

## 基于 VF2 算法的分子二维子结构检索

李欣<sup>1,2</sup>, 宋婷婷<sup>1,2</sup>, 何险峰<sup>1</sup>

(1. 中国科学院过程工程研究所多相反应重点实验室, 北京, 100080; 2. 中国科学院研究生院, 北京, 100049)

**摘要:** 为了有效地获取分子结构数据库中的分子结构信息, 就必须首先解决分子二维子结构检索问题。本文采用了一种通用图同构算法—VF2 算法来对 2 个分子二维结构图进行匹配, 程序采用标准 C++ 语言开发, 在运行效率和可移植性方面都可以满足要求。同时, 还使用了开源化学软件 OpenBabel 来解决在检索时遇到的芳香环的识别问题。经过与商业软件 ISIS/Base 对照实验, 检索结果正确, 检索时间可以满足要求。

**关键词:** 分子结构数据库; 子结构检索; VF2 算法

**中图分类号:** O6-39

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1001-4160(2007)11-1551-1554

## VF2 algorithm based 2D molecular substructure search

Li Xin<sup>1,2</sup>, Song Tingting<sup>1,2</sup> and He Xianfeng<sup>1</sup>

(1. Key Laboratory of Multi-phase Reactions, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100080, China; 2. Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049, China)

**Abstract:** In order to retrieve molecular structural information from a chemical database, it's necessary to solve the molecular 2D substructure search problem at first. In this paper, a new method based on VF2 algorithm is presented. The program is written in standard C++, which could be satisfying on both efficiency and transferability. At the meantime, an open source program, OpenBabel, is utilized to solve the aromatic ring perception problem. Compared with commercial software ISIS/Base, the search results are right as well as the searching time is satisfactory.

**Key words:** VF2 algorithm, molecular structure database, substructure search,

Li X, Song TT and He XF. VF2 algorithm based 2D molecular substructure search. Computers and Applied Chemistry, 2007, 24(11):1551-1554.

### 1 引言

为了有效地从分子结构数据库中获取分子结构信息, 首先要解决分子结构检索问题, 尤其是子结构检索的问题。子结构检索技术还可用于结构分析、分子设计等重要领域。

分子结构通常是用图的方式表达, 这意味着图的同构算法可以用于分子结构的检索<sup>[1]</sup>。图的同构算法能够识别图中结点对之间的结构关系, 可以用于精确匹配, 因此适用于分子的全结构检索。子图同构算法用于在图中寻找匹配的子图, 可用于分子子结构检索。最大公共子图算法用于寻找两图中最大的共同部分, 因此可在相似检索中用于查找与查询结构最相似的分子。图的同构是一个 NP 完全问题 (NP-Complete)<sup>[2]</sup>, 这意味着检索所需要的时间开销将随图的结点数目的增加而迅速增加。

为此, 科学家们开发了多种图-子图同构算法以尽量降低匹配过程的时间复杂度。自 Ullmann 于 1976 年提出 Ullmann 算法<sup>[3]</sup>之后, 陆续出现了徐俊针对化学结构提出的 GMA 算法<sup>[4,5]</sup>, 王亭等人根据 GMA 算法开发的 EMCSS 算

法<sup>[4,5]</sup>, Robert 等人提出的 Brown 算法<sup>[6]</sup>等。1995 年之前, Ullmann 算法被认为是执行效率最高的图-子图同构算法。1996 年, Cordella 等人提出了 VF 算法<sup>[7-10]</sup>, 实现了比 Ullmann 算法更高的执行效率和较低的复杂度<sup>[11]</sup>。2001 年, Foggia 等人对 VF 算法进行了改进, 提出了 VF2 算法<sup>[12]</sup>, 并对 Ullmann、SD、Nauty、VF 和 VF2 等 5 种算法进行了比较<sup>[13,14]</sup>。结论认为, 对于随机生成的连通图, Nauty 算法对密集图或大型图的效率较高, VF2 算法则对稀疏图或小型图的效率较高; 对于二维网状的规则图, VF2 的效率明显高于其他算法。由于分子二维结构图属于规则图, 因此本文采用 VF2 算法来进行分子结构匹配。

### 2 VF2 算法

VF2 是一种通用的图同构算法, 用于解决图的同构和图-子图同构问题, 是一种深度优先的回溯算法。

假设提问图  $QG$  有  $m$  个结点, 目标图  $TG$  有  $n$  个结点, 且  $m \leq n$ 。根据定义的匹配原则, 在  $QG$  与  $TG$  之间可建立映射

$M$ ,  $M$  是  $QG$  和  $TG$  中相互匹配的结点对的集合,  $M$  中的元素  $c_k = (m_i, n_j)$  表示  $QG$  的结点  $m_i$  与  $TG$  的结点  $n_j$  相互匹配。同时,  $M$  也反映了  $QG$  与  $TG$  中边的对应关系, 即如果  $M$  中含有元素  $(m_i, n_j)$  和  $(m_p, n_q)$ , 且  $(m_i, m_p)$  是  $QG$  中的一条边, 则  $(n_j, n_q)$  必定是  $TG$  中的一条边, 并且边  $(m_i, m_p)$  与边  $(n_j, n_q)$  匹配。如果  $M$  中包含  $QG$  中的所有结点, 即  $M$  中含有  $m$  个结点对, 则表明  $QG$  是  $TG$  的子图。否则,  $QG$  与  $TG$  不是子图匹配。

为使算法在处理大型图时的时间和空间复杂度都控制在一个合理的范围, 有必要使用一种经过精心设计的数据结构来实现匹配过程。这也是 VF2 算法相对于 VF 算法的改进之处。

VF2 算法采用状态空间 (State Space) 的概念表示每进行一次原子对比较后的状态。  $M(s)$  表示映射  $M$  的一个子集,  $T^{out}(s)$  表示不在  $M(s)$  中, 却是  $M(s)$  中某一结点的后继结点的结点,  $T^{in}(s)$  表示不在  $M(s)$  中, 却是  $M(s)$  中某一结点的先前结点的结点。采用向量  $core\_1$  和  $core\_2$  表示  $QG$  与  $TG$  的匹配状况,  $core\_1$  和  $core\_2$  的维数分别为  $QG$  和  $TG$  中总的结点数, 其中包含的非零元素代表已经完成匹配的结点对。  $core\_1[n] = m$  表示  $QG$  中序号为  $n$  的结点与  $TG$  中序号为  $m$  的结点相匹配, 例如  $core\_1[3] = 5$  表明  $QG$  中的结点 3 与  $TG$  中的结点 5 相匹配。对于  $core\_2$  也是如此。

此外, 还定义了 4 个向量  $in\_1$ ,  $out\_1$ ,  $in\_2$ ,  $out\_2$ , 它们的维数也分别代表  $QG$  和  $TG$  中总的结点数。对于  $out\_1[n]$ , 如果  $n$  既不在  $M(s)$  中, 也不在  $T^{out}(s)$  中, 那么  $out\_1[n] = 0$ , 反之为非零值。而向量中的具体值则表示结点被加入到状态空间时状态树的深度。其他 3 个向量道理相同。实际上, 对于分子结构这种无向图来说, 由于  $in\_1 = out\_1$ ,  $in\_2 = out\_2$ , 因此只需要  $out\_1$  和  $out\_2$  就已经足够了。

一个算法的时间复杂度取决于 2 个因素: 需要访问的状态空间的数量和访问状态空间所需要的时间。

对于访问状态空间所需要的时间, 假定待匹配的 2 个图的结点数都为  $N$ , 且访问每个结点所需的时间相同, 则将一对结点插入状态空间的时间复杂度仅与状态空间中的结点数  $N$  有关, 因此算法访问状态空间的时间复杂度为  $O(N)$ 。如果  $QG$  与  $TG$  匹配, 则在最好的情况下, 每次只有一对后继结点满足匹配条件, 匹配过程中需要访问的状态空间数为  $N$ , 这时 VF2 算法的时间复杂度为  $O(N^2)$ 。在最坏的情况下, 每次都要遍历当前节点的所有后继结点后才能确定  $QG$  与  $TG$  是否匹配, 在这种情况下需要访问的状态空间数为:

$$N! + \frac{N!}{2!} + \cdots + \frac{N!}{(N-2)!} + \frac{N!}{(N-1)!} + 1 = 1 + N! \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{i!} \quad (1)$$

因此, 需要访问的状态空间数正比于图中结点数  $N$  的阶乘, 这时 VF2 算法的时间复杂度为  $O(N! N)$ 。当  $QG$  和  $TG$  接近于完全连通图时, 就有出现这种情况的可能。

如果  $QG$  与  $TG$  匹配, VF2 算法的空间复杂度仅取决于图中的结点数  $N$ 。在匹配过程中, 内存中最多同时存在  $N$  个

状态空间。对于每个状态空间来说, 除算法中定义的 6 个共享向量外, 其他变量所需要的内存空间是一个常量, 所以每一状态空间占据的存储空间为一常量值。因此, VF2 算法的空间复杂度为  $O(N)$ 。表 1 中列出了 Ullmann 算法、VF 算法和 VF2 算法的计算复杂度的比较。

表 1 Ullmann、VF 和 VF2 算法复杂度的比较

Table 1 The complexity of Ullmann, VF and VF2 algorithms.

complexity	ullmann algorithm		VF algorithm		VF2 algorithm	
	best case	worst case	best case	worst case	best case	worst case
temporal	$O(N^3)$	$O(N! N^3)$	$O(N^2)$	$O(N! N)$	$O(N^2)$	$O(N! N)$
spatial	$O(N^3)$	$O(N^3)$	$O(N^2)$	$O(N^2)$	$O(N)$	$O(N)$

实际上, 算法的实际运行时间通常介于最好与最坏情况之间。对于分子结构而言, 结点的度一般不超过 4, 后续结点数不超过 3, 因此算法的复杂度将大大降低。

### 3 VF2 算法的 C++ 语言实现

本文采用标准 C++ 语言实现 VF2 算法, 在运行效率和可移植性方面都可以满足要求。分子二维子结构检索系统分为类的定义与文件读取模块、结构转化模块、算法模块、匹配过程模块。另外, 还加入了异常处理模块。

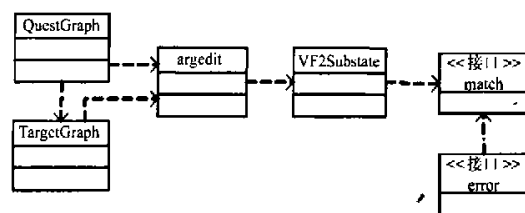


Fig. 1 Module diagram.

图 1 算法模块示意图

各模块功能说明如下: QuestGraph 类代表提问图, 保存了 MOL 文件中的各种分子属性信息; TargetGraph 类继承于 QuestGraph 类, 代表目标图, 保存了 SDF 文件中的各分子; argedit 类对提问图和目标图进行处理, 以满足 VF2 算法的需要; VF2Substate 类实现了 VF2 算法的所有功能; match 函数完成了分子结构匹配的具体过程, 在这一过程中还会调用 error 函数来处理匹配过程中可能会遇到的各种异常情况。

根据以上对算法原理的分析, VF2 算法的伪代码为:

PROCEDURE Match(s)

INPUT: an intermediate state  $s$ ; the initial state  $s_0$  has  $M(s_0) = F$

OUTPUT: the mappings between the two graphs

IF  $M(s)$  covers all the nodes of  $G_2$

THEN OUTPUT  $M(s)$

ELSE

Compute the set  $P(s)$  of the pairs candidate for inclusion in  $M(s)$

FOREACH  $(n, m) \in P(s)$

IF  $F(s, n, m)$  THEN

Compute the state  $s'$  obtained by adding  $(n, m)$

to  $M(s)$

CALL Match( $s'$ )

END IF

END FOREACH

Restore data structures

END IF

END PROCEDURE

其中,函数  $F(s, n, m)$  为可行性函数(Feasibility Function),返回布尔值,用于“裁剪”搜索树。如果  $F(s, n, m)$  的返回值为真,表明将结点对  $(n, m)$  加入状态空间  $s$  可获得部分同构子图,也就是说,最后得到的状态空间或者是全结构匹配,或者是图-子图同构匹配。同时函数  $F(s, n, m)$  还可以排除掉那些虽然可以使 2 个图部分同构,但却不能得到最终匹配结果的情况,从而减少状态空间的数量。 $P(s)$  表示所有待匹配的结点对的集合。

## 4 结果与讨论

为考察本文基于 VF2 算法开发的分子二维子结构检索软件的正确性,将本文开发的检索软件与商业分子结构检索软件 ISIS/Base<sup>[15]</sup>进行了对照检索实验。

对照检索实验中采用的提问子结构文件为 MDL 公司<sup>[16]</sup>开发的 MOL 格式<sup>[17]</sup>;目标分子结构文件为 SDF 格式,其中包含 61024 个 MOL 格式描述的分子结构,占用存储空间 193MB。对照检索实验采用的硬件环境为 Intel Celeron 1.2 GHz CPU, 256MB SDRAM PCI33 内存,操作系统为 Windows XP SP2,软件开发环境为 Microsoft Visual Studio。

表 2 检索结果样例

Table 2 Search result examples.











query substructure	hits	time/ms		query substructure	hits	time/ms	
		VF2	ISIS/base			VF2	ISIS/base
	104	2283	1590		27	2393	1620
	19	2273	1880		128	2364	1800
	2	2283	1720		32	2514	1700
	1	2263	1650		20	2293	1550
	7	2313	1680		12	3656	1600

表 2 中给出了部分对照检索实验的结果。结果表明,本文检索软件获得的命中结构与 ISIS/Base 获得的命中结构数

量完全相同,所需检索时间为 2~4 s, ISIS/Base 的检索时间在 1~2 s。

在检索过程中,我们遇到了芳香环的识别问题。由于有些分子的 MOL 文件中用单双键表示芳香键,因此在匹配的过程中会发生误判。要解决芳香环识别问题,就首先要找到分子中所有的最小环,也就是最小环的最小集问题(The smallest set of smallest rings, SSSR),然后再用休克尔规则(Huckel Rule)判断这些环是否具有芳香性。根据休克尔规则,在完全共轭的平面单环体系中,如果环中参与离域的  $\pi$  电子数为  $(4n+2)$  个( $n=0, 1, 2, \dots$ ),则该体系具有芳香性。

本文引入了开源软件 OpenBabel<sup>[18]</sup>来解决芳香环的识别问题,将其编译成动态链接库(dynamic link library, DLL)文件,然后调用它的芳香环识别模块和分子结构统一化模块对所有的分子结构进行处理。经过 OpenBabel 处理后的分子结构已经能正确地表达芳香性信息。

实验还发现,由于 ISIS/Base 在检索时不考虑原子的带电荷(charge)属性,因此对某些带电荷的分子会发生误判。对这一问题本文采取了如下策略:如果提问图中的原子不带电荷,那么不管目标图中的对应原子是否带电荷,均认为两者匹配;如果提问图中的原子带电荷,那么,提问图中的对应原子也必须带相同个数的电荷才认为两者匹配。以后还可以在程序中加入控制开关,由用户来决定是否考虑这一属性。

## References

- 1 Cvetkovic DM, Doob M and Sachs H. Spectra of Graph. Theory and Applications. 3rd edition. Heidelberg: Johann Ambrosius Barth, 1995.
- 2 Garey MR and Johnson DS. Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness. New York: Freeman Co, 1979.
- 3 Ullmann JR. An algorithm for subgraph isomorphism. Journal of the Association for Computing Machinery, 1976, 23:31-42.
- 4 Xu J. GMA: A generic match algorithm for structural homomorphism, isomorphism, and maximal common substructure match and its application. J Chem Info Comput Sci, 1996, 36:25-34.
- 5 Wang T and Zhou JJ. EMCSS: A new method for maximal common substructure search. J Chem Inf Comput Sci, 1997, 37:828-834.
- 6 Robert DB, Geoffrey MD and Peter W. A hyperstructure model for chemical structure handling: generation and atom-by-atom searching of hyperstructures. J Chem Inf Comput Sci, 1992, (32):522-531.
- 7 Cordella LP, Foggia P, Sansone C, Tortorella F and Vento M. An efficient algorithm for the inexact matching of ARG graphs using a contextual transformational model. In: Proc. 13th ICPR, IEEE Comput. Society Press, 1996:180-184.
- 8 Foggia P, GR, VM. Introducing generalized attributed relational graphs (GARG's) as prototypes of ARG's. In: Proc. 2nd IAPR Workshop on Graph-based Representations, 1999.
- 9 Cordella LP, Foggia P, Sansone C, Tortorella F and Vento M. Graph matching: a fast algorithm and its evaluation. In: Proc of the 14th International Conference on Pattern Recognition, 1998.

- 10 Cordella LP, Foggia P, Sansone C and Vento M. Subgraph transformations for the inexact matching of attributed relational graphs. Computing, 1998, 12:43-52.
- 11 Cordella LP, Foggia P, Sansone C and Vento M. Performance evaluation of the VF graph matching algorithm. In: Proc. 10th ICIAP, IEEE Comput. Society Press, 1999.
- 12 Foggia P, Sansone C and Vento M. An improved algorithm for matching large graphs. In: Proc. of the 3rd IAPR-TC-15 International Workshop on Graph-based Representations, 2001; Italy.
- 13 Foggia P, Sansone C and Vento M. A performance comparison of five algorithms. In: Jolion, J M Krotsch, and W Vento eds. Graph-based Representation in Pattern Recognition. edition Cuen, 2001; 176-188.
- 14 Foggia P, Sansone C and Vento M. A database of graphs for isomorphism and sub-graph isomorphism benchmarking. In: Proc. of the 3rd IAPR-TC-15 International Workshop on Graph-based Representations, 2001; Italy.
- 15 ISIS/Base. [http://www.mdli.com/products/framework/isis\\_base/index.jsp](http://www.mdli.com/products/framework/isis_base/index.jsp).
- 16 MDL Information Systems Inc. <http://www.mdli.com/>.
- 17 MDL CTF file formats. [www.mdli.com/downloads/ctfile/ctfile\\_suba.html](http://www.mdli.com/downloads/ctfile/ctfile_suba.html).
- 18 OpenBabel. [http://openbabel.sourceforge.net/wiki/Main\\_Page](http://openbabel.sourceforge.net/wiki/Main_Page).

## 纪念陈念贻教授

潘毓刚\*

陈念贻教授是我所认识的中国科学家和教育家之中给我留下最深印象的学长之一。他一生执着地追求科学真理,尽心尽力于科学教育事业,重视科普知识的传播,从不计较个人名利,是一位名符其实的优秀中国科学家。他的科研领域横跨理论与应用,学术造诣深厚。他能联系试验与计算,结合理论与实验,解决许多实际且有巨大经济效益的科研课题,使理论不流于纸上谈兵,使实验得到高瞻远瞩的理论指导。例如,他25岁时就解决了当时苏联专家未能解决的一系列氧化铝生产技术难题。他的有关N235萃取镍钴分离、氧化铝生产新工艺等科研成果,除在全国范围得到推广,还被编入几本国际和国内的大学教科书中。年轻有为的陈念贻先生在25岁时就被破格晋升为副研究员(副教授),且获得全国劳动模范的称号。20世纪60年代,“文化大革命”打乱了他的科研进程,但他还利用非常有限的条件,白天在上海冶炼厂和工人一起劳动,晚上回家把十多年积累的氧化铝镁等各种化合物的数据,进行两维的键参数分析研究,从中总结规律,完善了化学键参数理论。“文化大革命”一结束,他就出版了《键参数函数及应用》专著,那是他在“十年动乱”中潜心研究所取得的结果。后来,他又开创了中国的“模式识别调优技术”,推动了中国计算机化学和化学计量学的理论与应用研究。1984年开始,陈教授带领课题组成员和他的研究生,在我国化工、炼油、钢铁等工业领域进行“模式识别调优技术”的推广应用,他们开发了模式识别调优软件,在很多企业应用后使生产线产品的质量和效益上升,为国家创造了巨大的经济效益,也为中国科学家赢得了国际声誉。国际化学计量学会(1989年)的主席Kowalski教授撰文称赞陈教授说“由于你们的工作,中国的化学计量学在工业应用上在为世界的先导……走在了美国的前头”。1981年10月陈教授来波士顿访问,哈佛大学化学系邀请他做了一个报告,报告完毕后,哈佛的Martin Karplus和Roy Gordon二位美国科学院院士(也是理论化学造诣很深的同行学者)和陈教授等人到我家共进晚餐,闲谈中他们得悉陈教授尚未被选为中国科学院院士,为此感到惊讶。陈教授结合理论与实践,再把试验成果推广到生产,一生埋头苦干,全心投入科研,置名利于度外,即使病重在床,还心系科研,如此热爱和追求科学真理,且有丰硕科研成果和国际声誉的科学家未被选上中国科学院院士,我为陈教授感到不平。

2007年4月8日于美国普林斯顿寓所

选自《陈念贻先生纪念文集》——陆文聪主编

\* 潘毓刚,生于1937年,祖籍广东梅县,美国波士顿学院终身教授,曾连续四年担任全美华人协会总会主席,获海外杰出华人奖。他创立了先进的计算夫兰克-康登因子的渐近方法和最早把李氏群论用在量子化学。

# 基于VF2算法的分子二维子结构检索

作者: [李欣](#), [宋婷婷](#), [何险峰](#), [Li Xin](#), [Song Tingting](#), [He Xianfeng](#)  
 作者单位: [李欣, 宋婷婷, Li Xin, Song Tingting \(中国科学院过程工程研究所多相反应重点实验室, 北京, 100080; 中国科学院研究生院, 北京, 100049\)](#), [何险峰, He Xianfeng \(中国科学院过程工程研究所多相反应重点实验室, 北京, 100080\)](#)  
 刊名: [计算机与应用化学](#) **ISTIC** **PKU**  
 英文刊名: [COMPUTERS AND APPLIED CHEMISTRY](#)  
 年, 卷(期): 2007, 24(11)  
 被引用次数: 1次

## 参考文献(18条)

1. [Cvetkovic DM;Doob M;Sachs H Spectra of Graph](#) 1995
2. [Garey MR;Johnson DS Computers and Intractability:A Guide to the Theory of NP-Completeness](#) 1979
3. [Ullmann JR An algorithm for subgraph isomorphism](#) 1976
4. [Xu J GMA:A generic match algorithm for structural homomorphism, isomorphism, and maximal common substructure match and its application](#) 1996
5. [Wang T;Zhou JJ EMCSS:A new method for maximal common substructure search](#) 1997
6. [Robert DB;Geoffrey MD;Peter W A hyperstructure model for chemical structure handling:generation and atom-by-Atom searching of hyperstructures](#) 1992(32)
7. [Cordella LP;Foggia P;Sansone C;Tortorelle F Vento M An efficient algorithm for the inexact matching of ARG graphs using a contextual transformational model](#)[外文会议] 1996
8. [Foggia P;GR VM Introducing generalized attributed relational graphs \(GARG's\) as prototypes of ARG's](#) 1999
9. [Cordella LP;Foggia P;Sansone C;Tortorelle F and Vento M Graph matching:a fast algorithm and its evaluation](#)[外文会议] 1998
10. [Cordella LP;Foggia P;Sansone C;Vento M Subgraph transformations for the inexact matching of attributed relational graphs](#)[外文期刊] 1998
11. [Cordella LP;Foggia P;Sansone C;Vento M Performance evaluation of the VF graph matching algorithm](#) 1999
12. [Foggia P;Sansone C;Vento M An improved algorithm for matching large graphs](#) 2001
13. [Foggia P;Sansone C;Vento M A performance comparison of five algorithms](#) 2001
14. [Foggia P;Sansone C;Vento M A database of graphs for isomorphism and sub-graph isomorphism benchmarking](#) 2001
15. [ISIS/Base](#)
16. [查看详情](#)
17. [MDL CTfile formats](#)
18. [查看详情](#)

## 本文读者也读过(10条)

1. [孙婉怡, 何险峰, 温浩, Sun Wanyi, He Xianfeng, Wen Hao 一种新的分子二维子结构检索算法](#)[期刊论文]-[计算机与应用化学](#)2009, 26(12)

2. [张曦](#), [刘忠信](#), [陈增强](#), [Zhang Xi](#), [Liu Zhongxin](#), [Chen Zengqiang](#) [分子局部图形绘制及电势分析软件设计与实现](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)2009, 26 (6)
3. [姚建华](#), [袁身刚](#), [陈海峰](#), [郑崇直](#), [杨铎](#), [范波涛](#), [Annick PANAYE](#), [Jean-Pierre DOUCET](#), [YAO Jian-Hua](#), [YUAN Shen-Gang](#), [CHEN Hai-Feng](#), [ZHENG Chong-Zhi](#), [YANG Shuo](#), [FAN Bo-Tao](#), [Annick PANAYE](#), [Jean-Pierre DOUCET](#) [三维分子结构检索系统的结构索引与匹配](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)1999 (2)
4. [王映红](#), [姚建华](#), [袁身刚](#), [徐常富](#), [WANG Ying-Hong](#), [YAO Jian-Hua](#), [YUAN Shen-Gang](#), [XU Chang-Fu](#) [1H与13C NMR谱图模拟程序](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)1999 (1)
5. [李飞](#), [乔园园](#), [车云霞](#), [Li Fei](#), [Qiao Yuanyuan](#), [Che Yunxia](#) [动态显示生物大分子的JDM插件](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)2007, 24 (10)
6. [袁身刚](#), [姚建华](#), [陈海峰](#), [郑崇直](#), [YUAN Shen-Gang](#), [YAO Jian-Hua](#), [CHEN Hai-Feng](#), [ZHENG Chong-Zhi](#) [建立三维分子结构检索系统的总体设计](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)1999 (1)
7. [陈维明](#), [孙传涛](#), [朱翠娣](#), [郑崇直](#) [基于弦和路径分析的环系最小环最小集识别方法](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)2002, 19 (1)
8. [杨丽敏](#), [陆阳](#) [部分含氧、含氮有机分子的计算机三维结构模型](#) [期刊论文]-[化学通报](#)2002, 65 (4)
9. [沈理明](#), [章建东](#), [田军](#) [eChem—分子结构教与学的辅助工具](#) [期刊论文]-[化学教学](#)2005 (10)
10. [雷建平](#), [裘乐乐](#), [赵孔双](#) [分散系介电理论的数值计算方法](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#)2001, 18 (3)

#### 引证文献(1条)

1. [孙婉怡](#), [何险峰](#), [温浩](#) [一种新的分子二维子结构检索算法](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#) 2009 (12)

引用本文格式: [李欣](#), [宋婷婷](#), [何险峰](#), [Li Xin](#), [Song Tingting](#), [He Xianfeng](#) [基于VF2算法的分子二维子结构检索](#) [期刊论文]-[计算机与应用化学](#) 2007 (11)