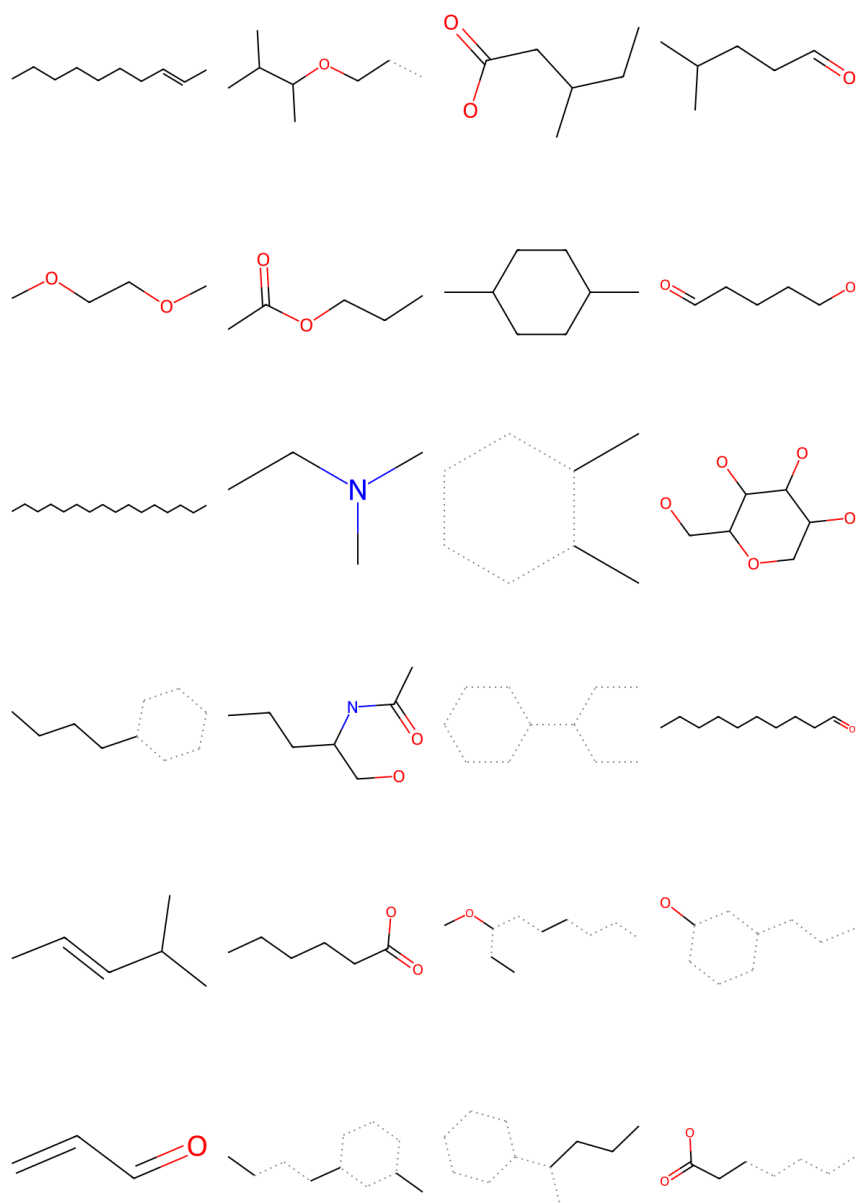
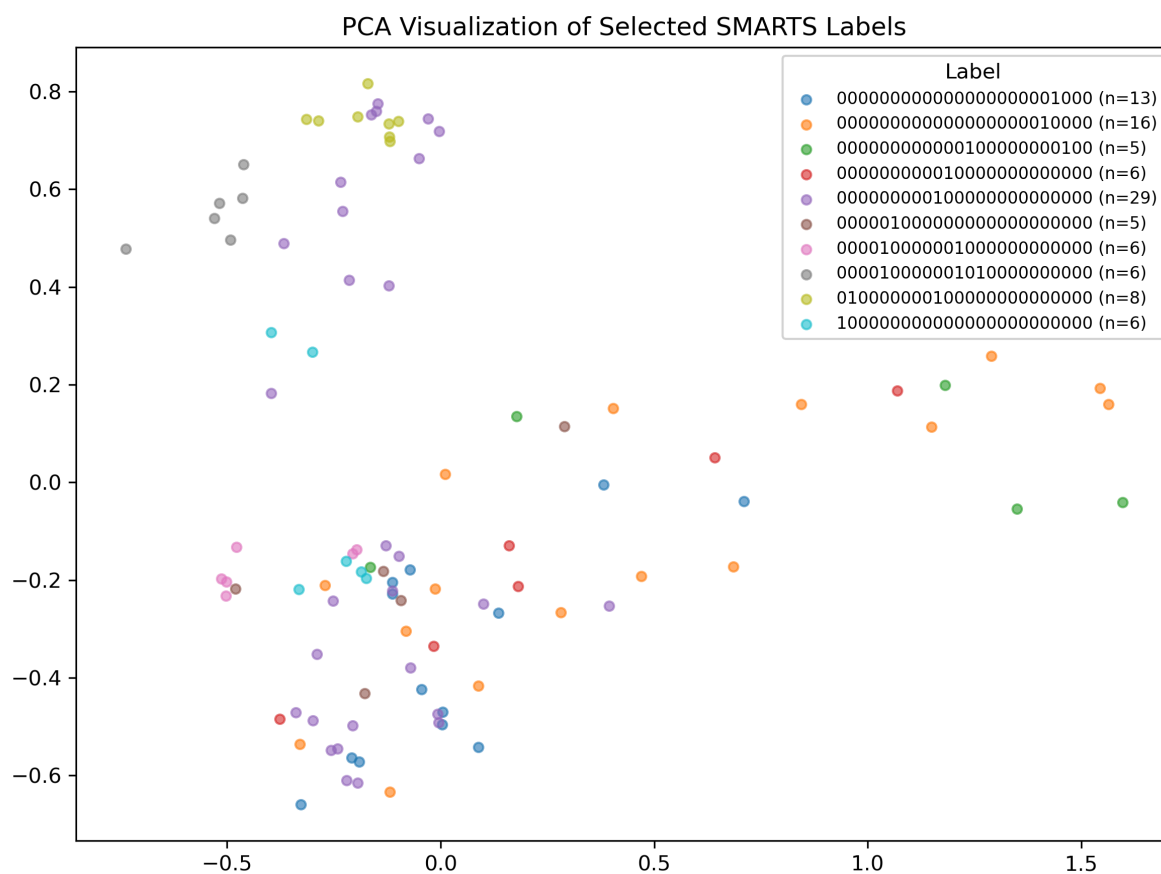


MCS尝试

之前做的是统计了共存最多的10个子结构,但是有一部分结构之间是彼此包括的,这或许会导致overlap的问题,因此我去掉了这些重复的子结构,重新统计了数量最多的24个结构



随后我把这24个当做label中的维度,产生了288个label,其中个数大于等于3的只有26类,大于等于5的只有10类,我把这10类可视化效果不好



tsne效果也是一样

