

融合多视图对比学习的知识图谱补全算法

乔梓峰, 秦宏超, 胡晶晶, 李荣华⁺, 王国仁

北京理工大学 计算机学院, 北京 100081

+ 通信作者 E-mail: lironghuabit@126.com

摘要:知识图谱补全是基于知识图谱中已有的实体和关系,推理新的三元组的过程。现有的方法通常使用编码器-解码器框架,在编码器中使用图卷积神经网络将三元组中的实体和关系编码为嵌入向量,在解码器中根据实体关系的嵌入计算各个尾实体的评分,评分最高的尾实体作为推理结果。解码器部分都是独立地对三元组进行推理,很少考虑图级别的嵌入信息。因此提出了融合对比学习的图谱补全算法,在模型中加入了多视图对比学习,对图级别的嵌入信息进行了约束。模型中多个视图的互相对比为三元组关系构造了不同的分布空间,不同关系分布互相拟合,更适合补全任务的学习。对比学习对实体和子图的嵌入向量的约束,增强了模型的补全效果。在两个基准数据集上进行了实验,结果表明,在数据集FB15k-237中,MRR比方法A2N提高了12.6%,比InteractE提高了0.8%。在数据集WN18RR上,MRR比A2N提高了7.3%,比InteractE提高了4.3%。实验结果表明,该方法优于已有补全算法。

关键词:知识图谱;链接预测;对比学习;编码器;解码器

文献标志码:A **中图分类号:**TP391

Knowledge Graph Completion Algorithm with Multi-view Contrastive Learning

QIAO Zifeng, QIN Hongchao, HU Jingjing, LI Ronghua⁺, WANG Guoren

School of Computer Science & Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract: Knowledge graph completion is a process of reasoning new triples based on existing entities and relations in knowledge graph. The existing methods usually use the encoder-decoder framework. Encoder uses graph convolutional neural network to get the embeddings of entities and relations. Decoder calculates the score of each tail entity according to the embeddings of the entities and relations. The tail entity with the highest score is the inference result. Decoder inferences triples independently, without consideration of graph information. Therefore, this paper proposes a graph completion algorithm based on contrastive learning. This paper adds a multi-view contrastive learning framework into the model to constrain the embedded information at graph level. The comparison of multiple views in the model constructs different distribution spaces for relations. Different distributions of relations fit each other, which is more suitable for completion tasks. Contrastive learning constraints the embedding vectors of entity and subgraph and enhances performance of the task. Experiments are carried out on two datasets. The results show that MRR is improved by 12.6% over method A2N and 0.8% over InteractE on FB15k-237 dataset, and 7.3% over A2N and 4.3% over InteractE on WN18RR dataset. Experimental results demonstrate that this model outperforms other completion methods.

Key words: knowledge graph; link prediction; contrastive learning; encoder; decoder

基金项目:国家重点研发计划(2020AAA0108503)。

This work was supported by the National Key Research and Development Program of China (2020AAA0108503).

收稿日期:2023-01-11 **修回日期:**2023-03-22

知识图谱(knowledge graph)是表示实体间关系的语义网络,由三元组(头实体,关系,尾实体)组成。知识图谱可以建模、识别、推断事物概念间的关系,被广泛应用于各个领域,如搜索引擎、智能问答、金融风控等领域,已经成为人工智能的核心技术之一。然而,人工构建或者表示学习所得到的知识图谱通常是不完整的,有很多没有被挖掘的隐藏信息,知识图谱补全的目的即是根据已有的三元组补全缺失部分,预测新的三元组。

早期的知识图谱的补全通常基于逻辑规则^[1-4]来进行,但是推理性能较差,对背景知识的依赖程度较高,因此不适用于大规模的知识图谱。现在常用的推理方法一般基于向量^[5-14]来进行,将图谱中的实体和关系表示为向量,通过评估三元组的合理性来进行推理。具体方法包括基于分布式表示的推理^[5-8]、基于神经网络的推理^[9-11]、基于图卷积神经网络的推理^[12-14]。

目前,知识图谱的补全一般基于编码器-解码器(encoder-decoder)框架^[12],编码器使用基于图卷积神经网络(graph convolutional neural network, GCN)的模型训练实体和关系嵌入,解码器使用分布式表示或者神经网络模型对三元组打分。算法只在解码器中对推理质量进行约束,是在三元组的级别上进行,缺少对图谱的图结构的约束。本文引入多视图对比学习^[15],在子图上进行约束,增强嵌入质量。多视图的引入可以增强模型的推理能力,视图的来源是数据增强,通过基于原始图谱构造不同的增强视图,每个视图上的关系处于不同的分布空间。在对比学习过程中,最大化两个视图的互信息,两个分布互相拟合,使得各个视图的独有三元组对最终嵌入结果的影响趋向一致。多视图对比学习增强了模型对实体和关系信息的语义信息的表达能力,最终提高了模型的推理能力。本文主要贡献如下:

(1)提出一种多视图对比图谱补全模型MVCL(multi-view contrastive learning model),通过多视图对比拟合关系分布,增强了模型的嵌入质量。

(2)在子图级别上对模型进行约束,使邻域实体互相靠拢,增强了邻域内实体间联系。

(3)在FB15k-237和WN18RR两个数据集上进行实验,结果表明MVCL优于主流的关系推理模型。

1 相关工作

基于分布式表示的推理方法将三元组的头尾实

体和关系表示为嵌入向量,设计打分函数衡量三元组的真实性。模型寻找映射函数,挖掘实体和关系之间的隐含关系。主要有TransE(translating embedding)^[5]、RESCAL^[6]、DistMult(bilinear diagonal model)^[7]、ComplEx(complex embeddings)^[8]等。TransE^[5]是基于转移距离模型的推理算法,将关系视为头实体向量到尾实体向量的转移向量,通过最小化转移结果和尾实体的嵌入向量距离来学习实体和关系的表示。RESCAL^[6]是双线性模型的代表,主要思想是张量分解,将图谱中节点和关系的连接建模为三维张量,使用向量表示实体,使用矩阵表示关系,将三维张量分解为实体向量和关系矩阵之间的乘积,学习实体和关系的嵌入。DistMult^[7]将RESCAL的关系矩阵限定为对角矩阵,降低了模型的复杂程度,但是丢失了对非对称关系的建模能力。ComplEx^[8]对DistMult进行扩展,将嵌入扩展到复数空间,通过复数点积计算三元组评分,对非对称关系的处理能力更强,提高模型的表达能力。

基于分布式的推理方法使用浅层的模型,计算简单,参数较少,训练速度快。但是抓取到的深层信息较少,只能通过增加维度获取更多特征。基于深度学习的方法能够更好地计算实体和关系之间的交互信息,增强了模型的表达能力,卷积神经网络是关系推理中的常用模型,主要有ConvE(convolutional 2D knowledge graph embeddings)^[9]、ConvKB(knowledge base completion based on convolutional neural network)^[10]、InteractE(improving embeddings by increasing feature interactions)^[11]等。ConvE^[9]是第一个使用卷积神经网络完成图谱补全任务的模型,使用多层2D网络计算实体和关系的交互结果,得到最终的推理得分。ConvKB^[10]为嵌入向量的相同维度建模,增强了信息挖掘能力。InteractE^[11]提出了特征置换、特征重塑、循环卷积三种特征交互方式,解决了ConvE交互数量有限的问题,提高模型的表达能力。

基于神经网络的模型主要处理了知识图谱的语义信息,即三元组的头尾实体和关系,没有处理图结构中的隐含信息。图卷积神经网络解决了这个缺陷,在消息传递的过程中考虑了图的结构信息,逐渐成为主流的研究方案。基于图卷积神经网络的模型采用编码器-解码器架构,编码器中使用GCN模型计算实体和关系的嵌入,解码器中基于嵌入进行评分,可以使用TransE^[5]、DistMult^[7]、ConvE^[9]等模型。典型的编码器有RGCN(relational graph convolutional net-

work)^[12]、KBGAT(knowledge base graph attention networks)^[13]、CompGCN(composition-based graph convolutional networks)^[14]等。RGCN^[12]使用图卷积神经网络对实体和关系进行建模,实体聚合邻居信息更新自身嵌入,并根据不同关系类型进行线性转换。KBGAT^[13]使用图注意力网络捕捉多跳邻居的信息,为不同的连接赋予不同的注意力权重。CompGCN^[14]在图谱中添加反向边,同时学习节点和边的嵌入,并使用基向量的加权来表示所有关系,减少了模型的参数。

对比学习^[15]是无监督学习的一种,在无数据标签的情况下,通过对比学习同类实例之间的相同特征,削弱不同实例之间的相似程度。对比学习通过设置成对的正样本和负样本,学习一个编码器,使正样本趋向一致,正样本和负样本间的差别变大,得到样本的最终嵌入向量,用于下游任务。对比学习常用于无标签的无监督学习任务,在图表示学习中,对比学习已经被广泛应用。DGI(deep graph infomax)模型^[16]最大化节点表示和图表示的互信息,用于学习节点的向量表示。GraphCL(graph contrastive learning)^[17]对图进行了增强,在两个增强图之间进行对比,并验证了不同增强方法的效果。Mvgrl^[18]通过图扩散生成新的视图,在一个视图的节点嵌入和另一个视图的图级别嵌入进行对比,实现互信息最大化。

对比学习可以灵活地设置实验方案,并且易于利用图的结构信息。因此本文通过对比学习对编码器进行约束,增强嵌入质量。

2 本文方法

2.1 基本定义

知识图谱定义为有向图 $G=(V,E)$ 。 V 和 E 分别表示图谱的实体和关系的集合。实体和关系的连接表示为三元组 (h,r,t) , h 为头实体, r 为关系, t 为尾实体。知识图谱补全的目的是预测头实体或者尾实体。即在给定 (h,r) 的情况下推断 t , 或者给定 (r,t) 的条件下推断 h 。

知识图谱补全的基本框架是编码器-解码器框架,结构如图1中椭圆虚线框所示。编码器的输入是知识图谱,即三元组的集合。编码器将三元组的实体和关系编码为低维向量,作为后续解码器的输入。简单的模型如TransE、DistMult等使用随机初始化的向量作为编码结果,复杂的编码器如RGCN、CompGCN等在此基础上使用图卷积神经网络进行编码。解码器使用编码器得到的向量作为输入,根据头实体、关系的嵌入枚举每个尾实体,计算评分。评分最高的尾实体作为推理结果。

2.2 模型框架

本文提出的MVCL模型使用对比学习,结构如图1所示。

对比学习模块:图1椭圆框外所示。对比学习模块是作为推理模块的补充,增强对模型的约束。在原始图谱的基础上,采用图谱增强,得到两个增强图 G_1 和 G_2 , 然后对 G_1 和 G_2 使用相同的编码器进行编码,编码得到实体、关系的嵌入向量 h 、 r , 然后对每

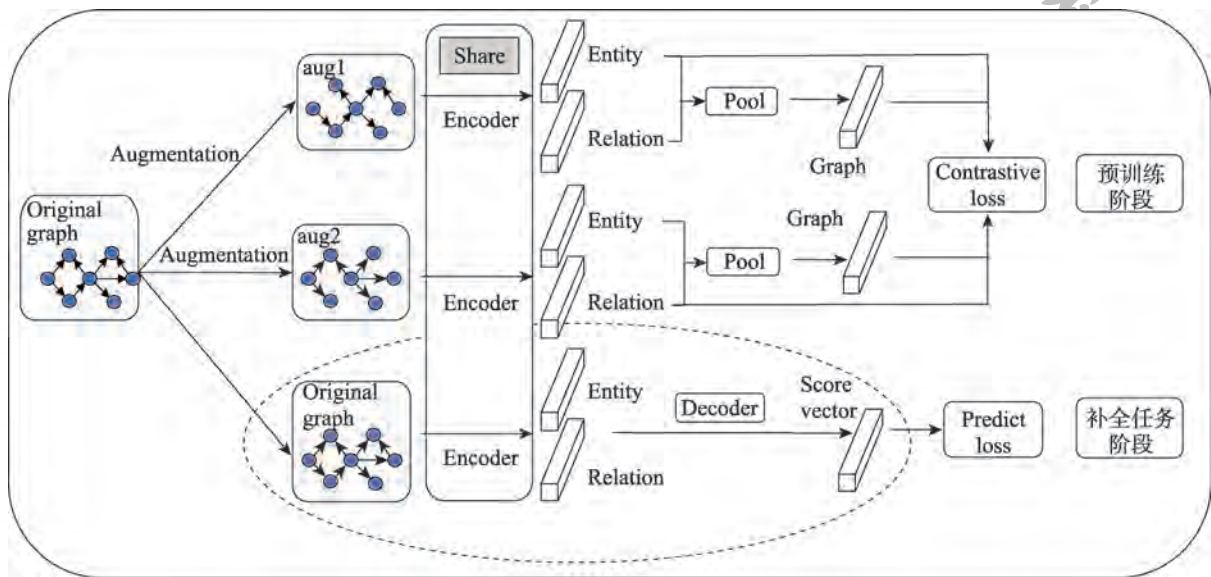


图1 多视图对比学习模型

Fig.1 Multi-view contrastive learning model

个节点构造一跳子图,采用池化方法计算子图的嵌入向量 I_g , 然后对两个视图的 h 、 I_g 计算对比损失。

图谱推理模块:图1椭圆框内所示。推理模块的目标是得到推理结果。方法是使用与对比学习相同的编码器,得到实体和关系的嵌入向量,然后经过解码器计算每个实体-关系对的推理结果。算法首先进行预训练阶段,训练编码器,然后基于训练好的编码器进行补全任务计算推理结果,进一步训练编码器和解码器。

2.3 对比学习模块-预训练阶段

对比学习模块结构如图1椭圆框外所示,包括数据增强、编码、池化、对比四个部分。

2.3.1 数据增强

数据增强的目的是得到图谱的两个新的视图,每个视图都是原始图谱的子图,两个视图分别代表关系的两种不同的分布,经过编码,得到每个实体和关系的嵌入向量进行对比。相同节点的邻域信息相似,因此实体嵌入距离相近。对比学习的目标是最大化两个视图的互信息,使两个视图的分布互相拟合,各自独有的三元组在聚合时对中心实体的影响趋向一致。图谱增强测试了三种不同方案:

(1)实体丢弃:随机去除一部分实体以及相连的关系,实体丢弃概率服从均匀分布。

(2)关系丢弃:随机去除一部分三元组的连接关系,关系丢弃概率服从均匀分布。

(3)子图采样:使用随机游走采样一个大的子图,子图大小由设定的节点数决定。

2.3.2 编码器

编码器是对比学习的训练目标。两个视图使用同一个编码器,并且和推理模块编码-解码框架的编码器相同。编码器是一个GCN模型,输入是图谱的三元组集合,输出是每个视图的嵌入向量。实体嵌入表示为 h , 关系嵌入表示为 r 。两个视图的实体嵌入分别表示为 h_i 、 h_j , 关系嵌入表示为 r_i 、 r_j 。

本文的模型中,编码器主要使用CompGCN^[14]。CompGCN^[14]是图谱补全模型中最常用的编码器之一,基于图卷积神经网络设计,通过聚合邻居节点来更新中心节点的嵌入,并且在更新过程中对关系嵌入进行了更新。给定一个知识图谱的三元组集合,CompGCN^[14]为每个三元组构造反向边,每个实体聚合入边、出边、自环三种类型的实体与关系嵌入,经过归一化和激活层处理作为实体自身的嵌入。如式(1):

$$h_v^{k+1} = f \left(\sum_{(u,r) \in N(v)} W_{\lambda(r)}^k \phi(h_u^k, r^k) \right) \quad (1)$$

式中, h_v^{k+1} 为 $k+1$ 层实体 v 的嵌入, $W_{\lambda(r)}^k$ 为第 k 层关系权重矩阵, $\phi(h_u^k, r^k)$ 为第 k 层实体 u 的嵌入和关系 r 的嵌入的交互函数。 $f(\cdot)$ 为归一化和激活函数。

关系嵌入更新如式(2):

$$r^{k+1} = W_{rel}^k r^k \quad (2)$$

式中, r^{k+1} 为 $k+1$ 层关系 r 的嵌入, W_{rel}^k 为 k 层关系组合参数矩阵。

2.3.3 子图池化

子图池化是图结构中根据节点嵌入获取图嵌入的方法,通常用于图级别的任务上,如图聚类、图分类等。

子图层面的对比是比较两个子图的嵌入,本文使用通用的Readout^[19,22]池化方法得到子图嵌入,计算方法是将子图内的实体嵌入进行平均得到子图的嵌入,子图的范围是中心实体的一阶邻域。计算公式如式(3)所示:

$$I_g = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h_i \quad (3)$$

式中, h_i 是实体的嵌入向量, I_g 是子图的嵌入向量, N 为子图内的实体数。子图范围是中心实体的一跳邻域。

2.3.4 对比学习损失

损失函数的目的是为了在两个视图中进行对比,最大化相同实体的一致性,子图的对比是为了使相同实体的邻域信息嵌入尽可能相近,不同实体的邻域嵌入的差异尽可能大。本文使用NT-Xent loss (normalized temperature-scaled cross entropy loss)^[23] 作为对比损失函数。

在对比学习中,对于一个随机采样的大小为 N 的三元组 batch,以头实体作为中心实体,经过图谱增强后得到两个视图,第 n 个实体在两个视图中的嵌入互为正样本。负样本是 batch 中不同视图的其他 $N-1$ 个实体嵌入。相似度计算方法使用余弦相似度,计算如式(4):

$$\text{sim}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{\mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| \|\mathbf{x}_2\|} \quad (4)$$

NT-Xent loss^[23]的计算如式(5):

$$l_n = -\ln \frac{\exp(\text{sim}(\mathbf{x}_{n,i}, \mathbf{x}_{n,j})/\tau)}{\sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\text{sim}(\mathbf{x}_{n,i}, \mathbf{x}_{n',j})/\tau)} \quad (5)$$

$\mathbf{x}_{n,i}$ 、 $\mathbf{x}_{n,j}$ 分别为第 n 个节点在两个视图中的嵌

入, τ 为温度系数, 是一个超参数, 决定了对比损失对困难负样本的关注程度^[24]。在节点级别的对比, 对比双方都是 batch 内实体的嵌入向量。对比学习的目标是互信息最大化, 使得同一实体在两个视图中的嵌入相似, 不同实体的嵌入尽可能远离。

NT-Xent loss 的分析如下:

模型中的 $\mathbf{x}_{n,i}$ 、 $\mathbf{x}_{n,j}$ 经过归一化, 相似度结果如式(6):

$$\text{sim}(\mathbf{x}_{n,i}, \mathbf{x}_{n,j}) = \mathbf{x}_{n,i}^T \mathbf{x}_{n,j} \quad (6)$$

Loss 对实体嵌入 $\mathbf{x}_{n,i}$ 的梯度如式(7):

$$\frac{\partial L(\mathbf{x}_{n,i})}{\partial \mathbf{x}_{n,i}} = \frac{-\partial(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n,j} / \tau - \ln \sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n'} / \tau))}{\partial \mathbf{x}_{n,i}} = -\frac{\mathbf{x}_{n,j}}{\tau} + \frac{\sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n'}) \mathbf{x}_{n'}}{\tau \sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n'} / \tau)} \quad (7)$$

梯度下降更新实体嵌入公式如式(8):

$$\mathbf{x}_{n,i}^{t+1} = \mathbf{x}_{n,i}^t - \eta \frac{\partial L(\mathbf{x}_{n,i})}{\partial \mathbf{x}_{n,i}} \quad (8)$$

$\mathbf{x}_{n,i}^{t+1}$ 、 $\mathbf{x}_{n,i}^t$ 分别代表第 $t+1$ 轮和第 t 轮迭代时 $\mathbf{x}_{n,i}$ 的嵌入向量, η 为学习率。公式表明实体嵌入会朝

向 $\frac{\mathbf{x}_{n,j}}{\tau}$ 的方向更新, 并且远离 $\frac{\sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n'}) \mathbf{x}_{n'}}{\tau \sum_{n'=1, n' \neq n}^N \exp(\mathbf{x}_{n,i} \cdot \mathbf{x}_{n'} / \tau)}$

方向。前者是 $\mathbf{x}_{n,i}$ 在另一个视图中的对应嵌入, 后者是同一个 batch 中其他实体嵌入 $\mathbf{x}_{n,j}$ 的加权平均, 代表了负样本的平均方向。因此, NT-Xent loss 可以使使得同一个实体在两个视图的嵌入互相靠拢, 不同实体对的嵌入互相远离。

子图级别的对比采用 NT-Xent loss 作为损失函数, 这部分的 $\mathbf{x}_{n,i}$ 、 $\mathbf{x}_{n,j}$ 分别为第 n 个节点的一阶子图在两个视图中的嵌入, 子图嵌入由式(3)计算得到, 子图范围与式(3)中的介绍相同。子图级别的对比目标是使得中心实体的邻域信息在两个视图中尽可能相似。在数据增强后, 两个视图的一跳子图区别主要来源于各自丢失的邻居实体。这部分实体共享同一个头实体或者尾实体, 子图对比可以促使模型拉近这部分实体的相似度, 即有相同头实体或尾实体的元组互相靠拢。

整个对比学习模块的损失函数定义为两者的加权组合, 如式(9):

$$\text{loss} = w_1 l_{\text{node}} + w_2 l_{\text{subgraph}} \quad (9)$$

公式中的 w_1 、 w_2 分别代表模型在实体对比损失和子图对比损失上的权重。

2.4 图谱推理模块-补全任务阶段

图谱推理的目标是完成补全任务, 由原始图谱推理得到新的预测结果。结构如图 1 椭圆框内所示, 包括编码、解码两个部分, 与通用结构完全相同。

2.4.1 编码器

推理模块使用对比学习训练好的编码器完成任务。输入是原始的图谱, 输出是原始图谱的实体和关系嵌入。

2.4.2 解码器

解码器的目的是根据输入的实体和关系计算预测的头实体或者尾实体, 并进行评分, 本文使用 ConvE 来进行解码。ConvE 是基于卷积神经网络的模型, 使用卷积层和全连接层对输入的实体和关系嵌入进行交互。在 ConvE 中, 三元组评分函数定义如式(10):

$$p(h, r, t) = \text{ReLU}(\text{vec}(\text{ReLU}([e_h; e_r] * \omega) \mathbf{W})) e_t \quad (10)$$

其中, ω 为卷积算子, ReLU 为激活函数。vec() 将张量转换为向量, 损失函数使用交叉熵损失。

3 实验与结果分析

3.1 数据集

本文在 FB15k-237^[25] 和 WN18RR^[9] 两个数据集上验证模型的效果。FB15k-237 是 FreeBase^[26] 的子集, 并删除了反转关系。WN18RR 是 WN18^[5] 的子集, 同样删除了反转关系。两个数据集的统计数据如表 1 所示。 N_e 、 N_r 分别表示实体和关系的数目, train、valid、test 分别表示训练集、验证集、测试集中的三元组数目。

表 1 数据集统计数据

Table 1 Statistics of datasets

Dataset	N_e	N_r	train	valid	test
FB15k-237	14 541	237	272 115	17 535	20 466
WN18RR	40 943	11	86 835	3 034	3 134

3.2 基准模型

(1) DistMult^[7]: 双线性模型, 训练模型使得三元组的邻接矩阵与头实体矩阵、关系矩阵、尾实体矩阵的乘积接近, 其中关系矩阵为对角矩阵。

(2) ConvE^[9]: 使用卷积神经网络计算实体关系向量的交互, 得到三元组评分。

(3) CompGCN^[4]: 使用基向量的线性组合表示所

有关系的嵌入,降低基于图神经网络的补全模型的复杂度。

(4)InteractE^[11]:增加实体和关系的交互方式。

(5)MuRP(multi-relational Poincaré graph embeddings)^[27]:将实体和关系嵌入到双曲空间。

(6)A2N(attending to neighbors for knowledge graph inference)^[28]:通过注意力机制学习实体表示。

(7)LTE-GCE(linearly transformed entity embeddings)^[29]:隐式聚合邻居信息的自环GCN模型。

3.3 评估指标

知识图谱补全的目标是给定 (h, r) 预测 t ,或者给定 (r, t) 预测 h 。具体的方案是对于每个实体 t' ,计算三元组 (h, r, t') 的评分,评分最高的一项作为预测结果。常用评估指标有:

(1)MRR(mean reciprocal rank):平均倒数排名,计算每个真实三元组 (h, r, t) 的评分在所有 (h, r, t') 评分中的排名的倒数的和。MRR的值越大,模型推理效果越好。

(2)Hits@1、Hits@3、Hits@10:分别表示在所有 (h, r, t') 中,真实三元组 (h, r, t) 评分排名前1、前3、前10的百分比。Hits值越大,模型效果越好。

3.4 参数设置

超参数的设置范围如下:关系丢弃概率为 $\{0.01, 0.1, 0.2\}$,实体和关系的嵌入向量维度 $\{100, 200\}$,学习率 $\{0.0005, 0.001, 0.005\}$,批量大小 $\{64, 128, 256\}$,节点对比超参数 $\{0.05, 0.1, 0.5, 1\}$,子图对比超参数 $\{0.05, 0.1, 0.5, 1\}$ 。

实验最终使用的超参数为:关系丢弃概率0.1,嵌入维度200,学习率0.001,实体对比损失超参数 w_1 为0.1,子图对比超参数 w_2 为0.1,对比损失温度系数0.2,批量大小128。

3.5 实验结果分析

3.5.1 模型效果分析

模型在FB15k-237和WN18RR数据集上的补全结果分别如表2和表3所示。

在两个数据集上,MVCL模型都超过了baseline方法,达到了最优效果。

(1)与ConvE模型相比,推理性能显著提升,图卷积神经网络编码器能学习到更丰富的邻域信息。

(2)与原本的CompGCN模型相比,MVCL性能也有提高,证明了引入对比学习对实体和关系嵌入的优化,经过对比学习损失和预测损失双重优化的

表2 FB15k-237数据集上补全实验结果

Table 2 Completion results on FB15k-237 dataset

模型	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
DistMult ^[7]	0.241	0.155	0.263	0.419
ConvE ^[9]	0.325	0.237	0.356	0.501
CompGCN ^[14]	0.355	0.264	0.390	0.535
InteractE ^[11]	0.354	0.263	—	0.535
MuRP ^[27]	0.335	0.243	0.367	0.518
A2N ^[28]	0.317	0.232	0.348	0.486
LTE-GCE ^[29]	0.355	0.264	0.389	0.535
MVCL	0.357	0.265	0.390	0.539

表3 WN18RR数据集上补全实验结果

Table 3 Completion results on WN18RR dataset

模型	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
DistMult ^[7]	0.430	0.390	0.440	0.490
ConvE ^[9]	0.430	0.410	0.440	0.520
CompGCN ^[14]	0.479	0.443	0.494	0.546
InteractE ^[11]	0.463	0.430	—	0.528
MuRP ^[27]	0.481	0.440	0.495	0.566
A2N ^[28]	0.450	0.420	0.460	0.510
LTE-GCE ^[29]	0.472	0.437	0.485	0.544
MVCL	0.483	0.447	0.496	0.553

的编码器比单独预测优化的编码器更强。对比学习中的节点对比使得中心实体的邻域节点对中心实体的影响趋于一致,影响过程通过卷积中的消息聚合实现,复杂的聚合过程如循环相关^[30]运算同时增强了关系对中心实体的影响。不同实体对构成负样本,节点对比会使这些实体互相远离。但是有相同邻居的实体之间具有一定的相似性,节点对比没有处理。子图对比通过池化操作聚合了一跳邻居,一跳邻居之间互相靠拢,利用了结构信息,弥补了节点对比的缺陷。这样的对比可以建立起约束,远距离实体互相远离,近距离实体嵌入互相靠拢,得到的实体嵌入具有更强的区分效果。多视图对比和子图约束能够显著提高实体对周围邻域节点的信息聚合能力和邻域内实体的关联程度,提升模型的推理能力。

3.5.2 多视图消融实验

基于MVCL模型,测试单个视图和多个视图对补全结果的影响。单视图的实验在原始图谱内部进行,将实体嵌入与邻域子图嵌入进行对比。多个视图的实验在两个增强视图之间进行,和前文模型相同。结果如表4和表5所示。实验证明:

(1)单个视图内部的对比削弱了模型的效果,原

表4 FB15k-237数据集上单视图实验结果(MVCL)

Table 4 Results on FB15k-237 dataset with single view (MVCL)

增强方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
单视图	0.354	0.263	0.387	0.534
增强视图	0.357	0.265	0.390	0.539

表5 WN18RR数据集上单视图实验结果(MVCL)

Table 5 Results on WN18RR dataset with single view (MVCL)

增强方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
单视图	0.475	0.440	0.490	0.544
增强视图	0.483	0.447	0.496	0.553

因是子图嵌入聚合了邻域的多个实体。子图嵌入和中心实体的相似程度较低,对比使嵌入偏离真实的推理结果。

(2)多个视图的对比建立在数据增强的基础上,增强视图的相同实体相似性更加显著,互信息最大化使得关系的不同分布互相拟合,提升了关系推理的能力,对模型的效果提升较大。

3.5.3 子图对比消融实验

基于MVCL模型,在两个数据集上测试子图对比对于模型的影响。分别是无对比、单独节点对比、节点+子图对比的模型。

实验结果如表6、表7所示。实验证明,节点和子图两个级别的对比达到了最优效果。在两个数据集的实验中,单独节点对比对模型的改进效果都比较小,因为节点对比考虑了邻居对中心节点的影响,但没有考虑邻域节点之间的相关性。子图对比考虑了

表6 FB15k-237数据集上子图对比实验结果(MVCL)

Table 6 Results on FB15k-237 dataset with subgraph contrast (MVCL)

对比方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
无对比	0.354	0.262	0.384	0.535
节点对比	0.355	0.263	0.391	0.535
节点+子图对比	0.357	0.265	0.390	0.539

表7 WN18RR数据集上子图对比实验结果(MVCL)

Table 7 Results on WN18RR dataset with subgraph contrast (MVCL)

对比方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
无对比	0.477	0.441	0.491	0.547
节点对比	0.478	0.442	0.492	0.550
节点+子图对比	0.483	0.447	0.496	0.553

这一点,融入了子图结构信息,提高了共享同一实体的邻居间的相似程度,增强了实体的嵌入质量,显著提高了模型的对比学习效果。

3.5.4 增强方案效果分析

基于MVCL模型,在两个数据集上测试不同增强方案对于模型的效果,丢弃概率全部设置为0.1,实验结果如表8、表9所示。实验证明:

(1)关系丢弃对模型的效果最好,优于其他两种增强方法。主要原因是关系丢弃对图谱的影响较少,所有的实体和关系类型都保存,邻域信息的变化全部是连接关系的变化。同一个中心实体在两个视图中大部分邻域信息相同,不同的部分代表不同的关系分布,分布互相拟合,使得嵌入向量经过了对比学习的优化结果优于初始结果。

(2)实体丢弃和子图采样都会丢失部分实体,两个视图丢失的实体不同,对比学习时差异实体不能在两个视图中同时训练,在其中一个视图中会保持随机初始化的结果,对比学习会使这部分实体的计算结果产生偏差,嵌入会向着初始嵌入靠近,不利于学习实体的邻域信息。相对于实体丢弃,子图采样丢失的实体更加集中,相当于丢弃了较大规模的子图信息,因此对结果的负面影响最大,效果最差。

表8 FB15k-237数据集上图谱增强实验结果(MVCL)

Table 8 Results on FB15k-237 dataset with knowledge graph augmentation (MVCL)

增强方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
实体丢弃	0.353	0.262	0.386	0.533
关系丢弃	0.357	0.265	0.390	0.539
子图采样	0.351	0.261	0.386	0.530

表9 WN18RR数据集上图谱增强实验结果(MVCL)

Table 9 Results on WN18RR dataset with knowledge graph augmentation (MVCL)

增强方案	MRR	Hits@1	Hits@3	Hits@10
实体丢弃	0.478	0.440	0.493	0.551
关系丢弃	0.483	0.447	0.496	0.553
子图采样	0.473	0.434	0.488	0.550

4 结束语

(1)本文提出了多视图对比学习的图谱补全模型,通过数据增强构造视图,进行对比学习,增强了模型对实体和关系的表达能力,进而增强了推理效果。

(2)融入子图信息,在子图级别进行了约束,对

结构信息的利用增强了模型的推理能力。

(3)在两个数据集上的实验验证了本文方法优于现有的图谱补全算法。

知识图谱的补全是知识图谱领域通用任务之一,研究关键在于学习实体和关系的嵌入向量。本文提出了多视图对比学习的图谱补全算法,通过对比学习增强编码器表达能力,使用子图结构信息增强编码质量,最终得到更优的编码器。在今后的研究中,将探索其他对比方案能否增强编码器模型的邻域学习能力,例如显式地构造子图负样本、破坏邻域结构等;还有对邻域信息更加细粒度的处理,例如对比学习时对不同关系分别建模等。

参考文献:

- [1] CHOENMACKERS S, DAVIS J, ETZIONI O, et al. Learning first-order horn clauses from web text[C]//Proceedings of the 2010 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Oct 9-11, 2010. Stroudsburg: ACL, 2010: 1088-1098.
- [2] GALÁRRAGA L, TELIOUDI C, HOSE K, et al. Fast rule mining in ontological knowledge bases with AMIE+[J]. The International Journal on Very Large Data Bases, 2015, 24(6): 707-730.
- [3] GALÁRRAGA L, TELIOUDI C, HOSE K, et al. AMIE: association rule mining under incomplete evidence in ontological knowledge bases[C]//Proceedings of the 22nd International Conference on World Wide Web, Rio de Janeiro, May 13-17, 2013. New York: ACM, 2013: 413-422.
- [4] KOK S, DOMINGOS P. Learning the structure of Markov logic networks[C]//Proceedings of the 22nd International Conference on Machine Learning, Bonn, Aug 7-11, 2005. New York: ACM, 2005: 441-448.
- [5] BORDES A, USUNIER N, GARCIA-DURAN A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data[C]//Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems, Lake Tahoe, Dec 5-10, 2013. Red Hook: Curran Associates Inc., 2013: 2787-2795.
- [6] 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, Bellevue, Jun 28-Jul 2, 2011. Madison: Omni-Press, 2011: 809-816.
- [7] YANG B, YIH W T, HE X, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases[C]//Proceedings of the 2015 International Conference on Learning Representations, San Diego, May 7-9, 2015.
- [8] TROUILLON T, WELBL J, RIEDEL S, et al. Complex embeddings for simple link prediction[C]//Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning, Jun 19-24, 2016: 2071-2080.
- [9] DETTMERS T, MINERVINI P, STENETORP P, et al. Convolutional 2D knowledge graph embeddings[C]//Proceedings of the 32nd AAAI Conference on Artificial Intelligence, New Orleans, Feb 2-7, 2018. Menlo Park: AAAI, 2018: 1811-1818.
- [10] DAI Q N, TU D N, NGUYEN D Q, et al. A novel embedding model for knowledge base completion based on convolutional neural network[C]//Proceedings of the 2018 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, New Orleans, Jun 1-6, 2018. Stroudsburg: ACL, 2018: 327-333.
- [11] 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, New York, Feb 7-12, 2020. Menlo Park: AAAI, 2020: 3009-3016.
- [12] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks[C]//Proceedings of the 15th International Conference on the Semantic Web, Heraklion, Jun 3-7, 2018. Cham: Springer, 2018: 593-607.
- [13] NATHANI D, CHAUHAN J, SHARMA C, et al. Learning attention based embeddings for relation prediction in knowledge graphs[C]//Proceedings of the 57th Conference of the Association for Computational Linguistics, Florence, Jul 28-Aug 2, 2019. Stroudsburg: ACL, 2019: 4710-4723.
- [14] VASHISHTH S, SANYAL S, NITIN N, et al. Composition-based multi-relational graph convolutional networks[C]//Proceedings of the 8th International Conference on Learning Representations, Addis Ababa, Apr 26-30, 2020.
- [15] JAISWAL A, BABU A R, ZADEH M Z, et al. A survey on contrastive self-supervised learning[J]. Technologies, 2020, 9(1): 2.
- [16] VELIC KOVIC P, FEDUS W, HAMILTON W L, et al. Deep graph infomax[C]//Proceeding of the 2019 International Conference on Learning Representations, New Orleans, May 6-9, 2019.
- [17] YOU Y N, CHEN T L, SUI Y D, et al. Graph contrastive learning with augmentations[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 33, Vancouver, Dec 6-12, 2020. Red Hook: Curran Associates Inc., 2020: 5812-5823.
- [18] HASSANI K, AHMADI A H K. Contrastive multi-view representation learning on graphs[C]//Proceedings of the 37th

- International Conference on Machine Learning, Jul 13-18, 2020: 4116-4126.
- [19] DUVENAUD D K, MACLAURIN D, IPARRAGUIRRE J, et al. Convolutional networks on graphs for learning molecular fingerprints[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 28, Montreal, Dec 7-12, 2015. Cambridge: MIT Press, 2015: 2224-2232.
- [20] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Neural message passing for quantum chemistry[C]//Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning, Sydney, Aug 6-11, 2017: 1263-1272.
- [21] ATWOOD J, TOWSLEY D. Diffusion-convolutional neural networks[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 29, Barcelona, Dec 5-10, 2016. Red Hook: Curran Associates Inc., 2016: 2001-2009.
- [22] SIMONOVSKY M, KOMODAKIS N. Dynamic edge-conditioned filters in convolutional neural networks on graphs[C]//Proceedings of the 2017 Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Honolulu, Jul 21-26, 2017. Washington: IEEE Computer Society, 2017: 29-38.
- [23] SOHN K. Improved deep metric learning with multi-class n-pair loss objective[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 29, Barcelona, Dec 5-10, 2016. Red Hook: Curran Associates Inc., 2016: 1857-1865.
- [24] WANG F, LIU H. Understanding the behaviour of contrastive loss[C]//Proceeding of the 2021 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Jun 19-25, 2021. Washington: IEEE Computer Society, 2021: 2495-2504.
- [25] TOUTANOVA K, CHEN D Q, PANTEL P, et al. Representing text for joint embedding of text and knowledge bases [C]//Proceedings of the 2015 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing, Lisbon, Sep 17-21, 2015. Stroudsburg: ACL, 2015: 1499-1509.
- [26] BOLLACKER K D, EVANS C, PARITOSH P K, et al. FreeBase: a collaboratively created graph database for structuring human knowledge[C]//Proceedings of the 2008 ACM SIGMOD International Conference on Management of Data. New York: ACM, 2008: 1247-1250.
- [27] BALAZEVIC I, ALLEN C, TIMOTHY M. Hospedales: multi-relational Poincaré graph embeddings[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 32, Vancouver, Dec 8-14, 2019. Red Hook: Curran Associates Inc., 2019: 4465-4475.
- [28] BANSAL T, JUAN D C, RAVI S, et al. A2N: attending to neighbors for knowledge graph inference[C]//Proceedings of the 57th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, Florence, Jul 28-Aug 2, 2019. Stroudsburg: ACL, 2019: 4387-4392.
- [29] ZHANG Z Q, WANG J, YE J P, et al. Rethinking graph convolutional networks in knowledge graph completion[C]//Proceedings of the ACM Web Conference 2022, Lyon, Apr 25-29, 2022. New York: ACM, 2022: 798-807.
- [30] NICKEL M, ROSASCO L, POGGIO T. Holographic embeddings of knowledge graphs[C]//Proceedings of the 30th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, Feb 12-17, 2016. Menlo Park: AAAI, 2016: 1955-1961.



乔梓峰 (1998—), 男, 山西忻州人, 硕士研究生, CCF 学生会员, 主要研究方向为知识图谱、图神经网络等。

QIAO Zifeng, born in 1998, M.S. candidate, CCF student member. His research interests include knowledge graph, graph neural network, etc.



秦宏超 (1992—), 男, 湖北荆州人, 博士, CCF 会员, 主要研究方向为图数据库、时序图挖掘、知识图谱挖掘。

QIN Hongchao, born in 1992, Ph.D., CCF member. His research interests include graph database, temporal graph mining and knowledge graph mining.



胡晶晶 (1978—), 女, 江苏徐州人, 博士, 副教授, CCF 专业会员, 主要研究方向为 Web 智能、信息安全等。

HU Jingjing, born in 1978, Ph.D., associate professor, CCF professional member. Her research interests include Web intelligence, information security, etc.



李荣华 (1985—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 会员, 主要研究方向为大规模图数据管理与挖掘、社交网络分析与挖掘等。

LI Ronghua, born in 1985, Ph.D., professor, Ph.D. supervisor, CCF member. His research interests include large-scale graph data management and mining, social network analysis and mining, etc.



王国仁 (1966—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 杰出会员, 主要研究方向为图数据库、图数据挖掘、大数据系统等。

WANG Guoren, born in 1966, Ph.D., professor, Ph.D. supervisor, CCF distinguished member. His research interests include graph databases, graph data mining, big data systems, etc.