

知識グラフにおける論理推論のための 多項式関数を用いた埋め込みモデル

数理情報学専攻 48226227 橋本 祐一
指導教員 岩田 覚 教授

1 はじめに

知識グラフは実世界の様々な事実関係を表すグラフであり、知識グラフの情報を用いて論理推論を行うことは幅広い分野において重要視されている。しかし、知識グラフのスパース性や大規模性から、単なる知識グラフ上の探索によって論理推論を行うことは困難である。そこで近年、一階述語論理で記述される FOL クエリを埋め込みモデルによって解く手法が広く提案されており、それらのモデルの性能比較のための定性的な指針としてこれまでに次の 3 つが用いられている。(1) 埋め込み空間において論理演算子(論理積, 論理和, 否定)を全て表現可能か。(2) 埋め込み空間における論理演算が論理規則を満たすか。(3) モデルの評価関数が多峰性を持ち、多義な答えを持つクエリを処理可能か。既存手法はこれら指針の一部を満たすが、全てを満たす手法は提案されていない。本研究では、上記の指針を全て満たすはじめてのモデルとして「PolyE」を提案し、実世界のデータセットを用いた評価実験により、既存手法を上回る性能を示すことを確認する。

2 予備知識

2.1 知識グラフ

知識グラフは、エンティティ集合 \mathcal{E} , リレーション集合 \mathcal{R} , およびファクト集合 $\{(e_h, r, e_t)\} (e_h, e_t \in \mathcal{E}, r \in \mathcal{R})$ で定義されるグラフである。エンティティがノード、リレーションがエッジに対応し、ファクトにおいてリレーション r はエンティティ e_h から e_t へと向かうエッジである。また、一階述語論理 (FOL) において、原子論理式 $r(e_h, e_t)$ は (e_h, r, e_t) がファクト集合の要素であるときに True を返し、それ以外で False を返す論理式として定義される。

2.2 FOL クエリ

知識グラフにおける論理推論のためのクエリは、存在量子 \exists , 論理積 \wedge , 論理和 \vee , 否定 \neg を含む FOL クエリとして定義される。任意の FOL クエリ q は式 (1) の選言標準形として表現可能であり、その論理表現が真となる k 個の存在量化変数 $V_1, \dots, V_k \in \mathcal{E}$ が同時に存在するターゲット変数 $V_?$ $\in \mathcal{E}$ の集合 $S_q = \{V_? \mid q[V_?] = \text{True}\}$ を答えとする。

$$q[V_?] = V_?. \exists V_1, \dots, V_k : c_1 \vee \dots \vee c_n$$

$$c_i = v_{i1} \wedge \dots \wedge v_{im_i} \quad (1)$$

各論理式 v_{ij} ($1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m_i$) は原子論理式あるいはその否定であり、以下のいずれかで表される: $v_{ij} = r(e_a, V)$, $v_{ij} = \neg r(e_a, V)$, $v_{ij} = r(V, V')$, $v_{ij} = \neg r(V, V')$ 。ここで、 $e_a \in \mathcal{E}$ は非変数の開始エンティティ, $V, V' \in \{V_1, \dots, V_k, V_?\}$ は $V \neq V'$ を満たす互いに異なる変数である。

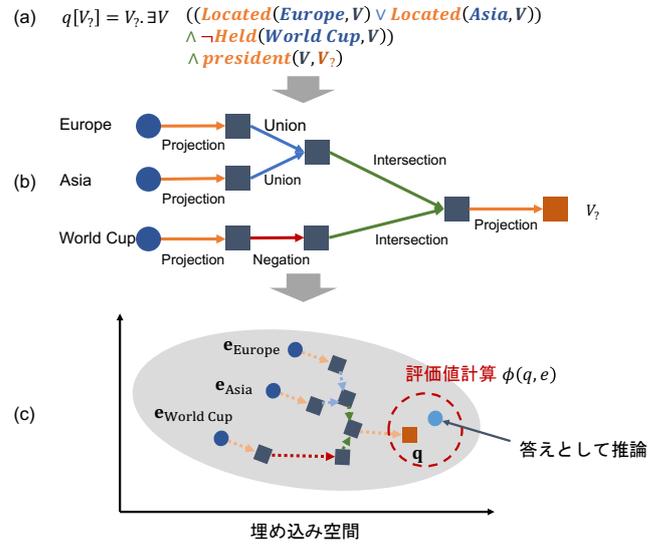


図 1: 埋め込みモデルによる FOL クエリの推論

2.3 FOL クエリの計算グラフとしての表現

FOL クエリは有向無サイクルな計算グラフとして表現される。例えば、図 1(a) で表される「Who is the president of a European or Asian country that has never hosted a World Cup?」という内容の FOL クエリは、図 1(b) の計算グラフとして表現される。計算グラフにおけるノードは知識グラフ内のエンティティの集合に対応し、エッジは以下で定義されるエンティティの集合に対する演算のいずれかに対応する。

- **Projection**: リレーション $r \in \mathcal{R}$ を介してエンティティの部分集合 $S \subseteq \mathcal{E}$ に隣接するエンティティ集合を計算。
- **Intersection**: エンティティの部分集合の集合 $\{S_1, \dots, S_n\}$ に対し、それらの積集合 $\bigcap_{i=1}^n S_i$ を計算。
- **Union**: エンティティの部分集合の集合 $\{S_1, \dots, S_n\}$ に対し、それらの和集合 $\bigcup_{i=1}^n S_i$ を計算。
- **Negation**: エンティティの部分集合 $S \subseteq \mathcal{E}$ に対し、その補集合 $\bar{S} \equiv \mathcal{E} \setminus S$ を計算。

2.4 埋め込みモデルによる FOL クエリの推論

埋め込みモデルは、エンティティとクエリの埋め込み表現、埋め込み空間における演算子、および評価関数 $\phi(q, e)$ を定義する。そして図 1(c) のように、計算グラフに従って開始エンティティの埋め込み表現から演算を繰り返すことでクエリの埋め込み表現 q を獲得し、評価関数 $\phi(q, e)$ の値が大きくなるエンティティ $e \in \mathcal{E}$ を答えとして推論する。学習時には、評価関数 $\phi(q, e)$ を元に定義された損失関数を最小化することで、エンティティの埋め込み表現および埋め込み空間における演算子に用いるパラメータを最適化する。

| Model | AvgE _{PFO} | AvgN _{eg} | 1p | 2p | 3p | 2i | 3i | pi | ip | 2u | up | 2in | 3in | inp | pin | pni |
|--------------|---------------------|--------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| GQE [1] | 28.2 | N/A | 54.5 | 15.3 | 11.0 | 39.8 | 51.6 | 27.6 | 19.3 | 22.4 | 11.9 | N/A | N/A | N/A | N/A | N/A |
| Q2B [2] | 38.5 | N/A | 68.5 | 21.4 | 14.3 | 54.9 | 66.4 | 40.1 | 26.5 | 37.0 | 17.5 | N/A | N/A | N/A | N/A | N/A |
| BetaE [3] | 42.2 | 11.7 | 64.8 | 26.1 | 24.9 | 55.7 | 66.8 | 44.7 | 28.6 | 42.0 | 25.9 | 14.3 | 14.5 | 11.2 | 6.3 | 12.4 |
| Q2P [4] | 46.2 | 16.9 | 82.1 | 27.1 | 23.4 | 64.1 | 73.1 | 48.0 | 30.1 | 43.0 | 24.7 | 24.6 | 21.6 | 11.4 | 9.0 | 17.7 |
| FuzzQE [5] | 42.6 | 16.9 | 67.6 | 31.0 | 25.8 | 54.1 | 65.9 | 44.5 | 36.5 | 30.9 | 27.2 | 19.4 | 20.3 | 12.8 | 14.1 | 18.0 |
| PolyE | 47.2 | 18.2 | 78.0 | 32.3 | 26.1 | 67.0 | 75.7 | 50.1 | 32.8 | 32.1 | 31.1 | 23.8 | 23.6 | 12.7 | 11.3 | 19.4 |

表 1: 14 種類の FOL クエリに対する各モデルの MRR (%) の結果

3 提案手法

多項式関数を用いた埋め込みモデル PolyE を提案する。

3.1 埋め込み表現

エンティティ $e \in \mathcal{E}$ の埋め込み表現を値の範囲が $[-l, l]$ の d 次元ベクトル $\mathbf{e} = [e_1, e_2, \dots, e_d] \in [-l, l]^d$, クエリ q の埋め込み表現を式 (2) で表される行列 $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{d \times n}$ として定義する。

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1(n-1)} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{d0} & a_{d1} & a_{d2} & \dots & a_{d(n-1)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times n} \quad (2)$$

ここで, クエリ埋め込み \mathbf{q} は d 個の $n-1$ 次の多項式関数 $f_{q,i} : x \mapsto \sum_{j=0}^{n-1} a_{ij}x^j (1 \leq i \leq d)$ の係数の行列を表す。

3.2 評価関数

評価関数 $\phi(q, e)$ は式 (3) で定義される。

$$\begin{aligned} \phi(q, e) &= \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d f_{q,i}(e_i) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \sum_{j=0}^{n-1} a_{ij}e_i^j \\ &= \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (a_{i0} + a_{i1}e_i + a_{i2}e_i^2 + \dots + a_{i(n-1)}e_i^{n-1}) \end{aligned} \quad (3)$$

3.3 埋め込み空間における演算子

Projection Projection は, リレーションごとの 1 層のニューラルネットワークによって定義する (詳細略)。

Intersection, Union クエリ埋め込み $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ に対する Intersection として式 (4), Union として式 (5) を満たすようなクエリ埋め込み \mathbf{q} を, 学習済みのニューラルネットワークによって計算する。

$$f_{q,i}(x) \simeq \min(f_{q_1,i}(x), f_{q_2,i}(x)) \quad (4)$$

$$f_{q,i}(x) \simeq \max(f_{q_1,i}(x), f_{q_2,i}(x)) \quad (5)$$

Negation クエリ埋め込み \mathbf{q} に対する Negation は $-\mathbf{q}$ として計算する。

3.4 損失関数

式 (6) で定義される損失関数を最小化することで, 学習可能なパラメータを最適化する。

$$L = -\log \sigma(\phi(q, e) - \gamma) - \sum_{i=1}^k \frac{1}{k} \log \sigma(\gamma - \phi(q, e'_i)) \quad (6)$$

ここで, $\sigma(\cdot)$ はシグモイド関数, γ はマージン, $e \in S_q$ はクエリ q の答えとなる正例エンティティ, $e' \notin S_q$ は負例エンティティ, k は 1 つの正例あたりに用いる負例の個数である。

3.5 定性的な分析

PolyE は, 1 節で述べた埋め込みモデルの性能のための 3 つの定性的な指針を全て満たす唯一の手法である。PolyE はクエリの埋め込み表現として多項式関数を用いることで, 3 つの論理演算子 (論理積, 論理和, 否定) を全て表現可能にした。また, 各論理演算子は基本的な 8 種類の論理法則 [5] を満たすように定義されているため, 埋め込み空間における自然な論理の表現を可能にしている。さらに, 評価関数はエンティティに対して多峰性を持ち, 多義なエンティティを答えに含むクエリに対する処理能力を持つ。

4 評価実験

実世界の知識グラフのデータセット FB15k [6] を用いて評価実験を行った。学習および評価には, 知識グラフにおいて 1 つ以上のリレーションの欠損を含む 14 種類の構造の FOL クエリ (1p/2p/3p/2i/3i/2u/up/2in/3in/imp/pin/pni/ip/pi) を使用し, MRR (Mean Reciprocal Rank) を評価指標とした。パラメータは $\{l = 1, d = 160, n = 5, \gamma = 12, k = 128\}$ で設定し, 表 1 に既存手法 [1, 2, 3, 4, 5] および提案手法の評価結果を示す。AvgE_{PFO} は否定を含まないクエリの平均, AvgN_{eg} は否定を含むクエリの平均を意味し, PolyE は平均的に最も高い性能を達成した。

5 結論

本研究では, 知識グラフにおける FOL クエリの推論のための埋め込みモデルの性能に関する 3 つの定性的な指針を全て満たすはじめてのモデルとして PolyE を提案し, 評価実験により既存手法と比較して高い性能を示すことを確認した。

参考文献

- [1] Hamilton W.L., Bajaj P., Zitnik M., Jurafsky D., and Leskovec J. Embedding logical queries on knowledge graphs. *NeurIPS*, 2018.
- [2] Ren H., Hu W., and Leskovec J. Query2box: Reasoning over knowledge graphs in vector space using box embeddings. *ICLR*, 2020.
- [3] Ren H. and Leskovec J. Beta embeddings for multi-hop logical reasoning in knowledge graphs. *NeurIPS*, 2020.
- [4] Bai J., Wang Z., Zhang H., and Song Y. Query2particles: Knowledge graph reasoning with particle embeddings. In *NAACL HLT*, 2022.
- [5] Chen X., Hu Z., and Sun Y. Fuzzy logic based logical query answering on knowledge graphs. In *AAAI*, 2022.
- [6] Bordes A., Usunier N., Garcia-Duran A., Weston J., and Yakhnenko O. Translating embeddings for modeling multi-relational data. *NeurIPS*, 2013.