

基于卷积神经网络的高效知识表示模型^①

李少杰^{②***} 陈曙东^{③**} 郝悦星^{**} 欧阳小叶^{**} 龚立晨^{***}

(* 中国科学院大学微电子学院 北京 100049)

(** 中国科学院微电子研究所 北京 100029)

摘要 为提升知识表示的有效性和可靠性,提出一种基于卷积神经网络(CNN)的知识表示模型(ConvKE)。ConvKE采用维度变换策略来提升卷积滑动窗口在三元组矩阵上的滑动步数以及三元组内实体和关系在更多维度上的信息交互能力。ConvKE还通过2-D卷积滑动窗口提升感受野来捕获三元组更多维度上的整体信息。通过采用知识补全任务来评估ConvKE模型的效果,实验结果证明了ConvKE在2个基准数据集WN18RR、FB15K-237的平均排名(MR)指标上取得了较好的结果。

关键词 知识图谱;知识表示;卷积神经网络(CNN);知识补全;维度变换;信息交互

0 引言

近年来知识图谱技术发展越来越快,在自然语言处理领域有了越来越多的应用,如机器阅读^[1]和知识问答^[2]。知识图谱是图结构的知识库,旨在描述真实世界中存在的各种实体及其关系,其构成一张巨大的语义网络图,它的节点代表实体,边代表连接2个实体之间的关系,边和两端的节点组成一个三元组。一般形式为(头实体,关系,尾实体),比如:(希区柯克,导演,惊魂记),也可以缩写为(h , r , t)。然而,一些大规模的知识图谱,比如世界知识库 Freebase^[3]、百科知识库 DBpedia^[4]和多语言知识库 YAGO^[5],通常是不完整的,缺少大量的合理三元组^[6,7],知识补全(又称为链接预测)任务^[8]被提出来解决这个问题。知识补全也称为链接预测,即预测一个三元组(h , r , t)是否是合理的知识,所采用的方法主要是基于知识表示的模型。知识表示旨在把图谱中的三元组投射到一个连续的向量空间,使得可以在低维空间中高效计算实体和关系的语义联系,有利于大量下游知识补全等任务的计算。知识

表示的模型大致可以分为3类,基于向量元素组合的模型、翻译模型、基于卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)的模型。矩阵分解模型(a three-way model for collective learning, RESCAL)^[9]、张量神经网络模型(neural tensor network, NTN)^[6]和全息表示模型(holographic embeddings, HOLE)^[10]是基于向量元素组合的模型。RESCAL和NTN都使用捕获向量各维度元素间丰富交互的张量乘积,但它们需要大量参数来建模关系,因此计算起来很麻烦。为了克服这些缺点,HOLE使用头尾实体向量的循环相关来表示实体对,创建了更有效和可扩展的表示。以TransE^[11]为代表的基于翻译的模型一般把实体表示成向量,把关系表示成实体间的操作,它们的打分函数是基于距离的方式。由于TransE无法有效建模1-N、N-1、N-N这3种类型^[11]的复杂关系,TransH^[12]、TransR^[13]和TransD^[14]等一系列基于TransE的改进模型被提出。其中,TransH引入了关系超平面机制,同时用平移向量和超平面的法向量来表示三元组中的关系。TransR认为不同的关系应该拥有不同的语义空间,

① 国家自然科学基金(61876144)资助项目。

② 男,1995年生,硕士生;研究方向:知识图谱;E-mail: lishaojie17@mails.ucas.ac.cn

③ 通信作者,E-mail: chenshudong@ime.ac.cn

(收稿日期:2019-11-18)

所以它用不同的矩阵来表示关系。而 TransD 认为头实体和尾实体应该拥有不同的关系矩阵,于是用 2 个关系矩阵来表示三元组中的关系,并且为了解决参数过多的问题,TransD 利用 2 个向量来构建关系矩阵。这些翻译模型结构更简单,参数更少并且相对更容易训练,但是基于翻译的模型难以学到实体和关系间复杂的特征。最近,学者们提出了 2 种基于卷积神经网络的知识表示模型,卷积嵌入模型(convolutional embeddings, ConvE^[15])和卷积知识库模型(convolutional knowledge base, ConvKB^[16])。ConvE 在头实体和关系组成的矩阵上用 2-D 卷积核来提取特征,得到的特征矩阵向量化后和尾实体向量内积来得到代表三元组知识合理性的分数。ConvE 架构里包括卷积层,全连接映射层和用于最终预测的内积层。ConvKB 使用多个 1-D 卷积核在头尾实体和关系组成的 3 列矩阵上逐行进行卷积操作以提取三元组每个维度上的特征关系。这 2 种基于卷积神经网络的模型都因为卷积特征提取器的高效性,可以提取到实体和关系间复杂的语义特征,得以学习到更高质量的知识表示。但是 ConvE 没有把头尾实体和关系组合在一起提取特征,丢失了三元组整体的结构信息。而 ConvKB 虽然在头尾实体和关系组成的矩阵上提取三元组整体特征信息,但由于采用 1-D 卷积核,卷积核的感受野仅限于一行,不如 2-D 卷积核覆盖的范围广,提取到的信息丰富。

在以上研究工作的启发下,为了能够提取到更丰富的三元组嵌入的特征信息,本文提出了一种新的基于卷积神经网络的知识表示模型(convolutional knowledge embeddings, ConvKE),对于每个三元组($\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}$),ConvKE 把每个元素都表示成一个 k 维向量空间里的向量(v_h, v_r, v_t),并把他们组合成一个 3 列的矩阵 $[v_h, v_r, v_t]$,用来提取三元组的整体全局信息,并且对这个矩阵进行维度转换以增加卷积核滑动窗口的步数,提升三元组内实体和关系在更多维度上的信息交互能力。除此之外,ConvKE 还采用感受野更大的 2-D 卷积核来提取三元组里不同向量元素的内在特征以及组合特征,得到不同的特征矩阵。然后 ConvKE 把这些矩阵组合在一起并且向

量化,经过一个全连接映射层和一个内积层后,得到三元组的得分,这个得分用于判断这个三元组的合理性。

本文在 2 个基准数据集(WN18RR^[15]、FB15K-237^[17])上评估了 ConvKE,实验结果显示 ConvKE 在平均排名(mean rank, MR)指标上达到了较好的结果。

1 基于卷积神经网络的知识表示模型

首先介绍在后文中提及的符号和定义,然后详细介绍模型。

1.1 背景

一个知识图谱定义为 $G = (E, R)$, E 和 R 分别代表实体集合和关系集合。一个三元组($\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}$)代表知识图谱 G 里的两个实体 \mathbf{h} 和 \mathbf{t} 以及它们之间的关系 \mathbf{r} 。知识表示模型旨在学习一个可以输出每个三元组的合理性的打分函数 $f(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t})$,合理的三元组知识得分高于不合理的三元组知识得分。

1.2 ConvKE 模型

ConvKE 把知识图谱里的实体和关系表示成 k 维向量空间里的向量,每个三元组表示成(v_h, v_r, v_t), 3 个向量组合在一起拼成一个 3 列的矩阵 $A = [v_h, v_r, v_t] \in \mathbf{R}^{k \times 3}$ 。然后 ConvKE 对矩阵 A 做维度转换得到矩阵 $B = \mathbf{R}^{m \times n}$,其中 $m \times n = k \times 3$ 。ConvKE 再把矩阵 B 输入卷积层,不同的 2-D 卷积核 ω 对矩阵 B 进行卷积操作提取三元组(v_h, v_r, v_t)里的特征。用 Ω 来代表卷积核 ω 的集合, $\tau = |\Omega|$ 表示卷积核的个数,假设卷积操作得到的特征矩阵维度为 $p \times q$ 。ConvKE 把这些特征矩阵组合在一起并向量化,得到一个向量 $v_w \in \mathbf{R}^{pq\tau \times 1}$ 。向量 v_w 先与权重矩阵 $W^{u \times pq\tau}$ 相乘映射到 u 维向量空间中,然后再与权重向量 $w_1 \in \mathbf{R}^{u \times 1}$ 内积后得到三元组($\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}$)的打分。图 1 中表明了 ConvKE 的模型结构。

ConvKE 的打分函数为以下形式:

$$f(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) = \text{vec}(g(\mathbf{B} * \Omega)) \times \mathbf{W} \cdot \mathbf{w}_1 \quad (1)$$

其中,*代表卷积操作,×代表矩阵相乘操作,·代表向量间的内积操作,vec代表对组合后的特征矩阵的向量化操作,g代表 Relu 等非线性函数, Ω, \mathbf{W}

和 w_1 是与三元组 (h, r, t) 无关的共享参数。为了训练 ConvKE 中的参数,使用 Adam^[18] 优化器来最小化损失函数 ξ ^[19]:

$$\xi = \sum_{(h, r, t) \in \{D \cup D'\}} \ln(1 + \exp(l_{(h, r, t)} \cdot f(h, r, t))) + \frac{\lambda}{2} (\|w_1\|_2^2 + \|W\|_2^2) \quad (2)$$

其中 $l_{(h, r, t)} = \begin{cases} 1 & (h, r, t) \in D \\ -1 & (h, r, t) \in D' \end{cases}$, D' 是无效三元组集合, D 是有效三元组集合。无效三元组 D' 通过将 D 中的每个三元组的头实体和尾实体其中之一随机替换为成其他实体来得到。

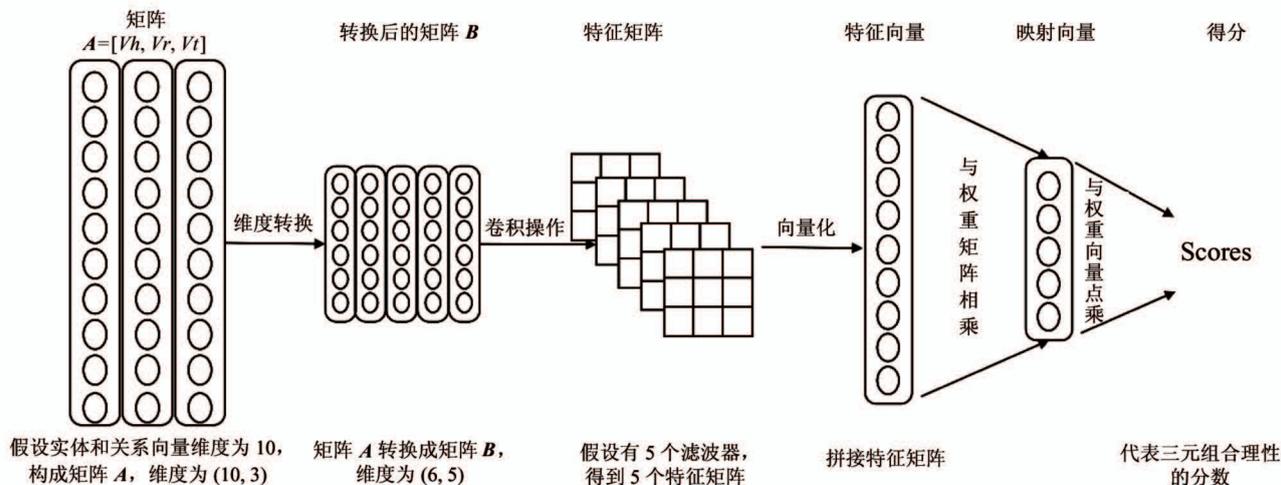


图 1 ConvKE 模型

2 实验和结果

2.1 数据集

本文使用 2 个数据集来评估模型 FB15K-237 和 WN18RR。FB15K-237 是 FB15K 的子集, FB15K 是 Freebase 的子集, 包含的三元组多与电影和体育话题有关。WN18RR 是 WN18 的一个子集, 包含的三元组多由下位词和上位词关系组成。文献[17]

提到数据集 FB15K 和 WN18 里大量测试三元组可以仅通过反转训练三元组来简单地获得。文献[15]介绍了一种简单的基于规则的模型, 该模型可以在 WN18 和 FB15K 上实现非常优异的结果。因此, 创建相应的子数据集 FB15K-237 和 WN18RR 可以避免 WN18 和 FB15K 数据集中的这种可逆问题。所以使用数据集 FB15K-237 和 WN18RR 来测试 ConvKE 的效果更能体现模型的性能。表 1 提供了 2 个数据集 WN18RR 和 Fb15K-237 的统计数据。

表 1 实验数据集的统计信息

数据集	实体 E	关系 R	训练集	验证集	测试集
WN18RR	40 943	11	86 835	3 034	3 134
FB15K-237	14 541	237	272 115	17 535	20 466

2.2 训练过程

在采样无效三元组时, 使用常见的伯努利技巧^[20,21]生成头部或尾部实体。使用 TransE 来初始化数据集里的实体和关系向量表示。在本文中, 对于 TransE 里的超参数选择如下: (1) 对于 FB15K-

237 数据集, 实体和关系的向量维度 $k = 100$, 学习率为 $5e^{-4}$, 间隔 $r = 1$, 使用 L1 范数; (2) 对于 WN18RR 数据集, 实体和关系的向量维度 $k = 50$, 学习率为 $5e^{-4}$, 间隔 $r = 5$, 使用 L1 范数。在 ConvKE 模型中还有如下超参, 卷积核 ω , 权重矩阵 W 和

权重向量 w_1 。为了训练这些参数,采用 Adam 优化器,采用批梯度下降方式并且设置批处理的大小为 256,采用 ReLU 作为激活函数。关于卷积核的初始化,采用 kaiming 正态分布,卷积核的个数范围选择是 $\tau \in \{100, 300, 500\}$ 。学习率取值范围是 $\{1e^{-3}, 5e^{-3}, 5e^{-4}, 5e^{-5}, 5e^{-6}\}$ 。对于数据集 WN18RR,最终选择卷积核个数为 500 并且设置学习率为 $1e^{-3}$,正则化 L2 的值为 $1e^{-5}$;对于数据集 FB15K-237,最终选择卷积核个数为 100,学习率选为 $5e^{-6}$,正则化 L2 的值为 0.001。对于 2 个数据集,都采用 3×3 形状的卷积核,并采用 dropout 防止模型的过拟合且设置 dropout 为 0.3。在 2 个数据集都训练了 200 轮,并使用第 200 轮的参数来评估 ConvKE 的性能。

为了验证维度转换策略的有效性,本文设置了一组对照实验,即把三元组拼成 3 列矩阵后,不采用维度转换策略,直接用形状的卷积核在三元组矩阵上卷积,其余模型结构与图 1 相同。除了在映射向量层没有采用 dropout 操作,对照实验的超参选择与 ConvKE 一致。

2.3 评估过程

本文用知识补全任务来评估 ConvKE 的性能,该任务的目的是在给定关系和一个实体的情况下预测另一个缺失的实体,即给定 (r, t) 预测 h 或者给定 (h, r) 预测 t 。与之前的研究工作类似^[11],为每个有效的测试三元组生成一组无效的三元组 (h, r, t) 集合,即将 h 或 t 随机替换为其他实体。在“过滤后”的设置^[11]中评估模型,即不考虑 KB 中已存在的三元组,只考虑不存在于现有 KB 中的无效三元组。在评估过程中,模型给每个有效的测试三元组和其对应的无效的三元组集合打分,然后对这些分数进行排名并获得有效测试三元组的排名。本文使用了 2 个常用的评估指标:MR 和前 10 名中含有预测正确三元组的比例(Hits@10)。较低的 MR 或较高的 Hits@10 代表着更好的性能。

2.4 主要实验结果

表 2 列出了 ConvKE 和其他模型的结果对比,表格显示 ConvKE 在数据集 WN18RR 和 FB15K-237 的 MR 指标上都获得了最好的结果,并且相对于其他的模型,ConvKE 在 MR 指标上取得了大幅度的提

升。具体地,相较于之前最优的结果,ConvKE 在 WN18RR 上提升了 $2\ 554 - 391 = 2\ 163$,在 FB15K-237 上提升了 $246 - 205 = 41$ 。其中 ConvKE^(NDT) 是没有采用维度转换策略的对照实验,表 2 也显示出了 ConvKE^(NDT) 在 2 个数据集上的 MR 指标上取得了较优的结果。采用 3×3 形状卷积核的 ConvKE^(NDT) 的与采用 1×3 形状卷积核的 ConvKB 相比,实验结果表明增大卷积核的感受野提升了 MR 指标的效果,但是降低了 Hits@10 指标的效果。再将 ConvKE^(NDT) 与采用了维度转换策略的 ConvKE 相比较,维度转换策略再次提升了 MR 指标的效果以及 WN18RR 数据集上的 Hits@10 指标的效果,实验结果证实了维度转换策略的有效性。具体地,将 ConvKE 的信息交互能力与 ConvKE^(NDT) 进行对比,假设三元组每个元素的向量维度是 100,那么 ConvKE^(NDT) 模型里每个 3×3 形状的卷积核会在形状为 100×3 的三元组矩阵上滑动 98 次。ConvKE 采用了维度变换策略,可以把维度为 100×3 的三元组矩阵转换成 10×30 的形状,假设采取 3×3 大小的卷积核,那么每个卷积核在三元组矩阵上滑动了 $8 \times 28 = 224$ 次,卷积核在三元组矩阵上的滑动次数明显增多。而且由于三元组矩阵维度的转换,之前实体和关系之间没有进行卷积操作的向量维度间也将有可能被卷积核覆盖到以提取特征信息,这增加了三元组内实体和关系在更多维度上的信息交互能力。本文认为正是这种信息交互能力的增加使得

表 2 模型实验结果对比

	WN18RR		FB15K-237	
	MR	Hits@10	MR	Hits@10
Distmult ^[22]	5 100	49	254	41.9
Complex ^[19]	5 261	<u>51</u>	339	42.8
TransE ^[11]	3 384	50	347	46.5
R-GCN ^[23]	6 700	8	600	30
ConvE ^[16]	5 277	48	246	<u>49.1</u>
ConvKB ^[17]	2 554	52.5	257	51.7
ConvKE ^(NDT)	<u>562</u>	48.8	<u>210</u>	47.1
ConvKE	391	50	205	45.1

最好的结果加粗表示,第 2 好的结果下面划线表示,ConvKE^(NDT) 是没有采用维度转换策略的对照实验

ConvKE 在 MR 指标上获得了目前最优的结果。

图 2 ~ 图 5 可视化的显示了不同模型在 2 个数据集上的 MR 和 Hits@10 指标上的效果对比。由于 MR 指标代表的是三元组集合的平均排名,所以实验结果说明了 ConvKE 在测试集的平均预测结果上取得了较好的结果,也证明了把三元组各个元素组合成一个整体并且采用 2-D 卷积核以及矩阵维度转换等策略的有效性。除此之外,从表 2 里可以看到,目前获得最好实验结果的模型都是基于卷积神经网络的,这就证明了卷积神经网络不仅在图像处理上

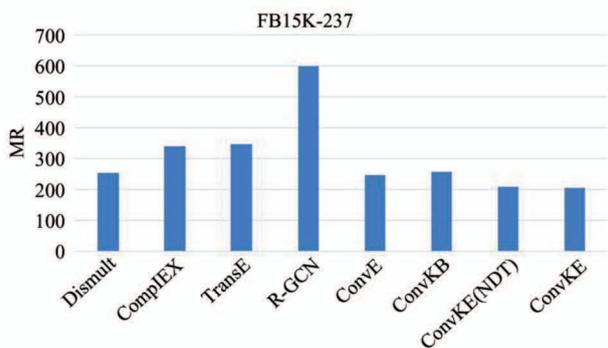


图 2 不同模型在 FB15K-237 的 MR 效果

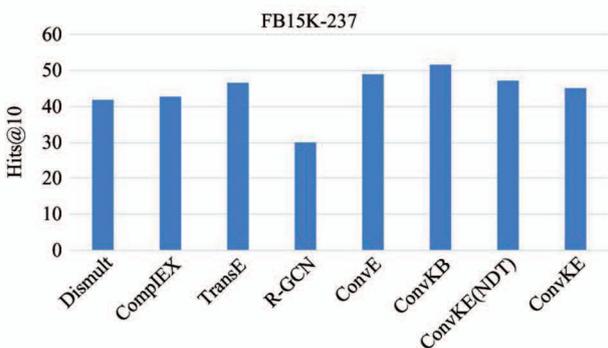


图 3 不同模型在 FB15K-237 的 Hits@10 效果

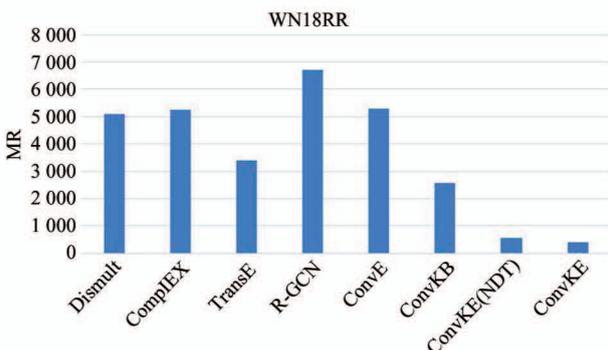


图 4 不同模型在 WN18RR 的 MR 效果

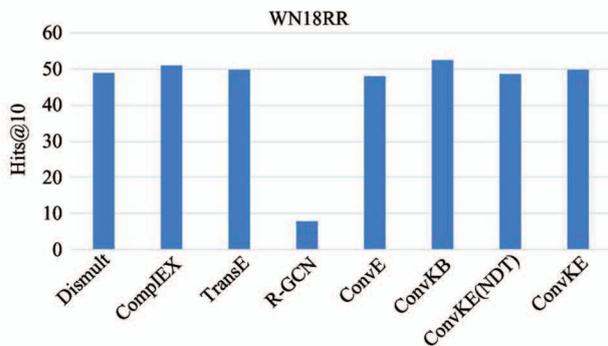


图 5 不同模型在 WN18RR 的 Hits@10 效果

效果优异^[24-27], 因为其可以对复杂的非线性关系进行拟合以及参数利用的有效性,所以在知识表示领域也表现出了非常优异的效果。

3 结论

本文提出了一个高效的基于卷积神经网络架构的知识表示模型 ConvKE。ConvKE 把三元组内各元素拼接在一起提取整体信息,采用维度变换策略来增加卷积滑动窗口在三元组矩阵上的滑动步数,同时提升三元组内实体和关系在更多维度上的信息交互能力。ConvKE 还使用拥有更大感受野的 2-D 卷积滑动窗口来捕获这些信息交互。本文用知识补全任务来评估 ConvKE 的性能,实验结果显示,ConvKE 在 2 个基准数据集 WN18RR、FB15K-237 上的 MR 指标上取得了较好的结果。

在以后的工作中,将不再单独考虑独立的三元组,因为这会丢失一个三元组周围复杂和隐藏的信息,考虑三元组之间的依赖性,加入关系路径信息到 ConvKE 中。

参考文献

- [1] Yang B, Mitchell T M. Leveraging knowledge bases in LSTMs for improving machine reading[C] // Proceedings of the 55th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, Vancouver, Canada, 2017: 1436-1446
- [2] Zhang Y Z, Liu K, He S Z, et al. Question answering over knowledge base with neural attention combining global knowledge information[J]. *arXiv*: 1606. 00979,

2016

- [3] Bollacker K D, Evans C, Paritosh P, et al. Freebase: a collaboratively created graph database for structuring human knowledge[C] // Proceedings of the ACM SIGMOD International Conference on Management of Data, Vancouver, Canada, 2008: 1247-1250
- [4] 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
- [5] Suchanek F M, Kasneci G, Weikum G. YAGO: a core of semantic knowledge[C] // Proceedings of the 16th International Conference on World Wide Web, Banff, Canada, 2007: 697-706
- [6] Socher R, Chen D, Manning C D, et al. Reasoning with neural tensor networks for knowledge base completion[C] // Neural Information Processing Systems, New York, USA, 2013: 926-934
- [7] West R, Gabrilovich E, Murphy K, et al. Knowledge base completion via search-based question answering[C] // Proceedings of the 23rd International Conference, New York, USA, 2014: 515-526
- [8] Bordes A, Weston J, Collobert R, et al. Learning structured embeddings of knowledge bases [C] // National Conference on Artificial Intelligence, San Francisco, USA, 2011: 301-306
- [9] Nickel M, Tresp V, Kriegel H P. A three-way model for collective learning on multi-relational data[C] // International Conference on International Conference on Machine Learning, Cambridge, USA, 2011: 809-816
- [10] Nickel M, Rosasco L, Poggio T, et al. Holographic embeddings of knowledge graphs[C] // National Conference on Artificial Intelligence, Phoenix, USA, 2016: 1955-1961
- [11] Bordes A, Usunier N, Garciaduran A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data[C] // Neural Information Processing Systems, New York, USA, 2013: 2787-2795
- [12] Wang J, Zhang J W, Feng J L, et al. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes[C] // Proceedings of the 28th AAAI Conference on Artificial Intelligence, Quebec, Canada, 2014: 1112-1119
- [13] Lin H, Liu Y, Wang W, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge resolution[J]. *Procedia Computer Science*, 2017, 108:345-354
- [14] Ji G, He S, Xu L, et al. Knowledge graph embedding via dynamic mapping matrix[C] // Meeting of the Association for Computational Linguistics and the International Joint Conference on Natural Language Processing, Stroudsburg, USA, 2015: 687-696
- [15] Dettmers T, Minervini P, Stenetorp P, et al. Convolutional 2D knowledge graph embeddings [C] // National Conference on Artificial Intelligence, New Orleans, USA, 2018: 1811-1818
- [16] Nguyen D Q, Nguyen T D, Nguyen D Q, et al. A novel embedding model for knowledge base completion based on convolutional neural network [J]. *arXiv*: 1712. 02121, 2017
- [17] Toutanova K, Chen D Q. Observed versus latent features for knowledge base and text inference[C] // Proceedings of the 3rd Workshop on Continuous Vector Space Models and their Compositionality, Beijing, China, 2015: 57-66
- [18] Kingma D P, Ba J. Adam: a method for stochastic optimization[J]. *arXiv*: 1412. 6980, 2015
- [19] Trouillon T, Welbl J, Riedel S, et al. Complex embeddings for simple link prediction[C] // International Conference on Machine Learning, New York, USA, 2016: 2071-2080
- [20] Wang Z, Zhang J W, Feng J L, et al. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes[C] // National Conference on Artificial Intelligence, Quebec, Canada, 2014: 1112-1119
- [21] Lin Y K, Liu Z Y, Sun M S, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion[C] // National Conference on Artificial Intelligence, Austin, USA, 2015: 2181-2187
- [22] Yang B S, Yih W T, He X D, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases[J]. *arXiv*: 1412. 6575, 2014
- [23] Schlichtkrull M, Kipf T N, Bloem P, et al. Modeling relational data with graph convolutional networks[J]. *arXiv*: 1703. 06103, 2018
- [24] 付秀丽, 黎玲萍, 毛克彪, 等. 基于卷积神经网络模型的遥感图像分类[J]. *高技术通讯*, 2017, 27(3): 203-212
- [25] 赵新秋, 贺海龙, 杨冬冬, 等. 基于改进的卷积神经网络在图片分类中的应用[J]. *高技术通讯*, 2018,

28(11-12):50-56

[27] 吉训生, 吴凡. 基于混合卷积神经网络的人头检测方法[J]. 高技术通讯, 2018, 28(4):313-319

[26] 胡硕, 赵银妹, 孙翔. 基于卷积神经网络的目标跟踪算法综述[J]. 高技术通讯, 2018, 28(3):207-213

A novel knowledge representation model based on convolutional neural network

Li Shaojie^{***}, Chen Shudong^{**}, Hao Yuexing^{**}, Ouyang Xiaoye^{**}, Gong Lichen^{***}

(* School of Microelectronics, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049)

(** Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029)

Abstract

In order to improve the validity and reliability of knowledge representation, this paper proposes a knowledge representation model based on convolutional neural network (CNN). Convolutional knowledge embeddings (ConvKE) uses a dimensional transformation strategy to increase the number of sliding steps of the convolution sliding window on the triple matrix and the information interaction capabilities of the entities and relations within the triple in more dimensions. ConvKE also captures the overall information of the triples in more dimensions by using the 2D convolution sliding windows with enhancing receptive field. By using the link prediction task to evaluate the performance of ConvKE, the experimental results show that ConvKE has achieved good results on the mean rank (MR) metric of the two benchmark datasets WN18RR and FB15K-237.

Key words: knowledge graph, knowledge representation, convolutional neural network (CNN), knowledge graph completion, dimensional transformation, information interaction