

## 1 实验研究

我们对我们的算法进行了广泛的实验研究来评估其有效性, 高效性及扩展性。我们在化学分子结构上测试我们的算法。对于化学结构, 节点特征包括数值特征和原子布尔特征。数值特征包括元素种类, 原子部分电荷, 原子电子亲和势, 原子自由电子数目和原子价态等等。布尔特征包括原子是否在供体中, 是否在末端碳中, 是否在环中, 是否为负, 是否是轴向的等等。在实验中, 我们仅用一个原子特征: 元素种类。

我们将我们的方法和小波分配核, C-tree, GraphGrep 还有 gIndex 进行对比。我们的算法, WA 算法, GraphGrep 和 gIndex 是基于 C++ 实现的, 用 g++ 进行编译。C-tree 是用 Java 实现的, 用 Sun JDK 1.5.0 编译。所有的实验都是在 Intel Xeon EM64T 3.2GHz, 4G 内存, Linux 系统这一平台上测试的。