

类型引导边匹配的异质图相似度学习方法

桑士龙, 陈可佳,

引用本文

桑士龙, 陈可佳, . 类型引导边匹配的异质图相似度学习方法[J]. 计算机科学, 2026, 53(3): 181-187.

SANG Shilong, CHEN Kejia. [Type-steered Edge Matching for Heterogeneous Graph Similarity Learning](#) [J]. Computer Science, 2026, 53(3): 181-187.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

[BiGCN-TL:软件错误部分定位场景下二分图图卷积神经网络Transformer定位模型](#)

BiGCN-TL: Bipartite Graph Convolutional Neural Network Transformer Localization Model for Software Bug Partial Localization Scenarios

计算机科学, 2025, 52(6A): 250200086-11. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.250200086>

[基于多视图表示学习的语义感知异质图注意力网络](#)

Semantic-aware Heterogeneous Graph Attention Network Based on Multi-view Representation Learning

计算机科学, 2025, 52(6): 167-178. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.240600032>

[基于数据增强的异质图注意力网络](#)

Heterogeneous Graph Attention Network Based on Data Augmentation

计算机科学, 2025, 52(3): 180-187. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.231200138>

[基于多关系图注意力网络的社交机器人检测](#)

Social Bots Detection Based on Multi-relationship Graph Attention Network

计算机科学, 2025, 52(1): 298-306. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.231100161>

[结构影响力及标签冲突感知的图课程学习方法](#)

Structural Influence and Label Conflict Aware Based Graph Curriculum Learning Approach

计算机科学, 2024, 51(10): 227-233. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.230800167>

类型引导边匹配的异质图相似度学习方法

桑士龙¹ 陈可佳^{1,2,3}

1 南京邮电大学计算机学院 南京 210023

2 江苏省大数据安全与智能处理重点实验室(南京邮电大学) 南京 210023

3 计算机软件新技术国家重点实验室(南京大学) 南京 210023

(1022040812@njupt.edu.cn)

摘要 图相似度学习是通过学习图的结构特征来匹配图之间相似程度的方法。目前,基于图神经网络的图相似度学习方法仍局限于节点级或图级的匹配范式,忽视了边级表示及其对图结构匹配的贡献。此外,现实图中的边通常具有不同类型,代表节点间不同的语义关系,可用于引导跨图交互。因此,提出了一种类型引导边匹配的异质图相似度学习方法(TEM-HGSL),首先设计基于线图的异质图同构网络以更好地学习边的嵌入,然后通过类型对齐的边匹配机制以更好地利用边的语义信息,最终实现边-图双层级的图相似度计算。在4个异质图数据集上的实验结果表明,TEM-HGSL方法计算的均方误差比最优基线平均降低了25.65%,能有效实现细粒度相似度计算。

关键词 图相似度学习;异质图;线图;类型引导边匹配;图结构匹配

中图分类号 TP391

Type-steered Edge Matching for Heterogeneous Graph Similarity Learning

SANG Shilong¹ and CHEN Kejia^{1,2,3}

1 School of Computer Science, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, China

2 Jiangsu Key Laboratory of Big Data Security & Intelligent Processing (Nanjing University of Posts and Telecommunications), Nanjing 210023, China

3 State Key Laboratory for Novel Software Technology at Nanjing University, Nanjing 210023, China

Abstract Graph similarity learning aims to measure the similarity between graphs by learning their structures. Graph similarity learning methods based on graph neural networks are still limited to the node-graph level matching paradigms, failing to perceive the edge-level representation and its contribution to graph structure matching. Moreover, edges in real-world graphs usually have different types, representing different semantic relationships between nodes, which are remain underutilized in cross-graph interaction methods. To address this problem, a type-steered edge matching for heterogeneous graph similarity learning(TEM-HGSL) framework is proposed. Firstly, a heterogeneous graph isomorphism network based on the line graph is designed to better learn edge embeddings. Then, a type-aligned edge matching mechanism is introduced to make better use of the semantic information of edges. Finally, the graph similarity calculation at both the edge and graph levels is realized. Experiments results on four heterogeneous graph datasets show that TEM-HGSL can reduce the mean square error in average of 25.65% compared with the best baseline, effectively achieving fine-grained similarity calculation.

Keywords Graph similarity learning, Heterogeneous graph, Line graph, Type-steered edge matching, Graph structure matching

1 引言

图相似度学习(Graph Similarity Learning, GSL)旨在通过学习图的结构特征来匹配图之间的相似程度,是目前图机器学习领域的关键研究方向之一^[1]。其研究成果在药物相互作用预测^[2]、跨领域知识迁移^[3]等诸多领域发挥着核心作用。

图编辑距离(Graph Edit Distance, GED)和最大公共子图(Maximum Common Subgraph, MCS)^[4]是两种主流的图相似度度量方法,但二者是NP-hard问题,计算代价高昂^[5]。随着图神经网络(Graph Neural Network, GNN)^[6-9]的迅速发展,出现了一系列基于GNN的图相似度学习框架,如GMN^[10], NA-GSL^[11], GraphSim^[12]等。这些方法通过计算节点级和图

到稿日期:2025-03-03 返修日期:2025-05-19

基金项目:国家自然科学基金(62476137);南京大学计算机软件新技术国家重点实验室开放课题(KFKT2022B01);南京邮电大学校级科研基金(NY221071)

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China(62476137), Foundation of State Key Laboratory for Novel Software Technology at Nanjing University(KFKT2022B01) and Research Foundation of Nanjing University of Posts and Telecommunications(NY221071).

通信作者:陈可佳(chenkj@njupt.edu.cn)

级的跨图交互,有效兼顾了精度和效率。

然而,已有方法主要关注节点级的表示和匹配策略,忽略了边作为图的基本结构在图匹配中的作用。此外,真实场景中图数据往往是异质的,边可能呈现不同的语义。例如,图1展示了两个相似的分子结构图,左侧是环己烯酮(C_6H_8O),右侧是环己酮($C_6H_{10}O$)。二者虽具有相同的官能团,但环己烯酮存在一对通过双键连接的碳原子,而环己酮则使用全单键碳链。现有遵循同质性假设的图相似度学习模型难以捕捉这一差异。

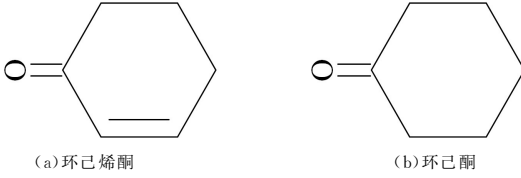


图1 环己烯酮和环己酮的分子结构图

Fig. 1 Molecular structures of cyclohexenone and cyclohexanone

为了验证上述假设,本文构建了异质图数据集 ACM1000 (构建流程见 5.1 节),并在该数据集与基准的同质图数据集 AIDS700nef 上分别进行了图相似度学习实验。结果如图 2 所示,各方法在 ACM1000 上的均方误差指标 (Mean Square Error, MSE)^[13] 较 AIDS700nef 增加了 25%~76%,证明了图的异质性的确会对匹配结果造成显著影响。

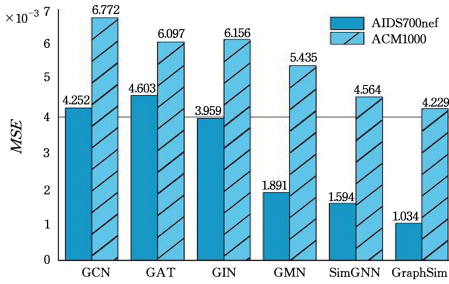


图2 基准 GSL 方法在同质图 AIDS700nef 和异质图 ACM1000 上的 MSE 值比较

Fig. 2 MSE comparison of GSL baselines on homogeneous graph AIDS700nef and heterogeneous graph ACM1000

针对以上两个问题,本文提出了一种基于类型引导边匹配的异质图相似度学习框架 (Type-steered Edge Matching for Heterogeneous Graph Similarity Learning, TEM-HGSL)。首先定义异质图编辑距离 (Heterogeneous Graph Edit Distance, HGED),量化异质图对的相似程度。接着,设计基于线图的异质图同构网络 (Heterogeneous Graph Isomorphism Network, HGIN),实现边嵌入的表示。随后,基于类型对齐规则,实现边级匹配以利用边的语义信息。最后,融合两级匹配向量输入全连接层 (Fully Connected Layers, FCLs),得到异质图的相似度分数。

本文的主要贡献如下:

- 1) 在图相似度学习方法中引入边级匹配机制,提出了异质图相似度学习方法 TEM-HGSL;
- 2) 提出了异质图编辑距离,并构建了针对异质图相似度问题的数据集;
- 3) 实验结果验证了 TEM-HGSL 模型在学习性能和计算效率上均优于其他基线方法。

2 相关工作

2.1 图相似度学习

随着图神经网络 (GNNs) 的发展,图相似度计算的研究范式从传统的 GED 度量方法转向基于表示学习的方法,例如采用 GCN^[6],GIN^[7],GAT^[8] 等方法获得图级表示后再计算相似度分数。为了实现细粒度匹配,SimGNN^[14] 开创性地加入跨图节点对的相似度矩阵并得到直方图表示。随后,GraphSim^[12] 通过节点排序保留节点位置信息,并利用 CNN 融合不同层的匹配矩阵,解决了 SimGNN 中直方图计算不可微问题。GMN^[10] 引入跨图节点交互注意力以获得更丰富的跨图表示。除了改进节点表示外,注意力机制也被用于匹配矩阵。例如:NA-GSL^[11] 计算图间节点对的注意力,并使用自注意力机制对齐节点匹配矩阵;TaGSim^[15] 将不同的图编辑操作通过注意力机制建模成不同的代价,实现更加精确的预测 GED。为了缓解节点级匹配开销大的问题,MGMN^[16] 仅计算节点-图对的相似度以减少时间消耗,ERIC^[17] 利用对齐正则化加速训练阶段,GraSP^[18] 利用位置编码增强节点表示以降低计算开销。

然而,上述方法均未考虑图元素的异质性特点,未能有效表示和匹配图元素的语义信息。

2.2 异质图表示学习

异质图神经网络能够显式建模节点和边的类型语义^[19]。早期方法通常使用元路径 (Meta-path) 建模语义关系。HAN^[20] 基于元路径的注意力机制捕捉语义级表示的重要性。HANDA^[21] 基于元路径形成语义增强异质图,利用注意力机制融入节点的类型信息。但是基于元路径的方法的时空复杂度较高。LYU 等^[22] 重新审视了先前的模型,对 GAT 进行修改,设计了适用于异质图的版本 Simple-HGN,取得了优越的性能。DAHGN^[23] 构建异质图及其同质子图的视图,并利用对比学习增强节点的表示。

异质图中的边代表节点的多类语义关系,对于图相似度学习至关重要。目前已有一些边感知的 GNN 展现了对关系的语义建模潜力。

2.3 边感知图神经网络

RGCN^[24] 为每种关系类型添加一个可学习权重,从而学习不同类型的边嵌入。PNA^[25] 在聚合阶段显式结合了边特征和邻居节点特征,但边信息仅用于更新节点的表示。NENN^[26] 则交替堆叠节点级和边级注意力层,联合学习节点和边的表示。CensNet^[27] 借助线图同时学习节点表示和边的表示。LEMON^[28] 通过原图和线图表示的对比,对分子进行编码。NemoNet^[29] 设计参数化滤波器,学习节点和边的高阶信息,从而增强局部子结构的表示。

3 预备知识

3.1 异质图表示

给定图 $G=(V,E,X,\Phi,\Psi)$, V 为节点集, E 为边集, X 为节点特征矩阵, $\Phi:V \rightarrow C$ 为节点类型映射函数, $\Psi:E \rightarrow R$ 为边类型映射函数, C 和 R 分别表示节点类型和边类型集合。若 $|C|+|R|>2$, 则图 G 为异质图。每个节点 $v_n \in V$ 具有类型 $c_n = \Phi(v_n) \in C$, 每条边 $e_a \in E$ 具有类型 $r_a = \Psi(e_a) \in R$ 。

3.2 异质图编辑距离

图编辑距离 (GED) 度量两张图转换的最小编辑代价。本

文将传统 GED 扩展到异质图场景, 定义了异质图编辑距离 (HGED), 表示将异质图 G_i 转换为 G_j 所需编辑操作的最小代价, 计算式如下:

$$HGED(G_i, G_j) = \min_{(e_1, \dots, e_k)} \sum_{l=1}^k C(e_l) \quad (1)$$

其中, e_1, \dots, e_k 表示所有编辑路径的集合, $C(e_l)$ 表示一次编辑操作 e_l 的代价。异质图中, 编辑操作除了节点和边的增删之外, 还涉及类型的转换。这一般需要两次编辑操作进行对齐, 即删除原始类型, 再添加具有目标类型的新元素。因此, 类型转换的代价为:

$$C(x_o \rightarrow x_n) = C_{del}(x_o) + C_{add}(x_n) \quad (2)$$

其中, $x \in V \cup E$, x_o 和 x_n 分别为具有不同类型的原始元素和目标元素。如图 3 所示, $HGED(G_1, G_2)$ 的值为 5。

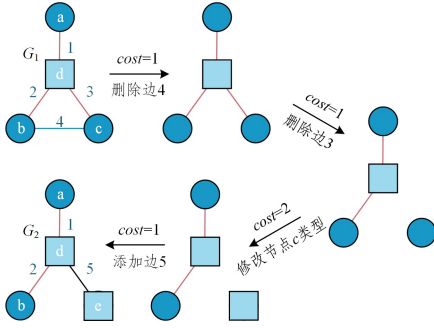


图 3 HGED 计算示例

Fig. 3 Example of HGED calculation

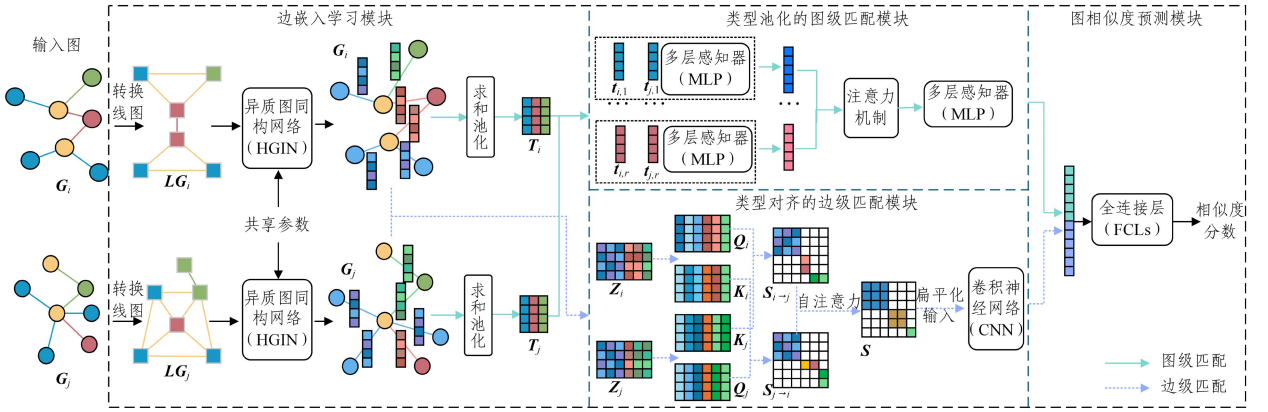


图 4 TEM-HGSL 整体框架图

Fig. 4 Overall framework of TEM-HGSL

4.1 边嵌入学习

该模块在异质图中扩展 GIN 的消息传递机制, 设计了类型感知的异质图同构网络 HGIN。

先前实验(见图 2)表明, GIN^[7] 性能与 GCN 和 GAT 相当, 但参数更少, 这得益于 GIN 的单射性消息传递机制。

$$\mathbf{z}_n^{(l)} = MLP^{(l)}((1 + \epsilon^{(l)})\mathbf{z}_n^{(l-1)} + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} \mathbf{z}_m^{(l-1)}) \quad (4)$$

其中, $\mathbf{z}_n^{(l)}$ 表示节点 n 在第 l 层的嵌入向量, $\mathbf{z}_n^{(0)} = \mathbf{X}_n$; ϵ 是可学习参数; $\mathcal{N}(n)$ 表示节点 n 的邻居集合。

然而, 在异质图(见图 2 的 ACM1000)中, GIN 的性能仍不理想。为了在边级表示中更好地融入结构和语义信息, 本文将原始图中的边映射为线图中的节点, 将 GIN 扩展到异质线图中。其消息传递公式如下:

$$\mathbf{z}_n^{(l)} = MLP^{(l)}((1 + \epsilon^{(l)})\mathbf{z}_n^{(l-1)} + \mathcal{T}) \quad (5)$$

3.3 线图

本文采用线图(Line Graph)学习边的嵌入。异质图 G 的线图定义为 $L(G) = (V_L, E_L, X_L, \Phi_L, \Psi_L)$, 满足如下条件:

1) 节点映射: $V_L = E$, 即 $L(G)$ 中每个节点对应 G 中的一条边。

2) 边构建规则: G 中的任意两条边 $e_a, e_b \in E$, 当且仅当它们共享同一个节点时, 在 $L(G)$ 中添加对应的边 $(e_a, e_b) \in E_L$ 。在异质图中, $L(G)$ 节点 $e_a \in V_L$ 的类型由 G 中边的类型 $r_a \in \mathbf{R}$ 决定, 即 $\Phi_L(e_a) = \Psi(e_a) = r_a \in \mathbf{R}$, 其中 $\Phi_L(\cdot)$ 为 $L(G)$ 的节点类型映射函数, $\Psi(\cdot)$ 为 G 的边类型映射函数。

3.4 异质图相似度学习

异质图相似度学习旨在通过匹配异质图对之间的结构和语义信息实现图相似度的预测。本文将该任务形式化为 HGED 回归任务, 即给定两个异质图 G_i, G_j 和它们归一化的 HGED 值 s , 学习一个最小化 MSE 的相似度预测函数 f_θ :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{|\mathcal{T}_r|} \sum_{(G_i, G_j) \in \mathcal{T}_r} \text{MSE}(f_\theta(G_i, G_j), s) \quad (3)$$

其中, \mathcal{T}_r 表示训练图对集合, θ 是模型的参数。

4 本文方法

本文整体框架如图 4 所示, 主要包含 4 个模块: 1) 基于异质图同构网络的边嵌入学习模块; 2) 基于类型池化的图级匹配模块; 3) 基于类型对齐的边级匹配模块; 4) 图相似度预测模块。

4.1 边嵌入学习

该模块在异质图中扩展 GIN 的消息传递机制, 设计了类型感知的异质图同构网络 HGIN。

先前实验(见图 2)表明, GIN^[7] 性能与 GCN 和 GAT 相当, 但参数更少, 这得益于 GIN 的单射性消息传递机制。

$$\mathbf{z}_n^{(l)} = MLP^{(l)}((1 + \epsilon^{(l)})\mathbf{z}_n^{(l-1)} + \sum_{m \in \mathcal{N}(n)} \mathbf{z}_m^{(l-1)}) \quad (4)$$

其中, $\mathbf{z}_n^{(l)}$ 表示节点 n 在第 l 层的嵌入向量, $\mathbf{z}_n^{(0)} = \mathbf{X}_n$; ϵ 是可学习参数; $\mathcal{N}(n)$ 表示节点 n 的邻居集合。

然而, 在异质图(见图 2 的 ACM1000)中, GIN 的性能仍不理想。为了在边级表示中更好地融入结构和语义信息, 本文将原始图中的边映射为线图中的节点, 将 GIN 扩展到异质线图中。其消息传递公式如下:

$$\mathbf{z}_n^{(l)} = MLP^{(l)}((1 + \epsilon^{(l)})\mathbf{z}_n^{(l-1)} + \mathcal{T}) \quad (5)$$

$$\mathcal{T} = \sum_{r \in \mathbf{R}} \sum_{m \in \mathcal{N}^r(n)} \frac{1}{|\mathcal{N}^r(n)|} \mathbf{W}_r^{(l-1)} \mathbf{z}_m^{(l-1)} \quad (6)$$

其中, $r \in \mathbf{R}$ 表示一个关系类型, $\mathcal{N}^r(n)$ 表示与节点 n 以边类型 r 相连的邻居集合, \mathbf{W}_r 表示类型 r 的可学习注意力权重矩阵。如果图中只有一种关系类型, 则 HGIN 退化为 GIN。

4.2 类型池化的图级匹配

该模块基于边嵌入得到图级匹配向量。首先, 给定边嵌入矩阵 $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{|\mathbf{E}| \times D}$, 其中 D 是边的维度。对每种边类型 r 使用求和池化, 得到类型嵌入:

$$\mathbf{T} = \sum_{r \in \mathbf{R}} \sum_{e \in E} \mathbf{z}_e \cdot \mathbb{I}(\Psi(e) = r) \quad (7)$$

其中, \mathbf{R} 是边类型集合; $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{|\mathbf{R}| \times D}$ 是求和池化后的嵌入矩阵; $\mathbb{I}(\cdot)$ 是一个指示函数, 当且仅当边 e 的类型为 r 的时, 值为 1, 否则为 0。

其次, 对相同类型 r 的边嵌入使用 MLP, 获得类型对齐

的跨图匹配向量:

$$\mathbf{t}_r = MLP([\mathbf{t}_{i,r}, \mathbf{t}_{j,r}]) \quad (8)$$

其中, $\mathbf{t}_{i,r}, \mathbf{t}_{j,r}$ 分别表示 $\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j$ 中类型 r 的嵌入, $[\cdot]$ 表示连接操作。

接着, 考虑到边类型的重要性不同, 设计了全局类型感知的注意力上下文向量, 实现对边类型嵌入的加权融合:

$$\mathbf{a} = \tanh\left(\frac{1}{|\mathbf{R}|} \mathbf{W}_a \sum_{r \in \mathbf{R}} \mathbf{t}_r\right) \quad (9)$$

其中, \mathbf{W}_a 是一个可学习权重矩阵。再将注意力系数 \mathbf{a} 与类型嵌入的内积归一化后送入 MLP 中, 得到图级匹配向量:

$$\mathbf{h} = MLP\left(\sum_{r \in \mathbf{R}} \sigma(\mathbf{t}_r^T \cdot \mathbf{a}) \cdot \mathbf{t}_r\right) \quad (10)$$

其中, $\sigma(\cdot)$ 是激活函数, 此处使用 sigmoid; $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^D$, D 是输出维度。

4.3 类型对齐的边级匹配

为了更好地实现图的结构匹配, 本文基于边嵌入进行跨图的边级匹配, 以补充图级匹配的结果。

首先, 计算跨图边嵌入之间的交互注意力分数。将一张图中的边视为查询, 另一张图中的边视为键和值。将 HGIN 学习得到的边嵌入作为计算多头交互注意力权重的输入, 同时学习异质图 $\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j$ 之间的双向相似度矩阵 $\mathbf{S}_{i \rightarrow j}, \mathbf{S}_{j \rightarrow i}$ 。本文设计了一种类型掩码技术, 以隐藏不同类型边之间的注意力分数。

$$\mathbf{S}_{i \rightarrow j}(a, b) = \sigma\left(\frac{\mathbf{Q}_{i,a} \mathbf{K}_{j,b}^T}{\sqrt{d_k}}\right) \cdot \mathbb{I}(\Psi(e_a) = \Psi(e_b)) \quad (11)$$

$$\mathbf{S}_{j \rightarrow i}(a, b) = \sigma\left(\frac{\mathbf{Q}_{j,b} \mathbf{K}_{i,a}^T}{\sqrt{d_k}}\right) \cdot \mathbb{I}(\Psi(e_b) = \Psi(e_a)) \quad (12)$$

其中, $\mathbf{S}_{i \rightarrow j}(a, b)$ 表示 \mathbf{G}_i 中边 e_a 对 \mathbf{G}_j 中边 e_b 的注意力分数; $\mathbf{Q}_i = \mathbf{Z}_i \mathbf{W}_Q$, $\mathbf{K}_i = \mathbf{Z}_i \mathbf{W}_K$, $\mathbf{W}_Q, \mathbf{W}_K$ 分别表示可学习权重矩阵, 反之亦然; $\sigma(\cdot)$ 是激活函数, 此处使用 softmax。

其次, 利用自注意力机制对齐 $\mathbf{S}_{i \rightarrow j}$ 和 $\mathbf{S}_{j \rightarrow i}$, 以便在相同的表示空间中进行比较。相似度矩阵更新公式为:

$$\mathbf{S} = \sigma\left(\frac{\mathbf{Q} \mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}}\right) \cdot \mathbf{V} \cdot \mathbb{I}(\Psi(e_a) = \Psi(e_b)) \quad (13)$$

其中, $\mathbf{Q} = \mathbf{S}_{i \rightarrow j} \mathbf{W}_Q$, $\mathbf{K} = \mathbf{S}_{j \rightarrow i} \mathbf{W}_K$, $\mathbf{V} = \mathbf{S}_{j \rightarrow i} \mathbf{W}_V$, $\sigma(\cdot)$ 是 softmax 函数。

接着, 将对齐后的相似度矩阵扁平化, 输入使用交叉滤波器的 CNN^[11] 中, 得到边级匹配向量 $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{D'}$, D' 是输出维度。

$$\mathbf{s} = \sum_{p=0}^{|\mathbf{E}_i|} \sum_{q=0}^{|\mathbf{E}_j|} (\mathbf{S}_p \mathbf{W}_p + \mathbf{S}_q \mathbf{W}_q) \quad (14)$$

其中, $\mathbf{S}_p, \mathbf{S}_q$ 分别表示 \mathbf{S} 的第 p 行与第 q 列。

4.4 图相似度预测

最终, 将图级匹配向量 $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^D$ 和边级匹配向量 $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{D'}$ 拼接送入 FCLs 中, 预测 \mathbf{G}_i 和 \mathbf{G}_j 的相似度分数 $\hat{s}_{i,j}$ 。本文使用 MSE 作为损失函数:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{|\mathbf{T}_r|} \sum_{(i,j) \in \mathbf{T}_r} (\hat{s}_{i,j} - s_{i,j})^2 \quad (15)$$

其中, \mathbf{T}_r 表示训练图对集合; $s_{i,j}$ 表示 $\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j$ 的真实相似度分数, 即归一化的 HGED 值。

TEM-HGSL 的伪代码描述如算法 1 所示。

算法 1 TEM-HGSL

输入: 异质图 $\mathbf{G}_i = (\mathbf{V}_i, \mathbf{E}_i, \mathbf{X}_i, \Phi_i, \Psi_i), \mathbf{G}_j = (\mathbf{V}_j, \mathbf{E}_j, \mathbf{X}_j, \Phi_j, \Psi_j)$, 真实归一化相似度值 s

输出: 预测的相似度值 \hat{s}

1. 转换线图: $\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j \rightarrow \mathbf{L}\mathbf{G}_i, \mathbf{L}\mathbf{G}_j$
2. for $l=1, \dots, L$ do:
3. for $v \in \mathbf{V}_L$ do:
4. $\mathbf{z}_v^{(l+1)} \leftarrow \text{HGIN}(\mathbf{z}_v^{(l)})$
5. end
6. end
7. 计算类型嵌入和注意力系数 $\mathbf{a}; \mathbf{t}_r \leftarrow \sum_{r \in \mathbf{R}} \sum_{e \in \mathbf{E}} \mathbf{z}_n \cdot \mathbb{I}(\Psi(e) = r)$
8. 图级匹配: $\mathbf{h} \leftarrow \text{MLP}(\sum_{r \in \mathbf{R}} \sigma(\mathbf{t}_r^T \cdot \mathbf{a}) \cdot \mathbf{t}_r)$
9. 跨图交互矩阵: $\mathbf{S} \leftarrow \text{交互注意力}(\mathbf{Z}_i, \mathbf{Z}_j)$
10. 边级匹配: $\mathbf{s} \leftarrow \text{CNN}(\text{扁平化}(\mathbf{S}))$
11. 返回 $\hat{s} \leftarrow \text{FCL}(\text{拼接}(\mathbf{h}, \mathbf{s}))$

5 实验及结果分析

本文比较了 TEM-HGSL 与相关方法在 HGED 回归任务上的表现, 并通过消融实验验证各模块的有效性。

5.1 数据集

现有的异质图数据集 (如 ACM, DBLP, IMDB 等) 是单个大规模图, 无法直接用于图相似度学习实验。因此, 本文采用广度优先搜索 (BFS) 进行随机子图采样, 从原图中提取中等规模的子图构建数据集。为了获得用于监督学习的精确 HGED 值, 设置采样子图的节点数不超过 $16^{[5]}$, 并包含原数据集中图元素的全部类型, 以避免其退化为同质图。除此之外, 本文还采用分子化合物数据集 MUTAG, 将其中的原子和化学键映射为异质图中的节点和边。所有数据集的统计信息如表 1 所列。

表 1 数据集统计信息

Table 1 Statistics of datasets

数据集	$ \mathbf{G} $	$ \bar{\mathbf{V}} $	$ \bar{\mathbf{E}} $	$ \mathbf{C} $	$ \mathbf{R} $
ACM1000	1 000	7.25	8.15	4	4
DBLP700	700	9.04	8.42	3	3
IMDB1200	1 200	11.03	10.19	3	3
MUTAG	188	17.93	19.79	7	4

5.2 比较方法

本文与多种基线方法进行比较, 包括 4 种仅使用图级匹配和均值池化的基本 GNN 方法 (GCN^[6], GIN^[7], GAT^[8], RGCN^[24]) 和 8 种同时使用图级匹配和节点级匹配的深度学习 GSL 方法 (SimGNN^[14], GraphSim^[12], GMN^[10], MGMN^[16], ERIC^[17], TaGSim^[15], NA-GSL^[11], GraSP^[18])。

5.3 实验设置

由于现有模型都在同质图环境中运行, 为了公平比较, 本文依据异质图基准 (Heterogeneous Graph Benchmark, HGB)^[22] 标准化流程, 对异质图数据集进行统一特征表示的预处理, 并采用各模型原论文报告的最佳参数进行实验。

所有数据集都按照 6:2:2 的比例随机划分为训练集、测试集和验证集。模型的批大小设置为 128, 学习率设置为 0.001, 使用 AdamW 作为优化器。图级匹配向量和边级匹配向量的输出维度为 128, FCLs 的层数为 4, 维度依次为 128, 64, 32, 1。

5.4 评价指标

与主流方法^[14-18]一致, 本文将任意图对 $(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)$ 的

HGED 分数进行归一化处理,确保与图的规模无关,并将其作为真实值(Ground Truth):

$$HGED_{\text{norm}} = e^{-\frac{HGED(G_i, G_j)}{(|V_i| + |V_j|)^{1/2}}} \in (0, 1] \quad (16)$$

其中, $|V_i|$, $|V_j|$ 分别为 G_i , G_j 的节点数。

所有评价指标与主流基线方法保持一致,即使用均方误差(MSE)、斯皮尔曼相关系数(Spearman's ρ)^[30]和肯德尔相关系数(Kendall's τ)^[31]来评估模型性能。其中,MSE 越小

表示模型匹配精度越高;斯皮尔曼系数适合评估全局排序趋势,肯德尔系数更关注局部排序一致性,二者结合能够全面捕捉不同粒度排序差异,数值越高表示性能越好。此外,记录各模型在相同图对上的相似度计算耗时,横向对比模型的运算效率。

5.5 异质图相似度回归实验

异质图相似度回归实验结果如表 2 所列,未行标注了相对于现有次优模型的性能提升率。

表 2 整体性能比较

Table 2 Overall performance comparison

	ACMI000			DBLP700			IMDBI200			MUTAG		
	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑
GCN	6.772×10^{-3}	0.950	0.851	2.516×10^{-3}	0.962	0.882	10.828×10^{-3}	0.790	0.633	5.933×10^{-3}	0.922	0.792
GIN	6.156×10^{-3}	0.924	0.808	2.307×10^{-3}	0.959	0.881	11.670×10^{-3}	0.785	0.629	5.208×10^{-3}	0.940	0.823
GAT	6.097×10^{-3}	0.922	0.79	4.012×10^{-3}	0.940	0.841	11.047×10^{-3}	0.788	0.630	8.863×10^{-3}	0.920	0.795
RGCN	<u>1.408×10^{-3}</u>	<u>0.983</u>	<u>0.914</u>	<u>0.895×10^{-3}</u>	<u>0.984</u>	<u>0.922</u>	<u>2.547×10^{-3}</u>	<u>0.947</u>	<u>0.837</u>	<u>3.398×10^{-3}</u>	<u>0.953</u>	<u>0.853</u>
SimGNN	4.564×10^{-3}	0.945	0.835	2.934×10^{-3}	0.953	0.854	10.523×10^{-3}	0.788	0.632	4.761×10^{-3}	0.935	0.811
GMN	5.435×10^{-3}	0.934	0.809	1.541×10^{-3}	0.972	0.895	10.183×10^{-3}	0.809	0.654	4.393×10^{-3}	0.950	0.837
GraphSim	4.229×10^{-3}	0.939	0.823	3.149×10^{-3}	0.948	0.840	11.270×10^{-3}	0.769	0.609	5.016×10^{-3}	0.918	0.789
MGMN	5.023×10^{-3}	0.904	0.841	1.631×10^{-3}	0.937	0.880	9.768×10^{-3}	0.830	0.721	4.272×10^{-3}	0.911	0.790
ERIC	3.731×10^{-3}	0.901	0.836	1.309×10^{-3}	0.955	0.891	8.448×10^{-3}	0.856	0.741	4.064×10^{-3}	0.906	0.774
TA-GSim	3.633×10^{-3}	0.910	0.827	1.398×10^{-3}	0.961	0.887	7.341×10^{-3}	0.868	0.750	4.135×10^{-3}	0.897	0.784
NA-GSL	3.440×10^{-3}	0.956	0.848	1.469×10^{-3}	0.948	0.884	7.581×10^{-3}	0.879	0.760	3.998×10^{-3}	0.937	0.813
GraSP	4.101×10^{-3}	0.917	0.832	1.477×10^{-3}	0.951	0.883	7.699×10^{-3}	0.849	0.733	4.532×10^{-3}	0.892	0.753
TEM-HGSL	1.164×10^{-3}	0.986	0.930	0.714×10^{-3}	0.986	0.939	1.778×10^{-3}	0.978	0.868	2.213×10^{-3}	0.971	0.892
	↓ 17.3%	↑ 0.3%	↑ 1.8%	↓ 20.2%	↑ 0.2%	↑ 1.7%	↓ 30.2%	↑ 3.3%	↑ 3.7%	↓ 34.9%	↑ 1.9%	↑ 4.6%

注:最优结果加粗表示,次优结果用下划线表示。

总体看来,TEM-HGSL 在所有数据集上都取得了最优的结果。值得注意的是,其在真实数据集 MUTAG 上性能提升最为显著,比次优模型提升了 34.9%。这可能是因为 MUTAG 中存在大量不同类型的边,提出的边级匹配策略能够消除不同语义匹配结果的干扰。

5.6 消融实验

为进一步研究关键模块的有效性,本文设计了一系列消融实验。如表 3 所列,用 GIN 替代 HGIN(w GIN)后,模型的性能下降幅度较大,验证了 HGIN 在消息传递过程中添加类

型信息的重要性。移除线图模块后(w/o LG),仅依赖原始图进行节点匹配会导致性能下降 13.1%~42.0%,且下降幅度随 $|E|$, $|R|$ 增大而增大,说明线图可以有效建模特征的拓扑交互。移除边级匹配仅使用图级匹配的结果(w/o EM)进一步验证了边嵌入在异质图相似度学习的重要性。将模块中图级匹配(w/o GM)或类型对齐机制(w/o TA)去除,计算所有跨图边之间的交互,性能出现了不同程度的下降,说明图级匹配可以有效地为相似度学习提供宏观信息,而类型对齐则可以减少不同类型的边匹配产生的噪声。

表 3 消融实验

Table 3 Ablation experiment

	ACMI000			DBLP700			IMDBI200			MUTAG		
	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑	MSE ↓	ρ ↑	τ ↑
w GIN	5.673×10^{-3}	0.913	0.803	2.131×10^{-3}	0.960	0.893	7.532×10^{-3}	0.789	0.638	4.906×10^{-3}	0.941	0.832
w/o LG	1.339×10^{-3}	0.974	0.921	0.881×10^{-3}	0.983	0.927	2.372×10^{-3}	0.953	0.846	3.818×10^{-3}	0.945	0.833
w/o EM	1.583×10^{-3}	0.952	0.917	0.932×10^{-3}	0.978	0.913	2.476×10^{-3}	0.950	0.839	3.831×10^{-3}	0.944	0.828
w/o GM	1.221×10^{-3}	0.976	0.922	0.790×10^{-3}	0.981	0.926	1.892×10^{-3}	0.964	0.851	2.343×10^{-3}	0.965	0.879
w/o TA	1.188×10^{-3}	0.984	0.927	0.721×10^{-3}	0.983	0.933	1.831×10^{-3}	0.967	0.858	2.239×10^{-3}	0.967	0.890
TEM-HGSL	1.164×10^{-3}	0.986	0.930	0.714×10^{-3}	0.986	0.939	1.778×10^{-3}	0.978	0.868	2.213×10^{-3}	0.971	0.892

5.7 时空复杂度分析和计算时间比较

图相似度预测时间是衡量模型性能的重要指标,也是基于 GNN 的 GSL 框架相比于传统启发式方法的一个主要优势。本文分析了 TEM-HGSL 算法的时空复杂度,主要包括 3 个模块。

1)边嵌入学习模块。本文采用参数共享的 HGIN 学习线图的节点表示,其时间复杂度为 $O(L \cdot (|E|d + |V|^2d))$,空间复杂度为 $O(|E|^2)$ 。其中 L 是 HGIN 的层数, $|E|$ 和 $|V|$ 分别表示图中边和节点的数量, d 是特征维度。

2)类型池化的图级匹配模块。首先通过对边进行求和池化获得图级表示,时间复杂度为 $O(|E|d)$;其次,使用 MLP 计算图级匹配,则时间复杂度为 $O(|R|dk)$,其中 d, k 分别表示输入和输出维度。该模块的总时间复杂度为 $O(|E|d + |R|dk)$,空间复杂度为 $O(|R|^2)$ 。

3)类型对齐的边级匹配模块。该模块逐类型计算跨图边对的交互相似度,时间复杂度为 $O(\sum_{r \in R} |E_r^{(r)}| \cdot |E_j^{(r)}| \cdot d)$,空间复杂度为 $O(|E|^2)$ 。其中 $|E_r^{(r)}|$, $|E_j^{(r)}|$ 表示 G_i, G_j 中类型为 r 的边数量。

在模型训练阶段,本文针对所有对比方法在 1280 个相同

图对上执行相似度学习任务,并记录耗时,如图 5 所示。

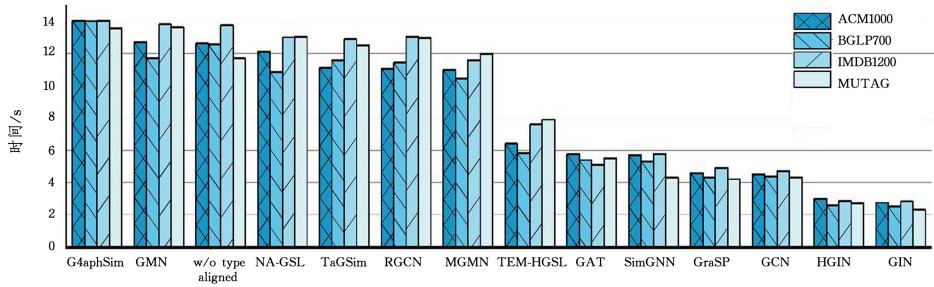


图 5 异质图相似度计算的运行时间比较

Fig. 5 Comparison of running time to calculate the heterogeneous graph similarity

总体看来,基于细粒度特征对齐的 GSL 方法,在实现更高匹配精度的同时,计算开销也较大。在所有 GSL 方法中, GraSP 利用位置编码增强节点表示以代替跨图节点交互,能有效减少时间消耗。在仅使用图级匹配的方法中, HGIN 的运行效率略低于 GIN,这是因为 HGIN 在消息传递的过程中额外添加了类型的注意力权重。在所有细粒度匹配 GSL 模型中, TEM-HGSL 的时间最短,进一步验证了类型对齐匹配的高效性。

5.8 参数敏感性分析

本文进一步探究 HGIN 层数对于模型匹配精度的影响,如图 6 所示。

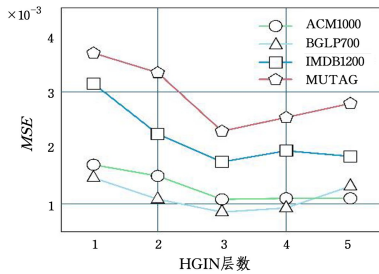


图 6 HGIN 层数对模型匹配精度的影响

Fig. 6 Effect of the number of HGIN layers on model matching

实验结果表明,当 HGIN 的堆叠层数 $L \in \{3, 4, 5\}$ 时,模型性能趋于稳定。当 HGIN 层数较少时,模型难以捕获高阶邻域信息,导致表示能力不足。随着 HGIN 层数的增加,计算时间复杂度呈 $O(L \cdot (|E|d + |V|^2d))$ 趋势增长,时间消耗显著增加。为了平衡性能和效率,本文最终选择 3 层 HGIN 学习边的表示。

结束语 本文提出了一种类型引导边匹配的异质图相似度学习方法(TEM-HGSL)。首先设计基于线图的异质图同构网络学习边嵌入,然后采用基于类型池化的图级匹配与基于类型对齐的边级匹配实现双层级交互计算,不仅减少了语义外匹配结果的干扰,也降低了时间消耗。在 4 个异质图相似度数据集上的大量实验验证了 TEM-HGSL 方法的有效性。未来工作将围绕边级匹配算法进一步优化匹配路径,并结合理论知识系统提升模型的可解释性。

参考文献

[1] HOU L, LIU J H, YU X, et al. Review of Graph Neural Networks[J]. Computer Science, 2024, 51(6): 282-298.

[2] COUPRY D E, POGANY P. Application of Deep Metric Learning to Molecular Graph Similarity[J]. Journal of Cheminformatics, 2022, 14(1): 11.

[3] WU Y, LIU X, FENG Y, et al. Neighborhood Matching Network for Entity Alignment[C] // Proceedings of the Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics, 2020: 6477-6487.

[4] BUNKE H. On a Relation between Graph Edit Distance and Maximum Common Subgraph[J]. Pattern Recognition Letters, 1997, 18(8): 689-694.

[5] BLUMENTHAL D B, GAMPER J. On the Exact Computation of the Graph Edit Distance[J]. Pattern Recognition Letters, 2020, 134: 46-57.

[6] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised Classification with Graph Convolutional Networks[C] // Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2017.

[7] XU K, HU W, LESKOVEC J, et al. How Powerful are Graph Neural Networks? [C] // Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2018.

[8] VELICKOVIC P, CUCURULL G, CASANOVA A, et al. Graph Attention Networks[C] // Proceedings of the International Conference on Learning Representations, 2018.

[9] 张辉宜, 夏媛龙, 周克武, 等. 一种融合标签间强相关性的多标签图像分类方法[J]. 重庆工商大学学报(自然科学版), 2023, 40(5): 8-15.

[10] LI Y, GU C, DULLIEN T, et al. Graph Matching Networks for Learning the Similarity of Graph Structured Objects[C] // Proceedings of the International Conference on Machine Learning, 2019: 3835-3845.

[11] TAN W, GAO X, LI Y, et al. Exploring Attention Mechanism for Graph Similarity Learning[J]. Knowledge-Based Systems, 2023, 276: 110739.

[12] BAI Y, DING H, GU K, et al. Learning-based Efficient Graph Similarity Computation via Multi-scale Convolutional Set Matching[C] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2020: 3219-3226.

[13] WADAYAMA T, NAKAI-KASAI A. Mean Squared Error Analysis of Noisy Average Consensus[J]. IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences, 2025, 108(3): 435-441.

[14] BAI Y, DING H, BIAN S, et al. SimGNN: A Neural Network Approach to Fast Graph Similarity Computation[C] // Proce-

- dings of the ACM International Conference on Web Search & Data Mining, 2019:384-392.
- [15] BAI J, ZHAO P. TaGSim: Type-aware Graph Similarity Learning and Computation[J]. VLDB Endowment, 2021, 15(2):335-347.
- [16] LING X, WU L, WANG S, et al. Multilevel Graph Matching Networks for Deep Graph Similarity Learning[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2021, 34(2):799-813.
- [17] ZHUO W, TAN G. Efficient Graph Similarity Computation with Alignment Regularization[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2022, 35:30181-30193.
- [18] ZHENG H, SHI J, YANG R. GraSP: Simple yet Effective Graph Similarity Predictions[C]// Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2025.
- [19] SHI C, WANG R J, WANG X. Survey on Heterogeneous Information Networks Analysis and Applications[J]. Journal of Software, 2022, 33(2):598-621.
- [20] WANG X, JI H, SHI C, et al. Heterogeneous graph attention network[C]// Proceedings of the World Wide Web Conference, 2019:2022-2032.
- [21] YANG Y X, CHEN H M, ZHOU L H, et al. Heterogeneous Graph Attention Network Based on Data Augmentation[J]. Computer Science, 2025, 52(3):180-187.
- [22] LYU Q, DING M, LIU Q, et al. Are We Really Making Much Progress? Revisiting, Benchmarking and Refining Heterogeneous Graph Neural Networks[C]// Proceedings of the ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, 2021:1150-1160.
- [23] ZHAO M X, JIA A L. DAHGN: Degree-Aware Heterogeneous Graph Neural Network[J]. Knowledge-Based Systems, 2024, 285:111355.
- [24] SCHLICHTKRULL M, KIPF T N, BLOEM P, et al. Modeling Relational Data with Graph Convolutional Networks[C]// The Semantic Web: International Conference, 2018:593-607.
- [25] CORSO G, CAVALLERI L, BEAINI D, et al. Principal Neighborhood Aggregation for Graph Nets[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2020, 33:13260-13271.
- [26] YANG Y, LI D. Nenn: Incorporate Node and Edge Features in Graph Neural Networks[C]// Proceedings of the Asian Conference on Machine Learning, 2020:593-608.
- [27] JIANG X, JI P, LI S. CensNet: Convolution with Edge-Node Switching in Graph Neural Networks[C]// Proceedings of the International Joint Conference on Artificial Intelligence, 2019:2656-2662.
- [28] CHEN X Y, LI S Z, LIU R M, et al. Molecular Graph Contrastive Learning with Line Graph[J]. Pattern Recognition, 2025, 162:111380.
- [29] THANH T H T, LE B. Unified Node, Edge and Motif Learning Networks for Graphs[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2024, 138:109354.
- [30] SPEARMAN C. The Proof and Measurement of Association between Two Things[J]. The American Journal of Psychology, 1987, 100(3/4):441-471.
- [31] KENDALL M G. A New Measure of Rank Correlation [J]. Biometrika, 1938, 30(1/2):81-93.



SANG Shilong, born in 2000, postgraduate, is a member of CCF (No. Z4415G). His main research interests include graph similarity learning and graph representation learning.



CHEN Kejia, born in 1980, Ph.D, associate professor, is a member of CCF (No. 14589M). Her main research interests include graph learning and complex network analysis.

(责任编辑:何杨)