

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ-ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

2. Αναζήτηση της Ομοιότητας σε "αντικείμενα" της χημείας (αντικείμενα: κβαντοχημικές μέθοδοι, φυσικοχημικές μετρήσεις, χημικά μόρια με συγκεκριμένες ιδιότητες)

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: ΤΡΙΤΗ 6/6/2017

ΩΡΑ: 09:00-11:00

ΤΟΠΟΣ: ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΑΙΘΟΥΣΑ: ΣΕΜΙΝΑΡΙΩΝ

υπο του Δρος Δημητρίου Ξενίδη

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

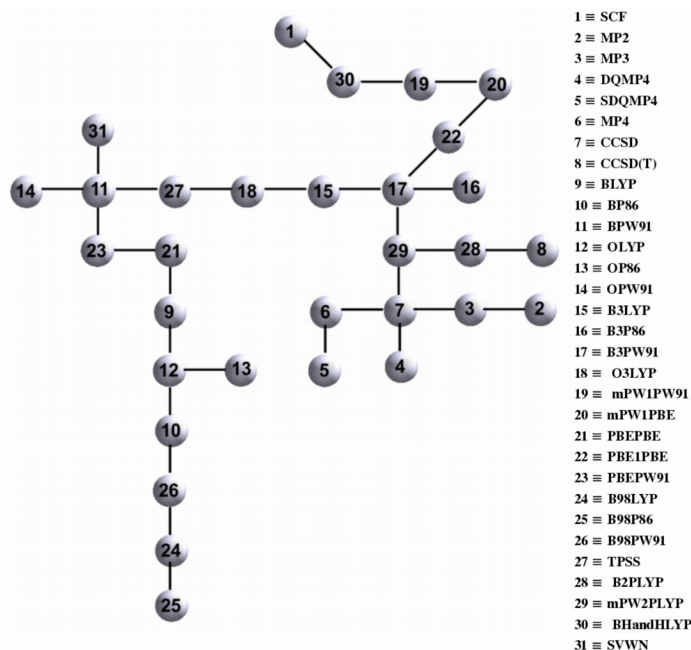
Είναι κοινός τόπος ότι στη φύση η αναζήτηση της ομοιότητας δεν είναι δυνατό να απαντηθεί με μονοσήμαντο τρόπο. Από την άλλη πλευρά στον χώρο της επιστήμης υπάρχει μια αδιάκοπη προσπάθεια προκειμένου να βρεθεί η "καλύτερη" εναλλακτική λύση είτε για την αντικατάσταση ενός αντικειμένου με ένα άλλο (ή μιας διαδικασίας από μία άλλη). Για τον λόγο αυτό ιδιαίτερη προσπάθεια έχει καταβληθεί ώστε η προσπάθεια να είναι τόσο ακριβής όσο και αποτελεσματική αλλά και "οικονομική" ταυτόχρονα.

Στην προσπάθεια αυτή έχουν χρησιμοποιηθεί μαθηματικά εργαλεία ώστε, σε πρώτη φάση, να επεξεργαστούμε ένα σύνολο από "υποψηφίους", και έπειτα απο μια επαναληπτική διαδικασία, να καταλήξουμε σε ένα όσο το δυνατό μικρότερο σύνολο από "επιζήσαντες" υποψηφίους. Αυτοί οι υποψήφιοι είτε ταυτίζονται ως προς κάποιο πρότυπο είτε εμφανίζουν ανάλογη συμπεριφορά.

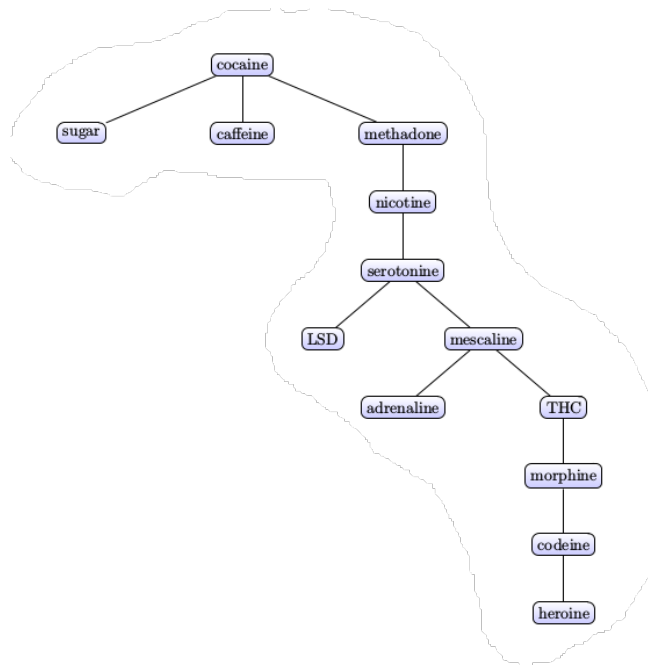
Στα πλαίσια του παρόντος μαθήματος θα παρουσιάσουμε το μαθηματικό υπόβαθρο της διαδικασίας. Θα αναφέρουμε τις διαφορετικές διεργασίες (π.χ. τεχνητή νοημοσύνη και νευρωνικά δίκτυα, θεωρία πληροφοριών, εξόρυξη δεδομένων) οι οποίες θα μας βοηθήσουν στην αναζήτηση του καταλληλότερου υποψηφίου.

Τέλος, θα παρουσιαστούν συγκεκριμένα παραδείγματα εφαρμογής των παραπάνω σε

- αναζήτηση σε χώρο που ορίζουν κβαντοχημικές μέθοδοι υπολογισμού της ενέργειας ενός συστήματος



- αναζήτηση σε χώρο που ορίζουν ενώσεις με συγκεκριμένη συμπεριφορά π.χ. ψυχοκινητική και ψυχομημητική δράση, εξάρτηση κλπ



- αναζήτηση σε χώρο φυσικοχημικών μετρήσεων π.χ. φθορισμομετρίας ακτίνων X (XRF)