



# INTELLIGENZA ARTIFICIALE IN CHIMICA

**N**egli ultimi cinque anni, l'intelligenza artificiale (IA) ha rivoluzionato il mondo della chimica e della biologia, aprendo strade prima considerate impossibili. In chimica, prodotti innovativi basati su tecniche di IA come **DeepChem** consentono ai ricercatori di scoprire più rapidamente molecole con proprietà specifiche, ottimizzando lunghi e costosi esperimenti in laboratorio. Un altro esempio è il sistema **GlassNet**, che usa reti neurali profonde per predire simultaneamente molte proprietà dei vetri, accelerando la progettazione di materiali avanzati e sostenibili con applicazioni in energia e telecomunicazioni. AlphaFold di **DeepMind** è ancora più rivoluzionario: non solo ha permesso la predizione delle strutture proteiche, ma ha anche aperto nuove strade nella progettazione razionale di farmaci, permettendo di prevedere accuratamente l'interazione tra molecole e bersagli biologici. L'intelligenza artificiale non è più solo un tema specialistico, ma un potente alleato nella scoperta di nuovi materiali sostenibili, tecnologie avanzate e cure mediche innovative.

In questo numero de *La Chimica e l'Industria* sono raccolti 5 contributi di chimici della SCI esperti in diverse applicazioni della IA in chimica e scienza dei materiali, di cui diamo una brevissima anticipazione nel seguito. Davide Manca (Dip. Chimica, Politecnico di Milano) mostra come l'IA rivoluzioni l'ingegneria chimica, ottimizzando processi, prevenendo guasti e accelerando la scoperta di materiali sostenibili per superare le sfide della transizione energetica e digitale, migliorando efficienza, sicurezza e sostenibilità dell'industria chimica.

Eugenio Alladio (Dip. Chimica, Università di Torino) illustra come la manutenzione predittiva nel contesto dell'Industria 4.0 e 5.0, basata sull'analisi di

dati storici di processo con modelli statistici multivariati, permetta una precoce rilevazione di anomalie per ridurre guasti e costi operativi. Un esempio significativo è il progetto DOLPHINS dell'Università di Torino, premiato con il Manufacturing Award 2021 per l'Intelligenza Artificiale e Data Analytics, grazie all'efficacia nella previsione accurata di malfunzionamenti.

Maria Cristina De Rosa (SCITEC, CNR Roma) descrive come i metodi di Computer-Aided Drug Design (CADD), integrati con l'IA e il *deep learning*, possono accelerare significativamente il processo di sviluppo dei farmaci, permettendo previsioni affidabili su proprietà molecolari e identificando rapidamente composti farmacologicamente efficaci. Alfonso Pedone (Dip. Scienze Chimiche e Biologiche, Università di Modena e Reggio Emilia) presenta l'uso del Machine Learning (ML) per progettare e simulare materiali vetrosi ossidici, ottimizzandone proprietà e composizioni. Le conclusioni evidenziano che il ML consente previsioni accurate grazie alla predizione degli spettri NMR, accelerando significativamente lo sviluppo di nuovi vetri, con applicazioni nei settori energetico, tecnologico e ambientale.

Infine, Giovanni Maria Piccini (Dip. Scienze Chimiche e Biologiche, Università di Modena e Reggio Emilia) spiega come l'integrazione della IA con la chimica computazionale (dinamica molecolare *ab initio*) permetta di progettare catalizzatori più efficienti, aumentando sostenibilità e accuratezza nella previsione di reattività e proprietà grazie all'incremento di ordini di grandezza nella esplorazione spazio-temporale delle complesse superfici di energia potenziale tipiche della catalisi eterogenea. C'è ancora strada da fare, ma il futuro è radioso.