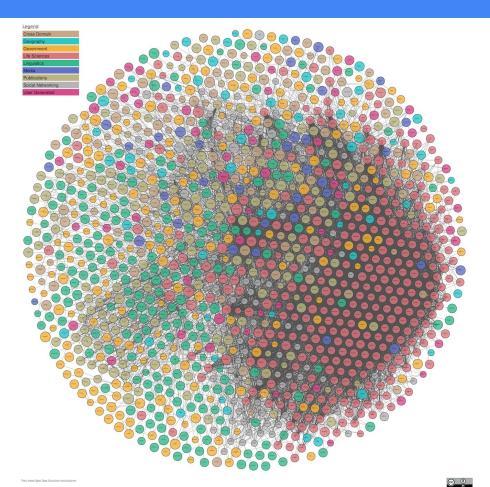
Крупнейшие онтологии:

- SNOMED-CT медицина
- FIBO финансы
- DBpedia Ontology из Википедии
- YAGO из Википедии
- Wikidata Ontology ~ из Википедии

Мета-онтологии:

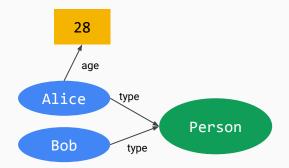
- Dublin Core Terms (dcterms)
- SKOS
- DCAT
- RDF DataCube

Linked Open Data - 2020



Open World Assumption

- Изначально неполная картина мира
- Все, что не задано (как истина) возможно, истина
- Онтологии могут быть неполными by design для расширения



Closed World Assumption

- Задается все возможное знание
- Все, что не задано (как истина) ложь
- Нужен источник истины, например
 - Колонка в БД
 - Поле объекта
 - Слот во фрейме

Person	Age
Alice	28
Bob	N/A

В следующей серии

- 1. Introduction
- 2. Представление знаний в графах RDF & RDFS & OWL
- 3. Хранение знаний в графах SPARQL & Graph Databases
- 4. Однородность знаний Reification & RDF* & SHACL & ShEx
- 5. Интеграция данных в графы знаний Semantic Data Integration
- 6. Векторные представления графов Knowledge Graph Embeddings
- 7. Введение в теорию графов Graph Theory Intro
- 8. Машинное обучение на графах Graph Neural Networks & KGs
- 9. Некоторые применения Question Answering & Query Embedding