A Survey of Knowledge Graph Reasoning on Graph Types: Static, Dynamic, and Multi-Modal

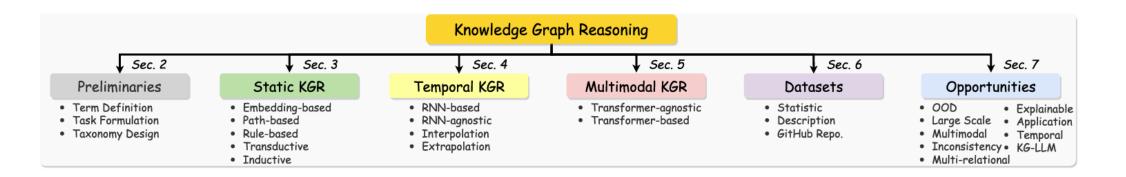
图类型视角下的知识图谱推理综述:静态、动态与多模态

I Introduction

I Introduction

研究背景

知识图谱(KGs)以直观的图结构存储人类知识事实,近年来被视为解决人工智能(AI)模型可解释性较差可解释性较差的潜在方案。然而,知识图谱的构建是一个动态持续的过程,大多数知识图谱都存在不完整的问题,为缓解这一问题,知识图谱推理(KGR)近年来受到越来越多的关注

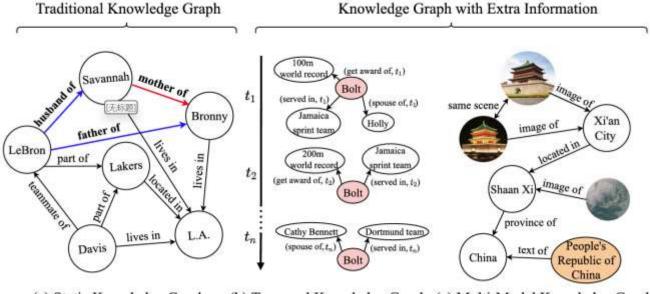


I Introduction

近年模型

当前的知识图谱大致可分为三类,<mark>即静态</mark>知识图谱、时序知识图谱和多模态知识图谱。

传统的知识图谱仅包含静态的单模态事实,这虽然简单,但对于开发通用的基础知识图谱推理模型很有效。然而,它们仍然无法充分描述包含来自各种来源信息的现实世界场景。因此,近年来的知识图谱(即时序知识图谱和多模态知识图谱)是在静态知识图谱的基础上,通过整合额外的时间和多模态信息构建而成的,这更加实用,也更接近现实世界。



(a) Static Knowledge Graph

(b) Temporal Knowledge Graph (c) Multi-Modal Knowledge Graph

静态知识图谱推理模型侧重于<mark>通用的表征学习能力</mark>。而对于时序和多模态知识图谱推理模型来说,如何更好地<mark>融合额外信息</mark>才是关键。

II STATIC KGR MODE

II- A Basic Conception

基本定义

静态知识图谱:静态知识图谱被定 义为SKG = {E, R, F, A, V, P}, 其中 集、关系集和关系事实集。A、V, 以及 $P = E \times A \times V$ 分别表示<mark>属性集、文</mark> 字属性值集和属性特性集。关系事 实采用三元组(eh, r, et) 形式。属性特 性也可以采用三元组形式 (e,a,v), 静态知识图谱被称为传统知识图谱。 "静态"这一表述是为了将它与其他 类型的知识图谱区分开来。

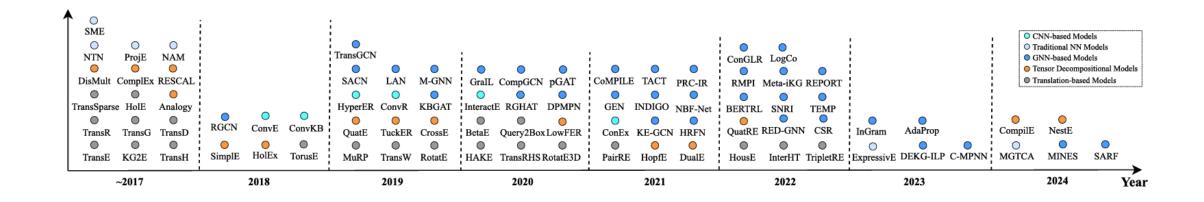
相关符号

TABLE II NOTATION SUMMARY

Notation	Explanation						
SKG	Static knowledge graph						
\mathcal{TKG}	Temporal knowledge graph						
\mathcal{MKG}	Multi-modal knowledge graph						
${\cal E}$	Entity set						
${\cal R}$	Relation set						
${\cal F}$	The set of facts, i.e., edges						
$\mathcal A$	Attribute set						
\mathcal{V}	Literal attribute set						
${\cal P}$	The set of attribute property						
${\mathcal T}$	The set of the time stamps						
\mathcal{F}_t	The set of facts at time t						
(e_h, r, e_t)	Fact triplet of the head, relation, tail						
(e, a, v)	Attribute property of entity e with attribute a with value v						
(e_h, r, e_t, t)	Fact quadruple of the head, relation, tail, timestamp						
(e, a, v, t)	Attribute property of entity e with attribute a with value v at t						
(e_h^q, r^q, e_t^q)	Queried fact triplet of head, relation, tail						
e, r, t	Embedding of entity, relation, timestamp						

II-B 基于嵌入的模型

基于嵌入的模型根据现有的事实三元组学习嵌入向量,然后基于评分函数计算出的可能性对排名前k的候选事实进行排序。接着,根据最高得分得到置信度最高的候选事实。与其他基于嵌入架构开发的模型相比,这种类型的模型仅依赖于表示学习。



II-B基于嵌入的模型

平移距离模型: 平移模型将关系r视为一种平移变换, 以便将实体e投影到潜在空间中。

- TransE: 将实体和关系表示为同一空间向量, 通过(h + r ≈ t)的平移假设衡量事实合理性. 无法处理一些特定的关系。
- **TransE改进**: 为解决 TransE 的问题, 一系列模型被提出。如 TransH 引入关系特定超平面; TransR 引入关系特定空间和投影矩阵; TransD 将投影矩阵分解为两个向量的乘积

张量分解模型: 张量分解模型将知识图谱编码为三阶张量, 然后分解为实体和关系的低维向量组合。

- RESCAL: 用向量捕捉每个实体的潜在语义,并且进一步利用矩阵将潜在因子之间的成对交互建模为一个矩阵。参数为O(d2)
- RESCAL 优化:为了简化它,DistMult 使用双线性对角矩阵将每个关系的参数减少到O(d),为了获取更多有用信息,HolE用压缩表示对循环相关性进行建模等等。

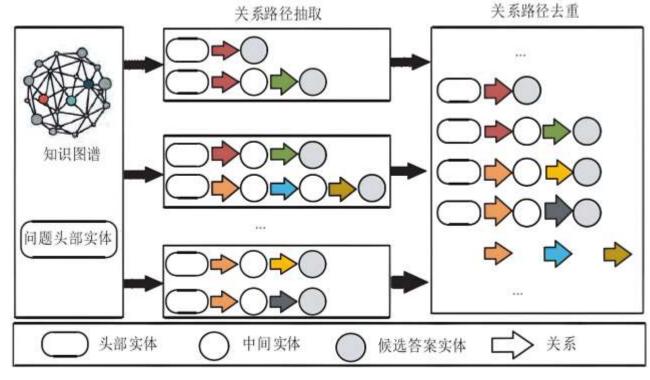
神经网络模型:利用神经网络生成用于三元组表示的嵌入向量。

- KBGAT: 利用基于注意力的特征嵌入,将注意力机制 集成到模型中,以获得更好的推理性能,一定程度上 缓解了 RGCN 的问题。
- SACN: 以加权图卷积网络(WGCN)作为编码器,以 名为 Conv - TransE 的卷积网络作为解码器,这种结构 是有效的。
- TransGCN:通过关系的转换算子同时训练关系和实体嵌入,进一步改进了嵌入学习的方式。
- DPMPN 和 RGHAT:设计了双 GNN 框架,分别对不同层次的信息进行编码, DPMPN 编码全局和局部信息, RGHAT 编码关系和实体信息。
- KEGCN 和 COMPGCN:都致力于联合传播和更新实体与边的嵌入,通过不同的实体-关系组合操作来共同学习表示。
- INDIGO: 基于图神经网络,采用成对编码的方式, 用于处理知识图谱外的情况

II-C基于路径的模型

定义:基于路径的模型挖掘被查询的头实体和尾实体之间路径所蕴含的逻辑知识,以实现推理。这些模型针对知识图谱中的复杂多跳推理任务。与之前基于嵌入的模型相比,这些模型更直观且具有可解释性。

- 基于深度强化学习的模型:深度强化学习(DRL)技术,如马尔可夫决策过程(MDP),最近被用于将实体间的路径查找重新表述为序列决策任务。例如,DeepPath通过新颖的奖励和关系动作空间应用 DRL 进行关系路径学习,提高了模型的性能和效率。MINERVA 将实体间的路径查找视为一个序列优化问题,通过最大化期望奖励来排除目标答案实体,以实现更强大的推理。MultiHop设计了一种软奖励机制,而不仅仅依赖于二元奖励,还采用了丢弃动作,使路径探索更有效。
- 神经多跳路径模型:为了获得更好的表达能力,研究人员对神经多跳路径模型进行了研究。例如,RNNPRA 利用循环神经网络 (RNN)来组合关系路径的含义进行推理。LogSumExp设计了一种跨所有元素的逻辑组合方法,并使用注意力机制进行多重推理。DIVA提出了一个统一的变分推理框架,将多跳推理分为路径查找和路径推理两个步骤。



II-D 基于规则的模型

定义:基于规则的模型旨在更好地利用逻辑规则背后的此类符号特征,逻辑规则通常以B→A的形式定义,其中A是一个事实,B可以是一组事实

- •规则挖掘:可使用 AMIE、RuleN 等工具从知识图谱中提取逻辑规则用于推理,如 RLvLR 通过规则搜索和修剪技术设计了更具可扩展性的规则挖掘方法。
- •规则与嵌入结合: 主要有联合学习和 迭代训练两种方式。例如, KALE 是一个统一的联合模型, 利用了兼容事实 和规则嵌入之间的 t 范数模糊逻辑连接词; 而RUGE模型是一个迭代模型, 利用软规则进行嵌入修正。

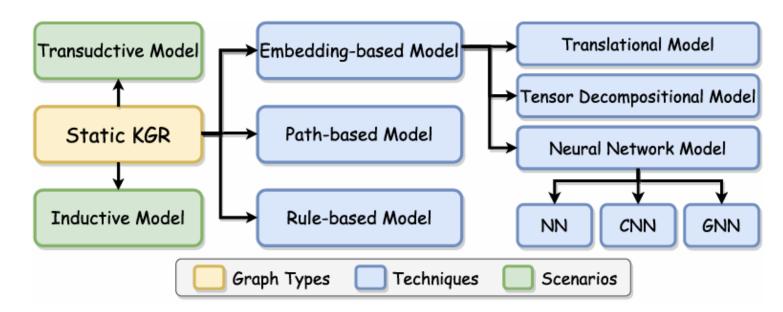
- •与神经网络技术结合:为缓解早期规则基模型表达能力有限和空间消耗大的问题,研究者将神经网络技术融入其中。如神经定理证明器 (NTP)利用设计的径向核挖掘逻辑规则;NeuralLP利用注意力机制和辅助记忆来优化挖掘规则的梯度;pLogicNet设计了概率逻辑神经网络,在一阶逻辑挖掘上表现出色。
- •融合额外信息:将规则本身以外的额外丰富信息,如邻居信息、文本信息等,整合到基于规则的模型中。如 ExpressGNN 通过微调 GNN 模型进行更有效的推理;GCR 通过挖掘查询事实周围的邻域信息,在推理和推荐方面都取得了良好的性能;LSTK 利用额外的文本信息生成软规则,增强了基于规则的模型的能力。

II-E 不同模型对比

基于嵌入的模型通常具有更好的表达能力,但缺乏可解释性。与此同时,目前更多的关注集中在开发基于图神经网络(GNN)的模型上。这主要是因为图的表达能力。与具有复杂拓扑结构的数据相比,知识图谱也应该以更复杂的数据结构来建模。图神经网络天生就适合挖掘知识图谱中图结构背后的信息,这在知识图谱中显示出了巨大的潜力。

基于路径和基于规则的模型比基于嵌入的模型更 具可解释性,但它们通常存在表达能力有限以及 时间和空间复杂度高的问题。此外,它们所占比 例相对较小,值得进一步深入研究。

由于其路径搜索机制,大多数基于路径的模型更适合转导推理,而基于规则的模型由于规则的通用性和不变性,天生就具有归纳能力。需要注意的是,基于规则的模型在较为简单的转导设置中也能有良好表现。



IV. TEMPORAL KGR MODEL

IV-A基础概念

TABLE II NOTATION SUMMARY

定义: 时序知识图谱: 时序知 识图谱被定义为在不同时间戳 下的一系列静态知识图谱 TKG={SKG1,SKG2,...,SKGt},时间 戳t时的知识图谱快照被定义 为 SKG。四元组事实表示在时 间戳 t 时,头实体与尾实体之 间存在关系。此外,属性特征 表示在时间戳 t 时,实体 e 具 有属性 a , 且属性值为 v

Notation	Explanation
SKG	Static knowledge graph
\mathcal{TKG}	Temporal knowledge graph
\mathcal{MKG}	Multi-modal knowledge graph
${\cal E}$	Entity set
${\cal R}$	Relation set
${\mathcal F}$	The set of facts, <i>i.e.</i> , edges
\mathcal{A}	Attribute set
\mathcal{V}	Literal attribute set
${\cal P}$	The set of attribute property
${\mathcal T}$	The set of the time stamps
\mathcal{F}_t	The set of facts at time t
(e_h, r, e_t)	Fact triplet of the head, relation, tail
(e, a, v)	Attribute property of entity e with attribute a with value v
(e_h, r, e_t, t)	Fact quadruple of the head, relation, tail, timestamp
(e,a,v,t)	Attribute property of entity e with attribute a with value v at t
(e_h^q, r^q, e_t^q)	Queried fact triplet of head, relation, tail
e, r, t	Embedding of entity, relation, timestamp

知识图谱推理技术关乎时序知识图谱推理模型如何<mark>整合时间信息</mark>。基于这一点,时序知识图谱推理模型可以分为<mark>基于循环神经网络(RNN)</mark>的模型和<mark>不依赖于循环神经网络(RNN)的模型</mark>。

IV-B基于循环神经网络的模型

基于四元组的模型: 时序知识图谱基本原子是四元组事实,早期多数基于 RNN 的模型将四元组表示输入 RNN 做时序信息嵌入。如 Know-Evolve 是首个经典模型,生成非线性实体嵌入; TTransE 和 TA-DistMult 扩展静态模型,添加时间约束编码时间信息;近期 TEMP用消息传递图神经网络学习各时间戳实体表示并组合; TPmod 和 HIP 网络利用更细粒度机制挖掘实体和关系动态交互; EvoKG 引入RNN 挖掘实体交互动态演化信息,研究时序推理任务。

基于路径的模型:整合时序信息时,静态 KGR 主干有时选基于路径模型,RNN 直接 用路径(四元组序列)表示做时序编码。例如 CluSTeR 用强化学习结合 LSTM 和 GRU 发现演化模式; DacKGR 在稀疏时序 KG 上基于多跳路径推理并动态预测; TimeTrav-eler 提出相对时间编码和时间形 状奖励模块; TPath 用 LSTM 挖掘环境信息 生成关系和时序嵌入; ExKGR 引入 LSTM 推理并提供路径,LSTM 是这类模型常用 RNN 单元。

基于图的模型:因知识图谱拓扑复杂,研究者将子图或图作为 RNN 时序编码对象。 EvolveGCN 用图卷积网络建模静态快照图结构,使用LSTM (或 GRU) 演化 GCN 参数; RE-NET 结合 GCN 和 RNN 捕捉演化动态处理查询; RE-GCN 关注演化动态,对固定长度 KG 序列建模生成实体嵌入; TRHyTE 用 GRU 转换实体到潜在空间,编码事实到时序 - 关系超平面; TiRGN 用两个编码器挖掘局部和全局信息; HiSMatch 用不同编码器挖掘历史查询结构和候选实体语义信息; RPC 和 RETIA 考虑关系视图图提升表达能力。

IV-C与循环神经网络无关的模型

与循环神经网络无关的模型通过融入时间信息扩展静态知识图谱推理模型,不使用 RNN 框架,具体可分为以下两类:

时间向量引导的模型:直接生成额外时间嵌入 并与事实嵌入融合。部分模型采用内积融合, 如 TComplex、TNTComplex 对含时间信息的四阶 张量空间建模,ChronoR 连接关系和时间嵌入获 整体旋转嵌入,DBKGE 平滑节点表示向量, Tuck-ERTNT 受张量分解启发提出新模型, RotateQVS 考虑潜在空间中时间信息随旋转操作 的变化;部分使用哈达玛积,如 TempoQR 生成 特定问题时间向量聚合实体和时间戳, TLT-KGE 将语义和时间信息作为复空间不同轴。此外, 还有拼接(xERTE 计算加权概率、CyGNet 编码 历史事实生成时间索引向量)、加权相加(T-GAP 编码查询结构模式并推理)、求和 (BoxTE 基于 BoxE 提出新表示方法) 等融合形式。

- •构建超平面: HyTE 将时间戳表示为超平面并投影实体和关系嵌入; ATiSE 根据时间戳将嵌入映射到高斯空间; Diachronic 将嵌入和时间信息映射到 KGR 模型空间; DyERNIE为嵌入在切空间定义速度向量挖掘动态演化。
- •构建正则化项: TeLM 利用线性时间正则化器和多向量编码器实现四阶张量分解; TeRo引入时间引导旋转操作评分; TIE 结合经验回放和时间正则化学习增量嵌入。

IV-D总结与对比

根据本文总结,共包含 44 个内插模型和 25 个外推模型。其中,44% 的外推模型属于时间操作模型,56% 属于基于循环神经网络(RNN)的模型。

基于 RNN 的模型中,内插模型和外推模型的 比例非常接近(1:1)。而在时间操作模型中 内插模型的数量多于外推模型 外,在与 RNN 无关的模型中,内插模型和外 推模型的比例为(32:13)。由此可知在进行 外推时,基于 RNN 的模型比与 RNN 无关的模 型表现更优,这进一步表明研究其背后的原 因存在潜在的机会。此外,这也表明基于 RNN 的模型和时间操作模型在两种场景 下都表现出了良好的兼容性。 近期的大多数研究都集中在这一类型的 时间向量模型只能在内插场景中表 现得更好,因为它们无法以一种原始的方式 充分解读时间信息。

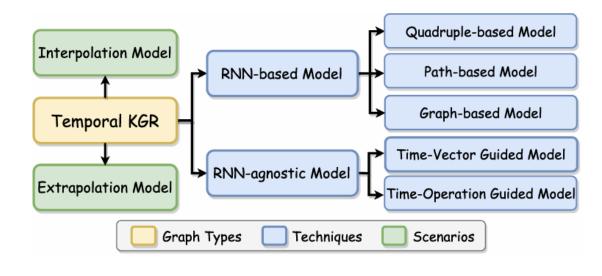


Fig. 9. Taxonomy of the temporal KGR models.

V MULTI -MODAL KGR MODEL

V-A基础概念

多模态知识图谱:多模态知识图谱MKG = {E, R, F, A, V, P}由知识事实组成,其中实体或属性中存在不止一种模态的信息。通常,存在两种多模态知识图谱 N-MMKG 和基于点的多模态知识图谱 A-MMKG 和基于属性的多模态知识图谱 A-MMKG。具体来说,N-MMKG将多模态数据表示为实体,其中多模态信息存在于实体集合E中。此外,在A-MMKG中,多模态信息被存储为新的属性,下标 MM 表示多模态信息

TABLE II NOTATION SUMMARY

Notation	Explanation						
\mathcal{SKG}	Static knowledge graph						
\mathcal{TKG}	Temporal knowledge graph						
\mathcal{MKG}	Multi-modal knowledge graph						
${\cal E}$	Entity set						
${\cal R}$	Relation set						
${\cal F}$	The set of facts, <i>i.e.</i> , edges						
${\cal A}$	Attribute set						
\mathcal{V}	Literal attribute set						
${\cal P}$	The set of attribute property						
${\mathcal T}$	The set of the time stamps						
\mathcal{F}_t	The set of facts at time t						
(e_h, r, e_t)	Fact triplet of the head, relation, tail						
(e, a, v)	Attribute property of entity e with attribute a with value v						
(e_h, r, e_t, t)	Fact quadruple of the head, relation, tail, timestamp						
(e,a,v,t)	Attribute property of entity e with attribute a with value v at t						
(e_h^q, r^q, e_t^q)	Queried fact triplet of head, relation, tail						
e, r, t	Embedding of entity, relation, timestamp						

V-B常见多模态的模型

基于Transformer的模型

Transformer 模型因对不同模态的扩展能力强,常作为多模态问题统一范式。一些通用多模态预训练 Transformer 模型如 VisualBERT、ViLBERT 可用于多模态 KGR,但因多模态知识图谱与其他多模态数据有差异,直接应用推理性能不佳。

近年研究进展

研究人员开发了多种基于 Transformer 的模型。如 VBKGC 用预训练 Transformer 编码多模态特征并设计评分函数; Knowledge-CLIP 借助 CLIP 模型考虑语义连接; HRGAT 构建超节点图聚合特征; MSNEA 和 IMF 利用对比学习实现多模态对齐; MuKEA 将 KGR 集成到视觉理解推理中; DRAGON提供自监督预训练方法; AIR 引入实体更多属性增强推理。部分模型设计单一 Transformer 框架统一特征编码,如 MarT 提出推理框架用于类比推理; MKGformer 设计混合 Transformer 统一学习范式; SGMPT 利用图谱结构融合多模态信息,这些模型虽潜力大但仍处于早期。

与 Transformer 无关的模型

早期模型特点多数该类模型不使用 Transformer 框架,通过扩展原始单模态 KGR 模型(如 TransE)设计机制编码额外 模态信息,多模态 KGR 早期尝试多属此类。

基于静态模型的扩展

一些模型在静态 KGR 模型基础上为额外模态信息设计细粒度机制。如 CKE 同时推理和协同过滤; DKRL 利用语言神经网络处理实体描述; IKRL 和 TransAE 用基于注意力的神经网络考虑视觉信息; KBLRN 提出端到端推理框架结合多种技术; KR-AMD 和MKRL 利用文本数据辅助推理; MTRL 是基于平移的模型,有对应不同信息的能量函数。

V-C未来研究方向

基于上述综述和性能比较,我们能够进一步得出以下结论:

最初大多数多模态知识图谱推理模型是<mark>基于基于嵌入的静态知识图谱模型开发的</mark>,而非基于路径或基于规则的模型。这主要是因为大多数现有的多模态 知识图谱模型通过在潜在空间中进行特征融合来利用额外的多模态信息。具体而言,针对不同模态的特征设计了不同的编码器。

近年来,研究人员倾向于为多模态特征研究统一的学习框架,例如基于预训练 Transformer 的模型,尤其是在大语言模型蓬勃发展之后。这些模型满足了通用人工智能的要求,在这个时代更具实用性和可扩展性。与其他两种类型的 KGR 相比,多模态 KGR 的研究仍处于早期阶段,即仅占 16%,这为我们留下了巨大的探索空间。

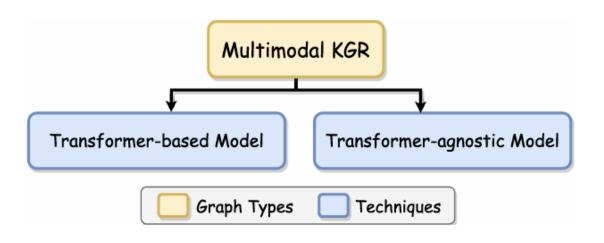


TABLE V
PERFORMANCE COMPARISON (IN PERCENTAGE) OF MULTI-MODAL KGR
MODELS ON FB15K-237-IMG AND WN18-IMG

Model	FB15k-237-IMG			WN18-IMG		
	MR	H@1	H@10	MR	H@1	H@10
IKRL [240]	298	19.4	45.8	596	12.7	92.8
TransAE [241]	431	19.9	46.3	352	32.3	93.4
MTRL [242]	187	22.9	49.4	_	_	_
MKBE [243]	158	25.8	53.2	_	_	_
RSME [244]	417	24.2	46.7	223	94.3	95.7
MoSE [245]	117	28.1	56.5	7	94.8	97.4
KBLRN [246]	209	21.9	49.3	_	_	_
VisualBERT [226]	592	21.7	43.9	122	17.9	65.4
Vilbert [227]	483	23.3	45.7	131	22.3	76.1
VBKGC [231]	-	21.3	47.8	_	_	_
HRGAT [234]	156	27.1	54.2	_	_	_
MKGformer [13]	252	24.3	49.9	25	93.5	97.0
IMF [12]	134	28.7	59.3	_	_	_
LAFA [247]	136	26.9	55.1	25	94.7	55.1

The best results are in boldface. "h" is short for "hits".

谢谢!