

## 面向关系特性建模的知识图谱表示学习研究综述

牛广林, 蔺震

### 引用本文

牛广林, 蔺震. 面向关系特性建模的知识图谱表示学习研究综述[J]. 计算机科学, 2024, 51(9): 182-195.

NIU Guanglin, LIN Zhen. [Survey of Knowledge Graph Representation Learning for Relation Feature Modeling](#) [J]. Computer Science, 2024, 51(9): 182-195.

---

### 相似文献推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

#### Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

#### [基于知识图谱与邻域感知注意力机制的推荐算法研究](#)

Study on Recommendation Algorithms Based on Knowledge Graph and Neighbor Perception Attention Mechanism

计算机科学, 2024, 51(8): 313-323. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.230500143>

#### [基于改进高斯混合变分自编码器的半监督情感音乐生成](#)

Semi-supervised Emotional Music Generation Method Based on Improved Gaussian Mixture Variational Autoencoders

计算机科学, 2024, 51(8): 281-296. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.230500124>

#### [基于动态图表示的设备故障推理预测方法](#)

Device Fault Inference and Prediction Method Based on Dynamic Graph Representation

计算机科学, 2024, 51(7): 310-318. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.231000223>

#### [融合多图卷积与层级池化的文本分类模型](#)

Text Classification Method Based on Multi Graph Convolution and Hierarchical Pooling

计算机科学, 2024, 51(7): 303-309. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.230400164>

#### [融合多源图特征的Kcore-GCN反欺诈算法研究](#)

Study on Kcore-GCN Anti-fraud Algorithm Fusing Multi-source Graph Features

计算机科学, 2024, 51(6A): 230600040-7. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.230600040>

# 面向关系特性建模的知识图谱表示学习研究综述

牛广林<sup>1</sup> 蔺震<sup>2</sup>

1 北京航空航天大学人工智能学院(人工智能研究院) 北京 100191

2 北京遥感设备研究所 北京 100854

**摘要** 知识图谱表示学习技术可以将符号化的知识图谱转换为实体和关系的数值化表示,进而有效结合各类深度学习模型以赋能知识增强的下游应用。相较于实体,关系充分体现了知识图谱中的语义信息,建模关系的各类特性对知识图谱表示学习的性能非常关键。首先,针对一对一、一对多、多对一和多对多的复杂映射特性,梳理基于关系感知映射的模型、基于特定表示空间的模型、基于张量分解的模型和基于神经网络的模型;接着,面向建模对称、反对称、逆反和组合特性的多种关系模式,总结基于改进张量分解的模型、基于改进关系感知映射的模型和基于旋转操作的模型;其次,面向建模实体间隐含的层次关系,介绍基于辅助信息的模型、基于双曲空间的模型和基于极坐标系的模型。最后,针对稀疏知识图谱和动态知识图谱等更加复杂的情况,从融合多模态信息知识图谱表示学习、规则增强的关系模式建模和针对动态知识图谱表示学习的关系特性建模等方面,讨论该领域研究的未来发展方向。

**关键词**: 知识图谱; 表示学习; 复杂映射关系; 关系模式; 层次关系

**中图分类号** TP391

## Survey of Knowledge Graph Representation Learning for Relation Feature Modeling

NIU Guanglin<sup>1</sup> and LIN Zhen<sup>2</sup>

1 School of Artificial Intelligence(Institute of Artificial Intelligence), Beihang University, Beijing 100191, China

2 Beijing Institute of Remote Sensing Equipment, Beijing 100854, China

**Abstract** Knowledge graph representation learning techniques can transform symbolic knowledge graphs into numerical representations of entities and relations, and then effectively combine various deep learning models to facilitate downstream applications of knowledge enhancement. In contrast to entities, relations fully embody semantics in knowledge graphs. Thus, modeling various characteristics of relations significantly influences the performance of knowledge graph representation learning. Firstly, aiming at the complex mapping properties of one-to-one, one-to-many, many-to-one, and many-to-many relations, relation-aware mapping-based models, specific representation space-based models, tensor decomposition-based models, and neural network-based models are reviewed. Next, focusing on modeling various relation patterns such as symmetry, asymmetry, inversion, and composition, we summarize models based on modified tensor decomposition, models based on modified relation-aware mapping, and models based on rotation operations. Subsequently, considering the implicit hierarchical relations among entities, we introduce auxiliary information-based models, hyperbolic spaces-based models, and polar coordinate system-based models. Finally, for more complex scenarios such as sparse knowledge graphs and dynamic knowledge graphs, this paper discusses some future research directions. It explores ideas like integrating multimodal information into knowledge graph representation learning, rule-enhanced relation patterns modeling, and modeling relation characteristics for dynamic knowledge graph representation learning.

**Keywords** Knowledge graph, Representation learning, Complex mapping relations, Relation patterns, Hierarchical relations

## 1 引言

知识图谱提供了一种以有向图结构建立实体之间各种关系的方式,可以为机器赋予类似人类的理解、归纳和应用知识的能力。符号化的知识对于人类而言具有显著的可解释性,

但是难以被机器高效处理。因此,受到词嵌入技术能够将符号化的词语转换为数值向量的启发,知识图谱表示学习方法旨在将知识图谱中符号化的实体和关系嵌入数值表示空间,同时保持知识图谱原有的语义和结构信息,进而能够通过数值计算高效地检索和推理知识<sup>[1-3]</sup>。知识图谱表示学习技术

到稿日期:2024-01-12 返修日期:2024-07-03

基金项目:国家自然科学基金(62376016)

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China(62376016).

通信作者:牛广林(beihangngl@buaa.edu.cn)

被广泛应用于知识图谱构建过程中的关系抽取<sup>[4]</sup>、实体对齐<sup>[5]</sup>和知识图谱补全<sup>[6]</sup>等,以及知识增强的下游任务如问答系统<sup>[7]</sup>、推荐系统<sup>[8]</sup>和预训练语言模型<sup>[9]</sup>等。因此,知识图谱表示学习已经成为构建和应用知识图谱的基座与主流模型<sup>[10]</sup>。

知识图谱表示学习方法主要是在数值表示空间学习实体和关系的表示并通过打分函数评估每个知识成立的可能性,因此,当前涌现出的大量知识图谱表示学习模型主要针对表示空间<sup>[11]</sup>、打分函数<sup>[12]</sup>、实体和关系的编码方式<sup>[13]</sup>等方面开展研究。虽然现在已有一些知识图谱表示学习的综述文献,但是这些文献主要以全面概括相关研究现状为主<sup>[14-20]</sup>。特别地,知识图谱的语义性主要体现在实体间的关系,而关系存在一对一、一对多、多对一和多对多的复杂映射特性及对称、反对称、逆反和组合特性的关系模式;同时,知识图谱中的实体间通常存在隐含的层次关系特性,对关系特性建模的能力很大程度上影响着知识图谱表示学习的效果及其在各类任务中的性能。然而,已有的文献缺乏从面向建模关系特性的角度对知识图谱表示学习方法进行总结和梳理。为此,本文分别从关系的复杂映射特性、多种关系模式和实体间层次关系的角度对知识图谱表示学习模型进行梳理,并讨论相关研究的未来发展方向。

本文第2章概述知识图谱表示学习方法的基本原理和几类关系特性;第3章论述建模复杂关系的知识图谱表示学习模型;第4章介绍建模多种关系模式的知识图谱表示学习模型;第5章归纳建模实体层次关系的知识图谱表示学习模型;第6章讨论知识图谱表示学习的未来研究方向;最后总结全文。

## 2 知识图谱表示学习相关介绍

为了充分建模和利用知识,知识图谱采用有向图结构来描述知识和建模世界万物之间的关联关系,其中节点表示实体,边表示实体之间具体的关联关系,每个关系及其连接的两个实体共同构成一个三元组(头实体,关系,尾实体)<sup>[21]</sup>。知识图谱中存储的大量显式常识知识和领域知识能够赋能诸多下游任务,然而,基于符号计算的知识检索和推理难以应用于大规模知识图谱中,且无法直接融入如预训练语言模型等深度学习模型中。

为了改善应用知识图谱的可扩展性和计算效率,基于数据驱动的知识图谱表示学习技术从三元组中自动学习实体和关系的嵌入表示。这里,嵌入表示可以是向量或矩阵,因此知识图谱表示学习也被称为知识表示学习或知识图谱嵌入<sup>[22]</sup>。知识图谱表示学习技术在训练过程中需要设定实体和关系的数值表示空间和评估三元组成立可能性的打分函数,进而设计优化目标对三元组训练样本学习实体和关系嵌入表示;在完成训练后,实体和关系的嵌入表示中蕴含了知识图谱的语义和结构信息,可以将其用于如预训练语言模型等下游任务或进行知识图谱补全<sup>[23]</sup>。图1给出了最经典的知识图谱表示学习模型之一 TransE 将符号化表示的知识图谱转换为数值化表示的示意图,其核心思想是期望一个正确的三元组中实体和关系对应的向量表示满足约束“头实体向量+关系向量 $\approx$ 尾实体向量”,这一约束目标使得训练得到的实体和关系向量表示之间满足知识图谱原有的语义和结构特性<sup>[24]</sup>。TransE 模型因具有简单有效的特点,受到了知识图谱推理研究领域的广泛关注,并且很多后续的相关研究都是在 TransE 模型基础上进行的改进。

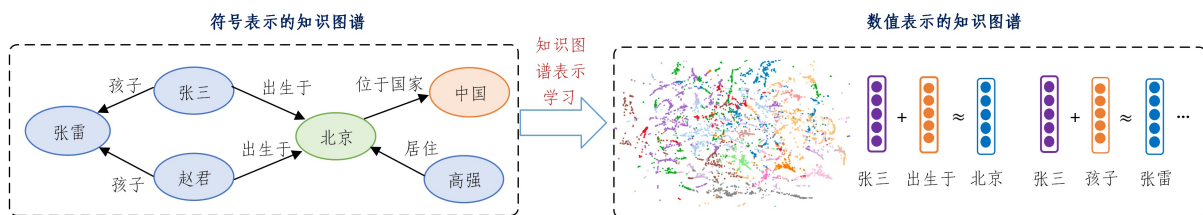


图1 知识图谱表示学习技术示意图

Fig. 1 Diagram of knowledge graph representation learning technique

为了评价知识图谱表示学习任务的性能,通常在模型训练完成后,采用链接预测的评价机制判断模型能够正确预测出新三元组的准确率。例如预测缺乏头实体的三元组(?,关系,尾实体),通过将知识图谱中的所有实体分别填入头实体位置构造候选三元组(候选头实体,关系,尾实体),并计算正确的候选三元组在所有候选三元组中的排名。进而,针对知识图谱表示学习任务3个常用的评价指标为:平均排名(MR),表示所有正确候选三元组排名的平均值;平均倒序排名(MRR),表示所有正确三元组排名倒数的平均值;前N准确率(Hits@N),表示正确的候选三元组排在前N的比例。其中,MR值越小表示知识图谱表示学习模型的性能越好,MRR值越大或Hits@N值越大表明模型的性能越好。

知识图谱中的语义信息主要体现在实体间的关系。特别

地,不同的关系具有一定的特性,包括复杂映射特性、多种关系模式和实体间的层次关系。当前知识图谱表示学习研究的关键挑战之一是在数值表示空间有效建模这些关系特性,其对于知识图谱表示学习的性能至关重要。为了便于理解,给出了几种关系特性的具体解释:

(1)关系的复杂映射特性包括一对一(1-1),一对多(1-N),多对一(N-1)和多对多(N-N),这里定义处于符号“1”位置的实体是唯一性实体,表示当三元组中的关系和另一个实体确定时,将唯一性实体替换为其他任意实体都将成为错误知识。而处于符号“N”位置的实体为非唯一性实体,表示这个位置的实体可能有多种不同的选择。例如针对N-1关系“出生于”,通常尾实体“北京”对应多个头实体,而给定的一个头实体“小明”仅能对应唯一的一个尾实体。关系的复杂映射特性示例如图2所示。

(2)多种关系模式包括对称、反对称、逆反和组合关系。其中,对称关系如“同学”或“夫妻”和反对称关系如“老师”均为某一个关系自身的特性,且包含对称关系的三元组中的头、尾实体互换位置后仍成立,而包含反对称关系的三元组中头、尾实体互换位置后一定不成立;逆反关系模式为两个不同的关系之间互为逆反关系,例如三元组(小明,老师,小强)和(小强,学生,小明)均成立;组合关系为三个关系之间的关系

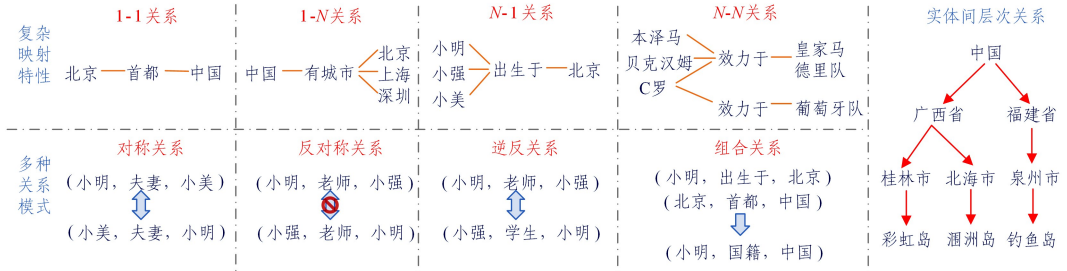


图2 关系的复杂映射特性和多种关系模式示意图

Fig. 2 Diagram of relation's complex mapping properties and various relation patterns

(3)由于每个关系连接的两个实体所属的语义层次可能不同,因而实体间具有一定的层次关系。如图2所示,实体“中国”“泉州市”“钓鱼岛”之间存在层次关系,建模实体间层次关系有助于知识图谱表示学习模型有效表示实体间更丰富的语义信息。

由于 TransE 模型的约束目标为“头实体向量+关系向量 $\approx$ 尾实体向量”,针对包含 1-N 关系的三元组如(中国,有城市,北京)和(中国,有城市,上海),会迫使实体“北京”和“上海”的向量表示近似相同,这一结果显然不合理。同时,针对包含对称关系的两个三元组如( $h, r, t$ )和( $t, r, h$ ),这里,本文定义  $h, r, t$  分别代表头实体、关系和尾实体,TransE 模型会得到  $r=0$  的结果,导致无法有效建模对称关系。此外,在没有额外信息辅助的情况下,TransE 模型无法建模实体间隐式的层次关系。

TransE 模型无法建模这几种关系特性的原因是其在实数向量空间采用了平移操作来表示实体间的关系,因此,后续的研究从关系感知映射、采用不同的表示空间、基于张量分解技术和神经网络技术建模实体和关系间的交互、将平移改为旋转操作、基于极坐标系等思路设计和优化了知识图谱表示学习模型,实现建模关系的复杂映射特性、多种关系模式和实体间层次关系。因此,本文将面向这3类关系特性分别梳理和总结当前的研究现状。

### 3 建模关系复杂映射特性的模型

为了打破 TransE 模型无法建模关系的复杂映射特性的局限,当前知识图谱表示学习方法主要从对实体向量表示进行关系感知映射、将知识图谱嵌入特殊的几何空间进行表示、将知识图谱视为高维三阶张量并采用张量分解技术、采用神经网络学习实体和关系间的交互几种思路进行知识图谱表示学习。

#### 3.1 基于关系感知映射的模型

基于关系感知映射的一系列模型仍以 TransE 模型的

模式,表示两个关系可以组合为另一个关系,例如通过(小明,出生于,北京)和(北京,首都,中国)可以直接推出(小明,国籍,中国)。图2给出了多种关系模式的示例,判断一个知识图谱表示学习模型是否能够建模某种关系模式的方式为:当关系模式中表示前提条件的三元组成立时,给出满足模型的优化目标,这时如果表达推论的三元组同时满足优化目标,说明该模型能够建模这类关系模式。

平移操作为基础,通过设计与关系相关的实体映射机制实现关系的复杂映射特性建模。TransH<sup>[25]</sup>最早扩展了 TransE 模型并对每个关系都定义了一个对应的关系超平面,将实体投影到不同的关系超平面,这样可以使每个实体关于不同的关系具有对应的表示,从而评估一个三元组( $h, r, t$ )成立可能性的打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{h}_r + \mathbf{r} - \mathbf{t}_r \|_{L_1/L_2} \quad (1)$$

$$\mathbf{h}_r = \mathbf{h} - \mathbf{w}^T \mathbf{h} \mathbf{w}, \mathbf{t}_r = \mathbf{t} - \mathbf{w}^T \mathbf{t} \mathbf{w} \quad (2)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^k, \mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  分别是头实体  $h$ 、关系  $r$  和尾实体  $t$  在维度为  $k$  的实数向量空间中的嵌入表示,  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^k$  为关系  $r$  对应的超平面法向量,  $\mathbf{h}_r \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t}_r \in \mathbb{R}^k$  分别是头实体和尾实体经过关系  $r$  的超平面投影后的向量表示;  $L_1/L_2$  代表通过  $L_1$  或  $L_2$  范数得到标量的三元组分值。

从另一个角度来看,针对一对多关系例如“有城市”、同一个头实体例如“中国”,对应多个尾实体都成立。将这些不同的尾实体向量表示投影到特定于“有城市”的关系超平面后得到相近的向量表示,基于这一机制可以巧妙地解决一对多、多对一和多对多复杂映射特性的关系建模问题。然而,TransH 要求同一关系关联的所有实体从实体空间中均投影到一个超平面上,导致实体的表示能力受限。TransR<sup>[26]</sup>针对每个关系定义了一个关系空间,将实体投影到特定的关系空间后,可以发现两个表示学习效果上的优点:(1)例如一个 1-N 关系,同一个头实体对应的多个尾实体在实体空间中具有不同的向量表示,而在关系空间中具有相近的向量表示;(2)原本相似的多个实体向量表示在关系空间中能够被有效区分,TransR 模型的打分函数被定义为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{M}_r \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_r \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (3)$$

其中,  $\mathbf{M}_r \in \mathbb{R}^{d \times k}$  为关系  $r$  的投影矩阵,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$  为关系的向量表示。

TransR 模型中的投影矩阵只和关系相关,缺乏头、尾实体语义信息对投影过程的作用,因此,STransE 模型<sup>[27]</sup>将 TransR 扩展为对每个关系分别学习两个投影矩阵,使得头、

尾实体分别投影到对应的关系空间,打分函数为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{M}_{r_1} \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_{r_2} \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (4)$$

其中,  $\mathbf{M}_{r_1} \in \mathbb{R}^{k \times k}$  和  $\mathbf{M}_{r_2} \in \mathbb{R}^{k \times k}$  为关系  $r$  的两个投影矩阵。

然而, STransE 模型的参数量过大, 对此, TransD 模型<sup>[28]</sup>联合关系投影向量、头实体投影向量和尾实体投影向量构造了动态投影矩阵。针对一个事实三元组中的头、尾实体, 可以分别通过不同的投影矩阵进行映射, 打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{M}_h \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_t \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (5)$$

$$\mathbf{M}_h = \mathbf{w}_r \mathbf{w}_h^T + \mathbf{I}^{d \times d}, \mathbf{M}_t = \mathbf{w}_r \mathbf{w}_t^T + \mathbf{I}^{d \times d} \quad (6)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  分别是头实体  $h$  和尾实体  $t$  的向量表示,  $\mathbf{w}_h \in \mathbb{R}^d$  和  $\mathbf{w}_t \in \mathbb{R}^d$  为头实体和尾实体相关的投影向量,  $\mathbf{w}_r \in \mathbb{R}^d$  表示关系投影向量。通过头、尾实体投影向量和关系投影向量分别构造特定于头、尾实体的投影矩阵, 相比直接使用两个投影矩阵的 STransE 模型显著降低了参数量。

与 TransD 类似, TranSparse 模型<sup>[29]</sup>通过衡量每个关系连接的实体对数量来计算稀疏度, 进而构造自适应投影稀疏矩阵。针对知识图谱的关系不平衡性问题进行自适应头、尾实体的投影映射, 打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \| \theta_h \mathbf{M}_{rh} \mathbf{h} + \mathbf{r} - \theta_t \mathbf{M}_{rt} \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (7)$$

$$\theta_h = 1 - (1 - \theta_{\min}) N_{rh} / N^* \quad (8)$$

$$\theta_t = 1 - (1 - \theta_{\min}) N_{rt} / N^* \quad (9)$$

其中,  $\theta_h$  和  $\theta_t$  分别代表头实体投影矩阵和尾实体投影矩阵的稀疏度,  $N_m$  和  $N_n$  分别为关系  $r$  关联的头实体和尾实体数量,  $N^*$  为  $N_m$  和  $N_n$  的最大值,  $\theta_{\min} \in [0, 1]$  为控制稀疏度的超参数。

TransF<sup>[30]</sup>将 TransE 中的优化目标放松为“头实体向量表示+关系向量表示”得到的向量仅需与尾实体向量表示

保持相同方向, 因此, 1-N 关系的多个尾实体可以分别学习到不同的向量表示, 实现了对关系复杂映射特性的建模。其打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = (\mathbf{h} + \mathbf{r})^T \mathbf{t} + \mathbf{h}^T (\mathbf{t} - \mathbf{r}) \quad (10)$$

不同于通过欧氏距离计算三元组成立可能性的评价机制, TransA 模型<sup>[31]</sup>将每个关系表示为一个对称的非负矩阵, 并在打分函数中采用马氏距离衡量三元组成立的可能性, 因而可以将关系矩阵视为头、尾实体和关系向量间差值向量所有维度的加权和, 使得 1-N 关系的多个尾实体具有不同的向量。这里的多个尾实体与同一头实体和关系组成的多个三元组可以满足相近的自适应马氏距离值, 实现对关系的复杂映射特性的建模。打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = (|\mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t}|)^T \mathbf{M}_r (|\mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t}|) \quad (11)$$

其中,  $(|\mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t}|) \in \mathbb{R}^k = (|h_1 + r_1 - t_1|, |h_2 + r_2 - t_2|, \dots, |h_k + r_k - t_k|)$ ,  $\mathbf{M}_r \in \mathbb{R}^{k \times k}$  代表关系  $r$  对应的对称非负矩阵。

TransM 模型<sup>[32]</sup>针对不同的关系设置不同的三元组打分权重, 由此, 具有复杂映射特性的关系具有较低权重, 例如, 包含同一 1-N 关系和头实体的多个三元组中, 多个尾实体向量表示可以不同, 按照 TransE 模型只能得到不同的三元组分值, 而通过 TransM 的打分函数可以保证在结合较低的权重后这些三元组打分接近, 其打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \omega_r \| \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (12)$$

其中,  $\omega_r$  为关系  $r$  的三元组打分权重。

为了便于理解, 以建模 1-N 关系的复杂映射特性为例, 给出了基于关系感知映射的几种典型模型的核心思想, 如图 3 所示。

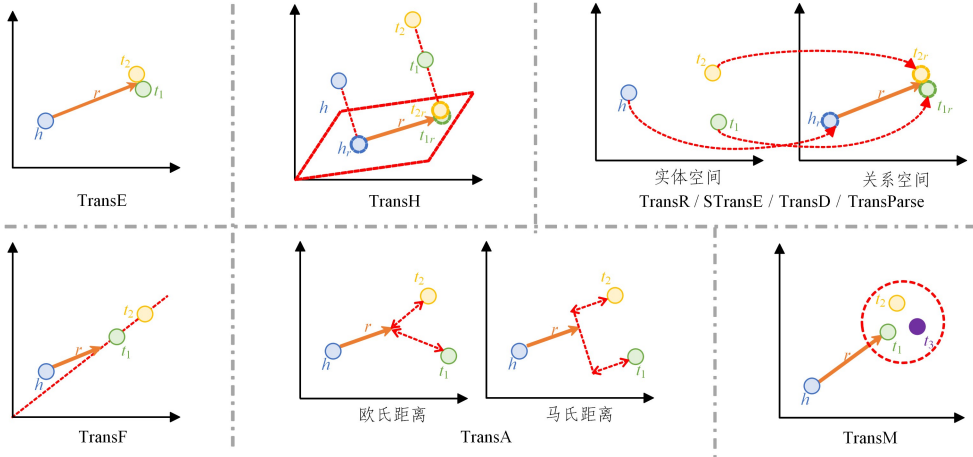


图 3 基于关系感知映射的模型建模 1-N 关系的示意图

Fig. 3 Diagram of modeling 1-N relation based on relation-aware mapping

### 3.2 基于特定表示空间的模型

基于关系感知映射的模型均将知识图谱嵌入欧氏向量空间, 而基于特定表示空间的知识图谱表示学习模型通过将知识图谱嵌入不同的表示空间如高斯空间、流形空间、李群等, 可以在这些特定的表示空间中自然地解决关系的复杂映射特性建模问题。

KG2E 模型<sup>[33]</sup>将实体和关系嵌入多维高斯空间中采用高斯分布进行表示,  $\mathbf{h} \sim N(\mathbf{u}_h, \Sigma_h)$ ,  $\mathbf{r} \sim N(\mathbf{u}_r, \Sigma_r)$ ,  $\mathbf{t} \sim N(\mathbf{u}_t,$

$\Sigma_t)$ , 其中均值向量  $\mathbf{u}_h \in \mathbb{R}^k$ ,  $\mathbf{u}_r \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{u}_t \in \mathbb{R}^k$  为实体和关系在表示空间中的中心位置, 协方差矩阵  $\Sigma_h \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ,  $\Sigma_r \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ,  $\Sigma_t \in \mathbb{R}^{k \times k}$  表示实体和关系的不确定度; KG2E 通过计算实体对差值  $(\mathbf{t} - \mathbf{h}) \sim N(\mathbf{u}_e = \mathbf{u}_t - \mathbf{u}_h, \Sigma_e = \Sigma_t + \Sigma_h)$  和  $\mathbf{r}$  之间的相似程度来评估三元组成立的可能性, 其采用 KL 散度和期望似然两种相似程度计算方式设计打分函数  $E(h, r, t)$ , 表示为:

$$\int_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k} N(\mathbf{x}, \mathbf{u}_r, \Sigma_r) \log \frac{N(\mathbf{x}, \mathbf{u}_e, \Sigma_e)}{N(\mathbf{x}, \mathbf{u}_r, \Sigma_r)} d\mathbf{x} \quad (13)$$

$$\int_{x \in \mathbb{R}^k} N(x, \mathbf{u}_e, \Sigma_e) N(x, \mathbf{u}_r, \Sigma_r) dx \quad (14)$$

其中,对于 1-N 关系的不同尾实体,采用这两种相似度打分函数能够得到相近的三元组打分,实现复杂映射特性的关系建模。

ManifoldE<sup>[34]</sup>模型将实体和关系表示在流形空间,例如一个高维球体,要求每个三元组的头实体和关系为球体的中心,尾实体位于该球体中;这时,1-N 关系的不同尾实体表示只需要满足在球体中这一条件,即可巧妙地达到建模关系的复杂映射特性的效果。打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \|MF(\mathbf{h}, \mathbf{r}, t) - D_r\|^2 \quad (15)$$

其中,  $MF$  为流形函数,  $D_r$  为球体半径的流形参数。

TorusE 模型<sup>[35]</sup>将知识图谱嵌入在一个紧李群环上,该表示空间的特点是一个实体表示  $[\mathbf{h}] \in T^k$  和另两个不同的实体表示  $[\mathbf{t}_1] \in T^k, [\mathbf{t}_2] \in T^k$  在李群环上的差值  $[\mathbf{t}_1] - [\mathbf{h}]$  和  $[\mathbf{t}_2] - [\mathbf{h}]$  可以是相似的,借鉴 TransE 的优化目标  $[\mathbf{h}] + [\mathbf{r}] = [\mathbf{t}]$ ,  $[\mathbf{t}_1] - [\mathbf{h}]$  和  $[\mathbf{t}_2] - [\mathbf{h}]$  这两个差值能够代表相同的嵌入表示,也就是能够建模 1-N 关系。TorusE 模型定义了 3 种打分函数,分别为:

$$E_{L1}(h, r, t) = 2 d_{L1}([\mathbf{h}] + [\mathbf{r}], [\mathbf{t}]) \quad (16)$$

$$E_{L2}(h, r, t) = (2 d_{L2}([\mathbf{h}] + [\mathbf{r}], [\mathbf{t}]))^2 \quad (17)$$

$$E_{dL2}(h, r, t) = (d_{dL2}([\mathbf{h}] + [\mathbf{r}], [\mathbf{t}])/2)^2 \quad (18)$$

图 4 给出了几种特定表示空间的三维示意图。



图 4 特定表示空间示意图

Fig. 4 Diagram of the specific representation space

### 3.3 基于张量分解的模型

基于张量分解思想的一系列知识图谱表示学习模型均先将原始的知识图谱视为一个大尺寸的三阶张量,张量中每个位置的取值代表当前位置对应的三元组是否出现在知识图谱中,取值为 1 代表出现在知识图谱中,取值为 0 说明未存储于知识图谱中;再通过张量分解的思路,将每个三元组的分值转换为头、尾实体表示和关系表示间的双线性运算,特别地,这类运算可以天然地解决关系的复杂映射特性问题。RESCAL<sup>[36]</sup>是最早采用张量分解技术的知识图谱表示学习模型,以低维实体向量表示和关系矩阵表示之间的矩阵乘法计算张量中每个位置对应三元组的分值。其打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{h}^T \mathbf{M}_r \mathbf{t} = \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{j=0}^{k-1} [\mathbf{M}_r]_{ij} [\mathbf{h}]_i [\mathbf{t}]_j \quad (19)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  分别是头实体  $h$  和尾实体  $t$  在维度为  $k$  的实数向量空间中的实体表示,  $\mathbf{M}_r \in \mathbb{R}^{k \times k}$  为关系  $r$  的矩阵表示。由于采用了矩阵乘法,因此相同的 1-N 关系和头实体与多个不同的尾实体向量可以得到近似的分值。

DistMult 模型<sup>[37]</sup>简化了 RESCAL 方法并将每个关系用

对角矩阵表示,显著降低了每个关系表示的参数量,进而打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{h}^T \text{diag}(\mathbf{r}) \mathbf{t} = \sum_{i=0}^{k-1} [\mathbf{h}]_i [\mathbf{r}]_i [\mathbf{t}]_i \quad (20)$$

其中,  $\text{diag}(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$  表示对角矩阵且  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^k$  为关系向量表示。

Tucker 模型<sup>[38]</sup>采用 Tucker 分解技术,其可以将一个三阶张量分解为一个核心张量和三个分部矩阵。基于这一思想, Tucker 模型将每个三元组的打分用一个核心张量和头实体向量、关系向量和尾实体向量的张量乘法计算得到。Tucker 打分函数为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{w} \times_1 \mathbf{h} \times_2 \mathbf{r} \times_3 \mathbf{t} \quad (21)$$

其中,  $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{k \times d \times k}$  表示核心张量,其可以被视为共享权重参数,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$  为关系的向量表示,  $\times_n$  代表在第  $n$  维的张量乘法。

### 3.4 基于神经网络的模型

基于神经网络的知识图谱表示学习模型采用非线性运算和网络结构建模实体和关系间的交互,可以直接解决关系的复杂映射特性建模问题。SME<sup>[39]</sup>是最早采用神经网络实现知识图谱表示学习的方法,在全连接神经网络的隐层中将头实体和尾实体的向量表示分别和关系向量表示进行组合得到两个隐层向量表示,再将二者计算内积得到三元组的打分。SME 的打分函数定义为:

$$g_u(h, r) = \mathbf{M}_u^h \mathbf{h} + \mathbf{M}_u^r \mathbf{r} + \mathbf{b}_u \quad (22)$$

$$g_v(t, r) = \mathbf{M}_v^t \mathbf{t} + \mathbf{M}_v^r \mathbf{r} + \mathbf{b}_v \quad (23)$$

$$E(h, r, t) = g_u(h, r)^T g_v(t, r) \quad (24)$$

其中,  $\mathbf{M}_u^h \in \mathbb{R}^{d \times k}$ ,  $\mathbf{M}_u^r \in \mathbb{R}^{d \times k}$ ,  $\mathbf{M}_v^t \in \mathbb{R}^{d \times k}$  和  $\mathbf{M}_v^r \in \mathbb{R}^{d \times k}$  表示神经网络的权重矩阵,  $\mathbf{b}_u \in \mathbb{R}^d$  和  $\mathbf{b}_v \in \mathbb{R}^d$  表示偏置向量。

NTN<sup>[40]</sup>模型将一个三元组中的头、尾实体向量表示共同输入特定于关系的神经网络中,通过张量乘法与矩阵乘法与激活函数得到三元组的打分。NTN 的打分函数设计为:

$$E = \mathbf{r}^T \tanh(\mathbf{h}^T \mathbf{M}_r \mathbf{t} + \mathbf{M}_r^h \mathbf{h} + \mathbf{M}_r^t \mathbf{t} + \mathbf{b}_r) \quad (25)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$  为关系的向量表示,  $\mathbf{M}_r \in \mathbb{R}^{k \times k \times d}$  和  $\mathbf{M}_r^h \in \mathbb{R}^{d \times k}$  以及  $\mathbf{M}_r^t \in \mathbb{R}^{d \times k}$  为神经网络中的双线性映射和线性映射参数,  $\mathbf{b}_r \in \mathbb{R}^d$  代表偏置向量。

ConvE<sup>[41]</sup>和 ConvKB<sup>[42]</sup>借鉴了计算机视觉中通过卷积神经网络(CNN)对二维图像提取特征图的方式,将头、尾实体和关系的向量表示重构为二维矩阵,利用卷积核来编码实体和关系之间的交互。二者的区别在于 ConvE 通过重构头实体和关系嵌入表示得到二维矩阵,并经过卷积操作后与尾实体向量结合得到三元组的分值:

$$E(h, r, t) = \sigma(\text{vec}(\sigma([\mathbf{M}_h; \mathbf{M}_r] * \omega)) \mathbf{W}) \mathbf{t} \quad (26)$$

其中,  $\mathbf{M}_h \in \mathbb{R}^{d_u \times d_h}$  和  $\mathbf{M}_r \in \mathbb{R}^{d_u \times d_h}$  为头实体和关系的矩阵表示,  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  代表尾实体向量表示,  $\omega$  为卷积核,  $*$  为卷积操作,  $\text{vec}$  代表将张量重构为向量,  $\mathbf{W}$  为线性映射矩阵。

而 ConvKB 直接堆叠头、尾实体和关系向量构造二维矩阵,从而利用卷积操作提取三元组的整体特征。其打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \text{concat}(\text{Relu}([\mathbf{h}; \mathbf{r}; \mathbf{t}] * \omega)) \mathbf{w} \quad (27)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$  为关系的向量表示,  $\text{Relu}$  表示线性整流函数,  $\mathbf{w}$  代表权重向量。

CapsE 模型<sup>[43]</sup>在 ConvKB 通过卷积核提取特征图的基础上采用胶囊网络捕捉特征向量间相同维度上的条目。其打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \| \text{capsnet}(\text{Relu}([\mathbf{h}; \mathbf{r}; \mathbf{t}] * \omega)) \| \quad (28)$$

其中, *capsnet* 代表胶囊网络操作。

InteractE 模型<sup>[44]</sup>为了增强实体和关系间的交互,在 ConvE 模型的基础上采用更复杂的直接堆叠、按行循环交替和按元素交叉排列 3 种方式重构嵌入二维矩阵,进一步

设计打分函数为:

$$E(h, r, t) = \sigma(\text{vec}(\text{Relu}([\mathbf{M}_h; \mathbf{M}_r] * \omega))\mathbf{W})t \quad (29)$$

图 5 展示了几类基于神经网络的模型在提取实体和关系交互特征上的对比。其中,针对 ConvE,ConvKB,InteractE 模型,主要给出将实体和关系向量重构为二维矩阵的特点;对于 CapsE 模型,主要展现其提取特征图后通过特征变换构建胶囊的示意图。同时,为了便于对比几类建模关系复杂映射特性的模型,表 1 列出了对这些模型的梳理和总结。

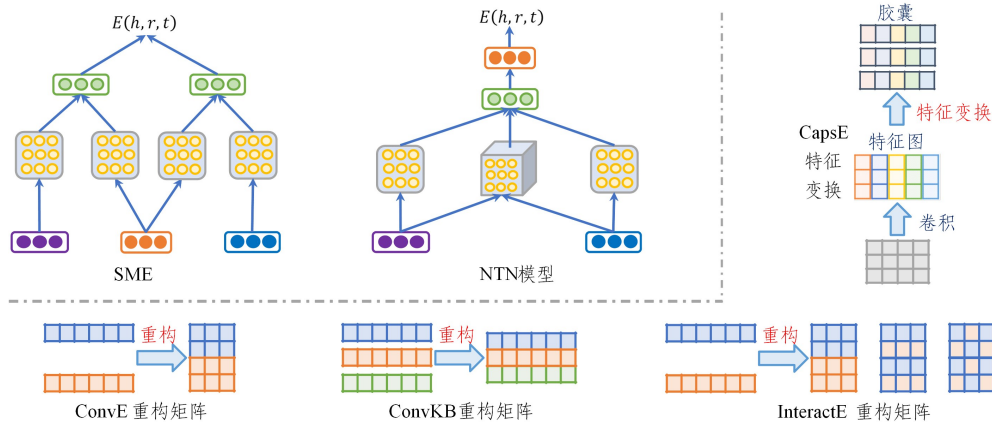


图 5 基于神经网络的模型示意图

Fig. 5 Diagram of models based on neural networks

表 1 建模关系复杂映射特性的模型总结

Table 1 Summary of models modeling complex mapping characteristics in relations

模型	表示空间	打分函数	特点	优缺点	
基于关系感知映射的模型	TransH	$\  \mathbf{h}_r + \mathbf{r} - \mathbf{t}_r \ _{L_1/L_2}$	关系超平面投影	建模关系复杂映射特性的几何解释性强,但需要为每个关系增加额外的参数	
	TransR	$\  \mathbf{M}_r \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_r \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$	关系空间投影		
	STransE	$\  \mathbf{M}_{r1} \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_{r2} \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$	头、尾实体分别在不同的关系空间投影		
	TransD	$\  \theta_h \mathbf{M}_{rh} \mathbf{h} + \mathbf{r} - \theta_t \mathbf{M}_{rt} \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$	自适应投影稀疏矩阵		
	TransF	$(\mathbf{h} + \mathbf{r})^T \mathbf{t} + \mathbf{h}^T (\mathbf{t} - \mathbf{r})$	“头实体向量+关系向量”与尾实体向量保持相同方向		
	TransA	$( \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t} )^T \mathbf{M}_r ( \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t} )$	欧氏距离改为加权的马氏距离		
	TransM	$w_r \cdot \  \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$	降低复杂映射特性关系权重		
基于特定表示空间的模型	KG2E	多维高斯空间	$\int_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k} N(\mathbf{x}, \mathbf{u}_e, \Sigma_e) N(\mathbf{x}, \mathbf{u}_r, \Sigma_r) d\mathbf{x}$	通过高斯空间表示实体和关系的不确定性	可以直接建模关系的复杂映射特性,但是表示空间比实数向量空间更复杂
	ManifoldE	流形空间	$\  MF(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) - D_r^2 \ $	头实体和关系为球体的中心,尾实体位于该球体中	
	TorusE	紧李群环	$E_{L1}(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) = 2d_{L1}([\mathbf{h}] + [\mathbf{r}], [\mathbf{t}])$	在紧李群环上不同的尾实体和同一头实体嵌入表示差值可以相同	
基于张量分解的模型	RESCAL	实数张量空间	$\mathbf{h}^T \mathbf{M}_r \mathbf{t}$	将高维三阶张量分解为低维矩阵和张量间的张量乘法	可以直接建模关系的复杂映射特性,但是参数量较大
	DistMult		$\mathbf{h}^T \text{diag}(\mathbf{r}) \mathbf{t}$	将每个关系表示为对角矩阵,降低参数数量	
	Tucker		$w \times_1 \mathbf{h} \times_2 \mathbf{r} \times_3 \mathbf{t}$	通过权重共享机制降低参数数量	
基于神经网络的模型	SME	实数向量空间	$g_u(\mathbf{h}, \mathbf{r})^T g_v(\mathbf{t}, \mathbf{r})$	利用全连接神经网络分别建立头、尾实体和关系的交互,计算三元组分值	可以直接建模关系的复杂映射特性,但是计算复杂度较高
	NTN		$\mathbf{r}^T \tanh(\mathbf{h}^T \mathbf{M}_r \mathbf{t} + \mathbf{M}_r^1 \mathbf{h} + \mathbf{M}_r^2 \mathbf{t} + b_r)$	在全连接神经网络中编码头、尾实体和关系的交互	
	ConvE		$\sigma(\text{vec}(\sigma([\mathbf{M}_h; \mathbf{M}_r] * \omega))\mathbf{W})t$	重构头实体和关系嵌入表示得到二维矩阵经过卷积操作	
	ConvKB		$\text{concat}(\text{Relu}([\mathbf{h}; \mathbf{r}; \mathbf{t}] * \omega))\mathbf{w}$	直接拼接头、尾实体和关系向量构造二维矩阵经过卷积操作	
	CapsE		$\  \text{capsnet}(\text{Relu}([\mathbf{h}; \mathbf{r}; \mathbf{t}] * \omega)) \ $	卷积操作后采用胶囊网络捕捉特征向量间相同维度上的条目	
	InteractE		$\sigma(\text{vec}(\text{Relu}([\mathbf{M}_h; \mathbf{M}_r] * \omega))\mathbf{W})t$	采用直接堆叠、按行循环交替和按元素交叉排列重构二维矩阵用于卷积操作	

#### 4 建模多种关系模式的模型

以 TransE 为代表的基于平移操作的知识图谱表示学习

模型易于建模反对称关系,但也因此无法建模对称关系。而 3.3 节介绍的基于张量分解的模型如 RESCAL 由于满足矩阵乘法的交换律,能够直接建模对称关系,但也因此无法建模

反对称关系,且难以建模多个关系间的模式如逆反和组合关系。当前能够建模多种关系模式的知识图谱表示学习方法主要通过改进基于张量分解的模型、基于改进关系感知映射的模型和将关系视为实体间的旋转操作等方式进行实现。

#### 4.1 基于改进张量分解的模型

为了突破在实数空间内矩阵乘法满足交换律而无法建模反对称关系模式的局限,基于改进张量分解的知识图谱表示学习模型致力于同时建模对称和反对称关系。ComplEx模型<sup>[45]</sup>最早将实体和关系嵌入复数空间中,并采用头实体、关系和尾实体复数表示之间的哈密顿乘法改进了 DistMult 模型。其打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \text{Re}(\mathbf{h}^T \text{diag}(\mathbf{r}) \bar{\mathbf{t}}) \quad (30)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体的复数向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^k$  为关系的复数向量表示,  $\bar{\mathbf{t}}$  代表  $\mathbf{t}$  的共轭,  $\text{Re}$  表示只取一个复数的实部。通过式(30)计算交换头、尾实体前后的三元组  $(h, r, t)$  和  $(t, r, h)$  分值时,取三元组  $(h, r, t)$  的三元组打分中尾实体  $t$  的复数向量共轭,而取三元组  $(t, r, h)$  的三元组打分中头实体  $h$  的复数向量共轭,因此这两个三元组理论上可以得到相同或不同的分值,实现同时建模对称关系和反对称关系。

不同于 RESCAL 和 DistMult 等模型采用针对头、尾实体对称的双线性运算, HolE 模型<sup>[46]</sup>采用头、尾实体向量表示间的循环相关运算,使得三元组打分针对头、尾实体不对称。HolE 打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{r}^T (\mathbf{h} * \mathbf{t}) \quad (31)$$

$$[\mathbf{h} * \mathbf{t}]_i = \sum_{j=0}^{k-1} [\mathbf{h}]_j [\mathbf{t}]_{i+j} \text{ mod } k \quad (32)$$

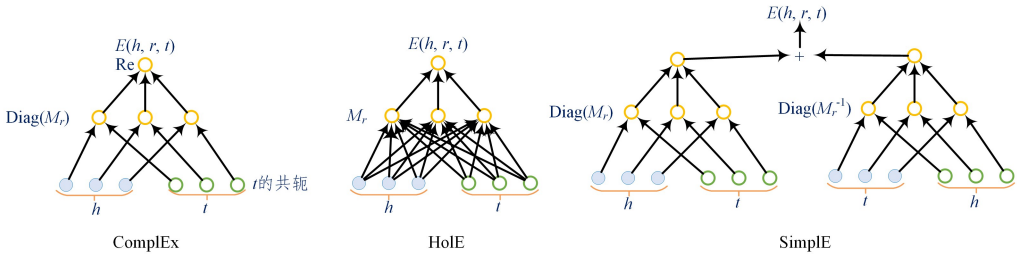


图6 基于改进张量分解的模型示意图

Fig. 6 Diagram of models based on improved tensor decomposition

基于改进张量分解的模型能够同时建模对称和反对称关系,尤其针对建模反对称关系,交换头、尾实体前后计算三元组打分时,与同一个关系表示进行矩阵乘法运算的头、尾实体向量产生了变化。这一特性同样适用于建模两个关系间的逆反关系模式,但是这类方法均无法建模对两个关系进行组合的模式。

#### 4.2 基于改进关系感知映射的模型

PairRE模型<sup>[48]</sup>采用成对的关系向量表示来解决同时建模关系模式和关系的复杂映射特性问题,其打分函数为:

$$E(h, r, t) = \|\mathbf{h} \circ \mathbf{r}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{r}'\| \quad (34)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r}^h \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{r}' \in \mathbb{R}^k$  为关系的成对向量表示,且  $\|\mathbf{h}\|^2 = \|\mathbf{t}\|^2 = 1$ 。进而,由于头实体向量表示和尾实体向量表示结合不同的关系向量表示

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^k$  为关系的向量表示,  $*$  表示循环相关算子。从式(32)可以看到,在对头、尾实体进行循环相关运算后,第  $i$  维的元素由头实体的第  $j$  个元素和尾实体的第  $i+j$  个元素组合得到;当交换头、尾实体位置后,头、尾实体进行循环相关运算得到的第  $i$  维的元素由尾实体的第  $j$  个元素和头实体的第  $i+j$  个元素进行组合;在对三元组打分时交换头、尾实体前后,头、尾实体均采用了不同的数值,因此可以得到相同或不同的三元组分值,取得和 ComplEx 类似的效果,能够同时建模对称和反对称关系。

Simple模型<sup>[47]</sup>在 DistMult 的基础上,为每个实体同时学习其作为头实体的嵌入表示和作为尾实体的嵌入表示,并且为每个关系构造一个对应的逆关系。进而对于三元组  $(h, r, t)$ ,包含对应逆关系的三元组  $(t, r^{-1}, h)$  应同时成立。因此 Simple 模型同时对原始三元组和包含逆关系的三元组打分,打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{h}_h^T \text{diag}(\mathbf{r}) \mathbf{t}_t + \mathbf{t}_h^T \text{diag}(\mathbf{r}^{-1}) \mathbf{h}_t \quad (33)$$

其中,  $\mathbf{h}_h \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{h}_t \in \mathbb{R}^k$  分别代表头实体  $h$  作为头实体和尾实体的向量表示,  $\mathbf{t}_h \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t}_t \in \mathbb{R}^k$  分别代表尾实体  $t$  作为头实体和尾实体的向量表示,  $\text{diag}(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$  和  $\text{diag}(\mathbf{r}^{-1}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$  分别是关系  $r$  及其逆关系  $r^{-1}$  的对角矩阵表示。特别地,在对三元组打分时交换头、尾实体前后,相同关系参与的双线性运算中头实体和尾实体采用不同的向量表示,因此可以得到相同或不同的三元组分值,能够同时建模对称和反对称关系。

为了便于理解,基于改进张量分解的几类模型包括 ComplEx, HolE 和 Simple,如图6所示。

进行映射,例如针对 1-N 关系,模型可以自动调整  $\mathbf{r}'$  使其由较小的元素值组成,类似于降低尾实体向量表示  $\mathbf{t}$  相关的权重,其对同一头实体和 1-N 关系对应的多个不同的尾实体向量表示均能够满足优化目标,实现建模关系的复杂映射特性的目标。同时,PairRE 能够建模多种关系模式,实现这一目标是通过要求关系嵌入表示满足约束条件:(1)对称关系:  $\mathbf{r}^h = \mathbf{r}^t$ ; (2)反对称关系:  $\mathbf{r}^h \neq \mathbf{r}^t$ ; (3)逆反关系:  $\mathbf{r}_1^h \circ \mathbf{r}_2^t = \mathbf{r}_1^t \circ \mathbf{r}_2^h$ ; (4)组合关系:  $\mathbf{r}_1^h \circ \mathbf{r}_2^t \circ \mathbf{r}_3^h = \mathbf{r}_1^t \circ \mathbf{r}_2^h \circ \mathbf{r}_3^t$ 。

TripleRE模型<sup>[49]</sup>对 PairRE 模型进行了扩展,将关系表示为分别对头实体和尾实体的映射及平移 3 部分,其打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \|\mathbf{h} \circ \mathbf{r}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{r}' + \mathbf{r}^m\| \quad (35)$$

其中,  $\mathbf{r}^m \in \mathbb{R}^k$  为对实体进行平移的关系向量表示,其余符号

均与 PairRE 相同。

类似地, Trans 模型<sup>[50]</sup>将 TripleRE 扩展为需要经过两次映射和 3 次平移操作, 打分函数为:

$$E = \| \mathbf{h} \circ \mathbf{t}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{h}^h + \mathbf{r}^h \circ \mathbf{h} + \mathbf{r} + \mathbf{r}' \circ \mathbf{t} \| \quad (36)$$

其中,  $\mathbf{t}^h \in \mathbb{R}^k$  为辅助尾实体向量,  $\mathbf{h}^h \in \mathbb{R}^k$  为辅助头实体向量,  $\mathbf{r}^h \in \mathbb{R}^k$  为与头实体相关的辅助关系向量,  $\mathbf{r}' \in \mathbb{R}^k$  为与尾实体相关的辅助关系向量。

### 4.3 基于旋转操作的模型

为了同时建模对称、反对称、逆反和组合几类关系模式, 基于旋转操作的知识图谱表示学习模型兼具基于平移操作的模型在反对称、逆反和组合关系模式上的建模能力, 以及基于改进张量分解的模型针对反对称关系模式的建模能力。RotatE 模型<sup>[51]</sup>最早将头实体到尾实体的转换视为旋转操作, 其通过将实体和关系嵌入复数向量空间并采用哈达玛积实现这一特殊操作。RotatE 的打分函数设计为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t} \| \quad (37)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{C}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{C}^k$  为头、尾实体的复数向量表示;  $\mathbf{r} \in \mathbb{C}^k$  为关系的复数向量表示;  $\circ$  为哈达玛积, 可以计算得到两个向量相同位置元素的乘积。针对一个三元组  $(h, r, t)$ , RotatE 的优化目标为  $\mathbf{h} \circ \mathbf{r} = \mathbf{t}$ , 基于这一优化目标, RotatE 模型最早从理论上证明了其能够同时建模对称、反对此、逆反和组合多种关系模式, 且每种关系模式对应的关系嵌入表示需要分别满足约束条件: (1) 对称关系:  $\mathbf{r} \circ \mathbf{r} = 1$ ; (2) 反对称关系:  $\mathbf{r} \circ \mathbf{r} \neq 1$ ; (3) 逆反关系:  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2^{-1}$ ; (4) 组合关系:  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 \circ \mathbf{r}_3$ 。

然而, RotatE 模型在复数向量空间中以欧拉角实现在一个复数平面上的旋转操作, 这会导致奇异性问题。为了建立更加稳定的旋转操作, QuatE 模型<sup>[52]</sup>将实体和关系表示在四元数空间, 通过哈密顿乘法实现在两个平面上的旋转操作, QuatE 模型的打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \mathbf{h} \otimes (\mathbf{r} / |\mathbf{r}|) \cdot \mathbf{t} \quad (38)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{Q}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{Q}^k$  为头、尾实体的  $k$  维四元数向量表示,  $\mathbf{r} \in \mathbb{Q}^k$  为关系的  $k$  维四元数向量表示,  $|\mathbf{r}|$  为  $\mathbf{r}$  的模长, 四元数由 1 个实部和 3 个虚部构成;  $\otimes$  为哈密顿乘法,  $\cdot$  为复数向量内积。特别地, RotatE 模型只能建模组合关系模式中包含 3 个不同关系的情况, 但是对于例如“哥哥  $(x, z) \leftarrow$  哥哥  $(x, y) \wedge$  姐姐  $(y, z)$ ”的组合关系模式中存在两个相同关系的情况, 以 RotatE 模型的约束条件  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1 \circ \mathbf{r}_2$  无法建模这类组合关系模式。然而, QuatE 可以建模存在两个相同关系的组合关系模式。

DualE 模型<sup>[53]</sup>为了结合旋转操作和平移操作以增强对实体和关系间交互的建模能力, 将实体和关系表示在对偶

四元数空间中, 并采用对偶四元数乘法表示旋转和平移操作。打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \langle \mathbf{Q}_h \otimes \mathbf{W}_r, \mathbf{Q}_t \rangle \quad (39)$$

其中,  $\mathbf{Q}_h = \mathbf{a} + \epsilon \mathbf{b}$ ,  $\mathbf{W}_r = \mathbf{c} + \epsilon \mathbf{d}$  和  $\mathbf{Q}_t = \mathbf{e} + \epsilon \mathbf{f}$  分别代表头实体、关系和尾实体的对偶四元数向量表示,  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}, \mathbf{e}, \mathbf{f}$  均为四元数向量;  $\epsilon$  为对偶单元, 其满足  $\epsilon^2 = 0$ ;  $\otimes$  为对偶四元数乘法,  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$  表示两个对偶四元数  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{y}$  的内积。

为了取得与 DualE 类似的旋转加平移操作的效果, BiQUE 模型<sup>[54]</sup>采用了双四元数表示每个关系, 其中一个四元数用于与头实体表示进行线性相加来表示平移操作, 另一个四元数用于与平移操作后的嵌入表示采用哈密顿乘法表示旋转操作。BiQUE 的打分函数为:

$$E(h, r, t) = \langle (\mathbf{Q}_h + \mathbf{Q}_r^+) \otimes \mathbf{Q}_r^-, \mathbf{Q}_t \rangle \quad (40)$$

其中,  $\mathbf{Q}_h \in \mathbb{Q}^k$  和  $\mathbf{Q}_t \in \mathbb{Q}^k$  表示头、尾实体的四元数向量表示,  $\mathbf{Q}_r^+ \in \mathbb{Q}^k$  和  $\mathbf{Q}_r^- \in \mathbb{Q}^k$  分别为关系  $r$  用于平移和旋转操作的两个四元数表示。

DihEdral 模型<sup>[55]</sup>采用二面体群来表示关系, 由于二面体组中的元素是通过在二维对称多边形上的旋转和反射操作构造的, 且旋转元素的数量  $K$  决定了二面体绕中心旋转的最小角度  $2\pi/K$ , 因此具有离散化旋转操作的特性。该模型的打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = \sum_{l=0}^{L-1} \mathbf{h}^{(l)\top} \mathbf{R}^{(l)} \mathbf{t}^{(l)} \quad (41)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{2L}$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^{2L}$  为头、尾实体向量表示,  $\mathbf{h}^{(l)} \in \mathbb{R}^2$  和  $\mathbf{t}^{(l)} \in \mathbb{R}^2$  为头、尾实体向量表示的第  $l$  个分量,  $\mathbf{R}^{(l)} \in D_k$  为关系的第  $l$  个分量的二面体群矩阵表示。

CompoundE 模型<sup>[56]</sup>在 DualE 的基础上, 基于对偶四元数空间同时建立平移、旋转和伸缩操作, 其打分函数为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{T}_r \cdot \mathbf{R}_r \cdot \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{h} - \mathbf{t} \| \quad (42)$$

其中,  $\mathbf{T}_r, \mathbf{R}_r, \mathbf{S}_r$  分别代表关系  $r$  对应的平移、旋转和伸缩矩阵。

HA-RotatE 模型<sup>[57]</sup>在 RotatE 的基础上为每个关系定义了一个权重参数, 在旋转操作前先进行线性映射, 在建模多种关系模式的情况下, 同时借助权重参数的控制建模实体间的层次关系, 其打分函数为:

$$E(h, r, t) = \| \mathbf{W}_r \mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t} \| \quad (43)$$

其中,  $\mathbf{W}_r$  为关系  $r$  的权重参数。

基于改进关系感知映射的模型和基于旋转操作的模型都可以视为对实体在表示空间上的移动, 图 7 展示了几个典型模型的特点。同时, 表 2 列出了本节中 3 类建模多种关系模式的模型。

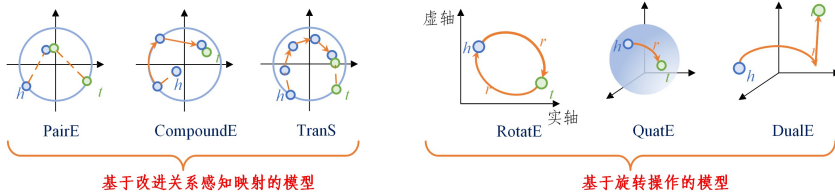


图 7 建模关系模式的模型示意图

Fig. 7 Diagram of models that modeling relation patterns

表 2 建模多种关系模式的模型总结

Table 2 Summary of models that modeling various relation patterns

模型	表示空间	打分函数	特点	优缺点	
基于改进张量分解的模型	Complex	复数向量空间	$Re(\mathbf{h}^T \text{diag}(\mathbf{r}) \bar{\mathbf{t}})$	复数取共轭参与三元组打分,同时建模对称关系和反对称关系	突破了传统张量分解模型的对称性,能够巧妙地建模对称和反对称关系,但是无法建模两个关系的组合模式
	HolE	实数向量空间	$\mathbf{r}^T (\mathbf{h} * \mathbf{t})$	头、尾实体向量间的循环相关运算,建模对称和反对称关系	
	Simple		$\mathbf{h}_h^T \text{diag}(\mathbf{r}) \mathbf{t}_t + \mathbf{t}_h^T \text{diag}(\mathbf{r}^{-1}) \mathbf{h}_t$	为每个实体同时学习其作为头实体和尾实体的嵌入表示,并且为每个关系构造一个对应的逆关系	
基于改进关系感知映射的模型	PairRE	实数向量空间	$\  \mathbf{h} \circ \mathbf{r}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{r}^t \ $	采用成对的关系向量表示来同时建模关系模式和关系的复杂映射特性	能够建模多种关系模式,但是由于需要增加额外的映射和平移等操作,导致相比基于改进张量分解的模型参数量较大
	TripleRE		$\  \mathbf{h} \circ \mathbf{r}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{r}^t + \mathbf{r}^m \ $	将关系表示为分别对头实体和尾实体的映射及平移3部分	
	TranS		$\  \mathbf{h} \circ \mathbf{t}^h - \mathbf{t} \circ \mathbf{r}^t + \mathbf{r}^h \circ \mathbf{h} + \mathbf{r}^t \circ \mathbf{t} \ $	对头、尾实体需要经过两次映射和3次平移操作	
基于旋转操作的模型	RotatE	复数向量空间	$\  \mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t} \ $	最早将头实体到尾实体的转换视为平面上的旋转操作	能够建模多种关系模式,但是由于将实体和关系表示在复数和四元数空间,导致相比采用实数向量空间参数量较大
	QuatE	四元数空间	$\mathbf{h} \otimes (\mathbf{r} /  \mathbf{r} ) \cdot \mathbf{t}$	实体和关系表示在四元数空间,实现在两个平面上的旋转操作	
	DualE	对偶四元数空间	$\langle \mathbf{Q}_h \otimes \mathbf{W}_h, \mathbf{Q}_t \rangle$	将实体和关系表示在对偶四元数空间中,同时建立旋转和平移操作	
	BiQUE	四元数空间	$\langle (\mathbf{Q}_h + \mathbf{Q}_r^+) \otimes \mathbf{Q}_r^{\times}, \mathbf{Q}_t \rangle$	采用两个四元数表示每个关系,分别用于旋转和平移操作	
	Dihedral	二面体群	$\sum_{l=0}^L \mathbf{h}^{(l)T} \mathbf{R}^{(l)} \mathbf{t}^{(l)}$	在二面体群上建立离散的旋转和反射操作	
	CompoundE	对偶四元数空间	$\  \mathbf{T}_r \cdot \mathbf{R}_r \cdot \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{h} - \mathbf{t} \ $	同时建立平移、旋转和伸缩操作	
	HA-RotatE	复数向量空间	$\  \mathbf{W}_r \mathbf{h} \circ \mathbf{r} - \mathbf{t} \ $	在旋转操作前先进线性映射,同时建模多种关系模式和层次关系	

## 5 建模实体间层次关系的模型

为了建模知识图谱中潜在的实体间层次关系,当前研究主要从采用额外辅助信息、双曲空间和极坐标系3个角度实现知识图谱表示学习。基于辅助信息的模型最早建模了实体间的层次关系,但是这类方法需要借助额外的层次化实体类型和聚类操作;基于双曲空间的模型考虑到实体间的层次关系形成树状结构的特点,通过适用于建模层次结构的双曲空间表示知识图谱中的实体和关系;基于极坐标系的模型通过充分利用极坐标系中模长和相角的概念,将同一层次的实体表示为具有相同模长而不同相角,将不同层次的实体表示为具有不同的模长,有效表示实体间的层次特性。

### 5.1 基于辅助信息的模型

HCE模型<sup>[58]</sup>利用知识图谱本体层中具有层次性的实体类型信息,首先基于预测实体上下文实体的任务同时学习实体和类型嵌入表示,进一步在学习一个实体的嵌入表示时引入该实体对应类型的祖先类别,使得如果一个类型嵌入表示靠近一个实体嵌入表示。那么该类型的祖先类型嵌入表示也与实体嵌入表示接近,因此可以将类型间的层次关系注入实体嵌入表示中。

HRS模型<sup>[59]</sup>主要考虑了关系间的层次性,分别对关系进行聚类得到高层关系,同时借鉴TransE模型计算每个关系关联的三元组中尾实体向量表示和头实体向量表示的差值,再进行聚类得到底层的子关系,原本的关系构成中间层,进而基于三层关系共同表示从头实体到尾实体的平移操作。其打分函数定义为:

$$E(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) = \| \mathbf{h} + \mathbf{r}_c + \mathbf{r} + \mathbf{r}_s - \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (44)$$

其中,  $\mathbf{r}_c$ ,  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{r}_s$  分别代表高层聚类关系向量表示、中层关系向量表示和底层子关系向量表示。

TKRL模型<sup>[60]</sup>通过层次类型映射矩阵学习每个实体不同层次的所有实体类型表示,从而将一个三元组转换为蕴含多个层次化实体类型表示之间的关联,其打分函数定义为:

$$E(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) = \| \mathbf{M}_h \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_t \mathbf{t} \|_{L_1/L_2} \quad (45)$$

其中,  $\mathbf{M}_h$  和  $\mathbf{M}_t$  分别为层次类型映射矩阵。TKRL设计了两种层次类型编码机制,第一种为循环层次编码,其设定一个实体首先被映射到最精确的低层实体类型表示空间中,再映射到较高层的实体类型表示空间中,以实现将一个实体从低层类型到高层类型逐步循环映射。循环层次编码的类型映射矩阵定义为:

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{M}_i^{(1)} \mathbf{M}_i^{(2)} \cdots \mathbf{M}_i^{(n)} \quad (46)$$

其中,  $n$  为对于一个实体类型在整个层次结构中的层数;  $\mathbf{M}_i^{(i)}$  表示第  $i$  层的类型映射矩阵,且第1层为最底层类型。第二种层次类型编码机制为加权层次编码,不同的权重可以反映类型的层次结构。加权层次编码的类型映射矩阵定义为:

$$\mathbf{M}_i = \beta_1 \mathbf{M}_i^{(1)} + \beta_2 \mathbf{M}_i^{(2)} + \cdots + \beta_n \mathbf{M}_i^{(n)} \quad (47)$$

其中,  $\beta_i$  为第  $i$  层类型的权重。为了增强类型间的层次性,考虑到高层类型表达一般化的抽象语义,低层类型表达精确的语义,设计了从低层类型到高层类型权重递减的策略:

$$\beta_i : \beta_{i+1} = (1 - \eta) : \eta, \sum_{i=1}^n \beta_i = 1 \quad (48)$$

其中,设置参数  $\eta$  的取值范围为  $\eta \in (0, 0.5)$ 。

### 5.2 基于双曲空间的模型

由于实体间的层次结构属于树状结构,而双曲空间可以被视为连续树形空间,因此能比欧氏空间更加有效地建模

实体间的层次关系。同时,知识图谱中高层实体通常蕴含抽象的语义,一般可以用低维嵌入表示,而低层实体蕴含个性化的语义,一般用高维嵌入表示。Poincare 模型<sup>[61]</sup>最早将知识图谱嵌入双曲空间来学习实体间的“上位”层次关系,其将知识图谱嵌入庞加莱球这一特殊的几何空间,距离球心越近的嵌入向量能够表示高层实体,距离球心越远的嵌入向量越能表示低层实体。由于 Poincare 模型只关注 WordNet 这类知识图谱中的“上位”关系,因此其打分函数设计为:

$$E(h, t) = \text{arcosh} \left( 1 + 2 \frac{\| \mathbf{h} - \mathbf{t} \|^2}{(1 - \| \mathbf{h} \|^2)(1 - \| \mathbf{t} \|^2)} \right) \quad (49)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathcal{B}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathcal{B}^k$  为头、尾实体在庞加莱球空间中的向量表示。

Poincare 模型仅针对头、尾实体间的“上位”关系这一类层次关系,因此打分函数仅体现为头尾实体间的距离。为了扩展到能够建模具有更丰富关系的多种层次结构, MuRP 模型<sup>[62]</sup>将三元组打分函数结合庞加莱球几何模型,设计了针对多关系的打分函数,表示为:

$$E(h, r, t) = -d_B(\mathbf{h}^{(r)}, \mathbf{t}^{(r)})^2 + b_h + b_t \\ = -d_B(\exp_0(\mathbf{R} \log_0(\mathbf{h})), \mathbf{t} \oplus_c \mathbf{r})^2 + b_h + b_t \quad (50)$$

其中,  $\mathbf{h} \in \mathcal{B}^k$  和  $\mathbf{t} \in \mathcal{B}^k$  为头、尾实体在庞加莱球空间中的双曲嵌入表示,  $\mathbf{R} \in \mathcal{B}^{k \times k}$  为关系  $r$  对应的对角矩阵,  $\mathbf{r} \in \mathcal{B}^k$  表示关系  $r$  对应的双曲平移向量,  $\mathbf{h}^{(r)} \in \mathcal{B}^k$  为头实体的双曲嵌入表示以莫比乌斯矩阵-向量乘法进行运算得到的与关系交互的头实体表示,  $\mathbf{t}^{(r)} \in \mathcal{B}^k$  为尾实体的双曲嵌入表示  $\mathbf{t}$  以  $h_r$  代表的莫比乌斯加法进行运算得到的与关系交互的尾实体表示。

MuRP 模型在固定曲率的双曲空间中表示实体和关系,导致其无法建模多种关系模式。ATTH 模型<sup>[63]</sup>借鉴 DihE-dral 模型中更有表现力的旋转和反射操作,并结合注意力机制调节旋转和反射操作的重要性,同时建模多种关系模式和实体间的层次关系。ATTH 模型的打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = -d_B(\mathbf{h}^{(r)}, \mathbf{t})^2 + b_h + b_t \quad (51)$$

$$\mathbf{h}^{(r)} = \text{Att}(\mathbf{h}_{\text{Rot}}, \mathbf{h}_{\text{Ref}}) \oplus_c \mathbf{r} \quad (52)$$

$$\text{Att}(\mathbf{h}_{\text{Rot}}, \mathbf{h}_{\text{Ref}}) = \text{exp}_0(\alpha^1 \mathbf{h}_{\text{Rot}} + \alpha^2 \mathbf{h}_{\text{Ref}}) \quad (53)$$

$$(\alpha^1, \alpha^2) = \text{softmax}(\alpha^1 \log_0(\mathbf{h}), \alpha^2 \log_0(\mathbf{t})) \quad (54)$$

其中,  $\mathbf{h}^{(r)} \in \mathcal{B}^k$  为头实体的双曲嵌入表示以旋转和反射操作后经过注意力机制加权得到的嵌入表示,  $\mathbf{h}_{\text{Rot}} \in \mathcal{B}^k$  是经过与关系相关的旋转运算后的头实体嵌入表示,  $\mathbf{h}_{\text{Ref}} \in \mathcal{B}^k$  是经过与关系对应的反射运算后的头实体嵌入表示,  $\alpha^1 \in \mathcal{B}^k$  和  $\alpha^2 \in \mathcal{B}^k$  分别表示与  $\mathbf{h}_{\text{Rot}}$  和  $\mathbf{h}_{\text{Ref}}$  相关的注意力权重参数, Att 表示注意力机制。

类似于 TransE 模型在基于转移操作的一系列模型中的地位,基于双曲空间的一系列模型都是在 MuRP 模型上进行的扩展。其中, HyperKA 模型<sup>[64]</sup>对实体双曲嵌入表示采用莫比乌斯加法代表的平移操作,之后用图神经网络(GNN)<sup>[65]</sup>聚合实体的邻域信息; MuRMP 模型<sup>[66]</sup>结合混合曲率模型与 GNN 解决 MuRP 模型在固定曲率的双曲空间中表示实体和关系的问题; UltraE 模型<sup>[67]</sup>结合双曲空间和流形空间构造了超双曲流形空间,以实现同时表示不同层次的关系和相同层次的关系。

### 5.3 基于极坐标系的模型

HAKE<sup>[68]</sup>是最早采用极坐标系进行知识图谱表示学习的模型。在极坐标系中,模长和相角表示在二维坐标系中的一个点,HAKE 在极坐标系中实现将头实体经过关系相关的运算转换为尾实体的过程,其中模长部分表示在固定角度下的伸缩,相角部分表示在固定模长下进行旋转。因此,模长可以建模不同层级的实体,相角可以建模同一层级的不同实体。HAKE 的打分函数定义为:

$$E(h, r, t) = d_{r,m}(\mathbf{h}_m, \mathbf{t}_m) + \lambda d_{r,p}(\mathbf{h}_p, \mathbf{t}_p) \quad (55)$$

$$d_{r,m}(\mathbf{h}_m, \mathbf{t}_m) = \| \mathbf{h}_m \circ \mathbf{r}_m - \mathbf{t}_m \|_{L_2} \quad (56)$$

$$d_{r,p}(\mathbf{h}_p, \mathbf{t}_p) = \| \sin((\mathbf{h}_p + \mathbf{r}_p - \mathbf{t}_p)/2) \|_{L_1} \quad (57)$$

其中,  $d_{r,m}(\mathbf{h}_m, \mathbf{t}_m)$  和  $d_{r,p}(\mathbf{h}_p, \mathbf{t}_p)$  分别表示对三元组关于模长和相角的打分,  $\lambda$  为平衡这两部分分值的权重参数;  $\mathbf{h}_m \in \mathbb{R}^k$  和  $\mathbf{t}_m \in \mathbb{R}^k$  分别是  $\mathbf{h}$  和  $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$  为头、尾实体模长向量表示,  $\mathbf{r}_m \in \mathbb{R}_+^k$  表示元素均为正数的模长向量表示;  $\mathbf{h} \in [0, 2\pi)^k$ ,  $\mathbf{r} \in [0, 2\pi)^k$ ,  $\mathbf{t} \in [0, 2\pi)^k$  分别是头实体、关系和尾实体的相角向量表示。

特别地,基于 HAKE 模型的核心思想,语义层次越高的实体模长越短,层次越低的实体模长越长,在模型训练过程中关系的模长表示趋于以下约束条件:(1)头实体比尾实体具有更高语义层次:  $[r_m]_i > 1$ ; (2)头、尾实体具有相同语义层次:  $[r_m]_i = 1$ ; (3)头实体比尾实体具有更低语义层次:  $[r_m]_i < 1$ 。

H2E 模型<sup>[69]</sup>充分结合双曲空间和极坐标系对于建模层次关系的有效性,通过在双曲空间中使用模长与相角的概念学习实体的双曲极坐标嵌入表示。类似地, HBE 模型<sup>[70]</sup>在经过扩展的庞加莱球空间中采用了莫比乌斯乘法和莫比乌斯加法,分别实现在极坐标系中针对相角旋转和针对模长伸缩操作,以充分建模实体间的层次关系。

图 8 展示了能够建模实体间层次关系的几类模型。其中,基于辅助信息的 TKRL 模型可以让实体从底层类型开始进行不同层次类型的映射;基于双曲空间的 MuRP 模型可以在庞加莱球空间中进行映射和平移操作;基于极坐标系的 HAKE 模型将关系表示为模长  $\mathbf{r}_m$  和相角  $\mathbf{r}_p$ ,通过改变头实体的模长和相角转换到尾实体。

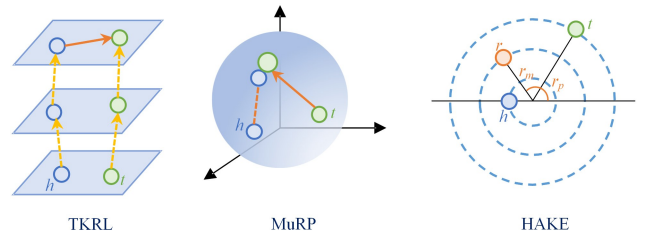


图 8 建模实体间层次关系的模型示意图

Fig. 8 Diagram of models that modeling hierarchical relations between entities

同时,为了便于对比几类建模实体间层次关系的模型,表 3 对这些模型进行了梳理,特别是对基于辅助信息的模型、基于双曲空间的模型和基于极坐标系的模型的特点及其优缺点进行了梳理和对比总结。

表3 建模实体间层次关系的模型总结

Table 3 Summary of models that modeling hierarchical relations between entities

模型	表示空间	打分函数	特点	优缺点
基于辅助信息的模型	HRS	$\  \mathbf{h} + \mathbf{r}_c + \mathbf{r} + \mathbf{r}_s - \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$	基于三层关系共同表示从头实体到尾实体的平移操作	借助和层次关系有关的辅助信息直接建立实体间的层次关系,但是完全依赖于辅助信息的准确性和有效性,无法适用于缺乏辅助信息的知识图谱
	TKRL	$\  \mathbf{M}_h \mathbf{h} + \mathbf{r} - \mathbf{M}_t \mathbf{t} \ _{L_1/L_2}$ $\mathbf{M}_c = \mathbf{M}_{c(1)} \mathbf{M}_{c(2)} \cdots \mathbf{M}_{c(n)}$	通过层次类型映射矩阵学习每个实体不同层次的所有实体类型表示	
基于双曲空间的模型	Poincare	$\operatorname{arcosh} \left( 1 + 2 \frac{\  \mathbf{h} - \mathbf{t} \ ^2}{(1 - \  \mathbf{h} \ ^2)(1 - \  \mathbf{t} \ ^2)} \right)$	采用庞加莱球进行表示,距离球心越近表示高层实体,但是仅针对“上位”这一种层次关系	通过双曲空间天然的连续树形结构特性直接建立实体间的层次关系,但是层次特性不如其他两类方法显著
	MuRP	$\  \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}^h - \mathbf{t} \cdot \mathbf{r}^t + \mathbf{r}^m \ $	将三元组打分函数结合庞加莱球几何模型,建模多关系表示的不同层次结构	
	ATTH	$-d_B(\mathbf{h}^{(r)}, \mathbf{t})^2 + b_h + b_t$	在双曲空间中建立旋转和反射操作,同时建模多种关系模式和实体间的层次关系	
基于极坐标系的模型	HAKE	$d_{r,m}(\mathbf{h}_m, \mathbf{t}_m) + \lambda d_{r,p}(\mathbf{h}_p, \mathbf{t}_p)$	在极坐标系中模长可以建模不同层级的实体,相角可以建模同一层级的实体	极坐标系中的模长可以表示层次特性,但是减弱了对关系模式的建模能力
	H2E	$d_B(\mathbf{h}_m, \mathbf{t}_m) + \lambda d_B(\mathbf{h}_p, \mathbf{t}_p)$	在双曲空间中使用模长与相角的概念学习实体的双曲极坐标嵌入表示	
	HBE	$\alpha \  2 \tanh^{-1}(\mathbf{R} \otimes \mathbf{h}) \oplus_c - (\mathbf{r} \oplus_c \mathbf{r}) \  + \beta \  (\theta_h + \theta_r - \theta_t) \bmod 2\pi \ $	在经过扩展的庞加莱球空间中实现在极坐标系中的相角旋转和模长伸缩操作	

## 6 未来研究方向

当前,知识图谱表示学习领域针对建模关系的复杂映射特性、多种关系模式和实体间层次关系已有大量的研究工作,但是更加有效地同时建模这几类关系特性对于提高知识图谱表示学习模型及其在知识图谱补全等下游任务中的性能仍然十分关键。为此,本章从融合多模态信息、结合逻辑规则和面向动态知识图谱的几个角度,讨论了几个有价值的未来研究方向。

### 6.1 融合多模态信息的知识图谱表示学习

已有的知识图谱表示学习模型主要从嵌入表示空间、打分函数和实体与关系间编码方式的角度进行设计,这些模型均依赖于提取知识图谱的结构特征,能够有效解决稠密的知识图谱建模几种关系特性的问题。然而,针对稀疏的知识图谱或长尾分布的实体和关系,当前提出的这些方法难以从有限的图结构数据中学习到建模几类关系特性的能力。因此,结合实体和关系对应的多模态信息能够直接有效地辅助建立关系的复杂映射特性和层次关系。

例如一个1-N关系关联的多个尾实体,其中每个尾实体的文本描述不同,但是每个尾实体与该关系相关的文本内容接近,因此在特定于一个1-N关系时,可以从多个尾实体的文本描述中提取相近的特征表示,以建模关系的复杂映射特性。同时,对于一个三元组(汽车,部件,轮胎),可以从实体“汽车”和“轮胎”的图像中提取视觉特征,因为这两个实体的视觉特征天然地存在层次特性。

当前已有的DKRL<sup>[71]</sup>和KG-BERT<sup>[72]</sup>利用了实体相关的文本描述信息,而IKRL<sup>[73]</sup>和RSME<sup>[74]</sup>提取实体的图像特征来有效补充实体表示,实现更准确的实体和关系表示,在知识图谱非常稀疏的情况下有助于改善知识图谱表示学习的性能,未来可以借鉴这些方法讨论对于建模关系特性的效果。

### 6.2 规则增强的关系模式建模

已有的知识图谱表示学习方法主要从三元组中自动学习隐含的多种关系模式,然而对于稀疏的知识图谱,这种方式

难以在模型训练过程中使得关系嵌入表示满足每种关系模式对应的约束条件。然而,值得关注的是,由于大多数知识图谱都具有本体层,其中通常会定义一些公理(或称为规则),同时可以利用面向知识图谱的规则学习算法从知识图谱中自动挖掘一定的规则,这些规则主要表达了关系间的逻辑关联,能够直接反映关系模式。RPJE模型<sup>[75]</sup>和EngineKG模型<sup>[76]</sup>能够从知识图谱中挖掘出表达逆反和组合关系模式的规则,同时可以将规则蕴含的逻辑信息注入实体和关系嵌入表示中,以增强对这两类关系模式的建模能力。进一步,可以研究自动挖掘表达更多关系模式的规则,进而利用规则来增强实体和关系的嵌入表示,提高对稀疏知识图谱的关系模式的建模能力。

### 6.3 针对动态知识图谱的关系特性建模

当前建模关系特性的知识图谱表示学习研究主要针对静态知识图谱,然而,现实中的大量数据具有动态特性,而现有研究很少对动态知识图谱的关系特性进行建模。由于动态知识图谱通常会新增一些未见的实体或关系,这类情况下与新增实体或关系关联的三元组数量非常稀少,因此难以直接从有限的三元组中学习几类关系特性。GANA模型<sup>[77]</sup>将TransH的思想结合元学习机制,一定程度上解决了适用于小样本知识图谱表示学习的复杂关系建模问题。此外,实体相关的语义信息发生变化,实体间的层次关系不固定,导致对动态知识图谱中层次关系的建模更具挑战。虽然DyERNIE模型<sup>[78]</sup>和HERCULES模型<sup>[79]</sup>分别改进了MuRP和ATTH模型,将动态知识图谱嵌入双曲空间中,一定程度上解决了层次关系的建模问题,然而,其对时间信息缺乏更有效的表示方式,建模关系特性的能力仍然有限。

**结束语** 知识图谱中的关系体现了很强的语义信息,针对关系特性的建模对于知识图谱表示学习的效果十分关键。本文首先介绍了知识图谱表示学习的概念,并论述了关系的复杂映射特性、多种关系模式和实体间层次关系这几类关系特性。然后,面向建模关系的复杂映射特性,梳理了基于关系感知映射的模型、基于特定表示空间的模型、基于张量分解的模型和基于神经网络的模型;面向建模多种关系模式,介绍了

基于改进张量分解的模型、基于改进关系感知映射的模型和基于旋转操作的模型;面向建模实体间的层次关系,总结了基于辅助信息的模型、基于双曲空间的模型和基于极坐标系的模型。此外,本文对当前知识图谱表示学习技术建模关系特性的几个未来研究方向进行了展望和讨论。

## 参 考 文 献

- [1] LIU Z Y, SUN M S, LIN Y K, et al. Research progress on knowledge representation learning[J]. *Journal of Computer Research and Development*, 2016, 53(2): 247-261.
- [2] ZHANG T C, TIAN X, SUN X H, et al. A comprehensive review of knowledge graph embedding techniques[J]. *Journal of Software*, 2023, 34(1): 277-311.
- [3] GE X, WANG Y C, WANG B, et al. Knowledge graph embedding: an overview[J]. *arXiv:2309.12501*, 2023.
- [4] ZHANG N, DENG S, SUN Z, et al. Long-tail relation extraction via knowledge graph embeddings and graph convolution networks[C]// *Proceedings of the 17th Annual Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics*. 2019: 3016-3025.
- [5] WANG Z, YANG J, YE X. Knowledge graph alignment with entity-pair embedding[C]// *Proceedings of the 2020 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*. 2020: 1672-1680.
- [6] LI G, SUN Z, HU W, et al. Position-aware relational transformer for knowledge graph embedding [J/OL]. <https://ieeexplore.ieee.org/document/10092525>.
- [7] LIN B Y, CHEN X, CHEN J, et al. KagNet: Knowledge aware graph networks for commonsense reasoning[C]// *Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP)*. 2019: 2829-2839.
- [8] WANG Y, LI A, ZHANG J, et al. Enhanced knowledge graph embedding for multi-task recommendation via integrating attribute information and high-order connectivity[C]// *Proceedings of the 10th International Joint Conference on Knowledge Graphs*. 2022: 140-144.
- [9] PAN S, LUO L. Unifying large language models and knowledge graphs: A roadmap[J]. *arXiv:2306.08302*, 2023.
- [10] YAN Q, FAN J, LI M, et al. A survey on knowledge graph embedding[C]// *2022 7th IEEE International Conference on Data Science in Cyberspace (DSC)*. 2022: 576-583.
- [11] CAO J, FANG J, MENG Z, et al. Knowledge graph embedding: A survey from the perspective of representation spaces[J]. *arXiv:2211.03536*, 2022.
- [12] SHEN Q, ZHANG H, XU Y, et al. Comprehensive survey of loss functions in knowledge graph embedding models[J]. *Computer Science*, 2023, 50(4): 149-158.
- [13] LI Z, ZHAO Y, ZHANG Y. Survey of knowledge graph reasoning based on representation learning[J]. *Computer Science*, 2023, 50(3): 94-113.
- [14] YU M B, DU J Q, LUO J G, et al. Research progress of knowledge graph completion based on knowledge representation learning[J]. *Computer Engineering and Applications*, 2023, 59(18): 59-73.
- [15] DU X, LIU M, SHEN L, et al. A survey of knowledge graph representation learning methods for link prediction[J]. *Journal of Software*, 2024, 35(1): 87-117.
- [16] NGUYEN D Q. A survey of embedding models of entities and relationships for knowledge graph completion[C]// *Proceedings of the Graph-based Methods for Natural Language Processing (TextGraphs)*. 2020: 1-14.
- [17] WANG Q, MAO Z, WANG B, et al. Knowledge graph embedding: A survey of approaches and applications[J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2017, 29(12): 2724-2343.
- [18] DAI Y, WANG S, XIONG N, et al. A survey on knowledge graph embedding: Approaches, applications, and benchmarks [J]. *Electronics*, 2020, 9(5): 750.
- [19] GESESE G A, BISWAS R, SACK H. A comprehensive survey of knowledge graph embeddings with literals: Techniques and applications[C]// *Workshop at ESWC 2020 on Deep Learning for Knowledge Graph*. 2019.
- [20] WANG M, QIU L, WANG X. A survey on knowledge graph embeddings for link prediction[J]. *Symmetry*, 2021, 13(3): 485.
- [21] WANG H, QI G, CHEN H. Knowledge graph methods, practices, and applications[M]. *Electronic Industry Press*, 2019.
- [22] JI S, PAN S, CAMBRIA E, et al. A survey on knowledge graphs: Representation, acquisition, and applications [J]. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2022, 33(2): 494-514.
- [23] ALAM M M, R R M, NAYYERI M, et al. Language model guided knowledge graph embeddings [J]. *IEEE Access*, 2022, 10: 76008-76020.
- [24] BORDES A, USUNIER N, GARCIA D, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data[C]// *Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems*. 2013: 2787-2795.
- [25] WANG Z, ZHANG J, FENG J, et al. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes[C]// *Proceedings of the 28th AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2014: 1112-1119.
- [26] LIN Y, LIU Z, SUN M, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion[C]// *Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2015: 2181-2187.
- [27] NGUYEN D Q, SIRTS K, QU L Z, et al. STransE: A novel embedding model of entities and relationships in knowledge bases [C]// *Proceedings of the 2016 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics (NAACL)*. 2016: 460-466.
- [28] JI G L, HE S Z, XU L H, 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*. Beijing: Association for Computational Linguistics (ACL), 2015: 687-696.
- [29] JI G L, LIU K, HE S Z, et al. Knowledge graph completion with

- adaptive sparse transfer matrix[C]// Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence(AAID). 2016:985-991.
- [30] FENG J, HUANG M L, WANG M D, et al. Knowledge graph embedding by flexible translation[C]// Proceedings of the 15th International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning(KR). 2016:557-560.
- [31] XIAO H, HUANG M L, HAO Y, et al. TransA: An adaptive approach for knowledge graph embedding[J]. arXiv: 1509.05490, 2015.
- [32] 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(PACLIC). 2014:328-337.
- [33] HE S, LIU K, JI G, et al. Learning to represent knowledge graphs with Gaussian embedding[C]// Proceedings of the 24th ACM International Conference on Information and Knowledge Management. 2015:623-632.
- [34] XIAO H, HUANG M, ZHU X. From one point to a manifold: Knowledge graph embedding for precise link prediction[C]// Proceedings of the 25th International Joint Conference on Artificial Intelligence. 2016:1315-1321.
- [35] EBISU T, ICHISE R. TorusE: Knowledge graph embedding on a lie group[C]// Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence(AAID). 2018:1819-1826.
- [36] NICKEL M, TRESP V, KRIEGEL H P. A three-way model for collective learning on multi-relational data[C]// Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning. 2011: 809-816.
- [37] YANG B, YIH W T, HE X, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases[C]// Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations. 2015.
- [38] BALAZEVIC I, ALLEN C, HOSPEDALES T. TuckER: Tensor factorization for knowledge graph completion[C]// Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing(EMNLP). 2019:5185-5194.
- [39] BORDES A, GLOROT X, WESTON J, et al. A semantic matching energy function for learning with multi-relational data[J]. *Machine Learning*, 2014, 94(2): 233-259.
- [40] SOCHER R, CHEN D, MANNING C D, et al. Reasoning with neural tensor networks for knowledge base completion[C]// Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems. 2013:926-934.
- [41] DETTMERS T, MINERVINI P, STENETORP P. Convolutional 2D knowledge graph embeddings[C]// Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2018: 1811-1818.
- [42] NGUYEN D Q, NGUYEN T D, NGUYEN D Q, et al. A novel embedding model for knowledge base completion based on convolutional neural network[C]// Proceedings of the 16th Annual Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics. 2018:327-333.
- [43] NGUYEN D Q, VU T, NGUYEN T D, 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(NAAACL). 2019:2180-2189.
- [44] VASHISHTH S, SANYAL S, NITIN V, et al. InteractE: Improving convolution-based knowledge graph embeddings by increasing feature interactions[C]// Proceedings of the 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2020:3009-3016.
- [45] TROUILLON T, WELBL J, RIEDEL S, et al. Complex embeddings for simple link prediction[C]// Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning. 2016:2071-2080.
- [46] NICKEL M, ROSASCO L, POGGIO T. Holographic embeddings of knowledge graphs[C]// Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2016:1955-1961.
- [47] KAZEMI S M, POOLE D. Simple embedding for link prediction in knowledge graphs[C]// Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems. 2018: 4289-4300.
- [48] CHAO L, HE J, WANG T, et al. Pairre: Knowledge graph embeddings via paired relation vectors[C]// Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and International Joint Conference on Natural Language Processing. 2021: 4360-4369.
- [49] YU L, LUO Z, LIU H, et al. Triplere: Knowledge graph embeddings via tripled relation vectors[J]. arXiv:2209.08271, 2022.
- [50] ZHANG X, YANG Q, XU D. Trans: Transition-based knowledge graph embedding with synthetic relation representation[J]. arXiv:2204.08301, 2022.
- [51] SUN Z, DENG Z H, NIE J Y, et al. RotatE: Knowledge graph embedding by relational rotation in complex space[C]// Proceedings of the 7th International Conference on Learning Representations. 2019:1-18.
- [52] ZHANG S, TAY Y, YAO L, et al. Quaternion knowledge graph embedding[C]// Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. 2019: 2731-2741.
- [53] CAO Z, XU Q, YANG Z, et al. Dual quaternion knowledge graph Embeddings[C]// Proceedings of the 35th AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2021:6894-6902.
- [54] GUO J, KOK S. Bique: Biquaternionic embeddings of knowledge graphs[C]// Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2021:8338-8351.
- [55] XU C, LI R. Relation embedding with dihedral group in knowledge graph[C]// Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics. 2019:263-272.
- [56] GE X, WANG Y C, WANG B, et al. CompoundE: Knowledge graph embedding with translation, rotation and scaling compound operations[J]. arXiv:2207.05324, 2022.
- [57] WANG S, FU K, SUN X, et al. Hierarchical-aware relation rotational knowledge graph embedding for link prediction[J]. *Neurocomputing*, 2021, 458: 259-270.
- [58] LI Y, ZHENG R, TIAN T, et al. Joint embedding of hierarchical categories and entities for concept categorization and dataless classification[C]// COLING. 2016:2678-2688.

- [59] ZHANG Z, ZHUANG F, QU M, et al. Knowledge graph embedding with hierarchical relation structure [C] // Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2018:3198-3207.
- [60] XIE R, LIU Z, SUN M. Representation learning of knowledge graphs with hierarchical types [C] // Proceedings of the 25th International Joint Conference on Artificial Intelligence. 2016: 2965-2971.
- [61] NICKEL M, KIELA D. Poincare embeddings for learning hierarchical representations [C] // Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS). 2017:6341-6350.
- [62] BALAŽEVIĆ I, ALLEN C, HOSPEDALES T. Multi-relational Poincare graph embeddings [C] // Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems. 2019:4463-4473.
- [63] CHAMI I, WOLF A, JUAN D C, et al. Low-dimensional hyperbolic knowledge graph embeddings [J]. arXiv: 2005. 00545, 2020.
- [64] SUN Z, CHEN M, HU W, et al. Knowledge association with hyperbolic knowledge graph embeddings [C] // Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2020: 5704-5716.
- [65] BRUNA J, ZAREMBA W, SZLAM A, et al. Spectral networks and locally connected networks on graphs [C] // Proceedings of the 2nd International Conference on Learning Representations. 2014.
- [66] WANG S, WEI X, NOGUEIRA DOS SANTOS C N, et al. Mixed-curvature multi-relational graph neural network for knowledge graph completion [C] // International Conference on World Wide Web. 2021:1761-1771.
- [67] XIONG B, ZHU S, NAYYERI M, et al. Ultrahyperbolic knowledge graph embeddings [J]. arXiv:2206. 00449, 2022.
- [68] ZHANG Z, CAI J, ZHANG Y, et al. Learning hierarchy-aware knowledge graph embeddings for link prediction [C] // AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2020:3065-3072.
- [69] WANG S, WEI X, DOS SANTOS C N, et al. Knowledge graph representation via hierarchical hyperbolic neural graph embedding [C] // IEEE International Conference on Big Data. 2021: 540-549.
- [70] PAN Z, WANG P. Hyperbolic hierarchy-aware knowledge graph embedding for link prediction [C] // Findings of Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2021:2941-2948.
- [71] XIE R, LIU Z, JIA J, et al. Representation learning of knowledge graphs with entity descriptions [C] // Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2016:2659-2665.
- [72] YAO L, MAO C, LUO Y. KG-BERT: BERT for knowledge graph completion [J]. arXiv:1909. 03193, 2019.
- [73] XIE R, LIU Z, LUAN H, et al. Image-embodied knowledge representation learning [C] // Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence. 2017:3140-3146.
- [74] WANG M, WANG S, YANG H, et al. Is visual context really helpful for knowledge graph? A representation learning perspective [C] // Proceedings of the 29th ACM International Conference on Multimedia. 2021:2735-2743.
- [75] NIU G, ZHANG Y, LI B, et al. Rule-Guided Compositional Representation Learning on Knowledge Graphs [C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2020: 2950-2958.
- [76] NIU G, LI B, ZHANG Y, et al. Perform like an Engine: A Closed-Loop Neural-Symbolic Learning Framework for Knowledge Graph Inference [C] // Proceedings of the 29th International Conference on Computational Linguistics. 2022: 1391-1400.
- [77] NIU G, LI Y, TANG C, et al. Relational Learning with Gated and Attentive Neighbor Aggregator for Few-Shot Knowledge Graph Completion [C] // Proceedings of the 44th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval. 2021:213-222.
- [78] HAN Z, CHEN P, MA Y, et al. Dyernie: Dynamic evolution of Riemannian manifold embeddings for temporal knowledge graph completion [C] // Proceedings of the 2020 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2020:7301-7316.
- [79] LING S, NGUYEN K, ROUX-LANGLAIS A, et al. A lattice-based group signature scheme with verifier-local revocation [J]. Theoretical Computer Science, 2018, 730(19): 1-20.



**NIU Guanglin**, born in 1993, Ph.D, assistant professor, is a member of CCF (No. N8283M). His main research interests include knowledge graph and computer vision.

(责任编辑:何杨)