类比推理增强的知识图谱嵌入

Zhen Yao[1*], Wen Zhang[1*], MingyangChen[2],Yufeng Huang[1],YiYang[4],HuajunChen[2,3,5†]

[1]浙江大学软件技术学院 [2]浙江大学计算机科学与技术学院[3]东海实验室，中国舟山 316021[4]华为技术有限公司[5]阿里巴巴—浙江大学前沿技术联合研究院{yz0204, zhang.wen, mingyangchen, huangyufeng, huajunsir}@zju.edu.cn
yangyi193@huawei.com,

arXiv:2301.00982v2 [cs.AI] 4 Feb 2023

摘要

知识图谱嵌入（KGE）将知识图谱中的实体和关系映射到连续向量空间，在预测知识图谱中的缺失链接方面取得了巨大成功。然而，知识图谱通常包含难以通过知识图谱嵌入进行归纳推理的不完整三元组。为应对这一挑战，我们采用类比推理，提出一种新颖且通用的自监督框架 AnKGE，通过类比推理能力增强知识图谱嵌入模型。我们提出了一种类比对象检索器，可从实体级、关系级和三元组级检索适当的类比对象。在 AnKGE 中，我们针对每个层级的类比推理训练一个类比函数，以训练良好的知识图谱嵌入模型的原始元素嵌入为输入，输出类比对象嵌入。为结合原始知识图谱嵌入模型的归纳推理能力与 AnKGE 增强的类比推理能力，我们将类比得分与基础模型得分进行插值，并在评分函数中引入自适应权重用于预测。通过在 FB15k-237 和 WN18RR 数据集上进行广泛实验，我们表明 AnKGE 在链接预测任务上取得了有竞争力的结果，并能有效执行类比推理。

1 引言

知识图谱（KG）以（头实体，关系，尾实体）的形式存储大量三元组，简写为（h，r，t），是表示事实知识的常用数据结构。Freebase（Bollacker 等人，2008）、WordNet（Miller，1994）、YAGO（Suchanek、Kasneci 和 Weikum，2007）以及 DBpedia（Lehmann 等人，2015）等许多知识图谱项目，是支持人工智能应用的重要基础。它们已成功应用于词义消歧（Bevilacqua 和 Navigli，2020）、问答（Yasunaga 等人，2021）和信息抽取（Hu 等人，2021）等下游应用，受到广泛关注。然而，大多数知识图谱并不完整，因此预测实体之间缺失的链接是知识图谱的一项基本问题这项任务称为链接预测。解决这一问题的常见方法之一是知识图谱嵌入（KGE）方法：将学习得到的实体嵌入和关系嵌入作为输入，通过预定义的三元组评分函数进行预测。已有许多知识图谱嵌入模型被提出，例如 TransE（Bordes 等人（2013））、DistMult（Yang 等人（2015））、RotatE（Sun 等人（2019））和 HAKE（Zhang 等人（2020））。这些方法在知识图谱补全任务中取得了巨大成功。

对于大多数知识图谱嵌入方法而言，参数化学习范式可被视为将训练数据当作一本书，并将预测缺失链接视为闭卷测试（Chen 等，2022），这属于归纳推理。然而，大型知识图谱往往包含不完整的三元组，难以通过应用记忆范式进行归纳推理。尽管如此，使用类比推理方法或许能很好地解决这一问题。这是因为类比推理是一种参照式方法，它通过检索相似的解决方案来解决新问题，类似于开卷考试。例如，大多数人似乎既记不住、甚至也不了解 Ron Wayne 创办了什么公司。然而，如果他们知道 Ron Wayne 和 Steve Jobs 是共同创始人，即在此语境下 Steve Jobs 和 Ron Wayne 是类比对象，并且众所周知 Steve Jobs 创办了苹果公司，那么他们就能通过类比推理得出 Ron Wayne 创办了苹果公司。

为了增强知识图谱嵌入的类比推理能力，需要解决三个问题：1）如何根据给定任务定义元素的类比对象？2）如何使模型能够将元素映射到类比对象？3）如何结合原始的归纳推理能力与增强后的类比推理能力?

我们提出了 AnKGE，这是一种新颖且通用的自监督框架，能够很好地解决这些问题，并增强训练良好的知识图谱嵌入的类比推理能力。针对问题1，我们认为类比对象能够很好地解决给定任务。受最近邻语言模型（Khandelwal 等，2020）的启发，我们提出了一种类比检索器，涵盖实体、关系和三元组层级这三个层级的对象。具体而言，我们将知识图谱嵌入的评分函数视为对三元组质量的评估，并将得分最高的替换三元组重新排序，选作合适的类比对象。针对问题

*这些作者贡献相同。

†通讯作者。版权所有 © 2023，人工智能促进协会（www.aaai.org）。保留所有权利。

题2，我们使用类比对象作为监督信号训练了一个投影函数。该函数将原始对象投影到合适的类比对象上。针对问题3，我们将类比得分与基础模型得分进行插值，从而结合原有的归纳推理能力与增强后的类比推理能力。此外，我们引入了自适应权重，以调整知识图谱补全任务中的类比推理。

最后，通过在 FB15k-237 和 WN18RR 数据集上进行链接预测实验，我们证明 AnKGE 具有很强的兼容性，且优于其他基线模型。据我们所知，AnKGE 是首个通过类比推理能力增强知识图谱嵌入的框架。

总而言之，本研究的贡献包括：

- 我们从类比推理的视角探讨知识图谱补全任务，并提出一种涵盖三个层次的有效检索方法，以获取恰当的类比对象。
- 我们提出了一种名为 AnKGE 的新型类比推理增强框架，可将原始对象映射到恰当的对象上以进行类比推理。据我们所知，AnKGE 是首个增强类比推理能力的知识图谱嵌入框架。
- 我们通过实验评估证明，所提出的 AnKGE 具有很强的兼容性，并在 FB15k-237 和 WN18RR 数据集上取得了具有竞争力的性能，展现出良好的实际应用前景。

2 相关工作

知识图谱嵌入 根据以往的研究（Zhang 等人（2022）），根据评分函数以及是否利用全局图结构，知识图谱嵌入方法可分为两类。第一类是传统知识图谱嵌入（C-KGEs），它们基于真实三元组在向量空间中采用几何假设，并以单个三元组作为输入进行三元组评分。传统知识图谱嵌入使用评分函数来衡量三元组的合理性。TransE（Bordes 等人（2013））是一种具有代表性的传统知识图谱嵌入方法，其评分函数为 $\|\mathbf{h}+\mathbf{r}-\mathbf{t}\|_2$。此外，还有许多旨在提升 TransE 性能的变体，例如 RotatE（Sun 等人（2019））、DistMult（Yang 等人（2015））和 HAKE（Zhang 等人（2020））。另一类是基于图神经网络的方法，它们使用从图中邻居聚合而来的实体和关系表示，而不是对其进行嵌入，以显式捕捉图模式。R-GCN（Schlichtkrull 等人（2018））是首个用于建模关系数据的图神经网络框架。它在聚合邻居时引入了关系特定变换。SE-GNN（Li 等人（2022））将三个层次的语义证据融入知识嵌入。请注意，SE-GNN 从语义证据视角引入的三个层次，与我们的三个层次类比对象并不相同。

增强型知识图谱嵌入框架 近年来，一些研究提出了若干框架和策略来提升知识图谱嵌入模型的性能，这些方法被称为增强型知识图谱嵌入，例如 CAKE（Niu 等人，2022）、PUDA（Tang 等人，2022）和 REP（Wang 等人，2022）。CAKE 是一种常识感知知识嵌入框架，能够利用带有实体概念的事实三元组自动提取常识，并生成常识增强项，以促进高质量的负采样。PUDA 是一种用于解决假负样本和数据稀疏性问题的数据增强策略。REP 是一种后处理技术，用于结合图上下文调整预训练知识图谱嵌入。我们的方法旨在通过类比推理能力增强一个训练良好的知识图谱嵌入模型，属于增强型知识图谱嵌入框架。

类比推理 在经典人工智能领域，类比推理曾是一个活跃的研究主题。然而，早期的类比研究计算模型（Gentner，1983；Turney，2008）主要聚焦于结构映射理论及其在结构映射引擎中的实现。近年来，一些研究者提出了 k 近邻语言模型（kNN-LM）（Khandelwal 等人，2020），该模型可以在测试时直接查询训练样例，也可视为神经语言处理领域中的类比推理模型。尽管这些模型效果显著，但它们通常需要在测试时从大型数据存储库中检索信息，从而大幅增加推理开销。在知识图谱领域，利用类比推理解决知识图谱不完整问题的研究尚付阙如。ANALOGY（Liu、Wu 和 Yang，2017）是首个用于对多关系嵌入中的类比结构进行建模的方法，但其性能并不理想。与我们的方法通过最近邻方法显式执行类比不同，ANALOGY 使用正规矩阵的交换约束来隐式建模类比关系。

3 类比对象检索器

在介绍我们的方法之前，本节首先介绍知识图谱和类比推理的背景，然后提出类比对象检索器，分别从实体级、关系级和三元组级检索合适的类比对象。检索到的类比对象将作为我们方法的监督信号。

背景 知识图谱表示为 $\mathcal{G}=(\mathcal{E},\ \mathcal{R},\ \mathcal{F})$，其中 $\mathcal{E}$ 表示实体集合，$\mathcal{R}$ 表示关系集合，而 $\mathcal{F}=\{(h,\ r,\ t)\}\subseteq\mathcal{E}\times\mathcal{R}\times\mathcal{E}$ 表示三元组事实集合。

类比推理长期以来一直是人工智能领域的研究主题，它将目标问题映射到一个已知的源问题，从而有效利用已知知识（Hall 1989）。将类比推理应用于知识图谱中的链接预测任务（$h,\ r,\ ?$）时，我们无需直接预测尾实体 t，而是可以通过已知的相似三元组（即训练数据集中的三元组）进行预测。我们认为，相似三元组由（$h,\ r,\ t$）的类比对象构成。具体而言，我们假设类比对象可能来自三个层面：头实体 h 部分的类比产生相似三元组（$h',\ r,\ t$）（实体级）；关系 r 部分的类比产生相似三元组

（h，r'，t）（关系级）；组合对（h，r）部分的类比 t 则产生相似三元组（h'，r'，t）（三元组级）。

因此，我们提出了三种检索器，以获取不同层级的类比对象。

实体级检索器 该检索器基于训练充分的知识图谱嵌入模型中预定义的评分函数 $f_{kge}(h,\ r,\ t)$ 设计，其中分数较高的三元组被认为为真实三元组的概率较高。受近邻语言模型（Khandelwal 等人，2020）的启发，我们替换三元组中所有可能的对象，并对替换三元组重新评分，将得分最高的作为合适的类比对象。给定一个三元组（$h,\ r,\ t$），实体级检索器会检索相似的真实三元组（$h',\ r,\ t$），用于实体级类比推理。例如，如果我们知道谢尔盖·布林和拉里·佩奇是共同创始人，就可以通过（$Larry\,Page,\ found,\ Google$）得出（$Sergey\ Brin,\ found,\ ?$ ）的答案是 $Google$。

具体而言，在实体级检索器中，我们首先用所有实体替换 h，从而得到 $|\mathcal{E}|$ 个替换三元组，然后将知识图谱嵌入模型评分最高的三元组视为相似三元组。我们将相似三元组中的头实体称为实体级检索器检索到的类比对象。因此，类比对象集合可表示为

$$\mathsf{E}_{N_e}^{hrt} = \{h_i \mid Top(\ \{f_{kge}(\mathbf{h_i}, \mathbf{r}, \mathbf{t}) \mid h_i \in \mathcal{E}\}\ )_{N_e}\}, \quad (1)$$

其中，$Top(\cdot)_k$ 表示所有输入中具有最高 k 值的 k 个元素，$f_{kge}(\cdot,\ \cdot,\ \cdot)$ 是知识图谱嵌入模型中预定义的评分函数，而 *hrt* 表示作为输入的特定三元组（$h,\ r,\ t$）。除非另有说明，为简洁起见，我们省略*hrt*，使用 E_{N_e} 代替 $E_{N_e}^{hrt}$。与直接从训练数据集中检索相似三元组相比，根据知识图谱嵌入的评分进行检索有助于克服知识图谱的不完整性。

关系级检索器 给定（$h,\ r,\ t$），关系级检索器会检索（$h,\ r',\ t$）用于关系级类比推理，因为知识图谱中存在上下文相似的关系。例如，公司的创始人通常是董事会成员。因此，$found$ 的关系级类比对象是 $board\ member$。与实体级检索器类似，关系级检索器得到的（$h,\ r,\ t$）的类比对象集合如下：

$$\mathsf{R}_{N_r} = \{r_i \mid Top(\ \{f_{kge}(\mathbf{h}, \mathbf{r_i}, \mathbf{t}) \mid r_i \in \mathcal{R}\}\ )_{N_r}\}. \quad (2)$$

三元组级检索器 给定 (h, r, t)，三元组级检索器会为三元组级类比推理检索 (h', r', t)。三元组级类比推理由实体级检索器和关系级检索器组合而成。例如，谢尔盖·布林是谷歌的创始人，而桑达尔·皮查伊是谷歌的首席执行官。因此，($SergeyBrin, found$) 的三元组级类比对象是 ($SundarPichai, CEO$)。实际上，在大多数知识图谱中，所有候选 (h', r') 对的数量高达数百万。为了降低检索候选对的成本，并受局部性原则的启发，我们通常分别选取三元组评分较高的 m 个实体和 n 个关系，然后将它们相互配对。因此，三元组级检索器得到的类比对象集合，即 (h', r') 对，是

$$\mathsf{T}_{N_t} = \{(h_i, r_i) \mid Top(\ \{f_{kge}(\mathbf{h_i}, \mathbf{r_i}, \mathbf{t}) \mid h_i \in \mathsf{E}_m, r_i \in \mathsf{R}_n\})_{N_t}\}. \quad (3)$$

4 方法论

本节将介绍一种新颖的知识图谱嵌入增强框架，称为类比增强知识图谱嵌入（AnKGE），它能够对第3节介绍的三个层次的类比推理进行建模。接下来，我们首先介绍类比函数的定义（第4.1节），以及如何利用类比对象对其进行训练（第4.2节和第4.3节）。最后，我们将介绍如何在知识图谱补全任务中结合原有的归纳推理能力和增强的类比推理能力（第4.4节）。

4.1 类比函数

给定一个训练充分的知识图谱嵌入模型 $\mathcal{M} = \{\mathbf{E}, \mathbf{R}\ f_{kge}, \Theta\}$，其中$\mathbf{E}$,$\mathbf{R}$ 和 f_{kge} 分别是 $\mathcal{M}$的实体嵌入表、关系嵌入表和评分函数，而 Θ 是其他参数的集合。AnKGE 通过一种称为类比函数 f的投影函数，增强 $\mathcal{M}$ 的类比推理能力。我们针对每个类比推理层级训练一个类比函数，以 $\mathcal{M}$ 中$\mathbf{E}$ 或$\mathbf{R}$ 的原始元素嵌入作为输入，并输出类比对象嵌入以进行链接预测。

具体而言，用于关系级类比推理的类比函数 f_{rel} 通过关系投影向量$\mathbf{v}_r^R \in \mathbb{R}^{d_r}$，将关系 r在 (h, r, t) 中的原始嵌入映射为类比嵌入，该向量

$$f_{rel}(r) = \mathbf{r_a} = \mathbf{v}_r^R \circ \mathbf{r}, \quad (4)$$

其中，d_r 是关系隐维度，$\circ$ 表示逐元素乘积。

类似地，用于实体级类比推理的类比函数 f_{ent} 将实体 h在 (h, r, t) 中的原始嵌入映射为类比嵌入。考虑到一个实体通常与多个关系相关联，我们将 f_{ent} 定义为：

$$f_{ent}(h, r) = \mathbf{h_a} = \mathbf{v}_h^E \circ \mathbf{h} + \lambda \mathbf{M}_{trans} \times \mathbf{v}_r^R \circ \mathbf{r}, \quad (5)$$

其中，$\mathbf{v}_h^E \in \mathbb{R}^{d_e}$ 是实体投影向量，d_e 是实体隐维度。$\mathbf{M}_{trans} \in \mathbb{R}^{d_e \times d_r}$ 表示变换矩阵，可将关系 r 纳入考虑。λ 是权重超参数。

三元组级类比推理的类比函数 f_{trp}根据知识图谱嵌入，将实体级与关系级的嵌入相结合，输出实体与关系对的类比嵌入，如下所示：

$$f_{trp}(h, r) = \mathbf{z_a} = g_{kge}\left(\mathbf{h_a}, \mathbf{r_a}\right), \quad (6)$$

$g_{kge}(\cdot,\cdot)$是知识图谱嵌入模型中的函数，它根据给定的关系嵌入，将头实体嵌入映射为尾实体嵌入。代表性知识图谱嵌入模型中的 $g_{kge}(\cdot,\cdot)$和 $f_{kge}(\cdot,\cdot,\cdot)$见附录A。

4.2 类比对象聚合器

为了增强框架在类比推理方面的鲁棒性，我们将按照第3节检索到的类比对象作为类比函数的监督信号。具体而言，我们使第4.1节中介绍的类比嵌入逼近知识图谱嵌入模型 $\mathcal{M}$中类比对象的加权平均值。

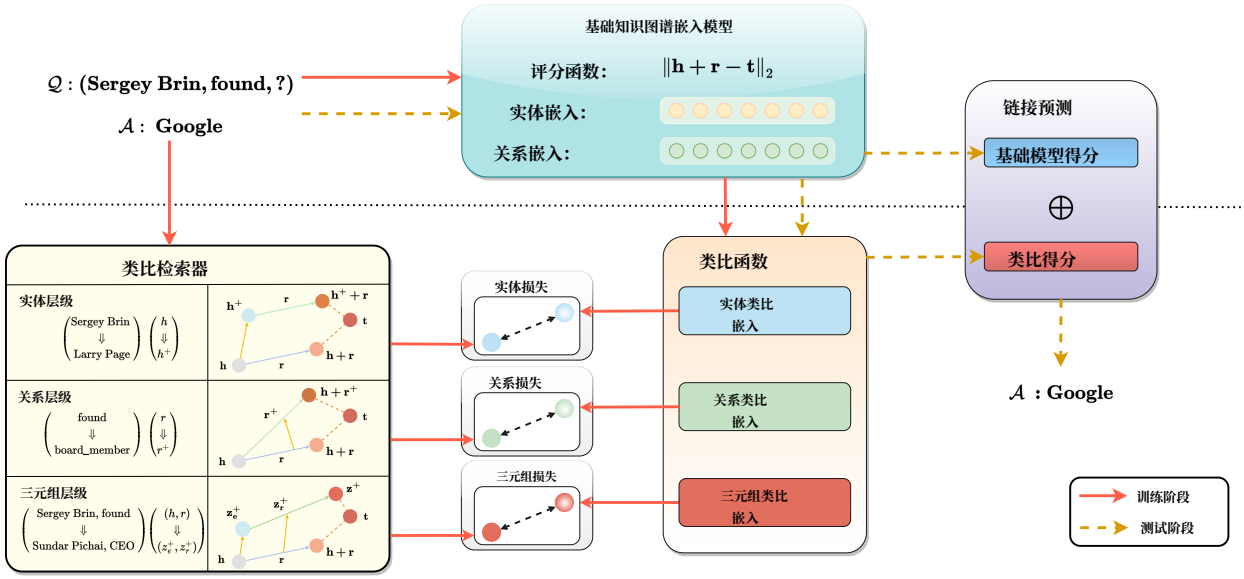

图 1：这是以 TransE 为基础模型的 AnKGE 结构图。为简化起见，我们将三个层级的类比对象数量设为 1。图的上半部分展示了基础模型模块。预定义的评分函数应用于学习得到的嵌入，以获得训练完成的模型。图的下半部分展示了 AnKGE 模块。首先，AnKGE 检索类比对象，用于训练类比函数。实线箭头表示 AnKGE 的训练过程。随后，AnKGE 通过插入类比得分重新调整预测排名。虚线箭头表示 AnKGE 的测试过程。

实体级和关系级的聚合嵌入分别记为 h^+ 和 r^+，计算如下

$$\mathbf{h}^+ = \sum_{h_i \in \mathsf{E}_{Ne}} \mathbf{h_i}\, \mathcal{S}(f_{kge}(\mathbf{h_i}, \mathbf{r}, \mathbf{t})), \tag{7}$$

$$\mathbf{r}^+ = \sum_{r_i \in \mathsf{R}_{Nr}} \mathbf{r_i}\, \mathcal{S}(f_{kge}(\mathbf{h}, \mathbf{r_i}, \mathbf{t})), \tag{8}$$

其中，$\mathcal{S}(\cdot)$是 Softmax 函数，可将包含K 个实数的向量转换为 K 种可能结果的概率分布，其形式为 $\mathcal{S}(c_i) = e^{c_i} / \sum_{k=1}^{K} e^{c_k}$。

三元组级聚合嵌入 z^+ 通过先分别聚合实体嵌入和关系嵌入，再计算组合嵌入得到，其形式如下：

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^+ &= g_{kge}\left(\mathbf{z}_\mathbf{e}^+, \mathbf{z}_\mathbf{r}^+\right), \\ \mathbf{z}_\mathbf{e}^+ &= \sum_{(h_i, r_i) \in \mathsf{T}_{Nt}} \mathbf{h_i}\, \mathcal{S}(f_{kge}(\mathbf{h_i}, \mathbf{r_i}, \mathbf{t})), \\ \mathbf{z}_\mathbf{r}^+ &= \sum_{(h_i, r_i) \in \mathsf{T}_{Nt}} \mathbf{r_i}\, \mathcal{S}(f_{kge}(\mathbf{h_i}, \mathbf{r_i}, \mathbf{t})). \end{aligned} \tag{9}$$

4.3 损失函数

类比函数的训练目标是缩小类比嵌入与分别依照第4.1节和第4.2节得到的聚合嵌入之间的距离。此外，考虑到 f_{kge} 对三元组真值具有先验作用，我们将类比三元组分数作为另一种监督信号。因此，给定一对类比嵌入 $\mathcal{X}_a$ 和三元组嵌入的聚合嵌入 $\mathcal{X}^+$ （$\mathbf{h}$，$\mathbf{r}$，$\mathbf{t}$），其损失函数为

$$\begin{aligned} &\mathcal{L}(\mathcal{X}, (\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t})) = \\ &\quad log\sigma\left(\gamma \left\|\mathcal{X}_a - \mathcal{X}^+\right\|_2 - f_{kge}(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t})\right), \end{aligned} \tag{10}$$

其中，γ 是损失函数的一个超参数，σ 是 Sigmoid 函数，$\|\cdot\|_2$ 是欧几里得范数。

然而，对于不同的三元组，三层类比推理的重要性并不相同。我们为三个层级的损失分别添加权重参数，最终的训练目标为[1]：

$$\begin{aligned} \min\ Loss = \sum_{(h,r,t) \in \mathcal{F}} &\big(\beta_E \mathcal{L}(\mathbf{h}, (\mathbf{h_a}, \mathbf{r}, \mathbf{t})) \\ &+\beta_R\, \mathcal{L}(\mathbf{r}, (\mathbf{h}, \mathbf{r_a}, \mathbf{t})) \\ &+\beta_T\, \mathcal{L}(\mathbf{z}, (\mathbf{h_a}, \mathbf{r_a}, \mathbf{t}))\big). \end{aligned} \tag{11}$$

因此，考虑到三个层级的不同贡献，我们引入 β_E、β_R 和 β_T 来调整梯度下降。三层损失函数的分布与类比三元组的得分正相关。由于篇幅限制，计算细节见附录B。

4.4 链接预测

对于测试集 $\mathcal{F}_{te}$ 中的测试三元组（h，r，t），我们沿用 kNN-LM（Khandelwal 等人，2020）的做法，将类比

[1]在梯度更新期间，原始模型的参数被冻结。

	FB15k-237				WN18RR			
	MRR	**命中率@1**	**命中率@3**	**命中率@10**	**MRR**	**命中率@1**	**命中率@3**	**命中率@10**
传统知识图谱嵌入								
TransE（Bordes 等人（2013））	0.317	0.223	0.352	0.504	0.224	0.022	0.390	0.520
ANALOGY（Liu、Wu 和 Yang，2017）	0.256	0.165	0.290	0.436	0.405	0.363	0.429	0.474
RotatE（Sun 等人（2019））	0.336	0.244	0.370	0.524	0.473	0.428	0.491	0.564
HAKE（Zhang 等人（2020））	0.349	0.252	0.385	0.545	0.496	0.452	0.513	0.580
Rot-Pro（Song、Luo 和 Huang，2021）	0.344	0.246	0.383	0.540	0.457	0.397	0.482	0.577
PairRE（Chao 等人，2021 年）	0.348	0.254	0.384	0.539	0.455	0.413	0.469	0.539
DualE（Cao 等，2021）	0.365	0.268	0.400	0.559	0.492	0.444	0.513	0.584
基于 GNN 的知识图谱嵌入								
R-GCN（Schlichtkrull 等人（2018））	0.249	0.151	0.264	0.417	-	-	-	-
A2N（Bansal 等，2019）	0.317	0.232	0.348	0.486	0.450	0.420	0.460	0.510
CompGCN（Vashishth 等，2020）	0.355	0.264	0.390	0.535	0.479	0.443	0.494	0.546
SE-GNN（Li 等人（2022））	0.365	0.271	0.399	0.549	0.484	0.446	0.509	0.572
增强型知识图谱嵌入								
CAKE（Niu 等人，2022）	0.321	0.226	0.355	0.515	-	-	-	-
PUDA（Tang 等人，2022）	0.369	0.268	0.408	**0.578**	0.481	0.436	0.498	0.582
REP（Wang 等人，2022）	0.354	0.262	0.388	0.540	0.488	0.439	0.505	**0.588**
AnKGE-HAKE（本文提出）	**0.385**	**0.288**	**0.428**	0.572	**0.500**	**0.454**	**0.515**	0.587

表1：链接预测结果　　分别在 FB15k-237 和 WN18RR 上。最佳结果以**粗体** 显示，次佳结果以下划线标示　e.

得分与基础模型得分进行插值，从而得到最终的评分函数：

$$Score(h,r,t) = f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t}) + \lambda_E f_{kge}(\mathbf{h_a},\mathbf{r},\mathbf{t}) + \lambda_R f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r_a},\mathbf{t}) + \lambda_T f_{kge}(\mathbf{h_a},\mathbf{r_a},\mathbf{t}) \quad (12)$$

其中，λ 是自适应权重参数，它会根据训练三元组动态调整类比权重。λ_E 与训练集中具有相同（r，t）的三元组数量成正比。λ_R 与训练集中具有相同（h，t）的三元组数量成正比。λ_T 与训练集中具有相同尾实体的三元组数量成正比。自适应权重参数的公式为[2]：

$$\begin{aligned}\lambda_E &= \min(|\{(h_i,r,t)\in\mathcal{F}\}|/N_e,1)\times\alpha_E,\\ \lambda_R &= \min(|\{(h,r_i,t)\in\mathcal{F}\}|/N_r,1)\times\alpha_R,\\ \lambda_T &= \min(|\{(h_i,r_i,t)\in\mathcal{F}\}|/N_t,1)\times\alpha_T,\end{aligned} \quad (13)$$

其中，α_E，α_R，α_T 是基本权重超参数。自适应权重利用训练数据集来判断测试三元组是否适合采用不同层次的类比推理。当所有层次的类比推理都不适用时，该评分函数会退化为基础知识图谱嵌入模型。事实上，AnKGE 通过类比推理重新调整基础模型中难以预测三元组的排名，从而提升预测性能。

5 实验

本节将介绍并分析实验结果。[3] 我们首先详细介绍实验设置。然后展示 AnKGE 与多种基础知识图谱嵌入模型的兼容性和有效性。此外，我们还通过消融研究进一步分析三级类比推理的效果。最后，我们开展案例研究，通过类比推理为知识图谱推理的解释提供一种新视角。

5.1 实验设置

数据集 我们在两个知名基准数据集 WN18RR 和 FB15k-237 上进行链接预测任务实验。WN18RR 和 FB15k-237 分别是 WN18 和 FB15k 的子集。先前的一些研究（Dettmers 等人（2018））指出，WN18 和 FB15k 存在测试集泄漏问题，即测试三元组会通过逆关系出现在训练数据集中。WN18RR 和 FB15k-237 是移除了逆关系后的修订版本。因此，我们使用 WN18RR 和 FB15k-237 作为实验数据集。这些数据集的统计详情汇总于附录 C。

评估协议 我们使用四种常用评估指标来评估知识图谱嵌入框架的性能：正确实体在整个实体集合中的排名倒数均值（平均倒数排名），以及正确实体排名位于前 1/3/10 的测试三元组所占的百分比（命中率@1、命中率@3、命中率@10）。对于一个测试任务（h，r，?）$\rightarrow t$，我们替换所有实体以生成损坏三元组。按照过滤设置协议，我们排除训练集、验证集和测试集中出现的其他真实三元组。最后，我们根据三元组分数对过滤后的损坏三元组进行排序。

实现细节我们基于四种具有代表性的知识图谱嵌入模型训练 AnKGE 框架：TransE（Bor-des 等人，2013年）、RotatE（Sun 等人（2019））、HAKE（Zhang 等人（2020））和 PairRE（Chao 等人，2021 年）。我们使用网格搜索来选择框架的超参数。我们搜索三个层级的类比对象数量 N_e，

[2]进行链接预测时，我们会添加反向关系来扩展数据集，并且只预测尾实体，这与同时预测头实体和尾实体的效果等同。每次预测都会使用所有实体替换尾实体。因此，不存在标签泄漏的风险。[3]我们的代码可在 https://github.com/zjukg/AnKGE 获取

	FB15k-237				WN18RR			
	MRR	**命中率@1**	**命中率@3**	**命中率@10**	**MRR**	**命中率@1**	**命中率@3**	**命中率@10**
TransE	0.317	0.223	0.352	0.504	0.224	0.022	0.390	0.520
AnKGE-TransE	**0.340**	**0.245**	**0.379**	**0.523**	**0.232**	**0.031**	**0.402**	**0.526**
RotatE	0.336	0.244	0.370	0.524	0.473	0.428	0.491	0.564
AnKGE-RotatE	**0.366**	**0.273**	**0.405**	**0.546**	**0.480**	**0.431**	**0.499**	**0.578**
HAKE	0.349	0.252	0.385	0.545	0.496	0.452	0.513	0.580
AnKGE-HAKE	**0.385**	**0.288**	**0.428**	**0.572**	**0.500**	**0.454**	**0.515**	**0.587**
PairRE	0.348	0.254	0.384	0.539	0.455	0.413	0.469	0.539
AnKGE-PairRE	**0.376**	**0.281**	**0.417**	**0.558**	**0.462**	**0.415**	**0.480**	**0.556**

Ta表2：AnKGE在FB15k-237和WN18RR不同模型上的表现。较好的结果以**粗体**表示。

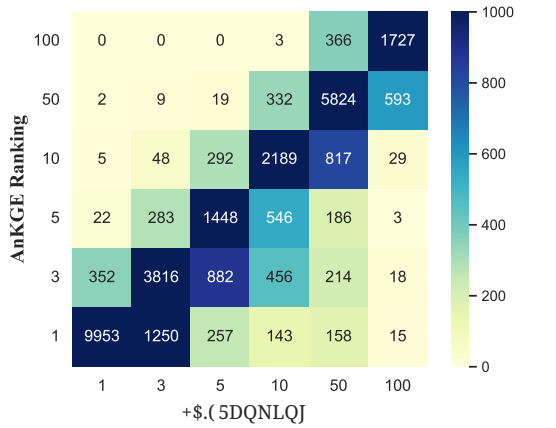

图2：AnKGE与FB15k-237上基础模型的排名比较。

N_r 和 $N_t \in \{1, 3, 5, 10, 20\}$，三个层级的基本权重 α_E、α_R和 $\alpha_T \in \{0。01、0.05、0.1、0.2、0.3\}$，学习率 $\alpha \in \{1e^{-3}, 1e^{-4}, 1e^{-5}\}$。公式（10）中的损失函数权重$\gamma$设为 10，公式（5）中的变换矩阵权重 λ 在 FB15k-237 和 WN18RR 上分别设为 1 和 0。在训练 AnKGE 之前，我们先从训练数据集中检索一次三个层级的类比对象。在训练和推理过程中，AnKGE 都基于原始模型的评分函数进行扩展。因此，AnKGE 与原始模型具有相同的模型复杂度。

5.2 链接预测结果

主要结果我们使用 HAKE（Zhang 等人（2020））作为 AnKGE 的基础模型，并与其他基线模型进行比较。基线模型分为三类：**传统知识图谱嵌入模型**包括 TransE（Bordes 等人（2013））、ANALOGY（Liu、Wu 和 Yang，2017）、RotatE（Sun 等人（2019））、HAKE、Rot-Pro（Song、Luo 和 Huang，2021）、PairRE（Chao 等人，2021 年）和 DualE（Cao 等，2021），**基于 GNN 的知识图谱嵌入模型**包括 R-GCN （Schlichtkrull 等人（2018））、A2N（Bansal 等，2019）、CompGCN（Vashishth 等，2020）和 SE-GNN（Li 等人（2022）），以及**增强型知识图谱嵌入框架**，包括 CAKE（Niu 等人，2022）、PUDA（Tang 等人，2022），以及 REP（Wang 等人，2022）。

模型	FB15k-237		WN18RR	
	MRR	命中率@1	MRR	命中率@1
AnKGE	**0.385**	**0.288**	**0.500**	0.454
不含实体级	0.384	**0.288**	0.497	0.451
不含关系级	0.349	0.253	**0.500**	**0.455**
不含三元组级	0.384	0.287	0.499	0.453
全部移除	0.349	0.252	0.496	0.452

表3：三个类比层级的消融研究，其中 w/o 表示从 AnKGE 中移除相应层级。

表1总结了 FB15k-237 和 WN18RR 上的实验结果。ANALOGY 的结果来自代码[4]。TransE、RotatE、HAKE 和 PairRE 的结果来自我们训练的模型。基础模型和 AnKGE 框架的训练细节见附录D。其他结果来自已发表的论文。可以看出，通过类比推理，AnKGE 增强了基础模型 HAKE 的类比推理能力；在大多数评估指标上，AnKGE 的表现优于基线模型。唯一例外是 Hit@10指标：AnKGE 的结果略低于 PUDA 和 REP，排名第二。总体而言，AnKGE 通过类比推理重新调整了 HAKE 中难以预测的三元组的排名，在两个数据集上均取得了最佳结果。

兼容性结果 AnKGE 是一种增强知识图谱嵌入模型类比推理能力的框架，它通过知识图谱嵌入模型中预定义的 f_{kge} 检索类比对象。从理论上讲，我们的框架适用于大多数为三元组定义了评分函数的知识图谱嵌入模型。我们选择了四种C-KGE模型：TransE、RotatE、HAKE 和 PairRE 作为基础模型，以验证兼容性。如表2所示，AnKGE 在所有指标上均显著优于基础模型。在 FB15k-237 上，平均倒数排名指标提升约 3%。这一结果表明，AnKGE 与多种知识图谱嵌入模型兼容。此外，基于 HAKE 的 AnKGE 在 FB15k-237 数据集上取得了更显著的提升。HAKE 通过使用实体的深度对不同层级的层级结构进行建模，使实体

[4]https://github.com/thunlp/OpenKE

	不完整三元组	类比对象	AnKGE Rank	原始 Rank
实体	(间脑，具有部分，？) →下丘脑	脑	**5**	25
	(休息，派生相关形式，？) → 呼吸	打瞌睡	**6**	38
	(屋顶，上位词，？) →防护罩	cap	39	**20**
关系	(猫科，成员部分，？) →豹属	具有部分	**5**	17
	(一角鲸科，成员部分，？) →白鲸属	上位词的反向关系	**1**	64
	(文学作品，上位词，？) →写作	具有部分	88	**18**
三元组	（提契诺，实例上位词，？） → 瑞士州	（瑞士，具有部分）	**8**	54
	（韩国，具有部分，？） → 仁川	（港口，实例上位词（反向））	**1**	31
	（初等几何学，上位词，？） →几何学	（构造，同义词集领域主题）	39	**12**

表4：类比推理案例研究。排名越好**加粗**。

具有层级结构，这更有助于类比推理。

与 WN18RR 相比，模型在 FB15k-237 上的提升更为显著，我们推测这是因为 FB15k-237 具有更丰富的关系模式，因此在关系级类比推理过程中有更大的提升。此外，AnKGE 旨在预测难以预测的三元组。FB15k-237 的整体准确率低于 WN18RR，因此模型的提升效果更加明显。

5.3 模型分析

排序研究 为了分析 AnKGE 的提升效果，我们在图2中比较了 AnKGE-HAKE 与原始 HAKE 在 FB15k-237 上的排名结果。横坐标表示 HAKE 模型的排名范围，纵坐标表示 AnKGE 的排名范围。我们发现，当排名高于 100 时，排名变化不太明显，因此我们选取排名在 100 以内的三元组，并将其划分为六个排名区间进行分析。对角线表示排名不变，右下方表示 AnKGE 的排名优于 HAKE，左上方则表示排名更差。我们发现有些三元组的排名变差了，但其数量远少于排名变好的三元组。此外，随着基础模型排名的提高，排名变化并不那么明显；基础模型排名越好，AnKGE 提升排名的可能性就越大。

消融研究 我们针对 AnKGE 的类比推理部分进行了消融实验。表3展示了 AnKGE-HAKE 在两个数据集上的消融研究结果。可以看出，除了 WN18RR 数据集上的关系级部分之外，移除任何一个部分都会降低模型的有效性。由于 WN18RR 中只有 11 个关系，因此很难检索到合适的关系级类比对象。我们将在案例研究中对此进行更详细的解释。此外，WN18RR 包含一个词典，其中的上下文词语能够自然地提供实体级类比对象，从而使模型在实体级类比推理方面更加有效。FB15k-237 的结果则恰恰相反。这可能是因为它具有丰富的关系模式，使关系级类比推理更加有效。

案例研究 类比推理可以为预测的三元组生成解释，这些解释对于实际应用十分有价值。我们的方法还为知识图谱推理的解释提供了类比视角。如表4所示，我们对类比推理进行了直观展示。对于每个层级，我们从 WN18RR测试集 中选取多个示例，并列出其对应的类比对象以及基于 RotatE 的预测结果。在实体级，思路是检索上位词或下位词作为类比对象。例如，间脑位于脑的核心部位。下丘脑属于脑这一事实提高了人们对预测结果的信任度。然而，如果下位实体成为类比对象，就会产生较差的解释和结果。例如，尽管帽子可以被视为屋顶的一种特殊类型，但它并不是防护罩。因此，误导性的解释（$cap, hypernym, protective\ covering$）降低了对预测结果的信任度，使正确答案的排名降至第39位。在关系级，AnKGE 倾向于检索概念上相似的关系，例如（$member\ meronym$）和（$has\ part$）。然而，WN18RR 中只有 11 个关系，这使得 AnKGE 有时会检索到不恰当的类比关系。例如，（$hypernym$）和（$has\ part$）是表示相反概念的关系，从而导致较差的解释和更低的排名。在三元组级，AnKGE 通常关注（h, r）对结构。作为证明，ticino 是瑞士的一个州，这意味着三元组（$switzerland, has\ part, swiss\ canton$）是很好的解释。然而，有时（$h, r$）对结构差异过大，会导致错误分类。

6 结论

本文采用类比推理来研究知识图谱补全任务。我们提出了一种类比对象检索器，可从实体级、关系级和三元组级检索合适的类比对象。随后，我们设计了一种新颖且通用的自监督框架，称为 AnKGE，用类比推理能力增强训练充分的知识图谱嵌入。我们的方法在知识图谱补全任务上取得了有竞争力的结果，并增强了类比推理能力。未来的研究方向包括探索更多类比模式，以及设计一种更通用的框架，以适用于基于 GNN 的知识图谱嵌入。

7 致谢

本研究由 NSFCU19B2027/91846204 资助。

参考文献

Bansal, T.; Juan, D.; Ravi, S.; and McCallum, A. 2019. A2N：面向知识图谱推理的邻居注意力机制。收录于*ACL (1)*，4387–4392。计算语言学协会。

Bevilacqua, M.; and Navigli, R. 2020. 突破 80% 玻璃天花板：通过纳入知识图谱信息，提升词义消歧的最先进水平。收录于*ACL*，2854–2864。计算语言学协会。

Bollacker, K. D.; Evans, C.; Paritosh, P. K.; Sturge, T.; and Taylor, J. 2008. Freebase：一个由协作创建、用于组织人类知识的图数据库。收录于 *SIGMOD*会议，1247–1250。ACM。Bordes, A.; Usunier, N.; Garc´ıa-Dur´an, A.; Weston, J.; and Yakhnenko, O. 2013年。用于多关系数据建模的平移嵌入。收录于*NIPS*，2787–2795。Cao, Z.; Xu, Q.; Yang, Z.; Cao, X.; and Huang, Q. 2021. 双四元数知识图谱嵌入。收录于*AAAI*，6894–6902。AAAI出版社。Chao, L.; He, J.; Wang, T.; and Chu, W. 2021. PairRE：通过成对关系向量实现知识图谱嵌入。收录于 *ACL/IJCNLP (1)*，4360–4369。计算语言学协会。Chen, X.; Li, L.; Zhang, N.; Tan, C.; Huang, F.; Si, L.; and Chen, H. 2022. 将关系抽取作为开卷考试：检索增强提示调优。收录于*SIGIR*，2443–2448。ACM。Dettmers, T.; Minervini, P.; Stenetorp, P.; and Riedel, S. 2018. 卷积二维知识图谱嵌入。收录于*AAAI*，1811–1818。AAAI出版社。Gentner, D. 1983. 结构映射：类比理论框架。认知科学，7(2)：155–170。Hall, R. P. 1989. 类比推理的计算方法：比较分析。人工智能，39(1)：39–120。Hu, Z.; Cao, Y.; Huang, L.; and Chua, T. 2021. 知识图谱和注意力如何发挥作用？对包级关系抽取的定性分析。收录于 *ACL/IJCNLP (1)*，4662–4671。计算语言学协会。Khandelwal, U.; Levy, O.; Jurafsky, D.; Zettlemoyer, L.; and Lewis, M. 2020. 通过记忆实现泛化：最近邻语言模型。收录于 *ICLR*。Open-Review.net。Lehmann, J.; Isele, R.; Jakob, M.; Jentzsch, A.; Kontokostas, D.; Mendes, P. N.; Hellmann, S.; Morsey, M.; van Kleef, P.; Auer, S.; and Bizer, C. 2015. DBpedia——从维基百科中提取的大规模多语言知识库。语义网，6(2)：167–195。Li, R.; Cao, Y.; Zhu, Q.; Bi, G.; Fang, F.; Liu, Y.; and Li, Q. 2022. 知识图谱嵌入如何外推至未见数据：语义证据视角。收录于*AAAI*，5781–5791

Liu, H.; Wu, Y.; 和 Yang, Y. 2017年。多关系嵌入的类比推理。载于国际机器学习会议，第70卷机器学习研究论文集，2168–2178页。PMLR。Miller, G. A. 1994年。WORDNET：英语词汇数据库。载于人类语言技术会议。Morgan Kaufmann。Niu, G.; Li, B.; Zhang, Y.; 和 Pu, S. 2022年。CAKE：一种可扩展的常识感知框架，用于多视图知识图谱补全。载于*ACL(1)*，2867–2877页。计算语言学协会。Schlichtkrull, M. S.; Kipf, T. N.; Bloem, P.; van den Berg, R.; Titov, I.; 和 Welling, M. 2018年。使用图卷积网络对关系数据建模。载于欧洲语义网大会，第10843卷计算机科学讲义，593–607页。施普林格。Song, T.; Luo, J.; 和 Huang, L. 2021年。Rot-Pro：通过投影对知识图谱嵌入中的传递性建模。载于神经信息处理系统大会，24695–24706页。Suchanek, F. M.; Kasneci, G.; 和 Weikum, G. 2007年。Yago：语义知识的核心。载于万维网大会，697–706页。ACM。Sun, Z.; Deng, Z.; Nie, J.; 和 Tang, J. 2019年。RotatE：通过复数空间中的关系旋转进行知识图谱嵌入。载于*ICLR (Poster)*。OpenReview.net。Tang, Z.; Pei, S.; Zhang, Z.; Zhu, Y.; Zhuang, F.; Hoehndorf, R.; 和 Zhang, X. 2022年。用于知识图谱补全的对抗式数据增强正例-未标记学习。载于国际人工智能联合会议，2248–2254页。ijcai.org。Turney, P. D. 2008年。潜在关系映射引擎：算法与实验。人工智能研究杂志，33：615–655。Vashishth, S.; Sanyal, S.; Nitin, V.; 和 Talukdar, P. P. 2020年。基于组合的多关系图卷积网络。载于*ICLR*。OpenReview.net。Wang, H.; Dai, S.; Su, W.; Zhong, H.; Fang, Z.; Huang, Z.; Feng, S.; Chen, Z.; Sun, Y.; 和 Yu, D. 2022年。用于知识表示学习的简洁有效的基于关系的嵌入传播。载于国际人工智能联合会议，2755–2761页。ijcai.org。Yang, B.; Yih, W.; He, X.; Gao, J.; 和 Deng, L. 2015 年。为知识库中的学习与推理嵌入实体和关系。载于*ICLR (Poster)*。Yasunaga, M.; Ren, H.; Bosselut, A.; Liang, P.; 和 Leskovec, J. 2021年。QA-GNN：使用语言模型和知识图谱进行问答推理。载于北美计算语言学协会人类语言技术会议，535–546页。计算语言学协会。Zhang, W.; Chen, X.; Yao, Z.; Chen, M.; Zhu, Y.; Yu, H.; Huang, Y.; Xu, Y.; Zhang, N.; Xu, Z.; Yuan, Z.; Xiong, F.; 和 Chen, H. 2022年。NeuralKG：用于知识图谱多样化表示学习的开源库。载于*SIGIR*，3323–3328页。ACM。Zhang, Z.; Cai, J.; Zhang, Y.; 和 Wang, J. 2020年。学习层次感知知识图谱嵌入以进行链接预测。载于*AAAI*，3065–3072页。AAAI出版社。

数据集	$\|\mathcal{E}\|$	$\|\mathcal{R}\|$	训练集	验证集	Test
FB15k-237	14,541	237	272,115	17,535	20,466
WN18RR	40,493	11	86,835	3,034	3,134

表5：数据集统计信息。Train、Valid 和 Test 分别表示训练集、验证集和测试集的大小。

A 知识图谱嵌入模型

我们可以将知识图谱嵌入模型分为两类：传统知识图谱嵌入模型和基于图神经网络的模型。从理论上讲，AnKGE 框架适用于大多数为三元组定义评分函数的传统知识图谱嵌入模型。为了展示 AnKGE 的有效性和兼容性，我们选择了四种具有代表性的传统知识图谱嵌入模型：TransE（Bordes 等人（2013））、RotatE（Sun 等人（2019））、HAKE（Zhang 等人（2020））和 PairRE（Chao 等人，2021 年），作为 AnKGE 的基础模型。表6展示了这些知识图谱嵌入模型中定义的$g_{kge}(\cdot,\ \cdot)$和 $f_{kge}(\cdot,\ \cdot,\ \cdot)$。我们将分别介绍这四种知识图谱嵌入模型。

TransE 是第一个提出潜在空间几何解释的知识图谱嵌入模型。TransE 模型受到 Word2vec 向量的启发，要求头实体嵌入与关系嵌入之和接近尾实体嵌入。通过平移，TransE 能够成功捕获词语之间的关系。然而，由于平移机制的局限，TransE 无法正确处理多对一、一对多和对称关系。

RotatE 要求 (**h**,**r**,**t**) 的嵌入属于 $\mathbb{C}^k$，并将关系嵌入视为复数潜在空间中的旋转向量。具体而言，复数分量表示沿该轴的旋转，而实数分量始终等于 1。研究表明，RotatE 的旋转机制能够正确建模多种关系模式，例如对称性、反对称性和反演。然而，RotatE 无法建模具有层级模式的关系。

HAKE 是一种层级感知知识图谱嵌入模型，它利用实体的深度对层级的不同层次进行建模。HAKE 将实体区分为两类：处于层级不同层次的实体，以及处于层级相同层次的实体，以此对语义层级进行建模。实验表明，HAKE 能够有效地对知识图谱中的语义层级进行建模。

PairRE 是一种能够同时编码复杂关系和多种关系模式的方法。该模型使用成对关系表示调整损失函数中的间隔，以适应不同的复杂关系。PairRE 捕捉关系向量之间的语义联系；研究已证明，这些关系向量能够编码三种重要的关系模式：对称性/反对称性、反演和组合。

B 损失权重

考虑到三个层级各自的不同贡献，我们引入 β_E、 β_R 和 β_T 来调整梯度下降。类似于 Softmax函数，首先，我们分别用三个层级的聚合嵌入替换原始元素嵌入，然后计算类比三元组得分与原始三元组得分的指数和，公式如下：

$$\begin{aligned}\mathcal{T} =& e^{f_{kge}(\mathbf{h}^+,\mathbf{r},\mathbf{t})} + e^{f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r}^+,\mathbf{t})} \\ &+ e^{f_{kge}(\mathbf{z}_\mathbf{e}^+,\mathbf{z}_\mathbf{r}^+,\mathbf{t})} + e^{f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t})}.\end{aligned} \tag{14}$$

公式（11）中损失函数的权重比为$\mathcal{T}$：

$$\begin{aligned}\beta_E &= e^{f_{kge}(\mathbf{h}^+,\mathbf{r},\mathbf{t})}/\mathcal{T}, \\ \beta_R &= e^{f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r}^+,\mathbf{t})}/\mathcal{T}, \\ \beta_T &= e^{f_{kge}(\mathbf{z}_\mathbf{e}^+,\mathbf{z}_\mathbf{e}^+,\mathbf{t})}/\mathcal{T}.\end{aligned} \tag{15}$$

最高的类比三元组分数意味着，将原始元素嵌入映射为聚合嵌入是必要的。如果原始三元组得分最高，则该三元组不应与其他对象进行类比。

C 数据集

我们在两个广泛使用的数据集 WN18RR 和 FB15k-237 上评估 AnKGE 框架。FB15k-237 来自 Freebase 知识图谱项目，其设计受到语义网和维基百科等广泛使用的信息社区的启发。FB15k-237 包含地点、媒体、地理和人物等信息。WN18RR 来自 WordNet 知识图谱项目，是一个描述英语单词之间关联的数据集。WN18RR 包含对称、非对称和组合关系等信息。这些数据集的统计信息见表5。

D 实现细节

首先，我们将四种知识图谱嵌入模型：TransE、RotatE、HAKE 和 PairRE 作为基础模型进行训练。在训练阶段，采用一种广泛使用的带自对抗训练的负样本采样损失函数：

$$\begin{aligned}L =& \log\sigma(\gamma_m - f_{kge}(\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t})) \\ &+ \sum_{i=1}^{n} p(h'_i,r,t'_i)\log\sigma(f_{kge}(\mathbf{h}'_i,\mathbf{r},\mathbf{t}'_i) - \gamma_m),\end{aligned}$$

其中， γ_m 是固定的间隔， σ 是Sigmoid函数，(h'_i, r, t'_i)是(h, r, t)的第 i个扰动负三元组，n 是负三元组的数量。此外， $p(h'_j,\ r,\ t'_j)$是该负三元组的自对抗权重。权重的计算方式为：

$$p(h'_j,r,t'_j) = \frac{\exp\alpha_{temp} f_{kge}(\mathbf{h}'_j,\mathbf{r},\mathbf{t}'_j)}{\sum_i \exp\alpha_{temp} f_{kge}(\mathbf{h}'_i,\mathbf{r},\mathbf{t}'_i)}$$

这是负采样三元组的概率分布，其中 α_{temp} 是采样的对抗温度。在训练和测试时，我们添加反向关系以

模型 $\mathcal{M}$	$f_{kge}(\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t})$	$g_{kge}(\mathbf{h}, \mathbf{r})$	参数
TransE	$-\|\mathbf{h}+\mathbf{r}-\mathbf{t}\|_1$	$\mathbf{h}+\mathbf{r}$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$
RotatE	$-\|\mathbf{h}\circ\mathbf{r}-\mathbf{t}\|_2$	$\mathbf{h}\circ\mathbf{r}$	$\mathbf{h}, \mathbf{r}, \mathbf{t} \in \mathbb{C}^k, \ \|r_i\|=1$
HAKE	$-\|\mathbf{h}_m\circ\mathbf{r}_m-\mathbf{t}_m\|_2 - \lambda\|\sin((\mathbf{h}_p+\mathbf{r}_p-\mathbf{t}_p)/2)\|_1$	$\text{Cat}[\|\mathbf{h}_m\circ\mathbf{r}_m\|_2, \lambda\|\sin((\mathbf{h}_p+\mathbf{r}_p)/2)\|_1]$	$\mathbf{h}_m,\mathbf{t}_m \in \mathbb{R}^k, \mathbf{r}_m \in \mathbb{R}^k_+, \mathbf{h}_p,\mathbf{r}_p,\mathbf{t}_p \in [0,2\pi)^k, \lambda \in \mathbb{R}^k$
PairRE	$-\|\mathbf{h}\circ\mathbf{r}^H-\mathbf{t}\circ\mathbf{r}^T\|_1$	$\mathbf{h}\circ\mathbf{r}^H$	$\mathbf{h},\mathbf{r},\mathbf{t} \in \mathbb{R}^k$

表6：知识图谱嵌入模型的详细信息，其中 $\|\cdot\|_1$ 表示绝对值范数，Cat $[\cdot]$ 表示向量拼接函数。

数据集	模型	嵌入维度	间隔	对抗温度	负样本样本	批次大小	逆关系
FB15k-237	TransE	500	9.0	1.0	256	1024	True
	RotatE	500	9.0	1.0	256	1024	True
	HAKE	1000	9.0	1.0	512	1024	True
	PairRE	1500	6.0	1.0	256	1024	True
WN18RR	TransE	500	6.0	1.0	256	2048	True
	RotatE	500	6.0	0.5	1024	512	True
	HAKE	500	6.0	0.5	1024	512	True
	PairRE	500	6.0	0.5	1024	512	True

数据集	模型	实体候选项 N_e	关系候选项 N_r	三元组候选。 N	实体 α_E	关系 α_R	三元组 α_T
FB15k-237	AnKGE-TransE	1	1	3	0.01	0.2	0.02
	AnKGE-RotatE	1	1	5	0.01	0.2	0.05
	AnKGE-HAKE	1	1	5	0.05	0.3	0.1
	AnKGE-PairRE	1	1	3	0.01	0.3	0.05
WN18RR	AnKGE-TransE	1	1	20	0.01	0.3	0.3
	AnKGE-RotatE	1	1	3	0.1	0.05	0.1
	AnKGE-HAKE	1	1	3	0.1	0.05	0.1
	AnKGE-PairRE	1	1	3	0.1	0.05	0.2

表7：不同数据集上基础模型和 AnKGE 的超参数设置。

扩展数据集。具体而言，对于三元组 (h, r, t)，我们在数据集中添加一个新的反向三元组 (t, r^{-1}, h)。r^{-1} 表示 r的反向关系。在链接预测任务中，模型只预测尾实体，这相当于同时预测头实体和尾实体。

随后，我们使用 AnKGE 增强训练充分的知识图谱嵌入，使其具备类比推理能力。结果表明，AnKGE 在知识图谱补全任务上取得了有竞争力的结果，并增强了类比推理能力。公式（10）中的损失函数权重 γ 设为 10；公式（5）中的变换矩阵权重 λ 在 FB15k-237 和 WN18RR 上分别设为 1 和 0。我们使用网格搜索选择其他超参数，包括：实体候选项 N_e、关系候选项 N_r、三元组候选项N_t、实体 α_E、关系 α_R 和三元组 α_T。其他实验设置均相同。唯一的例外是 AnKGE-TransE 在 WN18RR 上的实验。我们使用固定权重参数而非自适应权重参数，并使用余弦相似度而非欧几里得范数。

此外，由于无需进行负采样，其内存占用和时间开销均低于基础模型，通常可以接受。

我们使用 PyTorch 实现所有模型，并在配备 24GB 随机存取存储器的 NVIDIA RTX3090 GPU 和拥有 40 个核心、主频为 2.40GHz 的 Intel(R) Xeon(R) Silver 4210R CPU 上运行实验。基础模型和 AnKGE 的超参数设置如表 7 所示。