

به نام آن که جان را فکرت آموخت

**طراحی مناسب‌ترین مسیر واکنش
سنتز ترکیبات شیمیایی به وسیله
هوش مصنوعی**

سجاد رسولی
علی اصغر روحانی

سرشناسه : رسولی، سجاد، ۱۳۷۰ - Rasoul, Sajad
 عنوان و نام پدیدآور : طراحی مناسب‌ترین مسیر واکنش سنتز ترکیبات شیمیایی به وسیله هوش مصنوعی/مولفین سجاد رسولی، علی اصغر روحانی.
 مشخصات نشر : تهران: دانش بنیاد، ۱۴۰۲.
 مشخصات ظاهری : ۱۹۸ ص.: مصور (رنگی).
 شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۵۶۴۱-۴۴-۰
 وضعیت فهرست نویسی : فیبا
 یادداشت : کتابنامه.
 موضوع : شیمی — واکنش‌ها — داده‌پردازی
 موضوع: Chemical reactions -- Data processing :
 موضوع : هوش مصنوعی — کاربردهای صنعتی
 موضوع: Artificial intelligence -- Industrial applications :
 شناسه افزوده : روحانی، علی اصغر، ۱۳۵۱ -
 رده بندی کنگره : ۳۹/۳QD
 رده بندی دیویی : ۵۴۲/۸۵۴
 شماره کتابشناسی ملی : ۹۳۶۸۹۲۷
 اطلاعات رکورد کتابشناسی : فیبا

طراحی مناسب‌ترین مسیر واکنش سنتز ترکیبات شیمیایی به وسیله هوش مصنوعی

مولفان : سجاد رسولی - علی اصغر روحانی

ناشر : دانش بنیاد

نوبت چاپ : اول - ۱۴۰۲

تیراژ : ۱۰۰

قیمت : ۱۸۰۰۰۰ تومان

شابک : ۹۷۸-۶۲۲-۵۶۴۱-۴۴-۰

کلیه 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، کپی برداری به هر شکل (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 توجه و تعمیق واقع می‌شود، مسئله‌ی هوش مصنوعی باشد که در اداره‌ی آینده‌ی دنیا نقش خواهد داشت؛ ... باید کاری کنیم که ما در دنیا حداقل در [بین] ده کشور اول 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 از کاربرد روش‌های هوش مصنوعی به ویژه سامانه‌های خبره در تبیین ساختاری و طراحی مناسب‌ترین مسیر واکنش سنتز ترکیبات شیمیایی است. این منبع، شامل خلاصه‌ای عمیق از کارآمدترین الگوریتم‌ها و روش‌های هوش مصنوعی در قالب سامانه‌های خبره، در علم بسیار گسترده و عمیق شیمی مولکولی است. در این کتاب، در ابتدا، تاریخچه مفصلی از هوش مصنوعی به عنوان شاخه‌ای از علم رایانه، کاربردها، مزایا و معایب این علم به ویژه در کاربرد شیمیایی آن ارائه می‌شود. علاوه بر این، انواع روش‌های اساسی و کارآمد در جست‌جوی فضای راه‌حل که بخش بسیار مهمی را در علم داده و هوش مصنوعی تشکیل می‌دهد، به طور مفصل و موشکافانه بررسی 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 مولکولی را به خود درگیر کرده است. بررسی‌های صورت گرفته در این کتاب، همراه با ارزیابی گسترده‌ای از اندک منابع موجود در این زمینه است. در واقع، مباحث ارائه شده در این منبع، پوشش کلیه تحقیقات اساسی در تفسیر طیف‌های مولکولی در جهت طراحی مناسب‌ترین مسیر واکنش جهت سنتز ترکیبات شیمیایی را در بر دارد. 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 چندانی در دنیا وجود ندارد. به همین دلیل، این کتاب با هدف ارتقای علم هوش مصنوعی و کاربرد آن در طراحی مسیرهای واکنش سنتز 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، علی اصغر روحانی

پاییز ۱۴۰۱

فهرست

فصل ۱ مقدمه ۱

۱.۱ مقدمه ۲

۲.۱ مراجع ۱۱

فصل ۲ هوش مصنوعی: تاریخچه، قابلیت‌ها، اهداف و محصولات ۱۵

۱.۲ هوش مصنوعی ۱۶

۲.۲ مراجع ۴۳

فصل ۳ هوش مصنوعی و حل مسئله در تبیین ساختاری ترکیبات شیمیایی و

طراحی واکنش سنتز ۵۳

۱.۳ کاربرد هوش مصنوعی در حل مسائل ساختاری ترکیبات شیمیایی ۵۴

۲.۳ مراجع ۷۶

فصل ۴ هوش مصنوعی و جست‌وجو در فضای راه‌حل: بازنمایی دانش و

جست‌وجوی نامرتب ۷۹

۱.۴ بازنمایی دانش ۸۰

۲.۴ مراجع ۱۱۵

فصل ۵

هوش مصنوعی و جست‌وجو در فضای راه‌حل: تقلیل مسئله و

جست‌وجوی مرتب ۱۲۱

۱.۵ تقلیل مسئله ۱۲۲

۲.۵ مراجع ۱۴۸

فصل ۶

طراحی سامانه خبره جهت یافتن مناسب‌ترین مسیر واکنشی

ترکیبات شیمیایی ۱۴۹

۱.۶ مقدمه‌ای بر سامانه‌های خبره ۱۵۰

۲.۶ طراحی سامانه‌های خبره ۱۵۱

۳.۶ مزایا و معایب سامانه‌های خبره ۱۶۲

۴.۶ امکانات و اجزای سامانه‌های خبره ۱۶۳

۵.۶ محدودیت‌های سامانه‌های خبره ۱۶۶

۶.۶ استفاده از سامانه‌های خبره در بین ساختاری ترکیبات شیمیایی و طراحی واکنش سنتز ۱۶۹

۷.۶ استفاده از سامانه‌های خبره یکپارچه در بین ساختاری و طراحی مسیر واکنش سنتز ترکیبات

شیمیایی ۱۸۱

۸.۶ مراجع ۱۸۹