

Nº 179892

Inteligência artificial e o futuro da pesquisa

Denis Bruno Viríssimo

*Palestra apresentada
CONGRESSO DE MODELAGEM,
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL
E IA DO IPT, 1., 2025, São Paulo.
21 slides.*

A série “Comunicação Técnica” compreende trabalhos elaborados por técnicos do IPT, apresentados em eventos, publicados em revistas especializadas ou quando seu conteúdo apresentar relevância pública.
PROIBIDO A REPRODUÇÃO, APENAS PARA CONSULTA.



INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL E O FUTURO DA PESQUISA

I Congresso de Modelagem, Simulação
Computacional e IA

16.10.25

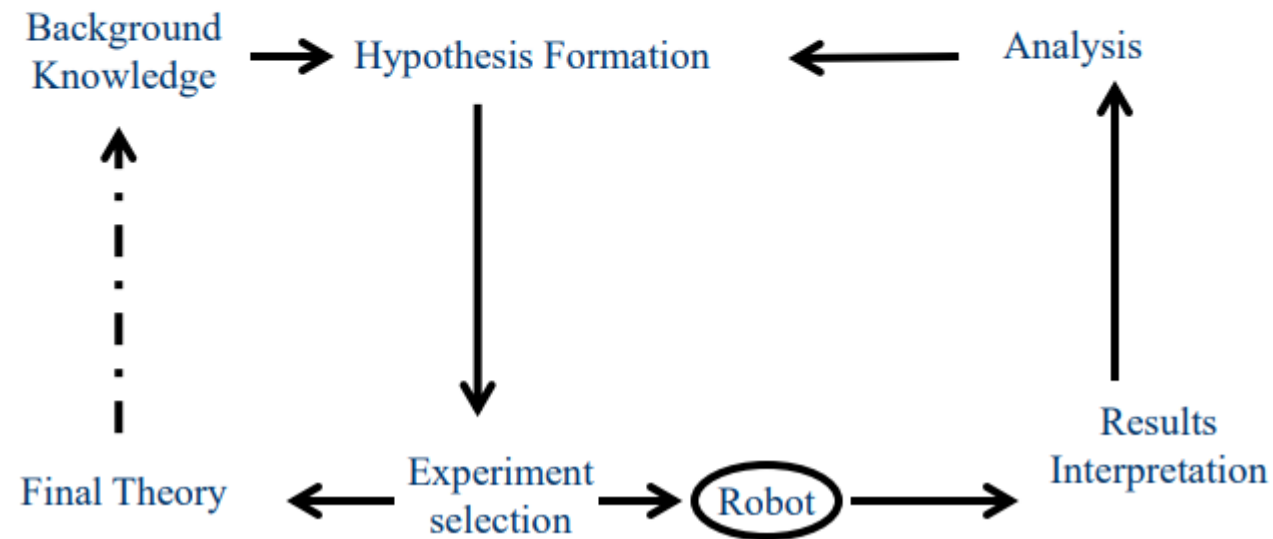
INTRODUÇÃO

- 8% dos artigos na Scopus citam IA no abstract ou Keywords, frente à 2% há 10 anos (segundo a Nature, 2023)
- IA se tornou a “aceleradora do progresso científico”
 - Nobel de Química 2024
- Espalha-se cada vez mais por todos os campos do conhecimento

INTRODUÇÃO

The Concept of a Robot Scientist

Computer system capable of originating its own experiments, physically executing them, interpreting the results, and then repeating the cycle.



King et al. (2009). *The Automation of Science*.

USOS PRINCIPAIS (CONVENCIONAL)



GERAR E PRIORIZAR HIPÓTESES

- Projetar objetos complexos, tais como novas drogas/medicamentos e proteínas
- Predizer comportamentos do tipo “caixa-preta”
- Explorar grandes possibilidades de combinações

PROJETAR EXPERIMENTOS E SIMULAÇÕES

- Busca e definição dos melhores experimentos a serem realizados, incluindo a redução na quantidade dos mesmos
- Simulações de processos complexos de serem implementados fora do ambiente computacional

ANALISAS E INTERPRETAR DADOS

- Avaliar uma grande quantidade de dados de experimentos e de ensaios de modo a interpretar os resultados
- Análise multi-modal de dados para identificação de correlações e padrões de mais complexidade para os pesquisadores

AUTOMATIZAÇÃO DE TAREFAS

- Curadoria de dados
- Revisões sistemáticas
- Automatização da execução de experimentos, incluindo a seleção do próximo experimento a ser realizado

USOS PRINCIPAIS (DISRUPTIVO)

NOVAS CAPACIDADES

- Modelos Fundacionais
- Geometric Deep Learning
- Agentes científicos

HUMAN-AWARE AI

- A pesquisa científica não é um processo abstrato de análise de dados
- Opera com base em um princípio fundamental observado na história da ciência: a maioria das descobertas surge em "vizinhanças de descobertas anteriores", impulsionadas pela "disponibilidade cognitiva" de ideias para os pesquisadores
- Utiliza-se de hipergrafos, que são mapas conceituais do domínio da pesquisa
 - Materiais
 - Características da pesquisa
 - Pesquisadores em si

Sourati e Evans (2023). *Accelerating science with human-aware artificial intelligence*.

HUMAN-AWARE AI

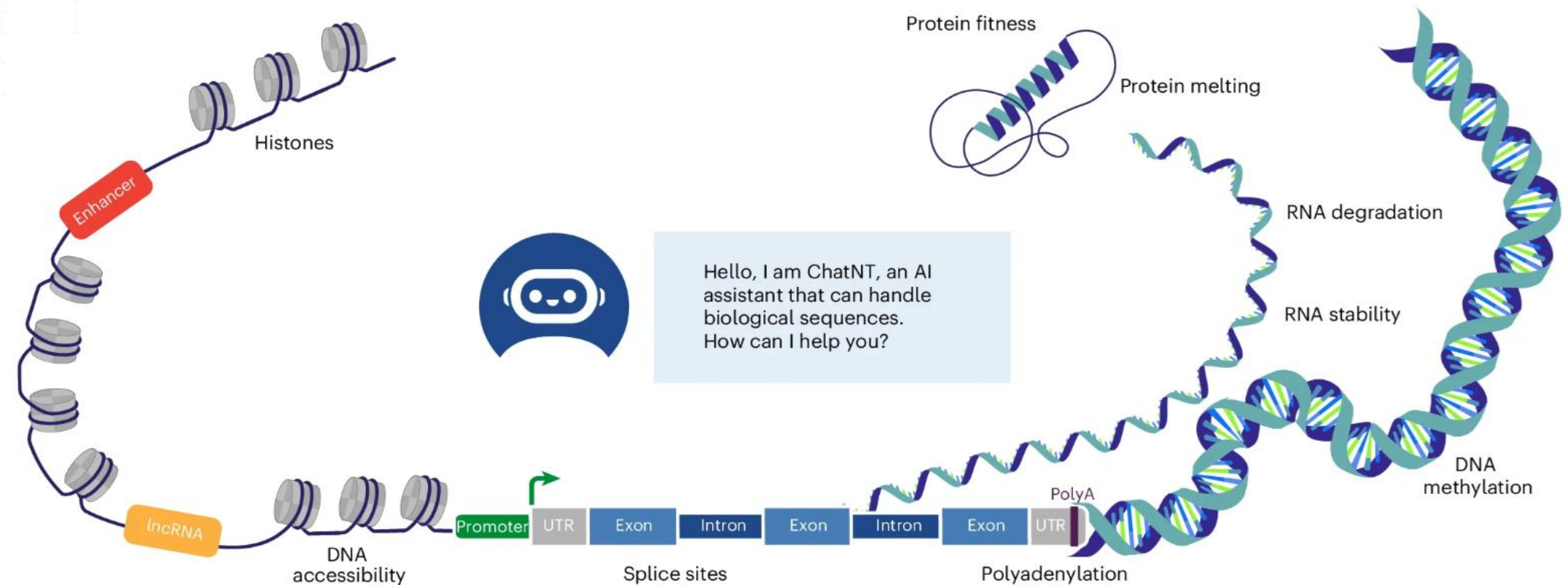
- O modelo simula o fluxo de ideias realizando "caminhadas aleatórias" sobre esse hipergrafo.
- Essas caminhadas modelam efetivamente as combinações de expertise, conexões sociais e experiências de pesquisa que levam às descobertas contemporâneas
- Predição de descobertas futuras superior à modelos somente baseados em conteúdo
 - Geração de “alien hypothesis”

Sourati e Evans (2023). Accelerating science with human-aware artificial intelligence.

EXEMPLOS

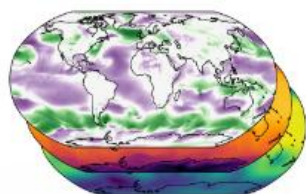
CHATNT

ChatNT, a conversational agent that can be prompted to solve a variety of biological tasks.

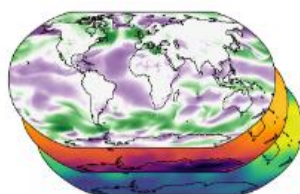


GRAPHCAST E GENCAST

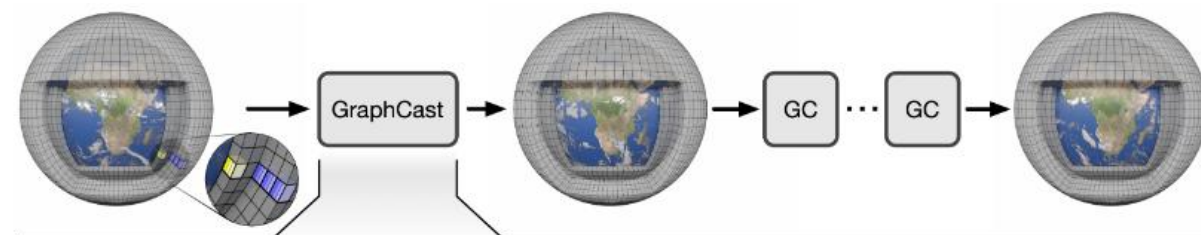
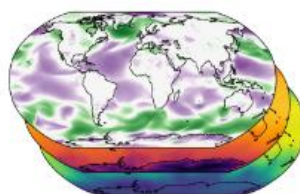
a) Input weather state



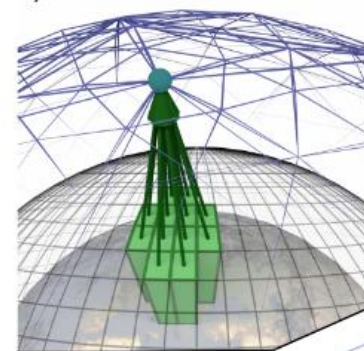
b) Predict the next state



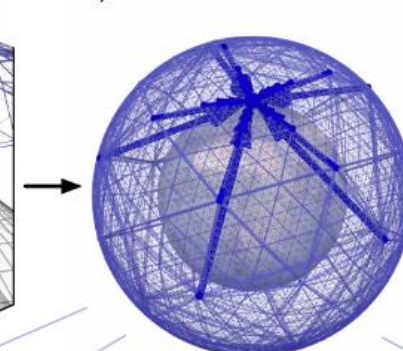
c) Roll out a forecast



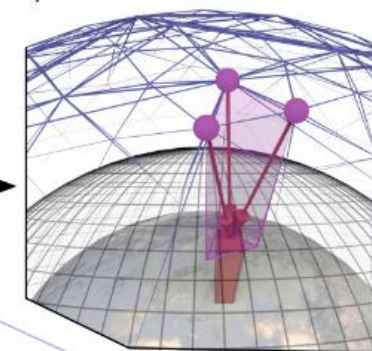
d) Encoder



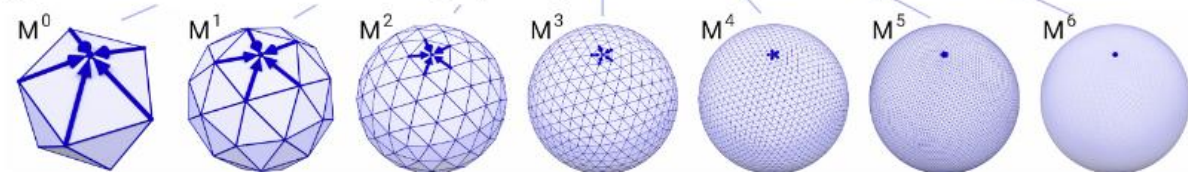
e) Processor



f) Decoder

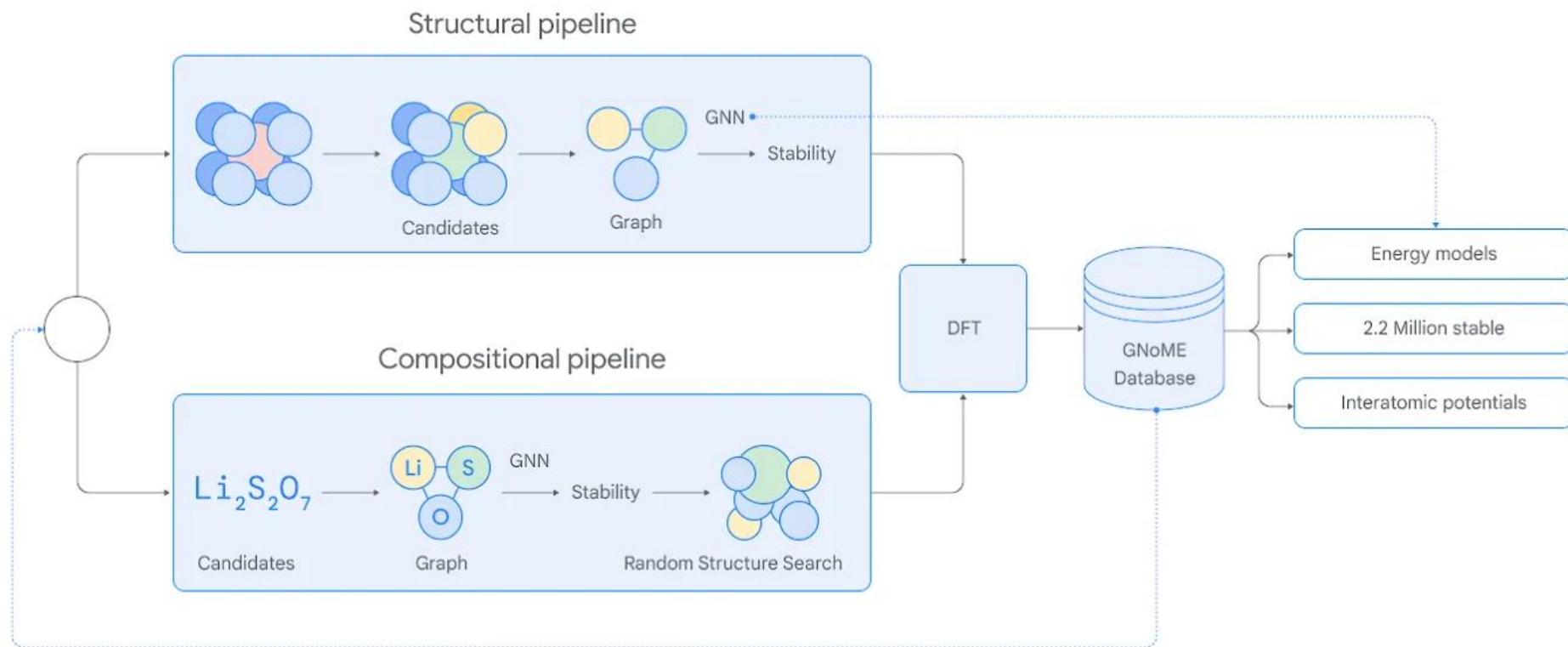


g) Simultaneous multi-mesh message-passing



GNoME

GNoME: Harnessing graph networks for materials exploration



MATERI.A.



- Physics-informed machine learning
- Previsão de propriedades físicas
- Extrapolação de comportamento de materiais e sistemas
- Otimização de processos industriais integrados

Descoberta digital de materiais

Testbed inteligente

- Sensoriamento
- Caracterização inteligente
- DFT e cálculos termodinâmicos
- Design de experimentos (DOE)

Aplicações estendidas para usos inovadores

Processos inteligentes

- Sugestões e previsões de aplicações de novos materiais
- Exploração de novos usos para materiais e processos

- Gêmeos digitais
- Aprendizado ativo
- Aprendizado por reforço
- Integração de processo e propriedades dos materiais

OUTRAS INICIATIVAS



MINE2MINE – INTELIGÊNCIA EM DADOS PARA MINERAÇÃO

Desenvolvimento de competências em Inteligência Artificial aplicada à mineração de dados tecnológicos e científicos, com foco em mineração e metalurgia.



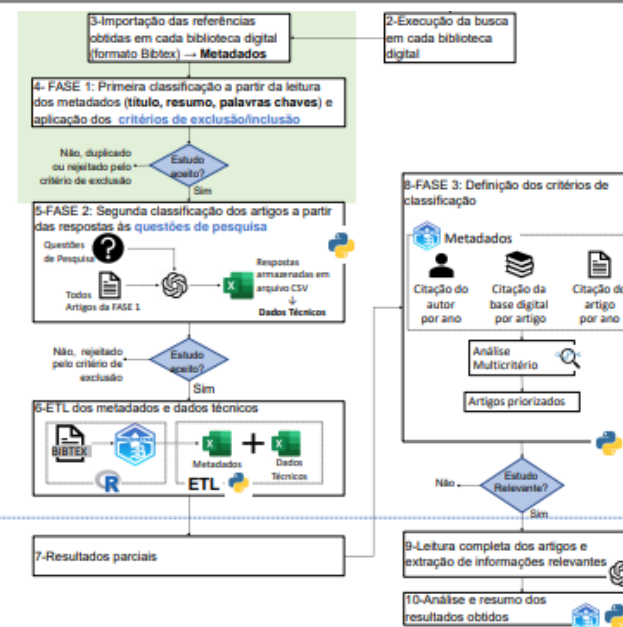
I CONGRESSO DE MODELAGEM, SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL E IPT IA DO IPT

METODOLOGIA INTEGRADA PARA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA APOIADA POR GPT

AF HELENO¹, AC de BRITO¹, HF SAAR¹, TY AOYAGI¹, FS SILLES¹, EM SALES¹, CMF da SILVA¹

¹Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo

Etapa 2:
Condução



Etapa 3:
Relatório

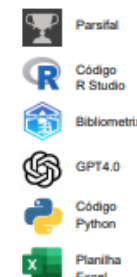


Figura 1: Fluxograma do processo de revisão e integração dos ferramentas digitais.

DESAFIOS

- Reprodutibilidade
- Criatividade e “monocultura” científica
- Qualidade dos dados
- Quantificação da incerteza

CONCLUINDO

- IA já é (e será) cada vez mais uma parte fundamental do processo científico
- A “fronteira” entre as diversas áreas de conhecimento ficará cada vez mais tênue
- Ainda é necessário o desenvolvimento de métodos e padrões que garantam que sistema de IA sejam não só precisos, mas interpretáveis e robustos com os padrões da pesquisa

Obrigado!

Me. Denis Bruno Viríssimo
denisbv@ipt.br



linkedin.com/school/iptsp/



instagram.com/ipt_oficial/



youtube.com/@IPTbr/

www.ipt.br



Linked in

