班　级　031111

学　号　03111002

西安电子科技大学

本科毕业设计论文

题　　目　大规模图数据库的相似性搜索

学　　院　计算机学院

专　　业　计算机科学与技术

学生姓名　贾新禹

导师姓名　霍红卫

目 录

第一章　引言

1.1　研究背景与意义

随着科学技术的进一步发展，我们正逐步从信息时代走入数据时代[10]，全球的数据量正在以一种前所未有的方式增长着。数据的迅速增长，在给人们带来便捷信息的同时，也带来了一个巨大的挑战——面对日益复杂的数据，传统的查询方法不再有效，无法快速检索出相关联数据。面对大量有意义的数据，无奈于查询手段的限制，只能将其简化再进行处理。现在的大数据现状就好似守着一座金山，却不知如何开采。为了进一步挖掘有效信息，加速查询速度，提高信息价值，各种数据查询技术便应运而生。

其中最为热门的就是图数据库的查询。图作为计算机科学中的一个数据结构，其数据表达能力较强，可以很好得表示

第二章　背景知识

2.1　图基本定义

定义 2.1 (标号图[6]). 一个可以被四元组 $G = (V, E, \Sigma, \lambda)$ 表示的图称为标号图 *(labeled graph)*，其中 V 为有限的节点集合，E 为有限的边集合 $\in V \times V$，Σ 是标号集合，λ 是一个标号函数用于给各个节点与边分配标号 $\lambda : V \cup E \to \Sigma$。

如图2.1就是一个包含六个节点的标号图。需要注意的是标号与标识的区别，标号是图的固有属性，标识只是为了方便使用人为添加的记号。在图2.1中，v_i 就是标识，而 A, B, C, D 则是标号。

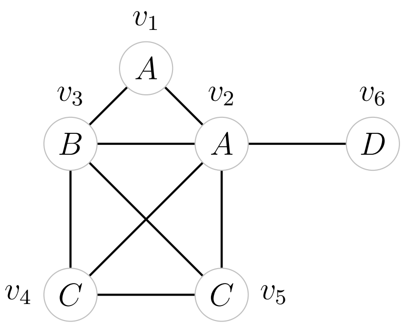


图 2.1 标号图

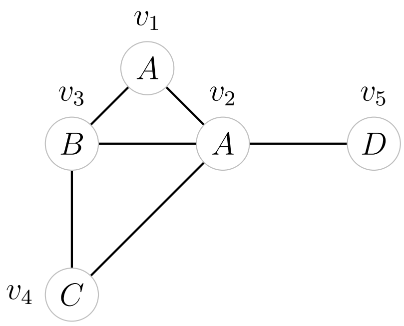


图 2.2 图2.1的子图

定义 2.2 (子图). 如果一幅图 $G = (V, E, \Sigma, \lambda)$ 和另一幅图 $G' = (V', E', \Sigma', \lambda')$ 有 1-1 映射的关系 $f : V \to V'$，那么图 G 就是 G' 的子图 *(subgraph)*，用 $G \in G'$ 表示。f 可以有这么几种

- 对于所有 $v \in V, \lambda(v) = \lambda'(f(v))$
- 对于所有 $(u, v) \in E, (f(u), f(v)) \in E$
- 对于所有 $(u, v) \in E, \lambda(u, v) = \lambda'(f(u), f(v))$

换言之，如果一幅图和另一幅图的节点标签，边关系，边标签能一一对应上，那么这副图就是另一幅图的子图。如图2.2就是图一个2.1的子图，节点标签，边关系及边标签均可一一对应，只有标识可以不同。

定义 2.3 (超图)**.** 如果图 G 是图 G' 的子图，则 G' 是 G 的*超图*。对于图2.1和图2.2, 图2.2是图2.1的子图，所以图2.1是图2.2的超图。

定义 2.4 (顶点的度[9])**.** 一个顶点 u 的*度数*是与它相关联的边的数目，记做 $degree(u)$。$degree(v_i) = |E(v_i)|, v_i \in V(i = 1, 2, ..., n)$, 图2.1中 v_2 的度 $degree(v_2) = 5$，图2.2中 v_2 的度为 $degree(v_2) = 4$。

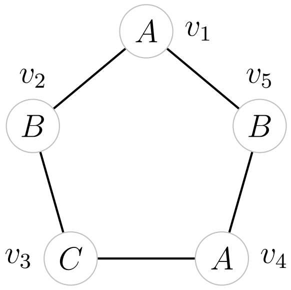
定义 2.5 (图的尺寸[11])**.** 一般由图中节点数 $|V(G)|$ 定义。因此图2.1的*尺寸 (size)* 为 6，图2.2为 5。

定义 2.6 (路径)**.** 在图 $G(V, E)$ 中，若从顶点 v_i 出发，沿着一些边经过一些顶点 $v_{p1}, v_{p2}, ..., v_{pm}$， 到达顶点 v_j, 则称顶点序列 $(v_i, v_{p1}, v_{p2}, ..., v_{pm}, v_j)$ 为从顶点 v_i 到 v_j 的一条*路径 (path)*。如在图2.1中，(v_1, v_2, v_5) 就是一条 v_1 到 v_5 的路径。

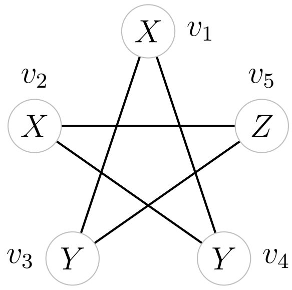
定义 2.7 (图的同构)**.** 给定图 g 和图 g', 若 g' 满足 $g' \equiv_{iso} g$, 则称 g 与 g' 是*同构图*。$g' \equiv_{iso} g$ 同构，当且仅当存在一个双射函数 $f : V(g) \leftrightarrow V(g')$，其满足下列条件:

- 对于所有 $v \in V, \lambda(v) = \lambda'(f(v))$
- 对于所有 $u, v \in V, (u, v) \in E \Leftrightarrow (f(u), f(v)) \in E$
- 对于所有 $(u, v) \in E, \lambda(u, v) = \lambda'(f(u), f(v))$

如图2.3, 图 G_1 和图 G_2 就是一组同构图, 顶点标号 $A \leftrightarrow X, B \leftrightarrow Y, C \leftrightarrow Z$,$G_1$ 中的边与 G_2 的边也形成双射关系



(a) G_1



(b) G_2

图 2.3 图的同构

2.2　图存储表示方式

图存储表示方法有很多种，常用的有 2 种：*邻接矩阵 (Adjacency Matrix)* 和*邻接表 (Adjacency List)*。本节还将介绍一种新颖的图表示方法*简化包表示 (Reduced Bag Representation)*[6]。

2.2.1　邻接矩阵

在邻接矩阵存储方法中，除了一个记录各个顶点信息的顶点数组外，还有一个表示各个顶点之间关系的矩阵，称为*邻接矩阵*。设 $G(V, E)$ 是一个具有 n 个顶点的图，则图的邻接矩阵是一个 $n \times n$ 的二维数组，用 $Edge[n][n]$ 表示，定义为:

$$Edge[i][j] = \begin{cases} 1, if(i,j) \in E \\ 0, else \end{cases} \tag{2-1}$$

增加邻接
图

2.2.2　邻接表

*邻接表*就是将同一个顶点发出的边连接在同一个称为边链表的单链表中。边链表的每个节点代表一条边，称为边节点。每个边节点有两个域：该边终点的序号以及下一个边节点的指针。

增加邻接

2.2.3　包表示法

*包表示法*是王教授等人在 *G-Hash*[6] 中提出的一种方法。这种方法的主要思想是将图中的各个节点特征提取出来形成一个列表，然后将这些特征就作为每个节点的标识。这样整幅图就变成了一个字符串的包，也就是一组字符串。通常，我们用这个节点的标号和其邻接节点的不同标号数目为特征。例2.1所示就是一个常用的包表示方法

例 2.1. 表2.1是图2.1的包表示。我们以节点标号和其邻接节点各个标号的个数作为特征，因此有五个特征：本身标号，A,B,C,D 分别的个数。所以加上第一列的标识，表一共有六列。而一共有六个不同节点，所以有六行。我们以 v_3 为例，详细说明下抽取特征的步骤。首先 v_3 的标号是 B, 所以 Label 为 B, 然后和 v_3 邻接的共

Nodes	Label	#A	#B	#C	#D
v_1	A	1	1	0	0
v_2	A	1	1	2	1
v_3	B	2	0	2	0
v_4	C	1	1	1	0
v_5	C	1	1	1	0
v_6	D	1	0	0	0

表 2.1 图2.1的包表示

有四个节点，分别是 v_1, v_2, v_4, v_5，其标号分别为 A, A, C, C 所以 $\#A = 2, \#C = 2$ 其余为 0。节点 v_3 的包表示就是"B,2,0,2,0", 如表2.1所示。需要注意一点的是，包表示不仅仅这一种表示方法，对于选取什么样的特征并没有限制。不过特征必须是离散的，这样才可以用字符串表示。

2.3 图查询类型

根据图之间的包含关系，可将图查询分为子图查询和超图查询。根据图查询的精确程度，可以将其分为精确查询和相似查询。

定义 2.8 (子图查询[5]). 子图查询的问题为: 对于给定的一个查询图，返回图数据库中所有查询图的超图。给定一个图数据库 GD 和一个查询图 q，子图查询的目的是找出在 GD 中所有包含 q 或者 q 的同构的图的集合，最后返回该超图集合 Q。$Q = g|g \in GD \wedge q \subseteq g$。

定义 2.9 (超图查询[2]). 超图查询的问题为: 对于给定的一个查询图，返回图数据库中所有查询图的子图。给定一个图数据库 GD 和一个查询图 q，超图查询的目的是找出在 GD 中所有以 q 为超图的图的集合，最后返回该子图集合 Q。$Q = g|g \in GD \wedge q \supseteq g$。

图2.4就是同一个查询 q 在同一数据库中子图查询和超图查询的不同结果。

定义 2.10 (精确查询). 图精确查询的问题是这样定义的：对于给定数据库 $G = g_1, g_2, ..., g_n$, 查询图 q, 返回 G 中与 q 具有子图同构的图集合。具体可以分为子图查询和超图查询。

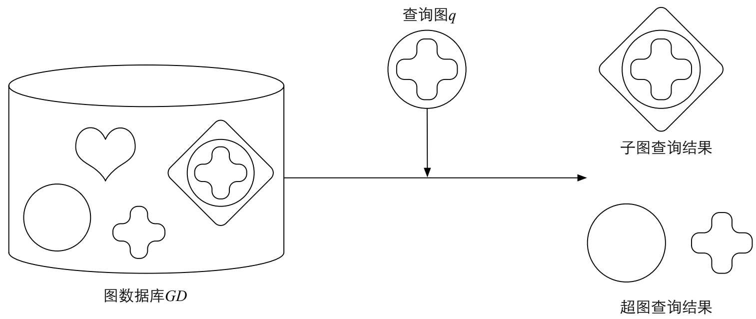


图 2.4 子图查询与超图查询

定义 2.11 (近似查询)**.** 图近似查询，又称相似性搜索，是这样定义的：对于给定数据库 $G = g_1, g_2, ..., g_n$, 查询图 q, 返回 G 中与 q 距离小于预设阀值的图集合。

因此，近似查询中相似性度量方法和近似阀值决定了结果集的大小。阀值越大，候选集越多；阀值越小，候选集越少。当阀值为零是，其结果应该与精确查询一致。

常见的相似性度量方法有两种，一种方法是*编辑距离 (edit distance)*. *编辑距离*就是我们将图 G 通过一系列操作 (如增删点边，重新标号等) 变换为另一个图 G' 所需的操作数。我们可以通过给不同操作分配不同的权值，然后计算权值和作为距离，这样可以让距离更为符合我们实际需求。虽然编辑距离是一种非常直观的图相似性测度方法，但是我们很难计算 (实际上，这是个 NP-hard 问题)。还有一种方法是*最大公共子图 (maximal common subgraph)*[7]，这里就不详细说明了。

第三章　经典图查询算法

本章将详细介绍几种经典的图查询算法。由于基本的图查询模式均为“过滤-验证”，所以要提高查询效率，只能从两方面优化。一是过滤阶段优化，二是验证阶段优化。众所周知，图是结构画的数据，目前并没有一个统一高效的索引机制可以实现较好的查询结果。因此大多数学者都会在过滤阶段选用不同的索引方式来得到更好的查询结果。而在验证阶段，由于图同构是个 NP-hard 问题，所以验证会消耗大量时间。如何快速检测同构，或将同构转为其他非复杂多项式的一半问题也是学者们关心的一个热点课题。本章介绍的几种查询方法均为过滤阶段的优化。

3.1　图精确查询算法

本节将详细介绍子图查询中的 *GraphGrep* 算法[1] 和 *gIndex* 算法[8]。

3.1.1　GraphGrep 算法

2002 年 ShaSha 教授等人提出了 *GraphGrep* 算法[1] 。GraphGrep 算法是基于特征索引方法中的第一个经典算法，它采取典型的“过滤-验证”框架，GraphGrep 算法中只讨论过滤阶段。由于基于结构的算法中对图的顺序扫描代价太高，GraphGrep 提出基于路径的过滤方法，来减少候选集大小。

其算法的主要流程是这样的:

1. 构造索引: 首先将节点和边利用哈希存成两个二维表作为未来筛选用特征之一，然后枚举图数据库中所有长度不大于 l_p 的路径 $v_0, v_1, v_2, ..., v_k, (k \leq l_p, \forall i \in [1, k-1], (v_i, v_i+1) \in E)$，然后将这些路径与图的关系存为一个二维表作为索引。表的每一行代表每一个图，每一列为一个路径，利用简单哈希确定路径对于行号，每一个单元格代表在该图包含该路径几条，如表3.1所示。

2. 解析查询: 如同图数据库，首先将节点和边利用哈希存成两个二维表，然后枚举查询中的所有长度不大于 l_p 的路径，哈希存在一个列表中。

Key	g_1	g_2	g_3
h(CA)	1	0	1
...			
h(ABAB)	2	2	0

表 3.1 GraphGrep 索引

3. 数据库过滤:

   (a) 利用节点信息过滤: 如果查询图中的某一节点在数据库中一图里未出现，则此图一定不会包含查询图，因此可以删去。

   (b) 利用边信息过滤: 同节点过滤，如果某条边未出现，则一定不会包含查询图，可删去。

   (c) 利用路径个数进行过滤: 如果查询图中某一路径个数大于数据库中一图的此路径个数，则此图一定不会包含查询图，可以从候选集中删去。

4. 子图查询: 利用标号进行路径合成，从候选集中删去所有未能成功合成的候选图。剩下的就是 GraphGrep 算法返回的候选集。后续再加以图同构验证即可得到最终子图查询结果。

成过程

由于 GraphGrep 算法是基于路径的，编写十分简单，但是路径数目过多，造成索引集很大，建立十分费时，子图查询过程中也有大量运算量，因此效果有限。

3.1.2 gIndex 算法

2004 年，Yan 教授等人提出了 *gIndex* 算法[8]。gIndex 算法是以频繁子图结构作为索引特征的子图查询算法。它采用**动态支持度** *(size-increasing support)* 和**区分度片段**两种方法来优化算法，获得性能更好的索引。

Index 详

其算法主要流程如此:

1.

3.2　图相似性搜索

本节将着重介绍两种相似性搜索方法，分别是 *G-Hash* 算法[6] 和 *C-tree* 算法[3]。

3.2.1　G-Hash 算法

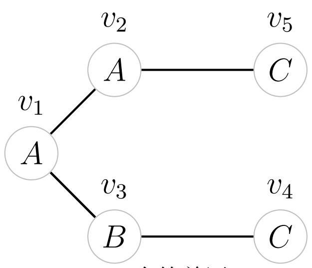
G-Hash 算法是 Wang 教授等人于 2009 年提出的一种图相似性搜索方法。相比较其他近似搜索方法，这种方法更加稳定高效。G-Hash 开创性地采用了*简化包表示 (Reduced Bag Represent)* 来表示每个节点特征，并表示成字符串，Hash 存储作为索引。并利用*小波匹配核函数 (Wavelet Graph matching kernels)* 来计算节点间的相似度，从而得到和查询图最为相似的 K 个图。但是 G-Hash 算法的准确度和速度完全取决于相似度度量函数，因此一个好的相似性度量方法尤为重要。

算法主要流程如下:

1. 索引构建: 将图数据库中每幅图用简化包表示，然后将每个节点特征变为字符串，利用 Hash 存成索引。如例3.1所示, 就是一个图建成索引过程。需要注意的是在例子中，我们只有三个标号，所以特征矩阵只有四列。但是在实际中当我们选取节点标号数目作为特征时，需要先统计出图数据库中有的所有标号，这样才好做归一化存储。

   例 3.1. 图3.1就是一个 G-Hash 构建索引的实例。图3.1(a) 是需要存储的一幅图。我们选取节点标签和邻接节点各个标号的个数作为度量特征，所以一共有四个特征。首先统计各个节点周围各个标号的数目，结果如图3.1(b) 所示。然后用小波函数提取出实际特征值。举例而言，对于 v_3 在用 $h = 0$ 的小波函数提取后，局部特征是 $[B, 2, 0, 1]$。将这些表示特征值的字符串利用 Hash 找到对应位置，然后将对应节点标号填到此位置，最后生成的哈希表如图3.1(c) 所示。而整个数据库生成的哈希表就如图3.1(d) 所示。

2. 查询过程: 将查询图也同数据库中图一样用简化包表示。然后计算其中每个节点字符串和图数据库中每个字符串的相似性，乘以每个图中此字符串出现的次数，得到这个节点和每幅图的相似度，求和即可得到总的相似度。排序得到最相近的 K 个。



(a) 一个简单图 P

Nodes	Label	#A	#B	#C
v_1	A	1	1	0
v_2	A	1	1	1
v_3	B	2	0	1
v_4	C	0	1	0
v_5	C	1	0	0

(b) 节点特征矩阵

索引键	哈希值
A,1,1,0	v_1
A,1,1,1	v_2
B,2,0,1	v_3
C,0,1,0	v_4
C,1,0,0	v_5

(c) 图 P 对应的哈希表

索引键	G_1	G_2	G_3
A,1,1,0	1	4	0
A,1,1,1	0	1	0
B,2,0,1	2	0	6
C,0,1,0	0	5	1
C,1,0,0	3	0	1

(d) 图数据库哈希表示例

图 3.1 一幅简单示例图

图是 G—Hash 查询的一个完整例子。从 XXXX

添加 G-Hash+ 中那副图

此方法还支持动态增删图数据，如例3.1因为其用字符串作为索引键，所以如果增删的图不改变原有的特征情况，在例3.1中就是标号的个数，那么在添加时需要添加数据库中的一列，在删除时也只需要删除一列即可。不需重建整个索引。

3.2.2 Closure tree 算法

C-tree

第四章　基于双哈希的图精确查询

由于传统算法在利用哈希表存储索引中多采用简单哈希，容易产生冲突问题，导致构建索引效率较低。本章在路径索引的基础上，探究了不同哈希方法对算法速度的影响，并提出一种基于双哈希的精确查询算法，来减少图查询中的过滤阶段的耗时，以提高查询速度。本章将先介绍下现有的哈希算法，然后详细介绍基于路径的查询方法，随后介绍子图同构算法 *ULLMANN*[4] 作为验证方法。最后是实验结果与分析。

4.1　常用哈希方法

本节将

同 *GraphGrep* 算法[1]

参考文献

[1] Rosalba Guigno and Dennis Shasha. Graphgrep : A fast and universal method for querying graphs. 2002.

[2] Shang H, Zhu K, and Lin X. Similarity search on supergraph containment. *ICDE*, 2010.

[3] H. He and A. K. Singh. Closure-tree: an index structure for graph queries. *Proc. International Conference on Data Engineering'06 (ICDE)*, 2006.

[4] J.R.ULLMANN. An algorithm for subgraph isomorphism. *Journal Association for Commputing Machinery*, 23(1):31–42, January 1976.

[5] Kurmochi M and Karypis G. Frequent subgraph discovery. *ICDM*, 2001.

[6] Xiaohong Wang, Aaron Smalter, and Jun Huan. G-hash:towards fast kernel-based similarity search in large graph databases. *ACM*, 2009.

[7] T. Jiang Y. Cao and T. Girke. A maximum common substructure-based algorithm for searching and predicting drug-like compounds. *Bioinformatics, 24(13)*, 2008.

[8] Xifeng Yan, Philip S.Yu, and Jiawei Han. Graph indexing : A frequent structure-based approach. *ACM*, 2004.

[9] 王桂平，王衍，任嘉辰. *图论算法理论, 实现及应用*. 北京大学出版社, 2011.

[10] (英) 维克托 · 迈尔 -舍恩伯格，肯尼思 · 库克耶. *大数据时代: 生活、工作与思维的大变革*. 浙江人民出版社, 2012.

[11] 谭伟，杨书新. 图数据精确查询与近似查询的研究. 2013.