

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**O USO DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA INDÚSTRIA
QUÍMICA**

Felipe De Antonio Camillo

Trabalho de graduação para a obtenção
de título de bacharel em Engenharia
Química pela Universidade Federal de
São Carlos.

Orientador: Fábio Bentes Freire

SÃO CARLOS
2025

O USO DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NA INDÚSTRIA QUÍMICA

**SÃO CARLOS
2025**

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Fábio Bentes Freire, Universidade Federal de São Carlos

Convidado: Maria do Carmo Ferreira, Universidade Federal de São Carlos

Professor da disciplina: Ruy de Sousa Júnior, DEQ/UFSCar

Trabalho de Graduação apresentado no dia _____ de _____ de _____ perante
a seguinte banca examinadora:

Fábio Bentes Freire

Maria do Carmo Ferreira

Ruy de Sousa Júnior

AGRADECIMENTOS

Este trabalho não representa apenas o encerramento de uma etapa acadêmica, mas também a realização de um sonho construído com esforço, dedicação e, principalmente, com o apoio de muitas pessoas especiais.

Agradeço primeiramente a Deus, por me conceder saúde, sabedoria e força nos momentos mais desafiadores dessa caminhada.

Aos meus pais, Marco e Ana, pelo amor incondicional, suporte para que tudo isso possa ter tornado realidade e por sempre acreditarem em mim. Sem vocês, nada disso seria possível. À minha família, pelo carinho e incentivo em todos os momentos.

Aos meus amigos, Leandro e Murilo, por serem minha família em São Carlos, pessoas que, ao longo dessa jornada, foram essenciais para me ajudar a superar todos os desafios. Agradeço por todos os momentos, pelas risadas, preocupações, companheirismo e por essa amizade que tenho certeza que vai muito além da graduação.

À Hanna, pelo amor e apoio incondicional em todos os momentos, obrigado por me mostrar que sou capaz de superar meus desafios e por ser minha companheira de vida.

Ao meu orientador, Fábio, pela paciência, orientação e valiosas contribuições durante todo o processo de desenvolvimento deste trabalho. Seu conhecimento e comprometimento foram fundamentais para a construção deste trabalho.

Aos professores do curso, que contribuíram imensamente para minha formação acadêmica e pessoal, meu sincero reconhecimento e gratidão.

A todos vocês, o meu mais sincero agradecimento!

RESUMO

Em poucas palavras, a inteligência artificial (IA) pode ser definida como uma área do conhecimento técnico e científico capaz de fazer um sistema executar tarefas comumente associadas a seres inteligentes. É notório o crescimento do número de aplicações da IA na indústria química, as áreas em que é mais comumente encontrada neste setor são pesquisa e desenvolvimento, produção, previsão, planejamento e gerenciamento de risco. A IA é uma tecnologia emergente que tem grande potencial na redução do consumo de energia, encargos ambientais e riscos operacionais dentro da produção química. No entanto, aplicações em larga escala da IA ainda são limitadas. Um dos gargalos ainda é a falta de entendimento quantitativo dos potenciais benefícios e dos riscos de diferentes usos da IA. É grande o interesse da indústria química em usar IA para abordar desafios em modelagem de processos, otimização, controle, detecção e diagnóstico de falhas. Nesse contexto, a IA surge como uma ferramenta aliada para que metas de sustentabilidade ambiental, econômica e social sejam atingidas. Há uma clara e evidente tendência de digitalização em todo o setor produtivo e a IA desempenha um papel essencial para permitir a revolução, ou transição, digital. Pesquisa e desenvolvimento são fundamentais na inovação industrial, especialmente para empresas químicas relacionadas ao desenvolvimento sustentável. Nesse caso, a inteligência artificial é usada para prever e otimizar reações e para melhorar o processo químico de forma holística. Estudos recentes destacaram o potencial da IA no suporte ao desenvolvimento de produtos químicos e de materiais sustentáveis. Além desses aspectos essencialmente técnicos, redes neurais artificiais podem ser usadas para avaliar e melhorar a satisfação no trabalho em laboratórios de pesquisa. Este Trabalho de Graduação analisou a presença da IA na indústria química, buscando revelar qual é o estado da arte analisando o histórico de evolução da área. A partir de uma revisão criteriosa da literatura disponível, foi feita uma descrição da conjuntura em que a IA pode dar, de fato, uma contribuição relevante para o desenvolvimento tecnológico dentro do setor químico.

Palavras-chave: Inteligência Artificial, IA, Otimização, Controle, Sustentabilidade

ABSTRACT

In brief, Artificial Intelligence (AI) can be defined as a field of technical and scientific knowledge that enables systems to perform tasks typically associated with intelligent beings. The chemical industry has seen a notable increase in the number of AI applications, particularly in areas such as research and development, production, forecasting, planning, and risk management. As an emerging technology, AI holds significant potential to reduce energy consumption, environmental impacts, and operational risks within chemical manufacturing processes. Despite its promise, large-scale AI implementation in the chemical industry remains limited. One of the main barriers is the lack of quantitative understanding regarding the potential benefits and risks associated with various AI applications. Nonetheless, there is considerable interest in leveraging AI to address key challenges in process modeling, optimization, control, fault detection, and diagnostics. In this context, AI emerges as a strategic tool to support the achievement of environmental, economic, and social sustainability goals. The ongoing digital transformation across the industrial sector underscores the essential role of AI in enabling this transition. Research and development play a critical role in driving innovation, particularly for chemical companies focused on sustainable practices. AI is increasingly employed to predict and optimize chemical reactions and to enhance processes from a holistic perspective. Recent studies have emphasized AI's potential to support the development of sustainable chemicals and materials. In addition to its technical applications, artificial neural networks may also be used to assess and enhance job satisfaction within research laboratories. This undergraduate thesis analyzed the presence of artificial intelligence in the chemical industry, aiming to reveal the state of the art by examining the historical evolution of the field. Based on a thorough review of the available literature, it provides a description of the context in which AI can truly make a relevant contribution to technological development within the chemical sector.

Keywords: Artificial Intelligence, AI, Optimization, Control, Sustainability

SUMÁRIO

Banca Examinadora.....	3
Agradecimentos.....	4
Resumo.....	6
Abstract.....	7
Lista de figuras.....	10
Lista de tabelas e quadros.....	11
Nomenclaturas.....	12
1.INTRODUÇÃO.....	13
2. METODOLOGIA E FERRAMENTAS DE PESQUISA.....	15
3. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL E REDES NEURAIAS.....	16
3.1. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL.....	16
3.2. TESTE DE TURING.....	17
3.3. REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS (RNAs).....	18
3.4. TREINAMENTO DAS RNAs.....	21
4. HISTÓRICO DO USO DE IA NA INDÚSTRIA.....	22
4.1. APLICAÇÕES ATUAIS NA INDÚSTRIA.....	23
4.1.1. GESTÃO DA CADEIA DE SUPRIMENTOS.....	23
4.1.2. PREVISÃO DAS PROPRIEDADES DE PRODUTOS.....	24
4.1.3. PESQUISA E DESENVOLVIMENTO (P&D).....	25
4.1.4. ANÁLISE DE DADOS NA PRODUÇÃO.....	25
4.1.5. CONTROLE DE QUALIDADE.....	25
4.1.6. OPERAÇÕES UNITÁRIAS.....	26
4.1.7. MELHORIAS E CONTROLE DE PROCESSOS.....	27
4.1.8. GÊMEOS DIGITAIS.....	28
5. RISCOS E OPORTUNIDADES.....	29
6. ANÁLISE DA LITERATURA.....	33

6.1. HISTÓRICO DE PUBLICAÇÕES DE TRABALHOS POR ANO.....	33
6.2. PUBLICAÇÕES POR ÁREA DE CONHECIMENTO.....	35
6.3. PUBLICAÇÕES POR PAÍSES.....	36
6.4. USO DE RNAs EM SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS.....	38
7. CONCLUSÃO.....	39
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	41

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.	Representação do Teste de Turing.....	18
Figura 2.	Estrutura da rede neural.....	19
Figura 3.	Número de publicações por ano para “artificial intelligence”.....	34
Figura 4.	Número de publicações por ano para “artificial intelligence industry”....	34
Figura 5.	Comparativo de publicações por ano.....	35
Figura 6.	Publicações por área de estudo.....	36
Figura 7.	Publicações por países.....	37

LISTA DE TABELAS E QUADROS

Quadro 1.	Riscos associados aos 5 estágios de implementação da IA.....	32
Quadro 2.	RNAs em sistemas de processos químicos.....	38

NOMENCLATURAS

Abreviações

IA	Inteligência artificial
RNAs	Redes neurais artificiais
IBM	International Business Machines Corporation
ReLU	Unidade linear retificada
OCDE	Organização para cooperação e desenvolvimento econômico
LAMBDA	<i>Light Attention-Mixed-Base Deep Learning Architecture</i>

1. INTRODUÇÃO

A inteligência artificial (IA) está desempenhando um papel transformador em diversos setores da economia global, em especial na indústria química. Sua capacidade de processar grandes volumes de dados, identificar padrões e tomar decisões com base em algoritmos avançados tem permitido otimizar operações, reduzir custos, melhorar a qualidade dos produtos e promover práticas mais sustentáveis (World Economic Forum, 2017; Hajjar et al., 2016). Esses avanços estão diretamente ligados ao contexto da quarta revolução industrial, que tem na digitalização e na automação seus pilares principais.

De acordo com uma pesquisa realizada pela IBM (International Business Machines Corporation), mais de 80% dos gerentes da indústria química acreditam que a IA terá um impacto significativo em seus negócios nos próximos três anos. As principais áreas em que a IA já está sendo implementada incluem pesquisa e desenvolvimento (74%), produção (61%), previsão e planejamento (47%) e gerenciamento de riscos (58%) (Lin et al., 2020). Tais aplicações refletem o amadurecimento tecnológico do setor e o reconhecimento da IA como um instrumento estratégico para a competitividade industrial.

A digitalização da indústria química, por sua vez, é amplamente vista como inevitável. Um levantamento feito pela Accenture aponta que 94% dos profissionais da área esperam pela digitalização total do setor, com a IA desempenhando papel fundamental nessa transição (Accenture, 2014). Nesse sentido, o Fórum Econômico Mundial destaca que tecnologias emergentes, como IA, aprendizado de máquina e Internet das Coisas (IoT), estão remodelando as cadeias produtivas globais ao promover maior conectividade, automação e integração entre sistemas (World Economic Forum, 2017).

Os benefícios da IA são amplamente reconhecidos: aumento da eficiência operacional, redução de falhas e desperdícios, otimização energética e predição de comportamentos complexos em reações químicas. A IA também pode auxiliar no desenvolvimento de novos produtos, simulação de cenários industriais e controle de qualidade em tempo real (Hajjar et al., 2016). Além disso, tem se mostrado uma aliada importante na detecção precoce de falhas e na análise de riscos, reduzindo assim perdas e incidentes operacionais.

Contudo, os desafios para a adoção plena da IA na indústria são significativos, especialmente em países em desenvolvimento. Conforme apontado por Laska e Karwala

(2020), embora haja um investimento massivo em IA por parte de países desenvolvidos, como Estados Unidos, China, Japão, Coreia do Sul e nações europeias, os países em desenvolvimento enfrentam sérias limitações estruturais, como a má gestão de recursos naturais e humanos, o que dificulta a aplicação de tecnologias de ponta. Essas nações, embora possuam potencial, carecem de políticas públicas eficazes e de capacitação profissional para viabilizar a digitalização industrial.

Adicionalmente, a rápida evolução da IA tem gerado preocupações relacionadas à segurança, ética e impactos sociais. A substituição de funções humanas por sistemas automatizados, embora aumente a eficiência, também levanta questões sobre empregabilidade e desigualdade social. Por isso, torna-se imprescindível que a integração da IA nas indústrias seja acompanhada de estratégias que garantam sua aplicação responsável, sustentável e inclusiva.

Outro ponto relevante refere-se à necessidade de aprofundamento teórico e metodológico na escolha das tecnologias de IA mais adequadas para cada contexto industrial. Laska e Karwala (2020) propõem um modelo conceitual que visa orientar pesquisadores, gestores e desenvolvedores na avaliação e seleção das ferramentas de IA mais sustentáveis e eficazes, considerando os aspectos econômicos, sociais e ambientais de sua implementação.

Em suma, a IA representa não apenas uma tecnologia promissora, mas um vetor estratégico para o futuro das indústrias. Sua aplicação na indústria química já demonstra resultados expressivos e sua tendência de crescimento é inevitável. No entanto, para que seus benefícios sejam amplamente usufruídos, é essencial superar as barreiras técnicas, econômicas e sociais, promovendo uma cooperação internacional robusta e investimentos contínuos em educação, pesquisa e infraestrutura tecnológica. A IA, assim, consolida-se como um elemento-chave na construção de um modelo industrial mais eficiente, inovador e sustentável.

O principal objetivo deste trabalho foi contribuir para o entendimento da crescente relação entre a IA e o setor químico. Para isso, foi necessário mapear o cenário atual de aplicações de IA na indústria química, mostrando não só o impacto da IA nos processos e na inovação, como também, as tendências e tecnologias emergentes.

2. METODOLOGIA E FERRAMENTAS DE PESQUISA

Como o objetivo deste trabalho é ser uma revisão da bibliografia disponível sobre o uso de inteligência artificial na indústria, foi necessário estabelecer uma metodologia de busca para reunir fontes e uma base de dados e informações satisfatórias.

Como ferramenta de busca principal, foi utilizada a Scopus, que é uma base de dados bibliográfica de caráter multidisciplinar mantida pela editora Elsevier. Lançada em 2004, destaca-se como uma das maiores bases de dados científicas atualmente disponíveis, cobrindo literatura das áreas de ciências exatas, biológicas, da saúde, sociais e humanas, além de engenharia e tecnologia (Elsevier, 2024).

Com mais de 25 mil títulos de periódicos indexados, provenientes de mais de 5 mil editoras, a Scopus oferece amplo acesso a artigos revisados por pares, livros, anais de congressos e registros de patentes (Burnham, 2006). Essa abrangência garante à plataforma um papel central em levantamentos bibliográficos, revisões sistemáticas e estudos de mapeamento científico.

Uma das características mais relevantes da Scopus é a disponibilização de métricas bibliométricas detalhadas, como o *h-index*, o CiteScore, o SCImago Journal Rank (SJR) e o SNIP (Source Normalized Impact per Paper), que auxiliam pesquisadores e instituições na avaliação da relevância e impacto de publicações científicas (Falagas et al., 2008). Além disso, a plataforma oferece ferramentas que permitem a análise de tendências de pesquisa, redes de colaboração entre autores e instituições, além de identificação de áreas emergentes do conhecimento.

Outro ponto forte é a atualização constante de seus dados: novos registros são adicionados diariamente, o que garante que o conteúdo esteja sempre alinhado com o estado da arte da produção científica mundial (Elsevier, 2024). Por isso, a Scopus é amplamente utilizada por universidades, centros de pesquisa, agências de fomento e bibliotecas como fonte confiável para atividades acadêmicas e científicas.

Além da Scopus, foi utilizada a base de dados Elicit (Experimental Laboratory for Investigating Collaboration, Information-sharing, and Trust), menos conhecida do que a Scopus, mas com aplicações relevantes, especialmente em estudos de aprendizado de máquina, engenharia do conhecimento e eliciação de requisitos. O Elicit é uma plataforma

desenvolvida pela Ought, projetada para ajudar os usuários a automatizar e otimizar partes do processo de pesquisa através do uso de IA. Ele utiliza modelos de linguagem para encontrar e resumir artigos acadêmicos relevantes, extrair informações importantes (como métodos, tamanhos de amostra e resultados) e, acima de tudo, auxiliar em revisões de literatura.

O diferencial dessa base está na sua estrutura voltada para o estudo de processos cognitivos e sociais em contextos simulados. A partir das interações dos usuários, são gerados dados ricos em informações sobre fluxos de comunicação, confiança, distribuição de conhecimento e desempenho coletivo, sendo extremamente úteis para a validação de algoritmos de inteligência coletiva, redes neurais sociais e modelos de aprendizado distribuído (Dekker, 2009).

Em ambas as bases, as buscas foram realizadas por meio de palavras chaves em inglês, visto que são bases internacionais, como “Artificial Intelligence”; “Artificial Intelligence in the Chemical Industry”; “AI Chemical Industry”; “Artificial Intelligence Industry”.

3. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL E REDES NEURAIAS

3.1. INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

A inteligência artificial (IA) é definida como a inteligência demonstrada por uma entidade artificial para resolver problemas complexos, sendo, em geral, representada por um computador ou uma máquina (LUDGER, 2009). Trata-se de uma área que integra conhecimentos da ciência da computação com aspectos fisiológicos e cognitivos. De maneira simples, pode-se dizer que inteligência é a parte computacional da capacidade de atingir metas no mundo. Envolve habilidades como pensar, imaginar, criar, memorizar, compreender, reconhecer padrões, tomar decisões, adaptar-se a mudanças e aprender com a experiência.

A IA, portanto, preocupa-se em fazer com que os computadores se comportem de maneira semelhante aos seres humanos. O objetivo é resolver problemas complexos de forma mais rápida e eficaz do que os próprios humanos poderiam, o que justifica o uso do termo "inteligência artificial" (JHA, 2005). Assim, a IA busca não apenas imitar a inteligência humana, mas superá-la em determinadas tarefas específicas, como análise de grandes volumes de dados, reconhecimento de padrões e tomada de decisão com base em algoritmos.

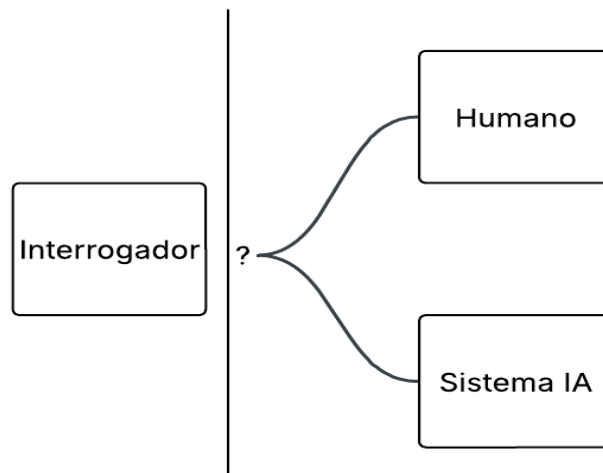
Do ponto de vista filosófico, a inteligência artificial pode ser dividida em duas categorias principais: a IA forte e a IA fraca. A IA forte pretende reproduzir integralmente a cognição humana, criando sistemas que não apenas simulem o comportamento inteligente, mas também possuam consciência e compreensão profunda. Já a IA fraca, por outro lado, busca apenas simular comportamentos inteligentes sem necessariamente ter uma representação completa da mente humana, focando na resolução prática de tarefas específicas (JHA, 2005).

A relevância da IA no contexto contemporâneo é evidente, uma vez que ela permeia diversas áreas da sociedade, desde a automação industrial até os sistemas de recomendação, diagnóstico médico e veículos autônomos. O desenvolvimento contínuo dessa tecnologia tem o potencial de transformar a forma como vivemos e interagimos com o mundo, tornando essencial a compreensão de suas bases conceituais, aplicações e implicações éticas.

3.2. TESTE DE TURING

O Teste de Turing é uma avaliação proposta para determinar a capacidade de uma máquina em demonstrar um comportamento inteligente. Esse teste foi introduzido por Alan Turing em seu artigo seminal de 1950, intitulado *Computing Machinery and Intelligence*. A questão central levantada por Turing foi: "As máquinas podem pensar?" A metodologia do teste consiste em uma conversa em linguagem natural entre um juiz humano, um ser humano e uma máquina. Todos os participantes são mantidos em locais isolados. O objetivo da máquina é se passar por humana, enquanto o juiz deve determinar qual dos dois interlocutores é, de fato, o ser humano. A conversa é restrita a um canal textual, como teclado e tela de computador, para garantir que o julgamento seja baseado na cognição e não em características vocais ou físicas. Se um número significativo de avaliadores não conseguir distinguir com precisão a máquina do ser humano, conclui-se que a máquina "pensa", tendo, portanto, passado no teste (COWEN; DAWSON, 2009). A representação do teste de Turing pode ser representada pela Figura 1.

Figura 1. Representação do Teste de Turing



Fonte: Adaptado de KUMAR; THAKUR (2012).

3.3. REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS (RNAs)

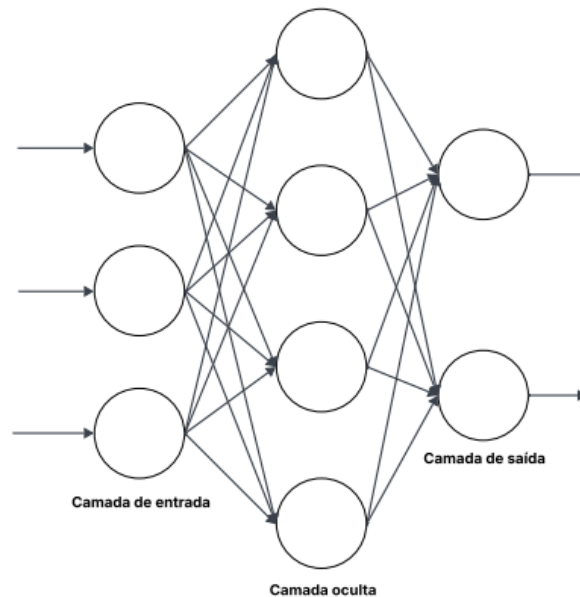
As redes neurais artificiais (RNAs) são sistemas computacionais inspirados na estrutura e funcionamento do sistema nervoso biológico, desenvolvidas para realizar tarefas complexas de reconhecimento, aprendizado e processamento de informações. A origem do interesse por RNAs remonta ao trabalho pioneiro de McCulloch e Pitts (1943), que propuseram modelos simplificados de neurônios artificiais, conhecidos como modelos conexionistas, marcando o início da inteligência computacional inspirada na neurobiologia (Abraham, 2006).

Uma RNA consiste em uma coleção de unidades simples, chamadas neurônios artificiais, que possuem uma pequena memória local e operam de forma distribuída e paralela. Essas unidades recebem sinais de entrada, realizam operações matemáticas simples, como somar os sinais ponderados, e produzem uma saída que é transmitida para outros neurônios na rede por meio de conexões unidirecionais (Jha, 2005). A regra que determina como o sinal de saída é calculado a partir dos sinais recebidos é denominada função de ativação, que pode variar desde funções lineares até funções não-lineares, como a sigmóide ou ReLU (unidade linear retificada), sendo fundamental para o desempenho da rede (Zhou, 2007).

A arquitetura de uma RNA geralmente envolve três camadas principais: a camada de entrada, que recebe os dados do mundo externo; uma ou mais camadas ocultas, responsáveis

pelo processamento intermediário e extração de características; e a camada de saída, que fornece a resposta final da rede (Nielsen, 2001). O conhecimento adquirido pela rede é armazenado nos pesos sinápticos das conexões entre neurônios, os quais são ajustados durante o processo de treinamento para minimizar o erro entre a saída produzida e a saída desejada (Zurada, 2006).

Figura 2. Estrutura da rede neural



Fonte: Adaptado de KUMAR; THAKUR (2012).

O algoritmo de retropropagação (backpropagation) é um dos métodos mais utilizados para treinar redes neurais multicamadas. Ele calcula o erro da saída e o propaga para trás pela rede, ajustando iterativamente os pesos sinápticos para melhorar a precisão do modelo (Zurada, 2006). Esse processo permite que as RNAs aprendam a reconhecer padrões complexos em dados, tornando-as adequadas para diversas aplicações, desde reconhecimento de voz e imagem até diagnósticos médicos.

Atualmente, os avanços tecnológicos têm possibilitado a criação de redes neurais baseadas em hardware de silício que mimetizam a estrutura e funcionamento do cérebro humano, o que pode acelerar o processamento e ampliar a capacidade de aprendizado dessas redes (Jha, 2005). A principal vantagem das RNAs é sua habilidade de generalização, que permite reconhecer padrões mesmo em dados previamente desconhecidos, imitando assim a capacidade cognitiva humana (Abraham, 2006).

Além disso, as arquiteturas de *deep learning* (aprendizado profundo) consistem em modelos de redes neurais artificiais compostos por múltiplas camadas que aprendem automaticamente representações hierárquicas dos dados, o que possibilita a extração de características complexas sem a necessidade de intervenção humana direta (LeCun et al., 2015). Essas arquiteturas são fundamentais para o avanço da inteligência artificial em áreas que demandam processamento intensivo e análise de dados multidimensionais, como as aplicações nas indústrias químicas.

Entre as principais arquiteturas destacam-se:

- Redes Neurais Feedforward: são a estrutura mais simples, onde os dados fluem em uma única direção, da camada de entrada até a camada de saída, sem ciclos ou conexões recorrentes. Essas redes são amplamente utilizadas como base para modelos mais complexos e realizam tarefas de classificação e regressão em diferentes contextos (Goodfellow et al., 2016).
- Redes Neurais Convolucionais: especializadas no processamento de dados com estrutura espacial, como imagens, essas redes aplicam filtros convolucionais para capturar características locais e hierárquicas, permitindo o reconhecimento preciso de padrões visuais. Essa arquitetura é amplamente adotada em visão computacional, incluindo inspeção de qualidade na indústria química e controle automatizado de processos (Zhang & Zhao, 2017).
- Redes Neurais Recorrentes: projetadas para lidar com dados sequenciais, possuem conexões recorrentes que permitem a retenção de informações anteriores, sendo assim aptas para modelar dependências temporais em séries temporais, processamento de linguagem natural e monitoramento dinâmico de processos industriais (Lipton, 2015).

Essas arquiteturas vêm sendo constantemente aprimoradas para lidar com os desafios da indústria 4.0, como a modelagem preditiva, controle em tempo real e otimização de processos químicos, permitindo uma transformação digital efetiva que resulta em maior eficiência, redução de custos e melhoria da qualidade dos produtos (LeCun et al., 2015; Zhang & Zhao, 2017).

3.4. TREINAMENTO DAS RNAs

O aprendizado supervisionado é um método no qual tanto as entradas quanto as saídas correspondentes são fornecidas à rede neural. Durante o processo, são calculados os erros ou discrepâncias entre a resposta desejada e a resposta real para cada nó na camada de saída. Esses erros são utilizados para determinar as alterações nos pesos da rede, seguindo uma regra de aprendizado previamente estabelecida. O termo “supervisionado” deriva do fato de que os sinais desejados para os nós de saída são fornecidos por um “professor” externo, que orienta o treinamento da rede. Exemplos clássicos desse tipo de aprendizado incluem a regra delta e a regra do perceptron, que ajustam os parâmetros da rede para minimizar os erros apresentados (Fausett, 1996).

Por outro lado, o aprendizado não supervisionado ocorre na ausência de um professor externo. Nesse caso, o processo é baseado em técnicas de agrupamento (clustering), onde os padrões de entrada são organizados em diferentes classes ou grupos conforme suas similaridades. Esse tipo de aprendizado é também conhecido como auto-organização, pois a rede descobre sozinha a estrutura dos dados sem receber instruções explícitas. Exemplos notórios desse aprendizado são a regra de Hebb e a regra de aprendizado competitivo. Acredita-se que o aprendizado não supervisionado seja mais prevalente no funcionamento do cérebro humano do que o aprendizado supervisionado, devido à sua capacidade de lidar com dados não rotulados e identificar padrões intrínsecos (Fausett, 1996).

Além desses, existe o aprendizado por reforço, que combina elementos dos dois tipos anteriores. O aprendizado por reforço envolve aprender a mapear situações para ações que maximizem uma recompensa numérica. Nesse modelo, a rede recebe um reforço positivo (recompensa) para saídas corretas e um reforço negativo (penalidade) para saídas incorretas. Também chamado de “aprendizado com um crítico”, esse método não depende de um professor que forneça diretamente as saídas desejadas, mas sim de um sistema que avalia o desempenho e guia o processo de aprendizado. O aprendizado por reforço é amplamente utilizado em sistemas onde a interação contínua com o ambiente é fundamental, como em robótica e jogos (Sutton; Barto, 1999).

Para a ativação da rede, realiza-se uma operação matemática sobre a saída do neurônio. A escolha da função de ativação depende do tipo de problema que a rede neural deve resolver, sendo que existem três tipos principais de funções de ativação. A primeira

delas é a função limiar (threshold), que assume o valor 0 caso a soma das entradas seja inferior a um determinado valor de limiar, e o valor 1 quando a soma for igual ou superior a esse limiar. Esse tipo de função é amplamente utilizado em modelos simples de neurônios binários, onde a saída é decidida por uma condição de ativação rígida.

Em segundo lugar, existe a função linear por partes (piecewise-linear), que pode assumir valores intermediários entre 0 e 1, dependendo do fator de amplificação dentro de uma certa região de operação linear. Essa função permite uma transição gradual entre os estados de ativação, oferecendo maior flexibilidade e suavidade na resposta da rede.

Por fim, a função sigmoide é muito utilizada devido à sua capacidade de mapear a saída em um intervalo contínuo, geralmente entre 0 e 1. Em alguns casos, também é útil utilizar a variação que mapeia para o intervalo entre -1 e 1, como é o caso da função tangente hiperbólica, que é um exemplo clássico de função sigmoide. Essa característica é importante para modelos que precisam de uma resposta diferenciável e contínua, facilitando o treinamento da rede através de métodos baseados em gradiente (BAJPAI; JAIN; JAIN, 2011).

4. HISTÓRICO DO USO DE IA NA INDÚSTRIA

O setor industrial exerce um papel essencial na economia global a longo prazo. Em 2022, o mercado global de produtos químicos foi avaliado em 616 bilhões de dólares, com uma previsão de crescimento anual de 5,1% até 2030. No entanto, eventos recentes como a pandemia da Covid-19 e tensões geopolíticas impactaram negativamente esse setor, ocasionando instabilidade nos preços da energia, aumento dos custos de produção, paralisação temporária de fábricas e interrupções na cadeia de valor (Market Analysis Report, 2022).

Além de sua contribuição direta, a indústria promove o crescimento de outros setores econômicos e gera empregos. Um setor industrial robusto é fundamental para manter a segurança econômica em períodos de crise, como ressaltado pelo Ministério do Desenvolvimento e Tecnologia.

Diante das mudanças climáticas, econômicas e sociais, as empresas têm investido na aquisição e implementação de inovações para enfrentar desafios emergentes. Segundo um relatório da Innogy (2019), três megatendências moldarão o futuro do setor industrial: transformações digitais, climáticas e organizacionais. A transformação digital, em especial, é

vista como uma exigência vital para a sobrevivência das empresas químicas no mercado atual (Matt, Hess & Benlian, 2015).

Devido à sua natureza, a indústria química já possui um alto grau de automação. Nesse contexto, a inteligência artificial (IA) tem ganhado destaque como uma das tecnologias mais promissoras. De acordo com a OCDE, a IA é um sistema baseado em máquinas que interage com o ambiente, fazendo recomendações e previsões a partir de dados de entrada provenientes de máquinas e humanos (OECD, 2018).

Relatórios da Comissão Europeia definem IA como sistemas de software desenvolvidos por humanos que operam em ambientes físicos ou digitais para coletar e analisar dados com o objetivo de prever ações necessárias para alcançar metas. Entre os campos abrangidos pela IA estão o aprendizado de máquina (machine learning), o raciocínio automatizado (planejamento, otimização, implementação do conhecimento) e a robótica (sensores, controle, percepção, atuadores e integração com sistemas ciberfísicos). Na prática, a construção de sistemas de IA ocorre majoritariamente por meio do aprendizado de máquina, onde dispositivos inteligentes utilizam redes neurais para encontrar padrões e processar dados de forma semelhante ao cérebro humano.

Dada sua versatilidade e potencial, a IA tem se mostrado indispensável para o setor químico, com aplicações em diversas etapas da produção.

4.1. APLICAÇÕES ATUAIS NA INDÚSTRIA

4.1.1. GESTÃO DA CADEIA DE SUPRIMENTOS

Sistemas tradicionais de previsão são sobrecarregados pelo volume de dados disponíveis na internet. Algoritmos de IA analisam grandes quantidades de dados para prever a demanda por produtos específicos, permitindo que as empresas ajustem o planejamento da produção e aumentem a eficiência de custos. Além disso, a IA pode coletar dados em pontos de venda para prever a demanda do consumidor e reduzir o desperdício de produtos com baixa procura. Organizações como Blue Yonder promovem técnicas de IA e aprendizado de máquina para otimizar previsão e reposição de estoque, podendo também ajustar preços simultaneamente.

A cadeia de suprimentos é uma rede integrada em que diferentes entidades, como fornecedores, fabricantes e distribuidores, colaboram para transformar matérias-primas em

produtos acabados e entregá-los aos clientes (BEAMON, 1998). A IA tem sido utilizada para apoiar o design, planejamento e otimização das cadeias de suprimentos químicas, considerando aspectos ambientais e econômicos, por meio de algoritmos genéticos (BERNING et al., 2004; GUILLÉN et al., 2006) e heurísticos (POZO et al., 2012). Alguns estudos focaram na seleção de fornecedores, como o raciocínio baseado em casos (ZHAO; YU, 2011), enquanto outros aplicaram técnicas de IA para prever e gerenciar eventos disruptivos, como modelagem baseada em agentes (BEHDANI et al., 2009, 2012, 2019; EHLEN et al., 2014). Pesquisas anteriores também incluíram IA em técnicas tradicionais para cadeias de suprimentos de materiais renováveis, como biomassa (CASTILLO-VILLAR, 2014; GHADERI et al., 2016; LAN et al., 2019).

4.1.2. PREVISÃO DAS PROPRIEDADES DE PRODUTOS

A empresa japonesa Mitsui Chemicals implementou tecnologia para prever a qualidade dos gases de reação, realizando análise em tempo real de 51 fatores diferentes, incluindo condições do reator e parâmetros do processo. Essa tecnologia aumentou a precisão dos sinais de reação, resultando em operações mais seguras e estáveis nas plantas químicas. No futuro, gestores poderão usar aprendizado profundo para analisar grandes volumes de dados em tempo real, melhorando a precisão das previsões e controle, especialmente durante processos de partida e modificações para aumentar a produção. A ferramenta também proporcionará maior transparência na avaliação das condições das máquinas e componentes, além de aprimorar a gestão de riscos. Ferramentas baseadas em IA possibilitam continuidade produtiva ao prever falhas e necessidades de manutenção com maior precisão (MITSUI CHEMICALS, 2021).

A BASF adotou solução semelhante, assinando em agosto de 2019 um acordo com a Technische Universität Berlin para desenvolver novos modelos matemáticos e algoritmos relacionados à química de processos e química quântica.

A Kebotix, plataforma americana que otimiza a produção de novos químicos e materiais usando IA e robótica, anunciou colaboração estratégica com a empresa holandesa SCM, especializada em métodos precisos de previsão de propriedades por modelagem atômica.

A IA também é aplicada na criação de novos produtos. A Pfizer usa IA para identificar opções de tratamento mais precisas, combinando IA e análise de dados com

informações reais, acelerando o tempo de pesquisa química (KANTIFY, 2023). Como essas tecnologias ainda estão em fase de pesquisa, espera-se que novos benefícios e aplicações surjam nos próximos anos na indústria química.

4.1.3. PESQUISA E DESENVOLVIMENTO (P&D)

A IA desempenha um papel crucial nos processos de pesquisa, desenvolvimento e produção na indústria química, especialmente em empresas focadas no desenvolvimento sustentável (HÁJEK; STEJSKAL, 2018). A IA é empregada para prever e otimizar reações químicas, aprimorar o design de sínteses e apoiar a triagem e o desenvolvimento de catalisadores (MARCOU et al., 2015; MOHAMMADI; PENLIDIS, 2018; SEGLER et al., 2018; LI et al., 2017; ZAHRT et al., 2019). Além disso, a IA auxilia no desenvolvimento de materiais sustentáveis e pode melhorar aspectos organizacionais, como a satisfação no trabalho em laboratórios (DOAN et al., 2020; GU et al., 2019; AZADEH et al., 2015)

4.1.4. ANÁLISE DE DADOS NA PRODUÇÃO

No âmbito da produção, modelos de aprendizado de máquina e IA possibilitam previsões mais precisas da demanda e da quantidade de matérias-primas, reduzindo erros em até 50% comparado a previsões humanas, o que contribui para uma cadeia de suprimentos mais eficiente (MCKINSEY, 2017). A análise inteligente de dados facilita o monitoramento do cumprimento de normas ambientais e regulatórias, além de permitir a identificação rápida de defeitos na produção, acelerando a resolução de problemas.

4.1.5. CONTROLE DE QUALIDADE

A garantia da qualidade é um dos pilares fundamentais da indústria química, sendo essencial para assegurar a conformidade dos produtos com normas técnicas, evitar prejuízos econômicos e garantir a segurança operacional. Com os avanços da Indústria 4.0, a inteligência artificial tem revolucionado os sistemas de controle de qualidade, especialmente por meio da aplicação de algoritmos de *deep learning* em sistemas de visão computacional. Essas soluções permitem a inspeção automatizada e em tempo real de produtos e processos, identificando falhas mínimas, como imperfeições visuais, desvios de cor, textura ou forma, que poderiam passar despercebidas em inspeções convencionais (ZHANG; ZHAO, 2017).

Além disso, tais sistemas podem ser continuamente treinados com novos dados, aprimorando sua acurácia e adaptabilidade às variações naturais do processo produtivo. O uso de arquiteturas de redes neurais profundas, como convolucionais (*CNNs*) e modelos atencionais, tem demonstrado elevada eficácia na detecção e classificação de não conformidades, permitindo ações corretivas imediatas e evitando paradas inesperadas nas linhas de produção (LI et al., 2023). A integração da IA com sensores industriais, plataformas de dados e gêmeos digitais, permite uma simulação contínua do desempenho real da planta, facilitando a identificação preditiva de falhas e a otimização do processo de controle de qualidade (LIU; BAO; ZHENG, 2023).

Entretanto, a adoção de IA para o controle de qualidade ainda enfrenta importantes desafios. Um deles é o viés algorítmico, que pode surgir devido à qualidade ou à limitação dos dados de treinamento, comprometendo a imparcialidade e a confiabilidade dos modelos. Esse risco é particularmente crítico em ambientes industriais altamente regulados, nos quais decisões baseadas em IA podem ter implicações diretas na segurança e no cumprimento de requisitos legais. Além disso, a integração efetiva com os sistemas legados da indústria e a formação de equipes técnicas capazes de interpretar os resultados gerados pelos modelos de IA também representam barreiras relevantes (BISHNU et al., 2023).

Mesmo diante desses desafios, a tendência é de crescimento contínuo no uso da IA para controle de qualidade, impulsionado por benefícios como a redução de perdas, o aumento da confiabilidade dos produtos e a possibilidade de rastreabilidade digital de lotes, um fator crítico em processos que envolvem substâncias perigosas ou regulamentadas.

4.1.6. OPERAÇÕES UNITÁRIAS

As operações unitárias, como síntese química e separação, são etapas fundamentais dos processos químicos (GREEN; PERRY, 2008). A inteligência artificial (IA) tem sido aplicada para melhorar o desempenho de operações unitárias específicas, como a combustão (ZHENG et al., 2009; ZHOU et al., 2005), destilação (OCHOA-ESTOPIER et al., 2013; OSUOLALE; ZHANG, 2016, 2017), evaporação (VERMA et al., 2017), compressão (QI et al., 2018) e reações químicas (FERNANDES, 2006; MOSAVI et al., 2019; SCHWEIDTMANN et al., 2018).

Essas aplicações da IA se dividem em dois grandes focos:

- Indicadores técnicos de desempenho, como o rendimento das reações (FERNANDES, 2006; GENG et al., 2016; KEYVANLOO et al., 2012; SCHWEIDTMANN et al., 2018);
- Desempenho relacionado a riscos, como segurança operacional e estabilidade dos processos (GUO et al., 2009; JADERI et al., 2019; QI et al., 2018).

Além disso, a IA também tem sido utilizada no controle inteligente das operações unitárias, com foco em automação e resposta adaptativa (JI et al., 2016).

4.1.7. MELHORIAS E CONTROLE DE PROCESSOS

A inteligência artificial tem sido explorada na engenharia de sistemas de processos há décadas (LEE et al., 2018), com aplicações iniciais nos anos 1990 voltadas ao controle de processos (NAIDU et al., 1990; SAINT-DONAT et al., 1991; YDSTIE, 1990).

Mais recentemente, novas técnicas de IA, como redes neurais profundas, redes neurais convolucionais e aprendizado por transferência, vêm sendo utilizadas para resolver problemas complexos de controle em plantas químicas (WU; ZHAO, 2018, 2020; ZHANG; ZHAO, 2017), que apresentam desafios superiores aos enfrentados nos anos 1990 (LUO et al., 2015; SAHEBJAMNIA et al., 2016).

Estudos também demonstram que a IA tem sido integrada a métodos de avaliação de riscos, com o objetivo de aprimorar a gestão de riscos em instalações químicas (AQLAN; MUSTAFA ALI, 2014; GUO et al., 2019; LAVASANI et al., 2015; YAZDI; KABIR, 2017).

Outra aplicação relevante está no projeto de processos químicos e plantas industriais, diretamente relacionada à qualidade, ao custo e ao impacto ambiental dos produtos (CECCHINI et al., 2012; NEGNY et al., 2012; STÉPHANE et al., 2010).

Estudos adicionais exploram o potencial da IA no ecodesign de processos químicos (ROBLES et al., 2009; FERRER et al., 2012; NEGNY et al., 2012) e na avaliação de fatores humanos nas plantas químicas, como saúde, segurança, meio ambiente e ergonomia, conhecidos como fatores HSEE (AZADEH et al., 2013; AZADEH; ZARRIN, 2016).

4.1.8. GÊMEOS DIGITAIS

Com a crescente complexidade e demanda por precisão na indústria química, tecnologias tradicionais de controle de qualidade têm se mostrado insuficientes para lidar com desafios como baixa rastreabilidade, atrasos no controle e imprevisibilidade de falhas.

A tecnologia de *digital twin* (gêmeo digital) são representações virtuais de processos, produtos ou sistemas físicos que permitem simulação, monitoramento e otimização em tempo real. Eles integram dados operacionais com modelos computacionais, auxiliando na tomada de decisões (GRIEVES; VICKERS, 2017; LIU et al., 2023). Esta tecnologia vem ganhando destaque como uma solução de alto desempenho capaz de representar, simular e otimizar processos dinâmicos em tempo real por meio de modelos digitais de alta fidelidade (LIU; BAO; ZHENG, 2023).

A arquitetura *LAMBDA* (Light Attention-Mixed-Base Deep Learning Architecture), desenvolvida por Li et al. (2023), é um exemplo notável de aplicação da inteligência artificial nessa área. Essa arquitetura inovadora integra redes neurais profundas com fundamentos dos processos químicos industriais e é composta por três módulos: o módulo convolucional de múltiplos núcleos, que identifica dinâmicas do processo; o módulo de atenção leve, que corrige desvios causados por perturbações transitórias; e o módulo residual, que reduz interferências nos dados de entrada. O modelo apresenta alta precisão, robustez e capacidade de lidar com múltiplas variáveis de saída, oferecendo vantagens significativas para a modelagem interpretável e o aprendizado multitarefa.

Paralelamente, o grupo de pesquisa dos mesmos autores desenvolveu o algoritmo *CSCA* (*Correlation-Similarity Conjoint Algorithm*), concebido para realizar análises de correlação entre sequências de variáveis com comprimentos desiguais, um desafio persistente na modelagem de processos dinâmicos. Com base neste algoritmo, foi elaborado um modelo de previsão multietapas do tipo *LSTM encoder-decoder*, especificamente aplicado a processos industriais de desetanização. O modelo demonstrou capacidade de prever diversos parâmetros operacionais, aumentando o potencial de controle preditivo e diagnóstico de falhas (LI et al., 2024).

A previsão de múltiplas etapas em tempo real é fundamental para aplicações online na indústria química, pois fornece suporte à tomada de decisões antecipadas. Contudo, as abordagens convencionais baseadas apenas em dados ainda carecem de métodos eficazes

para a análise de correlação entre variáveis complexas, o que reforça a importância da incorporação de modelos híbridos que combinam conhecimento de processos com aprendizado profundo (BAI; ZHAO, 2023).

Além disso, a evolução contínua da indústria inteligente reforça a expectativa de que o amadurecimento do gêmeo digital ocorrerá pela integração de tecnologias como aprendizado profundo, redes neurais recorrentes e análise multivariável. Essa convergência permitirá o monitoramento contínuo, a previsão de longo prazo e a otimização em tempo real dos processos químicos. Espera-se que tais tecnologias desempenhem papel central na transformação digital da indústria, não apenas promovendo operações inteligentes, mas também impulsionando a sustentabilidade, a eficiência energética e a segurança operacional (BISHNU et al., 2023).

Portanto, os avanços representados pela arquitetura LAMBDA, pelo algoritmo CSCA e pela previsão multietapas reforçam a tendência de um futuro industrial cada vez mais orientado por inteligência artificial. A robustez desses modelos e sua capacidade de integração com outras ferramentas de IA sinalizam um novo paradigma para o controle e a automação de processos na engenharia química.

5. RISCOS E OPORTUNIDADES

O uso de inteligência artificial (IA) tem se consolidado como um dos pilares da transição das indústrias químicas para os princípios da Indústria 4.0. Empresas que investem na digitalização e automação de processos passam a ter vantagens competitivas significativas, como a expansão de mercado e o aumento da resiliência frente a oscilações econômicas ou interrupções de cadeia produtiva. A aplicação da IA em processos industriais proporciona, entre outros benefícios, otimização operacional, melhorias na qualidade dos produtos, aumento da eficiência energética e controle mais rigoroso sobre variáveis críticas da produção.

Um dos principais ganhos proporcionados pela IA é a redução de desperdícios e falhas ao longo do processo produtivo, por meio da análise inteligente de causas-raiz e procedimentos de testes automatizados. Esses sistemas permitem controlar de forma precisa parâmetros como temperatura, velocidade de mistura e tempo de processo, assegurando a homogeneidade dos produtos e a padronização dos lotes. Os algoritmos de IA também oferecem flexibilidade às operações industriais, permitindo que as empresas se adaptem a

diferentes variantes de produção sem comprometer a qualidade, ao mesmo tempo em que aumentam a produtividade. Em alguns casos, relatam-se reduções de até 30% nas perdas de eficiência.

A inteligência artificial também atua de forma estratégica na análise do comportamento do consumidor e na previsão de demanda. Ao processar grandes volumes de dados de vendas e comportamento de mercado, os sistemas preditivos conseguem antecipar oscilações na procura por determinados produtos, ajustando a produção de forma proativa. Isso permite reduzir o excesso de estoque e as perdas associadas à obsolescência de produtos, além de aumentar a margem de lucro. Estima-se que as soluções baseadas em IA podem reduzir perdas em vendas e inventário em até 65% e 50%, respectivamente.

No campo da sustentabilidade, a IA tem desempenhado um papel relevante no desenvolvimento de tecnologias que contribuem para a mitigação de impactos ambientais. Suas aplicações incluem o desenvolvimento de modelos climáticos globais mais precisos, sistemas de agricultura de precisão que otimizam o uso de recursos naturais, e redes elétricas inteligentes que promovem um consumo energético mais eficiente. A IA também auxilia diretamente na redução de resíduos industriais, contribuindo com a economia circular e com as metas de sustentabilidade corporativa. Segundo estudo publicado na revista *Nature Communications*, a aplicação da IA pode tornar as organizações até 63% mais sustentáveis (Vinuesa et al., 2020).

A segurança operacional é outra dimensão fortemente beneficiada pelas tecnologias baseadas em IA. Por meio de sensores inteligentes e Internet Industrial das Coisas (IIoT), é possível monitorar em tempo real as condições das plantas industriais, evitando riscos que envolvem exposição humana. A coleta automatizada de dados facilita o cumprimento de exigências legais e normativas, além de fornecer informações críticas para auditorias e melhoria contínua.

Apesar dos avanços e benefícios evidentes, a adoção da IA nas indústrias químicas ainda enfrenta importantes obstáculos. Atualmente, apenas 40% das empresas do setor utilizam IA de forma ampla em suas operações. Entre os principais desafios estão a falta de ferramentas suficientemente desenvolvidas, a escassez de mão de obra especializada, a indisponibilidade de dados de alta qualidade, questões relacionadas à transparência e confiabilidade dos sistemas, além da incerteza quanto ao retorno sobre o investimento.

Para superar esses entraves, é essencial que as empresas estabeleçam estratégias claras para a adoção da IA, incluindo a definição de objetivos específicos, áreas prioritárias de aplicação e investimentos em capacitação profissional. À medida que a tecnologia evolui, os benefícios associados ao seu uso tendem a superar as barreiras iniciais, tornando a IA um elemento central para a inovação, a competitividade e a sustentabilidade no setor químico.

Apesar dos benefícios expressivos que a inteligência artificial (IA) proporciona à indústria química, sua implementação traz uma série de riscos e desafios que não podem ser negligenciados. Um dos principais riscos está relacionado ao aumento da complexidade dos sistemas. À medida que a IA se torna mais sofisticada, também se torna menos compreensível e mais difícil de operar, o que pode aumentar significativamente o risco de falhas operacionais e acidentes industriais. A possibilidade de mau funcionamento desses sistemas também representa um perigo, podendo gerar resultados inesperados e ameaças à segurança dos processos.

Outro aspecto crítico é o impacto da automação sobre o emprego. A substituição de tarefas humanas por sistemas de IA, especialmente em atividades repetitivas e padronizadas, pode levar à redução significativa de postos de trabalho. No entanto, pesquisas realizadas com trabalhadores da indústria química na Polônia demonstram que, até o momento, não há uma preocupação generalizada com a segurança no emprego (Kądziałowski, 2022), o que sugere uma percepção de que a IA pode atuar mais como ferramenta de apoio do que de substituição total.

Do ponto de vista da segurança de dados e da privacidade, a IA lida com informações sensíveis, como fórmulas químicas, processos produtivos e tecnologias proprietárias. Assim, garantir a proteção e confidencialidade dessas informações é essencial para preservar a propriedade intelectual e a vantagem competitiva das empresas. O risco de ataques cibernéticos é crescente, principalmente com o aumento da conectividade e integração entre sistemas. Tais ataques podem comprometer o funcionamento das operações, expor dados sigilosos e gerar perdas financeiras consideráveis.

A implementação eficaz da IA exige conhecimento técnico altamente especializado. A carência de profissionais qualificados ou a falta de capacitação pode resultar em erros de projeto, desempenho abaixo do esperado ou até falhas completas nos sistemas implantados. Esse cenário revela um paradoxo: ao mesmo tempo que a IA busca otimizar processos, ela

demanda níveis crescentes de qualificação técnica, o que pode ampliar desigualdades no mercado de trabalho.

Outro risco importante diz respeito à dependência tecnológica. Empresas que baseiam grande parte de suas operações em sistemas de IA podem se tornar vulneráveis em caso de falhas, interrupções ou limitações no funcionamento dos sistemas, o que pode comprometer seriamente a continuidade dos negócios. Além disso, o uso da IA levanta preocupações de cunho ético, uma vez que decisões automatizadas podem afetar diretamente a vida humana, como na avaliação da segurança de produtos químicos. Caso não haja supervisão adequada, a IA pode tomar decisões incompatíveis com os interesses da sociedade.

A imparcialidade dos algoritmos também é uma preocupação crescente. Como os sistemas de IA são treinados com base em conjuntos de dados históricos, qualquer viés presente nesses dados pode ser perpetuado ou até amplificado pelas decisões automatizadas. Isso pode gerar situações de discriminação ou julgamentos injustos, especialmente se os dados não forem cuidadosamente selecionados e validados.

Por fim, a integração entre os sistemas de IA e outras plataformas corporativas, como sistemas de controle de processos, ERP (Enterprise Resource Planning) e redes de sensores, apresenta desafios técnicos consideráveis. A ausência de interoperabilidade pode comprometer a eficiência operacional e anular os ganhos esperados com a digitalização.

Segundo estudo da McKinsey (2019), o processo de adoção da IA pode ser dividido em cinco etapas, e diferentes riscos são identificados em cada uma delas, desde a concepção do projeto até sua plena implementação. A compreensão desses riscos em todas as fases é essencial para uma abordagem estratégica e segura da inteligência artificial na indústria química.

Quadro 1. Riscos associados aos 5 estágios de implementação da IA.

Fase	Riscos Associados
Conceitualização	<ul style="list-style-type: none">• Usos em casos antiéticos
Gerenciamento de Dados	<ul style="list-style-type: none">• Dados insuficientes ou sem precisão• Dados sem proteção

Desenvolvimento do Modelo	<ul style="list-style-type: none"> ● Dados não representativos ● Modelos enviesados ● Instabilidade do modelo
Implementação do Modelo	<ul style="list-style-type: none"> ● Erros de implementação ● Treinamento insuficiente ● Tecnologia insuficiente
Uso do modelo e tomada de decisões	<ul style="list-style-type: none"> ● Problemas de performance ● Detecção lenta de problemas ● Ameaças à segurança

Fonte: Adaptado de McKinsey (2019).

6. ANÁLISE DA LITERATURA

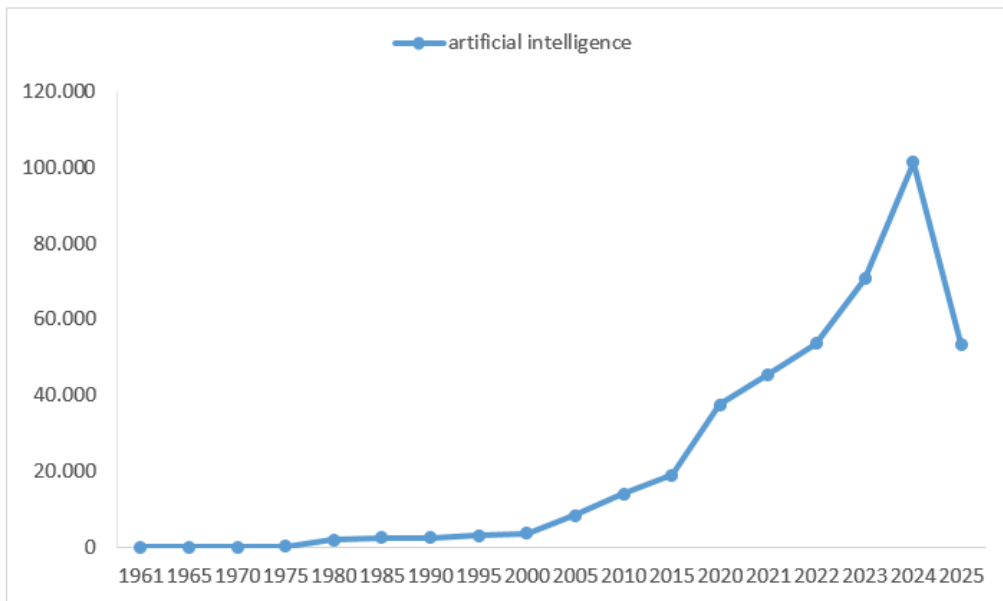
A análise da literatura científica constitui uma etapa fundamental no desenvolvimento de qualquer pesquisa, pois permite compreender o estado da arte de um determinado tema, identificar lacunas do conhecimento e acompanhar a evolução conceitual e tecnológica ao longo do tempo. No contexto do uso da inteligência artificial na indústria, essa tarefa se torna ainda mais relevante devido à velocidade com que novas metodologias, modelos e aplicações vêm sendo desenvolvidos e incorporados em diferentes setores da indústria.

Por meio da base de dados Scopus, foi possível realizar a análise de tendências de pesquisas para várias palavras chaves relacionadas à inteligência artificial e sua aplicação na indústria química, avaliando o histórico de publicações ao longo dos anos, quais áreas de conhecimento se destacam nas pesquisas e quais são os países com maiores quantidades de publicações.

6.1. HISTÓRICO DE PUBLICAÇÕES DE TRABALHOS POR ANO

O histórico de publicações por ano que contenham as palavras chave “artificial intelligence” e “artificial intelligence industry” pode ser observada na Figura 3:

Figura 3. Número de publicações por ano para “artificial intelligence”.

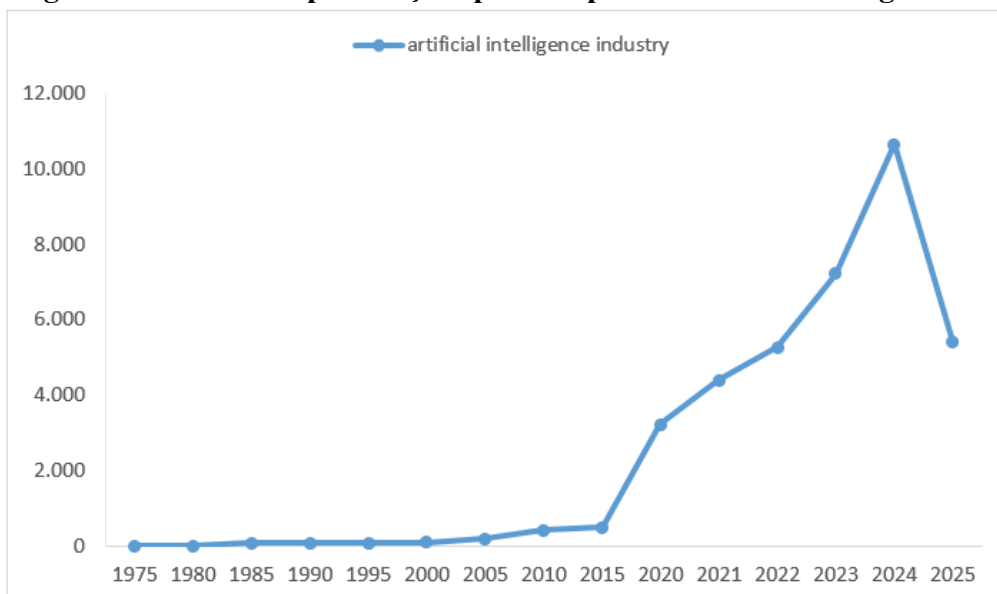


Fonte: Adaptado de SCOPUS (2025).

Com base no gráfico, o número de publicações por ano com a palavras chave “artificial intelligence” aumentou significativamente a partir do ano de 2015, atingindo um pico de 101.345 publicações no ano de 2024.

A mesma análise pode ser feita para a palavra chave “artificial intelligence industry”, representada pela Figura 4:

Figura 4. Número de publicações por ano para “artificial intelligence industry”.

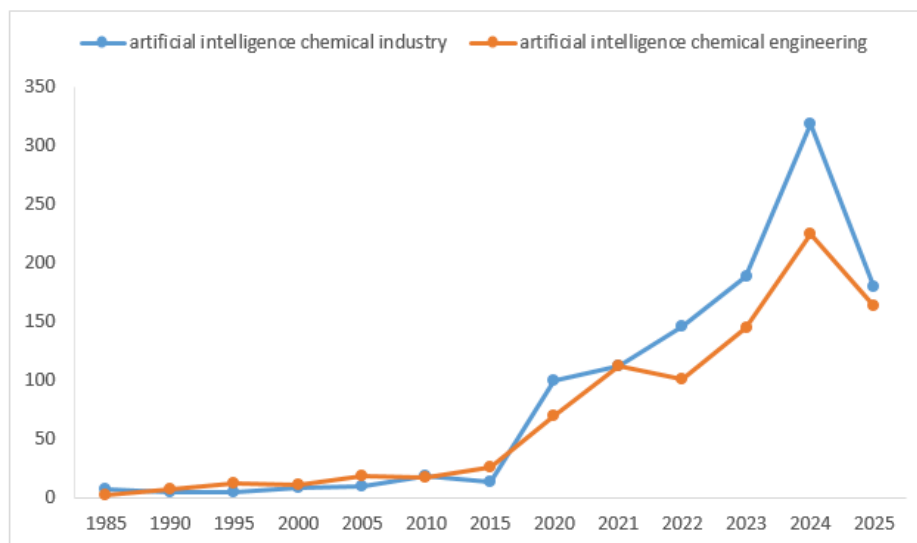


Fonte: Adaptado de SCOPUS (2025).

Ao adicionar a palavra “industry” à pesquisa anterior, o número de publicações diminuiu significativamente, porém manteve a tendência de crescimento nos últimos anos, atingindo 10.650 publicações em 2024.

A Figura 5 mostra a mesma análise feita para as palavras chave “artificial intelligence chemical industry” e “artificial intelligence chemical engineering”:

Figura 5. Comparativo de publicações por ano.



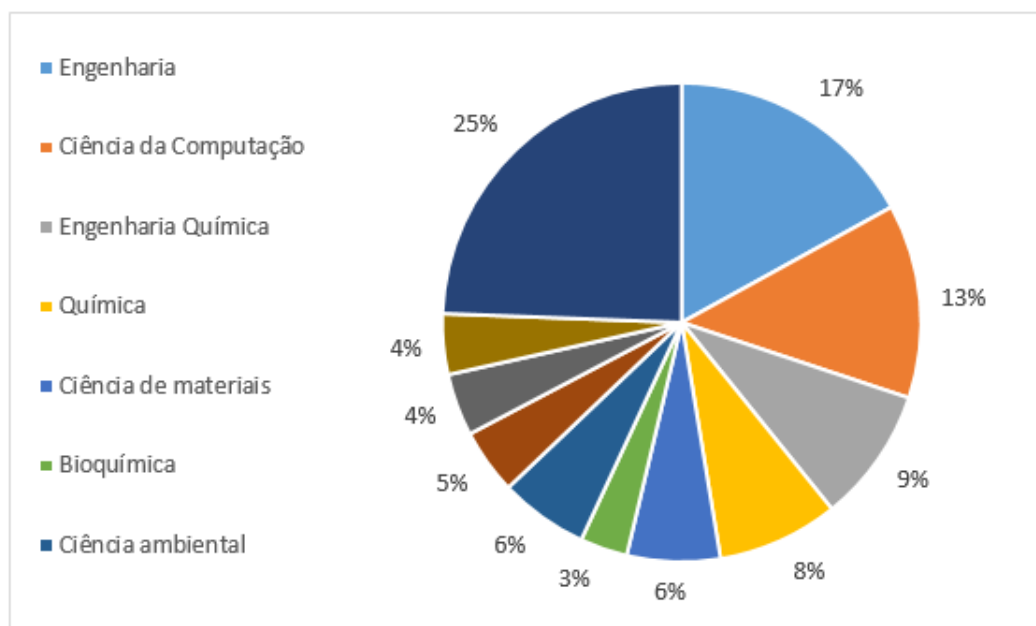
Fonte: Adaptado de SCOPUS (2025).

Ao direcionar a pesquisa para a indústria química, o número de publicações diminuiu ainda mais, com 318 publicações no ano de 2024. Nota-se, entretanto, que a tendência de aumento de publicações por ano se manteve, se tornando expressiva a partir de 2020.

6.2. PUBLICAÇÕES POR ÁREA DE CONHECIMENTO

Uma análise de quais áreas de estudo possuem os maiores números de publicações se mostra relevante para o entendimento do direcionamento que o uso de IA na indústria vem tomando. A Figura 6 representa um gráfico que mostra quais áreas de estudo possuem mais publicações para as palavras chaves “artificial intelligence chemical industry”:

Figura 6. Publicações por área de estudo.



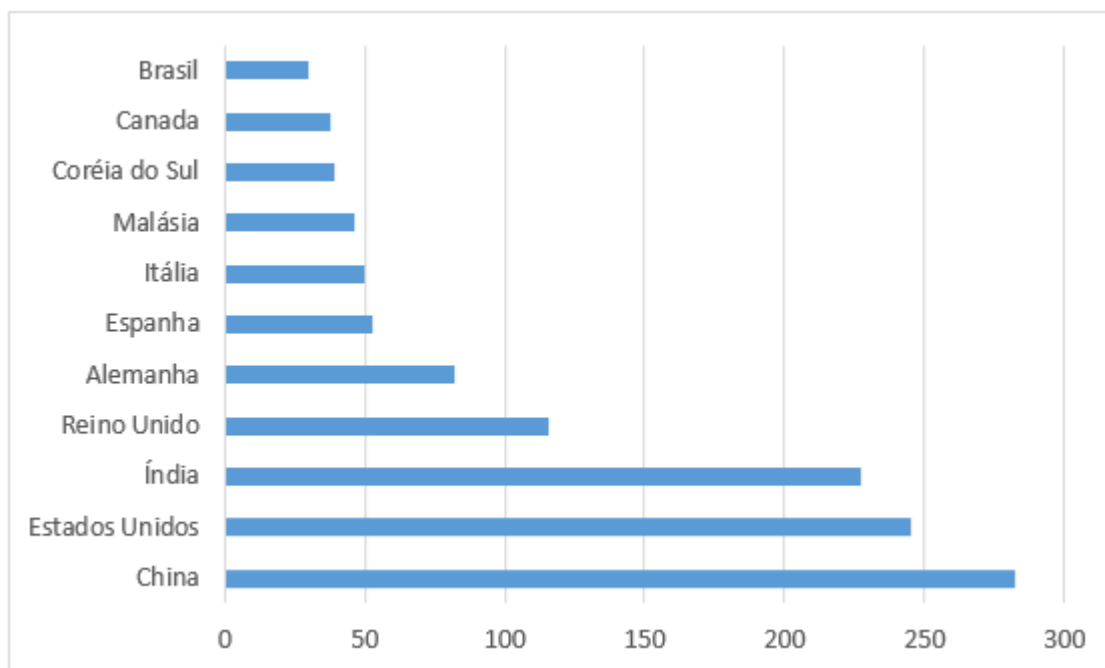
Fonte: Adaptado de SCOPUS (2025).

De acordo com o gráfico, a área de estudo com o maior número de publicações é “Engenharia”, seguido por “Ciência da Computação” e, em terceiro, “Engenharia Química”. Dessa forma, o uso de IA na indústria se mostrou de interesse multidisciplinar, além de gerar uma integração entre as áreas técnicas (engenharia) com o suporte tecnológico (ciências da computação).

6.3. PUBLICAÇÕES POR PAÍSES

A Figura 7 mostra a quantidade de publicações por países para as palavras chave “artificial intelligence chemical industry”:

Figura 7. Publicações por países.



Fonte: Adaptado de SCOPUS (2025).

A China lidera com 282 publicações, esse domínio é coerente com a política do país de investimento maciço em tecnologia e pesquisa aplicada em setores industriais, incluindo a química. Estudos mostram que a China tem investido fortemente em IA, inclusive com foco em modelagem de processos químicos, simulações moleculares e automação industrial (LI et al., 2023).

Na sequência, os Estados Unidos com 245 publicações, visto sua forte integração da indústria com a universidade. Empresas como IBM, Dow e BASF (em território americano) têm colaborado com universidades na produção de conhecimento nessa área (ACCENTURE, 2014).

A Índia aparece em terceiro lugar, com 227 publicações. Nota-se que a diferença de publicações entre os três primeiros países não foi tão expressiva. Isso reflete seu crescimento no setor químico e na formação de centros de pesquisa voltados à IA aplicada à indústria, com foco em otimização de reações e simulação de processos (HAJJAR et al., 2022).

Os países europeus também têm contribuído para a produção científica, O Reino Unido é reconhecido por iniciativas como o “Alan Turing Institute”, com projetos em IA para indústrias químicas sustentáveis. A Alemanha foca na automação de processos e manufatura

inteligente, enquanto a Espanha contribui principalmente com pesquisa acadêmica interdisciplinar (LIU, BAO, ZHENG, 2023).

6.4. USO DE RNAs EM SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS

O Quadro 2 mostra algumas aplicações de redes neurais em sistemas de processos químicos, além dos pontos positivos demonstrados pelas redes em cada aplicação:

Quadro 2. RNAs em sistemas de processos químicos.

Parâmetro objetivo da rede	Sistema aplicado	Pontos positivos	Referência
Condutividade	Evaporador	Erro baixo de validação	Devogelaere et al., 2002
Composição do destilado	Coluna de destilação	Bons resultados para destilação binária	Singh, Gupta, & Gupta, 2005
Composição do produto	Coluna de destilação binária	Capacidade de processar várias entradas com rápida resposta	Singh, Gupta, & Gupta, 2007
Fração molar do destilado	Coluna de destilação binária	Estimativa de resultado satisfatório	González, Aguilar, AlvarezRamírez, Fernández, & Barrón, 1999
Composição dos produtos	Destilação em batelada	Resultado próximo do real	Zamprogna, Barolo, & Seborg, 2001
Qualidade de produto polimérico	Reator de polimerização	Boa predição	Himmelblau, 2008
Parâmetros cinéticos	Biorreator	Estimativa satisfatória	de Assis & Filho, 2000
Concentração de biomassa	Biorreator	Estimativa estabilizada baseada em ação corretiva durante o treinamento	Acuña, Latrille, Béal, & Corrieu, 1998
Concentração de etanol	Fermentador flash	Performance excelente	Rivera, Atala, Filho, Carvalho da Costa, & Filho, 2010

Fluxo de calor	Trocador de calor	Predição baseada em dados experimentais	Su et al., 2002
Temperatura do reator	Reator de Polimerização	Baixo erro de estimativa	Kuroda & Kim, 2002
Concentração do monômero e iniciador	Reator de Polimerização	Performance satisfatória	Yang, Chung, & Brooks, 1999
Calor liberado	Reator batelada	Estimativa rápida e precisa	Aziz, Hussain, & Mujtaba, 2000
Coefficiente de transferência de massa de oxigênio	CSTR	Boa predição com perturbações	García-Ochoa & Castro, 2001
Concentração celular	Biorreator	Estimativa precisa	Silva et al., 2008
Concentração de glicose e galactose	Fermentador	Baixo erro de estimativa	Jin, Ye, Shimizu, & Nikawa, 1996
Taxa de transferência de calor	Trocador de calor	Valor estimado bem próximo do valor real	Islamoglu, 2003

Fonte: Adaptado de Razmi e Zarenejad (2022)

7. CONCLUSÃO

Gradativamente, a inteligência artificial está conquistando espaço na indústria química, aprimorando a eficiência, a inovação e a sustentabilidade. Desde o suporte à pesquisa e desenvolvimento à otimização de processos de fabricação com análises e automação em tempo real, a IA possibilita operações mais rápidas, seguras e econômicas. À medida que melhoram as ferramentas da IA, sua integração à engenharia química e ao setor produtivo se tornam cada vez mais essenciais.

Este TCC mostrou que a aplicação da inteligência artificial na indústria química representa uma transformação tecnológica profunda, com impactos relevantes tanto no desenvolvimento de novos produtos quanto na melhoria contínua de processos industriais. A revisão da literatura revelou que algoritmos como redes neurais artificiais, aprendizado de máquina e gêmeos digitais estão sendo utilizados para prever resultados, detectar falhas, reduzir desperdícios e acelerar tomadas de decisão.

Adicionalmente, foi possível identificar que a IA tem papel central na transição da indústria química para os princípios da Indústria 4.0, permitindo às empresas obter vantagens competitivas como expansão de mercado, maior resiliência e eficiência operacional. Os sistemas inteligentes proporcionam controle preciso de variáveis críticas, redução de falhas, padronização da produção e aumento da produtividade. Além disso, destacam-se os avanços na sustentabilidade, com apoio da IA na mitigação de impactos ambientais, redução de resíduos e promoção da economia circular.

Entretanto, a adoção da IA ainda enfrenta obstáculos significativos. Entre os principais desafios estão a escassez de mão de obra especializada, a falta de dados de alta qualidade, a complexidade dos sistemas, e os riscos associados à segurança operacional e cibernética. Adicionalmente, questões éticas, como o viés algorítmico e a transparência das decisões automatizadas, ainda precisam ser enfrentadas com rigor. A automação também levanta preocupações sobre o impacto no emprego e sobre a dependência tecnológica, especialmente em ambientes com baixa maturidade digital.

Portanto, conclui-se que o futuro da indústria química está intrinsecamente ligado à adoção estratégica e responsável da inteligência artificial. Para maximizar seus benefícios e mitigar riscos, é fundamental que empresas invistam não apenas em tecnologia, mas também em capacitação profissional, integração de sistemas, governança de dados e políticas éticas. A IA não apenas complementa o conhecimento humano, mas redefine os limites do que é possível na engenharia química moderna, tornando-se um elemento indispensável para a inovação, competitividade e sustentabilidade do setor.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAHAM, Ajith. Artificial Neural Networks. Oklahoma State University, Stillwater OK, USA, 2006.

ACCENTURE. The digital transformation of industry. Accenture, 2014. Disponível em: <https://www.accenture.com>. Acesso em: 30 jun. 2025.

ACUÑA, G.; LATRILLE, E.; BÉAL, C.; CORRIEU, G. Static and dynamic neural network models for estimating biomass concentration during thermophilic lactic acid bacteria batch cultures. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 85, n. 6, p. 615–622, jun. 1998. DOI: 10.1016/S0922-338X(98)80086-2.

ANDULKAR, A. Dow using AI to enhance safety by detecting hazards in confined spaces. 2021.

AQLAN, F.; MUSTAFA ALI, E. Integrating lean principles and fuzzy bow-tie analysis for risk assessment in chemical industry. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 92, n. 6, p. 661–670, 2014.

ARARIBOIA, G. Inteligência Artificial Rio de Janeiro: Ed. LTC, 1988.

ASSIS, Adilson José de; MACIEL FILHO, Rubens. Soft sensors development for on-line bioreactor state estimation. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, n. 2, p. 1099–1103, jul. 2000. DOI: 10.1016/S0098-1354(00)00489-0.

AZADEH, A. et al. An intelligent framework for performance assessment and improvement of HSEE indicators in chemical plants. *Safety Science*, v. 51, n. 1, p. 145–158, 2013.

AZADEH, A. et al. Application of artificial neural networks for job satisfaction assessment in research laboratories. *Journal of Manufacturing Systems*, v. 35, p. 201-209, 2015.

AZADEH, A.; ZARRIN, M. Integrated health, safety, environment and ergonomics assessment in petrochemical plants using fuzzy AHP. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 41, p. 123–130, 2016.

AZIZ, Norashid; HUSSAIN, Mohd Azlan; MUJTABA, Iqbal M. Performance of different types of controllers in tracking optimal temperature profiles in batch reactors. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, n. 2–7, p. 1069–1075, 2000. DOI: 10.1016/S0098-1354(00)00526-3.

BAI, Y.; ZHAO, J. A novel transformer-based multi-variable multi-step prediction method for chemical process fault prognosis. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 169, p. 937–947, 2023.

- BAJPAI, Saumya; JAIN, Kreeti; JAIN, Neeti. Artificial Neural Networks. *International Journal of Soft Computing and Engineering (IJSCE)*, v. 1, n. NCAI2011, p. –, jun. 2011.
- BEAMON, B. M. Supply chain design and analysis: Models and methods. *International Journal of Production Economics*, v. 55, n. 3, p. 281-294, 1998.
- BEHDANI, B. et al. Agent-based modeling of supply chain disruptions. *International Journal of Production Economics*, v. 114, n. 2, p. 656-670, 2009.
- BEHDANI, B. et al. Forecasting disruptive events in supply chains: An agent-based approach. *Computers & Industrial Engineering*, v. 127, p. 817-832, 2019.
- BEHDANI, B. et al. Managing disruptions in supply chains using agent-based models. *Journal of Supply Chain Management*, v. 48, n. 4, p. 32-47, 2012.
- BERNING, C. et al. Genetic algorithm approach to chemical supply chain optimization. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 82, n. 3, p. 330-342, 2004.
- BISHNU, S. K. et al. Computational applications using data driven modeling in process systems: a review. *Digital Chemical Engineering*, v. 8, p. 100111, 2023.
- BURNHAM, J. F. Scopus database: a review. *Biomedical Digital Libraries*, v. 3, n. 1, 2006. Disponível em: <https://biomed-digital-library.biomedcentral.com/articles/10.1186/1742-5581-3-1>. Acesso em: 19 jun. 2025.
- CASTILLO-VILLAR, K. Renewable materials supply chain modelling. *Renewable Energy Journal*, v. 29, n. 5, p. 1237-1244, 2014.
- CECCHINI, G. et al. Design of sustainable chemical processes using AI and optimization techniques. *Computers & Chemical Engineering*, v. 36, p. 93–104, 2012.
- COWEN, Tyler; DAWSON, Michelle. *What does the Turing test really mean? And how many human beings (including Turing) could pass?* George Mason University Department of Economics; University of Montreal, 2009. Disponível em: <https://www.gmu.edu/assets/docs/cowen/TuringTest.pdf>. Acesso em: 30 jun. 2025.
- DEKKER, A. H. Studying inform and influence in a C2 network: experimental results using the ELICIT multiplayer intelligence game. In: *Proceedings of the 14th International Command and Control Research and Technology Symposium (ICCRTS)*. Washington: DoD CCRP, 2009.
- Devogelaere, D., Rijckaert, M., Leon, O. G., & Lemus, G. C. (2002). Application of feedforward neural networks for soft sensors in the sugar industry. In *VII Brazilian symposium on neural networks, 2002. SBRN 2002. Proceedings* (pp. 2–6).

DOAN, H. A. et al. Artificial intelligence in the development of sustainable chemicals and materials. *Sustainable Chemistry Reviews*, v. 12, p. 150-165, 2020.

EHLEN, M. et al. Supply chain disruptions and agent-based modeling. *Journal of Industrial Engineering*, v. 12, n. 1, p. 45-58, 2014.

ELSEVIER. Scopus Content Coverage Guide. Elsevier, 2024. Disponível em: <https://www.elsevier.com/solutions/scopus/how-scopus-works/content>. Acesso em: 19 jun. 2025.

FALAGAS, M. E. et al. Comparison of PubMed, Scopus, Web of Science, and Google Scholar: strengths and weaknesses. *The FASEB Journal*, v. 22, n. 2, p. 338–342, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1096/fj.07-9492LSF>.

FAUSETT, Lloyd. *Fundamentals of Neural Networks*. Prentice Hall, USA, 1996.

FERNANDES, A. C. Artificial neural network models for prediction of reaction yield. *Chemical Engineering Journal*, v. 123, n. 1-2, p. 35-42, 2006.

FERRER, G. et al. Combining eco-design and artificial intelligence for process engineering. *Journal of Cleaner Production*, v. 20, n. 1, p. 32–40, 2012.

GARCÍA-OCHOA, Félix; GÓMEZ, Emilio. Estimation of oxygen mass transfer coefficient in stirred tank reactors using artificial neural networks. *Enzyme and Microbial Technology*, v. 28, n. 6, p. 560–569, 2001. DOI: 10.1016/S0141-0229(01)00297-6.

GENG, Z. et al. Yield optimization in chemical processes using AI. *Computers & Chemical Engineering*, v. 91, p. 122-133, 2016.

GHADERI, A. et al. Biomass supply chain optimization using AI. *Journal of Cleaner Production*, v. 133, p. 173-185, 2016.

GONZÁLEZ, J.; AGUILAR, R.; ÁLVAREZ-RAMÍREZ, J.; FERNÁNDEZ, G.; BARRÓN, M. *Linearizing control of a binary distillation column based on a neuro-estimator*. *Artificial Intelligence in Engineering*, v. 13, n. 4, p. 405–412, out. 1999. DOI: 10.1016/S0954-1810(99)00018-7.

GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. *Deep Learning*. MIT Press, 2016.

GREEN, D. W.; PERRY, R. H. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

GRIEVES, M.; VICKERS, J. Digital Twin: Mitigating Unpredictable, Undesirable Emergent Behavior in Complex Systems. In: KURFESS, T.; CROWDER, J. (Ed.). *Transdisciplinary Perspectives on Complex Systems: New Findings and Approaches*. Springer, 2017. p. 85–113.

GU, G. et al. Machine learning approaches for sustainable chemical manufacturing. *Chemical Engineering Journal*, v. 378, p. 122-135, 2019.

GUILLEN, G. et al. Optimization in chemical supply chains with genetic algorithms. *Computers & Chemical Engineering*, v. 30, n. 5, p. 842-853, 2006.

GUO, H. et al. Hybrid AI approaches to improve safety in chemical plants. *Journal of Hazardous Materials*, v. 366, p. 231–242, 2019.

GUO, L. et al. Risk evaluation for chemical processes using fuzzy logic. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 22, n. 4, p. 542-550, 2009.

HÁJEK, P.; STEJSKAL, J. The role of research and development in sustainable industrial innovation. *Industrial Innovation Journal*, v. 9, n. 4, p. 235-247, 2018.

HAJJAR, H. A.; VARGAS, J. V. C.; OLIVEIRA, D. D. Artificial intelligence applied to chemical engineering processes. *Chemical Engineering Research and Design*, 2016.

HAJJAR, H. A.; VARGAS, J. V. C.; OLIVEIRA, D. D. Artificial intelligence applied to chemical engineering: A bibliometric analysis. *Computers & Chemical Engineering*, 2022.

HIMMELBLAU, David M. Accounts of experiences in the application of artificial neural networks in chemical engineering. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 16, p. 5782–5796, 2008. DOI: 10.1021/ie800076s.

INNOGY. Foresight Report: Future of the Industrial Sector. 2019.

ISLAMOĞLU, Yaşar. A new approach for the prediction of the heat transfer rate of the wire-on-tube type heat exchanger – use of an artificial neural network model. *Applied Thermal Engineering*, v. 23, n. 3, p. 243–249, 2003. DOI: 10.1016/S1359-4311(02)00155-2.

JADERI, F. et al. AI-based risk assessment in distillation units. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 126, p. 323-332, 2019.

JHA, Girish Kumar. Artificial Neural Networks and its applications. *International Journal of Computer Science and Issues*, 2005.

Jl, Z. et al. Intelligent control systems for unit operations in chemical processes. *AIChE Journal*, v. 62, n. 11, p. 3848–3860, 2016.

JIN, Sha; YE, Kaiming; SHIMIZU, Kazuyuki; NIKAWA, Junichi. Application of artificial neural network and fuzzy control for fed-batch cultivation of recombinant *Saccharomyces cerevisiae*. *Journal of Fermentation and Bioengineering*, v. 81, n. 5, p. 412–421, 1996. DOI: 10.1016/0922-338X(96)85142-7.

KANTIFY. Pfizer uses AI to accelerate chemical research. Kantify, 2023.

KEYVANLOO, K. et al. Process yield prediction using neural networks. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v. 45, n. 9, p. 751–757, 2012.

Kumar, Koushal; Thakur, Gour Sundar Mitra. Advanced Applications of Neural Networks and Artificial Intelligence: A Review. *International Journal of Information Technology and Computer Science (IJITCS)*, v. 4, n. 6, p. 57–68, jun. 2012. DOI: 10.5815/ijitcs.2012.06.08 .

KURODA, Chiaki; KIM, Jinyoung. Neural network modeling of temperature behavior in an exothermic polymerization process. *Neurocomputing*, v. 47, n. 1–4, p. 77–89, 2002. DOI: 10.1016/S0925-2312(01)00621-X.

LAN, W. et al. Modelling biomass supply chain with AI techniques. *Energy*, v. 173, p. 437–449, 2019.

LASKA, M.; KARWALA, I. Artificial Intelligence in the Chemical Industry: Potential and Applications. 2020.

LAVASANI, S. M. et al. Risk-based design of chemical plants using AI tools. *Safety Science*, v. 70, p. 141–152, 2015.

LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. *Nature*, v. 521, p. 436–444, 2015.

LEE, J. et al. Review of artificial intelligence applications in process system engineering. *Computers & Chemical Engineering*, v. 114, p. 111–126, 2018.

LI, J. et al. Machine learning for catalyst design and screening. *Catalysis Today*, v. 290, p. 57–66, 2017.

LI, Y. et al. A light attention-mixed-base deep learning architecture toward process multivariable modeling and knowledge discovery. *Computers & Chemical Engineering*, v. 174, p. 108259, 2023.

LI, Y. et al. A new correlation-similarity conjoint algorithm for developing encoder-decoder based deep learning multi-step prediction model of chemical process. *Chemical Engineering Science*, v. 288, p. 119748, 2024.

LI, Ying et al. Multi-scale revolution of artificial intelligence in chemical industry. *Journal of Industrial Information Integration*, 2023. DOI: 10.1016/j.jii.2023.100459.

LIN, K. et al. AI and the chemical industry: what leaders need to know. IBM Institute for Business Value, 2020.

LIPTON, Z. C. A critical review of recurrent neural networks for sequence learning. *arXiv preprint arXiv:1506.00019*, 2015.

LIU, S.; BAO, J.; ZHENG, P. A review of digital twin-driven machining: from digitization to intellectualization. *Journal of Manufacturing Systems*, 2023, 67: 361–378.

LUDGER, George F. Artificial Intelligence – Structures and strategies for complex problem solving. 5. ed. Boston: Pearson, 2009.

LUO, X. et al. Deep learning for fault detection in process industries. *Neurocomputing*, v. 170, p. 317–326, 2015.

MARCOU, G. et al. Predictive optimization of chemical reactions using artificial intelligence. *Chemical Science Advances*, v. 7, n. 2, p. 120-129, 2015.

MARKET ANALYSIS REPORT. Global Chemical Market Size and Forecast, 2022–2030. 2022.

MATT, C.; HESS, T.; BENLIAN, A. Digital transformation strategies. *Business & Information Systems Engineering*, v. 57, n. 5, p. 339–343, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12599-015-0401-5>

McCULLOCH, Warren S.; PITTS, Walter. *A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, v. 5, n. 4, p. 115–133, 1943. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02478259>;

MCKINSEY & COMPANY. The potential for AI to transform supply chain and demand forecasting. McKinsey Report, 2017.

MCKINSEY. Using AI to forecast demand in the chemical industry. McKinsey Report, 2017.

MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO E TECNOLOGIA. Declaração sobre a importância da indústria para a segurança econômica. Brasília, 2022.

MITSUI CHEMICALS. Real-time quality prediction of reaction gases using AI. Mitsui Chemicals, 2021.

MOHAMMADI, M.; PENLIDIS, A. Optimization of chemical synthesis with machine learning. *Journal of Chemical Engineering*, v. 33, n. 5, p. 402-410, 2018.

MOSAVI, A. et al. Machine learning applications in chemical reaction engineering. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 87, p. 103237, 2019.

NAIDU, D. S. et al. Neural networks and fuzzy logic in process control. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, v. 37, n. 6, p. 491–497, 1990.

NEGNY, S. et al. Multi-objective optimization for eco-design in chemical engineering. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 90, n. 5, p. 606–618, 2012.

NIELSEN, Fiona. *Neural Networks algorithms and applications*. Neil's Brock Business College, 2001.

OCHOA-ESTOPIER, A. et al. AI tools for batch distillation control. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 91, n. 8, p. 1511–1524, 2013.

OECD – ORGANISATION FOR ECONOMIC CO-OPERATION AND DEVELOPMENT. *Artificial Intelligence in Society*. Paris: OECD Publishing, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1787/eedfee77-en>

OSUOLALE, O.; ZHANG, J. Advanced distillation modeling with machine learning. *Chemical Engineering Science*, v. 172, p. 133–142, 2017.

OSUOLALE, O.; ZHANG, J. Intelligent monitoring of distillation systems using AI. *Journal of Process Control*, v. 45, p. 1–10, 2016.

PACE, G. SG Vision AI improves defect detection in manufacturing. *Vision Systems Design*, 2021.

POZO, C. et al. Heuristic algorithms for supply chain optimization. *Expert Systems with Applications*, v. 39, n. 12, p. 10673-10681, 2012.

QI, H. et al. AI-based analysis of compressor performance under uncertainty. *Applied Thermal Engineering*, v. 132, p. 470–479, 2018.

RABUSKE, R. *Inteligência Artificial Florianópolis*: Editora da UFSC, 1995.

RAZMI, A. M.; ZARENEJAD, F. Artificial Intelligence techniques applied as estimator in chemical process systems – A literature survey. *Expert Systems with Applications*, v. 195, p. 116611, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.116611>.

RIVERA, Elmer Ccopa; ATALA, Daniel I. P.; FILHO, Francisco Maugeri; COSTA, Aline Carvalho da; FILHO, Rubens Maciel. Development of real-time state estimators for reaction–separation processes: A continuous flash fermentation as a study case. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 49, n. 4, p. 402–409, 2010. DOI: [10.1016/j.cep.2010.02.012](https://doi.org/10.1016/j.cep.2010.02.012).

ROBLES, J. R. et al. Sustainable process design using AI. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 87, n. 3, p. 143–150, 2009.

RUSPINI, E. H.; PAULUS, J.; ALBERT, M. Modeling decision-making under uncertainty using ELICIT. *International Journal of Command and Control*, v. 1, n. 1, p. 23–36, 2009.

SAHEBJAMNIA, N. et al. Risk management using dynamic Bayesian networks and artificial intelligence. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 41, p. 31–41, 2016.

SAINT-DONAT, B. et al. Expert systems for chemical process control. *IFAC Proceedings Volumes*, v. 24, n. 6, p. 85–90, 1991.

SCHWEIDTMANN, A. M. et al. Machine learning in chemical reaction optimization. *Chemical Science*, v. 9, n. 24, p. 6091–6097, 2018.

SEGLER, M. H. S. et al. Planning chemical syntheses with deep neural networks. *Nature*, v. 555, p. 604-610, 2018.

SILVA, Rosineide G.; PINOTTI, Laura M.; CRUZ, Antonio J. G.; GIORDANO, Raquel L. C.; GIORDANO, Roberto C. Artificial neural networks to infer biomass and product concentration during the production of penicillin G acylase from *Bacillus megaterium*. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, v. 83, n. 5, p. 739–749, 2008. DOI: 10.1002/jctb.1864.

SINGH, Vijander; GUPTA, Indra; GUPTA, H.O. *ANN based estimator for distillation—inferential control*. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, v. 44, n. 7, p. 785–795, 2005. DOI: 10.1016/j.cep.2004.08.010

SINGH, Vijander; GUPTA, Indra; GUPTA, H. O. *ANN-based estimator for distillation using Levenberg–Marquardt approach*. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 20, n. 2, p. 249–259, 2007. DOI: 10.1016/j.engappai.2006.06.017

STÉPHANE, N. et al. AI-based support systems for sustainable chemical production. *Computers & Chemical Engineering*, v. 34, n. 5, p. 792–803, 2010.

SU, Guanghui; JIA, Dounan; FUKUDA, Kenji; MORITA, Koji; PIDDUCK, Mark; MATSUMOTO, Tatsuya; AKASAKA, Ryo. Applications of artificial neural network for the prediction of flow boiling curves. *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 39, n. 11, p. 1190–1198, nov. 2002. DOI: 10.1080/18811248.2002.9715310.

SUTTON, R. S.; BARTO, A. G. *Reinforcement Learning: An Introduction*. Cambridge, MA: MIT Press, 1999.

UNIÃO EUROPEIA. Comissão Europeia. *Artificial Intelligence – A European approach to excellence and trust*. Brussels: European Commission, 2020. Disponível em: <https://ec.europa.eu/digital-strategy/our-policies/artificial-intelligence>. Acesso em: 2 jun. 2025.

VERMA, A. et al. Artificial intelligence-based evaporation system analysis. *Journal of Food Process Engineering*, v. 40, n. 5, p. e12504, 2017.

VINUESA, R. et al. The role of artificial intelligence in achieving the Sustainable Development Goals. *Nature Communications*, [s.l.], v. 11, n. 233, p. 1–10, 2020.

WORLD ECONOMIC FORUM. *Digital Transformation Initiative: Chemistry and Advanced Materials Industry*. Geneva: WEF, 2017.

WU, H.; ZHAO, C. Deep learning for chemical process control. *AIChE Journal*, v. 66, n. 3, p. e16895, 2020.

WU, H.; ZHAO, C. Transfer learning in process control systems. *IEEE Access*, v. 6, p. 32345–32355, 2018.

YANG, S. H.; CHUNG, P. W. H.; BROOKS, B. W. Neural network-based estimation of a semi-batch polymerisation reactor. *Computers & Chemical Engineering*, v. 23, suplemento, p. S443–S446, 1999. DOI: 10.1016/S0098-1354(99)80109-4.

YAZDI, M.; KABIR, E. A fuzzy Bayesian approach for chemical risk analysis. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 48, p. 249–258, 2017.

YDSTIE, B. E. Neural nets in process control. *Control Engineering Practice*, v. 1, n. 1, p. 23–29, 1990.

ZAHRT, A. F. et al. Machine learning for catalyst design. *Journal of Catalysis*, v. 377, p. 60-75, 2019.

ZAMPROGNA, E.; BAROLO, M.; SEBORG, D. E. Composition estimations in a middle-vessel batch distillation column using artificial neural networks. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 79, n. 6, p. 689–696, 2001. DOI: 10.1205/026387601316971361.

ZHANG, Y.; ZHAO, C. Convolutional neural networks in chemical process applications. *Chemical Engineering Science*, v. 169, p. 194–202, 2017.

ZHAO, J.; YU, Z. Case-based reasoning for supplier selection. *Journal of Supply Chain Management*, v. 47, n. 2, p. 33-46, 2011.

ZHENG, Y. et al. AI-supported combustion system optimization. *Energy*, v. 34, n. 7, p. 1035–1040, 2009.

ZHOU, H. et al. Predictive modeling of combustion processes using neural networks. *Fuel*, v. 84, n. 4, p. 389–396, 2005.

ZHOU, Z. et al. Machine learning predictions of chemical reactions. *Computational Chemistry Reviews*, v. 12, p. 55-66, 2017.

ZHOU, Zhi-Hua. Rule Extraction Using Neural Networks or For Neural Networks. National Laboratory for Novel Software Technology, Nanjing University, China, 2007.

ZURADA, Jacek M. Introduction to Artificial Neural System. Jaico Publishing House, 2006.