

# Simulação Computacional Teoria, “Teatro” e Unificação

FERNANDO M. S. SILVA FERNANDES\*

Este artigo é uma adaptação da conferência-debate, com o mesmo título, proferida na Reitoria da Universidade de Lisboa, em Maio de 2003, a convite da Cátedra “A Razão” do Departamento de Filosofia da Faculdade de Letras. Trata-se de um texto nas fronteiras da ciência,

da investigação e da filosofia. Traduz algumas das preocupações e interrogações do autor nas suas actividades docente e de investigação. Contém, porventura, polémica, “entropia” e contradições. Mas não são estes alguns dos ingredientes da ciência e da filosofia?

## Introdução...

A cultura é um dos produtos da actividade intelectual humana. As suas múltiplas manifestações como a ciência, a arte, a literatura, a política, etc. expressam o esforço humano em compreender o universo, a sua harmonia e o seu todo. São aproximações diversas, modos de olhar diferentes para a realidade de que nós próprios, corpo biológico e consciência, somos parte integrante. Não há cultura sem consciência. Mas poderá haver consciência sem corpo biológico? O núcleo-duro da inteligência artificial parece responder afirmativamente [1].

Não deve identificar-se qualquer dos diferentes modos de olhar a realidade como a própria realidade. Esta é, em última instância, uma síntese, sinérgica, de todos esses pontos de vista.

Quando Maria João Pires interpreta Chopin ou Mozart, traduz o seu modo de olhar, a sua compreensão da realidade que os compositores pretenderam transmitir. Ela teoriza acerca de Chopin ou Mozart, executando “teatro musical”.

Ruy de Carvalho, ao desempenhar Shakespeare, expressa o seu sentimento pessoal sobre os aspectos humanos que o dramaturgo pretendeu analisar.

Ele teoriza acerca de Shakespeare, executando “teatro declamado”.

José Saramago, em *O Homem Duplicado*, transmite-nos a sua visão de ficcionista sobre uma das múltiplas facetas da clonagem, executando “teatro literário”.

Quando Júlio Pomar pintou Mário Soares certamente teorizou sobre a personalidade e transmitiu-nos a sua visão de pintor. Ele executou “teatro visual”.

Quando os governantes falam em democracia, ou outras formas de regime, teorizam sobre as melhores formas de organização e interações sociais. Desempenham, então, “teatro político”.

Finalmente, quando os cientistas teorizam, eles transmitem-nos o seu modo de olhar para a realidade, convencionalmente designada por realidade física, executando “teatro científico”.

As teorias procuram correlacionar os factos observados e compreendê-los, isto é, descobrir a sua razão de ser e, especialmente em ciência, prever novos acontecimentos. A forma adequada para a explicação de um fenómeno depende fortemente do receptor. Para um teórico pode ser suficiente uma equação matemática. Um experimentalista exige, normalmente, uma explicação mais fenomenológica. Para um leigo, é indispensável uma excelente divulgação que evite a maioria dos aspectos técnicos.

A propósito, a divulgação cultural é de extrema importância, exigindo maturidade e capacidade inventiva. Os benefícios a colher de uma ligação entre o ensino/divulgação e a investigação são consideráveis. Não só para o ensino/divulgação que é encorajado pela investigação, mas inversamente, sublinhe-se, para a própria investigação

Os códigos de avaliação da produção nos diferentes vectores culturais também diferem substancialmente, mas todos eles têm um denominador comum: garantir a originalidade e a validade de cada contribuição.

Teoria e Teatro? De facto, existe uma relação íntima entre a sintaxe e a semântica dessas palavras, como David Bohm, um físico quântico, expressou em *Wholeness and the Implicate Order* [2]:

“The relationship between thought and reality that this thought is about is in fact far more complex than of a mere correspondence. Thus, in scientific research, a great deal of our thinking is in terms of theories. The word *theory* derives from the Greek *theatre*, in a word meaning *to view* or *to make a spectacle*. Thus, it might be said that a theory is *primarily* a form of *insight*, i.e. a way of looking at the world, and not a form of knowledge of how the world is.”

E, continua...

\* Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa; E-mail: fsilva@fc.ul.pt

“One might in fact go so far as to say that in the present state of society, and in the present general mode of teaching science, which is a manifestation of this state of society, a kind of prejudice in favour of a fragmentary self-world view is fostered and transmitted (to some extent explicitly and consciously, but mainly in an implicit and unconscious manner...)”.

Discordamos desta evidente “espécie de reducionismo”. Cremos que deve procurar-se a unificação que se manifesta, a cada passo, na harmonia do universo e nos diferentes aspectos da cultura. Ou seja, compreender como manifestações da realidade, aparentemente diferentes, podem ser vertentes do mesmo fenómeno. Não só no sentido de procurar traduzir o universo por um conjunto de equações matemáticas. Talvez que o universo seja demasiadamente complexo para que possa ser totalmente percebido por uma *theory of everything* (TOE). Mas, também, considerando a imensa diversidade, ou nas palavras do físico Freeman Dyson o “infinito em todas as direcções” [3], de modo a integrá-la numa visão tão abrangente quanto possível. Esta aproximação conduzirá a uma melhor compreensão da razão cosmológica e reforçará o valor da ciência bem como de todos os outros vectores da cultura. Isto não significa que se despreze o método reducionista, de extrema utilidade operacional em ciência, mas sempre com a noção de que, nem sempre, o todo é igual à soma das partes. E que temos de procurar as sinergias. De facto, “nada na unha humana prediz a existência do ser humano” segundo Buckminster Fuller [4] de quem falaremos adiante.

Neste contexto, parece-nos interessante referir o psicólogo Maslow, em *The Psychology of Science: A Reconnaissance* [5]:

“It is tempting, if the only tool you have is a hammer, to treat everything as if it were a nail”,

e o neuro-cirurgião Lobo Antunes:

“Um dos remédios para a depressão é a leitura dum livro de Mecânica Quântica ao som de Mozart” (citação de cor, de uma entrevista lida há alguns anos).

Embora necessitemos de peritos nas diferentes áreas do conhecimento, é curiosa a advertência que Wolfgang Pauli (o cientista que enunciou o *princípio da exclusão* relativamente aos estados quânticos dos electrões) fez a Victor Weisskopf (outro físico, ex-director do CERN): “Nunca se torne um perito, e isto por duas razões: em primeiro lugar, transformar-se-á num virtuoso do formalismo e esquecerá a verdadeira natureza; em segundo lugar, arrisca-se a nunca mais poder trabalhar em qualquer coisa verdadeiramente interessante” [6].

Weisskopf [6] aborda estas questões com uma clareza cristalina:

“Estou convencido de que o ensino da ciência deve, com toda a urgência, voltar a dar ênfase à sua unidade e à sua universalidade, evitando a tendência para produzir pequenos artifices especializados num ofício em particular. Não nego que precisamos de peritos competentes, mas devemos preocupar-nos constantemente com os laços existentes entre os diversos domínios científicos e levá-los ao conhecimento dos estudantes. Isidor Rabi soube dizê-lo em poucas palavras: «A própria ciência necessita de integração. A tendência aponta noutro sentido... Só o estudante das licenciaturas, como pobre animal de carga que é, pode pretender saber um pouco de tudo. Como o número de físicos não para de crescer, cada especialidade vai ficando cada vez mais fechada sobre si própria. Uma tal balcanização afasta a física, e, na verdade, todas as outras ciências, da filosofia da natureza que, intelectualmente, constitui o seu significado e o seu objectivo» “.

E, continua...

“No campo da música, o artista que interpreta é altamente considerado. Uma interpretação arrebatadora de Beethoven é considerada como um feito de maior relevância do que a composição de uma peça de segunda categoria. Não hesitarei em defender que a apresentação clara de um aspecto da ciência moderna tem mais valor do que um fragmento de pretensa investigação original, do género daquela que por aí se apresenta em certas teses de doutoramento, e

exige mais maturidade e capacidade inventiva.”

*Copenhaga e Proof, uma prova de amor*, peças já interpretadas em Portugal, são excelentes exemplos de tentativas da integração da ciência no teatro.

Algumas das obras de Lima de Freitas são inspiradas na geometria fractal, do matemático Benoit Mandelbrot [7], e o artista visualizou na arte manuelina reminiscências dessa geometria.

E o físico-químico-poeta Rómulo de Carvalho/António Gedeão? *Lágrima de Preta*, por exemplo, é leitura obrigatória, pelo menos para os químicos.

Um belo e apelativo ensaio sobre a integração da ciência, arte, tecnologia e consciência/percepção é a obra recente, *Histórias com Sentidos*, da química Raquel Gonçalves [8].

No âmbito da investigação científica algumas tentativas de unificação são histórias com sucesso. Que devem ser sempre contadas às novas gerações. No que se segue esboçamos alguns exemplos [9, 10].

No século XVII, Newton unificou a gravitação universal e a dinâmica dos corpos, com as suas leis e a invenção da análise infinitesimal (esta também inventada, independentemente, por Leibniz), e com base nas observações de Tycho Brahe, Kepler e Galileu. As consequências desta unificação estenderam-se à química, cosmologia e filosofia. A enorme influência das ideias de Newton transparece no poema, escrito após a sua morte, por Alexander Pope: “Nature and Nature’s laws lay hid in Night! / God said, *Let Newton be!* and all was Light.”

Nos séculos XVIII e XIX, Lavoisier, Dalton, Avogadro e Gay-Lussac, entre outros, iniciaram a unificação da química. Foram enunciadas as leis gerais da estequiometria, baseadas na análise quantitativa e na hipótese atómica. Adicionalmente, Mendeléef construiu a tabela periódica dos elementos químicos, uma expressão da estrutura electrónica dos átomos. Por outro lado, Maxwell unificou a electricidade e o magnetismo, a partir das experiências de Faraday e Ampère. Ao estabelecer as suas equações, Maxwell unificou também o electromagnetismo e

a óptica, dando origem à tecnologia das comunicações. O conhecimento das forças electromagnéticas, por sua vez, contribuiu para a unificação da química e da física. Ainda no século XIX, unificaram-se os conceitos de calor, trabalho e energia na síntese monumental da termodinâmica e da mecânica estatística realizada, fundamentalmente, por Carnot, Mayer, Helmholtz, Clausius, Joule, Lord Kelvin, Boltzmann, Maxwell e Gibbs. As limitações impostas pelo 2.º princípio da termodinâmica, por exemplo, são de enorme importância não só para a física, química, biologia e engenharia, mas também para a economia, política, sociologia e filosofia [11, 12]. Infelizmente, essas limitações são frequentemente desprezadas pelos economistas e políticos.

No século XX, Einstein considerou a equação de ondas de Maxwell e revolucionou a física com a teoria da relatividade restrita. Eliminou a hipótese da existência do éter assim como a do espaço, tempo e simultaneidade absolutas. Unificou a massa e a energia. Depois, Einstein unificou a mecânica, a geometria e a gravitação com a teoria da relatividade generalizada. E, sublinhe-se, mostrou que existe uma *verdade invariante*: as leis da física são absolutamente válidas, isto é, independentes do referencial do observador. Na relatividade universal, afinal, também existem invariantes, o que nem sempre é devidamente apreciado! A partir da comprovação experimental das suas ideias, com as observações astronómicas do grupo liderado por Eddington sobre o eclipse solar de 1919 e, posteriormente, com as realizações da energia nuclear, nada seria como antes na ciência e na filosofia. Mas um dos insucessos de Einstein foi não ter conseguido a unificação das forças electromagnética e da gravidade.

Simultaneamente, Planck descobriu que não só a matéria, mas também a energia é discreta, dando origem à mecânica quântica. Einstein serviu-se da discretização da energia para explicar o fenómeno fotoeléctrico. Mas tal era aparentemente incompatível com a continuidade da energia admitida pela teoria ondulatória que explicava os fenómenos da difracção e interferência. Sur-

giu, então, Louis de Broglie avançando a ideia de que não só a radiação electromagnética, mas também a matéria tem características ondulatórias podendo apresentar fenómenos de difracção e interferência. A comprovação experimental da sua ideia deu lugar, entre muitas outras aplicações, à microscopia electrónica.

Werner Heisenberg enunciou o princípio da incerteza, e Niels Bohr apresentou o princípio da complementaridade e a chamada interpretação de Copenhaga da mecânica quântica. As discordâncias entre Bohr e Einstein originaram o “debate do século XX”, cujo paradigma é o paradoxo EPR (de Einstein, Podolsky e Rosen) [13]. Já no presente século, o físico José Croca, da Universidade de Lisboa, mostrou que as relações de incerteza de Heisenberg não são válidas em todos os casos e deu passos significativos para a unificação das mecânicas clássica e quântica [14].

Glashow, Salam e Weinberg [15] unificaram a força electromagnética e a força fraca, esta responsável por algumas das emissões nucleares, contribuindo para o sonho de uma *theory of everything* (TOE).

Benoit Mandelbrot estabeleceu a geometria fractal [7], adequada para a descrição das estruturas complexas e que tem estreita relação com a teoria do caos. Complementou o conceito de dimensão inteira da geometria euclidiana com o de dimensão fractal expressa por números fraccionários. Como já referimos, a geometria fractal tem implicações na arte. O caos, por sua vez, atravessa as linhas de separação entre as diferentes disciplinas científicas. Tratando-se de uma ciência global dos sistemas, reúne pensadores provenientes de diferentes campos [16].

Watson, Crick e Wilkins [17] descobriram a estrutura em dupla hélice do ADN, a molécula da hereditariedade, contribuindo para a unificação da biologia molecular, bioquímica e medicina. Prigogine continuou os trabalhos de Onsager sobre a termodinâmica dos processos irreversíveis e deu contribuições para o esclarecimento dos processos de organização espontânea e das estrutu-

ras dissipativas, bem como para a filosofia da ciência [18, 19].

Entrou-se na era dos computadores, os quais implementaram muitas das ideias de John von Neumann sobre programas residentes, robótica e autómatos celulares [20]. Lofti Zadeh lançou a lógica difusa (*fuzzy logic*) que generaliza a lógica de Aristóteles, e desenvolveu o conceito de *computação com palavras*, realizações de grande importância no âmbito da inteligência artificial, química, física e tecnologia [21].

Finalmente, a simulação computacional passou a estar na ordem do dia nas mais diversas áreas. No campo molecular, a simulação permite “ver” as moléculas em movimento, confirmar princípios fundamentais, determinar propriedades físicas, esclarecer mecanismos moleculares, descobrir novos fenómenos [22, 23] e explorar aspectos tecnológicos. É tempo de lhe concedermos uma parte da nossa atenção.

### Vamos simular...

Ilustraremos, agora, uma mistura de química, física, arte e simulação computacional, recorrendo a dois exemplos: os fulerenos e as transições de fase em microagregados de cloreto de potássio. O ubíquo computador, que consideramos como mais um instrumento laboratorial, é um elemento unificador não só em ciência, mas em todos os vectores da cultura. De facto, desde a escala atómica à galáctica, será difícil encontrar, presentemente, uma área que não utilize alguma forma de simulação computacional. Simular é imitar, com base num modelo da realidade que nos pareça poder reproduzir, virtualmente, os fenómenos observados. Em ciência, esses modelos traduzem-se normalmente por equações matemáticas. A matemática é, também, uma linguagem que permite integrar, de forma elegante e útil, descrições complexas. Assim, necessita de ser continuamente praticada tal como qualquer outra linguagem. Porquê, então, o “horror” da matemática? Mais adiante voltaremos ao problema das linguagens.

Os fulerenos constituem uma família de moléculas, cujo primeiro representante é o C<sub>60</sub>. Esta substância, é uma forma

possível (designada por *forma alotrópica*) do elemento químico carbono. Outras formas alotrópicas do carbono, bem conhecidas de todos, são o diamante (das tão apreciadas jóias) e a grafite (dos modestos lápis ou dos eléctrodos das pilhas de bolso). O  $C_{60}$  foi descoberto em 1985, pelos químicos Harold Kroto (Reino Unido), Robert Curl (EUA) e Richard Smalley (EUA), laureados com o Prémio Nobel da Química em 1996. A história desta descoberta pode ler-se no artigo de Kroto [24].

Após a confirmação da existência da molécula com 60 átomos de carbono, por espectrometria de massa, faltava um passo essencial: descobrir a sua estrutura, isto é, como se ligam entre si os 60 átomos de carbono. Aqui, entra a arte em acção. Kroto recordou-se de uma visita à cúpula geodésica da Expo67 em Montreal, delineada pelo arquitecto americano Buckminster Fuller, que é considerado como o Leonardo da Vinci do século XX [4].

A bem conhecida estabilidade energética das estruturas geodésicas de Fuller, constituídas pela ligação de hexágonos e pentágonos; a consideração do teorema de Euler (que estabelece que uma caixa fechada, com um número par de vértices, pode construir-se utilizando 12 pentágonos e qualquer número de hexágonos, excepto um); as recordações de um modelo da abóbada celeste feito para os filhos, após a visita à Expo67, e as estruturas das carapaças da tartaruga e da *aulonia hexagona*, levaram Kroto a propor a estrutura da figura para o  $C_{60}$  e, em honra de Buckminster Fuller, a baptizá-lo com o nome de *buckminsterfulereno*.

Esta estrutura foi confirmada em 1990 pelas espectroscopias de ressonância magnética nuclear e de infravermelho.

Mas qual a estabilidade energética do  $C_{60}$ ? Esta, pode estimar-se determinando a temperatura à qual uma molécula se desintegra. Uma simulação, por exemplo, indica-nos essa temperatura. Temos o modelo. Depois, com uns condimentos de mecânica quântica e de mecânica molecular, embrulhados num programa computacional, pode produzir-se um filme. Veja-se:

<http://www.pa.msu.edu/cmp/csc/simulC60melt.html>

O filme mostra que a temperatura de desintegração de uma molécula isolada de  $C_{60}$  é da ordem de 4500K.

E o que dizer das moléculas em conjunto? Quais os efeitos das suas interacções mútuas e eventuais impurezas? Neste caso a experiência parece sugerir que acima de 1200K o  $C_{60}$  sólido é instável formando estruturas amorfas ou poliméricas. Todos estes factos têm de ser compatibilizados. Este é o papel da investigação científica.

A importância dos fulerenos é considerável. Desde a produção de supercondutores e lubrificantes até à dos nanotubos, os quais se espera que irão revolucionar a tecnologia computacional, é um mundo que se abre a todos os interessados.

Vejamos, agora, alguns aspectos das transições de fase de microagregados (“clusters”) de cloreto de potássio. Os resultados experimentais indicam que esta substância apresenta uma transição de fase sólido-líquido à temperatura de 1045K e pressão normal. Contudo, a experiência é realizada com quantidades de cloreto de potássio que contêm um número de moléculas da ordem de  $10^{23}$  (o número de Avogadro). Como se comportarão microcristais dessa substância (com 8, 64, 216, 512, etc. iões)? Também apresentarão transições de fase? E a que temperaturas? O cloreto de potássio pode formar vidros. E os

microagregados? Serão as leis no limite termodinâmico também aplicáveis a sistemas com um número muito pequeno de moléculas?

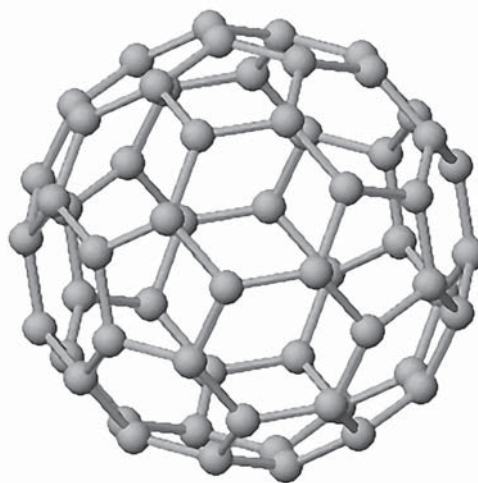
Estes aspectos são de crucial importância. Não esqueçamos, por exemplo, que a formação de qualquer material macroscópico começa por um microagregado. Embora existam técnicas experimentais para estudar microagregados, trata-se de um problema particularmente adequado para ser analisado por simulação computacional. Produzimos alguns filmes sobre o assunto, com base em simulações por Dinâmica Molecular. Podem ser vistos em:

<http://elixir.dqb.fc.ul.pt/clusters>

Aos leitores que consultem essas animações, sugerimos que as imaginem acompanhadas por uma banda sonora. Porque não por exertos do concerto n.º 5 para piano e orquestra do nosso célebre compositor Domingos Bomtempo conduzido, por exemplo, pelo jovem Maestro César Viana do grupo Sinfonia B? É um projecto que esperamos realizar brevemente com novos filmes actualmente em produção.

### Para uma visão global...

Para que uma visão global, unificada, seja cada vez mais o ponto de ordem é imprescindível considerar o problema da consciência. O que é, afinal, a consciência? Podem a física e a química dar contribuições para o seu



estudo? Podem, no futuro, os robots ser conscientes, raciocinar, ter sentimentos, em resumo, ter uma mente, uma inteligência? Qual o papel da consciência, por exemplo, no colapso ou redução dos estados quânticos dos sistemas? [1, 25, 26].

Aqui, interliga-se o aspecto das linguagens dos observadores. Segundo Lee Whorf que foi, entre múltiplas actividades, um reputado engenheiro químico e especialista em linguística:

“We are thus introduced to a new principle of relativity, which holds that all observers are not led by the same physical evidence to the same picture of the universe, unless their linguistic backgrounds are similar, or can in some way be calibrated” (em *Language, Thought and Reality*, [27]).

Em “linguistic backgrounds”, Lee Whorf engloba as linguagens faladas e as expressões pictóricas.

O pensamento, a percepção e as linguagens naturais parecem estar, de facto, intimamente relacionadas. Os índios Hopi do deserto do Arizona [27], por exemplo, percebem o universo sem ter no seu vocabulário qualquer referência, explícita ou implícita, ao tempo. Isto é, o tempo não é observável para essa tribo. Usam outros meios para falar acerca do universo. A sua linguagem expressa a sua percepção, e esta não inclui o tempo!

Curiosamente, o matemático Kurt Gödel defendia que o tempo, ao contrário dos números, não existe em qualquer sentido objectivo, sendo um modo particular humano de perceber o universo [20]. Por outro lado, enunciou, em 1931, o famoso Teorema de Gödel demonstrando que, a partir dum sistema de axiomas e regras de inferência, nem sempre é possível decidir se uma proposição matemática é verdadeira ou falsa. Uma verdadeira “catástrofe” que frustrou o sonho de um grupo de matemáticos, liderados por David Hilbert, de erradicar todos os paradoxos da análise infinitesimal e da teoria dos conjuntos, e fundar a matemática numa base absolutamente certa e completa. A explicação do Teorema de Gödel e o seu significado

na arte, na música e na civilização ocidental pode ler-se em *Gödel, Escher, Bach* [28].

O físico Albert Einstein, por sua vez, discutiu com Jean Piaget, psicólogo, se a nossa compreensão do tempo é primitiva ou derivada e se existirá uma intuição da velocidade independente do tempo [29]. E também afirmou que “So far as the laws of mathematics refer to reality, they are not certain. And so far as they are certain, they do not refer to reality” (citado nas referências [21, 30]).

Os chineses, japoneses e outros povos têm, também, uma visão do universo e práticas diferentes das dos europeus que adoptam as chamadas linguagens indo-europeias. Veja-se *O Tao da Física* [31] do físico Fritjof Capra. É interessante anotar a seguinte passagem deste livro sobre o físico dinamarquês Niels Bohr:

“Niels Bohr estava bem ciente do paralelo existente entre o seu conceito de complementaridade e o pensamento chinês. Quando visitou a China em 1937, numa altura em que a sua interpretação da teoria quântica se encontrava já completamente desenvolvida, ficou profundamente impressionado com a antiga noção chinesa de opostos, e desde aí manifestou interesse pela cultura oriental. Dez anos mais tarde, Bohr foi agraciado com o reconhecimento pela sua importante contribuição para a ciência e para a vida cultural dinamarquesa; e quando teve de escolher um motivo para a sua cota-de-armas, o seu favor foi para o símbolo de *Ta-chi* representando a relação complementar que existe entre os arquétipos opostos de *yin* e *yang*. Ao escolher este tipo de simbologia para a sua cota-de-armas em conjugação com a inscrição *contraria sunt complementa* (os opostos são complementares), Niels Bohr reconheceu a profunda harmonia existente entre a antiga sabedoria oriental e a moderna ciência ocidental”.

É curioso notar, também, o interesse que Albert Einstein nutria pela cultura indiana, patente nas suas relações com o líder Mohanda Gandhi e o es-

critor-poeta Rabindranath Tagore com quem discutiu política, religião e filosofia. Veja-se, por exemplo, *Einstein Viveu Aqui* [32]. A propósito de religião, determinismo e livre arbítrio ouvamos Einstein (citado em [32]):

“Honestamente, não percebo o que querem as pessoas dizer quando falam sobre a liberdade da vontade humana. Tenho a sensação, por exemplo, de desejar uma coisa ou outra; mas não consigo compreender a relação que existe entre essa sensação e a liberdade. Tenho a sensação de desejar acender o meu cachimbo e faço-o; mas como posso relacionar esta vontade com a ideia de liberdade? O que está por trás do acto de *desejar* acender o meu cachimbo? Outro acto de vontade? Schopenhauer disse certa vez: «O homem pode fazer aquilo que quer, mas não pode querer o que quer»”.

Mas, voltando às linguagens, o que dizer da matemática? Esta é, também, uma linguagem, simultaneamente analítica e geométrica (pictórica), mais universal e mais adequada a uma calibração (no sentido de Lee Whorf) do que as linguagens naturais. Além de integrar, de forma elegante e útil, descrições complexas, também pode conduzir à descoberta de fenómenos físicos subtilmente escondidos da percepção imediata. Um belo exemplo é a dedução, puramente matemática, da existência de anti-matéria, realizada pelo físico Paul Dirac em 1928 [13], a qual veio a ser experimentalmente confirmada por Carl Anderson em 1932.

Mas será a matemática uma linguagem essencialmente primitiva e intrinsecamente ligada aos nossos actos de pensamento e percepção? Ou, pelo contrário, uma linguagem que tenta expressar factos percebidos, *a priori*, pelos observadores, mesmo nas realizações matemáticas mais abstractas? Como seria uma matemática avançada desenvolvida pelos índios Hopi? Consideraria, por exemplo, a equação de Schrödinger dependente do tempo?

Os problemas da consciência e da inteligência conduzem a mais simulação computacional. As aplicações que vimos anteriormente pressupõem,

de um modo geral, que os problemas estão exactamente definidos e que a sua resolução pode ser sempre realizada através de algoritmos convencionais, isto é, por um conjunto de operações elementares e sequenciais que processam dados completos e precisos e que, sem qualquer ambiguidade, conduzem a uma única resposta. Esses algoritmos baseiam-se em métodos numéricos sofisticados e recorrem ao cada vez maior poder de cálculo dos computadores.

Nos últimos anos, contudo, tem-se identificado uma vasta série de problemas químicos de extrema complexidade, cuja resolução não pode ser realizada, de um modo eficiente, através daqueles algoritmos. Para estes problemas, o ponto essencial não é mais poder computacional e sofisticação matemática, mas uma aproximação inteiramente diferente.

Consideremos a determinação do número de isómeros do  $C_{26}H_{54}O$  que são alcoóis, o reconhecimento de uma imagem distorcida que possa corresponder a um grande número de objectos, o planeamento de sínteses químicas com vista a novos medicamentos, drogas ou materiais, o projecto do genoma humano, a estereoquímica de proteínas, a selecção de parâmetros óptimos em análise instrumental, o controlo automático e inteligente de instrumentos numa unidade industrial de larga escala, o estudo da dispersão de poluentes, a cinética em fase gasosa, a análise orientada de bases de dados de estruturas moleculares, a determinação das conformações de energia mínima de moléculas complexas, etc. É claro que poderíamos pensar em algoritmos convencionais para resolver os problemas. Todavia, esses casos tipificam o que se denomina como *explosão combinatoria*, isto é, o número de hipóteses e detalhes a considerar é tão grande que dificilmente um método convencional produzirá uma resposta satisfatória em tempo útil, mesmo que se utilizem a força bruta de um supercomputador ou técnicas numéricas sofisticadas. Adicionalmente, quer os dados, quer os resultados associados a esses problemas possuem, geralmente, uma

incerteza intrínseca, a qual tem como consequência que a sequência de operações para a sua resolução seja frequentemente imprevisível e que a solução não seja única, existindo várias respostas, cada uma delas com um certo nível de confiança.

Actualmente, a abordagem de muitos desses problemas é realizada com base nos métodos da inteligência artificial. Esses métodos tentam simular o raciocínio inteligente num computador. A aproximação-chave é o reconhecimento de que o cérebro não funciona sequencialmente, mas possui uma rede massivamente paralela de neurónios. Os neurónios têm, individualmente, um funcionamento semelhante e porventura simples, mas quando dispostos em arquitecturas paralelas convenientes que permitam o processamento simultâneo e integrado, trocando entre eles a informação recebida do exterior ou processada internamente, manifestam, entre muitos outros, dois aspectos essenciais do raciocínio: os saltos intuitivos e a capacidade de aprendizagem com a experiência.

Os métodos de inteligência artificial reproduzem, num computador, essas características com notável sucesso. Permitem, também, manipular dados mal definidos ou mesmo errados. Adicionalmente, tornam possível o uso de uma área de grande e crescente interesse em química e física: a lógica difusa. A lógica difusa mostra que, afinal, as nossas regras formais de raciocínio, estabelecidas por Aristóteles, são demasiadamente rígidas e não permitem uma abordagem correcta de problemas complexos [21,30]. Todos sabemos que, em geral, a resposta a um problema complexo pode não ser exactamente “sim” ou “não”, mas “talvez”; que a cor de um objecto pode não ser exactamente “preto” ou “branco”, mas “cinzento”, e dentro deste existe uma infinidade de tonalidades.

Os progressos realizados mostram que as contribuições da inteligência artificial são cruciais em química computacional. As redes neuronais artificiais, os sistemas-perito (*expert systems*), os algoritmos genéticos, os autómatos celulares e a lógica difusa passarão a

ser ferramentas usuais para qualquer químico num futuro próximo [33, 34].

### Pós-modernismo e heresia...

Nas últimas décadas cresceram as correntes pós-modernas [29, 35-37]. As suas versões mais fundamentalistas são caracterizadas por uma atitude anti-ciência, coberta pelo manto diáfano do humanismo: a ciência não é mais do que uma convenção social, é responsável por uma série de desastres, contribuí para a desumanização das sociedades e está eivada de subjectivismo. Anunciam, deste modo, o “fim da era moderna” e a “crise da objectividade”.

O certo é que esses movimentos pegaram o seu rastilho em todo o mundo, obstruindo projectos de investigação de grande alcance científico e influenciando os currículos de escolas e universidades. Como se as leis de Newton e da mecânica quântica, e os seus ensinamentos e aplicações fossem, de facto, convenções sociais. Isto é, como se a sua validade não fosse comprovada pelo “olho clínico” da evidência experimental.

Todo o progresso numa dada actividade cultural tem, naturalmente, o respectivo reverso da medalha. A ciência e a tecnologia não são, certamente, excepções. No entanto, somente a ciência e a tecnologia podem resolver, através dos seus conhecimentos, métodos e técnicas, os problemas menos positivos que elas possam eventualmente originar. Isto, não é, obviamente, uma convenção social.

A propagação das ideias anti-ciência de algumas facções mais extremistas do pós-modernismo tem contado, claramente, com a iliteracia científica das sociedades que, infelizmente, grassa em todo o mundo, incluindo os Estados Unidos da América [29, 38]. É particularmente preocupante que a ignorância científica seja frequente em alguns governantes influentes e órgãos de comunicação social. Acreditamos que um dos meios para combater a iliteracia científica é reforçar substancialmente a divulgação científica de forma correcta e apelativa. Esta é

uma das responsabilidades que cabe sobretudo aos cientistas.

A despeito das convicções desses movimentos, deve manter-se uma atitude de abertura intelectual perante novas ideias, novas questões e paradoxos que se desprezam, frequentemente, considerando-os como meras especulações metafísicas.

Contudo, atitudes de grande abertura e de quebra do “status quo” de cada vector da cultura, podem ter consequências imprevisíveis e ser consideradas heréticas pelas altas-autoridades das respectivas comunidades. Recordem-se, por exemplo, Sócrates, Jesus Cristo e Galileu. Mas não é necessário recuarmos tanto no tempo, pois pode parecer que se tratam de casos apenas com valor histórico, impensáveis nos tempos modernos da democracia e dos valores universais. Infelizmente, nada mais longe da verdade. Citamos, entre muitos outros, um exemplo actual: o caso de Harold Hillman, médico e especialista em fisiologia, bioquímica e microscopia electrónica. Até 1980 foi um reputado cientista, director do Centro de Neurobiologia Aplicada da Universidade de Surrey, Inglaterra. Um dia, ao entrar no laboratório, deparou-se com um frasco negro contendo ATP (AdenosineTriPhosphate, um composto químico fundamental na energética biológica), encomendado à empresa Sigma Corporation dos Estados Unidos da América, que dizia: “Deve ser guardado ao abrigo da luz”. Como até essa altura os frascos costumavam ser transparentes, Hillman desejou saber a razão da alteração e da advertência. O esclarecimento desse problema, aparentemente simples e sem qualquer importância para os altos desígnios da investigação científica, levou-o a realizar uma série de experiências sobre as células, e as técnicas de fixação, coloração e cortes afins, relativamente à preparação das amostras para a microscopia electrónica. A história é longa e pode ser lida em *O Génio Incompreendido* [39]. Resumidamente, após um intenso labor, Hillman sugeriu que a origem dos lentos progressos na cura do cancro, sida e doença de Alzheimer, por exemplo,

se radica nas estruturas e mecanismos celulares propostos pela biologia. Em sua opinião, muitos desses aspectos, como por exemplo o complexo de Golgi e o retículo endoplasmático, não existem nas células reais, sendo artefactos devidos a alterações provocadas nas células pelas técnicas da microscopia electrónica. Além disso, declarou que tal tem impedido a optimização da investigação em bioquímica, pois a interpretação biológica dos resultados bioquímicos tende a basear-se, em geral, nas imagens fictícias e estáticas propostas pela biologia. Em sequência, avançou a ideia de que os elevados investimentos na investigação biológica, com base na microscopia electrónica, deverão ser preferencialmente encaminhados para um reforço substancial da investigação bioquímica, esta real e dinâmica. Só assim, concluiu Hillman, “se poderá acelerar o progresso da investigação médica”. Enfim, uma “bomba” no seio dos biólogos e microscopistas electrónicos. O epílogo foi dramático. Hillman viu a sua carreira científica arruinada, o laboratório encerrado e recebeu a designação pública de “chalado”. A despeito disto, Hillman teve a seu lado reputados cientistas e ainda resta saber até que ponto as suas ideias são ou não plausíveis. O tempo dirá.

### O código da Ciência...

O caso Hillman e outros semelhantes [39] podem sugerir que não existe ética na ciência e que se trata, afinal, de uma actividade cultural desumana, parecendo consubstanciar algumas das convicções do pós-modernismo. Cremos, no entanto, que esses casos demonstram, pelo contrário, que a ciência, como qualquer outra actividade cultural, é essencialmente humana, exprimindo paixões, pontos de vista diferentes e controversias. Além disso, possui um código de avaliação muito severo, porventura um dos mais exigentes da cultura.

Esse código tem como ponto essencial garantir a originalidade e a validade dos resultados através da sua submissão a avaliadores (“referees”) conceituados e independentes, desconhe-

cidos dos autores e escolhidos pelos corpos editoriais das revistas. Em princípio, os avaliadores submetem os trabalhos a uma análise exaustiva tentando encontrar provas e, sobretudo, contra-provas dos resultados apresentados sugerindo, então, a sua aceitação ou rejeição para publicação. É claro que os avaliadores são humanos e, como tal, também podem cometer erros ou serem parciais sobre a apreciação dos trabalhos submetidos. A eventual parcialidade é atenuada pela regra geral da escolha de vários avaliadores independentes. Adicionalmente, os autores têm sempre a possibilidade de rebater as críticas dos avaliadores ou de resubmeterem os trabalhos a outras revistas.

É gratificante constatar que as críticas dos avaliadores, num número substancial de casos, têm normalmente sugestões importantes que contribuem para o refinamento dos resultados e da sua interpretação. Mas nem sempre é assim e, frequentemente, os autores são obrigados a trabalhos e argumentações ciclópicas para demonstrar a validade das suas ideias. Veja-se, por exemplo, *Nos Bastidores da Ciência* do químico Sebastião Formosinho [40].

A propósito de avaliadores é interessante referir, em especial quando se comemora o centenário das célebres publicações de 1905 do físico Albert Einstein, um artigo recente [41] sobre a discussão, em 1936, entre Einstein e o editor da prestigiada revista *Physical Review*. O artigo relata a recusa de Einstein em considerar as críticas do especialista anónimo, escolhido pelo editor, para avaliar um trabalho sobre ondas gravitacionais. A partir daí, Einstein nunca mais submeteu qualquer artigo a essa revista. A ironia do facto é que o avaliador tinha razão e, mais tarde, Einstein acabou por corrigir o erro que o trabalho efectivamente continha.

Actualmente, existe um outro aspecto característico do incremento das redes internacionais de investigação. Por exemplo, segundo Holton [29], um artigo publicado na *Physical Review D*, em 1992, enumerava 365 autores

de 33 instituições diferentes espalhadas por três continentes [42]. Quem é quem e qual a estratégia de validação nestas situações é, certamente, um problema adicional. A necessidade das redes de investigação surge, sobretudo, em estudos complexos que exijam grandes infraestruturas humanas e técnicas. Os resultados parecem promissores o que poderá confirmar-se, mesmo nestes casos, o código da ciência funciona em geral.

Finalmente, é bom que se diga que a ciência também possui uma espécie de “feira das vaidades” o que, aliás, só reforça a sua face humana. Atente-se, por exemplo, na declaração do químico Gilbert Lewis [43]:

“Science has its cathedrals built by the efforts of a few architects and of many workers”

Resta saber como e em que grupo (dos arquitectos ou dos trabalhadores) se classificará cada um dos membros da extensa comunidade científica.

### É tempo de terminar...

Durante esta digressão fomos, porventura, polémicos, “entrópicos” e contraditórios. Mas não são estes alguns dos ingredientes da ciência e da filosofia?

A nossa posição filosófico-científica é um misto de positivismo lógico e de realismo [13]. Cremos que existe uma certa realidade objectiva que flui “lá fora”, independente dos observadores. Mas também estamos conscientes de que é impossível observar um universo liberto de observadores.

Quanto à contradição, essa angústia inevitável, as palavras do poeta Walt Whitman (citadas em [44]) dão-nos algum alento:

“Do I contradict myself? Well then, I contradict myself. I am large. I contain multitudes”.

### Agradecimentos

O autor agradece reconhecidamente as sugestões do avaliador, em especial a indicação do artigo sobre Einstein publi-

cado, em Setembro de 2005, na revista *Physics Today*.

### Referências

- 1 R. Penrose, *The Emperor's New Mind*, Vintage, London, 1991.
- 2 D. Bohm, *Wholeness and the Implicate Order*, Ark Paperbacks, London, 1985.
- 3 F. Dyson, *Infinito em Todas as Direções*, Ciência Aberta, Gradiva, 1990.
- 4 B. Fuller, *Manual de Instruções para a Nave Espacial Terra*, Via Optima, Oficina Editorial, Lda., Porto, 1998.
- 5 A.H. Maslow, *The Psychology of Science: A Reconnaissance*, Harper & Row, New York, 1966.
- 6 V. Weisskopf, *A Revolução dos Quanta*, Terramar, Mem Martins, 1989.
- 7 B. Mandelbrot, *Objectos Fractais*, Ciência Aberta, Gradiva, 1991.
- 8 R. Gonçalves, *Histórias com Sentidos*, Terramar, Lisboa, 2002.
- 9 J. Simmons, *The Scientific 100. A Ranking of the Most Influential Scientists, Past and Present*, Citadel Press, New Jersey, USA, 1996.
- 10 W. Brock, *History of Chemistry*, Fontana Press, London, 1992.
- 11 J. Rosnay, *O Macroscópio. Para uma visão global*, Editora Arcádia, 1977.
- 12 J. Rifkin, *Entropia. Uma visão nova do Mundo*, Universidade do Algarve, 1987.
- 13 J. Baggott, *The Meaning of Quantum Theory*, Oxford University Press, 1992.
- 14 J. Croca, *Towards a Nonlinear Quantum Physics*, World Scientific Publishing, London, 2003.
- 15 A. Salam, P. Dirac, W. Heisenberg, *Em Busca da Unificação*, Ciência Aberta, Gradiva, 1991.
- 16 J. Gleick, *Caos. A construção de uma nova Ciência*, Ciência Aberta, Gradiva, 1989.
- 17 J. Watson, *A Dupla Hélice*, Ciência Aberta, Gradiva, 1994.
- 18 I. Prigogine, I. Stengers, *A Nova Aliança*, Ciência Aberta, Gradiva, 1987.
- 19 I. Prigogine, *O Fim das Certezas*, Ciência Aberta, Gradiva, n.º 84.
- 20 E. Regis, *Who Got Einstein's Office?*, Penguin Books, London, 1988.
- 21 *Fuzzy Logic in Chemistry*, edited by D.H. Rouvray, Academic Press, New York, 1997.
- 22 F. Fernandes, *Química – Bol. Soc. Port. Quím.*, **90** (2003) 39.
- 23 F. Fernandes, *Química – Bol. Soc. Port. Quím.*, **93** (2004) 49.
- 24 H. Kroto, *Colóquio/Ciências*, **15** (1994), 32.
- 25 E. Squires, *Conscious Mind in the Physical World*, Adam Hilger, Bristol, 1990.
- 26 E. Squires, *The Mystery of the Quantum World*, 2<sup>nd</sup>ed., Institute of Physics Publishing, Bristol, 1994.
- 27 B. Lee Whorf, *Language, Thought and Reality*, The MIT Press, Massachusetts, 1995.
- 28 D. Hofstadter, *Gödel, Escher, Bach: An Eternal Golden Braid*, Vintage Books, New York, 1980.
- 29 G. Holton, *A Cultura Científica e os seus Inimigos*, Ciência Aberta, Gradiva, 1998.
- 30 B. Kosko, *Fuzzy Thinking. The New Science of Fuzzy Logic*, Flamingo, London, 1994.
- 31 F. Capra, *O Tao da Física*, Editorial Presença, Lisboa, 1989.
- 32 A. Pais, *Einstein Viveu Aqui*, Ciência Aberta, Gradiva, 1996.
- 33 H.M. Cartwright, *Applications of Artificial Intelligence in Chemistry*, Oxford Chemistry Primers, n.º11, 1995.
- 34 J. Zupan; J. Gasteiger, *Neural Networks in Chemistry and Drug Design*, 2<sup>nd</sup>ed., VCH, Weinheim, 1999.
- 35 B.S. Santos, *Um Discurso sobre as Ciências*, Edições Afrontamento, 1987.
- 36 A.M. Baptista, *O Discurso Pós-Moderno contra a Ciência*, Ciência Aberta, Gradiva, 2002.
- 37 J.D. de Deus, *Da Crítica da Ciência à Negação da Ciência*, Ciência Aberta, Gradiva, 2003.
- 38 C. Sagan, *Um Mundo Infestado de Demónios*, Ciência Aberta, Gradiva, 1997.
- 39 F. Di Trocchio, *O Génio Incompreendido*, Dinalivro, Lisboa, 2002.
- 40 S. Formosinho, *Nos Bastidores da Ciência*, Ciência Aberta, Gradiva, 1988.
- 41 D. Kennefick, *Physics Today*, **58-9** (2005) 43. (<http://www.physicstoday.org/vol-58/iss-9/p43.html> )
- 42 F. Abe e outros, *Limit of the Top-Quark Mass from Proton-Antiproton Collision at  $\sqrt{s} = 1.8$  TeV*, *Physical Review D*, **45** (1992) 3921.
- 43 G. Lewis; M. Randall, *Thermodynamics*, 2<sup>nd</sup>ed., McGraw-Hill, New York, 1961.
- 44 M. João Seixas, *Conversa com Vasco Pulido Valente*, Pública, n.º 227, 2000.