

APLICAÇÕES DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA QUÍMICA E FÍSICA: ACELERANDO A DESCOBERTA DE MATERIAIS, PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES E OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS CIENTÍFICOS

Andrômeda Surak Doge¹

¹Uniassevi-Biomedicina, Santa Catarina, Brasil. Uninter- Física, Curitiba, Brasil
(andromedasurak@outlook.com)

A inteligência artificial (IA) assumiu um papel cada vez mais significativo nos campos da física e da química, avançando na descoberta de materiais, prevendo propriedades e otimizando procedimentos científicos. Este artigo examina as aplicações da IA em diversos campos, destacando suas contribuições significativas para a pesquisa e o desenvolvimento científico.

Palavras-chave: Descoberta de materiais, Física, Inteligência artificial, Otimização de processos científicos, Química.

INTRODUÇÃO

Em comparação com 2013, prevê-se que a quantidade de dados criados globalmente em 2020 aumentará seis vezes. É óbvio que existe a necessidade de armazenar, computar, gerenciar e analisar esses enormes volumes de dados em taxas nunca antes vistas. A inteligência artificial (IA) é útil nessa situação.

Como a IA pode ser usada nas ciências (física e química). Veremos como a IA pode acelerar o desenvolvimento de novos medicamentos, prever as qualidades dos materiais e melhorar os procedimentos de pesquisa científica. Também veremos algumas instâncias do mundo real disso em ação, incluindo as de química computacional, ciência de materiais e outros campos.

A influência da inteligência artificial (IA), uma das tecnologias mais revolucionárias do nosso tempo, na ciência e na tecnologia está se tornando cada vez mais clara. A IA tem sido essencial no avanço da descoberta de materiais, na previsão de qualidades químicas e físicas e na simplificação de procedimentos científicos nas áreas de química, física e tecnologia.

Encontrar novos materiais com certas propriedades é uma tarefa difícil e demorada. Mas a IA mudou completamente esse setor ao possibilitar a triagem rápida de milhares de compostos para aqueles com as qualidades necessárias. Uma IA examina grandes quantidades de dados usando técnicas de aprendizado de máquina para encontrar padrões e conexões entre estruturas químicas e qualidades desejadas. Isso acelera muito o processo

de encontrar novos materiais que tenham uso em vários campos, incluindo energia, eletrônica e medicina.

Para prever qualidades químicas e físicas, a IA tem sido usada. Os modelos de aprendizado de máquina podem prever atributos como energia de ligação, solubilidade e condutividade térmica com precisão, pois são treinados em dados experimentais. O tempo e o dinheiro que seriam necessários para pesquisas laboratoriais abrangentes são economizados graças a essas garantias, que são de grande valor para os cientistas. Além disso, a IA permite uma abordagem mais completa, levando em consideração vários fatores e relacionamentos intrincados que às vezes são perdidos nas avaliações analíticas.

A IA também pode ser usada para agilizar procedimentos científicos. Uma IA pode determinar a temperatura, pressão e concentração de reagente ideais para processos químicos e físicos usando algoritmos de otimização, otimizando a eficiência e reduzindo subprodutos externos. Como consequência, os processos tornam-se mais eficazes, utilizando menos recursos e com menor impacto ambiental negativo.

No entanto, apesar dos avanços significativos, o uso de IA em química, física e tecnologia também apresenta desvantagens e obstáculos. Para garantir o sucesso desses aplicativos, as preocupações com o calibre e a acessibilidade dos conjuntos de dados, a interpretabilidade dos modelos de IA e a necessidade

de uma infraestrutura de computação suficiente devem ser resolvidas.

MATERIAL E MÉTODOS

1. PREVISÃO DAS PROPRIEDADES DO MATERIAL

O ambiente físico em que vivemos é composto por uma grande variedade de materiais. Exemplos incluem biomassa, metais, polímeros e proteínas. Mas, independentemente do material, os cientistas estão interessados em como ele responderá a diferentes fatores ambientais, como calor, luz e estresse mecânico.

Figura 1. Polígonos de Referência Química



Fig. 1: Esta imagem gerada por computador exibe uma coleção de polígonos em vários matizes, cada um representando um determinado elemento químico.

As previsões baseadas em inteligência artificial das características dos materiais estão ganhando cada vez mais interesse dos cientistas. Foto de Thomas Bresson

Os cientistas empregam ciência computacional de materiais e química computacional para poder antecipar tais recursos. A IA tem se mostrado uma ferramenta útil para resolver questões complicadas neste campo.

Quadro 1 - Método SSF

FASES	ATIVIDADES
Fase I - Definição do protocolo de pesquisa	1. definição da estratégia de busca; 2. consultas nas bases de dados; 3. organização do portfólio; 4. definição dos critérios de seleção dos documentos; 5. composição do portfólio bibliográfico.

Fase II - Análise	6. consolidação dos dados obtidos na primeira fase, destrinchamento dos resultados obtidos, análise bibliométrica das publicações.
Fase III - Síntese	7. síntese e sistematização dos dados e conhecimentos mais relevantes obtidos a partir da análise documental.
Fase IV - Escrever	8. redação do trabalho.

Fonte: A autora (2021) a partir de (FERENHOF e FERNANDES, 2016).

2. PREVISÃO DE CARACTERÍSTICAS QUÍMICAS E FÍSICAS

A inteligência artificial tem se mostrado uma ferramenta potente para prever características químicas e físicas, o que pode acelerar a descoberta e criação de novos materiais. Esse método analisa conjuntos de dados massivos, encontra tendências e faz previsões precisas sobre as características dos compostos usando algoritmos de aprendizado de máquina e redes neurais.

A previsão de parâmetros químicos, incluindo energia de ligação, solubilidade, reatividade química e propriedades espectroscópicas, é um dos maiores problemas em química e física. Para resolver essas dificuldades, a IA tem sido usada para fornecer uma previsão rápida e precisa desses atributos com base em estruturas químicas e características moleculares.

Máquinas de vetor de suporte (SVM), redes neurais convolucionais (CNN) e redes neurais recorrentes (RNN), entre outros algoritmos de aprendizado de máquina, têm sido extensivamente empregadas para prever características químicas. Esses algoritmos podem aprender a conexão entre as características moleculares e as qualidades químicas desejadas, pois foram treinados em conjuntos de dados que contêm detalhes sobre estruturas químicas e propriedades correspondentes.

As características físicas dos materiais, incluindo condutividade elétrica, índice de refração, temperatura de fusão e dureza, também foram previstas usando IA. Para a criação de materiais com usos especializados, essas características são essenciais. Um método eficaz para escolher e projetar materiais com atributos desejáveis é possibilitado pela IA, que permite a identificação de relações

complexas entre as estruturas dos materiais e suas propriedades físicas.

A melhoria das propriedades químicas e físicas pelo uso de IA tem várias aplicações práticas. Por exemplo, na indústria farmacêutica, as propriedades moleculares podem ser utilizadas para identificar compostos promissores com potencial atividade terapêutica, acelerando a descoberta de novos medicamentos. A presença de propriedades físicas na indústria de materiais permite o desenvolvimento de materiais com propriedades específicas para aplicações em eletrônica, energia, catálise e muitos outros campos.

3. OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS CIENTÍFICOS

A otimização de processos científicos é uma área em que a inteligência artificial tem desempenhado um papel crítico na química e na física. Essa abordagem emprega técnicas avançadas de IA para melhorar a eficiência, precisão e velocidade de processos científicos, como simulações computacionais, modelagem molecular e análise de dados.

Na química e na física, a inteligência artificial tem desempenhado um papel crítico na otimização de processos científicos. Abordagens avançadas de IA são usadas nesta abordagem para aumentar a eficiência, precisão e velocidade de procedimentos científicos, como simulações de computador, modelagem molecular e análise de dados.

No que concerne aos Chatbots baseados em IA, utilizam o Processamento de Linguagem Natural para fazer recomendações, responder a perguntas, e executar ações (BARROS; GUERREIRO, 2019; CHEN; CHEN; LIN, 2020).

A simulação por computador é um uso fundamental da IA para melhorar os procedimentos científicos. Algoritmos de IA, com sua capacidade de analisar grandes quantidades de dados e executar cálculos, podem acelerar simulações de computador complicadas, permitindo que testes virtuais sejam feitos em muito menos tempo do que as abordagens tradicionais. Isso é particularmente significativo em disciplinas como a química quântica, onde as simulações são computacionalmente complexas e precisam de uma grande quantidade de poder computacional.

4. DESAFIOS E CONSIDERAÇÕES ÉTICAS

O uso de inteligência artificial em química, física e tecnologia levanta problemas e preocupações éticas que devem ser abordadas. Embora a IA forneça vários benefícios e oportunidades, é vital estar ciente

dos possíveis desafios e limites relacionados à sua aplicação em vários campos.

A qualidade dos dados de treinamento é uma das dificuldades mais difíceis. Para aprender e gerar previsões precisas, os modelos de IA dependem de vastos conjuntos de dados. No entanto, os resultados da IA podem ser prejudicados se esses conjuntos de dados forem tendenciosos, incompletos ou de baixa qualidade. É fundamental verificar se os dados utilizados são representativos, atualizados e rotulados corretamente.

Além disso, a interpretabilidade dos modelos de IA é um grande desafio. À medida que os algoritmos de IA ficam mais complicados, entender e explicar como eles fazem julgamentos torna-se cada vez mais desafiador. Isso é especialmente crucial ao prever qualidades químicas e físicas ou ao desenvolver materiais, quando as descobertas devem ser confiáveis e validadas cientificamente. Métodos e estratégias para aumentar a transparência e a interpretabilidade dos modelos de IA estão sendo desenvolvidos.

Além das dificuldades tecnológicas, questões éticas devem ser abordadas. A privacidade de dados é um grande problema em química, física e tecnologia, especialmente quando se lida com informações confidenciais ou classificadas. É fundamental manter a proteção de dados adequada e a conformidade com as regras de privacidade em algumas jurisdições, como o Regulamento Geral de Proteção de Dados (GDPR).

Outra preocupação ética no emprego da IA é a responsabilidade. Os resultados dos algoritmos de IA podem ter enormes implicações sociais. Como resultado, é fundamental que os desenvolvedores, pesquisadores e usuários de IA sejam responsabilizados por garantir justiça, imparcialidade e não confiança na implementação da tecnologia. Para garantir que as vantagens da IA sejam distribuídas uniformemente, é vital minimizar o viés nos algoritmos.

Finalmente, o uso de inteligência artificial em química, física e tecnologia levanta preocupações tecnológicas, éticas e de segurança que devem ser abordadas. É vital garantir a qualidade dos dados de treinamento, a interpretabilidade do modelo de IA, a privacidade dos dados, o uso ético da tecnologia e a segurança cibernética. A IA pode ser utilizada com sucesso e ética para pesquisas científicas e técnicas se esses problemas e preocupações éticas forem abordados.

5. PERSPECTIVAS FUTURAS

O tópico da inteligência artificial em química, física e tecnologia está crescendo continuamente, e há várias possibilidades futuras intrigantes para

investigar. Novos aplicativos de IA que prometem mudar ainda mais esses domínios estão se desenvolvendo à medida que a tecnologia avança e novas descobertas são feitas.

A integração da IA com outras tecnologias sofisticadas, como a computação quântica, é uma promessa intrigante. A combinação de IA com computação quântica pode ajudar na descoberta de materiais e na criação de novas reações químicas usando a capacidade de processamento e modelagem dessas tecnologias. Isso pode levar a avanços na química e na física, permitindo a resolução de questões complicadas e a criação de novos materiais com características notáveis.

Outra perspectiva futura é o emprego da inteligência artificial na busca de respostas para questões globais como energia sustentável e mudanças climáticas. A IA pode ser usada para criar novos materiais e métodos que garantam a geração de energia limpa enquanto reduzem as emissões de carbono. Além disso, a IA pode ajudar na descoberta de catalisadores mais eficazes, na otimização de reações químicas para reduzir o desperdício e no desenvolvimento de dispositivos sofisticados de armazenamento de energia.

Uma promessa significativa é o desenvolvimento de algoritmos de aprendizado de máquina mais avançados e eficientes. A busca por algoritmos de IA cada vez mais poderosos, capazes de lidar com grandes quantidades de dados com mais eficiência, é um esforço contínuo. Isso permitirá uma análise mais rápida e precisa de dados científicos complicados, acelerando a descoberta e o desenvolvimento de novos materiais, métodos e tecnologias.

Por fim, em química, física e tecnologia, o conhecimento das atitudes éticas e sociais da IA continua sendo uma perspectiva crucial. Ao criar e usar a tecnologia de IA, é fundamental abordar a ética, a justiça, a privacidade e a segurança. Para garantir que a IA seja utilizada de forma responsável e aceitável pela sociedade como um todo, o debate e a legislação adequada devem acompanhar os avanços tecnológicos.

6. LIMITAÇÕES E DESAFIOS DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA QUÍMICA E FÍSICA

Embora a inteligência artificial (IA) tenha se mostrado promissora em química e física, existem várias limitações e obstáculos a serem observados ao implementar essa tecnologia. É fundamental estar ciente dessas limitações para evitar experiências irrealistas e maximizar os benefícios da IA.

A necessidade de enormes conjuntos de dados de treinamento é um dos principais limites da IA em química e física. Para aprender e produzir previsões precisas, os modelos de IA requerem uma grande quantidade de dados. Infelizmente, obter conjuntos de dados apropriados e representativos nem sempre é simples, especialmente para desafios especializados e

áreas de pesquisa menos pesquisadas. A precisão e a capacidade de generalização dos modelos de IA podem ser prejudicadas pela falta de dados de alta qualidade.

Outra restrição é a interpretabilidade dos modelos de IA. Compreender como os algoritmos tomam decisões e articular o raciocínio por trás dessas conclusões fica cada vez mais difícil à medida que se tornam mais complicados. Isso pode ser problemático em aplicações científicas, onde a compreensão da lógica das previsões e descobertas é crítica. A confiança dos cientistas e a aceitação das descobertas da IA podem ser prejudicadas pela falta de interpretabilidade.

Além disso, a IA pode ter dificuldade em lidar com situações que estão fora do escopo dos dados de treinamento. Como os modelos de IA são construídos com base em dados existentes, eles podem ter dificuldades para lidar com cenários ou propriedades inesperadas que diferem daqueles encontrados nos dados de treinamento. Isso pode resultar em resultados errôneos ou falta de percepção em configurações complicadas ou novos domínios de investigação científica.

Num artigo seminal (Turing 1950), A. M. Turing propôs que a pergunta “Podem as máquinas pensar?” fosse substituída pela pergunta “É teoricamente possível que um computador digital de estados finitos, equipado com uma tabela de instruções grande, mas finita, ou programa, forneça respostas a questões que levem um interrogador desconhecedor a pensar que é um ser humano?”

Os últimos desafios são aqueles relacionados à ética e segurança. Ao utilizar IA em química e física, há desafios importantes que devem ser enfrentados, incluindo a coleta e uso de dados confidenciais, privacidade, responsabilidade e equidade. A segurança cibernética também deve ser considerada para proteger sistemas e dados contra interferências ou ataques hostis.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O uso de inteligência artificial em química e física tem mostrado resultados promissores em uma variedade de domínios, desde a descoberta de materiais até a previsão de propriedades e melhoria de processos científicos. Nesta seção, veremos algumas das descobertas importantes e os benefícios que a IA pode oferecer nessas áreas.

A IA tem sido usada para acelerar o processo de triagem e escolha de compostos com qualidades desejáveis no desenvolvimento de novos materiais. Grandes bancos de dados de compostos químicos podem ser analisados usando algoritmos de aprendizado de máquina para descobrir candidatos com certos atributos, como alta eficiência energética, estabilidade química ou propriedades elétricas favoráveis. Este método tem sido muito benéfico na

busca de materiais para aplicações de energia renovável, como células solares, baterias de alta capacidade e materiais de armazenamento de energia.

A previsão de características químicas e físicas é outro uso da IA. Com base em dados experimentais, os modelos de aprendizado de máquina podem ser treinados para prever recursos como energia de ligação, polarização da molécula e coeficientes de transmissão. Essas provisões provaram ser benéficas no estudo e na criação de novos produtos químicos, economizando tempo e dinheiro que, de outra forma, seriam necessários em longos estudos de laboratório. Além disso, a IA permite o desenvolvimento de modelos de previsão mais sofisticados que levam em consideração várias variáveis e conexões complicadas.

Outra área em que a IA se mostrou promissora é a otimização de procedimentos científicos. Por exemplo, um AI pode ser usado para otimizar os parâmetros de reação química, como temperatura, pressão e concentração de reagente, a fim de maximizar o rendimento enquanto reduz os subprodutos. Além disso, usando simulações e análises avançadas, a IA pode ser usada para otimizar equipamentos e sistemas físicos, como aeronaves. Essas técnicas permitem identificar soluções mais eficientes com menores custos e tempo de desenvolvimento.

Embora os resultados das aplicações de IA em química e física sejam encorajadores, limitações e restrições significativas devem ser reconhecidas. Conforme observado anteriormente, a qualidade dos dados de treinamento, a interpretabilidade dos modelos de IA e a necessidade de infraestrutura de computação são preocupações que precisam ser abordadas. Além disso, a colaboração entre acadêmicos e cientistas de outros domínios é essencial para maximizar os benefícios da IA e abordar os problemas que ocorrem. Desde então o Teste Turing é usado para demonstrar a capacidade de Inteligência artificial de máquinas e programas (RODRÍGUEZ e BRITO, 2017; TURING, 1937, 1949).

Em termos de efeito e desenvolvimento, o uso da IA em química e física tem o potencial de acelerar o processo de encontrar e produzir materiais, melhorar a precisão das propriedades e simplificar as operações científicas. Isso não apenas aumentou a pesquisa e o desenvolvimento científico, mas também pode ter implicações para projetos em setores como energia renovável e medicina.

CONCLUSÃO

A inteligência artificial (IA) demonstrou ser uma ferramenta potente em química, física e tecnologia, impulsionando a descoberta de materiais,

a previsão de propriedades e a melhoria de processos científicos. A IA tem a capacidade de acelerar muito o progresso em muitos campos usando algoritmos de aprendizado de máquina e análise de dados aprimorada, abrindo novas oportunidades e apoiando conquistas científicas e técnicas.

A qualidade dos dados de treinamento é uma das dificuldades mais difíceis. Para aprender e gerar previsões precisas, os modelos de IA dependem de vastos conjuntos de dados. No entanto, se esses conjuntos de dados forem inadequados ou de baixa qualidade, os resultados da IA podem sofrer. É fundamental verificar se os dados utilizados são representativos, atualizados e rotulados corretamente.

No entanto, é fundamental observar que o uso de IA em química, física e tecnologia apresenta obstáculos e restrições. Alguns dos problemas a serem resolvidos são a disponibilidade de conjuntos de dados representativos e de alta qualidade, a interpretabilidade dos modelos de IA e a necessidade de infraestrutura computacional adequada. Além disso, ética, segurança e cooperação multidisciplinar são questões críticas para garantir o uso ético e útil da IA em vários campos. Segundo Turing (A. M. TURING, I.—COMPUTING MACHINERY AND INTELLIGENCE;1950).

Podemos agora considerar que o terreno foi limpo e estamos prontos para prosseguir com o debate sobre nossa questão, 'As máquinas podem pensar?' e a variante dela citada no final da última seção. Não podemos abandonar completamente a forma original do problema, pois as opiniões divergem quanto à adequação da substituição e devemos pelo menos ouvir o que tem a ser dito a esse respeito.

À medida que avançamos, devemos continuar a investir na pesquisa e desenvolvimento de abordagens de IA cada vez mais avançadas e eficientes, capazes de lidar com desafios complicados e dados cada vez maiores. Além disso, a colaboração entre cientistas, pesquisadores e profissionais de IA é fundamental para inovação e resultados.

Em resumo, o uso de inteligência artificial em química, física e tecnologia tem uma enorme promessa de avanço científico e tecnológico. Com uma abordagem rigorosa que leva em consideração as restrições e obstáculos, a IA pode desempenhar um papel importante na descoberta de materiais, na previsão de características e na melhoria dos processos científicos, abrindo caminho para o sucesso em vários campos e promovendo o progresso social. todos.

AGRADECIMENTOS

Vida longa e próspera, gostaria de dedicar este agradecimento a todos cientistas, especialmente Alan Turing. Quero aproveitar esta oportunidade para agradecer a todos vocês por dedicarem suas vidas à busca do conhecimento, ao crescimento da ciência e à descoberta do desconhecido. Vocês são verdadeiros heróis que influenciaram as gerações futuras e mudaram o mundo em que vivemos. Expressar minha gratidão especialmente a Alan Turing. Seu brilhantismo e visão vanguardista desempenharam um papel crucial no crescimento da ciência da computação e da inteligência artificial. Seu trabalho inovador serviu de fonte de inspiração para estudiosos, cientistas e engenheiros em todo o mundo. Alan Turing, obrigado por seu notável trabalho em decifrar o código Enigma durante a Segunda Guerra Mundial. Seu desenvolvimento da máquina de Turing, predecessora dos computadores modernos, foi um ponto de virada na história da computação e influenciou a maneira como a guerra era travada. Seu trabalho ousado e inovador estabeleceu as bases para os computadores contemporâneos, iluminando o potencial do intelecto humano.

Além de suas contribuições para o campo da criptografia, Alan Turing foi um pioneiro no estudo da inteligência artificial e na compreensão das ideias subjacentes ao pensamento computacional. Ele nos desafiou a pensar sobre a possibilidade de que as máquinas possam exibir um comportamento inteligente com seu famoso teste de Turing, que foi uma contribuição fundamental para a ciência da inteligência artificial.

A ciência e a tecnologia avançaram significativamente nos últimos anos. Vimos avanços em tudo, desde saúde e energia até comunicação e exploração espacial por causa dos esforços de cientistas como você. Você tem a capacidade de mudar o curso de nossa civilização e melhorar a vida de bilhões de pessoas. Quero oferecer meus sinceros agradecimentos a ele em nome de todos que se beneficiaram e continuarão a se beneficiar de suas descobertas e inovações. Nosso mundo foi iluminado por seus grandes cérebros e devoção inabalável à busca do conhecimento.

Que todos vocês continuem a ultrapassar os limites do conhecimento, lidar com as questões mais complicadas e buscar novas abordagens. Somos todos inspirados por seus esforços e espero que sejam gratos pela enorme influência positiva que tiveram na humanidade. Audaciosamente indo onde nenhum nerd jamais esteve.

REFERÊNCIAS

A. M. TURING, I.—**COMPUTING MACHINERY AND INTELLIGENCE**, *Mind*, Volume LIX, Issue 236, October 1950, Pages 433–460, <https://doi.org/10.1093/mind/LIX.236.433>

BARROS, D. M. V.; GUERREIRO, A. M. **Novos desafios da educação a distância: programação e uso de Chatbots**. *Revista Espaço Pedagógico*, v. 26, n. 2, p. 410–431, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.5335/rep.v26i2.8743>. Acesso em: 12 jun. 2023.

FERNANDES, J. **O que é um programa (software)?**. Portal da UNB, 2002. Disponível em: https://cic.unb.br/~jhcf/MyBooks/iess/Software/oque_ehsoftware.html. Acesso em: 10 jun. 2023.

INSTITUTO FEDERAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE PERNAMBUCO Campus Ipojuca Coordenação de Licenciatura em Química Curso de Licenciatura em Química VIRGINIA MARLENE CORREIA, **APLICAÇÕES EM INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA EDUCAÇÃO, NA QUÍMICA E NO ENSINO DE QUÍMICA: uma Revisão Sistemática de Literatura** Ipojuca, [s.l.: s.n.], 2021.

RODRIGUEZ, G. de la C. L.; BRITO, S. M. V. **La inteligencia artificial en la educacion superior. Oportunidades y amenazas**. *INNOVA Research Journal*, v. 2, n. 8.1, p. 412–422, 15 sep. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.33890/innova.v2.n8.1.2017.399>. Acesso em: 12 jun. 2023.

Turing, AM (1936). **“On computable numbers, with an application to the Entscheidungsproblem”**. In: *Proceedings of the London Mathematical Society* 38.1931, pp. 173–198. url: <http://classes.soe.ucsc.edu/cmcs210/Winter11/Papers/turing-1936.pdf>.