

基于关系结构感知增强的知识图谱规则挖掘方法

徐会亲¹, 黄琪¹, 章程¹, 刘祥棋², 罗文兵¹, 王明文^{1,2,*}

¹江西师范大学, 计算机信息工程学院, 江西, 南昌, 330022

²江西师范大学, 数字产业学院, 江西, 上饶, 334000

Email: {1052909089, 1404266268}@qq.com,

{huangqi, lwb, xqliu, mwwang}@jxnu.edu.cn

摘要

知识图谱推理 (KGR) 旨在通过对知识图谱中蕴含的逻辑规则进行挖掘和应用, 进而推断和发现新事实。该任务广泛应用于智能问答、语义搜索和推荐系统等领域。近年来, 由于基于嵌入的知识图谱推理算法缺乏可解释性, 一些研究者开始研究基于规则的知识图谱推理方法。然而, 现有基于规则的推理方法在理解关系语义时难以处理关系之间的隐式关联信息且容易陷入局部最优解。为此, 本文提出了一种基于关系结构感知增强的规则挖掘模型ReSA。该方法通过构建关系图, 显式地建模关系之间的层次结构, 提高规则挖掘的效率。同时, ReSA还通过全局规则融合模块和相对关系编码器, 结合全局语义建模和局部结构建模, 增强模型对规则体整体逻辑的感知能力。实验表明, ReSA模型在WN18RR等数据集上取得了显著的性能提升, MRR指标相较于现有最新规则挖掘方法提升了4个百分点。

关键词: 知识图谱; 规则挖掘; 链接预测

A Relation Structure-Aware Enhanced Method for Knowledge Graph Rule Mining

Huiqin Xu¹, Qi Huang¹, Cheng Zhang¹,
Xiangqi Liu², Wenbing Luo¹, Mingwen Wang^{1,2,*}

¹School of Computer and Information Engineering, Jiangxi Normal University,
Nanchang, Jiangxi, 330022

²School of Digital Industry, Jiangxi Normal University,
Shangrao, Jiangxi, 334000

Email: {1052909089, 1404266268}@qq.com,

{huangqi, lwb, xqliu, mwwang}@jxnu.edu.cn

Abstract

Knowledge graph reasoning (KGR) aims to infer and discover new facts by mining and applying the logical rules contained in the knowledge graph. This task is widely used in fields such as intelligent question answering, semantic search and recommendation systems. In recent years, due to the lack of interpretability of embedding-based knowledge graph reasoning algorithms, some researchers have begun to study rule-based knowledge graph reasoning methods. However, existing rule-based reasoning methods have difficulty in handling implicit association information between relations when understanding relational semantics and are prone to fall into local optimal solutions. To this end, this paper proposes a rule mining model ReSA based on relational structure perception enhancement. This method improves the efficiency of rule mining by constructing a relational graph and explicitly modeling the hierarchical structure between

* 通讯作者 Corresponding Author

©2025 中国计算语言学大会

根据《Creative Commons Attribution 4.0 International License》许可出版

基金项目: 国家自然科学基金(62266023, 62466028);江西省自然科学基金(20242BAB20045)

relations. At the same time, ReSA also enhances the model's perception of the overall logic of the rule body through a global rule fusion module and a relative relationship encoder, combined with global semantic modeling and local structure modeling. Experiments show that the ReSA model has achieved significant performance improvement on datasets such as WN18RR, and the MRR index has increased by 4 percentage points compared with the existing state-of-the-art rule mining methods.

Keywords: Knowledge Graph , Rule Mining , Link Prediction

1 引言

知识图谱 (Knowledge Graphs, KGs) 作为结构化知识的载体, 通过实体-关系-实体三元组的形式描绘了现实世界中物体、人、概念等之间的复杂关联 (Ji et al., 2021)。然而, 现有知识图谱普遍面临知识不完备的问题。例如, Freebase中超过76%的人物实体缺乏职业属性, 而Wikidata中仅有18%的关系标注了逆关系 (Berant et al., 2013)。因此, 对缺失知识图谱进行补全具有相当大的挑战性 (Xie et al., 2024)。知识图谱推理正是通过挖掘底层逻辑规则, 从已有事实中推断出一些新知识。该技术在智能问答 (Yih et al., 2016; 季晓慧 et al., 2024)、语义搜索 (Xiong et al., 2017) 等领域的广泛应用, 凸显了高效知识推理的重要价值。一些主流方法通过学习关系和实体的表示来补全知识图谱。例如, TransE (Bordes et al., 2013) 和 ComplEx (Trouillon et al., 2016) 等嵌入学习方法, 通过在向量空间中进行语义计算实现实体关系预测。然而, 这些方法在实际应用中往往不适用, 因为它们假设实体在训练和测试期间是固定的, 但现实世界中的实体和关系是动态的, 测试过程中可能会出现新的实体和关系, 这大大降低了推理性能。此外, 基于三元组的独立学习方式无法显式地捕获围绕查询三元组的局部结构, 而这些结构本可以作为知识图谱推理的重要证据 (Liang et al., 2024)。最近, 受到图神经网络 (GNN) 聚合局部信息能力的启发, GNN被引入到知识图谱中, 通过聚合邻居节点来更新实体的表示, 从而捕获子图结构 (Schlichtkrull et al., 2018)。例如, GraIL (Teru et al., 2020) 模型通过以候选三元组为中心节点构建局部封闭子图, 从而具备了对新兴实体的归纳能力。然而, 这类方法在有效性和效率方面仍面临挑战。近年来, 由于逻辑规则具有可解释性,

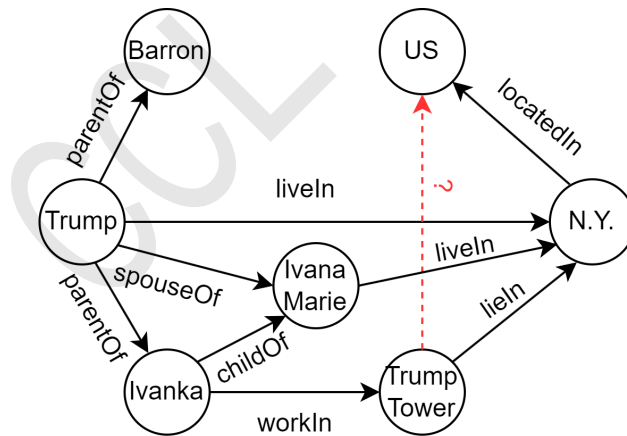


Figure 1: 知识图谱示例图

并且能够容易地泛化到新的任务、领域和数据, 基于逻辑规则的知识图谱推理方法受到了广泛关注。然而, 现有基于规则的推理方法存在一些问题, 给知识图谱推理带来了诸多挑战。一方面, 现有规则模型在理解关系语义时难以处理关系之间的隐式关联信息, 导致无法进行有效的传递性推理等。例如, 如图1所示, 基于已知事实 $lieIn(Trump\ Tower, N.Y.)$ 和 $locatedIn(N.Y., US)$, 我们可以轻松推断出 $locatedIn(Trump\ Tower, US)$ 。但是, 现有基于规则的模型通常无法正确学习到类似的规则: $locatedIn(X, Z) \leftarrow lieIn(X, Y) \wedge locatedIn(Y, Z)$ 。这主要是因为这些模型缺乏对关系层次结构的显式建模。

另一方面，现有规则模型由于受限于严格的逻辑形式，需要明确的规则表达，因而难以建模隐式的语义关联，容易陷入局部最优解，无法保证规则的顺序性和完整性。

针对上述问题，本文提出了一种基于关系结构感知增强的规则挖掘模型（Relation Structure-Aware, ReSA）。该模型首先将关系结构抽象为关系图，把原始知识图谱中的每个关系作为关系图中的节点，将实体之间的相对位置抽象为关系图中的边，定义了头对头、头对尾、尾对头、尾对尾四种类型的边。关系图能够有效发现不同关系之间的潜在模式，减少对实体的依赖，专注于关系之间的结构，提高规则挖掘的效率。此外，为避免局部最优问题，ReSA 提出了全局规则融合模块，通过整体感知规则的全局结构，利用自注意力机制生成全局语义向量，捕捉规则体的整体逻辑，同时结合四种交互的相对关系图，将信息传递给图神经网络（GNN），并同时将其注入门控机制，捕捉关系间的复杂交互模式，提高规则体的连贯性。最终，模型通过层次化递归注意力机制，逐步将长路径缩短为单一规则头，进行规则推理。

实验结果表明，ReSA 模型在多个数据集上的知识图谱补全任务中表现出色，相较于现有最新规则挖掘方法，其MRR 指标在WN18RR 数据集上提升了4 个百分点。这验证了ReSA 模型的有效性，证明了将关系结构感知增强应用于规则挖掘能够有效解决现有基于规则的推理方法所面临的问题。

综上所述，我们的贡献主要有以下几方面：

- 提出关系图结构，这是首次将关系固有的结构信息融入到规则挖掘过程中的模型。
- 为了进一步解决在规则挖掘过程中可能出现的局部最优问题，我们改进了原始LSTM的结构，在关系对融合的过程中先注入完整的规则信息，来提高模型的预测性能。
- 在多个数据集上的知识图谱补全实验验证了ReSA相对于最新规则挖掘方法的优越性，同时，ReSA可以获得推理可解释性的逻辑规则。

2 相关工作

2.1 基于嵌入的方法

基于嵌入的方法将知识图谱中的实体和关系映射到低维连续向量空间，并计算实体和关系之间的相似度来进行推理（刘知远et al., 2016）。主要方法有TransE (Bordes et al., 2013)、TransH (Wang et al., 2014)、CompIEx (Trouillon et al., 2017)、RotatE (Sun et al., 2019)、HousE (Li et al., 2022)等。这类方法简洁高效，但无法充分利用图的结构信息，并且推理结果缺乏可解释性。

2.2 基于图结构信息的方法

基于图结构信息的方法直接利用知识图谱的拓扑结构（如实体之间的连接路径、子图模式、邻居分布等）进行推理。主要有两类：基于全局子图和基于局部子图的方法。基于全局子图的方法如R-GCN (Schlichtkrull et al., 2018)、CompGCN (Vashishth et al., 2019)、KE-GCN (Yu et al., 2021)等能够处理复杂的知识图谱结构，但在大规模图谱上计算复杂，并且存在过平滑问题。为解决这些问题，基于局部子图的方法通过不同层次的图卷积或注意力机制，仅关注目标实体周围一定范围的领域信息，如NBFNet (Zhu et al., 2021)、RED-GNN (Zhang and Yao, 2022)、AdaProp (Zhang et al., 2023)、A*Net (Zhu et al., 2023)等方法能够适应不同复杂度的知识图谱结构，具有强大的表达能力，但仍然存在计算资源消耗大、未考虑图语义信息等问题。

2.3 基于规则的方法

基于规则的方法独立于实体，通过学习逻辑规则（如Horn子句）进行推理。例如Neural-LP (Yang et al., 2017) 与DRUM (Sadeghian et al., 2019)开创性地将规则学习纳入可微分计算范式中，实现规则模板生成与置信度评估的联合优化。IterE (Zhang et al., 2019) 与RNNLogic (Qu et al., 2020)则将逻辑规则建模为隐式表征空间中的潜变量，构建“规则生成-推理验证”的双阶段学习架构。NCRL (Cheng et al., 2023) 提出结构解耦策略，通过检测规则体中的最优子结构组合自底向上合成高质量规则头。基于规则的方法可解释性强泛化能力好，但缺乏对关系语义的理解无法处理关系之间的隐式关联。

3 问题描述

知识图谱被定义为 $G = \{E, R, F\}$, 其中 E 、 R 和 F 分别表示实体、关系和事实的集合。事实被描述为三元组的形式, 即 $(e_h, r, e_t) \in F$, 其中 $e_h, e_t \in E$, 它们之间的 $r \in R$ 。给定一个知识图谱 G , 知识图谱推理旨在利用已有的事实, 根据打分函数计算出查询事实 (e_h^q, r^q, e_t^q) 的可信程度。根据确实元素的类型, 一般分为三个子任务, 即头实体推理 $(?, r^q, e_t^q)$ 、尾实体推理 $(e_h^q, r^q, ?)$ 和关系推理 $(e_h^q, ?, e_t^q)$ 。本文研究的主要任务是关系推理, 即 $(e_h^q, ?, e_t^q)$ 。

一阶逻辑 (FOL) 规则中的Horn规则是由一组合取谓词和一个单一的中心语谓词组成的, 本文中我们感兴趣的是挖掘如下形式的链状Horn规则:

$$s(r_h, \mathbf{r}_b) : r_h(x, y) \leftarrow r_{b_1}(x, z_1) \wedge \dots \wedge r_{b_n}(z_{n-1}, y)$$

其中 $r_h(x, y)$ 称为规则头, $r_{b_1}(x, z_1) \wedge \dots \wedge r_{b_n}(z_{n-1}, y)$ 称为规则体, $s(r_h, \mathbf{r}_b)$ 是与规则相关的置信度分数。结合规则头和规则体我们将Horn规则记为 (r_h, \mathbf{r}_b) , 其中 $\mathbf{r}_b = [r_{b_1}, \dots, r_{b_n}]$

4 ReSA模型方法

ReSA模型是一种基于相对关系图的组合规则学习框架, 面对传统基于打分函数的逻辑规则学习方法中规则体与规则头孤立评估的问题。该模型通过全局语义建模与动态关系推理, 实现规则体对规则头的隐式高概率推导。如图2所示, ReSA模型的整体架构包括相对关系图构建、规则编码器、推理与注意力机制三个主要部分。

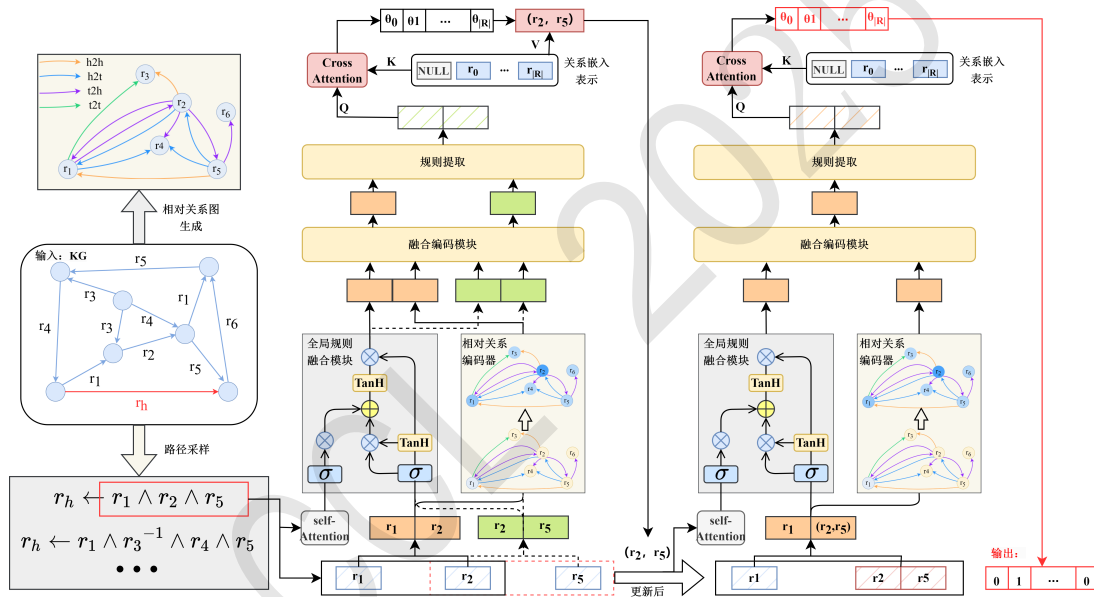


Figure 2: ReSA模型架构图

首先, 相对关系图的构建从原始知识图谱中抽取关系间的结构交互模式, 并将其转化为以关系为节点、四种基础交互类型 (h2h、h2t、t2h 和 t2t) 为边的图结构。这一过程通过显示编码关系间的交互, 捕获规则体和规则头之间的潜在关联, 避免因孤立打分导致的语义断裂。

其次, 规则编码器通过全局规则融合模块和相对关系编码器对规则体进行编码。全局规则融合模块利用全局语义向量增强模型对整体逻辑的感知能力, 相对关系编码器通过图神经网络 (GNN) 捕捉关系间的复杂交互模式。

最后, 推理与注意力机制通过融合编码和层次化递归注意力机制完成规则的推理和预测。模型通过动态调节语义和结构信息, 逐步将长路径缩短为单一规则头, 并通过交叉熵损失函数进行训练, 以最大化观察到的规则头的似然。

4.1 相对关系图构建

相对关系图的构建出从原始知识图谱中抽取出关系间的结构交互模式, 将其转化为以关系为节点、四种基础交互类型为边的一种图结构。通过显示的编码关系间的交互

(h2h、h2t、t2h和t2t)，来捕捉规则体和规则头之间的潜在关联，从而避免因孤立打分导致的语义断裂。同时，在长路径推理中，关系图可动态筛选有效子组合，保留高置信度的局部逻辑，从而提升规则体的连贯性。

给定知识图谱 $G = \{E, R, F\}$ ，首先将每个关系 $r \in R$ 及其逆关系 r^{-1} 作为关系图中的节点，形成节点集合 $\mathcal{R}' = \mathcal{R} \cup \{r^{-1} \mid r \in \mathcal{R}\}$ 。接着，通过分析原始图谱中三元组 (h, r, t) 的头尾实体连接模式。例如，若两个关系都从同一实体出发，那么这两个关系在相对关系图中通过h2h相连。为高效构建关系图 $A_r \in R^{(|R| \times |R| \times 4)}$ ，采用稀疏矩阵乘法技术，具体计算过程如公式1-4所示：

$$A_{h2h} = E_h^\top \cdot E_h \quad (1)$$

$$A_{h2t} = E_h^\top \cdot E_t \quad (2)$$

$$A_{t2h} = E_t^\top \cdot E_h \quad (3)$$

$$A_{t2t} = E_t^\top \cdot E_t \quad (4)$$

其中， E_h 为头实体-关系矩阵， E_t 尾实体-关系矩阵，分别记录头实体和尾实体与关系的关联。通过矩阵乘法生成四类邻接矩阵，最终合并得到 $A_r = [A_{h2h}, A_{h2t}, A_{t2h}, A_{t2t}]$ 。

4.2 规则编码器

规则编码器是ReSA模型的核心组件之一，负责将规则体的语义信息和结构信息进行编码，生成子规则的嵌入表示。其主要目标是通过结合全局语义建模和局部结构建模，增强模型对规则体整体逻辑的感知能力。

假设规则体表示为 $\mathbf{r}_b = [r_{b_1}, r_{b_2}, \dots, r_{b_n}]$ ，当滑动窗口为2时，子规则表示为 $e_i = [r_{b_i}, r_{b_{i+1}}]$ 。规则编码器通过全局规则融合模块和相对关系编码器分别对子规则的语义信息和结构信息进行建模，然后通过门控机制动态融合这两种信息，生成更全面的子规则嵌入表示。

4.2.1 全局规则融合模块

传统序列模型（如LSTM）在知识图谱规则推理中面临局部视野局限：其记忆单元仅依赖历史时间步的隐藏状态，难以捕捉长路径规则的整体逻辑结构。为此，本研究提出将规则体的全局语义向量深度融入序列建模过程，通过全局记忆引导机制增强模型对整体逻辑的感知能力。

首先，通过自注意力机制聚合子规则嵌入，生成反映规则体整体逻辑的全局向量，如公式5-6所示：

$$\mathbf{g} = \sum_{e_i \in \mathbf{r}_b} \alpha_i \mathbf{W}_g h_{e_i} \quad (5)$$

$$\alpha_i = \text{Softmax} \left(\mathbf{q}^\top \tanh(\mathbf{W}_a h_{e_i}) \right) \quad (6)$$

其中， h_{e_i} 为子规则的嵌入向量，由子规则中的关系级联得到， \mathbf{W}_a 、 \mathbf{W}_g 为参数矩阵， \mathbf{q} 为可学习查询向量。接着，将全局向量 \mathbf{g} 作为LSTM的初始记忆单元，并在记忆更新中持续注入全局信息，在时间步 t ，模型通过门控机制动态融合历史记忆 \mathbf{c}_0 与全局向量 \mathbf{W}_g ，具体如公式7-8所示：

$$\mathbf{c}_{t-1}^*(\mathbf{g}) = \lambda_t \mathbf{c}_{t-1} + (1 - \lambda_t) \mathbf{g} \quad (7)$$

$$\lambda_t = \sigma(\mathbf{W}_\lambda [\mathbf{h}_{t-1}^s, \mathbf{x}_t]) \quad (8)$$

其中, $\mathbf{c}_{t-1}^*(g)$ 表示将历史记忆 \mathbf{c}_{t-1} 与全局向量 g 进行动态融合。通过把子规则 e_i 中 r_{b_i} 的嵌入表示, 分别输入到改进后的LSTM中的输入 \mathbf{x}_t , 具体计算过程如公式9-14所示:

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{W}_f[\mathbf{h}_{t-1}^x, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_f) \quad (9)$$

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{W}_i[\mathbf{h}_{t-1}^x, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_i) \quad (10)$$

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{W}_o[\mathbf{h}_{t-1}^x, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o) \quad (11)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(\mathbf{W}_c[\mathbf{h}_{t-1}^x, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_c) \quad (12)$$

$$\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \odot \mathbf{c}_{t-1}^*(g) + \mathbf{i}_t \odot \tilde{\mathbf{c}}_t \quad (13)$$

$$\mathbf{h}_t^x = \mathbf{o}_t \odot \tanh(\mathbf{c}_t) \quad (14)$$

其中, \mathbf{f}_t 表示遗忘门, \mathbf{i}_t 表示输入门, \mathbf{o}_t 表示输出门, $\tilde{\mathbf{c}}_t$ 表示候选记忆单元, 我们用最后时间步的输出 \mathbf{h}_t^x 来表示子规则 e_i 的语义融合嵌入表示, 并且记为 $\mathbf{h}_{e_i}^x$ 。

4.2.2 相对关系编码器

在知识图谱规则推理任务中, 图神经网络 (GNN) 作为一种强大的工具, 被用于对子规则进行编码, 从而捕捉关系间的复杂交互模式。这一过程基于相对关系图的构建, 该图从原始知识图谱中抽取出关系间的结构交互模式, 将其转化为以关系为节点、四种基础交互类型 (h2h、h2t、t2h 和t2t) 为边的图结构。在子规则编码过程中, GNN 通过消息传递机制在关系图上进行信息传播, 从而捕捉关系间的复杂交互模式。我们定义了以下注意力机制具体计算公式, 具体计算公式如15所示:

$$\alpha_{ij} = \text{softmax} \left(\text{LeakyReLU} \left(\mathbf{W}_a \cdot [\mathbf{h}_i^{(l)}, \mathbf{h}_j^{(l)}] \right) \right) \quad (15)$$

其中, \mathbf{W}_a 为可学习的参数矩阵, $[A, B]$ 表示向量 A, B 拼接操作。通过这种方式, GNN 能够动态地调整对不同邻居节点的关注程度, 从而更有效地捕捉关系间的交互模式。

GNN 的每一层对关系节点进行更新, 通过聚合邻居节点的信息来更新当前节点的表示。具体而言, 这一过程可以表示为公式16所示:

$$\mathbf{h}_i^{(l+1)} = \sigma \left(\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \alpha_{ij} \cdot \mathbf{h}_j^{(l)} \right) \quad (16)$$

其中, $\mathbf{h}_i^{(l+1)}$ 表示第 l 层中节点 i 的隐藏状态, $\mathcal{N}(i)$ 表示节点 i 的邻居节点集合, α_{ij} 表示节点 i 和节点 j 之间的注意力权重, σ 为非线性激活函数。通过引入注意力机制来增强对关系交互的建模能力。最后, 我们通过最后一层的图神经网络嵌入来表示子规则的相对关系嵌入信息, 记为 $\mathbf{h}_{e_i}^g$ 。

4.3 推理与注意力机制

推理与注意力机制是ReSA模型的另一个核心组件, 负责将编码后的子规则进行推理和预测, 最终生成规则头。该部分通过融合编码和层次化递归注意力机制, 动态调节语义和结构信息, 逐步将长路径缩短为单一规则头。

4.3.1 融合编码

在我们的模型中, 子规则的编码是通过结合全局规则融合模块和相对关系图的图神经网络 (GNN) 来完成的。通过将这两种编码方式结合起来, 我们能够得到一个更全面、更丰富的子规则表示。具体来说, 我们首先通过全局规则融合模块建模得到子规则的编码, 然后通过相对关系图的GNN得到子规则的编码, 二者通过门控动态调节, 具体计算过程如公式17所示:

$$\mathbf{h}_{e_i}^f = \sigma(W_g[\mathbf{h}_{e_i}, \mathbf{h}_{e_i}^g]) \odot \mathbf{h}_{e_i}^s + (1 - \sigma(W_g[\mathbf{h}_{e_i}^s, \mathbf{h}_{e_i}^g])) \odot \mathbf{h}_{e_i}^g \quad (17)$$

其中 W_g 为可学习参数, σ 为Sigmoid函数, 动态平衡两类信息。

4.3.2 层次化递归注意力机制

通过借鉴NCRL (Cheng et al., 2023)的递归合并策略, 在将长路径逐步缩短为单一规则头的基础上, 我们进一步增强了子规则选择的语义和结构的联合优化。

我们用融合编码的嵌入表示来替换当前滑动窗口的嵌入表示, 并将该规则体中的所有子规则进行打分和排序选择出最好的子规则, 直到形成不可分割的子规则, 具体计算过程如公式18所示:

$$e_i = \text{softmax}([f(\mathbf{h}_{e_1}^f), f(\mathbf{h}_{e_2}^f), \dots, f(\mathbf{h}_{e_{n-s+1}}^f)]) \quad (18)$$

其中, $f()$ 表示打分函数, s 表示滑动窗口的大小, $\mathbf{h}_{e_i}^f$ 表示融合后的嵌入表示, e_i 表示得分最高的子规则, 在选择出组合后, 我们使用交叉注意力机制将选择的组合 \mathbf{w}_i 转换为单个关系表示。它能够通过注意力机制动态地调整对不同头关系的关注程度, 从而更有效地捕捉关系间的交互模式。具体实现如公式19所示:

$$\theta = \text{softmax}(\mathbf{w}_i \mathbf{W}_Q (\mathbf{H} \mathbf{W}_K)^\top / \sqrt{d}) \quad (19)$$

其中, \mathbf{W}_Q 和 \mathbf{W}_K 是可学习的参数矩阵, d 是嵌入维度。通过计算 \mathbf{w}_i 与每个头关系的语义一致性, 动态地调整对不同头关系的关注程度。并且根据注意力权重 θ , 计算新的组合表示如公式20所示:

$$\mathbf{w}'_i = \theta \mathbf{H} \mathbf{W}_V \quad (20)$$

其中, \mathbf{W}_V 是可学习的参数矩阵。根据注意力权重 θ , 将不同头关系的表示进行加权组合, 从而得到一个更准确的组合表示, 不断重复此过程直到最终预测规则头为止。

4.3.3 训练和规则提取

在训练阶段, 我们的目标是最大化观察到的规则头 r_h 的似然。为此, 我们使用交叉熵损失函数来训练模型。具体来说, 我们定义损失函数为公式21:

$$\mathcal{L} = - \sum_{(p, r_h) \in \mathcal{P}} \sum_{k=0}^{|R|} y_{r_h}^k \log \theta_p^k \quad (21)$$

其中, \mathcal{P} 是从知识图谱中采样的路径集合, y_{r_h} 是规则头 r_h 的one-hot 编码, θ_p 是路径 p 的注意力权重。这种交叉熵损失函数的设计动机在于, 它能够根据观察到的规则头 r_h 和模型预测的注意力权重 θ_p , 计算出模型的预测误差。通过最小化这个损失函数, 模型能够学习到更准确的规则头表示。

5 实验与分析

5.1 实验设置

5.1.1 数据集

我们采用了3个广泛使用的基准数据集来评估我们提出的模型, 它们分别是Kinship (Kok and Domingos, 2007)、WN18RR (Dettmers et al., 2018)、YAGO3-10 (Suchanek et al., 2007)。表1给出了这3个数据集的详细信息。

Table 1: 数据集统计情况

Dataset	Data	Relation	Entity
UMLS	5,960	46	135
WN18RR	93,003	11	40,943
YAGO3-10	1,089,040	37	123,182

5.1.2 评价指标

在知识图谱补全任务中，模型的目标是预测缺失的事实，即给定一个头实体和关系，预测尾实体，或者给定尾实体和关系，预测头实体。对于每个测试样本，模型会生成一个候选实体列表，并按照预测的置信度对这些候选实体进行排序。评价指标基于模型预测结果的排名来衡量其性能。

平均倒数排名(MRR) 是一个衡量模型预测准确性的指标，它计算的是所有测试样本的倒数排名的平均值。具体公式为：

$$\text{MRR} = \frac{1}{|Q|} \sum_{q \in Q} \frac{1}{\text{rank}_q}$$

其中， Q 是测试集中的所有查询样本， rank_q 是第 q 个查询样本的正确答案在预测结果中的排名。MRR值越高，表示模型的预测越准确。

Hits@N是另一个衡量模型预测准确性的指标，它计算的是在预测结果的前 N 个候选中包含正确答案的比例。具体公式为：

$$\text{Hits@N} = \frac{1}{|Q|} \sum_{q \in Q} \mathbb{I}(\text{rank}_q \leq N)$$

其中， \mathbb{I} 是指示函数，当条件成立时取值为1，否则为0。在本文中，我们让 N 取1和10的结果，分别表示正确答案是否出现在预测结果的第1位和前10位候选中。Hits@1衡量了模型预测最置信结果的准确性，而Hits@10则衡量了模型在较宽范围内的预测能力。

5.1.3 基线模型

在本次实验中，我们选取了两类基线模型进行对比：知识图谱嵌入（KGE）方法和基于规则学习的方法。知识图谱嵌入方法包括TransE (Bordes et al., 2013)、DistMult (Yang et al., 2014)、ComplEx (Trouillon et al., 2016)和RotatE (Sun et al., 2019)，这些方法通过将实体和关系映射到低维向量空间，并利用向量运算来建模和推理关系。其中，TransE通过向量平移来表示关系，DistMult利用双线性模型处理对称关系，ComplEx通过复数嵌入来捕捉更复杂的关系模式，而RotatE则通过旋转操作来建模关系，尤其擅长处理逆关系和对称关系。

基于规则的学习方法则包括RNNLogic (Qu et al., 2020)、RLogic (Cheng et al., 2022)、NCRL (Cheng et al., 2023)和Rule (Tang et al., 2024)，这些方法通过挖掘逻辑规则来进行推理，具有较强的可解释性。RNNLogic借助递归神经网络处理长路径规则，RLogic通过规则推理生成高质量的逻辑规则，而NCRL则采用结构解耦策略，自底向上合成高质量规则，进一步提升规则的泛化能力。Rule是一种结合规则嵌入和知识图谱推理的方法，通过将逻辑规则嵌入到知识图谱的表示中，提升了推理性能并增强了对隐式关系的捕捉能力。这些基线模型涵盖了从简单的向量空间建模到复杂的逻辑规则推理，为评估我们提出的ReSA模型提供了全面的对比基准。

5.1.4 实验设置或超参数

在本次实验中，我们对模型的训练和测试环境进行了精心配置，以确保实验结果的可靠性和高效性。我们使用了两台NVIDIA GeForce RTX 3090 显卡，每张显卡配备24GB 的显存，这为处理大规模知识图谱数据提供了强大的计算支持。实验环境基于PyTorch 框架搭建，充分利用了其高效的计算能力和灵活的模型构建特性。在超参数设置方面，我们统一将训练的epoch数设置为2000，以确保模型有足够的时间收敛。对于学习率，我们根据数据集的特点进行了差异化设置：在UMLS 数据集上，学习率设置为0.005，以适应其较小的规模和相对简单的结构；而在更具挑战性的WN18RR 和YAGO3-10 数据集上，学习率则调整为0.001，以实现更稳定的训练过程。嵌入层维度也因数据集而异，UMLS 设置为512，WN18RR 和YAGO3-10 设置为1024，以适应不同数据集的复杂性。图神经网络层数统一设置为2，以平衡表达能力和计算效率。

5.2 对比实验

实验结果展示了ReSA模型在多个数据集（UMLS、WN18RR、YAGO3-10）上的表现，相较于传统的知识图谱嵌入方法（KGE）和其他规则学习方法，ReSA在处理复杂推理任务时展现了一定的优势。实验结果如表2所示。

Table 2: 在数据集UMLS、WN18RR 和YAGO3-10 的实验效果

Methods	Model	UMLS			WN18RR			YAGO3-10		
		MRR	H@1	H@10	MRR	H@1	H@10	MRR	H@1	H@10
KGE	TransE	0.69	52.3	89.7	0.23	2.2	52.4	0.36	25.1	58.0
	DistMult	0.391	25.6	66.9	0.42	38.2	50.7	0.34	24.3	53.3
	ComplEx	0.41	27.3	70.0	0.44	41.0	51.2	0.34	24.8	54.9
	RotatE	0.74	63.6	93.9	0.47	42.9	55.7	0.49	40.2	67.0
Rule Learning	RNNLogic	0.75	63.0	92.4	0.46	41.4	53.1	-	-	-
	RLogic	0.71	56.6	93.2	0.47	44.3	53.7	0.36	25.2	50.4
	NCRL	0.78	65.9	95.1	0.67	56.3	85.0	0.38	27.4	53.6
	Rule	0.82	74.9	95.5	0.51	47.3	59.7	0.48	40.9	61.0
	ReSA	0.82	72.8	98.5	0.71	65.0	84.7	0.52	50.5	55.7

ReSA在UMLS和WN18RR数据集上取得了良好的实验效果，尤其在MRR和Hits@10指标上，表现出色。特别是在UMLS数据集上，ReSA的Hits@10高达98.5，明显超越了其他方法，这表明ReSA能够有效捕捉长路径推理和复杂的关系。ReSA在WN18RR数据集上的MRR为0.71，Hits@1为65.0，Hits@10为84.7，这些成绩也展现了其在高复杂度任务中的推理能力和准确性。另外在YAGO3-10数据集上其MRR,Hits@1指标也有显著提升，虽然在Hits@10指标上它没有优于RotatE，我们进行了多轮实验发现YAGO3-10实体规模较大，关系复杂，在训练过程中难以充分捕获潜在的关联。同时，该数据集部分关系稀疏，出现频率较低，进而导致预测出现频率低的关系时，Hits@10上的表现结果较差。而RotatE通过复数空间旋转建模对称/反对称等复杂关系，在链接预测任务（Hits@N）上天然具有优势。YAGO3-10作为典型的稀疏知识库，其长尾分布可能放大了这种差异。

与传统的KGE方法（如TransE和DistMult）相比，ReSA的表现更为稳定，尤其是在复杂的关系推理任务中。TransE和DistMult在这些数据集上的MRR较低，尤其在关系复杂度较高的任务中，它们的推理性能受到了一定限制。而ReSA通过结合规则学习与图结构信息，能够更好地捕捉隐式关系，提升推理精度。

尽管ReSA在YAGO3-10数据集上Hits@10指标上表现较差，但其MRR和Hits@1依然保持在较高水平，展示了其在多样化数据集上的适应性和稳定性。ReSA能够有效地结合全局语义建模和动态关系推理，提供了更加精确和广泛的推理能力。

总的来说，ReSA结合了规则学习与图结构信息，能够在多个数据集上提供优于传统嵌入方法和其他规则学习方法的推理性能，特别是在长路径推理和隐式关系建模上表现突出。这使得ReSA在知识图谱推理任务中具备了较强的优势和较高的应用潜力。

5.3 消融实验

为了验证我们模型的有效性我们在WN18RR和UMLS数据集上进行了一系列的消融实验，我们对ReSA模型进行了多种配置的测试，包括完整的ReSA模型以及分别移除关系图、全局规则融合模块、融合编码模块和层次化递归注意力机制的版本，以评估每个组件对模型性能的影响。

Table 3: WN18RR和UMLS数据集上的消融实验结果对比

Model	WN18RR			UMLS		
	MRR	H@1	H@10	MRR	H@1	H@10
Full Model (ReSA)	0.71	65.0	84.7	0.82	72.8	98.5
-w/o Relation Graph	0.67	59.7	84.1	0.78	70.6	98.3
-w/o Global Rule Fusion Module	0.69	62.5	84.5	0.79	71.9	98.4
-w/o Fusion Encoder	0.67	58.8	83.8	0.78	70.5	97.8
-w/o Hierarchical Recursive Attention	0.64	54.4	83.4	0.80	69.8	97.5

实验结果如表3所示，在WN18RR和UMLS数据集上进行的消融实验结果表明，ReSA模型的各个组件对整体性能均有显著贡献。以WN18RR数据集为例，移除关系图后，MRR下降至0.67，说明关系图对于捕捉关系间的层次结构和潜在模式至关重要，有助于模型更高效地挖掘规则。全局规则融合模块的移除导致Hits@1下降至62.5，表明该单元在增强模型对规则整体逻辑的感知能力方面发挥了作用，提升了推理的准确性。融合编码模块的移除使得MRR和Hits@10分别降至0.67和83.8，反映出该模块在整合语义和结构信息方面的重要性，对模型的综合性能有显著影响。层次化递归注意力机制的移除导致所有指标均有所下降，尤其是Hits@1降至54.4，这表明该机制在动态选择最优子规则和优化推理过程中发挥了作用，对于提升模型的推理效率和准确性不可或缺。

5.4 案例分析

在案例分析中，结果如表4所示。ReSA模型在UMLS、WN18RR和YAGO3-10数据集上生成的逻辑规则不仅语义清晰，而且形式多样，充分展现了模型的推理能力。例如，在UMLS数据集中，模型能够通过组合多个关系（如“complicates”、“consistsOf”和“connectedTo”）来推导出新的“locationOf”关系，体现了其捕捉复杂关系交互的能力。在WN18RR数据集中，模型生成的规则涉及逆关系和多跳关系（如“verbGroup”及其逆关系），进一步说明了其在处理复杂知识图谱时的高效性。而在YAGO3-10数据集中，模型生成的规则则展示了其在大规模数据集上生成高质量逻辑规则的能力。

Table 4: 案例分析中的逻辑规则

规则表示
UMLS:
$locationOf \leftarrow treats \wedge consistsOf^{-1}$
$locationOf \leftarrow prevents \wedge connectedTo^{-1} \wedge connectedTo$
$locationOf \leftarrow complicates \wedge consistsOf \wedge connectedTo \wedge consistsOf^{-1}$
WN-18RR:
$hypernym \leftarrow similarTo^{-1} \wedge verbGroup$
$hypernym \leftarrow hypernym \wedge DomainUsage \wedge memberMeronym^{-1}$
$hypernym \leftarrow verbGroup \wedge verbGroup^{-1} \wedge hypernym \wedge verbGroup$
YAGO3-10:
$isLocatedIn \leftarrow isLocatedIn \wedge isLocatedIn$
$isLocatedIn \leftarrow hasAcademicAdvisor \wedge isLocatedIn \wedge isLocatedIn$
$isLocatedIn \leftarrow hasGender^{-1} \wedge isLocatedIn \wedge actedIn^{-1} \wedge actedIn^{-1}$

6 总结

本文提出了一种基于关系结构感知增强的规则挖掘模型ReSA，用于提升知识图谱推理的性能。该模型通过构建关系图来显式地建模关系之间的层次结构，同时引入全局规则融合模块和融合编码器，结合全局规则语义建模与局部结构建模，增强对规则整体逻辑的感知能力。实验表明，ReSA模型在多个基准知识图谱数据集上取得了显著的性能提升，优于现有的最新规则挖掘方法。此外，通过相对关系编码捕捉关系间的复杂交互模式，利用结构建模增强逻辑感知能力。该模型不仅能够高效地挖掘规则，还能生成具有可解释性的逻辑规则，为知识图谱推理提供了更强大的工具。

参考文献

- Shaoxiong Ji, Shirui Pan, Erik Cambria, Pekka Marttinen, and Philip S. Yu. 2021. A survey on knowledge graphs: Representation, acquisition, and applications. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 33(2):494–514. IEEE.
- Jonathan Berant, Andrew Chou, Roy Frostig, and Percy Liang. 2013. Semantic parsing on freebase from question-answer pairs. In *Proceedings of the 2013 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*, pages 1533–1544.

- Ruzhong Xie, Ke Ruan, Bosong Huang, Weihao Yu, Jing Xiao, and Jin Huang. 2024. TSA-Net: a temporal knowledge graph completion method with temporal-structural adaptation. *Applied Intelligence*, 54(21):10320–10332. Springer.
- Wen-tau Yih, Matthew Richardson, Christopher Meek, Ming-Wei Chang, and Jina Suh. 2016. The value of semantic parse labeling for knowledge base question answering. In *Proceedings of the 54th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 2: Short Papers)*, pages 201–206.
- Chenyan Xiong, Russell Power, and Jamie Callan. 2017. Explicit semantic ranking for academic search via knowledge graph embedding. In *Proceedings of the 26th International Conference on World Wide Web*, pages 1271–1279.
- Antoine Bordes, Nicolas Usunier, Alberto Garcia-Duran, Jason Weston, and Oksana Yakhnenko. 2013. Translating embeddings for modeling multi-relational data. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 26.
- Ke Liang, Lingyuan Meng, Sihang Zhou, Wenxuan Tu, Siwei Wang, Yue Liu, Meng Liu, Long Zhao, Xiangjun Dong, and Xinwang Liu. 2024. Mines: Message intercommunication for inductive relation reasoning over neighbor-enhanced subgraphs. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 38, number 9, pages 10645–10653.
- Théo Trouillon, Johannes Welbl, Sebastian Riedel, Éric Gaussier, and Guillaume Bouchard. 2016. Complex embeddings for simple link prediction. In *International Conference on Machine Learning*, pages 2071–2080. PMLR.
- Théo Trouillon, Christopher R. Dance, Éric Gaussier, Johannes Welbl, Sebastian Riedel, and Guillaume Bouchard. 2017. Knowledge graph completion via complex tensor factorization. *Journal of Machine Learning Research*, 18(130):1–38.
- Rui Li, Jianan Zhao, Chaozhuo Li, Di He, Yiqi Wang, Yuming Liu, Hao Sun, Senzhang Wang, Weiwei Deng, Yanming Shen, and others. 2022. House: Knowledge graph embedding with householder parameterization. In *International Conference on Machine Learning*, pages 13209–13224. PMLR.
- Michael Schlichtkrull, Thomas N. Kipf, Peter Bloem, Rianne van den Berg, Ivan Titov, and Max Welling. 2018. Modeling relational data with graph convolutional networks. In *The Semantic Web: 15th International Conference, ESWC 2018, Heraklion, Crete, Greece, June 3–7, 2018, Proceedings*, pages 593–607. Springer.
- Komal Teru, Etienne Denis, and Will Hamilton. 2020. Inductive relation prediction by subgraph reasoning. In *International Conference on Machine Learning*, pages 9448–9457. PMLR.
- Antoine Bordes, Nicolas Usunier, Alberto Garcia-Duran, Jason Weston, and Oksana Yakhnenko. 2013. Translating embeddings for modeling multi-relational data. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 26.
- Mikhail Galkin, Xinyu Yuan, Hesham Mostafa, Jian Tang, and Zhaocheng Zhu. 2024. Towards Foundation Models for Knowledge Graph Reasoning. In *The Twelfth International Conference on Learning Representations*.
- Zhen Wang, Jianwen Zhang, Jianlin Feng, and Zheng Chen. 2014. Knowledge graph embedding by translating on hyperplanes. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 28, number 1.
- Zhiqing Sun, Zhi-Hong Deng, Jian-Yun Nie, and Jian Tang. 2019. Rotate: Knowledge graph embedding by relational rotation in complex space. *arXiv preprint arXiv:1902.10197*.
- Shikhar Vashishth, Soumya Sanyal, Vikram Nitin, and Partha Talukdar. 2019. Composition-based multi-relational graph convolutional networks. *arXiv preprint arXiv:1911.03082*.
- Donghan Yu, Yiming Yang, Ruohong Zhang, and Yuexin Wu. 2021. Knowledge embedding based graph convolutional network. In *Proceedings of the Web Conference 2021*, pages 1619–1628.
- Zhaocheng Zhu, Zuobai Zhang, Louis-Pascal Xhonneux, and Jian Tang. 2021. Neural bellman-ford networks: A general graph neural network framework for link prediction. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 34:29476–29490.

- Yongqi Zhang and Quanming Yao. 2022. Knowledge graph reasoning with relational digraph. In *Proceedings of the ACM Web Conference 2022*, pages 912–924.
- Yongqi Zhang, Zhanke Zhou, Quanming Yao, Xiaowen Chu, and Bo Han. 2023. Adaprop: Learning adaptive propagation for graph neural network based knowledge graph reasoning. In *Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, pages 3446–3457.
- Zhaocheng Zhu, Xinyu Yuan, Michael Galkin, Louis-Pascal Xhonneux, Ming Zhang, Maxime Gazeau, and Jian Tang. 2023. A* net: A scalable path-based reasoning approach for knowledge graphs. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 36:59323–59336.
- Fan Yang, Zhilin Yang, and William W. Cohen. 2017. Differentiable learning of logical rules for knowledge base reasoning. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30.
- Ali Sadeghian, Mohammadreza Armandpour, Patrick Ding, and Daisy Zhe Wang. 2019. Drum: End-to-end differentiable rule mining on knowledge graphs. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 32.
- Wen Zhang, Bibek Paudel, Liang Wang, Jiaoyan Chen, Hai Zhu, Wei Zhang, Abraham Bernstein, and Huajun Chen. 2019. Iteratively learning embeddings and rules for knowledge graph reasoning. In *The World Wide Web Conference*, pages 2366–2377.
- Meng Qu, Junkun Chen, Louis-Pascal Xhonneux, Yoshua Bengio, and Jian Tang. 2020. Rnnlogic: Learning logic rules for reasoning on knowledge graphs. *arXiv preprint arXiv:2010.04029*.
- Kewei Cheng, Nesreen K. Ahmed, and Yizhou Sun. 2023. Neural compositional rule learning for knowledge graph reasoning. *arXiv preprint arXiv:2303.03581*.
- Stanley Kok and Pedro Domingos. 2007. Statistical predicate invention. In *Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning*, pages 433–440.
- Tim Dettmers, Pasquale Minervini, Pontus Stenetorp, and Sebastian Riedel. 2018. Convolutional 2d knowledge graph embeddings. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 32, number 1.
- Fabian M. Suchanek, Gjergji Kasneci, and Gerhard Weikum. 2007. Yago: a core of semantic knowledge. In *Proceedings of the 16th International Conference on World Wide Web*, pages 697–706.
- Xiaojuan Tang, Song-chun Zhu, Yitao Liang, and Muhan Zhang. 2024. RuleE: Knowledge Graph Reasoning with Rule Embedding. In *Findings of the Association for Computational Linguistics: ACL 2024*, pages 4316–4335.
- Bishan Yang, Wen-tau Yih, Xiaodong He, Jianfeng Gao, and Li Deng. 2014. Embedding entities and relations for learning and inference in knowledge bases. *arXiv preprint arXiv:1412.6575*.
- Kewei Cheng, Jiahao Liu, Wei Wang, and Yizhou Sun. 2022. Rlogic: Recursive logical rule learning from knowledge graphs. In *Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, pages 179–189.
- 季晓慧, 董雨航, 杨中基, 杨眉, 何明跃, 王玉柱. 2024. 基于知识图谱多跳推理的中文矿物知识问答方法与系统. *地学前缘*, 31(04):37–46. DOI: 10.13745/j.esf.sf.2024.5.11.
- 官赛萍, 靳小龙, 贾岩涛, 王元卓, 程学旗. 2018. 面向知识图谱的知识推理研究进展. *软件学报*, 29(10):2966–2994. DOI: 10.13328/j.cnki.jos.005551.
- 刘知远, 孙茂松, 林衍凯, 谢若冰. 2016. 知识表示学习研究进展. *计算机研究与发展*, 53(02):247–261.