

知识图谱可泛化推理技术

孙泽群

南京大学 万维网软件研究组

2025年3月29日

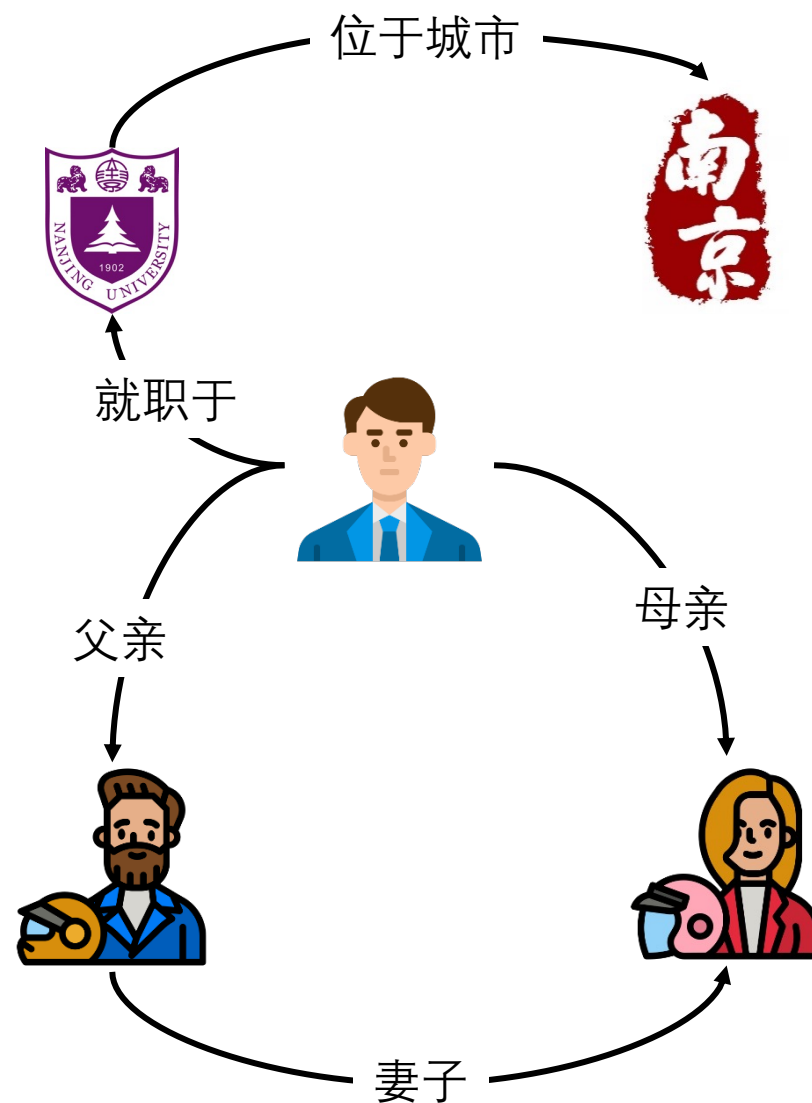
知识图谱

□ 在知识图谱中

- 结点：实体或者概念
- 边：有向，带标签，表示实体间关系

□ 事实可以用<主，谓，宾>三元组表示

- <南京大学，位于城市，南京>



知识图谱的不完备性

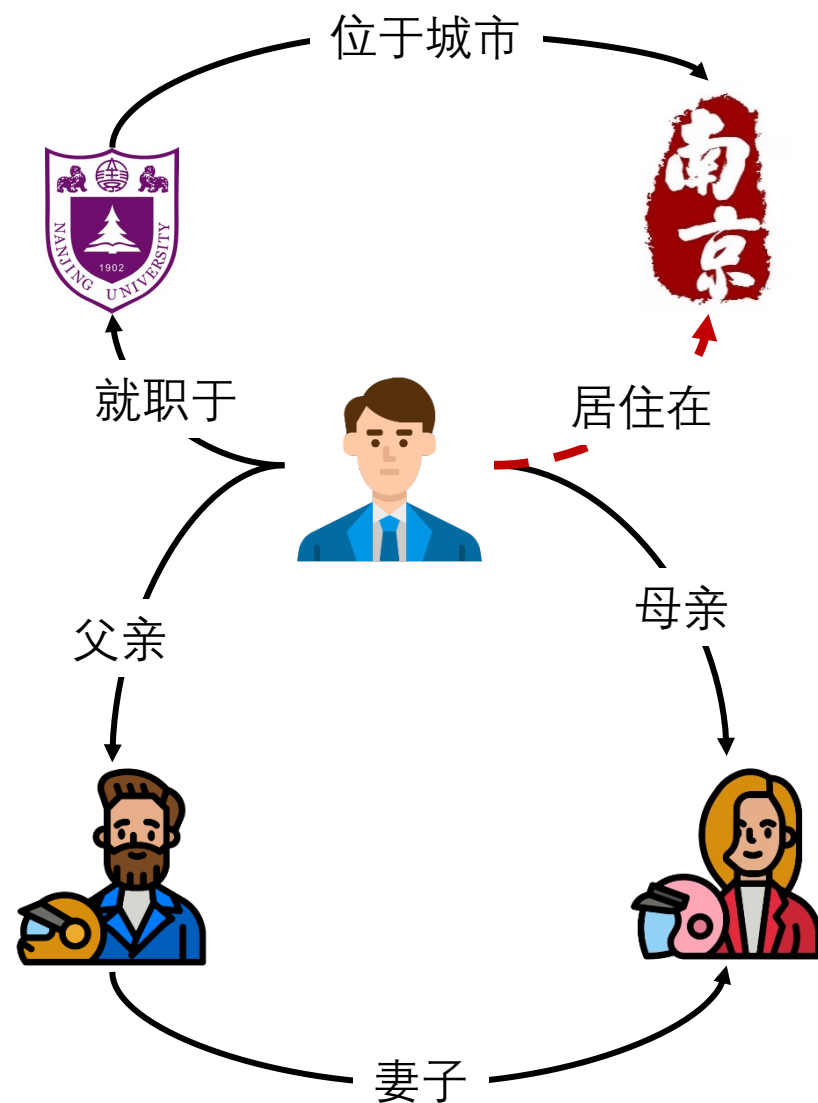
□ 不完备性

- 知识图谱往往存在大量缺失事实

□ 知识图谱推理

- 基于已有事实推理得到新结论

- <小南, 就职于, 南京大学> <南京大学, 位于城市, 南京> → <小南, 居住在, 南京>

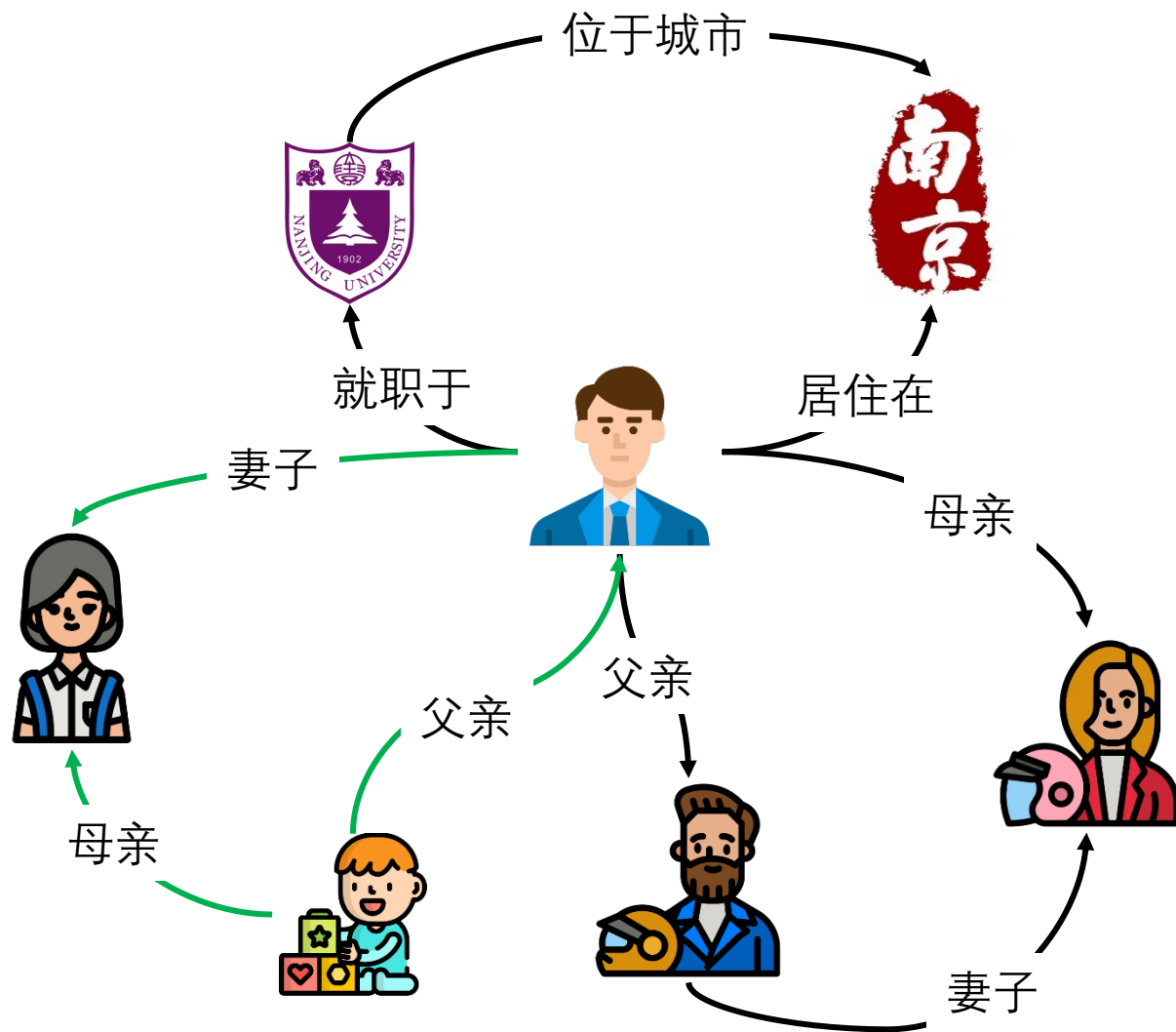


知识图谱的动态性

□ 知识图谱持续更新

- 真实世界变化
- 持续的知识采集
- 应用需求的演化

知识图谱不断迭代，新实体、关系随新事实持续加入，旧事实也不断被更新



知识图谱的开放性

□ 各类知识图谱被构建

- 通用知识图谱
- 领域知识图谱
- 企业知识图谱

多源知识图谱之间既有重合的实体与关系，也有彼此互补的事实与知识

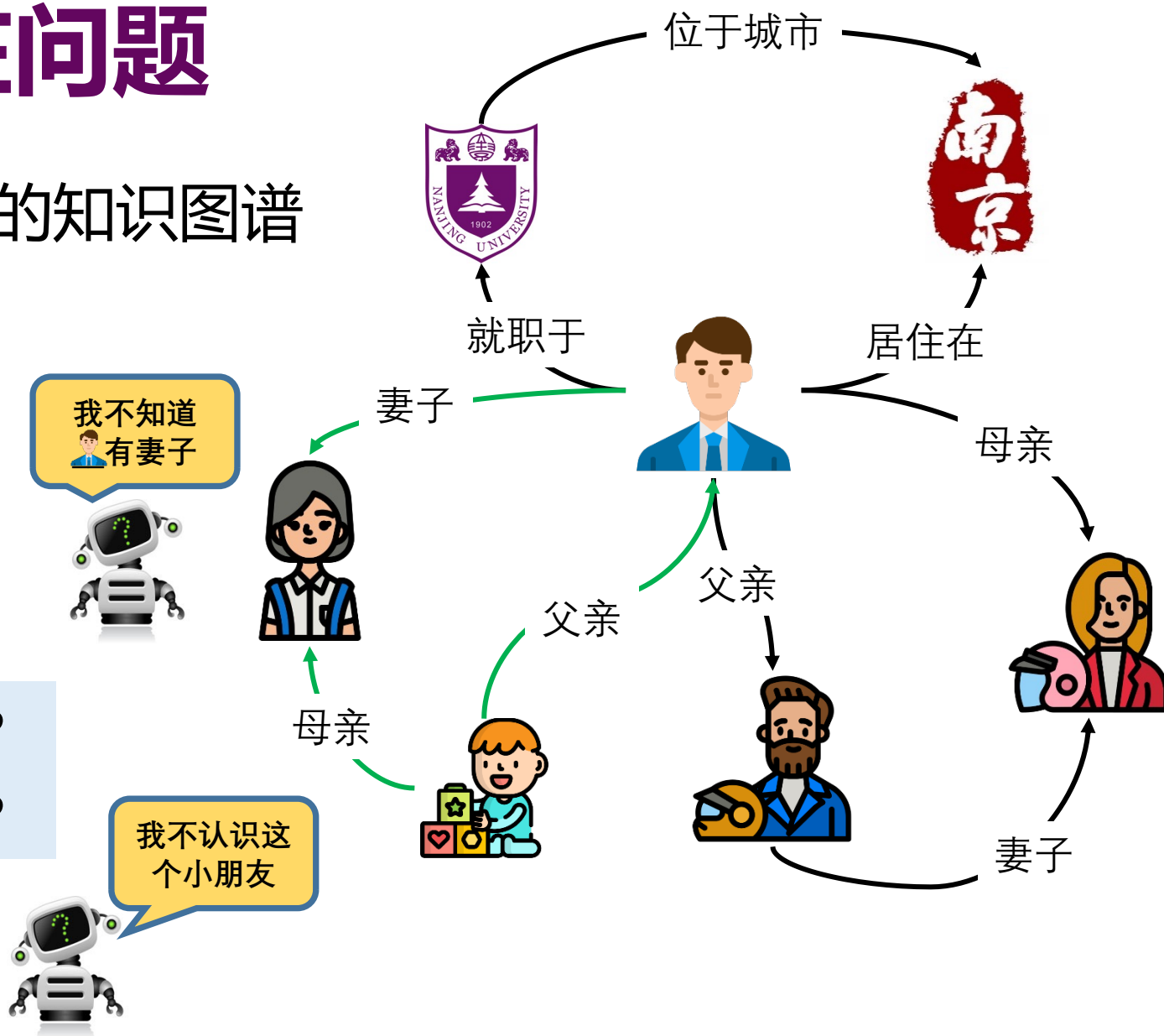


现有推理方法存在问题

□ 现有方法面向**单一且静止**的知识图谱

- 无法表征新实体、新关系
- 无法嵌入新事实
- 无法泛化新图谱

为什么现有方法不支持动态图谱？
为什么现有方法不能泛化新图谱？

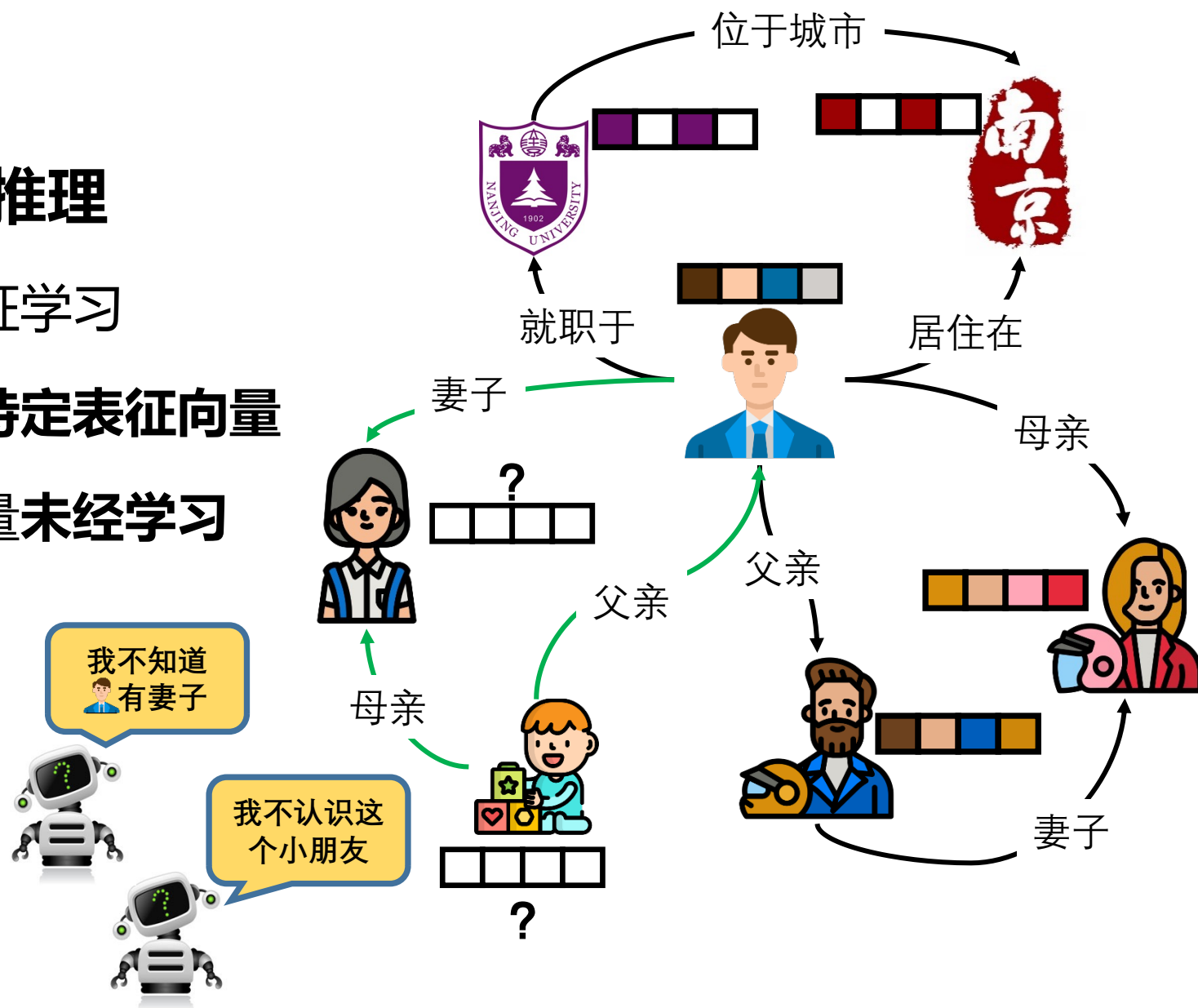


挑战与难点

□ 新实体与关系的表征与推理

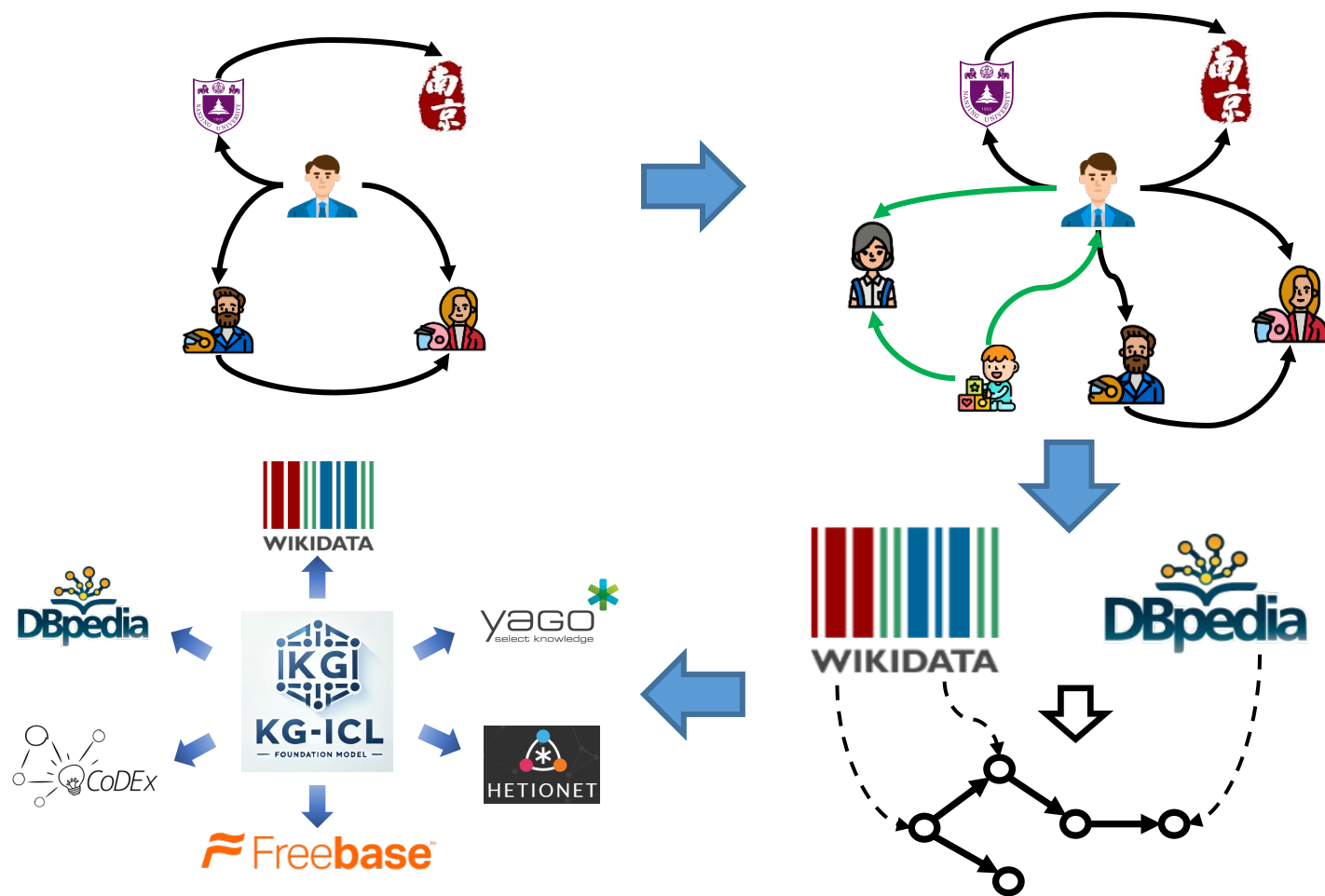
- 过去的方法大多基于表征学习
- 为每个实体和关系学习**特定表征向量**
- **新实体和关系的表征向量未经学习**
- 不能表征新实体关系

关键挑战在于如何基于已学习知识**表征新实体、新关系**!



知识图谱推理的需求演变

- 单一静止
- 单一动态
- 多源知识迁移
- 通用基座模型



知识图谱可泛化推理目的

□ 同图谱内的知识迁移

- 前向迁移：基于已学习实体和关系向量，促进新实体和关系的表征学习
- 双向迁移：基于已有知识增强新学习，基于新事实提升旧参数知识蕴含

□ 多源图谱间的知识迁移与泛化

- 跨源知识迁移：利用互补知识增强图谱的推理能力
- 跨源知识泛化：预训练基座模型，泛化到任意新图谱

知识图谱可泛化推理技术演变

基于关系语义的可泛化推理

基于规则

基于子图

基于条件消息传递

基于实体对齐的可泛化推理

基于实体回放

基于子图回放

基于路径回放

基于结构语义的可泛化推理

基于关系图

基于双重条件消息传递

基于上下文提示图

2022

2024

基于关系语义的可泛化推理

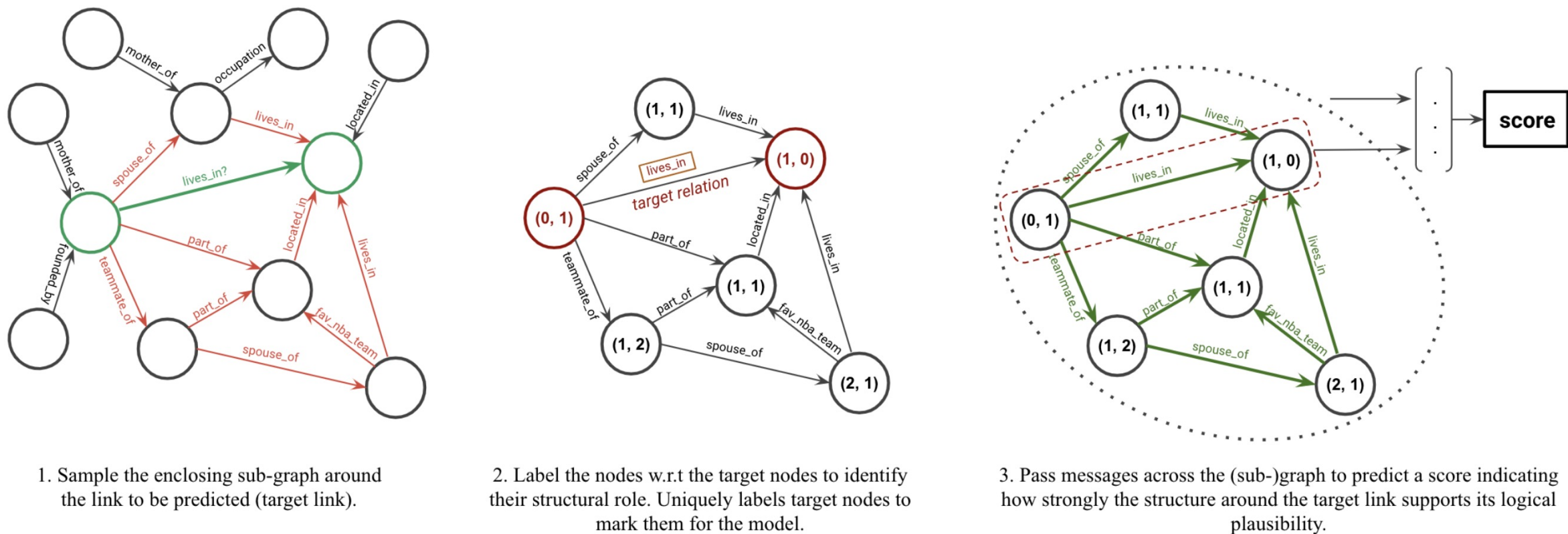


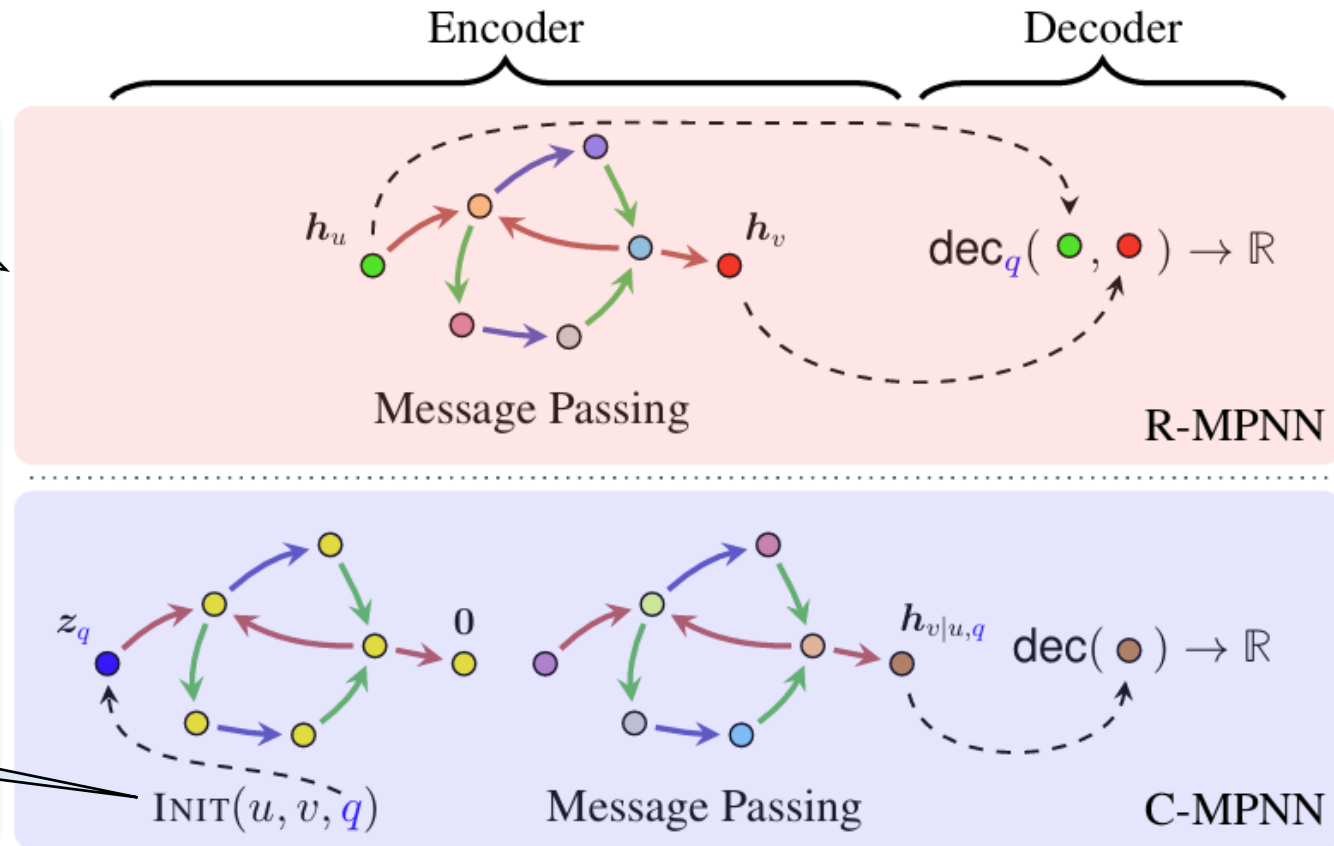
Figure 2. Visual illustration of GraIL for inductive relation prediction.

基于关系语义的可泛化推理

全局编码，每个实体和关系对应一个特定表征

将查询($u, q, ?$)作为条件，用于结点特征初始化

$$h_q^{(0)}(u, v) \leftarrow \mathbb{1}_q(u = v)$$



传统
消息
传递

条件
相对
消息
传递

基于关系语义的可泛化推理

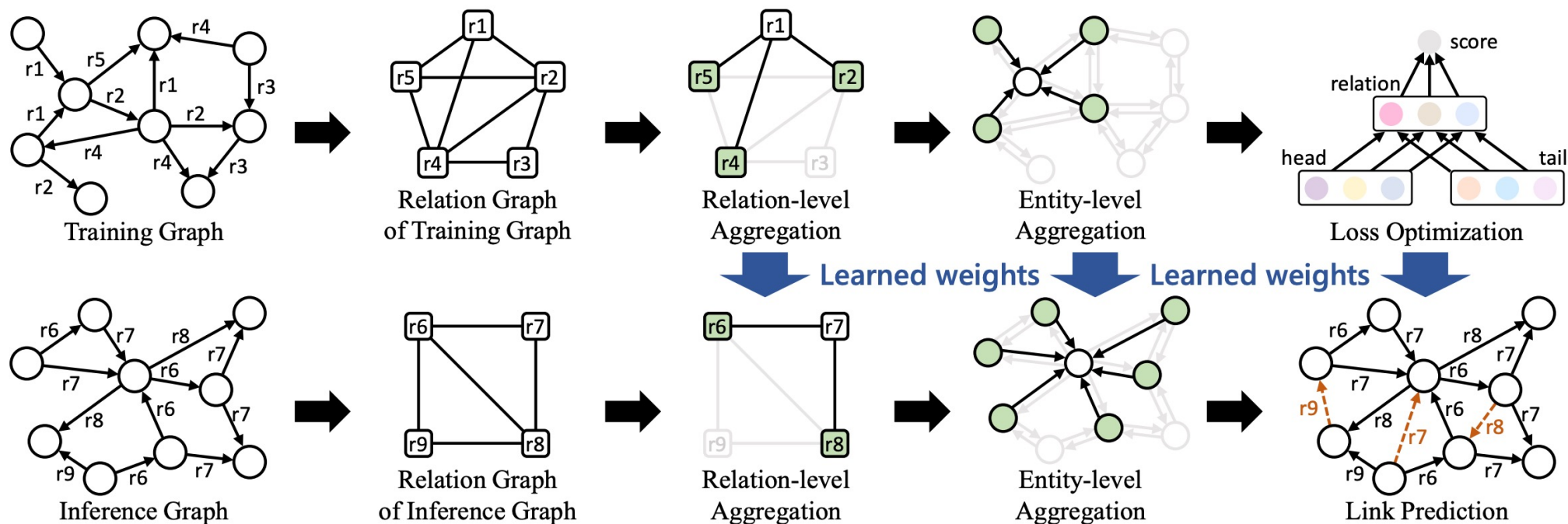


Figure 2: Overview of INGRAM. Given a knowledge graph, a relation graph is created to define the neighboring relations of each relation. Based on the relation graph and the original knowledge graph, relation and entity embedding vectors are computed by aggregating their neighbors' embeddings. During training, INGRAM learns how to aggregate the neighbors' embeddings by maximizing the scores of training triplets. At inference time, INGRAM creates embeddings of new relations and entities by aggregating their neighbors' embeddings and conducts link prediction in the way it learned during training.

基于关系语义的可泛化推理

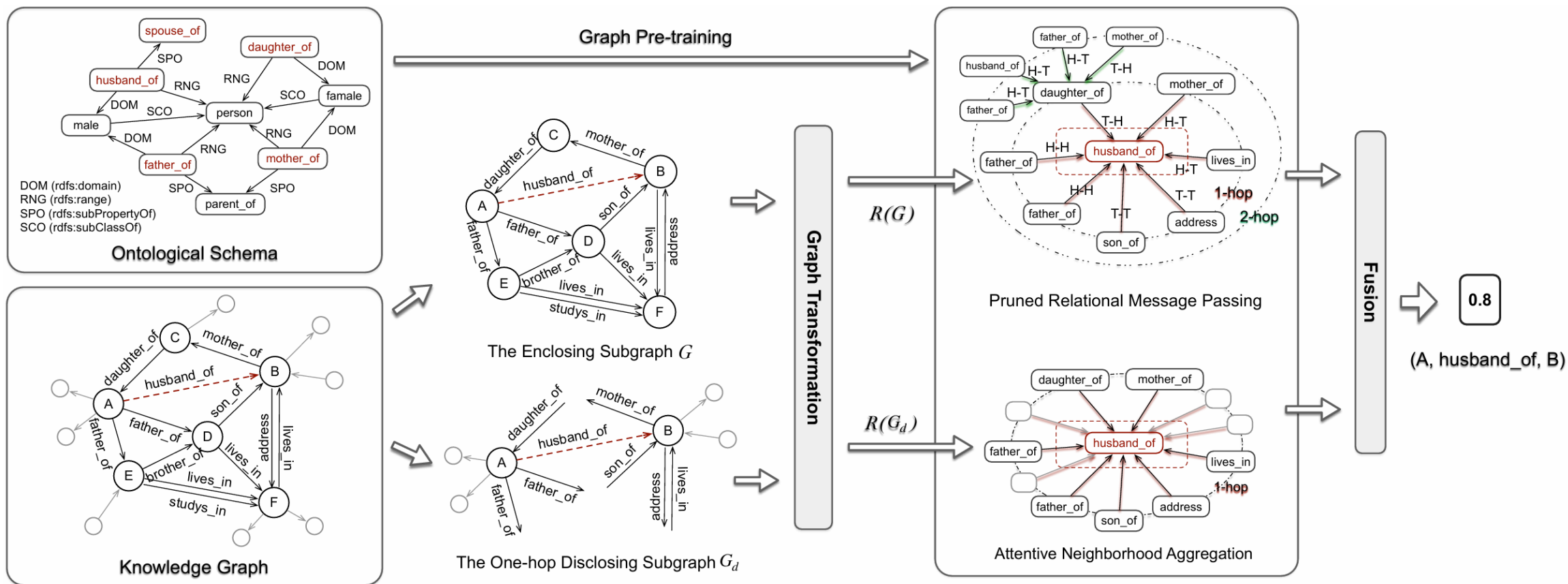


Fig. 2: The overall framework of our Relational Message Passing Network.

基于关系语义的可泛化推理

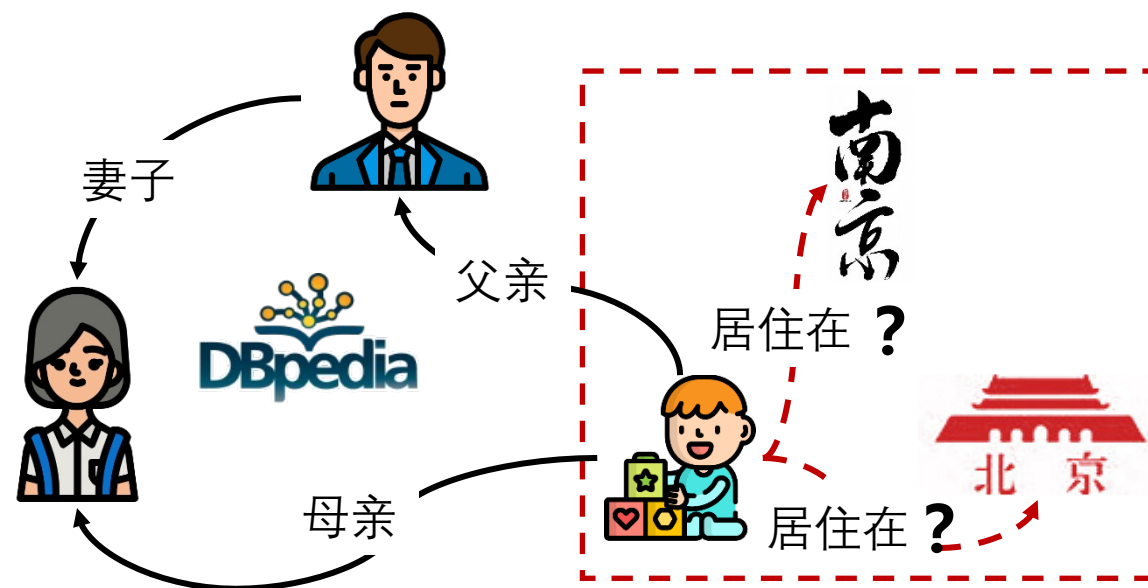
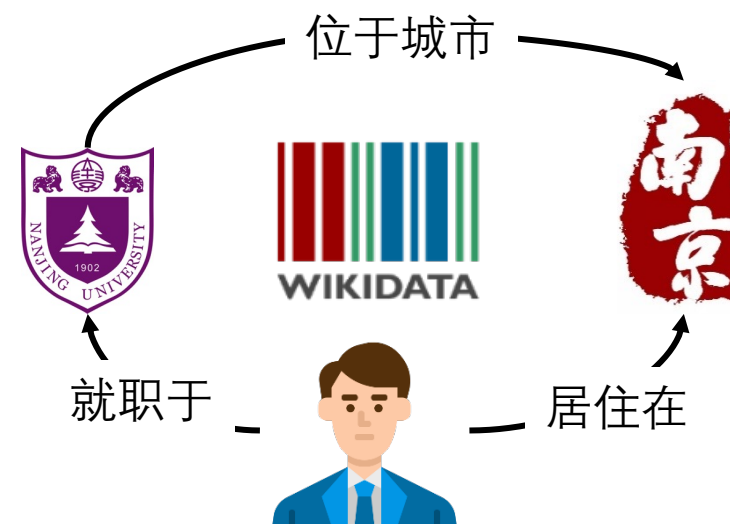
- 旨在消解实体的绝对表征，但是依赖关系的绝对表征，所以无法泛化到新关系
- 抽象关系的高阶语义，忽视了实体的具体信息

基于实体对齐的可泛化推理

□ 多源知识图谱间包含互补知识

- 多源知识图谱包含互补知识
- 但知识图谱是符号化的数据孤岛
- 缺少知识迁移的桥梁

在右图例子中，仅基于DBpedia中的知识不足以推理  居住的城市。

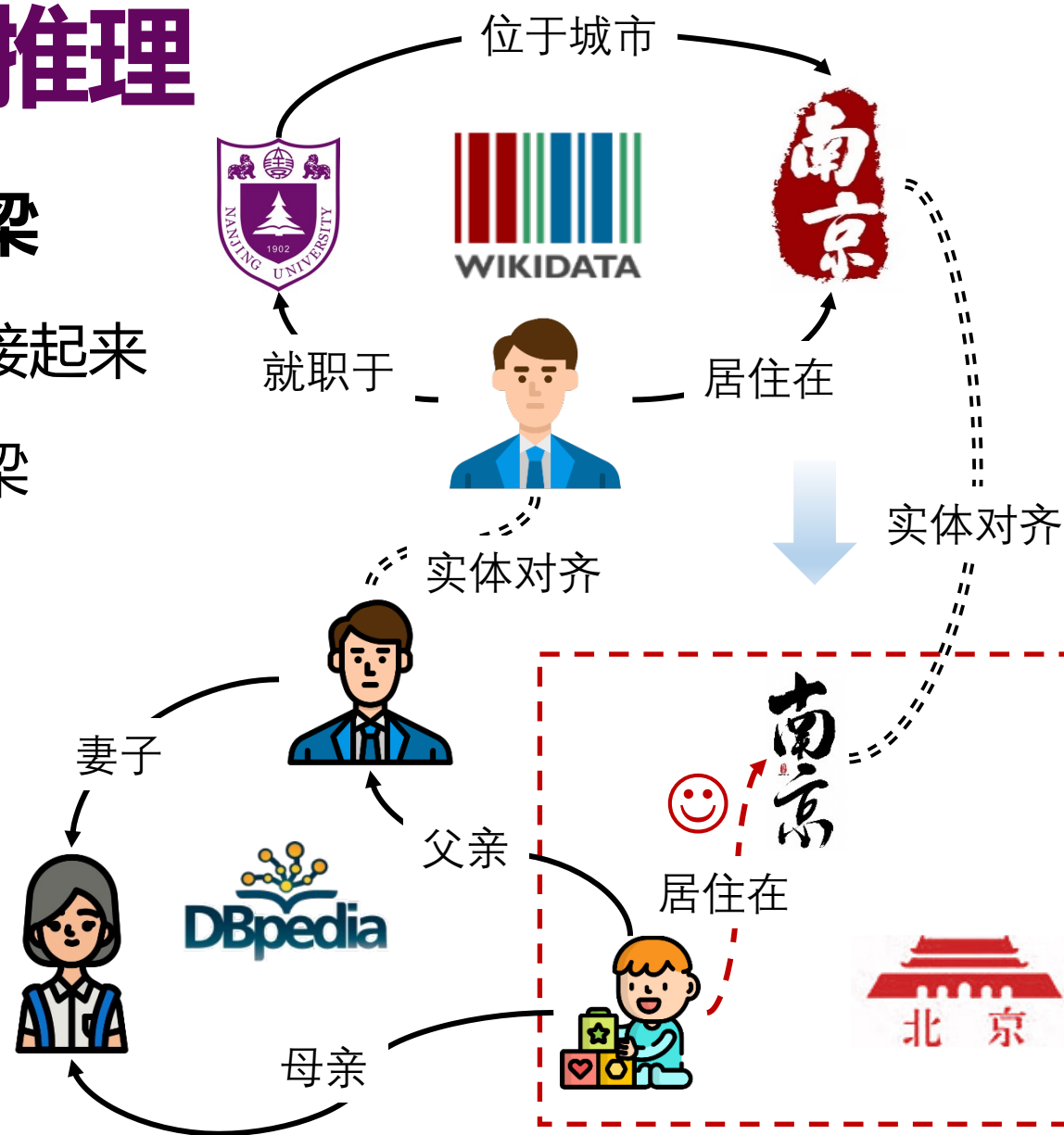


基于实体对齐的可泛化推理

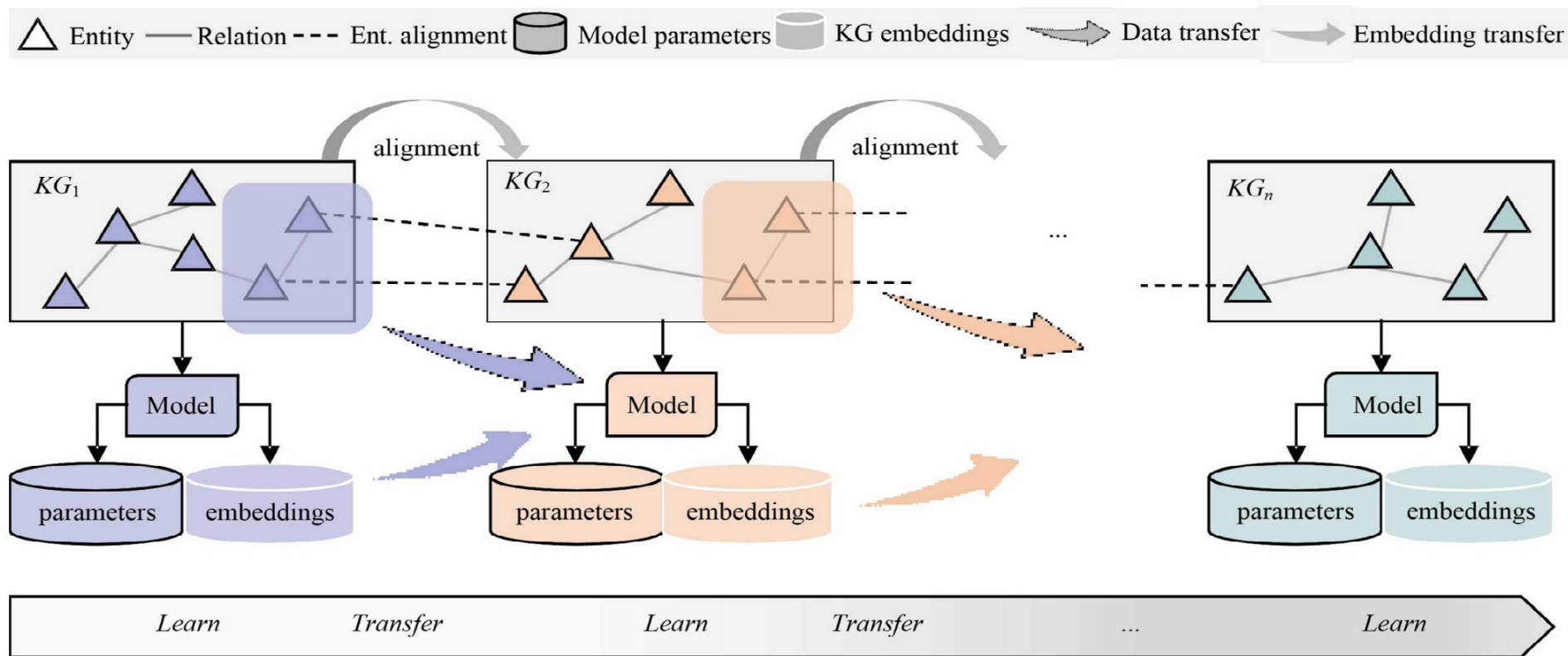
□ 实体对齐是图谱间知识迁移的桥梁

- 实体对齐将彼此孤立的多源图谱连接起来
- 实体对齐提供了天然的知识迁移桥梁
- 如何充分利用实体对齐来迁移知识？

以实体对齐作为桥梁，联合 Wikidata 和 DBpedia 中的知识，推理可得  居住在南京。

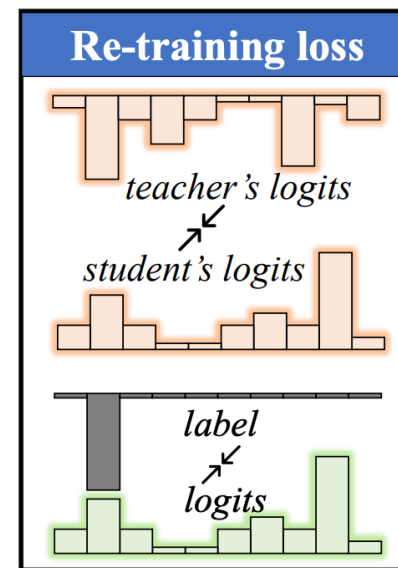
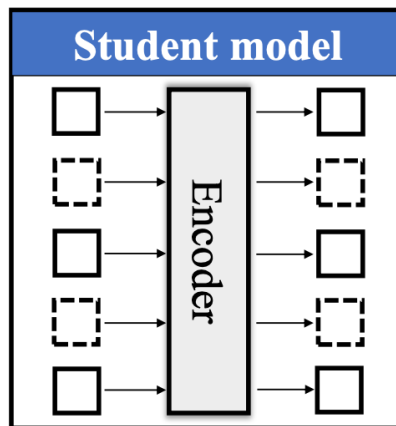
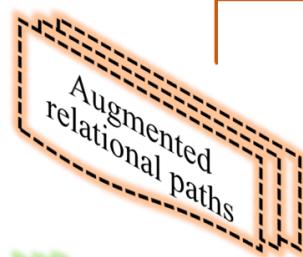
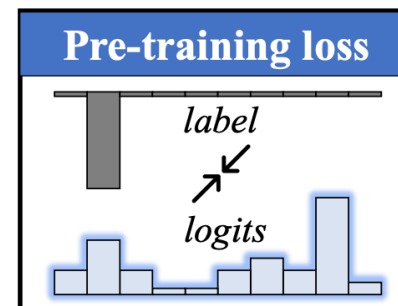
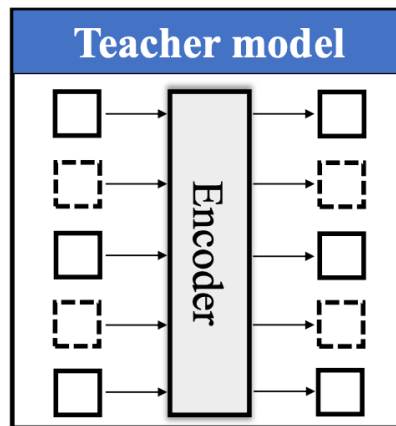
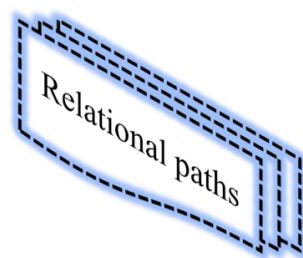
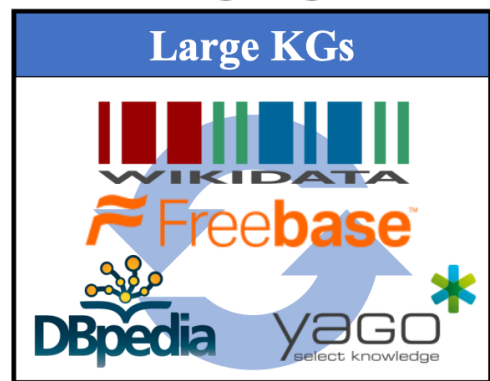


基于实体对齐的可泛化推理



基于实体对齐的可泛化推理

Pre-training stage



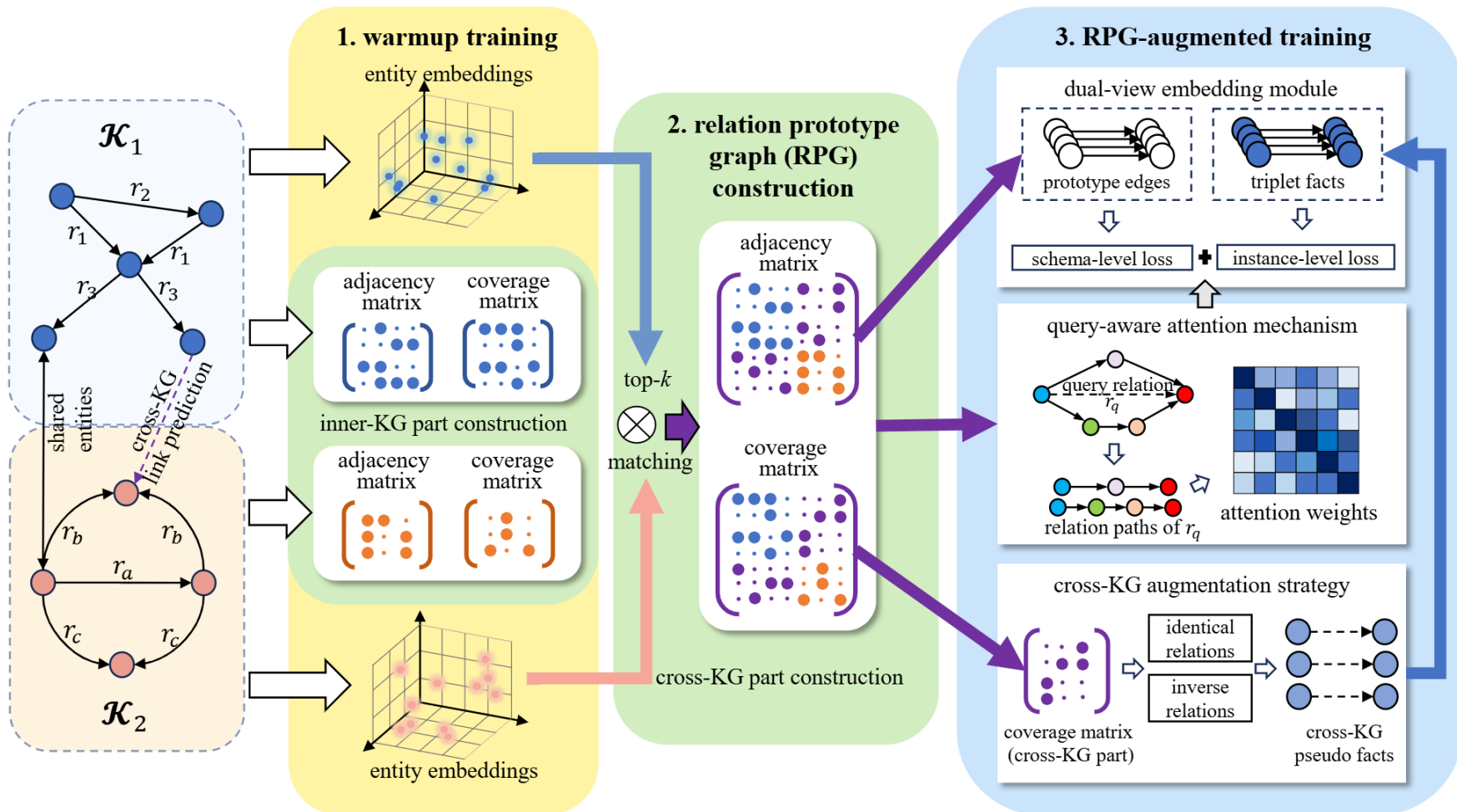
Re-training stage

基于实体对齐的可泛化推理

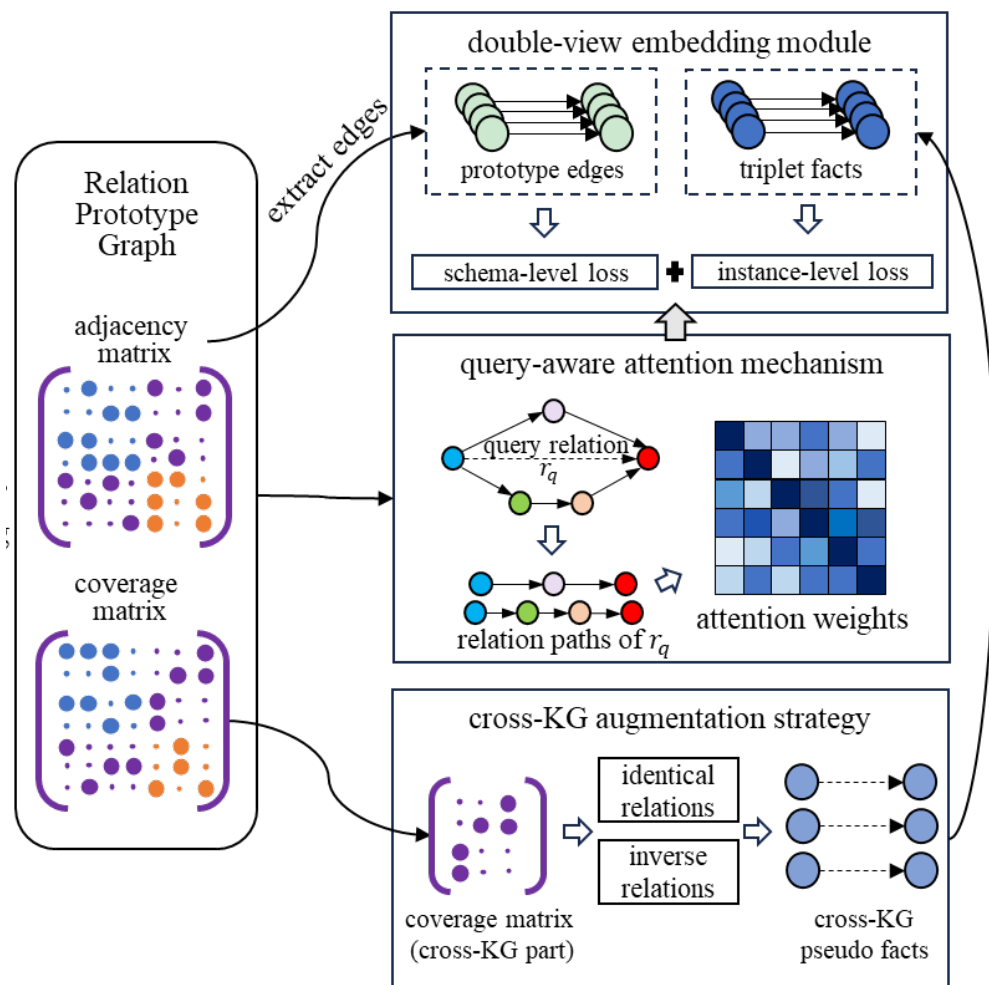
Setting	Model	FB15K-237			WN18RR			YAGO3-10		
		MRR	H@10	H@1	MRR	H@10	H@1	MRR	H@10	H@1
LP	TransE [5]	0.288	0.475	—	0.224	0.510	—	0.370	0.612	0.242
	ConvE [14]	0.325	0.501	0.237	0.430	0.520	0.400	0.440	0.620	0.350
	RotatE [48]	0.338	0.533	0.241	0.476	0.571	0.428	0.495	0.670	0.402
	TuckER [2]	0.358	0.544	0.266	0.470	0.526	0.443	0.505	0.661	0.422
	MuKGE (RNN)	0.285	0.433	0.210	0.406	0.447	0.382	0.447	0.617	0.354
	MuKGE (RSN)	0.295	0.468	0.211	0.428	0.490	0.398	0.504	0.654	0.422
	MuKGE (TF)	0.307	0.481	0.220	0.444	0.494	0.417	0.523	0.678	0.439
JointLP	TransE	0.346 (20.1%)	0.562 (18.3%)	0.237 (—)	0.234 (4.4%)	0.528 (3.5%)	0.059 (—)	0.504 (36.2%)	0.699 (14.2%)	0.294 (21.5%)
	ConvE	0.377 (16.0%)	0.575 (14.8%)	0.279 (17.7%)	0.455 (5.8%)	0.516 (-0.7%)	0.424 (6.0%)	0.467 (6.1%)	0.660 (6.5%)	0.387 (10.6%)
	RotatE	0.375 (10.9%)	0.579 (7.9%)	0.271 (12.4%)	0.476 (0.0%)	0.556 (-2.6%)	0.430 (4.7%)	0.502 (1.4%)	0.719 (7.3%)	0.425 (5.7%)
	TuckER	0.386 (7.8%)	0.579 (6.4%)	0.286 (7.5%)	0.463 (-1.5%)	0.518 (-1.5%)	0.432 (-2.5%)	0.542 (7.3%)	0.699 (5.7%)	0.459 (8.8%)
	MuKGE (RNN)	0.383 (34.4%)	0.581 (34.2%)	0.285 (35.7%)	0.398 (-2.0%)	0.475 (6.3%)	0.356 (-6.8%)	0.565 (26.4%)	0.739 (19.8%)	0.468 (32.2%)
	MuKGE (RSN)	0.415 (40.7%)	0.612 (30.8%)	0.315 (49.3%)	0.427 (-0.2%)	0.499 (1.8%)	0.384 (-3.5%)	0.626 (24.2%)	0.791 (20.9%)	0.531 (25.8%)
	MuKGE (TF)	0.400 (30.3%)	0.592 (23.1%)	0.303 (37.7%)	0.426 (-4.1%)	0.496 (0.4%)	0.385 (-7.7%)	0.664 (27.0%)	0.806 (18.9%)	0.581 (32.3%)
PR4LP	MuKGE (RNN)	0.388 (36.1%)	0.586 (35.3%)	0.289 (37.6%)	0.418 (3.0%)	0.474 (6.0%)	0.385 (0.8%)	0.584 (30.6%)	0.748 (21.2%)	0.490 (38.4%)
	MuKGE (RSN)	0.435 (47.5%)	0.644 (37.6%)	0.327 (55.0%)	0.430 (0.5%)	0.500 (2.0%)	0.388 (-2.5%)	0.656 (30.2%)	0.802 (22.6%)	0.565 (33.9%)
	MuKGE (TF)	0.440 (43.3%)	0.648 (34.7%)	0.336 (52.7%)	0.459 (3.4%)	0.522 (5.7%)	0.426 (2.2%)	0.687 (31.4%)	0.818 (20.6%)	0.608 (38.5%)

基于实体对齐和开源图谱预训练的模型对链接预测带来巨大提升

基于实体对齐的可泛化推理



基于实体对齐的可泛化推理



■ 双视图表示学习

- 除事实三元组外，还从邻接矩阵中提取关系原型三元组，从实例（事实）和 schema（原型）两个层面学习

■ 查询感知的注意力

- 从邻接矩阵中生成关系路径，并计算注意力，来降低无关事实带来的噪音

■ 跨图谱增强机制

- 基于重合矩阵发现相同和相逆关系，并生成伪标签事实来增强知识迁移

基于实体对齐的可泛化推理

- 实验结果表明所提模型的跨图谱链接预测能力优于基线模型
- 提出的各模块均对最终结果有贡献

基于广泛使用的四个知识图谱
Wikidata、YAGO3、DBpedia和
Freebase构建了2个数据集，它们
之间有着不同的schemata和size

TABLE II
MAIN RESULTS: CROSS-KG LINK PREDICTION.

Models	WIKI-YAGO				DBP-FB			
	<i>MRR</i>	<i>H@1</i>	<i>H@5</i>	<i>H@10</i>	<i>MRR</i>	<i>H@1</i>	<i>H@5</i>	<i>H@10</i>
TransE+	.1070	.0480	.1641	.2131	.1153	.0633	.1645	.2148
ComplEx+	.0316	.0193	.0388	.0510	.0597	.0275	.0895	.1195
RotatE+	.0287	.0191	.0370	.0444	.0276	.0188	.0357	.0443
ConvE+	.1304	.0809	.1773	.2213	.1503	.1041	.1976	.2385
CompGCN+	.1078	.0667	.1423	.1832	.1332	.0831	.1821	.2241
HittER+	.1464	.0884	.2018	.2636	.1516	.0904	.2056	.2720
CogKR+	.1170	.0813	.1776	.2168	.1296	.0808	.1937	.2513
ULTRA+	.1246	.0833	.1685	.1951	.1352	.0889	.1815	.2238
CrossLink-EP	.1040	.0645	.1348	.1680	.1092	.0518	.1686	.2184
Dual-AMN+TransE	.0898	.0452	.1276	.1725	.0975	.0488	.1444	.1859
CLP	.1815	.0914	.2878	.3981	.1816	.1121	.2545	.3192
w/o dual-view	.1780	.0878	.2847	.3941	.1804	.1110	.2534	.3172
w/o attention	.1809	.0896	.2875	.3956	.1702	.1044	.2405	.2955
w/o augment	.1320	.0756	.1852	.2323	.1611	.0960	.2274	.2873

基于关系语义或实体对齐的可泛化推理

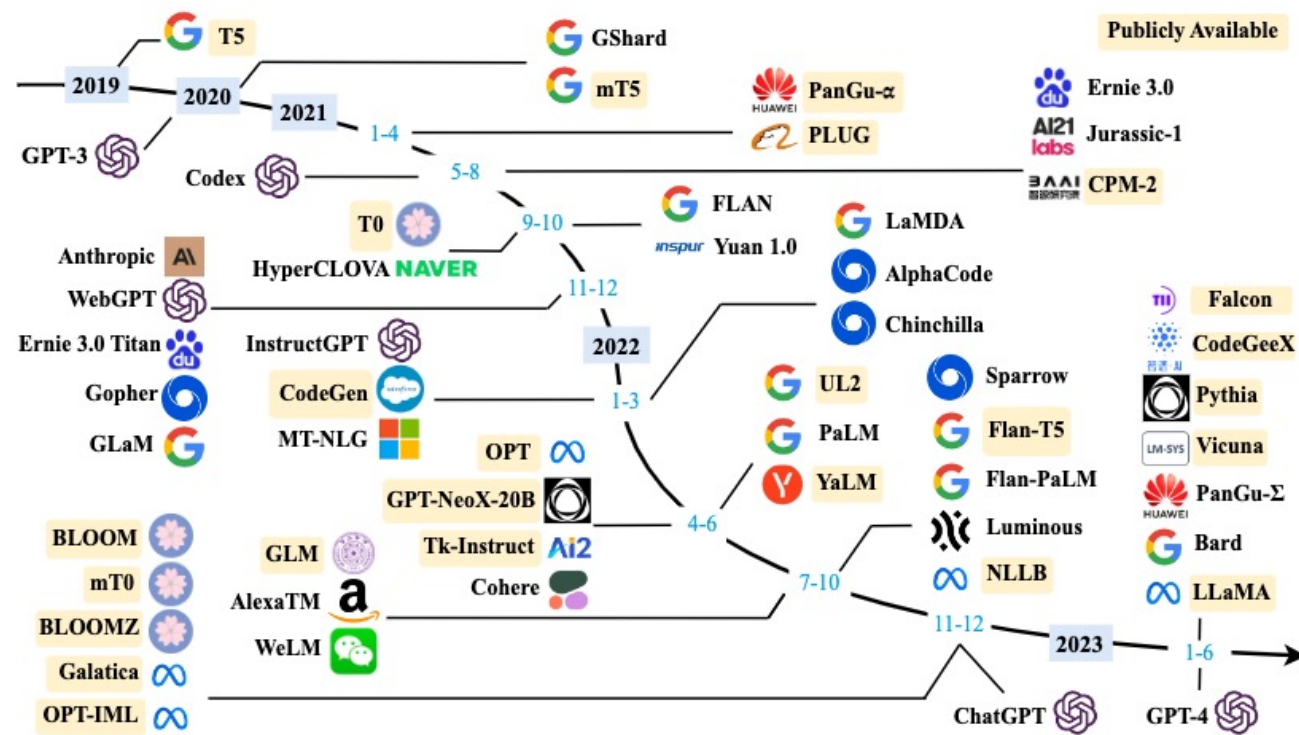
- 越抽象，泛化性越好，但是效果往往不足，缺乏实例信息指导
- 越具体，泛化性越差，可是一旦提供可用实例，效果提升明显

基于提示图的可泛化推理

□ 近年来，基座模型 (Foundation Model) 受到广泛关注

- 支持多领域应用的预训练模型
- 共享统一的模型架构和知识表征
- 强大的迁移能力和泛化能力

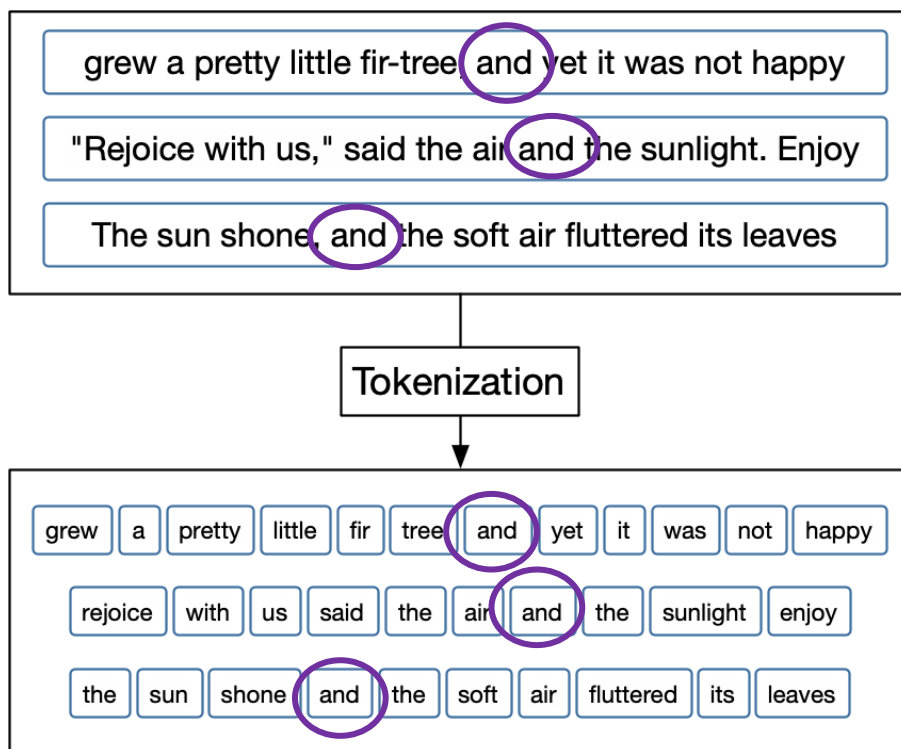
现有工作仍然需要在每个KG上分别训练、存储一个独立的模型，将每个KG视作独立的数据孤岛。



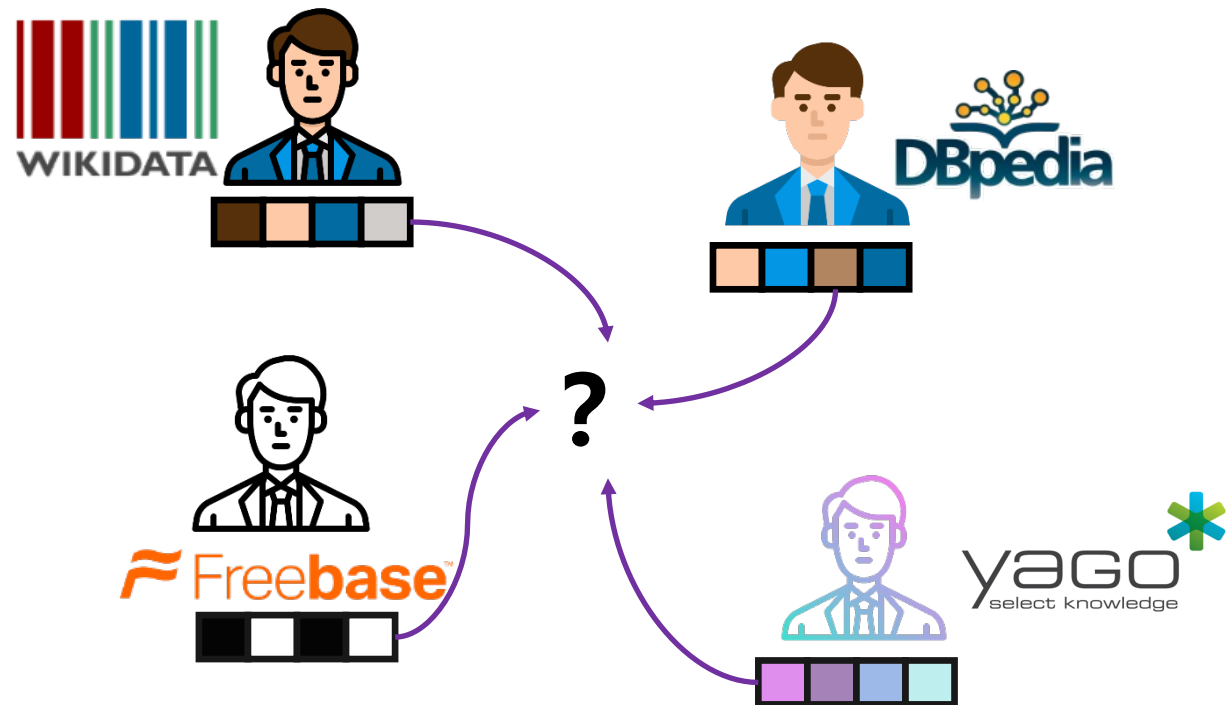
基于提示图的可泛化推理

□ 关键：用同一种“语言”表达不同图谱

不同句子
不同语料



共享分词



统一分词是自然语言处理基座模型成功的关键基础之一

符号化的知识图谱间没有统一分词

基于提示图的可泛化推理

□ 统一的图谱语言--两个关键工具

工具1：提示图

以关系相关例子为中心，通用的提示图

- 推理示例
以包含查询关系的训练样本作为示例
- 提示图
包含推理示例的KG子图
- 提示图包含该关系推理需要的重要信息

工具2：统一分词器

统一表征不同KG提示图中的实体关系

- 实体分词：在提示图中与头尾实体的距离
[1, 1]表示与头尾实体最短路径长度都为1
- 关系分词：是否为查询关系
若为查询关系则为[1]，否则为[0]
- 每个预定义分词映射到一个可学习的分词向量

基于提示图的可泛化推理

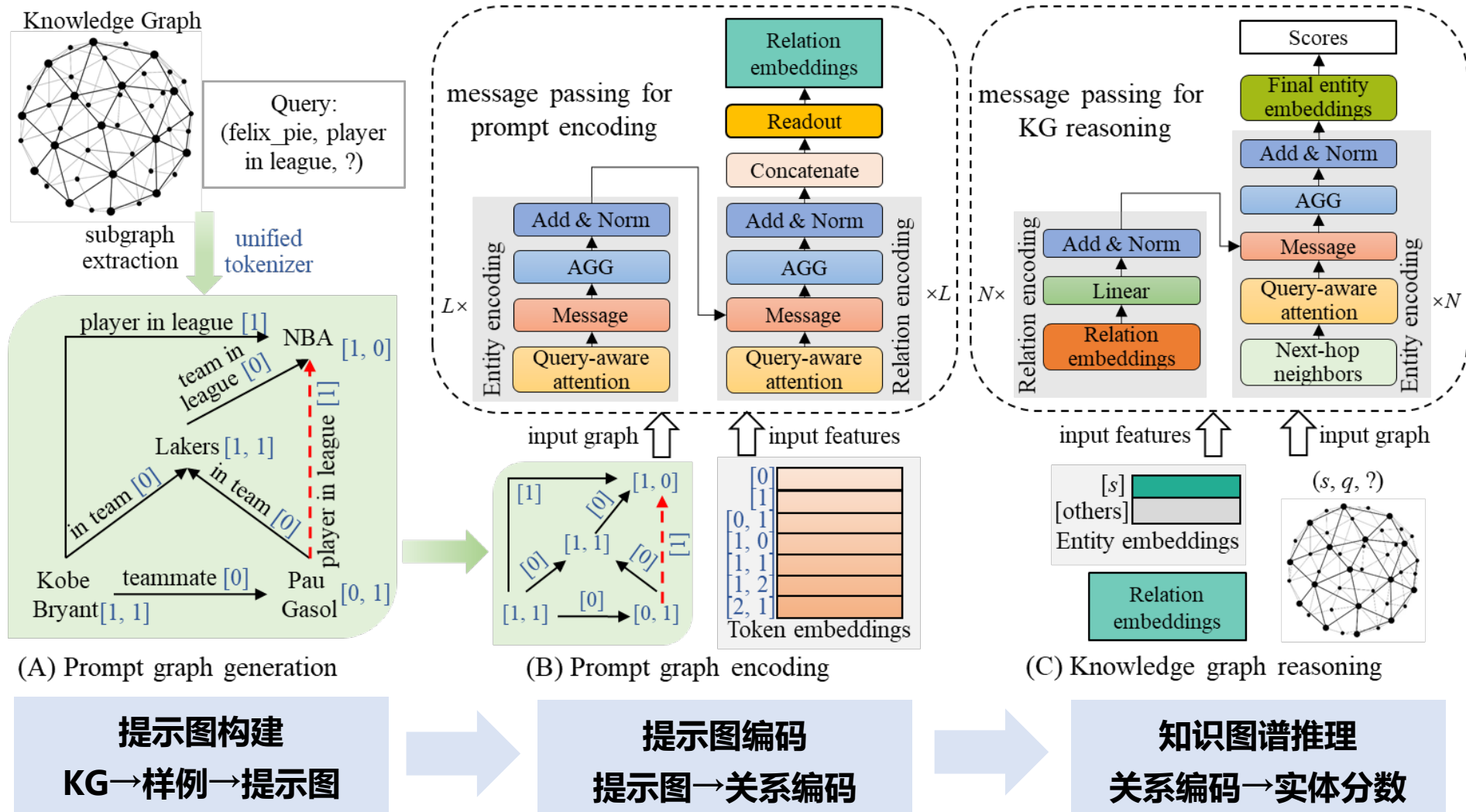
□ 更抽象的知识迁移与泛化

- $(A, \text{邻居}, B), (B, \text{居住在}, C) \rightarrow A \text{ 也在 } C \text{ 居住}$
- $(A, \text{同事}, B), (B, \text{工作在}, C) \rightarrow A \text{ 也在 } C \text{ 工作}$
- $(A, \text{队友}, B), (B, \text{在球队}, C) \rightarrow A \text{ 也在 } C \text{ 球队}$

□ 来自不同KG的实例却有相似的推理模式

- 提示图抽象地建模了它们共有的推理pattern
- 如果将这三个例子作为提示图，将得到相同提示图分词和编码

基于提示图的可泛化推理



基于提示图的可泛化推理

□ 提示图构建

■ 示例采样

- 从KG中采样M个包含关系r的示例样本

$$\mathcal{S}_q = \{c_i\}_{i=1}^M, \quad c_i \sim \text{Uniform}(\mathcal{N}_q),$$

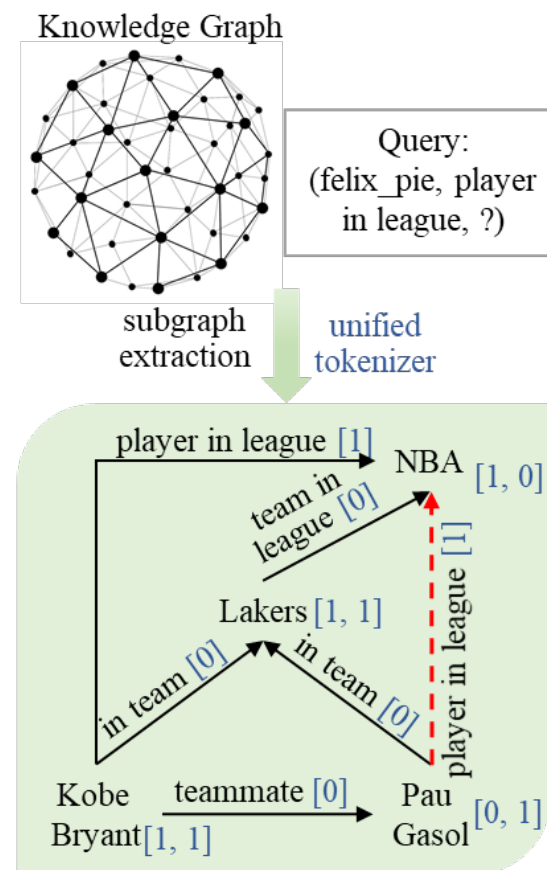
■ 子图抽取

- 每个示例样本抽取一个子图作为提示图
- 头尾实体间的k跳路径+头尾实体的邻居实体

$$\mathcal{E}_{\text{pmt}} = \{x \mid \exists(x, r, u) \in \mathcal{T}\} \cup \{x \mid \exists(x, r, v) \in \mathcal{T}\} \\ \cup \{x \mid \text{dist}(x, u) + \text{dist}(x, v) \leq k\},$$

■ 分词

- 用统一分词器来对提示图中的实体和关系分词



(A) Prompt graph generation

基于提示图的可泛化推理

□ 提示图编码

- 特征初始化：分词→分词表征向量

- 编码模块： L 层消息传递网络

$$\mathbf{H}_E^{(l+1)} \leftarrow \text{Aggregation}_E \left(\left\{ \text{Message}(\mathbf{H}_E^{(l)}, \mathbf{H}_R^{(l)}, n, q) \right\} \right),$$

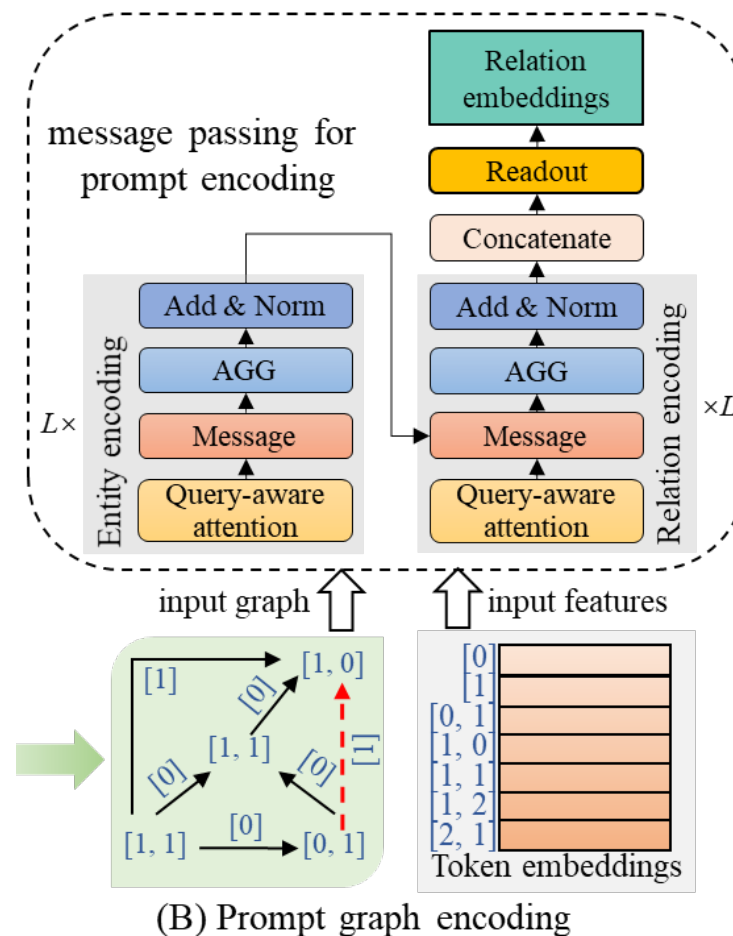
$$\mathbf{H}_R^{(l+1)} \leftarrow \text{Aggregation}_R \left(\left\{ \text{Message}(\mathbf{H}_E^{(l+1)}, \mathbf{H}_R^{(l)}, n, q) \right\} \right),$$

- 读取

- 读取 M 个提示图各层关系编码

$$\mathbf{H}_{\mathcal{P}} = \mathbf{W}_{\text{Readout}} \left(\mathbf{H}_R^{(1)} \parallel \mathbf{H}_R^{(2)} \parallel \cdots \parallel \mathbf{H}_R^{(L)} \right),$$

$$\bar{\mathbf{H}}_{\text{pmt}} = \frac{1}{|\mathcal{S}_q|} \sum_{c \in \mathcal{S}_q} \hat{\mathbf{H}}_{\mathcal{P}_c},$$



基于提示图的可泛化推理

□ 知识图谱编码与推理

■ 特征初始化：基于提示向量的特征初始化

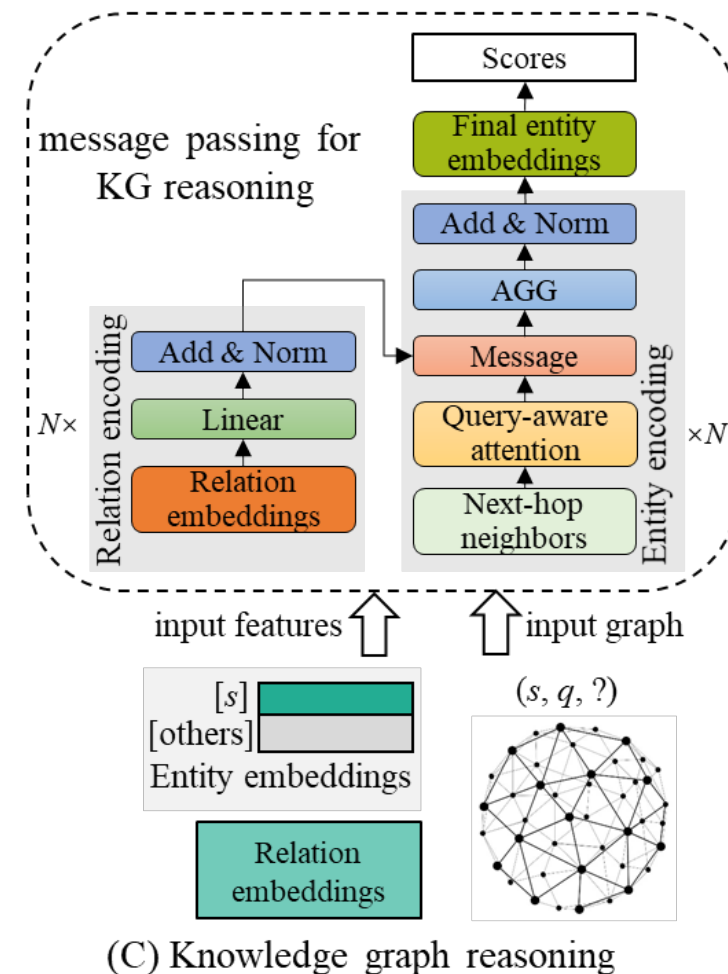
- 实体：头实体 $\leftarrow$ 查询关系向量，其他实体 $\leftarrow$ 0向量
- 关系：知识图谱关系向量 $\leftarrow$ 提示图关系向量

■ 知识图谱编码：从主语实体出发，逐跳扩展

$$\mathbf{V}_R^{(l+1)} = \text{LN}\left(\mathbf{V}_R^{(l)} + \text{ReLU}(\mathbf{W}_R^{(l)} \mathbf{V}_R^{(l)})\right),$$
$$\mathbf{V}_E^{(l+1)} \leftarrow \text{Aggregation}_E \left(\left\{ \text{Message}(\mathbf{V}_E^{(l)}, \mathbf{V}_R^{(l+1)}, n, q) \right\} \right),$$
$$\mathcal{L}^{(0)} = \{s\}, \quad \mathcal{L}^{(l+1)} = \mathcal{L}^{(l)} \cup \{e \mid \exists (x, y, e) \in \mathcal{T} \wedge x \in \mathcal{L}^{(l)}\}$$

■ 实体打分：读取最后一层的实体编码并打分

$$f(s, q, e) = \mathbf{W}_{\text{score}} \mathbf{e}_{s,q}^{(N)}$$



基于提示图的可泛化推理

□ 多种设定下的3类数据集的实验结果

- 各类数据集上均分皆优于有监督SOTA模型，验证了KG-ICL的泛化推理能力
- finetune版本比pre-train版本的性能有进一步提升

Table 1: KG reasoning results in various settings.

Models	Inductive (14 KGs)		Fully-inductive (13 KGs)		Transductive (16 KGs)		Average (43 KGs)	
	MRR	H@10	MRR	H@10	MRR	H@10	MRR	H@10
Supervised SOTA	0.466	0.607	0.210	0.347	0.365	0.511	0.351	0.493
ULTRA pre-train	0.513	0.664	0.352	0.536	0.329	0.479	0.396	0.557
ULTRA finetune	0.528	0.684	0.350	0.542	<u>0.384</u>	<u>0.548</u>	0.421	0.590
KG-ICL pre-train	<u>0.554</u>	<u>0.707</u>	<u>0.439</u>	<u>0.635</u>	0.346	0.493	<u>0.442</u>	<u>0.606</u>
KG-ICL finetune	0.582	0.727	0.449	0.647	0.397	0.554	0.473	0.638

有监督SOTA模型是在每个数据集上取得最高MRR分数的模型的集合

基于提示图的可泛化推理

Table 11: Detailed results on 43 datasets.

Datasets	Supervised SOTA		ULTRA pre-train		KG-ICL pre-train		ULTRA finetune		KG-ICL finetune	
	MRR	H@10	MRR	H@10	MRR	H@10	MRR	H@10	MRR	H@10
FB V1	0.457	0.589	0.498	0.656	0.520	0.678	0.509	0.670	0.531	0.700
FB V2	0.510	0.672	0.512	0.700	0.565	0.749	0.524	0.710	0.568	0.768
FB V3	0.476	0.637	0.491	0.654	0.535	0.695	0.504	0.663	0.537	0.704
FB V4	0.466	0.645	0.486	0.677	0.513	0.699	0.496	0.684	0.525	0.706
ILPC-large	0.070	0.146	0.290	0.424	0.288	0.412	0.308	0.431	0.295	0.411
ILPC-small	0.130	0.251	0.302	0.443	0.288	0.446	0.303	0.453	0.316	0.473
NELL V1	0.637	0.866	0.785	0.913	0.693	0.915	0.757	0.878	0.841	0.995
NELL V2	0.419	0.601	0.526	0.707	0.644	0.835	0.575	0.761	0.641	0.835
NELL V3	0.436	0.594	0.515	0.702	0.613	0.792	0.563	0.755	0.631	0.799
NELL V4	0.363	0.556	0.479	0.712	0.590	0.791	0.469	0.733	0.594	0.802
WN V1	0.741	0.826	0.648	0.768	0.733	0.838	0.685	0.793	0.762	0.827
WN V2	0.704	0.798	0.663	0.765	0.696	0.783	0.679	0.779	0.721	0.787
WN V3	0.452	0.568	0.376	0.476	0.425	0.548	0.411	0.546	0.503	0.626
WN V4	0.661	0.743	0.611	0.705	0.652	0.722	0.614	0.720	0.683	0.749
FB-25	0.223	0.371	0.388	0.640	0.396	0.656	0.383	0.635	0.434	0.694
FB-50	0.189	0.325	0.338	0.543	0.341	0.559	0.334	0.538	0.384	0.598
FB-75	0.117	0.218	0.403	0.604	0.438	0.633	0.400	0.598	0.458	0.664
FB-100	0.133	0.271	0.449	0.642	0.487	0.694	0.444	0.643	0.499	0.703
NL-0	0.309	0.506	0.342	0.523	0.557	0.777	0.329	0.551	0.555	0.765
NL-25	0.261	0.464	0.395	0.569	0.550	0.736	0.407	0.596	0.540	0.730
NL-50	0.281	0.453	0.407	0.570	0.534	0.704	0.418	0.595	0.528	0.708
NL-75	0.334	0.501	0.368	0.547	0.452	0.673	0.374	0.570	0.446	0.681
NL-100	0.269	0.431	0.471	0.651	0.556	0.762	0.458	0.684	0.557	0.766
WK-25	0.107	0.169	0.316	0.532	0.423	0.621	0.321	0.535	0.425	0.628
WK-50	0.247	0.362	0.166	0.324	0.273	0.430	0.140	0.280	0.277	0.432
WK-75	0.068	0.135	0.365	0.537	0.437	0.602	0.380	0.530	0.466	0.626
WK-100	0.186	0.309	0.164	0.286	0.262	0.409	0.168	0.286	0.270	0.415
AristoV4	0.311	0.447	0.182	0.282	0.203	0.306	0.343	0.496	0.313	0.480
CoDEX-small	0.473	0.663	0.472	0.667	0.465	0.654	0.490	0.686	0.479	0.662
CoDEX-medium	0.352	0.490	0.372	0.525	0.330	0.474	0.372	0.525	0.402	0.565
CoDEX-large	0.345	0.473	0.338	0.469	0.261	0.376	0.343	0.478	0.388	0.508
ConceptNet100K	0.320	0.553	0.082	0.162	0.249	0.416	0.310	0.529	0.371	0.584
DBpedia100K	0.306	0.418	0.398	0.576	0.390	0.541	0.436	0.603	0.455	0.604
FB15k-237	0.415	0.599	0.368	0.564	0.359	0.541	0.368	0.564	0.376	0.538
FB15k-237-10	0.219	0.337	0.248	0.398	0.274	0.433	0.254	0.411	0.260	0.416
FB15k-237-20	0.247	0.391	0.272	0.436	0.285	0.454	0.274	0.445	0.284	0.456
FB15k-237-50	0.293	0.458	0.324	0.526	0.329	0.520	0.325	0.528	0.324	0.499
Hetionet	0.257	0.403	0.257	0.379	0.260	0.371	0.399	0.538	0.269	0.402
NELL-995	0.543	0.651	0.406	0.543	0.532	0.653	0.509	0.660	0.534	0.672
NELL23K	0.253	0.419	0.239	0.408	0.317	0.532	0.268	0.450	0.329	0.552
WD-singer	0.393	0.500	0.382	0.498	0.470	0.582	0.417	0.526	0.493	0.599
WN18RR	0.551	0.666	0.480	0.614	0.455	0.527	0.480	0.614	0.536	0.637
YAGO3-10	0.563	0.708	0.451	0.615	0.352	0.503	0.557	0.710	0.545	0.688
Average	0.351	0.493	0.396	0.557	0.442	0.606	0.421	0.590	0.473	0.638

□ 43个数据集上的详细实验结果

- KG-ICL在大多数据集上取得SOTA结果
- 不止在预训练数据集上有明显提升

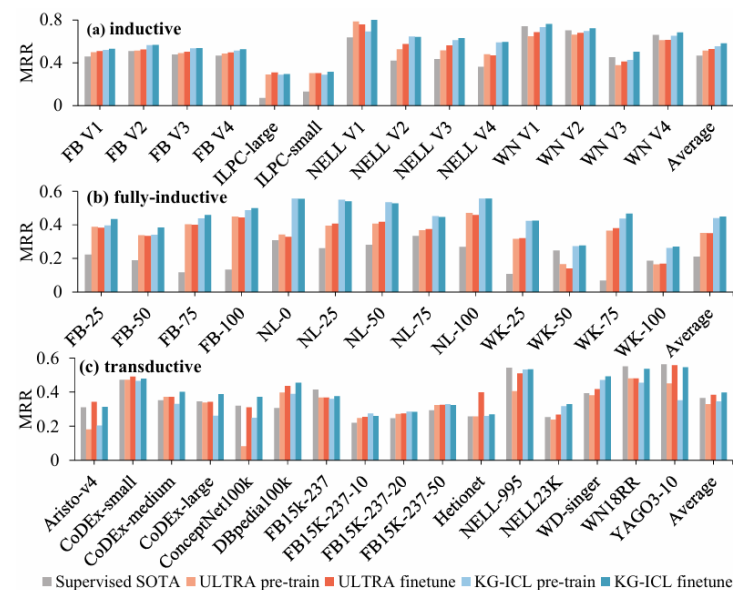


Figure 2: MRR results on various KGs.

总结与展望

□ 总结

- 近期工作主要面向**动态多源知识图谱**的表征与推理
- **知识迁移**是知识图谱可泛化推理的关键

□ 展望

- 下一代知识图谱基座模型：Knowledge Concept Foundation Model
- 知识图谱基座模型与大语言模型的融合计算仍需深入探索

都在让大语言模型理解图数据，图基础模型不能理解自然语言问句吗？

谢谢！ 请批评指正！

孙泽群

sunzq@nju.edu.cn

