

班 级 031111

学 号 03111002

西安电子科技大学

本科毕业设计论文



题 目 大规模图数据库的图的

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

摘 要

随着科学技术的进一步发展,各种数据正以前所未有的速度增长着,特别是图数据,如 AIDS 抗体数据库现已有超过 42,000 个分子结构。如何有效存储,索引,搜索图数据已成为一个日益显著的问题,因此大规模图数据库的图搜索已成为一个热点话题,并在大量领域都得到了应用,如分子化学,药物学,传感器网络,关系网络,XML 文档等等。

本文首先介绍了图搜索的基本概念,并探究了目前几个经典的图搜索算法,分析总结了这些算法优缺点。

然后,针对精确搜索,本文以 GraphGrep 为基础提出了一种基于二次哈希开链法的新算法,解决了 GraphGrep 在索引定位中哈希容易产生冲突的问题,加快了搜索效率,并通过实验比较了两算法性能。

其次,针对相似性搜索,本文结合 G-Hash 中小波匹配核函数和简化包表示提出了一种基于节点相似度的新算法,在效率不逊于 G-Hash 的基础上提高了匹配精度,降低了编码难度,并通过实验证明了此算法的正确性与可行性。

关键词: 图搜索 图精确搜索 图相似性搜索 二次哈希开链 节点相似度

ABSTRACT

With the further development of the science and technology, all kinds of data is growing at an unprecedented speed, especially graph data, such as AIDS anti Screen Database has more than 42,000 chemical structure. How to effectively store, index and search figure data become an increasingly important problem, so the graph search in large graph database has become a hot topic, and are used in many areas, such as molecular chemistry, pharmacology, sensor networks, human network, XML documents, and so on.

This paper first introduces the basic concept of graph search, and explore the current several classic graph search algorithm, these algorithms were analyzed advantages and disadvantages.

Then, in view of the accurate search, this paper put forward a new algorithm based on the secondary hash chain method, on the basis of the GraphGrep, to solve the GraphGrep hash prone to conflicts when index positioning, speed up the search efficiency, and compared the two algorithms performance through experiments.

Secondly, in view of the similarity search, this paper combine G-Hash wavelet matching kernel function and Reduced Bag to node similarity, then puts forward a new algorithm based on node similarity, the efficiency is not inferior to the G-Hash, But improved the precision of matching, reduces the coding difficulty, and through the experiment proves the correctness and feasibility of this algorithm.

Keywords: Graph search Graph accurate Search Graph Similarity Search
Twice-hash chain Node similarity

目 录

第一章 绪论	1
1.1 研究背景与意义	1
1.2 问题的提出	2
1.3 本文的主要工作	3
1.4 论文的结构安排	3
第二章 背景知识	5
2.1 图基本定义	5
2.2 图存储表示方式	7
2.2.1 邻接矩阵	7
2.2.2 邻接表	7
2.2.3 包表示法	8
2.3 图搜索类型	8
第三章 经典图搜索算法	11
3.1 图精确搜索算法	11
3.1.1 GraphGrep 算法	11
3.1.2 gIndex 算法	12
3.2 图相似性搜索	13
3.2.1 G-Hash 算法	14
3.2.2 Closure tree 算法	15
第四章 基于二次哈希开链法的图精确搜索	17
4.1 常用哈希方法	17
4.1.1 开放定址法	17

4.1.2	开链法	17
4.1.3	再哈希法	18
4.2	基于二次哈希开链法的搜索算法	18
4.2.1	数据库路径遍历	18
4.2.2	二次哈希开链法索引构建	18
4.2.3	查询图路径遍历	19
4.2.4	先验剪枝	21
4.2.5	路径合成	21
4.2.6	子图同构	22
4.3	实验结果与分析	23
4.3.1	实验环境	23
4.3.2	实验数据分析	23
第五章	基于节点相似度的图相似性搜索	25
5.1	相关概念	25
5.1.1	小波图匹配核函数	25
5.1.2	G-Hash 中的图相似性定义	27
5.1.3	节点相似度	28
5.2	基于节点相似度的图相似性搜索	28
5.2.1	数据库构建	29
5.2.2	查询前 K 个相似图	29
5.2.3	数据库维护	29
5.2.4	代码设计	30
5.3	实验结果与分析	31
5.3.1	实验环境	31
5.3.2	实验数据分析	31
第六章	总结与展望	33
6.1	本文总结	33

6.2 不足与展望	34
致 谢	35
参考文献	37

第一章 绪论

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^[1]，全球的数据量正以一种前所未有的方式增长着。统计表明，全球数据几乎每两年翻一番^[2]。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，加快查询速度，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搜索技术。图作为计算机科学中的一个通用数据结构^[2]，其数据表达能力较强，可以很好得表示各种关系特征，拓扑结构等，在许多领域都有应用。

举例而言，图数据在以下领域都发挥着显著的作用：

1. 在分子化学^[3]与生物信息学^[4]领域，图可以很好得表示分子结构，用节点代表分子，节点属性代表分子属性，边代表分子之间的化学键，边长等可以代表化学键键值等。利用图模型建立分子结构数据库，就可以利用图查询技术快速寻找相似的分子结构，来查询具有特定功能的分子集，如 *DAYLIGHT* 系统^[5] 作为一个商用的分子化合物数据库已经在业界被广泛使用。
2. 在地理信息系统领域^[6-8]，利用图模型可以完整的表示出各实体之间的关系特征，然后利用这些特征实现许多功能，像拓扑关系建模，污染网络绘制，最短路查询^[8] 等。
3. 在软件工程中，也可以利用图对程序代码进行建模，获得程序调用图，类关系图等，然后利用图相似性搜索可以进行易发故障判定或者代码剽窃检测^[9] 等。
4. 在社会生活中，我们可以利用图结构对人际关系进行建模，进行社群侦查，行为预测等，甚至可以利用其进行犯罪团伙检测^[10]。

5. 在 Web 领域, 利用图结构进行 XML 文件分析, 新闻的聚类分析等早被广泛使用。

除此之外, 图数据还在像文献查重^[11], 专家推荐系统等众多领域发挥着重要作用。

由此可见, 图数据有着广泛的应用前景。随着图数据的大量增加, 如 AIDS 抗体数据库已有超过 42,000 个化学结构图, 如何对图数据进行有效管理与使用, 愈加成为数据管理领域一个重大挑战。而如何快速检索图结构则是图数据管理中最为重要的一个问题, 已备受研究人员的关注。

图查询搜索技术种类很多, 包括子图查询, 超图查询, 精确搜索, 相似性搜索等^[12]。子图查询是给定查询图 q 在图数据集中找到所有包括 q 的数据图。子图查询是目前图查询中运用最为广泛的, 也是研究最久的一种查询类型。如在生物信息学中^[12], 当我们知道某一蛋白质分子结构 CA 是 HIV 病毒中的活跃成分, 那就可以通过子图查询, 将 CA 作为查询图, 找出所有包含该分子结构的大型分子。而超图查询则与子图查询正好相反, 是在图数据库中查找所有 q 的子图。精确搜索与相似性搜索相对, 可以是超图也可以是子图。精确搜索主要是强调精确的图匹配过程, 即查询图中每条边, 每个点, 每个关系要在数据图中存在。常用于分子结构匹配, 关系网络匹配等领域。而近似查询则不需要完全匹配, 只需要大致相似即可, 而相似尺度则由各算法决定。近似查询在实际使用中有很大的应用空间, 像地理信息系统的位置查询, 机器视觉的人脸识别等^[12]。

1.2 问题的提出

由上文可见, 图搜索有着广泛的应用价值, 但是目前还未有一个公认优秀的图搜索算法。因为相对于传统数据, 图数据结构更为复杂, 传统表示方法难以描述。目前, 图搜索的难点主要有以下几个方面:

1. 图搜索的时间复杂度。对于精确搜索, 无论是子图搜索还是超图搜索, 按照传统的“过滤-验证”框架, 验证阶段都要进行复杂的子图同构测试, 而过滤阶段的图遍历也会消耗大量时间。而对于相似性搜索, 相似度度量过程需要大量计算量, 也十分耗时。因此, 如何有效降低时间复杂度, 是研究者们十分关注的一个问题。

2. 图数据库的索引机制。传统的数据库可以采用多种索引结构进行高效查询，但对于图数据，无论是精确搜索还是相似性搜索，如何设计出高效的索引策略，已成为目前的研究热点。至今为止，还未有一种规范化的索引结构，这使得当前图搜索方法参差不齐。
3. 图的内存装载问题。尽管目前硬件技术有了很大发展，内存也在不断扩大，但对于一些数据量很大的图，如 **FaceBook** 的社交网络图数据，目前仍无法完整装入内存。因此存在大量 I/O 耗时。而随着图数据尺寸的快速增长，这将很快成为又一瓶颈问题。

1.3 本文的主要工作

本文主要研究了大规模图数据库下的精确搜索和相似性搜索，工作重点主要放在了如何降低图搜索过程中的时间复杂度上。概括而言本文主要工作有两个：

1. 研究了精确搜索算法，以经典算法 **GraphGrep**^[13] 为基础，提出了一种基于二次哈希开链法的新算法，解决了原算法中因为常规哈希易导致地址冲突的问题，降低了索引构建与查询时间，增加了稳定性。
2. 研究了相似性搜索算法，以简化包表示为基础，结合 **G-Hash**^[14] 算法中的小波图匹配核函数定义了节点相似度。并提出了基于节点相似度的相似性搜索算法，提高了搜索精度，大大降低了编码难度。

1.4 论文的结构安排

本文共分为六章，具体如下：

- 第一章: 绪论。本章介绍了本文的研究背景与意义，总结了本文的主要内容，给出了结构安排。
- 第二章: 背景知识。本章介绍了图的基本定义及存储表示方式，和图查询的基本分类。
- 第三章: 经典算法。本章介绍了四种经典的图搜索算法，比较了其各自的优缺点。

- 第四章: 基于二次哈希开链法的图精确搜索算法。本章首先介绍了几种常用的哈希方法, 然后详细介绍了基于二次哈希开链法的图搜索算法, 最后给出了实验结论与数据分析。
- 第五章: 基于节点相似度的图相似性搜索算法。本章首先分析了一下传统算法存在的问题, 然后介绍了一些相关概念, 随后详细阐述了基于节点相似度的算法思想, 并给出了代码设计类图。最后通过实验得出了该算法的一些结论。
- 第六章: 总结与展望。本章总结了本文的主要工作及研究成果和不足, 并提出了进一步工作的方向。

第二章 背景知识

2.1 图基本定义

定义 2.1 (有向图). 如果图中的所有边都是有方向性的, 则称这种图为有向图。如图2.1所示。

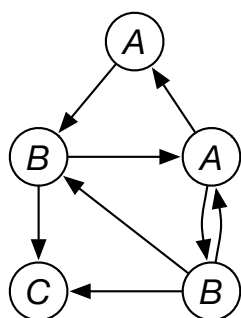


图 2.1 有向图

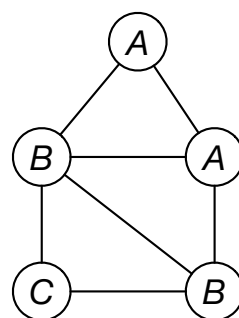


图 2.2 无向图

定义 2.3 (标号图). ^[14] 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 $E \in V \times V$, 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 $\lambda: V \cup E \rightarrow \Sigma$ 。

如图2.3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2.3中, v_i 就是标识, 而 A, B, C, D 则是标号。

本文中, 我们所研究的均是只有节点有标号, 边上无标号的无向图。

定义 2.4 (子图). 如果一幅图 $G = (V, E, \Sigma, \lambda)$ 和另一幅图 $G' = (V', E', \Sigma', \lambda')$ 有单射关系 $f: V \rightarrow V'$, 那么图 G 就是 G' 的子图 (*subgraph*), 用 $G \in G'$ 表示。 f 需要满足以下几个条件:

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

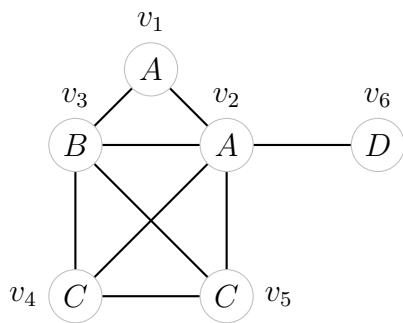


图 2.3 标号图

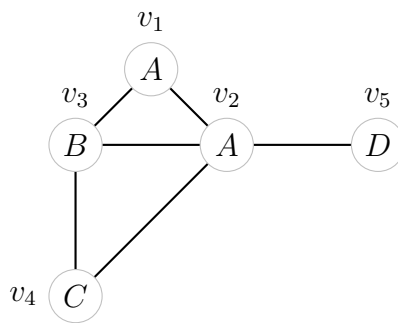


图 2.4 图2.3的子图

- 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2.4就是图一个2.3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 2.5 (超图). 如果图 G 是图 G' 的子图，则 G' 是 G 的超图。如对于图2.3和图2.4而言，图2.4是图2.3的子图，所以图2.3是图2.4的超图。

定义 2.6 (顶点的度). ^[15] 一个顶点 u 的度数是与它相关联的边的数目，记做 $degree(u)$ 。 $degree(v_i) = |E(v_i)|, v_i \in V (i = 1, 2, \dots, n)$ ，图2.3中 v_2 的度 $degree(v_2) = 5$ ，图2.4中 v_2 的度为 $degree(v_2) = 4$ 。

定义 2.7 (图的尺寸). ^[12] 一般由图中节点数 $|V(G)|$ 定义。因此图2.3的尺寸 (*size*) 为 6，图2.4为 5。

定义 2.8 (路径). ^[15] 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 $v_{p1}, v_{p2}, \dots, v_{pm}$ ，到达顶点 v_j ，则称顶点序列 $(v_i, v_{p1}, v_{p2}, \dots, v_{pm}, v_j)$ 为从顶点 v_i 到 v_j 的一条路径 (*path*)。如在图2.3中， (v_1, v_2, v_5) 就是一条 v_1 到 v_5 的路径。

定义 2.9 (图的同构). ^[12] 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2.5，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。

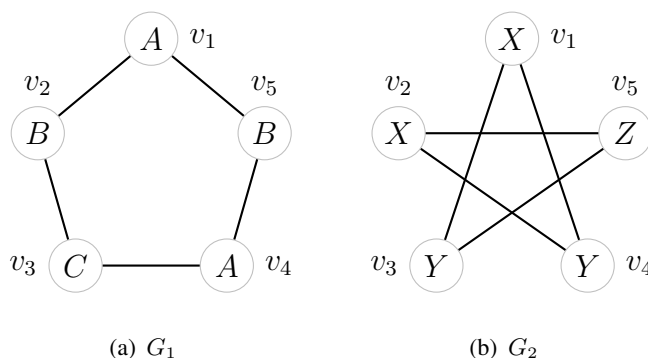


图 2.5 图的同构

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*)^[14]。

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^[15]，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：

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

2.2.2 邻接表

邻接表^[15]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。

2.2.3 包表示法

包表示法是 Wang 教授等人在 *G-Hash*^[14] 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2.3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。

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2.3的包表示

2.3 图搜索类型

根据图之间的包含关系，可将图查询搜索技术分为子图查询和超图查询；根据图搜索的精确程度，可以将其分为精确搜索和相似性搜索^[12]。

定义 2.10 (子图查询). ^[16] 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 2.11 (超图查询).^[17] 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 。 $Q = \{G | G \in GD \wedge q \supseteq G\}$ 。

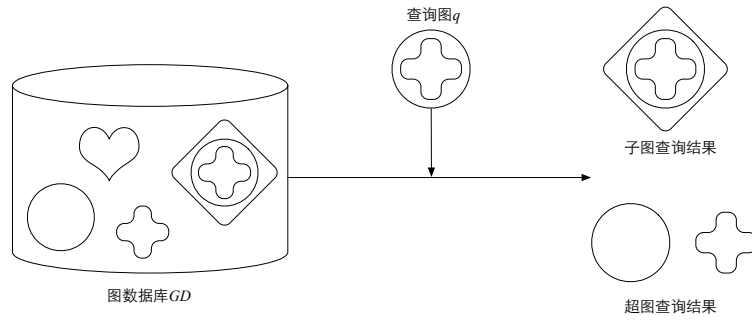


图 2.6 子图查询与超图查询

如图2.6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 2.12 (精确搜索).^[18] 图精确搜索, 又称精确查询, 是这样定义的: 对于给定数据库 $G_D = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$, 查询图 q , 返回 G_D 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。如图2.7所示, 对于精确查询查询图 q 的结果就是 $\{G_1, G_2\}$

定义 2.13 (相似性搜索).^[19] 图相似性搜索, 又称近似查询, 是这样定义的: 对于给定数据库 $G_D = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$, 查询图 q , 返回 G_D 中与 q 距离小于预设阈值的图集合。如图2.7所示, 对于近似查询查询图 q 的结果就是 $\{G_1, G_2, G_3, G_4\}$

显然, 近似查询中相似性度量方法和预设的阈值决定了结果集的大小。阈值越大, 结果集越大; 阈值越小, 结果集越少。当阈值为零是, 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'

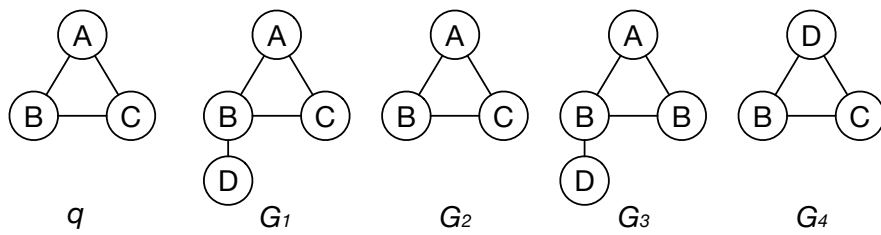


图 2.7 精确查询与相似查询

所需的操作数。面对不同的需求，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，来使度量更精确。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）。还有一种常用方法是最大公共子图 (*maximal common subgraph*)^[20]，顾名思义，这里就不详细说明了。

第三章 经典图搜索算法

本章将详细介绍几种经典的图搜索算法。由于图搜索算法中大多数采用“过滤-验证”这一框架，所以要提高查询效率，只能从两方面优化。一是在过滤阶段优化，二是在验证阶段优化。众所周知，图是结构化的数据，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。所以在过滤阶段，大量学者在研究不同的索引机制，力图通过优化索引的构建和查询来得到更好的查询结果。而在验证阶段，由于子图同构会消耗大量的时间，所以也是个优化的好思路。但是由于子图同构是个 **NP-hard** 问题，优化起来并不简单。如何快速检测同构，或将同构转为其他非复杂多项式的一般问题也是学者们关心的一个热点课题。由于本文主要在过滤阶段进行优化，所以本章将介绍的几种查询方法也均为在过滤阶段优化的算法。

3.1 图精确搜索算法

本节将详细介绍精确搜索中的 *GraphGrep* 算法^[13] 和 *gIndex* 算法^[18]。

3.1.1 GraphGrep 算法

2002 年 ShaSha 教授等人提出了 *GraphGrep* 算法^[13]。*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，并只讨论了过滤阶段。由于传统基于结构的算法中需要对图进行顺序遍历比对，其时间空间代价都太高，因此 *GraphGrep* 提出了一种基于路径索引和哈希快速存储的过滤方法，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 $v_0, v_1, v_2, \dots, v_k, (k \leq l_p, \forall i \in [1, k-1], (v_i, v_{i+1}) \in E)$ ，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。

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

表 3.1 GraphGrep 索引

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。
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精确搜索结果。

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，搜索过程中对路径的操作也有大量运算量，尤其在内存有限的情况下哈希常发生冲突现象，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^[18]。*gIndex* 是一种以频繁子结构作为索引特征的精确搜索算法。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。

其算法主要流程如此:

1. 利用数据挖掘中的相关算法挖掘出频繁子结构, 并用最小支持阈值 min_sup 筛选出频繁子结构作为特征片段
2. 利用 DFS 序列化编码将特征片段序列化, 然后存成一颗前缀树称为 $gIndex$ 树作为索引, 如图3.1所示。并记录每个图包含哪些特征片段。
3. 对于给定查询图 q , 找出其所有特征片段, 然后对包含此片段的图取交集即为最终结果。

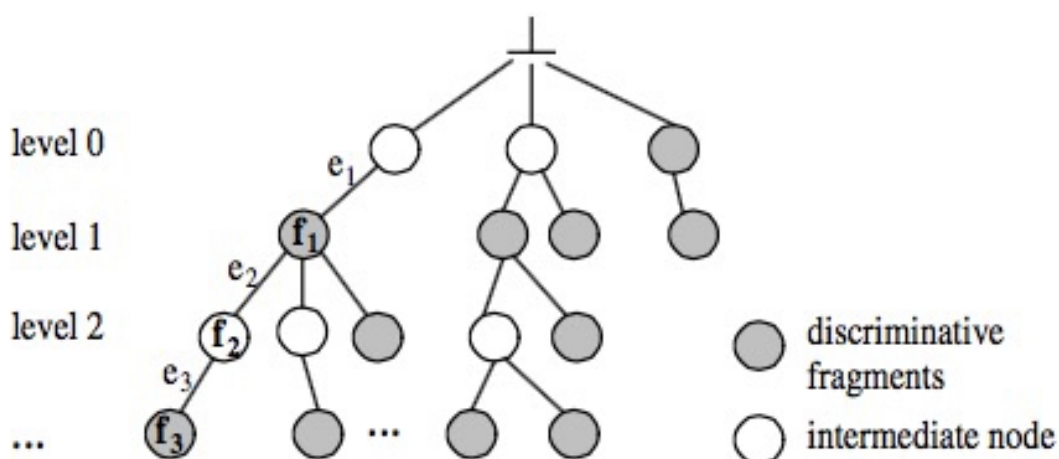


图 3.1 $gIndex$ 树

$gIndex$ 算法是首个以频繁子结构为索引特征的经典算法, 其利用了图的结构化信息, 使得效率大大提高。但是由于记录的为结构化的子图信息, 对空间要求较大, 同时特征片段的筛选使得其只携带了自身的结构特点, 丢失掉的结构信息也会对算法效率造成一定影响。

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^[14] 和 $C-tree$ 算法^[21]。

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。将图分解成字符串用 Hash 存储在内存里作为索引。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。
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。

如图3.2,便是 *G-Hash* 查询的一个完整例子。

例 3.1. 图3.3就是一个 *G-Hash* 构建索引的实例。图3.3(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3.3(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3.3(c)所示。而整个数据库生成的哈希表就如图3.3(d)所示。

G-Hash 算法作为经典的相似性搜索算法,其提出利用核函数计算相似度,成功将结构化特征用数学方法转为数值特征,使得搜索效率有明显提升。但是由于

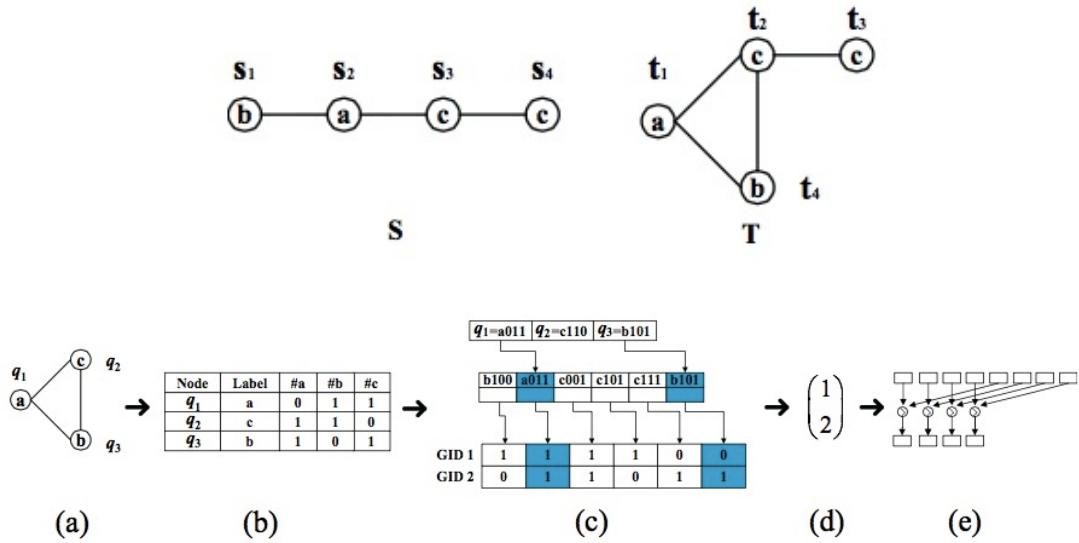


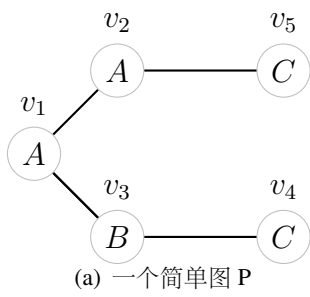
图 3.2 G-Hash 查询示例:(a) 图数据库 S,T 和查询 Q, (b) 查询 Q 的简化包表示, (c) 与哈希存储的图数据库比对, (d) 计算比对结果, (e) 排序得出最相似的 k 个图

其对哈希函数要求严格, 造成编码复杂, 而核函数的计算也很耗时, 使得此方法实际运用并不多。

3.2.2 Closure tree 算法

2006 年 He 和 Singh 提出了一种基于树结构建立索引的查询算法 C-Tree^[21], C-Tree 利用启发式图映射方法来判断编辑距离, 进而得到近似图。C-Tree 具有以下几个特点^[22]: (1) 每个节点都是其孩子的闭包图, 只有作为叶子节点的孩子节点是数据库中的图数据; (2) 除了根节点每个节点至少包含 m 个孩子 $m \geq 2$; (3) 每个节点最多不超过 M 个孩子, $(M+1)/2 \geq m$ 。

C-Tree 提出了一种利用图闭包计算编辑距离的方法, 提出了邻接子树和邻接子图在相似性搜索中的应用, 是图相似性搜索领域一个重要基础算法。但是基于图闭包的计算还是略显复杂, 仍须研究。



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 3.3 一幅简单示例图

第四章 基于二次哈希开链法的图精确搜索

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，并提出一种基于二次哈希开链法的精确搜索算法，来减少图搜索中过滤阶段的耗时，以提高搜索速度。本章将先介绍下现有的哈希算法，然后详细介绍基于二次哈希开链法的精确图搜索算法，包括作为此算法验证方法用的子图同构算法 *ULLMANN*^[23]，最后是实验结果与分析。

4.1 常用哈希方法

本节将介绍三种常用的解决哈希冲突的方法：开放定址法，开链法，再哈希法。

4.1.1 开放定址法

开放定址法^[24]是一种常用的处理冲突方法，公式如(4-1)所示

$$H_i = (H(key) + d_i) \text{MOD } m \quad i = 1, 2, \dots, k (k \leq m - 1) \quad (4-1)$$

其中， $H(key)$ 为哈希函数； m 为哈希表表长， d_i 为增量序列，可有以下三种取法：

1. $d_i = 1, 2, 3, \dots, m - 1$ ，称线性探测再散列；
2. $d_i = 1^2, -1^2, 2^2, -2^2, 3^2, \dots, \pm k^2, (k \leq m/2)$ ，称为二次探测再散列；
3. $d_i =$ 伪随机数序列，这种方法称为伪随机探测再散列^[24]。

4.1.2 开链法

开链法又称链地址法^[24]，是将所有关键字为同义词的记录存储在同一线性链表中。

4.1.3 再哈希法

$$H_i = RH_i(key) \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (4-2)$$

再哈希法^[24]如公式(4-2)所示, RH_i 均是不同的哈希函数, 即在同义词产生地址冲突时计算另一个哈希函数地址, 直到冲突不再发生。

4.2 基于二次哈希开链法的搜索算法

本方法同 *GraphGrep* 算法^[13], 都是基于路径的精确子图搜索算法。算法基本流程如下: (1) 遍历图数据库中图的路径, (2) 利用双哈希构建索引, (3) 遍历查询图路径, (4) 利用基本索引特征先验剪枝, (5) 路径合成进一步筛选候选集, (6) 子图同构确定最终结果。下面我们将分小节详细说明这些步骤。

4.2.1 数据库路径遍历

首先, 对于每个数据库我们设定一个路径长度的上限 l_p , l_p 越大意味着可记录的路径越长, 索引集合也会相应增加。随后对于数据库中的每幅图, 我们用深度优先搜索遍历每个节点, 遍历最大深度为 l_p , 并记录遍历过程中经过的每一条路径, 存成一个列表, 用于下一步构建索引。

4.2.2 二次哈希开链法索引构建

双哈希是再哈希的一种, 其利用两个哈希函数来构造哈希探测序列, 大大降低了地址冲突概率。但是传统上, 双哈希方法实质上也是开放定址法的一种, 也就是如果所需节点数目大于 Mod 时, 将完全无法表示, 这完全不符合图数据库实际情况。因为作为一个通用算法, 我们无法预先确定数据库中最大图的节点数。因此, 本文将双哈希和开链法相结合提出了一个变形的双哈希算法, 即二次哈希开链法来进行哈希定址。

二次哈希开链法就是只进行一次双哈希, 然后再有冲突就利用开链法解决。双哈希函数公式如(4-3)。

$$h(key) = (h_1(key) + h_2(key)) \% Mod \quad (4-3)$$

其中 h_1, h_2 为两个不同的哈希函数, Mod 为哈希函数取模值, 一般为一个小于但最接近存储空间大小的素数。当 $h_1(key)$ 发生冲突时, 再用 $h_2(key)$ 的值作为偏移量来进行探测。如果再有冲突则进行开链法, 存成链表。

根据二次哈希开链法的特点, 本文设计了一种将路径字符串映射到哈希表的算法, 如算法4.1所示。而访问时函数则不需重新设计, 直接用开链法原有函数即可。

算法 4.1 二次哈希编码

输入: 路径字符串 $path_string$

输出: 哈希编码 $code$

```

1: function HASH( $path\_string$ )
2:    $code \leftarrow h_1(key) \% Mod$ 
3:   if  $code$  有冲突 then
4:      $code \leftarrow (code + h_2(key)) \% Mod$ 
5:   end if
6:   return  $code$ 
7: end function
  
```

在二次哈希开链法中哈希函数可以自选, 不过我们推荐选取算法4.2中的两个函数作为 h_1, h_2 , 经过实验这两个函数对于字符串哈希这两个效果最好。

BKDRHash 运算简单, 速度快, 所以作为第一次哈希函数。*APHash* 不易冲突, 所以作为第二次。不过需要注意的一点是, 在某些平台上, 位运算不一定比直接乘法快, 甚至会慢很多倍。因为哈希运行次数很多, 所以实际使用中需要注意这一点。

通过哈希存储, 我们可以很便捷得获得各图包含的路径关系表, 我们将其存到文件中作为索引, 分离查询与建库, 进行离线查询加速查询速度。

4.2.3 查询图路径遍历

我们对查询图也像数据库中的图一样进行拆分, 以 l_p 为路径最大长度遍历出所有路径。然后同样存成一个哈希表, 记录着每一条路径出现了几次。为进一步搜索做准备。不过和数据库路径遍历有所不同的是, 查询图的遍历过程中需要记录不同路径中相同的节点, 这个可以通过在路径中添加特定标签实现。

算法 4.2 哈希函数

输入: 字符串 *String***输出:** 哈希编码 *code*

```

1: function  $h_1(String)$  ▷ BKDRHash
2:    $char \leftarrow (string.first)$ 
3:    $code \leftarrow 0$ 
4:   while  $char \neq 0$  do
5:      $code \leftarrow code \ll 6 + char$ 
6:      $char \leftarrow (char.next)$ 
7:   end while
8:   return  $(code \& 0 \times 7FFFFFFF) \% Mod$ 
9: end function

10: function  $h_2(String)$  ▷ APHash
11:    $char \leftarrow (string.first)$ 
12:    $code \leftarrow 0$ 
13:    $i \leftarrow 0$ 
14:   while  $char \neq 0$  do
15:     if  $i$  为偶数 then
16:        $code \leftarrow (code \oplus ((code \ll 7) \oplus char \oplus (code \gg 3)))$ 
17:     else
18:        $code \leftarrow (code \oplus (\sim ((code \ll 11) \oplus char \oplus (code \gg 5))))$ 
19:     end if
20:      $char \leftarrow (char.next)$ 
21:   end while
22:   return  $(code \& 0 \times 7FFFFFFF) \% Mod$ 
23: end function

```

4.2.4 先验剪枝

在介绍本算法的先验剪枝步骤之前，我们先介绍一下包含逻辑规则 (*inclusion logic*)。

定义 4.1 (包含逻辑).^[25] 对于给定的标号图 G_1, G_2 ，和 G_1 的一个子图 G' ，若 G_1 是 G_2 的子图，则 G' 必定是 G_2 的子图 ($G_1 \subseteq G_2 \Rightarrow (G' \subseteq G_2)$)，反之，若 G' 不是 G_2 的子图，则 G_1 也不可能是 G_2 的子图 ($G' \not\subseteq G_2 \Rightarrow (G_1 \not\subseteq G_2)$)

从包含逻辑规则中，我们可以得知如果查询图 G_1 中的子图 G' 不是数据图 G_2 的子图，那么 G_2 就不可能是 G_1 的超图，因此可以放心得把 G_2 从候选集中删去。这就大大加速了“过滤-验证”框架中过滤阶段的过滤速度。

在本算法中，我们从三个方面进行了先验剪枝来缩小索引集个数。三个方面分别是 (i) 节点，(ii) 边，(iii) 路径。如果查询图中的某个节点个数大于数据图中的，那么数据图自然不会包含查询图。如果查询图中有数据图中没有的边，那么自然这幅数据图也不合要求。如果查询图中某条路径的个数大于数据图，那么因为包含逻辑规则，这幅数据图也当从候选集中删去。

经过这三步筛选过程，候选集将会大大减少，降低了后文所述路径合成和子图同构所需时间。

4.2.5 路径合成

当完成先验剪枝后，候选集已经相对较小，但是并没有达到最好的情况。我们可以通过路径合成确定其中很多的合理性。路径合成的复杂度远远小于子图同构，因此最后对候选集做一次路径合成可以大大降低最终复杂度。路径合成，顾名思义就是将多条路径进行合成，具体而言就是将多个有着公共节点的路径合成到一起，通过判定其是不是相同节点来筛选候选集。我们采用的是遍历的方法，只进行两两合成，然后逐一比对。如例4.1所示。

例 4.1. 假设有路径 $\bar{A}BC\bar{A}$ 和 $\underline{C}B$ ，其中有相同标记的节点均为同一节点，即在本例中两个 A 是同一节点和两个 C 也是同一节点。

1. 现在假设数据库中有四幅图，其路径信息如下所示，数字代表节点标识：

$$g_1 : ABCA = (1, 0, 3, 1) \quad CB = (3, 2)$$

$$g_2 : ABCA = (1, 2, 3, 1) \quad CB = (3, 2)$$

$$g_3 : ABCA = (1, 0, 3, 4) \quad CB = (3, 2)$$

$$g_4 : ABCA = (1, 0, 4, 1) \quad CB = (3, 2)$$

2. 在路径合成前，我们就可以利用节点信息删去 g_3 ，因为 g_3 的 $ABCA$ 中两个 A 一个是 1，一个是 4，并非同一节点。
3. 我们将 $ABCA$ 和 CB 合成，我们知道其中两个 A 是统一节点，两个 C 是同一节点，而两个 B 不是。我们得到合成结果：

$$g_1 : ABCACB = (1, 0, 3, 1), (3, 2)$$

$$g_2 : ABCACB = (1, 2, 3, 1), (3, 2)$$

$$g_4 : ABCACB = (1, 0, 4, 1), (3, 2)$$

4. 显然， g_2 不满足条件，因为它的两个 B 也是一个节点， g_4 也不满足，因为其两个 C 不是同一节点。所以筛选集中只剩下 g_1 。

可见，通过路径合成，我们大大缩小了候选集，降低了下一步子图同构所需的计算量，加速了整个算法。

4.2.6 子图同构

子图同构作为算法最后的验证部分，承担着对于整个算法正确性把关的责任，也同样是消耗大量运算量的部分。由于子图同构是个 $NP - hard$ 问题，所以目前仍没有一种快速的解法。我们选用经典算法 *ULLMANN* 算法^[23] 来解决这个问题。下面我们将大致介绍下 *ULLMANN* 算法。

ULLMANN 算法是 Ullmann 教授 1976 年提出的一种经典图同构算法，其本质是基于一个深度优先搜索树。其算法流程大致如下。首先，根据查询图节点的出入度从数据图中找出候选集。随后，根据每个节点的邻接节点对候选集进行筛选。最后，通过深度优先搜索，一一遍历配对，寻找匹配点。例4.2就是一个子图同构的完整过程。

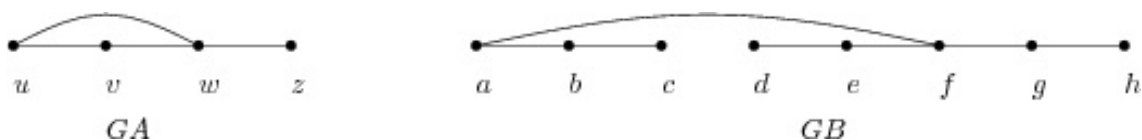


图 4.1 一个例子

例 4.2. 我们以图4.1为例说明下 Ullmann 的判断过程。我们要判断 GA 是否与 GB 同构。

1. 首先根据节点出入度找出候选集。显然 $degree(u) = degree(v) = 2, degree(w) = 3, degree(z) = 1$, 根据匹配节点出入度一定小于适配节点这一特征, 我们可以确定 $candidates(u) = candidates(v) = \{a, b, e, f, g\}, candidates(w) = \{f\}, GB$ 的每个节点都可以作为 z 的候选。
2. 然后我们根据邻接节点进行筛选, 例如 h 是 z 的候选节点, z 的邻接节点是 w , 但是 h 没有邻接节点在 w 的候选集中。因此, 我们就可以把 h 从 z 的候选集合中删去。这样, 我们得到 $candidates(u) = candidates(v) = candidates(z) = \{a, e, g\}, candidates(w) = \{f\}$
3. 最后, 我们进行一一匹配过程, 这步最简单, 但也最耗时。举例而言在本例中就是先看 u 如果和 a 配对, 那么 v, z, w 可以正常匹配么, 他们之间的边关系还能保持么? 显然, 本例中不可以。因此得出结论 GA 与 GB 不同构。

4.3 实验结果与分析

4.3.1 实验环境

本文提出算法的实验环境为 CPU Intel Core i7, 主频为 1.7 GHz, 内存为 8 GB 1600 MHz DDR3, 硬盘为 128GB SSD, 操作系统为 Mac OS X Yosemite 10.10.3; 所有算法均用 C 语言在 clang 600.0.56 环境编译完成。

4.3.2 实验数据分析

实验数据全采用真实数据, 为 DTP 提供的 AIDS 数据集。可从以下网址得到: <https://wiki.nci.nih.gov/display/NCIDTPdata/AIDS+Antiviral+Screen+Data>。我们从其数据库中随机抽取了 1000, 2000, 4000, 8000, 16000 个图作

为我们的查询集合。数据集平均每幅图有 41 条节点，48 条边。所有实验运行 10 次取平均值。

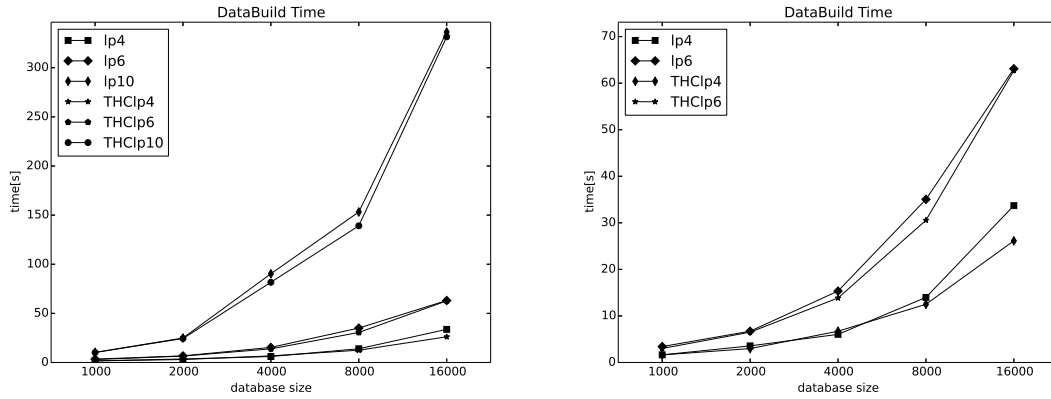


图 4.2 建库时间比较

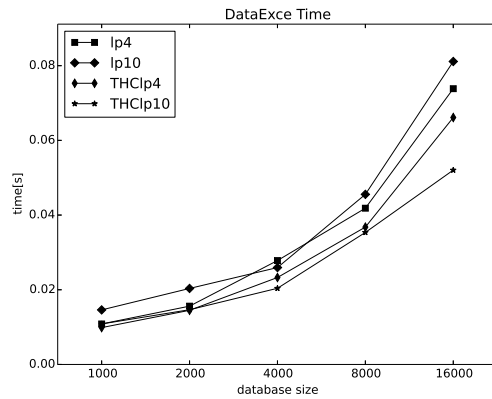


图 4.3 运行时间比较

我们测试了不同最大长度 l_p 下两个算法的表现，实验结果如图4.2,4.3所示，THC 为 Twice Hash Chain(二次哈希开链法) 的缩写。我们还具体统计了在 $l_p = 4$ 时，对于不同数目的真实数据建库时哈希发生冲突的数目，如表4.1所示。

数据集大小	10	1000	2000	4000	8000	16000
ORG	5465	588697	1284829	2620045	5317286	11307774
THC	4944	534059	1171099	2391228	4837960	10318729

表 4.1 $l_p = 4$ 时建库哈希冲突次数对比表

由图表可知，二次哈希开链的确有效减少了冲突，提高了建库速度与查询速度。

第五章 基于节点相似度的图相似性搜索

由前文可知，图数据能表示复杂的数据结构，在诸多领域也得到了广泛应用。从基本的生物，化学的分子结构，到交通网络，人际关系网都可以用图来建模。而对于图数据库的搜索也自然成为了热点问题。

上一章我们介绍了精确子图搜索方法，但是由于真实情况下图数据库具有信息不完整，含有杂质等情形，精确搜索容易出现各种不匹配问题，难以得到我们想要的结果。同时，对于查询图的完整信息有时查询者也并不了解。所以相似性搜索的实际应用领域更加广泛。对于实际应用，相似性搜索的研究意义远超过了精确搜索。

传统的图相似性算法虽然运行效率已较为理想，但是编码上过于复杂，也无法做到对所有图数据库良好适配。所以本章我们提出了一种性能上不输于传统算法，但是实现更为简单，并且无需复杂设计即可适用于大量图数据库的基于节点相似度的通用型算法。本章将首先详细介绍下一些相关概念，然后介绍下我们算法的具体思路并给出详细的代码设计方案，最后给出对于真实数据的实验结果与分析。

5.1 相关概念

本节主要介绍下文介绍算法时会用到的一些概念，包括小波图匹配核函数，G-Hash 中的图相似度定义，节点相似度定义三部分。

5.1.1 小波图匹配核函数

小波图匹配核函数 (Wavelet Graph matching kernel)^[14] 是 Wang 等人在 G-Hash 算法中提出的，用于度量图相似度的一个核心函数。其思想是先通过压缩每个节点周围邻接节点的属性信息，然后应用非递归线性核去计算图之间的相似度。这个方法包含两个重要的概念： h -hop 邻域和离散小波变换。用 $N_h(v)$ 标记一个节点 v 的 h 跳邻域，代表一个距离节点 v 最短距离是 h 跳 (跳过 h 个节点，也就是 $h+1$ 的曼哈顿距离) 的节点集合。离散小波变换涉及到一个小波函数的定义，见

下文公式(5-1)，也用到了 h 跳邻域。

$$\psi_{j,k} = \frac{1}{h+1} \int_{j/(k+1)}^{(j+1)/(k+1)} \varphi(x) dx \quad (5-1)$$

$\varphi(x)$ 代表 *Haar* 或者 *Mexican Hat* 小波函数， h 是在将 $\varphi(x)$ 在 $[0, 1)$ 区间上分成 $h+1$ 个间隔后的第 h 个间隔， $j \in [0, h]$ 。基于以上两个定义，我们现在可以将小波分析用在图上了。我们用小波函数来计算每个节点的局部拓扑和。公式(5-2)展示了一个小波度量方法，记做 $\Gamma_h(v)$ ，以图 G 中的一个节点 v 为例。

$$\Gamma_h(v) = C_{h,v} \times \sum_{j=0}^k \psi_{j,k} \times \bar{f}_j(v) \quad (5-2)$$

其中， $C_{h,v}$ 是一个归一化因子

$$C_{h,v} = \left(\sum_{j=0}^h \frac{\psi_{j,h}^2}{|N_h(v)|} \right)^{-1/2}, \quad (5-3)$$

$\bar{f}_j(v)$ 是离节点 v 最远距离为 j 的原子特征向量的平均值

$$\bar{f}_j(v) = \frac{1}{|N_j(v)|} \sum_{u \in N_j(v)} f_u \quad (5-4)$$

f_u 表示节点 v 的特征向量值。这样的特征向量值只会是下面四种中的一种：定类，定序，定距，定比。对于定比和定距特征值，直接在上述的小波分析时代入其值即可得到局部特征值。对于定类和定序节点特征，我们首先建立一个直方图，然后用小波分析提取出特征值。在节点 v 分析完成后，我们可以得到一个节点列表 $\Gamma^h(v) = \{\Gamma_1(v), \Gamma_2(v), \dots, \Gamma_h(v)\}$ ，我们称其为小波测度矩阵。用此方法我们可以将一个图转换为一个节点向量集合。因为小波变换有明确的正负区域，所以这些小波压缩特征可以表示出局部的邻接节点和距离较远的邻接节点的差异。因此，通过小波变换，一幅图的结构化信息可以压缩成节点特征。从而我们可以忽略拓扑结构来专心于节点匹配。核函数就是建立在这些集合上的，我们以图 G 和 G' 为例，图匹配核函数是这样的

$$k_m(G, G') = \sum_{(u,v) \in V(G) \times V(G')} K(\Gamma^h(u), \Gamma^h(v)), \quad (5-5)$$

$$K(X, Y) = e^{\frac{-\|X-Y\|_2^2}{2}}. \quad (5-6)$$

WA 方法是一种很好的利用核函数进行图相似度定义的方法。但是这个方法有一个问题，就是小波匹配核的总时间复杂度是 $O(m^2)$ ，核矩阵的是 $O(n^2 \times m^2)$ ， n

是数据库图个数, m 是平均节点个数。这意味着, 当数据库尺寸增加时, 计算时间将大幅度增加。

5.1.2 G-Hash 中的图相似性定义

图相似性有很多种定义方式有很多, 第二章中介绍的图编辑距离和最大公共子图就是两种常用的图相似度量方法。

G-Hash 中是利用核函数计算两图相似性的。公式(5-7)就是两图相似度距离的定义。

$$\begin{aligned}
 d(G, G') &= \sqrt{\|\phi(G) - \phi(G')\|_2^2} \\
 &= \sqrt{\langle \phi(G) - \phi(G'), \phi(G) - \phi(G') \rangle} \\
 &= \sqrt{\langle \phi(G), \phi(G) \rangle + \langle \phi(G'), \phi(G') \rangle - 2\langle \phi(G), \phi(G') \rangle} \\
 &= \sqrt{k_m(G, G) + k_m(G', G') - 2k_m(G, G')}
 \end{aligned} \tag{5-7}$$

公式中 $k_m(G, G)$ 代表图 G 和其本身的核函数值, $k_m(G', G')$ 是图 G' 及其本身的值, $k_m(G, G')$ 就是图 G 和 G' 的。

$$k_m(G, G') = \sum_{v \in G', u \in \text{simi}(v)} K(\Gamma^h(u), \Gamma^h(v)) \tag{5-8}$$

$\text{simi}(v)$ 是一个包含着图 G 和节点 v 哈希到同一个位置的节点集合。我们用以下的解码方式来获取包含这些节点的图号和节点号。

显然, 仅利用相似点对而非所有点对来计算两图相似度可以节约很多运算时间。因此为了增加准确度, 相似的节点应该被哈希到相邻的位置。在图很大 (如大于 40) 时, 我们也要计算相邻位置的节点。

因此在核函数计算时我们只考虑相似点对, 在使用 RBF 核的情况下, $K(\Gamma^h(u), \Gamma^h(v)) \approx 1$, 所以公式 (2) 可以写成

$$K(G, G') \approx \sum_{v \in G', u \in \text{simi}(v)} 1 = \sum_{v \in G'} |\text{simi}(v)| \tag{5-9}$$

$|\text{simi}(v)|$ 是在 $\text{simi}(v)$ 中的节点数目。这意味着我们只需要数据图 G 中和查询 G' 相似的点个数, 其和就是我们要求的核。同理, 我们可以这样计算每个图与其自己的核。显然, 每个图与自己的核就是节点数目。

所以公式(5-7)最终变成公式(5-10)，其中 $simi'(v)$ 代表图 G' 中和节点 v 相似的节点数。

$$d(G, G') = \sqrt{\sum_{v \in G} |simi(v)| + \sum_{v \in G'} |simi'(v)| - 2 \sum_{v \in G'} |simi(v)|} \quad (5-10)$$

5.1.3 节点相似度

在上一节我们介绍了 G-Hash 中的图相似性的定义。其中有参数 $simi(v)$ 代表与节点 v 相似的节点，但是何为相似，这个很难定义。G-Hash 算法在这边根据不同图数据库构建了不同类型的哈希，来保证相似的节点都在相邻位置。而这在实际应用中很是困难。因此我们提出了节点相似度这一概念。我们用查询图每个节点和数据图中每个节点的节点相似度作为 $simi(v)$ 的值。

定义 5.1 (节点相似度). 用简化包 (*Reduced Bag*) 表示的两个节点字符串之间的相似度节点相似度称为节点相似度。

因为简化包表示的字符串实质上是一个向量，如 “a,1,0,1” 就可以看做一个向量 $\vec{A} = (a, 1, 0, 1)$ ，所以对于字符串的距离，也就是节点相似度，可以用公式(5-11)计算。

$$simi(A, B) = \frac{\vec{A} \times \vec{B}}{\|\vec{A}\| \times \|\vec{B}\|} \leq 1 \quad (5-11)$$

其中， $\|\vec{A}\|$ 表示 \vec{A} 的模， $simi(A, B)$ 永远是小于等于 1 的，值越大代表越为相似，为 1 代表两个节点特征完全一样。

5.2 基于节点相似度的图相似性搜索

本算法和 G-Hash^[14] 基本类似，只是在查询过程计算相似度时没有利用哈希特征找到相似的节点，而是利用节点相似度来计算相似度。这样避免了由于哈希函数选取不当造成的相似节点不在靠近位置的问题。用普通的枚举虽然理论复杂度从 $O(1)$ 变为了 $O(n)$ 但是提高了查询准确度，并且由于哈希存在冲突，而实际图一般节点不多等情况，我们算法的运行效率并不比 G-Hash 低，甚至在某些情况下会略好于 G-Hash 算法，而且编码难度也得到了大大降低。本节将从数据库构建，查询过程，数据库维护，编码设计四个方面详细说明我们提出的基于节点相似度的图相似性搜索算法。

5.2.1 数据库构建

首先统计数据库中的不同标号数目，然后将数据库中的每幅图都用简化包表示，选取节点标号和与其直接连接的各标号个数作为特征值。归一化后变成字符串，利用红黑树建立 **Bag** 编号与特征字符串的对应关系。之所以选用红黑树而不是哈希表是因为对于纯字符串结构红黑树的表现要好于哈希表。然后再以 **Bag** 编号为行，图序号为列建立一个二维表，每个值代表在此图中此种节点有几个。最终数据库如表5.1所示。

Bag 编号	G_1	G_2	G_3
1	0	3	1
2	1	0	2
3	4	2	1
4	2	3	0

表 5.1 数据库示例

5.2.2 查询前 K 个相似图

首先，我们参考 **G-Hash** 的图距离函数定义了我们的基于节点相似度的图距离函数，即公式(5-12)。

$$d(G, G') = \sqrt{\sum_{v \in G, u \in G} simi(v, u) + \sum_{v \in G', u \in G'} simi(v, u) - 2 \sum_{v \in G', u \in G} simi(v, u)} \quad (5-12)$$

当我们得到一个查询图 G' 时，我们也用简化包将其表示，得到节点字符串集。然后利用公式(5-12)计算查询图和数据库中每副图的距离。随后将结果排序，取出最小的 **K** 个即为与查询图最相似的 **K** 个图。

5.2.3 数据库维护

当需要增删图的时候，会出现两种情况:(i) 增删图对标号个数没有影响，即没有因为添加图而添加新的标号，也没有标号因为删除图而不被使用，(ii) 增删图对标号个数有影响，即因为添加图而引入了新的标号，或者因为删除图而有的标号不再有图使用。当出现 (i) 情况时，只需要添加一行或者删除一行即可。当出现

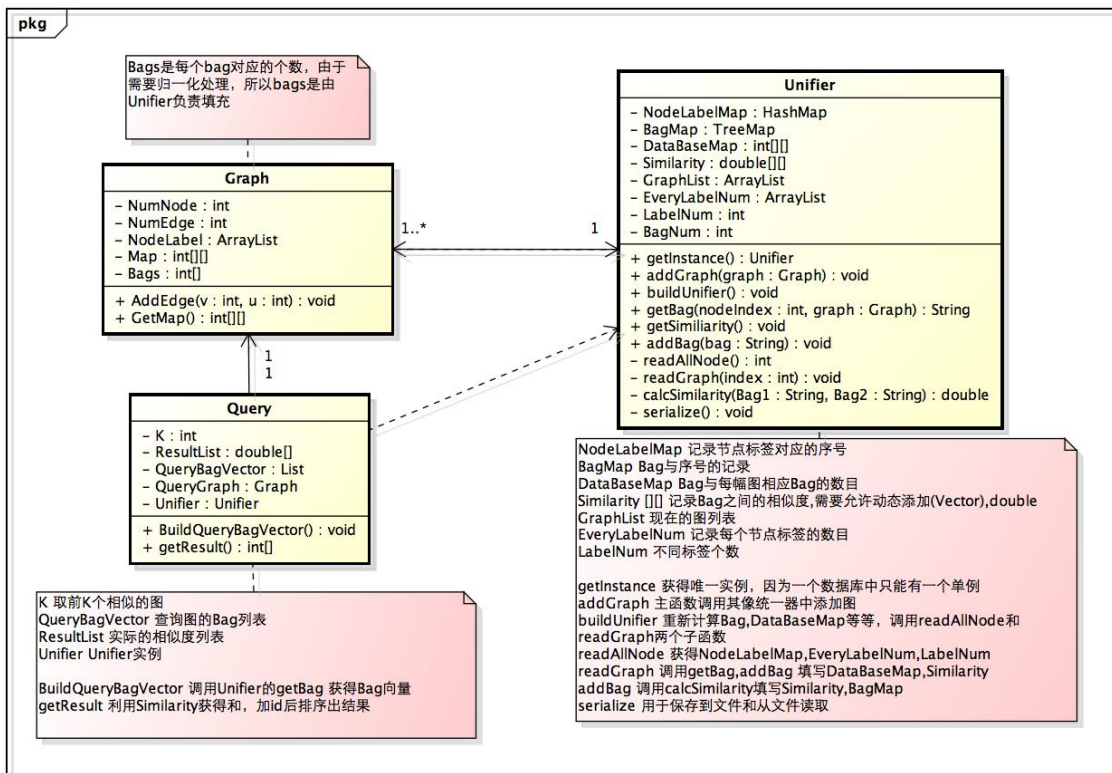


图 5.1 基于节点相似度的图相似性搜索设计类图

(ii) 情况时, 则需要重新建立数据库索引, 不过无需每次出现都重新建立, 每 5-10 次重建一次即可。

5.2.4 代码设计

本算法的实现非常简单, 不需要任何复杂数据结构, 只需要三个类即可实现。类图设计如图5.1所示。

其中, *Graph* 为一个最小单元即一个图, 对外提供一些基本数据访问方法。*Unifier* 顾名思义, 是个用于归一化的类, 也是数据库类, 负责建库, 增删图, 和数据查询时一些算法定义, 像获取简化包表示, 图相似度计算就是靠这个类实现的。*Query* 是一个查询, 通过调用 *Unifier* 实现查询过程, 最后输出查询结果。结果表现为图的 id 列表。我们还给 *Unifier* 添加了序列化接口, 实现建库查询分离, 加速查询过程。

由上可见, 基于节点相似度的图相似算法实现非常方便, 可运用在大量环境中。

5.3 实验结果与分析

5.3.1 实验环境

本文提出算法的实验环境为 CPU Intel Core i7，主频为 1.7 GHz，内存为 8 GB 1600 MHz DDR3，硬盘为 128GB SSD，操作系统为 Mac OS X Yosemite 10.10.3；所有算法均用 Java 语言在 JDK1.7u71 环境编译完成。

5.3.2 实验数据分析

实验数据全采用真实数据，为 DTP 提供的 AIDS 数据集。可从以下网址得到：<https://wiki.nci.nih.gov/display/NCIDTPdata/AIDS+Antiviral+Screen+Data>。我们从其数据库中随机抽取了 1000,2000,4000,8000,16000 个图作为我们的查询集合。数据集平均每幅图有 41 条节点，48 条边。所有实验运行 10 次取平均值。由于未能联系到原作者，实验中用于对照的 G-Hash 算法也是我们根据 G-Hash 论文^[14]自行仿写的。

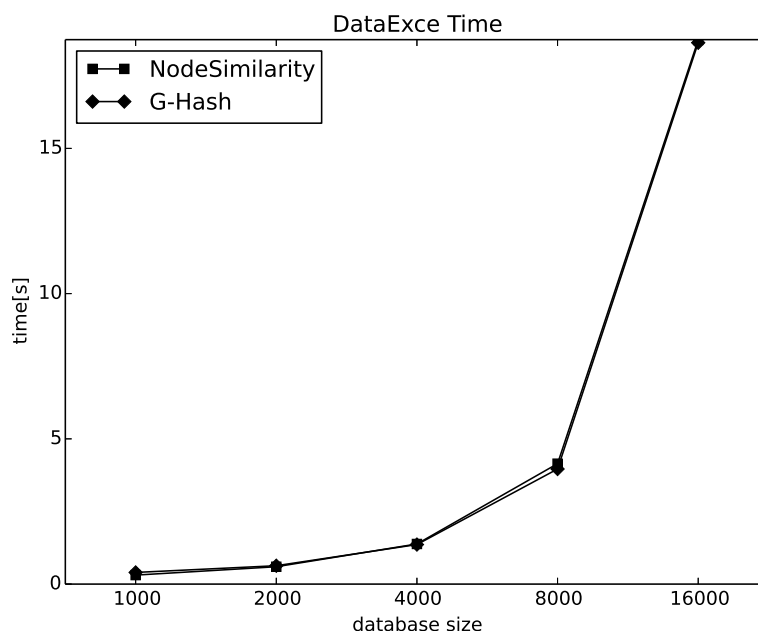


图 5.2 查询时间对比图

实验结果如图5.2所示，可以看出节点相似度算法与 G-Hash 算法在线查询时间基本一致，说明其性能不输于 G-Hash 算法，但是编码难度大大降低。由于近似搜索的精度并不好定义，因此我们没有给出精度的对比图。不过由于 G-Hash 靠哈

希函数获得相似节点，具有局限性。而本算法则是完全计算所有节点相似度，显然更加可靠。

第六章 总结与展望

本章作为全文的最后一章，将对本文的所述内容进行总结，并对下一步的研究工作给出一些意见。

6.1 本文总结

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。图作为一种通用的数据结构，能对复杂数据很好建模。由此图搜索技术日益成为一个热点课题，本文在前人的基础上，对图的精确搜索和相似性搜索做了一定深入的研究。主要工作如下：

1. 本文首先介绍了下图的基本定义，存储方法，图查询类型和一些经典的查询算法。
2. 随后，我们对于图精确搜索提出了一种基于二次哈希开链法的搜索算法，有效避免了传统哈希方法冲突频发的问题，加速了整个查询过程。本文中，我们完整得介绍了这种算法，从数据库建库，到查询剪枝，直最后的子图同构检测，并通过实验证明了此算法确实可以加快整个查询过程。
3. 然后，对于图相似性搜索我们提出了一种基于节点相似度的搜索算法。本算法与 **G-Hash** 算法大致相同，但重新定义了其核心部分——图相似度度量方法，使得编码复杂度大大降低，但同时效率又不低于 **G-Hash** 算法。本文中我们除了详细介绍了此算法原理，还给出了算法设计类图，并通过实验证明了此算法完全符合我们预期的目标——运行效率不低于 **G-Hash**，甚至在某些情况下略好于 **G-Hash**，但是编码难度大大下降。

综上所述，本文对子图搜索方面做了一定基础性的研究，在认真研究了前人的经典算法基础上，进行了一些新的探索。

6.2 不足与展望

但是，本文提出的两种新算法也只是在传统算法上的一个局部优化，并没有脱离传统算法的框架，因此效率上并没有显著的提升。图数据查询仍是图数据管理中的一个重要领域，还有许多方向可以研究。在进一步的研究中可以从以下几个方面入手：

1. 物理存储。目前，时时刻刻产生着大量的图数据信息，如何在图数据库中有有效存储，在内存中以何种结构存储图数据，如何用固定的磁盘页面存储不同规模尺寸的图数据，又如何对图数据进行压缩表示，这些基本的物理存储问题将直接决定 I/O 操作的用时。而在实际中对图的存取又是非常频繁的，所以如果能解决存储问题，那么必然能提高整体查询效率。
2. 索引结构。除了物理存储，逻辑索引显得更为重要，如何高效索引，如何进行维护和更新，这些都是亟待解决的问题。特别是图索引的维护与更新，由于目前大量算法都处于理论阶段而并非实际运用，所以都没有涉及动态维护与更新。但是随着图数据越来越为重要，实际中对图的应用也日益增多。如果能解决这个问题，那么对图从实验室走到实际运用中将会是个强助力。
3. 并行计算。图查询的计算复杂度通常能达到指数级及以上，单线程的运算速度就成了图查询速度的瓶颈。因此考虑利用 CPU/GPU 异构并行或者多处理器并行，多机并行等也是一个不错的研究课题。

致 谢

毕业论文暂告收尾，这也意味着我在西安电子科技大学的四年的学习生活即将结束。回首既往，自己一生最宝贵的时光能于这样的校园之中，能在众多学富五车、才华横溢的老师们的熏陶下度过，实是荣幸之极。在这四年的时间里，我在学习上和思想上都受益非浅。这除了自身努力外，与各位老师、同学和朋友的关心、支持和鼓励是分不开的。

首先感谢霍红卫教授的指导，霍老师在我论文写作期间给了我莫大的帮助。从选题到构思，研究，撰写，每一步都倾注了霍老师大量的心血。

其次感谢陈晓阳学长，每次在我迷茫时都给我指明了方向。特别是研究遇到一些瓶颈时，陈学长都会用其丰富的经验帮我度过。

感谢 ShaSha 教授，提供了 GraphGrep 源代码。

最后，特别感谢我的父母和女朋友吕莹在我毕设期间给予我的支持与理解！

时间的仓促及自身专业水平的不足，整篇论文肯定存在尚未发现的缺点和错误。恳请阅读此篇论文的老师、同学，多予指正，不胜感激！

参考文献

- [1] (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 [M]. 杭州: 浙江人民出版社, 2012.
- [2] 王海勋. 图数据管理与挖掘 [J]. 中国计算机学会通讯, 2012.
- [3] COOK D J, HOLDER L B. Substructure discovery using minimum description length and background knowledge[J]. Journal of Artificial Intelligence Research, 1994: 231–255.
- [4] HOLDER L B, COOK D J. Graph-Based Data Mining.[J]. Encyclopedia of data warehousing and mining, 2009, 2: 943–949.
- [5] JAMES C A, WEININGER D, DELANY J. Daylight theory manual daylight version 4.82. Daylight Chemical Information Systems[J], 2003.
- [6] F C E P, N Z. Finding shortest paths in large network systems[J]. Proceedings of the 9th ACM international symposium on Advances in geographic information systems, 2001.
- [7] JING N, HUANG Y-W, RUNDENSTEINER E A. Hierarchical encoded path views for path query processing: An optimal model and its performance evaluation[J]. Knowledge and Data Engineering, IEEE Transactions on, 1998, 10(3): 409–432.
- [8] HUTCHINSON D, MAHESHWARI A, ZEH N. An external memory data structure for shortest path queries[M]. Germany: Springer, 1999.
- [9] OGATA H, FUJIBUCHI W, GOTO S, et al. A heuristic graph comparison algorithm and its application to detect functionally related enzyme clusters[J]. Nucleic acids research, 2000, 28(20): 4021–4028.
- [10] CHAU P. Catching bad guys with graph mining[J]. XRDS: Crossroads, The ACM Magazine for Students, 2011, 17(3): 16–18.

-
- [11] 朱戈. 基于图的科技文献相似性搜索关键技术研究 [D]. 哈尔滨: 黑龙江大学, 2011.
- [12] 谭伟. 图数据精确查询与近似查询的研究 [D]. 赣州: 江西理工大学, 2013.
- [13] GIUGNO R, SHASHA D. Graphgrep: A fast and universal method for querying graphs[C] // Pattern Recognition, 2002. Proceedings. 16th International Conference on: Vol 2. 2002: 112–115.
- [14] WANG X, SMALTER A, HUAN J, et al. G-hash: towards fast kernel-based similarity search in large graph databases[C] // Proceedings of the 12th International Conference on Extending Database Technology: Advances in Database Technology. 2009: 472–480.
- [15] 王桂平, 王衍, 任嘉辰. 图论算法理论, 实现及应用 [M]. 北京: 北京大学出版社, 2011.
- [16] KURAMOCHI M, KARYPIS G. Frequent subgraph discovery[C] // Data Mining, 2001. ICDM 2001, Proceedings IEEE International Conference on. 2001: 313–320.
- [17] SHANG H, ZHU K, LIN X, et al. Similarity search on supergraph containment[C] // Data Engineering (ICDE), 2010 IEEE 26th International Conference on. 2010: 637–648.
- [18] YAN X, YU P S, HAN J. Graph indexing: a frequent structure-based approach[C] // Proceedings of the 2004 ACM SIGMOD international conference on Management of data. 2004: 335–346.
- [19] HUAN J, YAN K, KULKARNI P. G-HASH+: Fast Graph Similarity Search in Very Large Transaction Graph Databases with Graphics Processing Units[J]. ACM, 2013.
- [20] CAO Y, JIANG T, GIRKE T. A maximum common substructure-based algorithm for searching and predicting drug-like compounds[J]. Bioinformatics, 2008, 24(13): i366–i374.

-
- [21] HE H, SINGH A K. Closure-tree: An index structure for graph queries[C] //Data Engineering, 2006. ICDE'06. Proceedings of the 22nd International Conference on. 2006: 38–38.
- [22] 张立地. DTS 系统中内存数据库关键技术研究与应用 [D]. 武汉: 华中科技大学, 2007.
- [23] ULLMANN J R. An algorithm for subgraph isomorphism[J]. Journal of the ACM (JACM), 1976, 23(1): 31–42.
- [24] 严蔚敏, 吴伟民. 数据结构 (C 语言版)[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011.
- [25] YAN X, HAN J. gspan: Graph-based substructure pattern mining[C] //Data Mining, 2002. ICDM 2003. Proceedings. 2002 IEEE International Conference on. 2002: 721–724.