

---

## Editorial

### 5º Anais do Programa de Mestrado Profissional do Instituto de Química da USP

#### Aplicações da Inteligência Artificial na Área da Química

No primeiro semestre de 2024, o Programa de Mestrado Profissional do Instituto de Química da USP ofereceu sua disciplina “MPT6013-Tópicos em Tecnologia Química e Bioquímica” tendo como tema “**As Aplicações da Inteligência Artificial (IA) na Área da Química**”. Vivemos em uma época em que avanços tecnológicos reconfiguram tanto a pesquisa acadêmica quanto a prática profissional. A escolha deste tema reflete o compromisso do programa em promover a formação de profissionais capacitados para atuar em um mercado em constante transformação, ao mesmo tempo em que se mantém em diálogo direto com o ambiente acadêmico.

A natureza do programa oferece uma perspectiva singular sobre a integração entre IA e química. A pluralidade de experiências de seus alunos e alunas — profissionais atuantes em empresas de destaque internacional, mas imersos no ambiente acadêmico do Instituto de Química da USP, instituição reconhecida como a melhor da América Latina e entre as 100 melhores do mundo — enriquece os trabalhos apresentados nestes anais. Essa dinâmica resulta em uma visão integrada entre teoria (ferramentas computacionais) e prática (aplicações em problemas reais na indústria e na academia). Os textos aqui compilados mostram como a IA pode revolucionar a forma como entendemos, aplicamos e desenvolvemos soluções baseadas no conhecimento químico, abrangendo empresas, laboratórios acadêmicos e até questões de importância global.

O presente volume dos Anais reúne artigos que, de forma acessível, apresentam um panorama das contribuições da IA para a química e áreas correlatas, sendo relevante até mesmo para um público que não seja especialista na área.

O primeiro artigo, **“Sinergia entre Aprendizado de Máquina e Dinâmica Molecular para Predição de Propriedades Moleculares: uma Revisão da Literatura”** analisa como a combinação de aprendizado de máquina (ML) com dinâmica molecular (MD) tem reduzido a demanda computacional e ampliado a precisão das simulações, com aplicações na predição de propriedades de biomoléculas, materiais e catálise.

No artigo seguinte, **“Uso da IA na Metodologia Científica”**, discutem-se as ferramentas de IA no contexto acadêmico, evidenciando como modelos avançados, como os de linguagem natural, estão automatizando revisões de literatura e outras tarefas científicas. Esses avanços enfrentam desafios éticos e técnicos, mas também estão redefinindo a forma como a pesquisa é conduzida.

Na sequência temos **“Planejamento Racional de Compósitos Digitais por Impressão 4D”** que apresenta o impacto da manufatura aditiva e da IA na criação de materiais híbridos altamente personalizáveis, com comportamentos responsivos, marcando um avanço na integração da Indústria 4.0 com a ciência dos materiais.

**“Inteligência Artificial Aplicada a Biossensores no Contexto da Segurança Alimentar”**, explora como a IA tem transformado a utilização de biossensores para a detecção de contaminantes e patógenos em alimentos. Algoritmos como SVM e KNN aumentam a precisão, a sensibilidade e a eficiência desses dispositivos, contribuindo significativamente para a segurança alimentar global.

Já o artigo **“Machine Learning na Nanotecnologia”** apresenta como algoritmos de IA estão transformando a síntese de nanopartículas e avaliando sua segurança. Esses avanços têm promovido melhorias em áreas como catálise, medicina e sensores, além de assegurar a minimização de riscos ambientais e à saúde humana.

**“Exemplo de Impacto da IA em Atividade Econômica: Inteligência Artificial para Otimização da Prospeção de Petróleo em Reservatórios”** ilustra como a análise sísmica

auxiliada por IA tem aumentado a eficiência na prospecção de petróleo, reduzindo custos e ampliando a precisão na avaliação de reservas.

Finalmente, um resumo oriundo da pesquisa desenvolvida no IQ está na interface entre tecnologia de materiais e química, o artigo **“Otimização de Conexões Elétricas em Eletrodos Impressos em 3D”** analisa como polímeros condutores impressos podem ser otimizados para aplicações em sensores eletroquímicos, revelando limitações elétricas importantes e estratégias para mitigá-las, reiterando a atualidade dessa temática.

Embora a pesquisa em IA remonte a várias décadas, foi apenas nos últimos anos que suas aplicações práticas atingiram o cidadão comum, profissionais de diversas áreas e os mais variados campos da ciência e tecnologia. A IA não deve ser resumida apenas às ferramentas generativas populares, como *ChatGPT* ou *Gemini*. Cada vez mais, ela deixa de ser apenas uma ferramenta para se tornar uma presença essencial, quase obrigatória, para profissionais do mercado ou da academia que desejam se manter competitivos.

Assim, os temas aqui apresentados não representam apenas avanços científicos, mas também um chamado à integração inevitável da IA à prática profissional. Seja na indústria ou na academia, a familiaridade com essas tecnologias já é uma necessidade no presente, e não mais algo reservado ao futuro.

Que estes Anais inspirem os leitores a abraçar a transformação digital. O progresso não espera, e cabe a nós, enquanto universidade, proporcionar uma formação moderna e integrada, preparando nossos alunos e alunas para manter a química e suas aplicações alinhadas às demandas do século XXI.

São Paulo, 09 de dezembro 2024.

Atualpa A. C. Braga