

QuatCNNE_x: 一种面向多关系模式的知识图谱嵌入模型

熊伟¹⁾ 陈浩¹⁾ 苏鸿宇^{1),2)}

¹⁾(国防科技大学电子科学学院 长沙 410073)

²⁾(中国人民解放军 31576 部队 北京 100144)

摘要 在大数据时代,快速的数据增长引发了信息过载的问题。一方面,在海量的数据中人们难以快速获取自己想要的信息;另一方面,一些用户虽然知道自己想要什么,但在不知道如何描述时,搜索引擎往往不能提供帮助。因此如何更加有效地表达和获取有价值的信息是一个挑战。知识图谱是一种被广泛使用的知识模型,可以保存大量节点和边形式的知识。知识图谱嵌入可以通过向量表示知识的语义信息,因此采用知识图谱嵌入模型可以利用图谱中的知识辅助提升人们获取信息的效率。知识图谱嵌入的主要思想是通过连续的向量空间表示知识图谱中实体和关系的语义联系。这种技术在链接预测、问答系统、推荐系统以及自然语言处理领域等知识图谱其他下游任务方面展现出较好的能力。现有的知识图谱嵌入方法主要有基于距离的模型、语义匹配模型、神经网络模型等。这些模型或者没有充分利用实体和关系的交互特征信息,或者组合关系的建模能力较弱。因此,这些方法对知识图谱中多关系模式的三元组表示能力不足。要有效解决多关系模式的建模问题,需要结合上述模型。论文提出将四元数和卷积神经网络结合的嵌入模型 QuatCNNE_x。该模型借鉴了 QuatE 的建模思想和 CNN 的特征提取能力。将建模过程由复数空间扩展至四元数空间,进一步提高嵌入模型的表达能力。QuatCNNE_x 将嵌入实体和关系的四元数作为 CNN 模型的输入。该模型使用四元数表达实体和关系更丰富的特征,从而具有建模多关系模式的能力。在此基础上,利用特征嵌入与头实体嵌入的 Hadamard 积使得头实体嵌入得到关系嵌入的特征。然后,再通过关系嵌入与头实体嵌入的 Hamilton 积实现头实体在四元数空间中的旋转,得到尾实体的嵌入表示。从而使用 Hadamard 积和 Hamilton 积的组合运算,通过迭代优化得到三元组的嵌入表示。通过链接预测实验,论文提出的方法与现有的主要模型在 *MRR*、*Hit@3*、*Hit@1* 指标上进行了对比。实验结果表明,本文方法在关系数量更多的基准测试集上取得了最优结果。与神经网络模型 ConEx 和基于四元数的模型 QuatE 相比,QuatCNNE_x 在 *MRR*、*Hit@3*、*Hit@1* 三个指标上分别提高 0.3% 和 0.3%、0.5% 和 1%、0.4% 和 0.4%,这表明该模型能够有效利用实体和关系的交互特征信息表示知识图谱中的多关系模式。

关键词 知识图谱;链接预测;嵌入表示;四元数;卷积神经网络

中图法分类号 TP183

DOI号 10.11897/SP.J.1016.2025.00124

QuatCNNE_x: A Knowledge Graph Embedding Model for Multiple Relation Mode

XIONG Wei¹⁾ CHEN Hao¹⁾ SU Hong-Yu^{1),2)}

¹⁾(College of Electronics Science and Technology, National University of Defense Technology, Changsha 410073)

²⁾(31576 Unit, The Chinese People's Liberation Army, Beijing 100144)

Abstract In the era of big data, rapid data growth has caused the problem of information overload. On the one hand, it is difficult for people to quickly get what they want in the massive amount of data. On the other hand, some users know what they want but don't know how to describe it, and search engines often can't help. Therefore, how to express and obtain valuable information more effectively is a challenge. A knowledge graph is a widely used model that can hold a large number of nodes and edges of knowledge. Knowledge graph embedding can represent the semantic information of knowledge through vectors, so the knowledge graph embedding

收稿日期:2024-01-10;在线发布日期:2024-06-27。本课题得到国家自然科学基金项目(U19A2058)、湖南省自然科学基金项目(2020JJ4663)资助。熊伟,博士,教授,中国计算机学会(CCF)会员,主要研究领域为时空大数据管理。E-mail: xiongwei@nudt.edu.cn。陈浩(通信作者),博士,教授,中国计算机学会(CCF)会员,主要研究领域为时空大数据。E-mail: hchen@nudt.edu.cn。苏鸿宇,硕士,主要研究方向为地理知识图谱。

model can be used to help improve the efficiency of people's access to information by using the knowledge in the graph. The main idea of knowledge graph embedding is to represent the semantic connections of entities and relationships in the knowledge graph through a continuous vector space. This technology has shown good capabilities in other downstream tasks of knowledge graphs, such as link prediction, question answering system, recommendation system, and natural language processing. The existing knowledge graph embedding methods mainly include distance-based models, semantic matching models, neural network models, etc. These models either do not make full use of the interactive feature information of entities and relationships, or have weak modeling capabilities for combinatorial relationships. Therefore, these methods are not capable of representing the triples of multi-relationship patterns in knowledge graphs. In order to effectively solve the modeling problem of multi-relational patterns, it is necessary to combine the above models. In this paper, we propose an embedding model QuatCNNEEx that combines quaternion and convolutional neural networks. The model draws on the modeling ideas of QuatE and the feature extraction ability of CNN. The modeling process is extended from complex space to quaternion space to further improve the expressive ability of the embedded model. QuatCNNEEx takes the quaternions embedded in entities and relationships as inputs to the CNN model. The model uses quaternion to represent features with richer entities and relationships, giving it the ability to model multi-relational patterns. On this basis, the Hadamard product of feature embedding and head entity embedding is used to make the head entity embedding to obtain the features of relational embedding. Then, the rotation of the head entity in the quaternion space is realized through the Hamilton product of relational embedding and head entity embedding, and the embedding representation of the tail entity is obtained. Therefore, the combination of Hadamard product and Hamilton product is used to obtain the embedding representation of the triplet through iterative optimization. Through link prediction experiments, the proposed method is compared with the existing main models in *MRR*, *Hit@3*, and *Hit@1* indicators. Experimental results show that the proposed method achieves the best results on the benchmark set with a larger number of relationships. Compared with the neural network model ConEx and the quaternion-based model QuatE, QuatCNNEEx improves by 0.3% and 0.3%, 0.5% and 1%, 0.4% and 0.4% in *MRR*, *Hit@3* and *Hit@1*, respectively, which indicates that the model can effectively use the interaction feature information of entities and relationships to represent the multi-relationship patterns in the knowledge graph.

Keywords knowledge graph; link prediction; embedding representation; quaternion; convolutional neural network

1 引言

知识图谱(Knowledge Graph, KG)是描述客观世界中实体与实体、实体与概念以及概念与概念之间关系的集合。在知识图谱中,一条知识用一个三元组表示,而三元组则由头实体、关系和尾实体组成,例如(长津湖战役、发生地、长津湖)表示一个三元组,即一条知识(事实)。目前知识图谱已经在问答系统、推荐系统以及自然语言处理领域被

广泛应用。为研究不同模型对关系的表示能力,根据三元组中关系特点的不同,三元组可分为四种关系模式(relation pattern),分别是对称模式、非对称模式、逆模式以及组合模式。但现有的知识图谱往往不完整,很多客观上存在的知识并没有被表达出来。如果要充分利用知识图谱中丰富的知识,让知识图谱在这些下游应用中有较好的表现,就需要对知识进行更为有效的表示,从而更好地刻画知识所蕴含的丰富特征。

知识图谱嵌入(Knowledge Graph Embedding,

KGE)就是为了解决这个问题而提出的方法,其主要思想是将 KG 的实体和关系嵌入到连续的向量空间中,以在简化操作的同时保留 KG 的固有结构。KGE 的实现通常包括三个步骤:首先定义实体和关系的表示形式,然后定义一个衡量三元组(主体、关系、客体)合理性的打分函数,最后通过训练学习实体和关系的嵌入表示。知识图谱嵌入为 KG 中的实体和关系提供了更加密集的表达,具有更高的计算效率。此外,还可以通过度量实体和关系低维嵌入的相似性来显式地捕获实体和关系之间的相似性。使用事实进行知识图谱嵌入的主要模型包括:基于距离的模型、语义匹配模型以及采用神经网络、旋转模型、双曲几何模型等最新的技术^[1-2]。

典型的知识图谱嵌入模型如 TransE^[3]、TransR^[4]、DistMult^[5]等根据不同的评分函数实现了对不同关系模式的表示, RotatE^[6]通过复数空间中的 Hadamard 积实现了对四种关系模式三元组的表示。QuatE^[7]则在四元数空间建模,利用四元数的 Hamilton 积,不仅实现了对四种模式三元组的表示,还克服了 RotatE 表示组合模式的缺陷,实现了对非固定组合模式三元组的表示,虽然这些模型都不同程度上解决了表示四种关系模式三元组的问题,但是它们对具有多关系模式的三元组表示研究不足。例如:以实体毛泽东和宋时轮为例,他们之间有两条关系,“战友”是对称模式,“上级”是逆模式,这些方法没有考虑到如何对这样的节点和边同时进行嵌入表示。此外虽然 TransR 具有建模一对多关系、多对多关系以及多对一关系的能力,但是它却不能表示逆模式和组合模式。特别是两个实体之间有多个关系连接,它们的关系模式可能相同也可能不同。

然而,上述模型只使用加减法或简单的乘法运算,只能捕捉实体与关系之间的线性关系,没有充分利用实体与关系的交互特性。因而神经网络方法被引入应用于链接预测任务。神经网络模型 ConEx^[8]使用复数表示实体和关系的嵌入,并将复数的 Hermitian 积和实数的卷积操作进行结合,解决了 ComplEx^[9]不能表示组合关系模式三元组的问题。这在一定程度上说明复杂空间的乘法运算具有较强的表示能力。但是 ConEx 编码和建模没有考虑多维输入可能的交互特性。因此,在对称、不对称、逆、组合等多关系模式建模中,表达能力仍然不够强。而 QuatE 由于没有利用神经网络的优势来提取特征,因此对组合关系模式的建模表达能力还可以进一步加强。

近年来,四元数和神经网络模型的组合越来越

受到关注,由于四元数能编码多维输入特征,从而形成更紧密的交互和更好的表达能力。在语音识别任务中,四元数递归神经网络(QRNN^[10])只使用了较少的参数,就获取了比递归神经网络(RNN)更好的性能。在自动语音识别和图像分类任务中,四元数还可以有效提升卷积神经网络(CNN)的性能。

本文针对知识图谱嵌入领域对多关系模式表示研究不足的问题提出了一种基于四元数卷积神经网络的嵌入表示模型。该模型在四元数空间建模,利用 CNN 结合 Hadamard 积和 Hamilton 积组合运算,学习知识图谱中的知识,得到三元组的嵌入表示。该模型增强了对多关系模式三元组的表示能力,可以表达知识图谱中的更多特征。

本文的主要贡献包括 3 个方面:

(1) 结合 CNN 的特征提取能力,构建知识图谱嵌入模型 QuatCNNE_x,借鉴 QuatE 模型思想,将建模过程由复数空间扩展至四元数空间,进一步提高嵌入模型的表达能力。将嵌入实体和关系的四元数作为 CNN 模型的输入;

(2) 然后利用特征嵌入与头实体嵌入的 Hadamard 积使得头实体嵌入得到关系嵌入的特征,再通过关系嵌入与头实体嵌入的 Hamilton 积实现头实体在四元数空间中的旋转,得到尾实体的嵌入表示。从而使用 Hadamard 积和 Hamilton 积的组合运算,通过迭代优化得到三元组的嵌入表示;

(3) 通过基准数据集的实验评估表明,QuatCNNE_x的几个指标优于大多数现有模型。说明与基线模型相比,本文提出的嵌入模型更善于表示多关系模式的三元组,能够对图谱中的知识进行更充分的表达。

2 相关工作

知识图谱特征表达通常用“嵌入”的方式表示知识的语义信息。嵌入就是用空间中的低维向量表示知识三元组中的实体和关系。而根据三元组关系特点的不同,通常分为对称、不对称、逆、组合四种关系模式。不同模式的三元组在调换头实体和尾实体的位置后,有的关系会发生变化,有的则不会。特别的是,组合关系模式由三个实体连接组成。为了表示不同关系模式的三元组,学术界提出了多种嵌入表示模型。

以 TransE 为例,它把实体和关系映射到同一个空间中,用嵌入(向量)表示实体和关系,它的思想是头实体嵌入在关系嵌入的平移作用下得到尾实体

嵌入,通过衡量平移后头实体和尾实体嵌入的距离判断三元组是否成立。然后进行多次迭代优化就会得到最后的三元组嵌入表示。虽然 TransE 的建模思想易于理解,但是表示的关系模式单一,因此更多改进的嵌入模型被用来提高表示三元组的能力。

根据模型不同的运算特点,可以分为如表 1 所示的几种嵌入模型,其中基于距离的模型是把关系看成是空间中的平移,特别是 RotatE 在复数空间建模,实现了距离类模型对四种关系模式的表示。基于语义匹配的模型把关系看作矩阵分解或空间中的旋转,其中的 QuatE 在四元数空间建模,实现了对非固定组合模式的建模,提升了表示四种关系模式的能力。基于距离和基于语义匹配的模型都使用了加法或者乘法的线性运算。而基于神经网络的模型使用了非线性运算,通过神经元学习实体和关系的特征,表 1 总结了不同类别嵌入模型的特点以及对应的代表模型。

表 1 嵌入模型的特点对比

模型分类	运算特点	建模思想	代表模型
距离模型	加法运算	向量平移	TransE, TransR
语义匹配模型	乘法运算	矩阵分解或 向量旋转	DistMult, QuatE TuckER
神经网络模型	非线性运算	提取特征	ConvE, ConEx, ConvKB, InteractE
旋转模型	加法和 乘法运算	向量旋转	TransE, TransR, RotatE
双曲几何模型	加法和 乘法运算	分层多关系	MuRP
胶囊网络	构造胶囊 网络	关系三元组 建模	CapsE

RotatE、QuatE 等模型在复杂空间的乘法运算上都表示出了强大的建模能力。因而可以考虑使用复杂空间的乘法组合来解决建模多关系模式的问题。但是 Hamilton 积与 Hamilton 积的组合计算复杂,模型负担过重。Hadamard 积与 Hadamard 积的组合不能对非固定的组合模式建模。需要考虑兼顾建模能力与模型负担的乘法组合方式。TuckER^[11]则使用了三元的 Tucker 分解,通过输出一个核心张量以及实体和关系的嵌入来学习嵌入,由于核心张量使得参数在不同关系之间共享,因此实现了多任务学习。

与只能挖掘实体之间线性关联的传统嵌入模型不同,神经网络模型可以通过匹配实体和关系的语义相似性,利用神经元的非线性运算得到实体与关系的更多关联特征。ConvE^[12]重构头部实体的嵌入和关系,通过二维卷积提取特征,最后利用卷积得到的特征与尾实体嵌入进行点积运算,进而判断三元

组的正确性。ComplEx、ConEx 等模型则进一步增强了过拟合训练的鲁棒性。ConvKB^[2]将头、尾实体与关系向量同时堆叠构造二维矩阵,与 ConvE 相比,ConvKB 保留了过渡特征。InteractE^[13]对 ConvE 进行了改进,采用最简单的堆叠方式构造二维矩阵的思路,通过特征置换、reshape 操作和循环卷积捕捉实体和关系间更多的交互。此外,一些图神经网络模型如 KE-GCN^[14]、M-GNN^[15]等在链路预测任务方面也取得了很好的效果。

综上所述,基于距离的知识图谱嵌入模型主要通过基本的向量运算挖掘知识的语义特征,构建原理简单,具有较好的解释性,可以更好地挖掘实体之间的线性关联,但是大多只能捕获浅层特征。而基于四元数的模型可以更好地捕捉实体和关系的潜在相互依赖关系,能较好地利用实体和关系的语义相似性,但构建过程复杂,并且缺少对实体和关系之间特征的表达。引入神经网络模型可以通过匹配实体和关系的语义相似性来获得更好的链接预测结果,但是缺少可解释性,对知识的特征表达仍然存在不足。要有效解决多关系模式的建模问题,需要结合上述模型。

3 方法

3.1 模型思想

ConvE 将卷积神经网络引入知识图谱嵌入领域,利用卷积神经网络提取特征的能力,得到实体和关系的嵌入表示。ConEx 又将建模过程由实数空间扩展到了复数空间,使模型的表示能力得到提升。

由于四元数更多的维度可以表达实体和关系更丰富的特征,并且四元数的 Hamilton 积具有建模四种关系模式的能力,本文思路是将建模过程由复数空间扩展至四元数空间,并选择更为合适的空间运算,进一步提高模型的性能。基于此,提出利用四元数与卷积神经网络构建嵌入模型 QuatCNNE (QuaternionCNN ComplexEmbedding)。

3.2 符号定义

定义 1. 给定知识图谱 $\mathcal{G} = \{(h, r, t)\} \subseteq \mathcal{E} \times \mathcal{R} \times \mathcal{E}$, 其中 $h, t \in \mathcal{E}, r \in \mathcal{R}$ 。 \mathcal{E}, \mathcal{R} 分别代表实体和关系的集合。

定义 2. 一个三元组表示为 (h, r, t) , h, r, t 分别表示头实体、关系、尾实体。

定义 3. e_h, e_r, e_t 对应表示头实体、关系、尾实体的嵌入(向量)表示。

定义 4. 给定一个三元组 (h, r, t) , 神经网络将实体 $h, t \in \mathcal{E}$ 和关系 $r \in \mathcal{R}$ 映射到四元数向量空间,

得到对应的四元数嵌入(向量)表示 $e_h, e_r, e_t \in \mathbb{H}^k$ 如下:

$$e_h = \{a_h + b_h \mathbf{i} + c_h \mathbf{j} + d_h \mathbf{k} : a_h, b_h, c_h, d_h \in \mathbb{R}^k\},$$

$$e_r = \{a_r + b_r \mathbf{i} + c_r \mathbf{j} + d_r \mathbf{k} : a_r, b_r, c_r, d_r \in \mathbb{R}^k\},$$

$$e_t = \{a_t + b_t \mathbf{i} + c_t \mathbf{j} + d_t \mathbf{k} : a_t, b_t, c_t, d_t \in \mathbb{R}^k\},$$

其中, \mathbb{R}^k 表示 k 维实数空间, \mathbb{H}^k 表示 k 维超复数空间。

3.3 QuatCNNEx 结构

在 QuatCNNEx 中将 e_h 和 e_r 拼接在一起, 依靠二维卷积提取它们的特征, 与图像应用领域中使用多个卷积层不同, QuatCNNEx 中只使用一层卷积, 因为过多的卷积层会造成三元组的特征丢失。

定义 5. 卷积。通过卷积核 ω 提取实体和关系的特征, 返回一个特征图张量 $\mathbf{P} \in \mathbb{H}^{c \times m \times n}$:

$$\mathbf{P} = [e_h, e_r] * \omega,$$

其中, $[\cdot]$ 代表对嵌入的拼接操作, $*$ 是卷积操作, ω 表示二维卷积核。通过 c 个卷积核的卷积操作得到特征图 \mathbf{P} 的数量为 c , 嵌入形状为 $m \times n$ 。随后将特征图张量 \mathbf{P} 重塑为向量 $vec(\mathbf{P}) \in \mathbb{H}^{cmn}$, 再利用一个可训练的投影矩阵 $\mathbf{W} \in \mathbb{H}^{cmn \times k}$, 将特征向量投影到 k 维的四元数空间。这一步可以理解为多个卷积核的卷积操作学习得到了实体和关系的特征, 再通过投影矩阵的乘法运算将不同的特征投影在了空间中的不同位置, 进而实现了不同特征的表达。具体操作为

$$e_c = f(vec(\mathbf{P}) \cdot \mathbf{W} + b),$$

其中, $vec(\cdot)$ 表示重塑操作, 使得嵌入矩阵 $\mathbf{P} \in \mathbb{H}^{c \times m \times n}$ 变换为 $\mathbf{P} \in \mathbb{H}^{cmn}$, b 是一个偏置量, $f(\cdot)$ 代表一个非线性整流函数。通过以上步骤, 可得到实体和关系在空间中的特征表示 $e_c \in \mathbb{H}^k$ 。

不同于一般的矩阵乘法, Hadamard 积实现了矩阵元素间的乘积。两个形状相同的矩阵进行 Hadamard 积运算, 其结果仍然是一个形状相同的矩阵。此前在 RotatE 的研究中表明, 在复数空间中, 头实

体嵌入与关系嵌入的 Hadamard 积代表了头实体嵌入在空间中的旋转, 实现了对四种关系模式的表示。受此启发, 本文在四元数空间中对实体和关系的特征 e_c 与头实体 e_h 进行 Hadamard 积乘法。

定义 6. Hadamard 积。通过矩阵中对应元素之间的乘积实现特征 e_c 对头实体 e_h 的加权, 从而使得头实体嵌入 e_h 具有了其对应关系的特征, 其过程可表示为

$$e_{ch} = e_c \circ e_h.$$

QuatE 的研究已经证明, 在四元数空间中, 头实体嵌入和关系嵌入的 Hamilton 积实现了对头实体嵌入的空间旋转, 由于可以同时包含平移和旋转操作, 将增强表示非固定组合模式三元组的能力^[7]。与 Hadamard 积基于固定轴的旋转不同, Hamilton 积是通过任意的旋转轴实现旋转, 因此 Hamilton 积实现的旋转拥有更多自由度。

定义 7. Hamilton 积。通过关系嵌入 e_r 对嵌入 e_{ch} 进行空间旋转。对此可理解为嵌入 e_{ch} 在 e_r 的作用下, 根据关系的不同特征在空间中进行旋转, 而关系的不同特征则表示为四元数空间中的任意旋转轴。其过程可表示为

$$e_{chr} = e_{ch} \otimes e_r^\triangleleft,$$

其中, e_r^\triangleleft 是对 e_r 单位化后的结果。最后将嵌入 e_{chr} 与尾实体嵌入 e_t 进行内积运算, 通过相似性匹配计算评分函数, 因此 QuatCNNEx 模型的评分函数可以写为

$$f_s(h, r, t) = e_c \circ e_h \otimes e_r^\triangleleft \cdot e_t.$$

QuatCNNEx 的主要特点是通过四元数嵌入的二维卷积以及矩阵乘法共同定义预测分数, 模型结构如图 1 所示。其中输入的实体和关系由四元数空间中的低维向量表示, 实体和关系之间的交互作用由神经网络中的卷积层和全连接层建模。

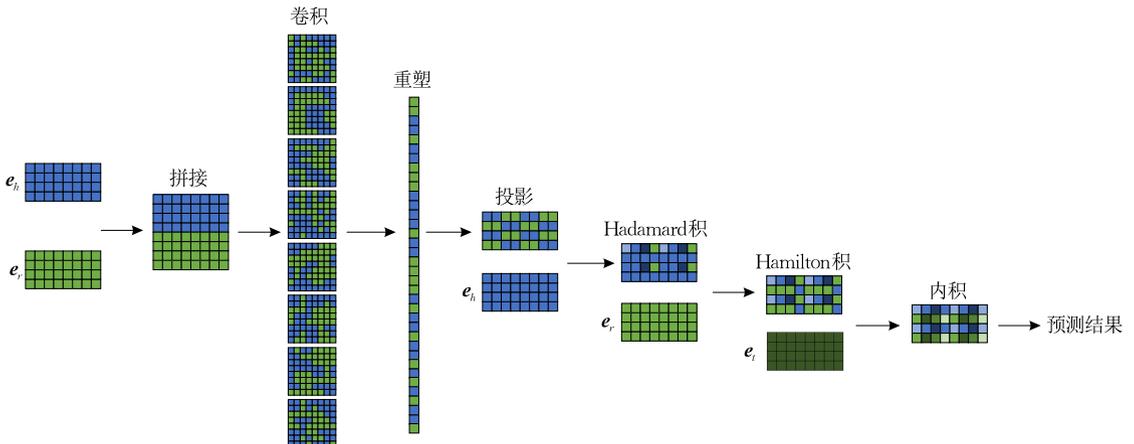


图 1 QuatCNNEx 结构示意图

卷积部分用于学习头实体和关系的特征,并在空间中投影后以嵌入的形式表示,然后特征嵌入和头实体进行 Hadamard 积乘法,使得头实体嵌入具有它对应关系的特征。而关系嵌入通过 Hamilton 积对头实体进行旋转,得到对应的尾实体嵌入表示。最后通过内积运算衡量嵌入表示的相似性。对以上过程进行多次迭代优化,就可以得到知识图谱中实体和关系的嵌入表示。

与现有主流嵌入模型的评分函数与参数信息对比如表 2 所示。

表 2 嵌入模型评分函数及参数对比

模型	评分函数	参数
TransE	$\ e_h + e_r - e_t\ _p$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
DistMult	$\langle e_h, e_r, e_t \rangle$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
ComplEx	$\text{Re}(\langle e_h, e_r, e_t \rangle)$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{C}^k$
ConvE	$f(\text{vec}(f([e_h; e_r] * \omega)) \cdot W) \cdot e_t$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
ConvKB	$f(\text{vec}(f([e_h; e_r; e_t] * \omega)) \cdot W)$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
CapsE	$\ \text{capsnet}(f([e_h; e_r; e_t] * \omega)) \ $	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
RotatE	$-\ e_h \circ e_r - e_t\ $	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{C}^k$
TuckER	$w \times_1 e_h \times_2 e_r \times_3 e_t$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{R}^k$
QuatE	$e_h \otimes e_r^\dagger \cdot e_t$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{H}^k$
ConEx	$\text{Re}(\langle \text{conv}(e_h, e_r), e_h, e_r, e_t \rangle)$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{C}^k$
QuatCNNEEx	$e_c \circ e_h \otimes e_r^\dagger \cdot e_t$	$e_h, e_r, e_t \in \mathbb{H}^k$

通过嵌入模型评分函数对比可知,将知识图谱建模在四元数空间的模型,可以通过四元数空间的任意旋转轴克服其他模型在表示组合模式时的不足,从而能表示图谱中的四种关系模式。

3.4 QuatCNNEEx 的训练与评估

文献[11]的研究表明,卷积在模型训练中往往要花费较长的时间,其中卷积的计算时间约占训练总时长的 75%~90%。因此,QuatCNNEEx 中考虑通过尽量减少卷积操作的次数来加快模型的计算速度,对于以链接预测任务进行评估的模型而言,通常用增加训练批次数量(batchsize)的方法来加快评估效率。但是这对于使用卷积的模型而言通常难以实现,其原因在于增加训练批次数后,模型对内存的需求会快速增长,而机器的 GPU 内存容量往往不能满足模型的计算需求。所以考虑通过改变评分策略来提高模型的计算速度。

一些模型使用 1-1 的评分策略,即每次选取一个 (h, r) 或 (h, t) , 以及一个 t 或 r , 然后进行评分。与这些模型不同,本文选取一个 (h, r) , 然后将它与所有的实体组合,并对得到的所有三元组同时进行评分,即 1-N 评分策略。该方法的优势是,在大型知识图谱上拥有更高的计算速度,使模型更快收敛。

基于此,在模型的训练阶段,QuatCNNEEx 使用

激活函数 Sigmoid: $\sigma(\cdot)$ 对最终的预测分数进行激活,得到相应的预测概率 $\hat{y}^{(i)} = \sigma(f_s(h, r, t))$, 使用 1-N 的评分策略计算所有实体的评分函数,同时最大限度的减少得分对数和真实标签之间的交叉熵损失。使用的损失函数为

$$L = -\frac{1}{|\mathcal{E}|} \sum_{i=1}^{|\mathcal{E}|} (y^{(i)} \log(\hat{y}^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - \hat{y}^{(i)})),$$

其中, $\hat{y}^{(i)} \in \mathbb{R}^{|\mathcal{E}|}$ 代表预测概率的向量,向量中的每一个元素为每个尾实体的预测概率, $y^{(i)} \in [0, 1]^{|\mathcal{E}|}$ 代表二元标签向量,1 代表相应的事实是存在的事实,否则相反。对于模型的评估阶段,选择得分较高的实体作为预测实体。

3.5 QuatCNNEEx 能力分析

QuatCNNEEx 的评分函数中包含了 QuatE 模型的核心组件: $e_h \otimes e_r^\dagger \cdot e_t$ 。因此 QuatCNNEEx 的评分函数可以改写为

$$f_s(h, r, t) = e_c \circ \text{QuatE}(h, r, t),$$

$$f_s(h, r, t) = \text{conv}(e_h, e_r) \circ \text{QuatE}(h, r, t)。$$

文献[6]已经证明了 QuatE 可以对对称、非对称、逆以及组合关系模式四种关系模式进行建模,并且证明了 QuatE 是 DistMult 和 ComplEx 的推广,在一定条件下 QuatE 可以变化为 DistMult 和 ComplEx。因此 QuatCNNEEx 同样可以对四种重要的关系模式进行建模。下面通过和 QuatE 的对比讨论 QuatCNNEEx 表示多关系模式的能力。

在对 QuatCNNEEx 的结构进行说明时,本文已经从空间中嵌入位置变化的角度阐述了 QuatCNNEEx 对特征的处理过程。下面以处理实体的一词多义现象为例,通过与 QuatE 进行对比,说明 QuatCNNEEx 表达特征的能力。

如图 2 所示,QuatE 的原理是通过头实体嵌入和关系嵌入的 Hamilton 积实现头实体嵌入的旋转。对于知识的一词多义现象而言,尽管同一个实体拥有不同的含义,但是同一个实体对应的关系往往是不同的。因此 QuatE 利用关系的不同特征使得实体在空间中旋转后的位置也不同,例如图中得到的预测尾实体 e_{t_1} 与 e_{t_2} 。尽管与同是旋转变换的 RotatE 相比,QuatE 借助 Hamilton 积的旋转优势实现了对三元组更好的嵌入表示,但是这样的旋转变化仍然有限,因此表达特征的能力是不足的。

与 QuatE 不同,QuatCNNEEx 拥有更多变化,对同一个头实体,由于关系的不同,卷积神经网络可以得到头实体和对应关系的特征 e_{c_1} 和 e_{c_2} , 当特征嵌入 e_{c_1} 和 e_{c_2} 与头实体嵌入 e_h 进行 Hadamard 积运算

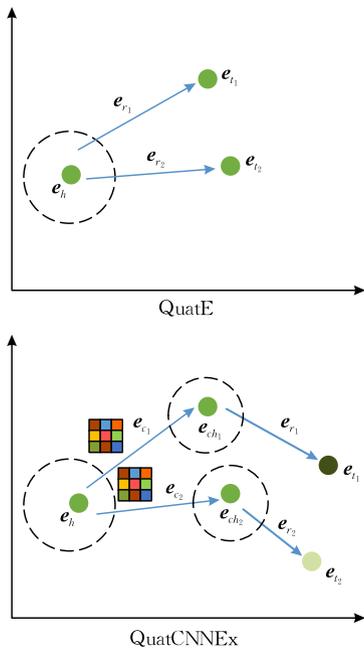


图2 QuatE与QuatCNNEEx的空间位置变换图

时,两个嵌入矩阵中的元素对应相乘,实现了 e_{c_1} 和 e_{c_2} 对头实体嵌入 e_h 进行的特征加权。从空间的角度理解: e_{c_1} 和 e_{c_2} 拥有不同的特征信息,对 e_h 进行特征加权后,使得空间中头实体嵌入 e_h 的位置发生不同的变化。之后两个不同的关系 e_{r_1} 和 e_{r_2} 通过Hamilton积分别实现对 e_{ch_1} 和 e_{ch_2} 的空间旋转,使得头实体嵌入的位置再次发生变化,进而得到预测尾实体 e_{t_1} 和 e_{t_2} 。QuatCNNEEx对空间中头实体嵌入的位置进行了两次改变,因此相比较于QuatE^[6],QuatCNNEEx拥有更多变化。同理,对于关系的复杂性而言,QuatCNNEEx在不同特征嵌入的影响下经过Hadamard积和Hamilton积的两次作用,仍然可以实现空间中嵌入位置的更多变化,因此QuatCNNEEx具有更强的特征表达能力。

以多关系模式的三元组(宋时轮,战友,毛泽东)与(宋时轮,上级,毛泽东)为例,分别用 (h_1, r_1, t_1) 与 (h_1, r_2, t_1) 表示。根据QuatE评分函数^[6]可得 $e_{h_1} \otimes e_{r_1}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$ 与 $e_{h_1} \otimes e_{r_2}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$,因此QuatE将(宋时轮,战友,毛泽东)与(宋时轮,上级,毛泽东)的关系表示为 $\otimes e_{r_1}^{\Delta}$ 与 $\otimes e_{r_2}^{\Delta}$ 。而根据QuatCNNEEx评分函数,可得 $e_{c_{11}} \circ e_{h_1} \otimes e_{r_1}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$ 与 $e_{c_{12}} \circ e_{h_1} \otimes e_{r_2}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$,因为Hamilton积不具有交换性,而Hadamard积是可交换性的,因此上面可改写为 $e_{h_1} \circ e_{c_{11}} \otimes e_{r_1}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$ 与 $e_{h_1} \circ e_{c_{12}} \otimes e_{r_2}^{\Delta} \cdot e_{t_1}$,所以QuatCNNEEx将它们的关系分别建模为 $\circ e_{c_{11}} \otimes e_{r_1}^{\Delta}$ 与 $\circ e_{c_{12}} \otimes e_{r_2}^{\Delta}$ 。相比而言QuatE仅将关系表示为对头实体的旋转。而QuatCNNEEx将关系建模为两

次乘积,不仅利用Hadamard积和Hamilton建模四种关系模式的优势,而且还利用了卷积从 $e_{c_{11}}$ 与 $e_{c_{12}}$ 中得到的头实体“宋时轮”和关系“战友”与“上级”的特征,因此在同时表示多关系模式的三元组时具有更强的能力。

因此,四元数更适合表示具有多关系模式的数据集,通过更有效地嵌入特征关系,对于知识图谱下游任务如推荐系统能够起到很好的辅助作用,例如:使用四元数表示用户、项以及知识图谱中的三元组,并利用QuatCNNEEx表达实体和关系的特征,能够为推荐模型提供更多的辅助信息。

4 实验与分析

4.1 实验数据集

在知识图谱嵌入领域,链接预测是用来衡量模型表示知识能力的重要任务,该任务常用的数据集包括FB15K^[3]、WN18^[3]、WN18RR^[12]与FB15K-237^[16]。其中,FB15K包含了大规模的常识性知识,其三元组数据格式为(头实体ID,关系,尾实体ID),关系模式分别为对称、非对称、逆。WN18里的实体是英文中的名词、动词、形容词和副词,关系则是这些英文词汇之间的语义关系。数据格式为(头实体ID,关系,尾实体ID),关系模式主要为对称、非对称、逆。

ConvE揭示了FB15K和WN18这两个数据集存在测试数据泄露的问题,即将训练集中的三元组 (h, r, t) 反转后得到 (t, r, h) ,从而得到大量的三元组作为测试集使用。为避免数据泄露影响实验结果,本节在实验中使用FB15K-237和WN18RR检验模型表示知识的能力,这两个数据集是由FB15K和WN18创建得到。为了确保评估数据集不存在反向关系测试泄露,它删除了其中所有的逆关系。主要关系模式为对称、非对称、组合。

数据集描述见表3,包括实体数量、关系数量以及训练集、验证集和测试集的三元组数量。表4包括了拆分后数据集的详细信息。从数据集特点来看,WN18RR的实体数量更多,关系数量更少。而FB15K-237的关系数量更多,实体数量更少,因此在该数据集上实验具有更大的挑战性。同时两个数据集也基本上能反映模型对不同特点数据处理的差异性。

表3 数据集描述 (单位:个)

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

表 4 数据集详细信息 (单位:个)

		三元组 总数	关系 种类数	实体平均 关系数
FB15K-237	训练	272 115	237	19.70
	验证	17 535	223	2.29
	测试	20 466	224	2.50
WN18RR	训练	86 835	11	2.20
	验证	3034	11	1.06
	测试	3134	11	1.05

4.2 评估指标

一般来说,知识图谱的嵌入模型会对一个三元组 (h, r, t) 进行合理性评估,得到相应的分数 $f_s(h, r, t)$: $\mathcal{E} \times \mathcal{R} \times \mathcal{E}$, 根据分数的排名或高低来分析三元组 (h, r, t) 是否应存储在知识图谱中。但是如果考虑到所有未知的三元组,需要对所有三元组组合情况进行评分,在大型知识图谱上是不现实的,如 FreeBase,而且有些三元组评分是无意义的,比如对于关系“Place-Of-Birth”的主语对应标签为“Person”的实体,可以过滤掉其他标签的实体^[17]。

现阶段的评价指标并不会考虑完备知识图谱的全部三元组,而是只考虑在测试集中出现的三元组,下面将针对现阶段使用的主要评测任务——链接预测任务进行介绍。

链接预测任务是基于知识图谱测试集中已经存在的事实 (h, r, t) 预测新的事实 (h', r', t') 是否存在,其中 $h', t' \in \mathcal{E}, r' \in \mathcal{R}$ 。这个任务通过评分函数 f_s 对 (h', r', t') 进行打分,其中正确的三元组将得到较高的分数,错误的三元组得到较低分数,然后对它们进行从高到低的排序,计算正确三元组 (h, r, t) 所在的位置排名。随后取平均值作为此三元组的最后排名。根据此方法对测试集中的三元组依次计算,得到位置排名序列 $\{rank_1, rank_2, \dots, rank_n\}$, 其中 n 为测试集的三元组个数。通常基于链接预测任务使用四种常用评估指标来验证模型的有效性,包括:

平均倒数秩排名 (Mean Reciprocal Rank, MRR), 针对查询返回正确实体的排名,该指标取排名倒数的平均值,值越高表示性能越好。

$$MRR = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{rank_i}.$$

命中前 N 指标 ($Hit@N$), 计算排名前 N 的实体中正确的实体所占的比例,值越高表示性能越好,该指标通常取 $N=1, 3, 10$ 对模型进行评估。

$$Hit@N = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(rank_i, N),$$

$$f(rank_i, N) = \begin{cases} 1, & rank_i \leq N \\ 0, & rank_i > N \end{cases}.$$

通过以上方式得到的结果名为“raw”,因为在随机替换时,得到的负例三元组可能会出现在测试集/验证集/训练集中,这种三元组不被认为是错误的,因此排名结果剔除假负例三元组,从而获得更加准确的评估结果,这种方式称为“filter”,本文在实验中对所有结果进行“filter”处理,保证结果的公平性。

4.3 实验设置

实验环境为操作系统 Linux64 位,独立显卡型号 NVIDIA GeForce GTX1080ti,显存 11GB。实验工具为 PyCharm, Python3.6 版本,深度学习框架 Pytorch1.0。

文献[17]表明,可以通过从大型超参数空间中探索相对较少的随机样本来发现模型配置。因此根据 WN18RR 验证集获得的 MRR 分数得到了 QuatCNNE_x 的最佳超参数配置,然后基于同样的参数配置评估了 QuatCNNE_x 在 FB15K-237 和 WN18RR 上的链路预测性能。

在实验中,将 QuatCNNE_x 与各种基线模型进行比较,其中平移距离模型包括 TransE、RotatE,语义匹配模型包括 DistMult、ComplEx、ConvE、QuatE、TuckER、ConvKB、InteractE 以及 ConEx,其他模型包括 MuRP、CapsE^[18]。

4.4 结果与分析

表 5 显示了本节模型与当前最优的模型在 WN18RR 和 FB15K-237 上的实验结果,最优结果用黑体表示,次优结果用下划线表示。由表 5 可知,在两个公开数据集的 8 个指标上,本节提出的 QuatCNNE_x 取得了 4 个指标的最优结果,3 个指标的次优结果,综合来看,具有更好的嵌入表示能力。具体分析,在 FB15K-237 上,QuatCNNE_x 在 MRR、Hit@3、Hit@1 三个指标上取得了较好结果,分别是 0.367、0.405、0.272,比 ConEx 和 QuatE 分别提高 0.3% 和 0.3%、0.5% 和 1%、0.4% 和 0.4%。在 Hit@10 上取得次优结果,比最优的模型低 0.2%。在 WN8RR 上 QuatCNNE_x 性能提升相对有限,与 QuatE 相比,QuatCNNE_x 在 MRR 指标上取得了同样的结果,在 Hit@3 和 Hit@1 两个指标上取得了次优结果,比 QuatE 低 0.6% 和 0.2%。在数据集 WN18RR 上,QuatCNNE_x 的结果与其他模型相比提升效果不明显。与神经网络模型 InteractE、ConvKB 相比,在 MRR、Hit@10 上均有大幅提升,与同类型

的卷积神经网络 ConEx 模型相比, QuatCNNE_x 在 *MRR*、*Hit@10* 和 *Hit@3* 上分别提升了 0.2%、0.5%、0.4%, *Hit@1* 下降了 0.2%。与同样使用四元数的语义匹配模型 QuatE 相比, QuatCNNE_x 在 *MRR* 上

取得了相同的结果, 在 *Hit@1* 上提升了 2.5%, 而在 *Hit@10* 和 *Hit@3* 上分别下降了 3.7% 和 0.6%。与双曲几何模型和胶囊模型相比也类似, 在 *MRR* 上有所提升, 在 *Hit@10* 上分别下降了 2.7% 和 1.4%。

表 5 WN18RR 和 FB15K-237 上链接预测的结果

模型	WN18RR				FB15K-237			
	<i>MRR</i>	<i>Hit@10</i>	<i>Hit@3</i>	<i>Hit@1</i>	<i>MRR</i>	<i>Hit@10</i>	<i>Hit@3</i>	<i>Hit@1</i>
TransE	0.226	0.501	—	—	0.294	0.465	—	—
DistMult	0.430	0.490	0.440	0.390	0.241	0.419	0.263	0.155
ComplEx	0.440	0.510	0.460	0.410	0.247	0.428	0.275	0.158
ConvE	0.430	0.520	0.440	0.400	0.335	0.501	0.356	0.237
RotatE	0.476	<u>0.571</u>	0.492	0.428	0.338	0.533	0.375	0.241
TuckER	0.470	0.526	0.482	0.443	0.358	0.544	0.394	0.266
QuatE	0.482	0.572	0.499	0.436	<u>0.366</u>	0.556	0.401	0.271
ConEx	<u>0.481</u>	0.550	0.493	0.448	<u>0.366</u>	<u>0.555</u>	<u>0.403</u>	<u>0.271</u>
MuRP	0.481	0.566	0.495	0.440	0.335	0.518	0.367	0.243
CapsE	0.415	0.559	—	—	0.150	0.356	—	—
InteractE	0.463	0.528	—	0.430	0.354	0.535	—	0.263
ConvKB	0.248	0.525	—	—	0.243	0.421	—	—
QuatCNNE _x	0.482	0.551	<u>0.496</u>	<u>0.447</u>	0.367	0.555	0.405	0.272

需要指出的是, QuatCNNE_x 计算采用了迭加 Hadamard 积和 Hamilton 积的方式, 模型复杂度增加了, 因而在相同实验环境下与对比模型相比, 训练时间也有所增加。

由表 3 可知, WN18RR 的实体数量更多, 关系数量更少, 而 FB15K-237 的关系数量更多, 实体数量更少。这说明与 WN18RR 相比, FB15K-237 中的三元组更加复杂, 关系更加多样, 因此在 FB15K-237 上得到较好的实验结果也更具挑战性。对比表中所有模型在两个数据集上的结果, 可以发现包含 QuatCNNE_x 在内, 多数模型在 WN18RR 上有较好的实验成绩。对比模型在关系模式较多的数据集 FB15K-237 上的表现却相对有限, 而本文模型取得了大部分最优的结果。因此, 这也说明多数模型对具有多条关系连接的三元组的嵌入表示能力不够理想, 而 QuatCNNE_x 对多关系模式的三元组表示能力更强。

此外, 尽管 QuatCNNE_x 在 WN18RR 上没有取得最优成绩, 但是仍然拥有和最优模型相当的表现。与 ConEx 相比, QuatCNNE_x 的嵌入表示能力更强。为验证 QuatCNNE_x 结合神经网络方法和四元数方法的优势, 本文对 ConEx、QuatE 和 QuatCNNE_x 在 WN18RR 上的表现进一步研究, 图 3 显示了 ConEx、QuatE 与 QuatCNNE_x 在 WN18RR 上每条关系的 *MRR* 得分情况, 横轴代表数据集中的每一条关系, 纵轴代表模型对每条关系建模的 *MRR* 分数。

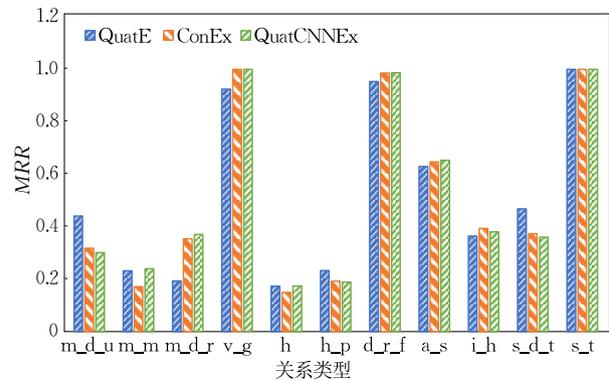


图 3 QuatCNNE_x 与 ConEx、QuatE 的 *MRR* 分数对比

表 6 为图 3 中关系缩写名对应的完整关系名称。由图 3 可以发现, 在 11 种关系中的 4 种关系: *m_m*、*m_d_r*、*a_s*、*h* 上, QuatCNNE_x 均存在优势。在 3 种关系: *v_g*、*d_r_f* 与 *s_t* 上, QuatCNNE_x 与 ConEx 具有相当的能力, 且优于 QuatE。表明论文

表 6 关系缩写名对应表

缩写词	关系名称
m_d_u	_member_of_domain_usage
m_m	_member_meronym
m_d_r	_member_of_domain_region
v_g	_verb_group
h	_hypernym
h_p	_has_part
d_r_f	_derivationally_related_form
a_s	_also_see
i_h	_instance_hypernym
s_d_t	_synset_domain_topic_of
s_t	_similar_to

提出的模型的确结合了 CNN 和四元数的优势, 是一种更为有效的嵌入模型。

总体而言, QuatCNNE_x 在两个数据集上的表现存在优势, 并且更适用于表示多关系模式的事实三元组。

为考察模型设计的合理性, 还测试了嵌入维数对 QuatCNNE_x 的影响。

如图 4 所示, 分别是 QuatCNNE_x 在六个不同嵌入维数下三个关键指标的变化, 横坐标表示了模型的嵌入维数, 纵坐标表示命中前 N 指标中正确实体所占的比例。其中, 图 4(a) 和图 4(b) 分别是在 FB15K-237 和 WN18RR 上的实验结果。由图 4(a) 可以发现, 随着嵌入维数的增加, 模型的命中比例逐渐增大, 在嵌入维数为 200 时有最佳结果, 之后略有下降。相比较而言, QuatCNNE_x 在 WN18RR 上的表现更加明显, 如图 4(b) 所示, 在嵌入维数为 100 时, 模型的三个命中指标取得最大值, 尤其是 $Hit@1$, 在维数由 50 变为 100 时, 增幅明显。因此, 结合表 3 中的实验结果, QuatCNNE_x 能在较低的嵌入维数下对实体和关系嵌入有较好的表示, 这体现出本文模型的设计合理性。TorusE^[19] 是在复杂空间(圆环面)建模的嵌入模型, 但是其嵌入维数为 10 000, 而使用两个关系嵌入的 PairRE^[20] 其嵌入维数也高达 1000, 这两个模型显然与嵌入模型的初衷是不符的, 因为嵌入模型意在将三元组嵌入到一个更低的维度空间进行知识表示, 而不是通过更高的维数来换取

嵌入性能的提高。

QuatCNNE_x 正确实体比例均在 60% 以下, 表明模型还可以进一步探索使用残差学习块增加卷积的深度, 以及找到更有效的模型集成组合。

5 结 论

本文提出了一种面向多关系模式表达的知识图谱嵌入模型, 该模型使用二维卷积和四元数嵌入的乘法组合来预测三元组。通过链接预测任务的实验, 结果表明 QuatCNNE_x 在 FB15K-237 和 WN18RR 的多个指标上有所改进, 并且该模型利用四元数和 CNN 的优势有效地捕获了实体和关系的更多交互特征, 并更好地预测了知识图中的未知知识, 进而提升了多关系模式知识表达能力。

未来的工作包括 3 个方面, 首先是进一步优化神经网络, 提高神经网络提取特征信息的能力, 并在链接的预测任务上实现模型的更好性能。其次, 使用应用数据进行测试, 以更好地测试模型的预测性能。最后, 将模型应用于推荐系统等下游任务以检测效果。

参 考 文 献

- [1] Zhang Tian-Cheng, Tian Xue, Sun Xiang-Hui, et al. Overview on knowledge graph embedding technology research. *Journal of Software*, 2023, 34(1): 277-311 (in Chinese) (张天成, 田雪, 孙相会等. 知识图谱嵌入技术研究综述. *软件学报*, 2023, 34(1): 277-311)
- [2] Rossi A, Barbosa D, Firmani D, et al. Knowledge graph embedding for link prediction: A comparative analysis. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data*, 2021, 15(2): 1-49
- [3] Bordes A, Usunier N, Garcia-Duran A, et al. Translating embeddings for modeling multi-relational data//*Proceedings of the 27th Annual Conference on Neural Information Processing Systems*. New York, USA, 2013: 1-9
- [4] Lin Y, Liu Z, Sun M, et al. Learning entity and relation embeddings for knowledge graph completion//*Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence*. Palo Alto, USA, 2015: 2181-2187
- [5] Yang B, Yih W, He X, et al. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases//*Proceedings of the International Conference on Learning Representations*. San Diego, USA, 2015: 1-12
- [6] Sun Z, Deng Z H, Nie J Y, et al. RotatE: Knowledge graph

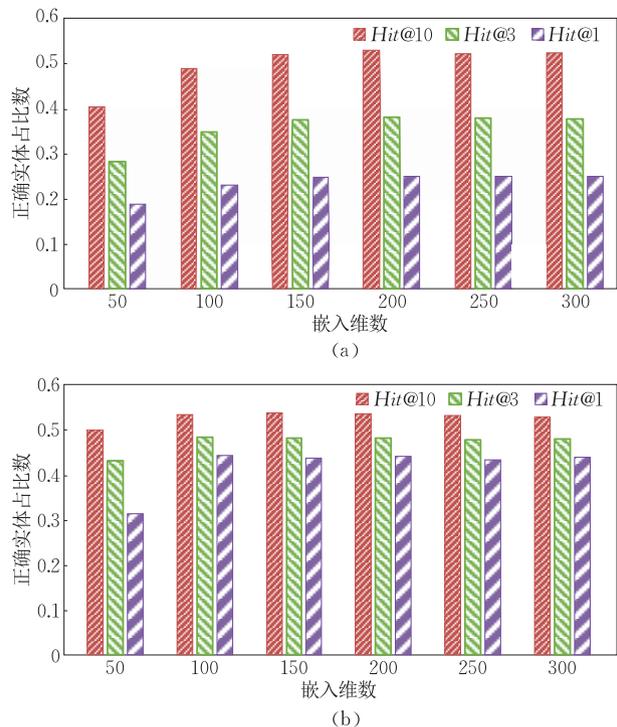


图 4 QuatCNNE_x 在不同嵌入维数的命中性能

embedding by relational rotation in complex space//Proceedings of the International Conference on Learning Representations. New Orleans, USA, 2019; 1-18

- [7] Zhang S, Tay Y, Yao L, et al. Quaternion knowledge graph embeddings//Proceedings of the 33rd Annual Conference on Neural Information Processing Systems. New York, USA, 2019; 2735-2745
- [8] Demir C, Ngomo A C N. Convolutional complex knowledge graph embeddings//Proceedings of the European Semantic Web Conference. Cham, Germany, 2021; 409-424
- [9] Trouillon T, Welbl J, Riedel S, et al. Complex embeddings for simple link prediction//Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning. New York, USA, 2016; 2071-2080
- [10] Parcollet T, Morchid M, Linares G. A survey of quaternion neural networks. *Artificial Intelligence Review*, 2020, 53; 2957-2982
- [11] Balažević I, Allen C, Hospedales T. Tucker: Tensor factorization for knowledge graph completion//Proceedings of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP). Hong Kong, China, 2019; 5185-5194
- [12] Dettmers T, Minervini P, Stenetorp P, et al. Convolutional 2D knowledge graph embedding//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. New Orleans, USA, 2018; 1811-1818
- [13] Vashishth S, Sanyal S, Nitin V, et al. InteractE: Improving convolution-based knowledge graph embeddings by increasing

feature interactions//Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. 2020, 34(3); 3009-3016

- [14] Yu D, Yang Y, Zhang R, et al. Knowledge embedding based graph convolutional network//Proceedings of the Web Conference 2021. New York, USA, 2021; 1619-1628
- [15] Wang Z, Ren Z, He C, et al. Robust embedding with multi-level structures for link prediction//Proceedings of the IJCAI. New York, USA, 2019; 5240-5246
- [16] Toutanova K, Chen D. Observed versus latent features for knowledge base and text inference//Proceedings of the 3rd Workshop on Continuous Vector Space Models and Their Compositionality. Beijing, China, 2015; 57-66
- [17] Ruffinelli D, Broscheit S, Gemulla R. You can teach an old dog new tricks! On training knowledge graph embeddings//Proceedings of the International Conference on Learning Representations. New Orleans, USA, 2020; 1-20
- [18] Niu G, Li B, Zhang Y, et al. CAKE: A scalable common-sense-aware framework for multi-view knowledge graph completion//Proceedings of the 60th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers). 2022; 2867-2877
- [19] Ebisu T, Ichise R. Generalized translation-based embedding of knowledge graph. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2019, 32(5); 941-951
- [20] Chao L, He J, Wang T, et al. PairRE: Knowledge graph embeddings via paired relation vectors//Proceedings of the 59th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 11th International Joint Conference on Natural Language Processing. 2021; 4360-4369



XIONG Wei, Ph. D., professor. His research interest focus on spatio-temporal big data management.

CHEN Hao, Ph. D., professor. His research interest focus on big spatio-temporal data.

SU Hong-Yu, M. S. His research interest focus on geographic knowledge graph

Background

In the era of Big Data, the rapid growth of spatio-temporal data has led to an explosion in information, resulting in the problem of information overload. On one hand, individuals struggle to quickly locate desired content within the vast amount of data available. On the other hand, some users are aware of what they seek but lack the ability to describe it adequately for search engines, leading to a consideration of recommending technologies to efficiently access valuable

information. Knowledge graphs encompass a substantial amount of knowledge in the form of nodes and edges, and knowledge graph embeddings can represent the semantic information of knowledge through vectors. Therefore, by combining knowledge graph embeddings to construct recommendation models, the knowledge contained within the graphs can be utilized to enhance the recommendation effect, thereby improving the efficiency of people's access to information.

This research was supported by the National Natural Science Foundation of China (No. U19A2058) and the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (No. 2020JJ4663). The goal of these projects is to better explore the potential of spatio-temporal big data. By enhancing the precision of knowledge representation, the successful deployment of knowledge graphs in downstream applications such as question answering systems, recommendation systems, and natural language processing can be facilitated. The paper proposes a novel embedding representation model to address the scarcity of research on the representation of multi-relational patterns in knowledge graph embedding. Subsequently, a recommendation model is constructed using the proposed embedding representation model to tackle the issue that existing recommendation

models utilize excessive knowledge graph information operations, resulting in an overburdened model.

A quaternion convolutional neural network-based embedding representation model is introduced. To address the limitation of existing embedding representation models in representing multi-relational pattern triads, the model is formulated in the quaternion space and employs a combination of convolutional neural network, Hadamard product, and Hamiltonian product operations to learn the knowledge contained within the knowledge graph and obtain the embedding representation of triads. Compared with other models in this domain, the proposed model exhibits superior performance in representing multi-relational pattern triads and can express more features within the knowledge graph.