GNN与知识图谱结合相关调研

**一、最原始图神经网络特点**

图神经网络(GraphNeural Networks, GNNs)，主要针对非欧几里得空间结构（图结构）的数据进行处理。具有以下特点：

1)忽略节点的输入顺序；

2)在计算过程中，节点的表示受其周围邻居节点的影响，而图本身连接不变；

3)图结构的表示，使得可以进行基于图的推理。

**二、图神经网络的模型与变种：**

图神经网络由两个模块组成：

传播模块(PropagationModule)和输出模块(Output Module)，具体地：

（1）Propagation Module：图中节点之间传递信息并更新状态；

aggregator: 对于一个节点v, 通过聚合其周围节点的信息，学习其潜在表示。

（2）Output Module：基于节点和边的向量表示根据不同的任务定义目标函数

在监督学习场景中，对于一个特定的节点，其监督信号表示为：t\_v，lossfunction定义为：

常见的图神经网络有：

1. 图卷积神经网络(GraphConvolutional Networks, GCNs)
2. 门控图神经网络(Gated Graph Neural Networks,GGNNs)
3. 以及基于Attention机制的GraphAttention Networks(GAT)

1、图卷积神经网络（GCN）

（1）基于谱方法(Spectral Methods):

相关论文：<ICLR-17> Kipf T N, Welling M.Semi-supervised classification with graph convolutional networks.

通过计算图拉普拉斯算子(Graph Laplacian)的特征分解，在Fourier域定义卷积计算。对于输入信号x和卷积核𝑔\_𝜃=𝑑𝑖𝑎𝑔(𝜃):

其中，表示图结构的Graph Laplacian矩阵可分解为：

上式的计算将卷积核近似为切比雪夫多项式，并进行化简，最终得到GCN网络中的表示：

但是以上方法有几点不足，卷积核的学习依赖图拉普拉斯矩阵的特征分解，对于图结构有一定的要求，在固定结构上学习的模型，无法迁移到其他结构的模型上。

（2）基于非谱方法(Non-spectral Methods):

在图上直接定义卷积计算，将不同size的邻居节点考虑在内，同时保持像CNN一样的局部卷积不变性。

DCNNs：基于扩散卷积的思想的网络；

GraphSAGE：采样固定size的邻居节点，同时通过mean,LSTM, pooling等方式聚合周围节点的信息。

2、门控图神经网络（GGNN）

相关论文：<ICLR-16> Li Y, Tarlow D, Brockschmidt M,et al. Gated graph sequence neural networks.

提高图结构信息的long-term传播能力

将图中的edge信息考虑在内

3、注意力图神经网络（GAT）

相关论文：<ICLR-18> Velickovic, Petar, et al. Graphattention networks.

为节点的不同的邻居节点指定不同权重

节点-邻居节点对的计算可并行化，相比于GCN等网络，速度较快

**三、图神经网络与实验室知识图谱相结合**

宏观上-GNN解决NLP的相关任务：

Text Classification

Sequence Labeling

Neural machine translation

Relation Extraction

Event Extraction

QA Answering

跟实验室知识图谱相结合：

1、Structural Scenarios

主要应用于其数据结构为图结构的场景，如KnowledgeGraph等。

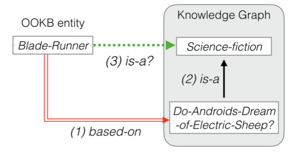
以KnowledgeGraph中应用GNN为例：

相关论文：<IJCAI-17> Hamaguchi T, et al. Knowledgetransfer for out-of-knowledge-base entities: a graph neural network approach.

论文主要针对KG中的out-of-knowledge-base(OOKB)实体，进行知识库补全等任务。

1）OOKB实体定义：

在训练过程中未被训练到的实体，无法得到其embedding表示，从而无法预测其与知识库中其他实体之间的关系。如下图中在测试期间新出现的实体“Blade-Runner”，或者说新出现的三元组“(Blade-Runner,based-on, Do-Androids-Dream-of-Electric-Sheep?)”（图中红线所示部分）。



我们的任务则定义为：基于知识库中已存在的三元组（2）和当前新出现的三元组（1），预测当前新实体与知识库中其他实体之间的关系（即三元组3）。

同时，OOKB实体即哪些与知识库中已存在的实体直接相连的实体，基于此，可以通过知识库中现有的实体表示得到OOKB实体表示。

竞争协作、上下游、分类、因果关系知识图谱新关系构建。

举例而言，

句子：一般认为，黄酒比较适合配大闸蟹，因为大闸蟹性寒，吃多易伤脾胃，而黄酒较温和，具有活血暖胃功效，可抵消大闸蟹的寒性

我们之前只是把一个句子独立分析，现在可以多个知识图谱融合分析，并且得出新的关系，或者新的知识图谱。

因果知识图谱：

1. 性寒食物易伤脾胃
2. 黄酒配大闸蟹，不会腹泻

=>推理：日本清酒也可以配一些大闸蟹

食品知识图谱：

1）黄酒 属于 温和食品

2）日本清酒 属于 温和食品

竞争协作知识图谱：

1. 黄酒公司和大闸蟹公司属于合作关系

=>推理：日本清酒公司和大闸蟹公司属于合作关系

上下游知识图谱：

1）黄酒公司和大闸蟹公司是上下游关系

=>推理：日本清酒公司和大闸蟹公司是上下游关系

创新点：

1. 我们可以采用无监督模式进行知识图谱补全
2. 我们可以采用软标注的模式进行知识图谱三元组标注分配权重，将来可以修正
3. 这个方法的应用我们只要规定好相关规则以及已有规则可以跨行业进行泛化
4. 知识图谱更新实时性
5. 一句话为多个知识图谱，多个知识图谱的融合

2）这篇文章利用GNN中节点表示的方式，对OOKB实体进行表示：

其中，T\_head表示以OOKB实体为尾实体的三元组集合，T\_tail表示以OOKB实体为头实体的三元组集合，通过其周围邻居的头尾实体对当前实体进行表示。

T\_head, T\_tail分别表示聚合三元组信息的函数，论文中为batchnormalization function。

3）模型的输出模块利用TransE等经典模型，进行知识库补全任务。

竞争协作、上下游、分类、因果关系知识图谱补全。

知识图谱不全请参考论文，与上文新关系推理不同

2、Non-structural Scenarios

主要应用于其数据结构为非图结构的场景，如图片、文本等。在此类场景中，应用GNN通常有两种方式：

1）利用具有图结构信息的外部资源，如KnowledgeGraph；

2）探索此类数据中隐含的图结构，如文本的句法结构。

四、GNN相关问题

图神经网络目前虽被广泛利用，但存在不少问题亟待解决：

（1）Shallowstructure：多层的图神经网络，可能会导致over-smoothing的问题，如GCN等网络，一些论文中也尝试用Skip connection的方式加以解决；

（2）Dynamicgraphs：GNN目前仅能处理一些静态图，对于实时增加/减少的节点和边则无法很好地处理；

（3）Non-structuralscenarios：在处理非图结构的数据时，希望利用其中内在的结构，而目前从raw data中生成graph的方法仍需改善；

（4）Scalability：可量测性