

## 摘要

推荐系统是解决互联网环境下人们面临信息超载现象的有效手段，受到了研究者们广泛而持续的关注。为了缓解传统推荐系统中存在的稀疏性和冷启动问题，近年来研究者们将知识图谱作为辅助信息用于推荐系统中以提供用户与项目间丰富的关系和背景知识，同时引入图神经网络来捕获知识图谱中多种实体和关系之间的高阶结构和语义信息，提出了一种基于知识图谱和图神经网络的推荐系统方法，能够有效提高推荐系统的性能和可解释性。但现有推荐方法存在一些不足，没有进一步挖掘用户对项目属性的偏好信息，导致模型在训练过程中可能无法聚合到原始图谱中更为重要的结构信息和语义关系；其次在用户端建模过程中，用户嵌入表示的学习也主要利用用户交互过的项目信息来表征，学习方式较为单一，无法更好的表征用户的兴趣偏好特征。

针对以上问题，本文通过对现有算法进行改进，提出了一种基于知识图谱的融合项目属性偏好的图神经网络推荐模型(KGNN-IAP)，研究工作包括：

(1) 挖掘用户对项目属性的偏好信息。从项目属性角度将用户选择项目进行交互的过程看作是一个多属性决策的问题，将用户-项目交互矩阵转换为用户-项目属性矩阵，使用树模型的特征重要性来获取对用户选择项目进行交互的决策更为重要的项目属性信息。

(2) 在用户建模过程中引入用户对项目属性的偏好信息。从用户偏好的项目属性角度出发，利用用户对项目属性的偏好背景知识构建用户的一阶邻域图，学习得到用户的一阶邻域表示作为用户的历史兴趣偏好表示以及融合用户一阶邻域信息的用户实体表示。

(3) 在项目建模过程中引入用户对项目属性的偏好信息。即在邻域采样中利用用户对项目属性的偏好信息，尽可能选择对用户更重要的属性邻居进行采样，在减少随机采样带来的不确定性的同时还能够预先给模型训练指导一个方向；在邻域聚合中利用用户建模中获取的用户历史兴趣偏好表示与邻域采样后的邻居实体进行交互，得到用户对采样实体偏好的权重，权重越大，表明当前采样的实体与用户历史兴趣偏好越相似，用户越有可能感兴趣。

在三个数据集 MovieLens-20M、Book-Crossing 和 Last.FM 上进行的 CTR 预测和 Top-N 推荐的实验结果表明：KGNN-IAP 在 AUC、F1、召回率（R@N）三个性能指标上均优于 KGCN 及基线模型，证明了本文提出的推荐模型具有一定的优越性。

**关键词：**推荐系统；知识图谱；图神经网络；项目属性偏好；特征重要性

# Abstract

Recommender systems is an effective means to solve the problem of information overload in the Internet environment, which has been widely and continuously concerned by researchers. In order to alleviate the sparse and cold start problems existing in the traditional recommender systems, in recent years, researchers have used the knowledge graph as auxiliary information in the recommender systems to provide rich relationship and background knowledge between users and items, and introduced the graph neural network to capture the higher-order structure and semantic information among various entities and relationships in the knowledge graph. A recommender systems method based on knowledge graph and graph neural network is proposed, which can effectively improve the performance and interpretability of the recommender systems. However, there are some shortcomings in the existing recommendation methods, which do not further excavate the user's preference information for project attributes. As a result, the model may not be able to aggregate the more important structural information and semantic relations in the original graph during the training process. Secondly, in the process of client modeling, the learning of user embedding representation is also mainly represented by the project information that users have interacted with, and the learning mode is relatively simple, which cannot better represent the characteristics of users' interests and preferences.

To solve the above problems, this paper proposes a knowledge graph and graph neural network based on item attribute preference for recommender systems (KGNN-IAP) by improving the existing algorithm. The research work includes:

(1) Mining users' preference information for project attributes. From the perspective of project attributes, the process of user interaction is regarded as a multi-attribute decision making problem. The user-item interaction matrix is transformed into user-item attribute matrix, and the feature importance of tree model is used to obtain the more important item attribute information for

interactive decision making of user selection item.

(2) Introduce user preference information for project attributes in the process of user modeling. From the perspective of the user's preferred project attributes, the first order neighborhood graph of the user is constructed by using the user's preferred background knowledge of the project attributes, and the first order neighborhood representation of the user as the user's historical interest preference representation and the user entity representation integrating the user's first order neighborhood information are learned.

(3) Introduce user preference information for project attributes in the process of project modeling. That is, in the neighborhood sampling, the user's preference information for project attributes is used to select the attribute neighbors that are more important to the user as far as possible for sampling, which can not only reduce the uncertainty brought by random sampling, but also provide a direction for model training in advance. In the neighborhood aggregation, the user historical interest preference expression obtained in the user modeling is used to interact with the neighbor entity after the neighborhood sampling, and the weight of the user's preference for the sampled entity is obtained. The larger the weight is, the more similar the current sampled entity is to the user's historical interest preference, and the more likely the user is to be interested.

The experimental results of CTR prediction and Top-N recommendation on three datasets MovieLens-20M, Book-Crossing and Last.FM show that: KGNN-IAP is superior to KGCN and baseline model in AUC, F1 and recall rate ( $R@N$ ), which proves that the recommended model proposed in this paper has certain advantages.

**Keywords:** Recommendation system; Knowledge map; Graph neural network; Project attribute preference; Feature importance

# 目录

<b>1 绪论</b> .....	<b>1</b>
1.1 研究的背景及意义.....	1
1.2 国内外研究现状.....	3
1.2.1 传统推荐系统.....	3
1.2.2 基于图神经网络的推荐系统.....	4
1.2.3 基于知识图谱的推荐系统.....	5
1.2.4 基于知识图谱和图神经网络的推荐系统.....	7
1.3 论文的主要内容及创新.....	10
1.4 论文组织结构.....	11
<b>2 相关理论及技术</b> .....	<b>13</b>
2.1 推荐系统.....	13
2.1.1 推荐系统概述.....	13
2.1.2 推荐系统的任务.....	13
2.2 知识图谱.....	14
2.2.1 知识图谱概述.....	14
2.2.2 知识图谱的分类.....	15
2.3 图神经网络.....	17
2.3.1 图神经网络概述.....	17
2.3.2 基于空间的图卷积模型.....	17
2.4 基于知识图谱和图神经网络的推荐模型.....	20
2.4.1 概述.....	20
2.4.2 基于知识图谱和图神经网络的推荐模型分类.....	23
2.4.3 KGCN.....	25
2.5 特征重要性评估.....	27

<b>3 融合项目属性偏好的知识图谱推荐模型</b> .....	<b>30</b>
3.1 问题定义.....	30
3.2 模型总体架构.....	30
3.3 挖掘用户对项目属性的偏好.....	31
3.3.1 引言.....	31
3.3.2 用户对项目属性的偏好计算.....	32
3.4 用户嵌入.....	35
3.5 项目嵌入.....	36
3.6 模型预测.....	40
<b>4 实验结果与分析</b> .....	<b>41</b>
4.1 实验数据集.....	41
4.2 实验数据预处理.....	42
4.3 实验评价指标.....	43
4.4 实验对比模型.....	45
4.5 实验设置.....	46
4.6 实验结果.....	47
4.6.1 推荐模型实验对比分析.....	47
4.6.2 消融实验分析.....	50
4.6.3 超参数敏感分析.....	51
4.7 结论.....	53
<b>5 总结与展望</b> .....	<b>54</b>
5.1 总结.....	54
5.2 展望.....	56
<b>参考文献</b> .....	<b>57</b>
<b>致谢</b> .....	<b>64</b>

# 1 绪论

## 1.1 研究的背景及意义

近年来，随着互联网时代尤其是移动互联网时代的蓬勃发展，互联网的流量和信息迎来了指数式增长，人们从网络应用和移动应用上获取大量的网络信息资源变得越来越便捷。然而信息的爆炸式增长也给用户带来了信息超载（Information Overload）现象，即用户很难在纷繁复杂的海量信息资源中快速、精准的筛选出自己真正需要和感兴趣的内容。推荐系统（Recommender Systems, RS）<sup>[1, 2]</sup>作为一种信息过滤系统，能够根据海量的用户历史交互行为数据、用户画像、物品信息等以个性化的方式来呈现其可能感兴趣的内容，有效的过滤掉不符合用户需求的信息，从而能够适当缓解信息超载的问题，并且对增强用户体验、提高用户满意度具有一定的现实意义。经过不断的发展和更新迭代，现阶段的推荐系统已被广泛应用到电子商务、音乐和电影、个性化广告、社交网络、医疗、就业、教育等各行各业中，如何构建更加贴合用户个性化需求的推荐算法模型，从而提高推荐系统的推荐性能和推荐质量一直是研究者们关注的问题之一。

传统的推荐算法按照推荐机制的不同一般可以分为以下三类<sup>[3]</sup>：（1）协同过滤的推荐方法（Collaborative Filtering Recommendation, CF）<sup>[4]</sup>；（2）基于内容过滤的推荐方法（Content-Based Recommendation, CB）<sup>[5]</sup>；（3）融合以上两者的混合推荐方法（Hybrid Recommendation）<sup>[6]</sup>。但这三类推荐方法通常存在交互数据稀疏以及冷启动等问题，导致推荐效果并不理想。随着深度学习技术在各个领域的迅速发展，深度神经网络被广泛的应用到推荐算法领域，如卷积神经网络、循环神经网络、注意力模型等等。尤其是在图数据领域的扩展和应用中，近年来，图神经网络被认为在图数据处理方面具有得天独厚的优势，能够更好地挖掘推荐系统中用户的偏好信息和项目的特征表示。但是，只基于用户和项目历史交互数据构建推荐模型存在一定的局限性，

在交互数据稀疏或冷启动用户推荐场景下容易导致推荐效果不佳的问题，这就需要引入除用户和项目历史交互数据以外的辅助信息来缓解这些问题，如用户画像、物品属性特征、社交网络、上下文信息等等。这些大量的辅助信息天然存在着复杂多变的网状结构知识，而知识图谱(Knowledge Graph, KG)为表达、管理和利用这些网状结构知识提供了一种有效的方式。知识图谱<sup>[7]</sup>是一种有向的基于图数据的数据结构，由节点和节点之间的边组成，其中节点对应实体，边对应实体之间的关系，其本质上是一种大型的、结构化的语义网络知识库，能够提供丰富的知识表达和关联信息。因此，将知识图谱引入到图神经网络的推荐算法模型中，能够借助 KG 中丰富的辅助信息来更好地学习用户和项目的特征表示，不仅能够提升推荐系统的准确性，还给推荐系统的推荐结果提供了多样性和可解释性，这些性质也有助于提高用户的使用体验和对推荐系统的信任。因此，近年来越来越多的研究者将知识图谱和图神经网络两者融合进行推荐系统模型的构建以提升推荐系统的性能。然而，现有的研究工作依然存在以下两个问题：

- 未挖掘用户对项目属性的偏好信息。在现有的基于知识图谱和图神经网络的推荐系统中，其邻域采样和邻域聚合的过程主要从项目角度考虑中心实体和邻居实体的相关性，对于用户兴趣的偏好也仅局限于用户对关系的偏好而未考虑到用户对项目属性的偏好，无法深层次的挖掘用户的兴趣特征。
- 用户嵌入表示的方式较为单一。在现有基于知识图谱的推荐方法中，大都只利用用户与项目的交互关系在图中进行路径挖掘来学习用户的嵌入表示，没有导入用户丰富的背景知识，特征嵌入表示不能准确地拟合用户兴趣，容易导致模型的次优表示。

因此，本文研究如何在基于知识图谱和图神经网络的推荐系统中引入用户对项目属性的偏好信息来更好的学习用户和项目的特征表示，以进一步提升模型的推荐性能。

## 1.2 国内外研究现状

### 1.2.1 传统推荐系统

推荐系统是一种过滤信息的重要方法，它通过利用用户与项目的历史交互信息来学习不同用户或项目之间的相似度，根据用户偏好为用户推荐其可能感兴趣的项目。传统的推荐系统通常面临交互数据稀疏以及冷启动等问题。以应用广泛的基于矩阵分解的协同过滤算法为例，一般仅需要利用用户-项目的历史评分数据即能达到较好的推荐准确性，但在实际应用中，用户与项目的交互数据往往较为稀疏。此外，在新用户或新项目的推荐场景下，由于没有交互数据而很难进行推荐，存概率矩阵分解在用户或项目冷启动的问题，这进一步限制了模型的推荐性能。

一些研究者们将社交网络、用户画像、人口统计学、项目属性等额外的信息加入到基于矩阵分解的推荐模型中，这在一定程度上缓解了上述存在的两个问题。从项目属性特征的角度来看，Li Cong<sup>[8]</sup>提出了基于属性值偏好矩阵（Attributes-value Preference Matrix，APM）的协同过滤推荐算法，通过将稀疏的用户-项目的历史评分矩阵映射到相关项目属性上，为每个用户生成了较为稠密的 APM，从而基于 APM 来计算用户的相似度，在一定程度上缓解了用户评分稀疏和冷启动的问题。Yu 等人<sup>[9]</sup>提出了一种基于属性耦合的矩阵分解推荐方法，通过采用项目属性耦合对象相似度来学习项目之间的潜在关系，并利用项目-属性信息建立项目关系对矩阵分解的过程进行正则约束，在一定程度上缓解了冷启动的问题。除了在基于矩阵分解的推荐算法中直接利用项目属性信息，还有一些研究者从用户偏好的角度来引入用户对项目属性的偏好信息。胡新明<sup>[10]</sup>将商品的推荐问题看成是一个商品多属性的决策问题，借鉴文本分类中的 TF-IDF 算法计算用户对商品属性值的偏好程度，将用户对商品的评分矩阵转化为带偏好权重的用户商品属性评分矩阵，提出了基于商品属性的协同过滤推荐方法，在一定程度上改善了用户评分矩阵的稀疏性问题，并有效提高了推荐系统的准确性。魏港明等人<sup>[11]</sup>利用用户评分数据和项

目属性数据来获得项目属性评分次数，从统计意义上获取了用户对项目各属性的偏好矩阵，提出了加入项目属性特征因子和用户对项目属性的偏好特征因子的矩阵分解算法（UC-SVD），更好的将评分和项目属性信息综合融入到矩阵分解算法中，对矩阵分解中隐类的分解带来了额外的提升效果，有效缓解了项目冷启动的问题，同时也提升了模型的推荐性能。

上述方法在推荐算法中都引入了用户对项目属性的偏好信息，拓展了新的研究视角，但是在计算用户对项目属性的偏好权重时都没有考虑到项目属性在用户不同交互状态下项目集合中的分布情况，对用户根据项目属性偏好信息来选择某一或某些项目的决策没有发挥更大的作用。借鉴于此，本文将用户对项目属性的偏好信息融合到知识图谱结合图神经网络的推荐模型中，以便能够增强推荐模型对用户兴趣偏好的挖掘能力，带来更高的推荐性能。

## 1.2.2 基于图神经网络的推荐系统

推荐系统中的大部分数据天然存在着跟图数据一样的网络结构属性。像用户、项目、属性特征等等都能通过多种类型的关系相互网罗成紧密的图结构数据，例如用户之间的社交网络关系（朋友关系、家人关系、同事关系等）、用户与项目之间的交互关系（点击、购买、浏览等），从而生成了能够表达不同内容的图结构数据。这类非欧式结构化数据通常具有格式不一、结构不标准、数据复杂性高等特点，这给传统的推荐算法带来了较高的应用和处理的门槛，从而无法进行有效的利用和图结构数据的建模。

图学习（Graph Learning, GL）能够从复杂的图结构数据中捕获和学习各种实体和关系的特征表示，尤其是图神经网络（Graph Neural Network, GNN）<sup>[12]</sup>的提出，能够通过挖掘用户与项目之间高阶、复杂的关系，更加高效地学习用户和项目的特征表示。Berg R 等人<sup>[13]</sup>基于用户-项目的二部图提出了一种图自编码器框架，即以图卷积神经网络为编码器在图中进行消息传递生成用户和项目之间的隐含特征表示，再结合一个双线性解码器构建评分链接，将用户-项目评分矩阵的补全看作是图上的链接预测问题，在纯协同过滤的场景

中，缓解了与冷启动问题相关的推荐性能瓶颈。Jiani Zhang 等人<sup>[14]</sup>提出了一种新的堆叠和重构图卷积网络模型 STAR-GCN，也采用了图卷积网络作为编码器，在用户-项目二部图上通过使用多个图卷积网络编码器和解码器与中间监督结合来重建掩码的输入节点表征，从而能够为新节点生成节点表征，有效缓解了推荐过程中的冷启动问题，并显著地提高了预测性能。Wenqi Fan 等人<sup>[15]</sup>不但在用户-项目交互图上执行图卷积操作，还在用户-用户社交图上引入融合注意力机制的图卷积网络，从而能够在社交图和用户-项目交互图中将项目聚合和社交聚合的用户表示有效的结合起来，以便学习到更加丰富的用户嵌入表示，带来了更优越的推荐性能。

尽管图神经网络在图数据处理方面能够更好的挖掘推荐系统中用户的偏好与项目的特征，然而只关注用户与项目的历史交互信息，没有导入更多的用户与项目的背景知识存在一定的局限性，当交互数据较稀疏时将依然存在冷启动等问题。

### 1.2.3 基于知识图谱的推荐系统

近年来，基于知识图谱的推荐系统受到越来越多学术界和工业界研究者的深入研究，他们将用户、项目和多种类型的关系等信息整合到知识图谱中，提供了用户与项目间丰富的语义相关性和背景知识，从而能够更好的挖掘它们之间的潜在联系，提升推荐性能的同时还增加了推荐结果的可解释性和多样性，为用户带来更加合理的个性化推荐体验。知识图谱作为当下最为常用的图数据的知识表示结构，通常以三元组<头实体，关系，尾实体>的形式表示，实体间通过不同的关系相互联结，构成了复杂丰富的网状知识结构，在此之上可以进行知识图谱的特征学习。基于知识图谱的推荐模型按照算法思想的差异一般可以分为三类：基于路径的推荐、基于嵌入的推荐和基于混合的推荐。

基于路径的推荐方法主要是在用户-项目交互图中按照提前构建好的路径规则自动挖掘实体间的连接关系，以此计算实体之间的相似性从而实现推荐。

这类方法起源于 2013 年, Yu 等人<sup>[16]</sup>提出一个基于矩阵分解的推荐模型框架, 通过选择多条不同元路径来计算每种路径上项目对的相似度, 然后利用相关信息网络将用户评分和基于相似度定义的各种实体相似性矩阵相结合, 获得了更细化的用户和项目的特征表示, 实现了更精准的推荐性能, 但该方法没有考虑不同路径的权重, 无法准确捕获图上实体之间的语义关系。Shi 等人<sup>[17]</sup>提出了一种基于语义路径的加权异构信息网络推荐模型 SemRec (Semantic Path based Personalized Recommendation), 利用用户评分生成带权重的元路径, 然后通过一种带权路径的相似度计算方法捕获图中用户之间的相似度, 最后基于与目标用户相似的用户评分完成项目的评分预测。SemRec 方法具备可解释性高、个性化权重、可快速运算的优良特点, 但该方法严重依赖人工手动设计的元路径, 适用场景有限, 且在大规模知识图谱中充分计算用户-项目的所有路径也不大现实。

基于嵌入的推荐方法通常需要利用知识图谱嵌入技术对知识图谱中的实体和关系进行特征表示的学习。这类方法主要经过两个模块的工作来完成推荐, 即图嵌入模块和推荐模块<sup>[18]</sup>。图嵌入模块对知识图谱中的实体和关系进行特征表示的学习, 而推荐模块则对图嵌入模块获得的特征表示进行加工处理, 完成整个推荐模型的预测推荐任务。其中, 图嵌入模块常用的知识图谱嵌入模型有基于距离翻译模型的 TransE 系列<sup>[19-23]</sup>、高斯嵌入系列<sup>[24, 25]</sup>和其他距离模型<sup>[26, 27]</sup>以及基于语义匹配模型的 SME<sup>[28]</sup>、NAM<sup>[29]</sup>、MLP<sup>[30]</sup>等。这些图嵌入方法能够将高维稠密的图数据映射为低维嵌入表示, 同时保留了图谱中原有的拓扑结构信息和语义信息, 有效解决了基于路径的推荐方法中过度依赖元路径人工手动设计和无法充分挖掘语义关系的问题。但是, 这些图嵌入模型在建模过程中缺乏发现多跳关系路径的能力, 容易导致推荐结果可解释性较低的问题。

基于混合的推荐方法融合了基于路径和嵌入推荐的算法思想, 将知识图谱中的路径与嵌入的语义信息结合起来, 通过在整个图谱上的消息传播来丰富用户和项目的表示, 最后再利用推荐模块完成模型的预测推荐。Wang 等人<sup>[31]</sup>提出了一种端到端的结合知识图谱的推荐模型框架: RippleNet (Ripple

Network), 首次在基于 KG 的推荐系统中将基于路径和基于嵌入的推荐方法相结合。具体来说, 先将图谱中的项目经过嵌入转化为低维向量, 然后借鉴水波 (Ripple) 传播的思想, 将用户的历史交互项目作为项目知识图谱中的种子集合, 然后沿着目标项目在项目知识图谱中的路径进行迭代的波纹扩展, 通过这种偏好传播的方法能够不断自动的发现用户潜在的层级兴趣, 构建更丰富的用户嵌入表示。相较于传统的基于路径的方法, RippleNet 可以自动的学习发现 KG 中可解释的路径。这类基于知识图谱的混合推荐方法虽然取得了阶段性的成果, 但未充分利用图谱的高阶结构和语义信息, 且存在计算成本高和计算冗余等问题。如何更好地挖掘整个 KG 的语义关系和拓扑结构信息、探索实体间的高阶结构特征是基于知识图谱的推荐系统的一大挑战。

## 1.2.4 基于知识图谱和图神经网络的推荐系统

知识图谱包含了实体和关系之间的拓扑结构和语义关系, 为推荐算法额外引入了更多有用的辅助信息 (Side Information), 不仅能够丰富推荐系统中用户和项目的背景知识, 有效地弥补传统推荐算法中交互信息的稀疏、缺失、冷启动等问题, 还能帮助推荐系统产生多样化、个性化、可解释的推荐结果。知识图谱本身恰好就是一种图结构数据, 应用图神经网络技术可以很好地学习知识图谱中多种实体和关系的低维嵌入表示, 对图数据中的拓扑结构和语义特征等信息进行合理地传播、整合和推理, 从而学习到更为精细的实体特征表示, 为深层次挖掘知识图谱中的高阶结构和语义信息提供了一种端到端的训练方式。因此, 将知识图谱与图神经网络技术相结合以提升推荐系统的性能和可解释性已经成为了一种新的研究趋势。

在基于知识图谱和图神经网络的推荐系统中, 消息传播的核心思想就是邻域聚合, 即通过聚合知识图谱中的多阶邻域特征信息来学习目标实体的嵌入表示。但知识图谱中通常会有多种类型的实体和关系信息, 需要深入挖掘实体与关系之间复杂、高阶的关联信息, 才能更好的学习用户和物品的嵌入表示, 使其有效地融入到推荐任务中。为了区分不同关系和邻居实体的重要

性，一些模型考虑了实体与实体之间的关系信息的处理。如 Wang 等人<sup>[32]</sup>提出了一种知识图谱卷积网络模型（Knowledge Graph Convolutional Network，KGCN），在由项目实体、关系和属性实体组成的项目知识图谱中，该模型通过一个函数 $g(u, r)$ 对用户 $u$ 和关系 $r$ 做内积得到关系对用户的权重 $\pi_r^u$ ，表征了关系 $r$ 对用户 $u$ 的重要性。用户喜欢一个项目可能是因为该项目包含了某种重要的关系。例如，一个用户可能偏好电影的“类型”，另一个用户可能更关注电影的“演员”。尽管 KGCN 的推荐性能已经达到不错的效果，但它没有引入用户相关的背景知识，对用户实体嵌入表示的学习较为简单，尚有进一步提升的空间。另外一些模型将用户-项目交互图与项目知识图谱融合，不仅考虑项目嵌入表示的学习，也关注对用户嵌入表示的学习。如 Wang 等人<sup>[33]</sup>又提出了一种知识图谱注意力网络模型（Knowledge Graph Attention Network for Recommendation，KGAT），利用用户与项目的交互关系和项目之间的属性关系作为捕捉图谱中高阶信息的链接，相比传统基于协同过滤的推荐方法能够学习到更多相似的用户和项目，更好的探索用户潜在的兴趣偏好，同时在邻域聚合过程中引入注意力机制来区分不同邻居实体对中心实体的重要性，从而在邻域聚合时能够重点聚合相关性更高的邻居实体信息，细化了不同邻居实体的权重影响，能够更有效的学习用户和项目的嵌入表示。上述两种方法在邻域聚合过程中主要考虑了用户对关系的偏好或者以不同邻居实体对中心实体的相关性作为不同邻居实体的权重去聚合邻域信息，存在一定的局限性，没有从用户角度考虑用户对项目属性的兴趣偏好来衡量不同邻居实体的重要性。在用户端建模中主要利用用户交互过的项目来得到用户的嵌入表示，学习方式较为单一。此外，在新用户推荐的场景下，新用户交互数据较少或者没有可能无法更好的表征用户的兴趣特征，导致很难学习到冷启动用户的兴趣偏好。而这些问题都需要引入丰富的用户背景知识才能更好地学习到用户的特征表示。

此外，在基于知识图谱和图神经网络的推荐系统中，当前目标实体的嵌入表示是由它的邻居实体通过不断迭代的聚合和转移向量表示计算得来的，随着在图中进行的迭代跳数的增加，多跳邻居会消耗大量的计算资源，导致

邻居爆炸的问题。为了解决这个问题，一些研究者提出了“固定邻域”的图采样策略，即在图采样的过程中只采样固定大小数量的邻居，而不使用完整的邻居集合，大幅度地降低了计算资源的开销。如 Pinterest 研究团队提出了一种结合随机游走和图卷积网络的高效算法 Pinsage<sup>[34]</sup>，该算法的核心是通过一种基于随机游走的采样方法对邻域进行固定大小的采样，进而生成当前目标实体的新的子图。这种方法可以快速收集到远端节点，且经过频率筛选生成的子图的样本表达能力更强也更具泛化能力，Pinsage 在大规模图的嵌入学习中取得了快速又良好的效果。包括之前提到的 RippleNet<sup>[31]</sup>和 KGCN<sup>[32]</sup>模型，在每一跳邻域聚合的过程中都是对邻居实体进行固定数量的随机采样以减少计算开销。但这些采样方法可能会丢失原始图中重要的结构信息和语义关系，最终聚合得到的用户和物品的嵌入表示将难以更好地表征用户真实的兴趣偏好和物品的自然属性特征。此外，这些采样策略中的随机性也会较大地影响推荐模型的性能和稳定，甚至会在训练过程中引入额外的噪声。因此，一些学者开始在采样过程中侧重于选择与中心实体相关性更高或者关系紧密性更高的邻居实体，以便能够利用更为重要的结构和语义信息来训练，减少随机采样带来的负面影响。李世宝等人<sup>[35]</sup>提出了一种基于共同邻居排序采样的知识图谱卷积网络推荐模型 KGCN-PN，该模型通过度量实体之间的共同邻居数目来衡量不同邻居实体与中心实体的关系紧密性，据此来对 KG 中每个目标实体的邻居实体集合进行排序，然后从排序序列中进行固定邻域采样。梁顺攀等人<sup>[36]</sup>提出了一种基于关系紧密度采样策略和平均池化聚合策略的知识图谱卷积网络推荐算法 KGCN-PL，该模型通过计算关系紧密度来度量不同邻居实体对中心实体的重要性，在邻域采样时选择对中心实体更为重要的邻居实体进行聚合，减少了随机采样带来的不确定性。但上述这些邻域采样策略更多的是从项目角度出发，存在一定的局限性，没有根据用户的兴趣偏好来聚合对用户而不是对项目更为重要的结构信息和语义关系。

### 1.3 论文的主要内容及创新

通过梳理国内外研究现状，本文主要针对的问题包括：

(1) 在推荐算法中融入用户对项目属性偏好信息的研究工作中，现有的项目属性偏好权重的计算方法没有考虑到项目属性在用户不同交互状态下项目集合中的分布情况，对用户根据属性偏好信息来选择某一或某些项目的决策没有发挥更大的作用。

(2) 用户嵌入表示的学习主要利用用户交互过的项目信息来表征，学习方式较为单一，且在新用户推荐的场景下，用户-项目交互数据稀疏或者缺少时，将难以捕获冷启动用户的兴趣偏好，无法更好的表征用户的兴趣特征，容易导致模型的次优表示。

(3) 在邻域聚合和邻域采样时主要考虑用户对关系的偏好或者不同邻居实体对中心实体的相关性，存在一定局限性，没有根据用户的兴趣偏好来度量不同邻居实体的重要性。

本文针对上述问题展开相关研究，通过改进 KGCN 模型，提出了一种基于知识图谱的融合项目属性偏好的图神经网络推荐模型 (KGNN-IAP)。本文提出的 KGNN-IAP 模型主要贡献有：

(1) 挖掘用户对项目属性的偏好信息。借鉴一些研究者在矩阵分解的模型中融入项目属性偏好信息的做法，将用户-项目历史交互矩阵按照统计次数转换为用户项目属性矩阵。从项目属性角度来看将用户选择与项目进行交互的过程看作是一个多属性决策的问题，进而考虑使用树模型的特征重要性来获取对用户做出决策更为重要的项目属性信息，相较于以往计算项目属性偏好权重的方式，这种方法考虑到了项目属性在用户不同交互状态下项目集合中的分布情况，所获取的用户对项目属性的偏好信息，对用户做出选择某一或某些项目进行交互的决策能够发挥更大的作用。

(2) 在用户建模中融入用户对项目属性的偏好信息。本文从用户偏好的项目属性的角度出发，利用用户对项目属性的偏好背景知识来构建用户的知识图谱，学习得到了用户的一阶邻域表示作为用户的历史兴趣偏好特征以及

融合用户一阶邻域信息的用户实体嵌入表示，相较于以往利用用户交互过的项目、用户属性等信息来学习用户的嵌入表示的做法，直接选择用户在与项目交互时更为看重的项目属性更能反应用户的兴趣偏好。

(3) 在项目建模过程中融入用户对项目属性的偏好信息。具体来说，在邻域采样时根据用户对项目属性的偏好信息尽可能选择对用户更为重要的属性邻居进行采样，在减少随机采样带来不确定性的同时，还能够利用 KG 中更重要的结构信息和语义关系来表征用户真实的兴趣偏好和物品的自然属性特征，预先给模型训练指导一个方向；在邻域聚合中利用用户建模中获取的用户历史兴趣偏好特征与邻域采样后的邻居实体进行交互，得到用户对采样实体偏好的权重，权重越大，表明当前采样的实体与用户历史兴趣偏好越相似，用户越有可能感兴趣。最终能够学习得到更细致的项目嵌入表示。

(4) 本文通过改进 KGCN 模型提出了一种基于知识图谱的融合项目属性偏好的图神经网络推荐模型 (KGNN-IAP)，最终在三个实验数据集上验证了本文模型的有效性。

## 1.4 论文组织结构

围绕基于知识图谱和图神经网络的推荐模型研究，本论文分为以下五章。

第一章是绪论。本章首先介绍了推荐系统的应用背景和应用意义以及将知识图谱和图神经网络两者融合进行推荐系统模型构建的研究背景及意义；然后论述了推荐系统国内外研究的发展状况；最后介绍了论文的研究内容，并对研究中的创新性做出了说明。

第二章是相关理论及技术。本章介绍了与研究领域相关的背景知识与支撑技术，包括推荐系统、知识图谱、图神经网络和基于知识图谱与图神经网络相结合的推荐模型及其相关理论和技术基础。

第三章是本文提出的基于知识图谱的融合项目属性偏好的图神经网络推荐模型 (KGNN-IAP) 的详细内容。本章主要介绍了本文提出的 KGNN-IAP 模型，包括问题陈述、符号定义、推荐模型总体框架以及模型的各个模块。

第四章是实验结果与分析。本章主要介绍了实验所需的数据集及数据预处理、评价指标、实验设置、实验结果和实验的结论。

第五章是总结与展望。本章对论文全部的研究工作进行总结，介绍本文提出的推荐系统模型的意义及研究中的不足，最后对未来研究工作进行了展望。

## 2 相关理论及技术

### 2.1 推荐系统

#### 2.1.1 推荐系统概述

推荐系统通过信息过滤和筛选从海量的数据信息中能够提供给用户所需要的信息，满足用户个性化、多样化的信息需求。推荐系统本质上是通过相似度的计算或行为概率的预测来建立用户与项目的联系，利用用户与项目的背景信息、用户与项目的历史交互信息等进行推荐模型的构建，从而实现符合用户偏好需求的项目的推荐。推荐系统的具体定义<sup>[37]</sup>如下：

设 $U$ 表示所有用户的集合， $I$ 表示所有项目的项目集合，用 $L_{ij}$ 表示用户 $U_i$ 对项目 $I_j$ 的喜爱程度。例如在电影推荐中，用户对其看过的电影的评分就可以作为 $L_{ij}$ 。给定一个预测函数 $f: U \times I \rightarrow L$ ，推荐系统主要的工作就是对给定的一个用户 $U_i$ ，预测该用户对没有交互过的项目产生交互的概率， $I_k$ 是用户交互概率最大推荐项目，具体定义如下：

$$\forall U_i \in U, I_k = \arg \max f(U_i, I_j) \quad (2-1)$$

#### 2.1.2 推荐系统的任务

Top-N 推荐、点击率预测和评分预测是推荐系统的三大主要任务，相关介绍如下：

##### (1) Top-N 推荐

一般用户打开网站应用或者手机应用浏览信息时会被给到一个根据用户个性化偏好生成的项目推荐列表，这是根据用户的历史行为和相关特征信息计算得到的 N 个排序好的推荐列表，不同用户的推荐列表往往不同。Top-N 推荐广泛应用于如淘宝、Amazon 等购物场景以及很多拿不到用户显式反馈数据的场景中。

## (2) 点击率预测

点击率 (Click-Through Rate, CTR) 预测任务一般应用于广告推荐任务中, 对用户浏览广告时选择点击的概率情况做出预测。在其他推荐任务中, 也可以对用户与项目交互情况 (点击、浏览等) 进行预测。CTR 预测问题一般是一个二分类的问题, 可以输出交互或不交互两种情况, 也可以输出一个交互概率值, 我们可以认为这个概率值是某个用户与某个项目交互的概率。

## (3) 评分预测

评分预测 (Rating Prediction) 任务根据已有的用户历史评分信息预测用户未交互过项目的评分。一般多媒体网站会有让用户对其提供的服务或项目打分的功能, 如豆瓣电影评分, 评分预测一般应用于有显式评分信息的评价网站。

本文提出的模型在 CTR 预测和 Top-N 推荐两个推荐任务下进行实验分析。

## 2.2 知识图谱

### 2.2.1 知识图谱概述

知识图谱能够形式化地描述现实世界中的实体和概念, 以及它们之间相互存在的各种关系, 其本质上是一种大型的、结构化的语义网络知识库, 能够将推荐系统中复杂的信息以接近于人类认知世界的形式表示出来, 从而为推荐系统提供丰富的知识表达和关联信息。知识图谱目前广泛应用于各种场景中, 如搜索引擎、医疗、智能问答、金融投资、社交网络等。

知识图谱是由多个实体和连接两个实体的边所构成的拓扑结构, 知识图谱的形式化定义为:  $E$  表示知识图谱的实体集合, 包含头实体和尾实体,  $R$  表示实体之间关系的集合, 知识图谱  $G = \{(h, r, t) | h, t \in E, r \in R\}$  表示为图中所有三元组的集合, 每一个三元组表示头实体  $h$  与尾实体  $t$  存在关系  $r$ 。如图 2-1 所示, 三元组 (Anna Karenina, writer, Tolstoy Leo) 表示《安娜·卡利尼娜》的作者是列夫·托尔斯泰。

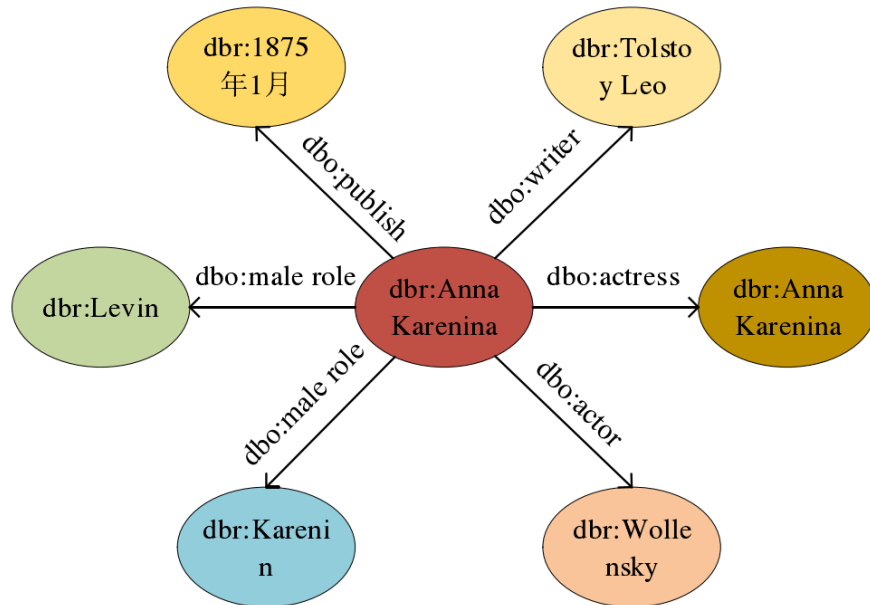


图 2-1 关于书籍《安娜·卡列尼娜》的知识图谱示例

### 2.2.2 知识图谱的分类

用于推荐系统的知识图谱根据用户实体是否加入一般可以分为两类，其中最普遍的是如文献<sup>[38, 39]</sup>等构建的项目知识图谱（Item Knowledge Graph, IKG），以及将用户实体、项目实体以及它们之间存在的多种关系构建而成的协同知识图谱（Collaborative Knowledge Graph, CKG）<sup>[40]</sup>。

项目知识图谱是由项目及项目属性构建而成的，图谱中包含项目实体、关系和项目属性实体，没有用户实体的加入，也就没有将用户-项目交互图融合进来。在基于项目知识图谱的模型中，主要任务是学习项目的嵌入表示，而图谱中的实体不直接参与用户嵌入表示的学习。

协同知识图谱是由用户-项目交互的知识图谱与项目知识图谱融合而构成的，图谱中不仅包含项目实体、项目属性实体，还包含了用户实体，除了项目之间的关系，还加入了用户与项目之间的交互关系。在基于协同知识图谱的模型中不仅需要考虑项目嵌入表示的学习，也需要关注用户嵌入表示的学习。图 2-2 为协同知识图谱示例，可以看出，用户与项目之间为单一的交互关系，彼此构成了用户-项目交互图，项目和属性实体之间存在多种不同类

型的关系，彼此构成了项目知识图谱。用户、项目、属性实体通过各自的关系共同构成了协同知识图谱。

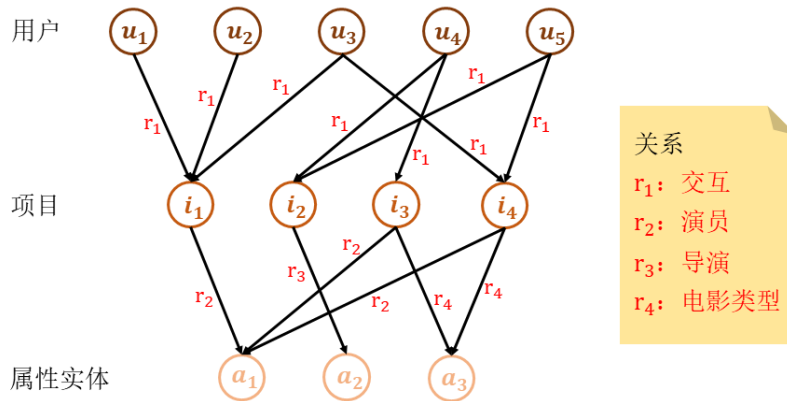


图 2-2 协同知识图谱示例

本章主要为项目 and 用户两者分开构建项目知识图谱和用户知识图谱。两个图谱通过用户对项目属性的偏好信息建立联系，从项目知识图谱中学习项目的嵌入表示，从用户知识图谱学习用户的嵌入表示。

不论是项目知识图谱，还是协同知识图谱，知识图谱中都包含了丰富的知识表达和关联信息，如项目的相关属性信息和项目之间的关系、用户与项目的交互关系等等。知识图谱在推荐系统中主要能发挥以下作用<sup>[41]</sup>：

(1) 知识图谱引入了实体之间的语义信息有助于发现它们之间的潜在联系，深度挖掘用户的兴趣偏好，有助于提高模型的性能并带来推荐结果的可解释性；

(2) 知识图谱提供了实体之间丰富的连接关系，有利于拓展发散用户的喜好，带来推荐结果的多样性。

但知识图谱在推荐系统中应用的过程中也面临着一些问题，例如，如何对知识图谱中复杂的结构进行合理简化以实现信息的高效传播和挖掘？如何捕获图谱中多种实体和关系之间高阶复杂的关系以有效地融合到推荐模型中？如何从图谱中更好地学习到用户和项目的嵌入表示以进一步提高推荐性能和可解释性？

## 2.3 图神经网络

### 2.3.1 图神经网络概述

图神经网络是指使用神经网络来学习图结构数据，提取和发掘图结构数据中的特征和模式，满足聚类、分类、预测、分割、生成等图学习任务需求的算法总称<sup>[42]</sup>。一般基于图神经网络的模型主要用来实现图特征的学习过程，比如知识图谱中实体的特征表示，模型训练过程中的输入一般是图的属性和图的结构，输出则是一组更新后的实体表示。

图神经网络的提出最早可以追溯到 2005 年，Gori 等人<sup>[12]</sup>首次提出了一种能够直接处理图结构数据的神经网络模型：图神经网络（Graph Neural Network, GNN）。之后，Scarselli 等人<sup>[43]</sup>和 Micheli 等人<sup>[44]</sup>对该模式下的 GNN 算法进行不断改进，通过特征映射和实体聚合的方式给图中每个实体生成嵌入表示，缺点就是对更复杂的图数据不能灵活处理。针对于此问题，Bruna 等人<sup>[45]</sup>通过对卷积算子的巧妙转换提出了图卷积神经网络，是最早提出在图上构建卷积神经网络的方法，该方法基于图谱理论使用卷积定理在谱空间上定义图卷积，后来逐渐发展成为图卷积领域的谱方法。但谱方法在空域上没有明确的意义，具有较高的时空复杂度。Thomas Kipf 等人<sup>[46]</sup>在 2017 年提出 GCN（Graph Convolutional Network），受到谱图卷积的局部一阶近似可以用于对局部图结构与实体的特征进行编码从而确定卷积网络结构的启发，提出了一种可扩展的图卷积的实现方法，虽然该方法被归为谱方法，但已经开始从实体的空间角度来定义图卷积，在此之后，基于空间的图卷积方法应运而生，成为了图卷积网络另外一支重要的研究方法。本文使用的是基于空间的图卷积方法，下一节主要对空间图卷积模型进行梳理和介绍。

### 2.3.2 基于空间的图卷积模型

类似深度学习中使用卷积神经网络对图像的像素点进行卷积计算，基于

空间的图卷积模型从图数据的空间特征出发，通过计算中心实体与邻居实体之间的卷积来得到中心实体的更新表示。一般构建基于空间的图卷积神经网络模型的通用框架有以下两个。第一个是混合卷积网络，文献<sup>[47]</sup>试图将深度学习的方法推广到非欧几里得结构的数据如图和流形，提出了混合模型网络（MoNet），一个允许在非欧几里得域上设计卷积深体系结构的通用框架。平移不变性的缺失给图卷积神经网络的定义带来了很多困难，为解决该问题，MoNet 在图上定义的坐标系下将实体之间的关系映射为一个低维向量，同时通过簇权重函数作用在中心实体的邻近实体上，以实体间的关系表示为输入，输出一个标量值，进而获得图中每个实体相同尺寸的向量表示：

$$(f_G^* g)(x) = \sum_{j=1}^J g(i) D_j(x) f \quad (2-2)$$

其中， $\{g(j)\}_{j=1}^J$  表示卷积核。不同于混合卷积网络，Gilmer<sup>[48]</sup>等人提出了另外一种基于聚合函数的图卷积神经网络模型的通用框架：消息传递图神经网络（MPNN），其核心在于定义图中实体之间的聚合函数，基于聚合函数，每个实体可以表示为周围实体和自身的信息叠加。MPNN 框架主要包括两个阶段：消息传递（message passing）和读出（readout）。其中消息传递阶段分为两个步骤，首先将聚合函数作用在目标实体及其邻居实体上，聚合获得目标实体的邻域表示，然后将更新函数作用在实体自身的特征及其邻域表示上，更新自身实体的特征，公式如下：

$$m_v^{t+1} = \sum_{w \in N(v)} M_t(h_v^t, h_w^t, e_{vw}), h_v^{t+1} = U_t(h_v^t, m_v^{t+1}) \quad (2-3)$$

其中， $h_v^t$  是实体  $v$  的自身特征， $h_w^t$  表示实体  $v$  的邻居实体的特征， $e_{vw}$  表示实体及其邻居实体之间边的特征，通过聚合函数  $M_t$  得到实体  $v$  在第  $t + 1$  层的邻域表示  $m_v^{t+1}$ ，通过更新函数  $U_t$  得到实体  $v$  的新的特征表示。之后，读出阶段通过读出函数对实体级别的表示进行读出，获得图级别的表示，公式如下：

$$\hat{y} = R(\{h_v^T | v \in G\}) \quad (2-4)$$

其中， $\hat{y}$  表示图最终的输出向量， $R$  是读出函数。

一般基于 MPNN 框架设计的图神经网络模型需要根据任务和具体的图结构灵活的设计不同的聚合函数、更新函数以及读出函数，从而利用不同的方

式聚合自身和邻居特征以获得整个图的特征。对此，研究者提出了很多相关的模型和方法。文献<sup>[49]</sup>首先提出在空间上的卷积操作方法- PATCHY-SAN，使用实体中心度或 Weisfeiler-Lehman<sup>[50]</sup>算法来测量实体的中心性，据此对各个实体进行排名，并以固定间隔的方式从排序中选取实体；在实体邻域集合收集集中，利用广度优先搜索扩展中心实体的邻居实体，与中心实体一起构成一个固定大小的邻域集合。PATCHY-SAN 方法对中心实体和邻居实体进行了有序的组织，并对它们的特征加以利用。该过程如图 2-3 所示。

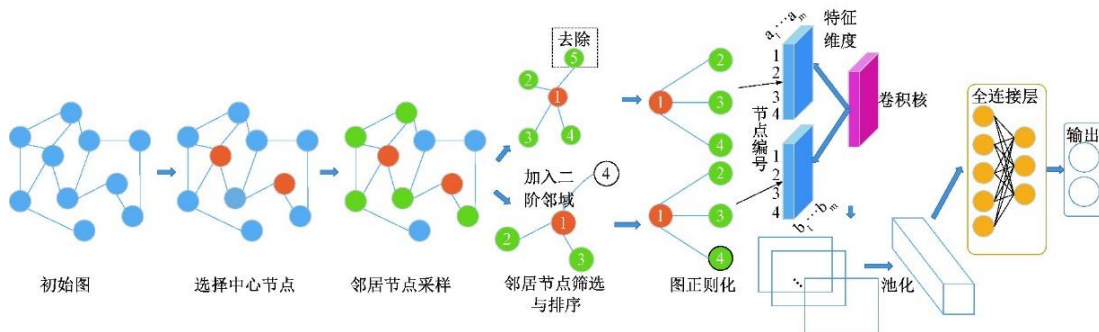


图 2-3 一个标准的空间图卷积处理流程

文献<sup>[51]</sup>提出了一种归纳式实体嵌入算法 GraphSAGE，能够将 GCN 全图采样优化到当前对中心实体的邻域采样。具体来说，图谱中心实体通过向外逐渐扩展进行邻域采样，在每层邻域中随机采样不同标准数量的邻居实体，当邻居实体数量小于采样所需数量时，则在对应的邻居实体集合中进行重复采样；在邻域聚合上，GraphSAGE 设计了三种不同的聚合策略：平均聚合、LSTM 聚合和池化聚合。GraphSAGE 通过将每轮迭代的邻居实体特征向量传递聚合到中心实体，最终生成中心实体的特征聚集向量。

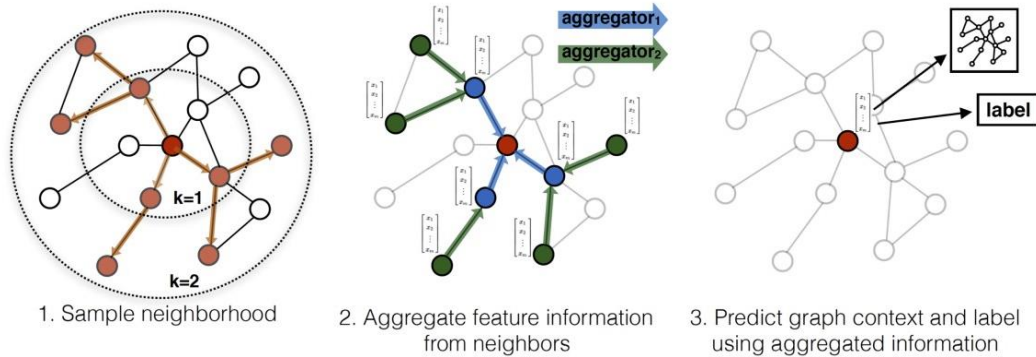


图 2-4 GraphSAGE 的算法流程

图 2-4 举例了在 GraphSAGE 中红色目标实体学习嵌入向量的过程，主要分为三步进行：第一步是对目标实体的邻域进行随机采样， $k=1$  表示在一阶邻域中采样了 3 个邻居实体， $k=2$  表示在二阶邻域中采样了 5 个邻居实体；第二步是聚合邻居实体的信息生成目标实体的嵌入向量，先聚合二阶邻域的特征生成一阶邻域的嵌入向量，再聚合一阶邻域的特征得到目标实体的嵌入向量；第三步是使用更新后的实体嵌入向量，完成具体的预测目标任务。

## 2.4 基于知识图谱和图神经网络的推荐模型

### 2.4.1 概述

为了解决传统推荐系统存在的数据稀疏性和冷启动两大问题，学术界和工业界广泛使用知识图谱作为外部信息整合到推荐系统中以具备常识推理能力。知识图谱本身是一种图结构数据，研究者们基于图神经网络强大的聚合信息以及推理能力，设计了基于知识图谱和图神经网络的推荐模型，不仅有效的提升了推荐性能，基于图神经网络的强大的信息传播、整合和推理能力也为推荐结构提供了一定的可解释性。

利用图神经网络去挖掘知识图谱中多种实体和关系之间的高阶结构信息和语义关系通常涵盖以下几个过程：

#### (1) 嵌入层

嵌入层的作用是为图谱上的实体学习一个低维的向量表示，得到的向量表示作为模型的输入，也可以进行其它的下游任务如实体分类、链接预测等等。在传统的推荐系统中，提取用户和项目特征应用最广泛的方法是矩阵分解 (MF)<sup>[52]</sup>，如概率矩阵分解 (PMF)<sup>[53]</sup>、神经网络矩阵因子分解 (NNMF)<sup>[54]</sup> 等等，但这些方法通常面临较高的时间复杂性和空间复杂性，且并不能完全挖掘用户和项目之间的潜在联系。近年来，越来越多的研究者将深度学习技术结合到图嵌入的学习中。DeepWalk<sup>[55]</sup> 是首次将深度学习技术引入到图表示学习领域，充分利用了图结构数据中的随机游走序列信息，将实体序列看作文本序列，利用 word2vec 方法进行无监督学习，生成了图谱中每个实体的嵌入表示，自此之后，基于深度学习进行嵌入的方法层出不穷。其中，最简单的方法是在初始步骤中，将每个用户和项目定义为唯一 ID，然后将用户 ID 和项目 ID 直接映射为一个唯一的低维向量表示。

## (2) 邻域采样

近年来，尽管 GCN 在不同领域取得了广泛应用，但在训练大规模图数据的图神经网络模型时依然面临着不足和困难。首先大规模图谱中实体数目巨大，难以全量参与到 GCN 的训练和推理中；其次在邻域聚合过程中指数级增长的实体数量也将消耗巨大的计算资源和时间成本。为了解决 GCN 应用的缺陷，研究人员设计了不少更高效的邻域采样策略。如 Pinsage<sup>[34]</sup> 方法设计了一种基于随机游走的重要性采样方法，从中心实体开始随机游走，通过计算  $L_1$  正则获取实体的重要性分数，最后采样重要性分数最高的前  $T$  个邻居实体，该方法在大规模图的训练中取得了良好的性能。区别于 Pinsage 对邻居实体的采样，FastGCN<sup>[56]</sup> 是一种结合了重要性采样的批量训练的算法，它设计了一种 layer-wise 的采样策略，即对每层顶点进行固定数量的批次采样，通过重要性增强，在效果差不多的情况下，训练时间得到了大幅提升。还有研究者提出了子图采样的方法 Cluster-GCN<sup>[57]</sup>，它利用图聚类算法对整个图的实体划分为多个簇，每次只选择几个簇的实体和这些实体对应的边构成的子图进行训练，并限制在该子图内的邻居进行搜索，这种方法在大型图卷积网络模型中在满足性能的同时又显著提升了内存和计算效率。

### (3) 邻域聚合

在完成图谱的邻域采样后，模型一般需要经过邻域聚合来挖掘知识图谱上的高阶结构信息和语义关系，其框架主要包含 Aggregate 和 Combine 两个部分：

$$h_{N(v)}^{(k)} = \text{AGGREGATE}^{(k)} \left( \{h_u^{(k-1)}, \forall u \in N(v)\} \right) \quad (2-5)$$

$$h_v^{(k)} = \text{COMBINE}^{(k)}(h_v^{k-1}, a_v^{(k)}) \quad (2-6)$$

将目标实体的邻居实体的信息通过某种 Aggregate 函数的聚合以获得目标实体的邻域信息。GraphSAGE<sup>[51]</sup>对 Aggregate 函数的性质进行了分析，提出 Aggregate 函数需要满足的三个条件：对实体数量的自适应性、排列不变形和可导性，并提出了三个经典的 Aggregate 函数：

- 平均聚合：先对邻居实体向量表示取平均，再进行非线性变换。

$$h_v^{(k)} \leftarrow \sigma(W \cdot \text{MEAN}(\{h_v^{(k-1)}\} \cup \{h_u^{(k-1)}, \forall u \in N(v)\})) \quad (2-7)$$

- 池化聚合：对上一层每个实体的嵌入向量先进行非线性变换，然后再进行平均或者最大池化。

$$\text{AGGREGATE}_k^{\text{pool}} = \max(\{\sigma(W_{\text{pool}} h_{u_i}^{(k)} + b), \forall u_i \in N(v)\}) \quad (2-8)$$

- LSTM 聚合：获得邻居实体的顺序后将其向量表示序列作为 LSTM 网络的输入。

最简单的 Aggregate 函数是线性变换  $h_v^{(k)} = w^k h_v^{(k-1)}$ ，将  $k-1$  层实体特征  $h_v^{(k-1)}$  乘以权重矩阵  $w^k$  得到变换传递之后的信息。比如 KCGN 模型的

Aggregate 函数就是线性变换： $v_{N(v)}^u = \sum_{e \in N(v)} \text{softmax} \left( \frac{\exp(W_{r_{v,e}}^u)}{\sum_{e \in N(v)} \exp(W_{r_{v,e}}^u)} \right) e$ ,

权重为经过归一化后的关系对用户的重要性得分。聚合权重除了自己定义外，还可以通过注意力机制为邻域中每个实体自动学习权重。这方面典型算法如 KGAT<sup>[33]</sup> 模型，在信息传播过程中引入注意力机制： $\pi(h, r, t) = (W_r e_t)^T \tanh((W_r e_h + e_r))$ ，区分了不同邻居实体对中心实体的权重，该权重用于在聚合时权衡实体的影响力。在获得目标实体的邻域信息后，还需要通

过 *Combine* 函数将目标实体的信息及其邻域信息进行聚合以获得目标实体的新的嵌入表示。*Combine* 函数一般可以选择 *Sum* ( $\cdot$ )、*Mean* ( $\cdot$ )、*Max* ( $\cdot$ ) 或者 *Concat* ( $\cdot$ ) 操作, 聚合之后通常还需要进行一次非线性变换, 通常可选 *Relu* ( $\cdot$ ) 或者 *Sigmoid* ( $\cdot$ ) 函数。

#### (4) 预测

最后将从图谱学习得到的用户或项目最终的嵌入表示送入到预测模块, 进行预测函数  $\hat{y}_{uv} = F(u, v | \theta, Y, G)$  的训练学习。

## 2.4.2 基于知识图谱和图神经网络的推荐模型的分类

按照知识图谱类型的不同一般可以将知识图谱增强的图神经网络推荐方法分为基于项目知识图谱增强的图神经网络推荐和基于协同知识图谱增强的图神经网络推荐两类<sup>[58]</sup>, 下面对这两类模型的相关研究进行梳理和介绍。

#### (1) 基于项目知识图谱增强的图神经网络推荐模型

基于项目知识图谱增强的图神经网络推荐模型主要工作聚焦于如何在项目知识图谱上运用图神经网络对邻居实体信息进行传播和聚合, 以学习得到最终的项目嵌入表示。*Wang* 等人<sup>[32]</sup>提出的 *KGCN* 模型通过挖掘项目之间的关联属性, 获取用户对项目之间关系的偏好权重, 在邻域聚合时细化了项目的嵌入表示。更进一步地, *刘欢* 等人<sup>[59]</sup>提出的基于知识图谱驱动的端到端图神经网络模型 *KGLN*, 在引入关系对用户的重要性的同时, 还加入了不同邻居实体对中心实体的影响因子, 作为不同邻居实体进行聚合时的权重。相比 *KGCN* 模型, *KGLN* 融合了来自邻居实体的特征, 并考虑到不同影响因子对聚合邻居实体特征信息的影响, 能够更细致地学习项目的嵌入表示。

上述两种推荐模型都引入了用户对关系的感知信息以获得更好的项目嵌入表示, 但对用户实体嵌入的学习较为简单。*Tien* 等人<sup>[60]</sup>提出一种引入用户的社交关系来学习用户嵌入的模型。该模型提供了将交互关系组织成图的原理, 将来自社会网络的信息和各种关系结合在异质知识图中, 之后从用户空间和知识图谱空间中学习项目嵌入表示, 然后利用一个多层感知机来融合用

户空间和知识图谱空间中捕获的信息，最后从项目空间和社交空间中学习用户的嵌入表示，该模型在实验数据集中取得了更好的推荐性能。

## （2）基于协同知识图谱增强的图神经网络推荐模型

基于协同知识图谱增强的图神经网络推荐模型不仅需要研究项目嵌入表示的学习，也需要关注对用户嵌入表示的学习。Wang 等人在文献<sup>[33]</sup>中提出的 KGAT 模型以端到端的方式建模了知识图谱中的高阶邻居，利用用户与项目的交互关系和项目之间的属性关系作为捕捉高阶结构信息的链接，能够学习到更多相似的用户和项目来深度探索用户的潜在兴趣偏好，以便更有效的学习用户和项目的嵌入表示。更进一步地，Yang 等人在文献<sup>[61]</sup>中提出了一种采用层次图注意力网络结合知识图谱的模型（HAGERec）。为了从高阶连接结构中挖掘用户的潜在偏好信息，HAGERec 模型设计了双向实体传播策略和分层注意力机制来同时学习用户和项目的表示。具体来说，在消息传递过程中采用 GCN 建模实体的局部结构，合并实体的邻居信息，之后在实体传播过程中通过双向实体传播策略获得用户和项目的聚合表示，并开发了一种层次注意力机制来自适应的挖掘和调整每个用户-项目对之间的协作信号，将每个邻居实体的注意力评分作为其与中心实体的相似度，并对相似度低的邻居实体进行筛选，区分了中心实体同其邻居实体之间的不同关系。相较于 KGAT，HAGERec 利用了 KG 和 GCN 的优势有效缓解了稀疏性的问题，利用分层机制来采样邻居实体，通过高阶连通性实现了模型的可解释性。可以看出，注意力机制的引入可以很好的区分中心实体和其邻居实体的不同关系权重，有效地获取了用户偏好的重点，更能突出用户的个性化偏好，极大地优化了推荐模型的性能和可解释性。

但上述推荐方法在处理知识图谱时大多是提取用户-项目链接对，或者在整个知识图谱上传播实体的特征，并没有考虑不同的路径信息，未充分挖掘知识图谱的拓扑结构信息。Wang 等人在文献<sup>[62]</sup>中提出了 KGIN 模型，该模型通过识别意图和关系路径，在意图的粒度上揭示用户和项目的关系，加强不同用户-项目关系的独立性，关系路径感知聚合中集成了来自多跳路径的关系信息以细化表示，为推荐结果提供了有效性和可解释性。虽然 KGIN 模型

有效的挖掘了在整个知识图谱的拓扑结构信息，但是没有充分利用知识图谱上的语义信息。Sha 等人<sup>[63]</sup>提出了 AKGE 模型，该模型设计了一种距离感知路径采样策略来帮助构造用户和项目之间关系的高阶子图，在构造的特定子图上进行传播，能提取更有效的、高质量的交互信息，通过特定的交互方式同时结合了注意力知识图谱的语义信息和拓扑结构信息。可以看出，在引入路径信息的推荐中，可以充分挖掘知识图谱中的拓扑结构信息和语义信息，还能够同时捕获用户和项目之间的多种关系，增加推荐的可行性。

### 2.4.3 KGCN

由于本文是在改进 KGCN 模型<sup>[32]</sup>的基础上提出了 KGNN-IAP 模型，因此本节将详细介绍 KGCN 模型的相关内容，为下章 KGNN-IAP 模型的介绍铺垫理论基础。

KGCN 是基于知识图谱和图神经网络的典型推荐算法。该模型把知识图谱视为带权重的有权图，将用户对关系的偏好程度作为关系的权重值，这也是实体之间进行消息传递的权重，具体的计算过程如下：

给定用户 (user) 集合  $U$ 、项目 (item) 集合  $V$ 、实体 (entity) 集合  $E$  (项目实体和属性实体) 以及项目知识图谱  $G$  (由项目实体、关系和属性实体构成)， $G = \{(h, r, t) | h, t \in E, r \in R\}$ ，用户向量表示为  $u$ ，关系向量表示为  $r$ ，实体表示向量为  $e$ ， $v$  是中心实体表示当前要预测的项目。使用  $N(v)$  表示  $v$  的邻居实体集合，使用  $r_{v,e}$  表示中心实体  $v$  和邻居实体  $e$  的关系， $e \in N(v)$ 。使用函数  $g$  (例如内积) 计算用户与关系之间的得分：

$$W_{r_{v,e}}^u = g(u, r) \quad (2-9)$$

一般来说， $W_{r_{v,e}}^u$  表征了关系  $r$  对用户  $u$  的重要性。接下来对  $W_r^u$  做 softmax 操作进行归一化：

$$\tilde{W}_{r_{v,e}}^u = \text{softmax}(W_{r_{v,e}}^u) = \frac{\exp(W_{r_{v,e}}^u)}{\sum_{e \in N(v)} \exp(W_{r_{v,e}}^u)} \quad (2-10)$$

为了表征中心实体  $v$  的拓扑邻近结构，计算  $v$  邻域的线性组合，即经过邻

域聚合后的 $v$ 的特征表示向量:

$$v_{S(v)}^u = \sum_{e \in S(v)} \tilde{W}_{r,v,e}^u e \quad (2-11)$$

在实际构建的知识图谱中,不同的中心实体 $v$ 的邻居实体数量可能会不同,为了保持每个批次的计算模式固定且更高效,每个中心实体 $v$ 随机采样固定大小数量的邻居: $k$ ,而不是使用所有的邻居。经过在邻域进行固定数量 $k$ (参数可配置)的采样后,得到 $S(v)$ ,被称为中心实体 $v$ 的(单层)感受野,经过 $S(v)$ 聚合后的 $v$ 特征表示向量为 $v_{S(v)}^u$ 。图 2-5 给出了 $h=2$  两层感受野,  $k=2$  邻居采样数量的聚合示例。

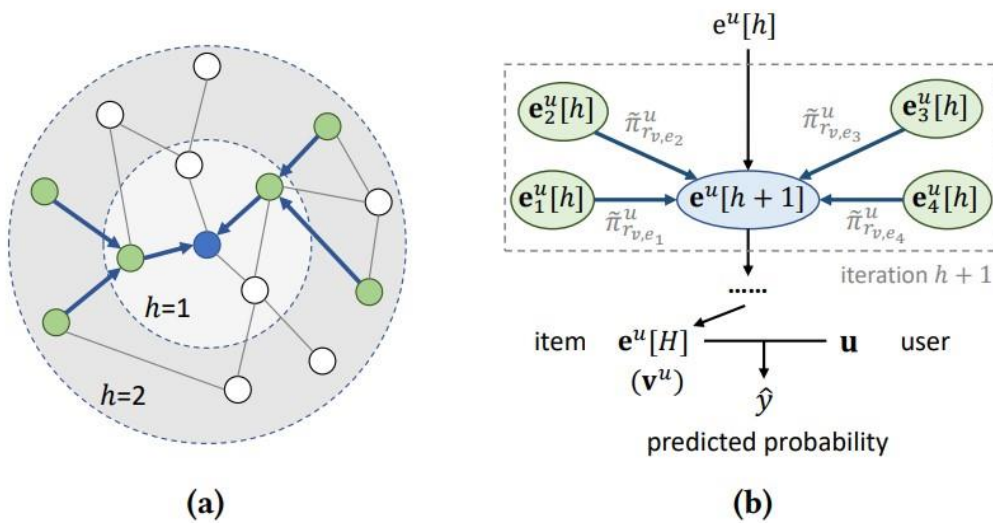


图 2-5 (a) KG 中蓝色实体的两层感受野 (b) KGCN 框架

最后可以把中心实体 $v$ 及其邻域表示的 $v_{S(v)}^u$ 再进行一次聚合, KGCN 中提供了三种类型的聚合器 $agg$ :

- *Sum*聚合器: 对两个表示向量求和, 然后进行非线性变换:

$$agg_{sum} = \sigma(W \cdot (v + v_{S(v)}^u) + b) \quad (2-12)$$

- *Concat*聚合器: 在进行非线性变换之前, 首先对两个向量进行拼接:

$$agg_{concat} = \sigma(W \cdot \text{concat}(v, v_{S(v)}^u) + b) \quad (2-13)$$

- *Neighbor*聚合器: 直接将中心节点 $v$ 经过邻域表示的特征向量输出:

$$agg_{neighbor} = \sigma(W \cdot v_{S(v)}^u + b) \quad (2-14)$$

以上是获得一阶实体嵌入表示的计算过程，不断迭代此过程，即进一步传播和聚合一阶表示便可获得二阶乃至  $H$  阶表示。KGCN 模型在 MovieLens-20M、Book-Crossing 和 Last.FM 三个真实数据集上进行了 CTR 预测和 Top-N 推荐，结果表明 KGCN 的推荐性能优于其它主流模型，且在三种聚合器上表现略有不同，Sum 聚合器总体表现最好，参照于此，本文提出的 KGNN-IAP 模型沿用的聚合方式也是 Sum 聚合器。

## 2.5 特征重要性评估

模型解释方法根据模型结果的解释是面向整体模型还是局部数据表现可分为全局解释和局部解释，作为全局解释属性的一部分，特征重要性常被用于挖掘与目标值具有较强关联的特征，揭示模型进行预测时每个特征的相对重要性。近年来，模型的特征重要性逐渐被应用在特征选择、问题归因或影响因素研究等相关的文献中。ZHANG F 等人<sup>[64]</sup>提出的 GPPI 算法根据 Permutation Importance 计算 GP (Genetic Programming) 的特征重要性，去掉了无关或噪声的特征，利用更重要的特征构建模型提高了模型的泛化性能。张因国等人<sup>[65]</sup>提出了一种基于特征重要性的卷积神经网络模型，利用随机森林的特征重要性对高光谱遥感图像进行特征重要性评估，减少了高光谱图像中的冗余，同时也进一步挖掘了潜在的分类信息，最终有效地提高了高光谱图像的分类精度。张云中等人<sup>[66]</sup>构建了标签质量影响因素的决策树模型，利用随机森林模型的特征重要性找出了影响标签质量的关键特征。借鉴于此，本文利用树模型的特征重要性来挖掘用户对项目属性的偏好信息。

特征重要性是一种能够为机器学习模型输入特征评分的方法，该方法衡量了特征对模型预测效果的相对重要性。特征重要性能够去除掉不相干冗余或噪声的特征进行数据降维，更好的理解数据，带来更好的模型学习性能、更高的学习精度和更好的模型解释性。特征重要性的两个主要工作是：确定不同特征之间的关系，在一定程度上可以改善决策树模型的性能；其次就是

确定每个特征对最终结果的重要性得分，在一定程度上可以提高模型的复杂性和有效性。而在实际应用中，决策树的特征重要性还可以帮助商业决策人员找出影响客户决策行为的重要因素，也可以帮助开发者进行风险分析以便能够关注更重要的因素。

机器学习模型中计算特征重要性的方式通常有相关系数、回归模型系数、基于树模型的信息增益、增益率、基尼系数等等作为衡量标准。以下主要介绍基于树模型的特征重要性评估方法，其计算过程主要体现在两个方面：

#### 1) 训练过程中计算

树模型在训练过程中会记录节点分裂时特征的总体表现，据此对特征的重要性进行量化计算。一般有三种评估值的选择，第一种是特征被作为决策树分裂节点的总次数，树模型构建时会寻找合适的特征作为分割点，特征出现次数越多，即对决策树的构建贡献越大重要性也越高；第二种是特征作为分裂节点划分后带来的总/平均信息增益，信息增益越高该特征作为分裂节点越有用；最后一种是特征作为分裂节点对样本的覆盖度，计算公式为特征节点样本的二阶导数和除以特征出现总频次，值越大，表明特征在分裂时能够影响的平均样本数越多。

#### 2) 训练后计算

将训练好的模型与改变特征或样本之后再训练的模型进行对比，通过前后模型性能的变化来量化特征重要性。一般有两种评估方法，第一种是使用袋外 (out of bag, OOB) 数据计算特征重要性。在基于 Bagging 的决策树模型中，如随机森林 (Random Forest, RF)，采用 Bootstrap(有放回的随机抽样) 生成构建一颗树模型的样本，并没有使用到所有的样本，未使用的样本即叫袋外样本。可以使用袋外样本数据检测模型的泛化能力并进行特征重要性的量化计算，具体来说，先用训练好的模型对袋外数据进行打分评估，如 AUC、决定系数等评估指标，然后对袋外数据的每个特征赋予一个随机值，重新计算当前数据的评估指标，得到评估指标前后的变化率，最后对每个特征对应的指标变化率排序量化特征重要性。还有一种是排列重要性 (Permutation Importance)，其思想是：先训练好模型，然后随机打乱某一特征的值并保持

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/198104124134006026>