به نام آن که جان را فکرت آموخت

انقلاب شبکه‌های عصبی مصنوعی در ارزیابی مولکولی ترکیبات شیمیایی

www.ketab.ir

سجاد رسولی
علی اصغر روحانی

سرشناسه : رسولی، سجاد، ۱۳۷۰- Rasoul, Sajad
عنوان و نام پدیدآور : انقلاب شبکه های‌عصبی مصنوعی در ارزیابی مولکولی ترکیبات شیمیایی/ مولفین سجاد رسولی، علی‌اصغر روحانی.
مشخصات نشر : تهران: دانش بنیاد، ۱۴۰۲.
مشخصات ظاهری : ۱۸۰ ص.: مصور، جدول، نمودار.
شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۵۶۴۱-۴۳-۳
وضعیت فهرست نویسی : فیپا
یادداشت : کتابنامه.
موضوع : شبکه‌های عصبی (کامپیوتر)
موضوع : Neural networks (Computer science)
موضوع : شیمی — داده‌پردازی
موضوع : Chemistry -- Data processing
موضوع : دینامیک مولکولی
موضوع : Molecular dynamics
موضوع : محاسبات کوانتومی
موضوع : Quantum computing
شناسه افزوده : روحانی، علی‌اصغر، ۱۳۵۱ -
رده بندی کنگره : QA۷۶/۸۷
رده بندی دیویی : ۳۲/۰۰۶
شماره کتابشناسی ملی : ۹۳۶۸۸۷۸

www.ketab.ir

انقلاب شبکه‌های عصبی مصنوعی در ارزیابی مولکولی ترکیبات شیمیایی

مولفان : سجاد رسولی - علی اصغر روحانی
ناشر : دانش بنیاد
نوبت چاپ : اول- ۱۴۰۲
تیراژ : ۱۰۰
قیمت : ۱۶۰۰۰۰ تومان
شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۵۶۴۱-۴۳-۳

کلیهٔ حقوق و حق چاپ متن و عنوان کتاب که به ثبت رسیده است؛ مطابق با قانون حقوق مولفان و مصنفان مصوب ۱۳۴۸ محفوظ و متعلق به مولف می‌باشد. هرگونه برداشت،تکثیر،کپی‌برداری به هرشکل (چاپ، فتوکپی، انتشار الکترونیکی) بدون اجازه کتبی از مولف ممنوع بوده و متخلفین تحت پیگرد قانونی قرار خواهند گرفت.

«من پیشنهاد می‌کنم یکی از مسائلی که مورد تکیه و توجّه و تعمیق واقع می‌شود، مسئله‌ی هوش مصنوعی باشد که در اداره‌ی آینده‌ی دنیا نقش خواهد داشت؛ ..... باید کاری کنیم که ما در دنیا حدّاقل در [بین] ده کشور اوّل در مورد هوش مصنوعی قرار بگیریم.»
(بیانات مقام معظم رهبری در دیدار جمعی از نخبگان و استعدادهای برتر علمی کشور ۱۴۰۰ / ۸ / ۲۶)

پیش‌گفتار

کتاب حاضر، مروری جامع و دسته‌بندی روش‌های ارزیابی سامانه‌های شیمیایی با استفاده از علم شیمی محاسباتی در مقیاس‌های مختلف کوانتومی، تمام‌اتمی و دانه‌درشت، جهت دستیابی به دانش‌های نهفته از مواد در مقیاس مولکولی است. این منبع، شامل خلاصه‌ای عمیق از کارآمدترین روش‌های مکانیک کوانتومی و دینامیک مولکولی در علم بسیار گسترده و عمیق شیمی مولکولی است. تا کنون، تمامی روش‌هایی که جهت بررسی سامانه‌های مولکولی مورد استفاده قرار می‌گرفته است، دارای بار محاسباتی بسیار سنگینی هستند، که سبب می‌شود استفاده از آنها با چالش‌های بسیاری همراه شود. در سال‌های اخیر با پیشرفت علم هوش مصنوعی، دانشمندان در تلاش هستند تا با وارد کردن این علم در علم شیمی و محاسبات مولکولی، دقت و سرعت انجام محاسبات را افزایش دهند. در این کتاب، تلاش می‌شود تا روشی بر پایه علم هوش مصنوعی- یادگیری ماشینی و شبکه‌های عصبی مصنوعی ارائه شود تا بتوان منشاء پدیده‌های شیمی- فیزیکی موجود در سامانه‌های مولکولی را با سرعت و دقت بسیار بالایی بررسی و تحلیل کرد. از این رو، در ابتدای این کتاب، اصول، مبانی و ریاضیات روش‌های مکانیک کوانتومی، نیمه‌تجربی، دینامیک مولکولی تمام اتم و دینامیک ذرات اتلافی به تفضیل ارائه می‌شوند. در ادامه، با آشکار کردن نقاط ضعف روش‌های کلاسیک، به نحوه عملکرد یادگیری ماشینی و عمیق از علم هوش مصنوعی با بکارگیری الگوریتم شبکه عصبی در ارزیابی سامانه‌های مولکولی پرداخته می‌شود. این بررسی‌ها همراه با بحث‌های عمیق و تخصصی در مورد بسیاری از سؤالاتی است که ذهن شیمیدانان علاقه‌مند به استفاده از روش‌های رایانه‌ای در شیمی محاسباتی را به خود درگیر کرده است. این کتاب با هدف ایجاد منبعی کارآمد و مناسب برای شیمیدانان در دوران ظهور هوش مصنوعی در علم شیمی نگارش شده است. چون، به دلیل جدید بودن کاربرد علم هوش مصنوعی در بررسی‌های مولکولی، متأسفانه، منابع چندانیدر این زمینه در دنیا وجود ندارد. به همین دلیل، این کتاب با هدف ارتقای علم هوش مصنوعی

www.ketab.ir

و کاربرد آن در ارزیابی مولکولی ترکیبات شیمیایی نگارش شده است. باشد که این کتاب آغازگر مطالعات در زمینه کاربرد هوش مصنوعی در علم شیمی مولکولی در کشور عزیزمان ایران باشد.

سجاد رسولی، علی‌اصغر روحانی

تابستان ۱۴۰۲

www.ketab.ir

فهرست

فصل ۱ شیمی محاسباتی ۱

۱.۱ مقدمه ۲
۲.۱ هوش مصنوعی ۳
۳.۱ مقدمه‌ای بر یادگیری ماشینی ۱۱
۴.۱ مراجع ۱۳

فصل ۲ روش‌های محاسباتی کوانتومی ۱۵

۱.۲ مقدمه ۱۶
۲.۲ مقدمه‌ای بر شیمی کوانتومی ۱۶
۳.۲ نظریه شیمی کوانتومی ۱۸
۴.۲ پیاده‌سازی محاسباتی ۲۳
۵.۲ روش ترکیبی مکانیک کوانتومی و مکانیک مولکولی ۲۶
۶.۲ کاربردهای شیمی محاسباتی کوانتومی ۲۹
۷.۲ مکانیک مولکولی ای‌بی-اینیشیو ۳۲
۸.۲ مراجع ۳۶

فصل ۳ دینامیک مولکولی ۴۵

۱.۳ مقدمه ۴۶
۲.۳ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۴۶

www.ketab.ir

۳.۳ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در ارزیابی محلول‌های پلیمری ۶۱
۴.۳ مراجع ۱۰۹

فصل ۴ دینامیک مولکولی ذرات اتلافی ۱۱۹

۱.۴ مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ذرات اتلافی ۱۲۰
۲.۴ اصول شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ذرات اتلافی ۱۲۱
۳.۴ خودتجمعی و هیدرودینامیکی پلیمر پاسخگوی دمایی در محیط آبی ۱۲۴
۴.۴ مراجع ۱۳۶

فصل ۵ هوش مصنوعی در ارزیابی مولکولی ترکیبات شیمیایی ۱۳۹

۱.۵ هوش مصنوعی در علم شیمی محاسباتی ۱۴۰
۲.۵ پتانسیل شبکه عصبی ۱۴۴
۳.۵ پتانسیل شبکه عصبی ای‌ان‌آی ۱۴۵
۴.۵ روش عملکرد پتانسیل شبکه عصبی ای‌ان‌آی ۱۵۵
۵.۵ پتانسیل شبکه عصبی ای‌ان‌آی در ارزیابی ترکیبات شیمیایی ۱۶۰
۶.۵ مراجع ۱۶۹

www.ketab.ir