



كلية العلوم
قسم الرياضيات

حسابات الالهام البيولوجي و تطبيقاته في المعلوماتية الكيميائية

رسالة مقدمة كجزء من متطلبات الحصول على درجة الماجستير فى العلوم تخصص حاسبات علمية من

كلية العلوم-جامعة المنوفية

مقدمة من

عبدالعظيم جلال عبدالعظيم عبدالسلام حسين

المعيد بقسم الرياضيات - كلية العلوم - جامعة الفيوم

تحت إشراف

أ.د/ ابوالعلا عطيفي حسنين

أستاذ بقسم تكنولوجيا المعلومات - كلية الحاسبات و
المعلومات - جامعة القاهرة

[]

أ.د/ محمد امين عبدالواحد

أستاذ علوم الحاسب- قسم الرياضيات و علوم الحاسب
كلية العلوم - جامعة المنوفية

[]

لجنة الحكم و المناقشة

أ.د/ ابراهيم محمد يوسف سليم

أستاذ علوم الحاسب- المعهد التكنولوجي
العالي بالعاشر من رمضان

[]

أ.د/ خالد عبدالحميد البهنسي

أستاذ و وكيل الكلية لشئون البيئة و خدمة المجتمع
كلية الحاسبات و المعلومات - جامعة عين شمس

[]

أ.د/ ابوالعلا عطيفي حسنين

أستاذ بقسم تكنولوجيا المعلومات - كلية الحاسبات و
المعلومات - جامعة القاهرة
[]

أ.د/ محمد امين عبدالواحد

أستاذ علوم الحاسب - قسم الرياضيات و علوم الحاسب
كلية العلوم - جامعة المنوفية
[]

جمهورية مصر العربية

٢٠١٨

الملخص العربي

ان التشابه في المركبات الكيميائية يؤدي الى تشابه في الانشطة البيولوجية و التأثير الدوائي. اعتمادا على هذه القاعدة السابقة قمنا في هذه الرسالة بمحاولة ايجاد النشاط البيولوجي عن طريق ايجاد التشابه في التركيب للمركبات الكيميائية و ذلك بعد ان قمنا بتحويلها من صيغ كيميائية لخصائص رقمية بلغ عددها ٤٦٦٥ للتحويل بعد ذلك المسالة الى مسالة تحديد الخصائص و قد قمنا بتقديم خوارزمية جديدة تعمل على المجال المنفصل بدلا من المجال المتصل باستخدام دالتين للتحويل و للتأكد مما قمنا به قمنا بالاختبار على على ٢٢ دالة رياضية و على ٣ مشاكل هندسية للتأكد من قوة و فاعلية الخوارزيم و بمقارنة النتائج بعدد ٦ من اقوى الخوارزميات الموجودة و اعتمادا على ٨ معايير احصائية تبين ان النتائج كانت مقبولة بنسبة تخطت ال ٨٩ في المئة اي ان الرسالة تم بها الاتي

١- تقديم خوارزمية جديدة تحول من النظام المتصل الى النظام المنصل باستخدام دالتين

رياضيتين

٢- اختبار الخوارزمية بعدد ٨ معايير احصائية

٣- مقارنة النتائج بعدد ٦ من اقوى و اشهر الخوارزميات

٤- اعادة الاختبار على عدد ٣ مشاكل هندسية

٥- ايجاد ٨ معايير احصائية تمكننا من الحكم و المفاضلة بين الخوارزميات

٦- اعادة الاختبار على عدد ٢٤ مخزن بيانات

٧- عمل عدد ١٠٠ جيل بكل جيل ٧٠ فرد لايجاد الافضل

٨- عمل دراسة على كافة البرامج المستخدمة في المعلوماتية الكيميائية

٩- عمل حصر لكل الخوارزميات الموجودة في نكاء الاسراب

١٠- المقارنة بين نكاء الاسراب و بقية الطرق الموجودة في هذا المجال

