**重庆师范大学**

**硕士研究生开题报告文献综述**

**知识图谱表示学习模型的参数优化方法**

**何苗惠**

**指导老师：吴至友 教授**

**专业名称：运筹学与控制论**

**研究方向：最优化理论与算法**

|  |
| --- |
| **开题专家小组审核意见：**  该生在前期通过查阅文献，对研究内容所涉及的研究领域进行了较为全面的调研，对课题有了较全面的认识，论文的研究方法基本已经掌握。工作安排合理，态度认真，目前论文写作的前期准备工作已经基本完成，开题报告符合规范格式，准予开题。  **成绩： （通过/不通过）**  **主持人（签字）：**  **年 月 日** |

**文献综述**

**1 研究背景及意义**

当前的知识图谱[1-4]（Knowledge Graph，KG）技术已广泛应用于人工智能的众多应用中，如搜索[5]、问答[5]、推荐系统[7]和智能医疗[8]等，但现有大多数的大规模KG，例如YAGO[9]、DBpedia[10]、WordNet[11]、NELL[12]等都存在数据不完备的缺陷，这给实际应用带来了许多困难。例如，在问答场景中，无法回答KG中未包含的知识。因此，需要对KG中缺失的数据（三元组）进行知识图谱补全。知识图谱表示学习方法就是把KG中的实体和关系嵌入到连续向量空间中，通过低维向量之间的相关性来进行链接预测。知识图谱表示学习包括融入事实信息的知识图谱表示学习方法和融入附加信息的知识图谱表示学习方法。

融入事实信息的知识图谱表示学习方法分为以下几种：基基于翻译的知识图谱表示学习方法，例如TransE[13]、TransH[14]、TransR[15]和TransD[16]等。双线性知识图谱表示学习方法，例如RESCAL[17]、DistMult[18]、ComplEx[19]等。基于神经网络的知识图谱表示学习方法，例如ConvE20]、CapsE[21]等。基于旋转的知识图谱表示学习方法，例如RotatE[22]和QuatE[23]等。除此之外，融入附加信息的知识图谱表示学习方法可以通过合并其他信息来进一步改进任务。例如，添加实体所属的语义类别[24,25]，包含丰富语义线索的关联路径[26,27]，结合了更一般的文本信息[28,29]和逻辑规则[30]。

近来，Akrami等人[31]针对现有知识图谱表示学习方法进行分析，发现KG 中存在的大量冗余关系会影响现有知识图谱表示学习方法的性能。因此将具有冗余关系的数据称为非长尾数据，其语义重复且相关性较高，相同实体和关系出现频率较高；其余不具有冗余关系的数据称为长尾数据，其语义重复较少且相关性较低，实体和关系出现频率较低。文献[31]指出，在许多KG的三元组对和中，模型更倾向于判断关系和是否形成反向对，从而未学得更加准确的语义信息，导致了长尾数据的补全性能通常不好，如在包含大量反向对的数据集FB15K中，利用简单的统计方法其 FHit@1已达到71.3%，而利用现有相对较好的知识图谱表示学习方法——RotatE，其FHit@1也只能达到73.8%，仅提升2%左右；通过对比包含大量非长尾数据的FB15K和剔除非长尾数据的FB15K-237 数据集，发现大多数现有知识图谱表示学习方法方法在FB15K-237数据集比在FB15K数据集的性能相差较多，如TransE的FHit@10在FB15K数据集上可达到62.4%，而在FB15K-237数据集上仅能达到47.5%，RotatE的FHit@10在FB15K数据集上可达到88.1%，而在FB15K-237数据集上仅能达到53.2%。由此可见大多数现有的知识图谱表示学习方法方法对长尾数据的补全效果不好。因此如何改进现有的知识图谱表示学习方法方法，优化长尾数据的向量表示，从而提高在长尾数据上的知识图谱补全性能，从而提升KG在实际任务中的应用效果是一项非常有意义的工作。

**2 国内外研究现状**

知识图谱表示学习方法的方法可以分为两大类：融入事实信息的知识图谱表示学习方法和融入附加信息的知识图谱表示学习方法。

**2.1 融入事实信息的知识图谱表示学习方法**

融入事实信息的知识图谱表示学习方法包括基于翻译的知识图谱表示学习方法、双线性知识图谱表示学习方法、基于神经网络的知识图谱表示学习方法、基于旋转的知识图谱表示学习方法等。

**2.1.1 基于翻译的知识图谱表示学习方法**

表示学习在自然语言处理领域受到广泛关注起源于Mikolov等人于2013年提出的word2vec词表示学习模型和工具包。利用该模型，Mikolov等人发现词向量空间存在平移不变现象。例如他们发现: ,受到该平移不变现象的启发，Border等人提出了TransE模型[13]，将知识库中的关系看作实体间的某种平移向量。对于每个事实三元组(h,r,t)，TransE模型将实体和关系表示为同一空间中，把关系向量r看作为头实体向量h和尾实体向量t之间的平移即h+r≈t。它得评分函数被定义为：



知识库中的实体关系类型可分为 一对一 、一对多 、 多对一 、多对多4 种类型，而复杂关系主要指的是 一对多 、 多对一 、多对多的 3 种关系类型。虽然TransE模型的参数较少，计算的复杂度显著降低，并且在大规模稀疏知识库上也同样具有较好的性能与可扩展性。但是TransE 模型不能用在处理复杂关系上 。原因如下：以一对多为例，对于给定的事实，以姜文拍的民国三部曲电影为例，即《让子弹飞》、《一步之遥》和《邪不压正》。可以得到三个事实三元组即（姜文，导演，让子弹飞）、（姜文，导演，一步之遥）和（姜文，导演，邪不压正）。按照上面对于TransE模型的介绍，可以得到，让子弹飞≈一步之遥≈邪不压正，但实际上这三部电影是不同的实体，应该用不同的向量来表示。多对一和多对多也类似。

TransE能够解决1-1类别的关系，但不能够很好的解决1-N, N-1, N-N关系。比如（流浪地球，演员，吴京）、（流浪地球，演员，吴孟达）两个三元组，当头实体和关系相同时，TransE认为所有尾实体具有相同的Embedding信息，但实际情况并非如此。

为了解决TransE模型在处理一对多 、 多对一 、多对多复杂关系时的局限性，TransH模型[14]提出让一个实体在不同的关系下拥有不同的表示。对于关系r，TransH模型同时使用平移向量r和超平面的法向量来表示它。对于一个三元组(h, r, t) , TransH首先将头实体向量h和尾实体向量r，沿法线，影到关系r对应的超平面上，用和表示如下:





TransH定义评分函数为:



需要注意的是，由于关系r可能存在无限个超平面，TransH简单地令r与,近似正交来选取某一个超平面。TransH 使不同的实体在不同的关系下拥有了不同的表示形式，但由于实体向量被投影到了关系的语义空间中，故它们具有相同的维度。

虽然TransH模型使每个实体在不同关系下拥有了不同的表示，它仍然假设实体和关系处于相同的语义空间中，这一定程度上限制了TransH的表示能力。TransR模型[15]则认为，一个实体是多种属性的综合体，不同关系关注实体的不同属性。TransR认为不同的关系拥有不同的语义空间。对每个三元组，首先应将实体投影到对应的关系空间中，然后再建立从头实体到尾实体的翻译关系。

对于每个三元组(h,r,t)，我们首先将实体向量向关系r空间投影。具体而言，对于每一个关系r，TransR定义投影矩阵，将实体向量从实体空间投影到关系r的子空间，用和表示如下：





TransR定义评分函数为:



虽然TransR模型较TransE和TransH有显著改进，它仍然有很多缺点:

1)在同一个关系:下，头、尾实体共享相同的投影矩阵。然而，一个关系的头、尾实体的类型或属性可能差异巨大.例如，对于三元组(美国，总统，奥巴马)，美国和奥巴马的类型完全不同，一个是国家，一个是人物。

2)从实体空间到关系空间的投影是实体和关系之间的交互过程，因此TransR让投影矩阵仅与关系有关是不合理的。

3)与TransE和TransH相比，TransR由于引入了空间投影，使得TransR模型参数急剧增加，计算复杂度大大提高。

为了解决这些问题，Ji等人提出了TransD模型[16]。给定三元组(h, r, t) , TransD模型设置了2个分别将头实体和尾实体投影到关系空间的投影矩阵和。具体定义如下:





则头实体和尾实体用和表示如下：





TransD定义评分函数为:



TranSparse[32]是通过在投影矩阵上强化稀疏性来简化TransR的工作。它有两个版本:TranSparse (共享)和TranSparse (单独)。前者对每个关系r使用相同的稀疏投影矩阵即：





后者对于头实体和尾实体分别使用2个不同的投影矩阵和。





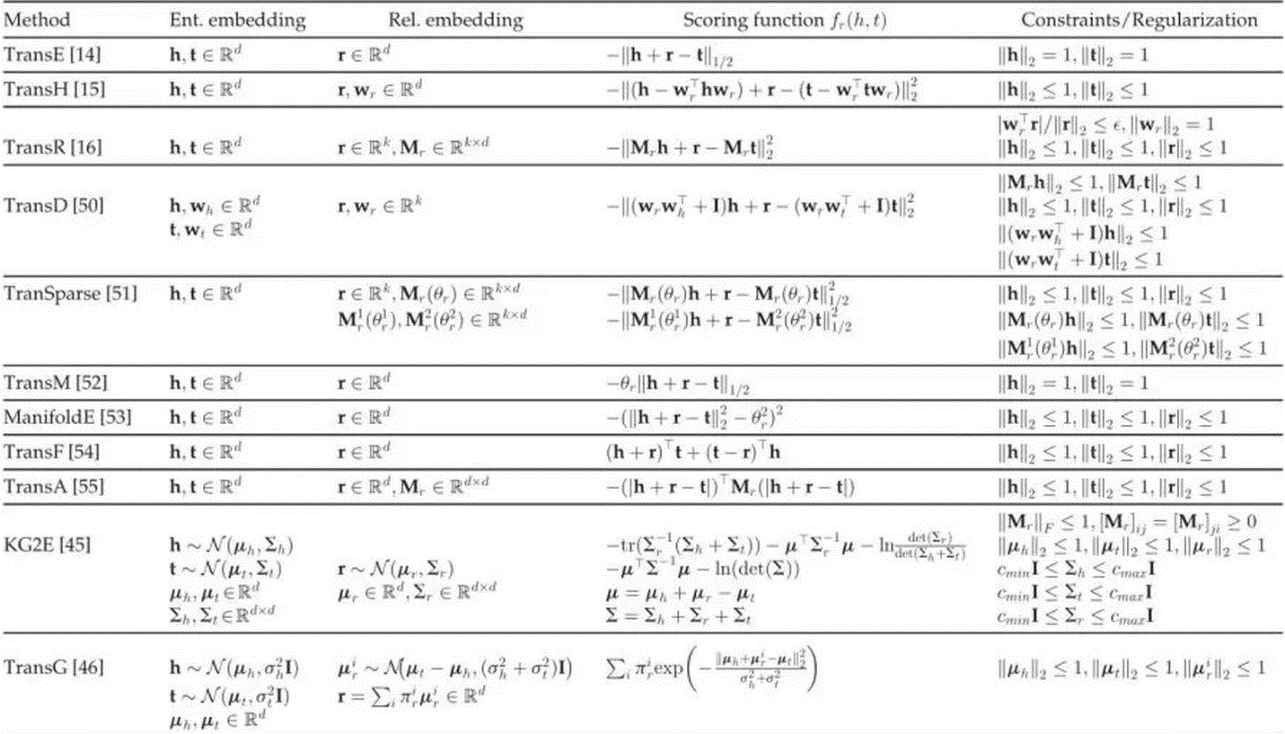


图1 基于翻译的知识图谱表示学习方法总结

除了允许实体在涉及不同关系时具有不同的嵌入之外，提高TransE模型性能可以从降低h+r≈t的要求研究开始。TransM[33]模型将为每个事实（h,r,t）分配特定的关系权重，定义的评分函数如表1所示。通过对一对多、多对一和多对多分配较小的权重，TransM模型使得t在上述的复杂关系中离h+r更远。

ManifoldE模型[34]则是对于每个事实三元组（h,r,t）将h+r≈t转换为为（h+r-t）的L2范式约等于的平方。同样地，ManifoldE把t近似地位于流形体上，即一个以h+r为中心半径为的超球体，而不是接近h+r的精确点。

TransF[35]使用了类似的思想。而不是执行严格的翻译h+r≈t，TransF只需要t与h+r位于同一个方向，同时h与t-r也位于同一个方向。则评分函数（即t和h+r匹配，h也要与t-r匹配）如表1所示。

TransA[36]模型为每个关系r引入一个对称的非负矩阵，并使用自适应马氏距离定义评分函数，评分函数如表1所示。通过学习距离度量, TransA在处理复杂关系时更加灵活。

Xiao等人认为TransE及其之后的扩展模型均存在2个重要问题：1)评分函数只采用L1或L2距离，灵活性不够；2)评分函数过于简单，实体和关系向量的每一维等同考虑。为了解决这2个问题，Xiao等人提出TransA模型，将评分函数中的距离度量改用马氏距离，并为每一维学习不同的权重。对于每个三元组(h,r,t)，TransA模型定义的评分函数如表1所示。其中为与关系r相关的非负权值矩阵。

**2.1.2 双线性知识图谱表示学习方法**

双线性模型计算实体和关系在向量空间中潜在语义的可信度，包括RESCAL、DisMult、ComplEx等模型。

RESCAL[17]把关系利用满秩矩阵表示，并定义评分函数为 。能够看到，RESCAL的实体和关系之间全是矩阵运算，因此实体和关系的信息可以进行深层次交互，非常具有表现力。但同时，RESCAL容易过拟合，并且随着关系矩阵维度的增加，复杂度会很高，很难应用到大规模知识图谱。

针对RESCAL存在的问题，DisMult[18]放松对关系矩阵的约束，把关系矩阵利用对角矩阵表示，并定义损失函数为。但DisMult过分简化了RESCAL模型，导致只能够解决知识库中存在的对称关系，不能够解决知识图谱中其他类型的关系。

针对DisMult存在的问题，ComplEx[19]把DisMult扩展到复数空间表示，并定义评分函数为，其中均用复数表示，表示的共轭复数，表示取得复数的实部。ComplEx对DisMult扩展后，能够同时解决对称和非对称关系。ComplEx首次在KGE中引入复数方法，后面我们还能看到其他模型利用复数空间解决问题，并且可解决除对称、非对称外更复杂的对称类型。

**2.1.3 基于神经网络的知识图谱表示学习方法**

随着神经网络的兴起，开始利用神经网络来构建知识图谱表示学习方法，包括ConvE、CapsE等，通过利用神经网络计算相似度来得到三元组得分。

ConvE[20]首先把头实体和关系转换为二维向量，接下来利用卷积层和全连接层获取交互信息，然后与矩阵W和尾实体进行计算，判断当前三元组的可信度。ConvE评分函数为，表示二维向量，表示卷积核，表示矩阵。

CapsE[21]采用胶囊神经网络模型，首先把头实体、关系、尾实体表示乘的矩阵，接下来通过卷积层获取其特征信息，然后对特征信息进行压缩，并进行动态路由，最后计算三元组的可信度。

**2.1.4 基于旋转的知识图谱表示学习方法**

旋转模型把关系当作头实体和尾实体之间的旋转，包括RotatE、QuatE等模型。

RotatE[22]认为知识库中存在多种类型的关系，如symmetry(e.g., marriage), antisymmetry(e.g., filiation), inversion(e.g., hypernym and hyponym), composition(e.g., my mother's husband is my father)关系，但以往的TransE, RESCAL, ConvE等模型均不能够解决上述关系。因此，如下图（2）所示，RotatE提出在复数空间中建模，把关系当作头尾实体之间的旋转，并定义评分函数为:



其中 ，RotatE从理论上证明能够解决对称/反对称、翻转、组合关系。另外，RotatE认为在训练过程中，很多三元组明显是错误的，因此RotatE提出自对抗的负采样方法，让错误样本更加明显，负采样和损失函数公式如下所示:





RotatE是在二维复平面空间中进行操作，那么很自然的可以推广到三维复平面空间中。三维情况下旋转可以利用欧拉角和四元数等方法，但欧拉角存在死锁问题，因此QuatE[23]采用四元数进行旋转。

**2.2 融入附加信息的知识图谱表示学习方法**

除此之外，融入附加信息的知识图谱表示学习方法可以通过合并其他信息来进一步改进任务。例如，添加实体所属的语义类别[24,25]，包含丰富语义线索的关联路径[26,27]，结合了更一般的文本信息[28,29]和逻辑规则[30]等。

近来，Akrami等人[31]针对现有知识图谱表示学习方法进行分析，发现KG 中存在的大量冗余关系会影响现有知识图谱表示学习方法的性能。因此将具有冗余关系的数据称为非长尾数据，其语义重复且相关性较高，相同实体和关系出现频率较高；其余不具有冗余关系的数据称为长尾数据，其语义重复较少且相关性较低，实体和关系出现频率较低。文献[31]指出，在许多KG的三元组对 和 中，模型更倾向于判断关系 和 是否形成反向对，从而未学得更加准确的语义信息，导致了长尾数据的补全性能通常不好，如在包含大量反向对的数据集FB15K中，利用简单的统计方法其 FHit@1已达到71.3%，而利用现有相对较好的知识图谱表示学习方法——RotatE，其FHit@1也只能达到73.8%，仅提升2%左右；通过对比包含大量非长尾数据的FB15K和剔除非长尾数据的FB15K-237 数据集，发现大多数现有知识图谱表示学习方法在FB15K-237数据集比在FB15K数据集的性能相差较多，如TransE的FHit@10在FB15K数据集上可达到62.4%，而在FB15K-237数据集上仅能达到47.5%，RotatE的FHit@10在FB15K数据集上可达到88.1%，而在FB15K-237数据集上仅能达到53.2%。由此可见大多数现有的知识图谱表示学习方法对长尾数据的补全效果不好。因此如何改进现有的知识图谱表示学习方法，优化长尾数据的向量表示，从而提高在长尾数据上的知识图谱补全性能，进而提升KG在实际任务中的应用效果是一项非常有意义的工作。

1. **拟采用的研究方法与拟解决的关键问题**
2. 文献研究法：通过查阅本体匹配相关的文献，理清本体匹配，黑箱超参数优化这两个研究方向的脉络，对最新的基于深度学习的本体匹配方法，黑箱优化方法进行调研，学习，并再次基础上做到创新。
3. 实验法：通过大量复现别人的工作，别人的本体匹配模型，学习别人的方法，并且将自己的本体匹配方法通过实验，控制变量，找到自己方法的优势所在，将新的理念的创新之处体现在数值上。
4. 定量分析法：通过控制变量，将我们的本体匹配方法与别人的方法进行对比，不断改进，不断将自己的方法进行优化，并采用黑箱优化方法，提升模型效果。
5. 调查法：查阅网上博客，论坛，找到本体匹配领域的文献检索渠道，以及相关的数据集的下载方法。

**参考文献：**

[1] 漆桂林, 高桓, 吴天星. 知识图谱研究进展[J]. 情报工程, 2017, 3(1):22.

[2] 杨大伟,周刚,卢记仓,宁原隆.基于知识表示学习的知识图谱补全研究综述[J].信息工程大学学报,2021,22(05):558-565.

[3] 缴霖境. 面向知识图谱补全的表示学习研究[D].辽宁大学,2021.DOI:10.27209/d.cnki.glniu.2021.001713.

[4] 赵晓函. 面向知识图谱补全的嵌入方法研究[D].曲阜师范大学,2021.DOI:10.27267/d.cnki.gqfsu.2021.000739.

[5] Yang Y, Agrawal D, Jagadish H V, et al. An efficient parallel keyword search engine on knowledge graphs[C]//2019 IEEE 35th international conference on data engineering (ICDE). 2019: 338-349.

[6] Yao X, Van Durme B. Information extraction over structured data: Question answering with freebase [C]//Proceedings of the 52nd Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1:Long Papers). 2014: 956-966.

[7] Zhang F, Yuan N J, Lian D, et al. Collaborative knowledge base embedding for recommender systems [C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining. 2016: 353-362.

[8] Rotmensch M, Halpern Y, Tlimat A, et al. Learning a health knowledge graph from electronic medical records [J]. Scientific reports, 2017, 7(1): 1-11.

[9] Suchanek F M, Kasneci G, Weikum G.Yago: A large ontology from wikipedia and wordnet [J].Journal of Web Semantics, 2008, 6(3): 203-217.

[10] Lehmann J, Isele R, Jakob M, et al. Dbpedia–a large-scale, multilingual knowledge base extracted from wikipedia [J]. Semantic web, 2015, 6(2): 167-195.

[11] Miller G A. WordNet: a lexical database for English [J]. Communications of the ACM, 1995 , 38(11): 39-41.

[12] Carlson A, Betteridge J, Kisiel B, et al. Toward an architecture for never-ending language learning [C]//Twenty-Fourth AAAI conference on artificial intelligence. 2010: 1306-1313.

[13] Bordes A, Usunier N, Garcia-Duran A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data [J]. Advances in neural information processing systems, 2013, 2: 2787–2795.

[14] Wang Z, Zhang J, Feng J, et al. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes [C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2014, 28(1): 1112-1119.

[15] Lin Y, Liu Z, Sun M, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion [C]//Twenty-ninth AAAI conference on artificial intelligence. 2015: 2181-2187.

[16] 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 (Volume 1:Long Papers). 2015: 687-696.

[17] Nickel M, Tresp V, Kriegel H P. A three-way model for collective learning on multi-relational data [C]//Icml. 2011: 809–816.

[18] Yang B, Yih W, He X, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases[J]. 2014, arXiv: 1412.6575.

[19] Trouillon T, Welbl J, Riedel S, et al. Complex embeddings for simple link prediction [C]//International conference on machine learning. PMLR, 2016: 2071-2080.

[20] Dettmers T, Minervini P, Stenetorp P, et al. Convolutional 2d knowledge graph embeddings [C]//Thirty-second AAAI conference on artificial intelligence. 2018: 1811-1818.

[21] Vu T, Nguyen T D, Nguyen D Q, et al. A capsule network-based embedding model for knowledge graph completion and search personalization [C]//Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long and Short Papers). 2019: 2180-2189.

[22] Zhiqing Sun, Zhi-Hong Deng, Jian-Yun Nie,and Jian Tang. RotatE: Knowledge Graph Embedding by Relational Rotation in Complex Space [C]//Proceedings of the International Conference on Learning Representations. 2019: 926–934.

[23] Shuai Zhang, Yi Tay, Lina Yao, and Qi Liu. Quaternion knowledge graph embeddings [C]//In Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS). 2019: 2731–2741.

[24] Guo S, Wang Q, Wang B, et al. Semantically smooth knowledge graph embedding[C]//Proceedings of the 53rd Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 7th International Joint Conference on Natural Language Processing (Volume 1: Long Papers). 2015: 84-94.

[25] Xie R, Liu Z, Sun M. Representation Learning of Knowledge Graphs with Hierarchical Types[C]//IJCAI. 2016: 2965-2971.

[26] Lao N, Cohen W W. Relational retrieval using a combination of path-constrained random walks[J]. Machine learning, 2010, 81(1): 53-67.

[27] Lao N, Mitchell T, Cohen W. Random walk inference and learning in a large scale knowledge base[C]//Proceedings of the 2011 conference on empirical methods in natural language processing. 2011: 529-539.

[28] Xie R, Liu Z, Jia J, et al. Representation learning of knowledge graphs with entity descriptions[C]//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2016, 30(1).c

[29] Wang Z, Li J, Liu Z, et al. Text-enhanced representation learning for knowledge graph[C]//Proceedings of International Joint Conference on Artificial Intelligent (IJCAI). 2016: 4-17.

[30] 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. 2016: 192-202.

[31] Akrami F, Saeef M S, Zhang Q, et al. Realistic re-evaluation of knowledge graph completion methods: An experimental study [C]//Proceedings of the 2020 ACM SIGMOD International Conference on Management of Data. 2020: 1995-2010.

[32] Ji G, Liu K, He S, et al. Knowledge graph completion with adaptive sparse transfer matrix[C]//Thirtieth AAAI conference on artificial intelligence. 2016.

[33] Fan M, Zhou Q, Chang E, et al. Transition-based knowledge graph embedding with relational mapping properties[C]//Proceedings of the 28th Pacific Asia conference on language, information and computing. 2014: 328-337.

[34] Xiao H, Huang M, Zhu X. From one point to a manifold: Knowledge graph embedding for precise link prediction[J]. arXiv preprint arXiv:1512.04792, 2015.

[35] Feng J, Huang M, Wang M, et al. Knowledge graph embedding by flexible translation[C]//Fifteenth International Conference on the Principles of Knowledge Representation and Reasoning. 2016.

[36] Xiao H, Huang M, Hao Y, et al. TransA: An adaptive approach for knowledge graph embedding[J]. arXiv preprint arXiv:1509.05490, 2015.