

## Da ordem ao caos: uma reorientação das ciências e da química

Rafael Cava Mori e Raphael Nagao

Entre os pares de temas estabilidade/instabilidade, determinação/indeterminação, previsibilidade/imprevisibilidade, recorrência/ inovação e ordem/caos, as ciências físicas se voltaram, tradicionalmente, para os primeiros termos de cada dupla. No entanto, principalmente a partir do século XX, três revoluções científicas contribuíram para uma reorientação temática. Com o advento do paradigma do caos, na segunda metade do século em questão – graças aos estudos sobre meteorologia, a geometria fractal e a turbulência –, a investigação da natureza passou a considerar, crescentemente, a importância dos segundos termos. Não tardaria a que esses novos temas (instabilidade, indeterminação, imprevisibilidade, inovação e, em uma palavra, caos) passassem a ser admitidos, também, na química.

► paradigma, caos, reações oscilantes ◀

Recebido em 17/03/2020, aceito em 19/06/2020

337

A presente publicação, primeira de duas partes, trata de um dos assuntos mais fascinantes das últimas décadas: o estudo dos sistemas químicos longe do equilíbrio. Abordá-lo implica esbarrar em pares de temas transversais à química e demais ciências: estabilidade/instabilidade, determinação/indeterminação, previsibilidade/imprevisibilidade, recorrência/ inovação, ordem/caos.

Esta primeira parte defenderá que a ciência, tratando de objetos idealizados, tem privilegiado os primeiros termos dessas duplas. Porém, a emergência do mencionado campo de investigação, abarcando fenômenos complexos – a maior parte das transformações físicas e químicas, a passagem do tempo e a própria vida – requer o emprego dos segundos termos.

Adiante, mostraremos como tal reorientação da ordem ao caos foi se tornando premente para as ciências, e introduziremos a terminologia e os conceitos que serão mais bem explorados na segunda parte do artigo (a ser publicada em um número posterior de *QNEsc*).

A seção "Atualidades em Química" procura apresentar assuntos que mostrem como a Química é uma ciência viva, seja com relação a novas descobertas, seja no que diz respeito à sempre necessária revisão de conceitos.

### A ciência e a busca por domar o universo

Situa-se na Grécia Antiga o surgimento do conceito de *cosmos*, "comunidade jurídica das coisas" (Jaeger, 1994, p. 202), remetido aos ideais de justiça, equilíbrio e beleza. Nesse contexto, os filósofos pré-socráticos da escola jônica – Tales (635-543 a.C.), Anaximandro (610-546 a.C.), entre outros – buscaram compreender a origem (*physis*) desse todo estruturado, propondo a aliança, na busca do conhecimento, da reflexão teórica com a observação empírica.

Até a Idade Média, outras escolas seguiram investigando o *cosmos* e expondo questões ainda relevantes. O problema da indução, por exemplo, já aparecia na filosofia de Aristóteles (384-322 a.C.) e, no Renascimento, alimentou as polêmicas entre Francis Bacon (1561-1626) e René Descartes (1596-1650) (Chalmers, 1993). Para o empirista Bacon, investigar a natureza era uma condição para dominá-la. Já Descartes, racionalista, conceberia a *res extensa*, situando os corpos num espaço geometrizado e homogêneo. Os avanços atribuídos a Galileu Galilei (1564-1642), participe desses debates e tido como fundador da ciência moderna, representaram a superação das concepções cosmológicas antigas, substituídas pelo conceito de Universo.

Caberia à ciência, então, investigar as relações de causa e efeito de que participam os entes universais, expressas

em linguagem matemática, e mobilizando instrumentos específicos, como o *experimentum*, origem do atual experimento científico (Koyré, 1991). As equações de Isaac Newton (1643-1727) tornaram possível descrever e prever trajetórias de corpos moventes, incluindo os astros. Estes, conforme se tornavam menos sacralizados, mais se apresentavam como objetos inteligíveis; lembremos que mesmo o aparente comportamento anômalo dos planetas (o movimento retrógrado, irregularidade intrigante desde os tempos antigos) fora esclarecido pela proposta de órbitas elípticas com foco no Sol.

Os objetos idealizados da física newtoniana (e da química moderna), inseridos na matriz de pensamento do determinismo laplaciano, mantinham compromissos com a estabilidade, a determinação, a previsibilidade, a recorrência - em uma palavra, a ordem

Ainda que baseados em idealizações, tais modelos pareciam cumprir a ambição baconiana pelo domínio da natureza, deslumbrando os entusiastas da modernidade físico-matemática. Pierre-Simon Laplace (1749-1827), na introdução aos *Essai philosophique sur les probabilités* (1814), imaginou que, a uma inteligência que conhecesse estado e movimento de todos os seres (dos corpos astronômicos ao menor átomo), passado e futuro pareceriam presente. Afinal, as funções de deslocamento  $f(t)$ , solúveis para  $t$  ou  $-t$ , são simétricas quanto ao tempo. Por outro lado, essa simetria temporal parecia ignorar a claríssima percepção subjetiva, apreendida pelos sentidos humanos, de que o tempo possui uma direção preferencial.

À mesma época, as tabelas de Torbern Bergman (1735-1784), num ambicioso projeto de reunir dados de todas as possíveis transformações dos corpos, buscavam apor à química maior poder preditivo justamente partindo de um conceito inspirado em Newton, a afinidade (Bensaude-Vincent e Stengers, 1992). A ideia seria desafiada pela noção de equilíbrio químico de Claude-Louis Berthollet (1748-1822), mas o sonho newtoniano continuaria guiando a química, ainda mal compreendida em seus aspectos dinâmicos. De fato, a obra de Berthollet, lançando a noção de equilíbrio, fala de uma “química estática” (*Essai de statique chimique*).

Essa visão do mundo como um relógio, consubstanciada no determinismo laplaciano e no desejo de domar a natureza, seria abalada a partir do século XIX. Aqui, é útil a noção de Kuhn (2007) sobre os paradigmas científicos e suas anomalias. Assim, apesar de a comunidade intelectual aceitar tacitamente o núcleo proposicional do paradigma newtoniano, anormalidades já desafiavam os modelos com trajetórias simétricas em relação ao tempo. Henri Poincaré (1854-1912), no ensaio *Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique* (1890), demonstrou que o problema das interações gravitacionais num sistema determinístico de apenas três corpos (por exemplo, o sistema Terra-Lua-Sol) poderia ser inesperadamente complexo, não admitindo soluções que convergissem para uma quantidade finita de órbitas estáveis, pelo contrário, acenando para um comportamento que poderia ser considerado “caótico”.

O nascente ramo da termodinâmica também obstava a

descrição do mundo nos termos da ciência de então. Seu desenvolvimento, a partir de 1824, agregou à física novos conceitos e categorias descritivas: calor, temperatura, dissipação, entropia. Graças ao trabalho de estudiosos como Josiah Gibbs (1839-1903), essas variáveis foram incluídas no estudo das transformações da matéria, emergindo a subárea da físico-química.

Apesar de tudo, a ciência permanecia vista como empreendimento de domínio sobre a natureza. Os objetos idealizados da física newtoniana (e da química moderna), inseridos na matriz de pensamento do determinismo

laplaciano, mantinham compromissos com a estabilidade, a determinação, a previsibilidade, a recorrência – em uma palavra, a ordem. A própria termodinâmica integrava-se a essa visão de mundo, associando ao calor um teor negativo, a degradação entrópica da energia em nível atômico-molecular. Assim, a percepção subjetiva da passagem do tempo foi apenas parcialmente incorporada pela mecânica, que ignorava o também evidente caráter criativo e inovador das evoluções temporais.

### Três revoluções no século XX

No século XX, esse quadro seria alterado por três revoluções científicas.

A relatividade de Albert Einstein (1879-1955) desfez o espaço cartesiano absoluto e homogêneo, agora descrito como um espaço-tempo, a partir de geometrias não-euclidianas.

Já a física quântica – associada a nomes como Max Planck (1858-1947), Niels Bohr (1885-1962), Louis de Broglie (1892-1987), Werner Heisenberg (1901-1976) e Paul Dirac (1902-1984) – abalou a ideia de determinação, com o princípio da incerteza: diferentemente do mundo macroscópico, em nível atômico não se pode medir, precisa e simultaneamente, posição e momento das partículas. A quantização impossibilitou, também, retratar o movimento dessas partículas como trajetórias newtonianas, substituídas pelo conceito de densidade de probabilidade, associado à função de onda  $\Psi$ .

Apesar dos novos paradigmas, permaneciam imperando as categorias estabilidade, determinação, previsibilidade e recorrência. Como as equações de movimento da física clássica, a função  $\Psi$  é simétrica em relação a  $t$ . Embora a possibilidade de um colapso da função de onda representasse a admissão da irreversibilidade ao menos no mundo submicroscópico, a unidirecionalidade do tempo permanecia à parte das propriedades inerentes dos constructos matemáticos, devendo-se, antes, à atividade de um observador. Fenômenos como o surgimento da vida num universo regido pela degradação energética (ou seja, a eclosão de estruturas organizadas frente à tendência geral à desagregação) continuavam inexplicados. Curiosamente, um dos patronos da física quântica, Erwin Schrödinger (1887-1961), chamaria

a atenção para tais temas, em *O que é vida* (1943). A obra parecia antever a descoberta do DNA (presumindo um cristal aperiódico preñado de informações genéticas) e vislumbrar um intercâmbio energético-entrópico que explicaria a organização celular. Se as reflexões de Schrödinger ocupavam-se de velhas indagações da termodinâmica, é justo reconhecer que a física moderna legou novas questões ontológicas e epistemológicas, na forma de paradoxos relativísticos e quânticos – como que retomando os antigos jogos lógicos da escola grega eleata.

Foi a terceira revolução científica do século XX, já em suas décadas finais, que agravou os empecilhos às concepções científicas deterministas, reorientando os estudos da recorrência para a inovação, da estabilidade para a instabilidade, da ordem para a desordem. Inaugurando a ciência do caos, ela emergiu a partir de três frentes independentes e contemporâneas (anos 1960): os modelos para a previsão meteorológica, a geometria fractal e o estudo da turbulência.

#### A previsão meteorológica

Edward Lorenz (1917-2008), pesquisando a previsão do tempo, programou uma simulação do clima com 12 equações diferenciais. Para reanalisar valores de um dia anterior, o pesquisador iniciou a simulação a partir de um valor com três casas decimais (0,506), tal como impresso pelo computador, obtendo um resultado bastante inesperado.

Mais tarde, percebeu o que se sucedera: a simulação interpretou 0,506 como 0,506000, sendo 0,506127 o valor armazenado no computador. Essa diferença infinitesimal, aparentemente insignificante, causou uma enorme divergência. A ciência se deparava, assim, com uma propriedade inerente a muitos sistemas dinâmicos: a *hipersensibilidade às condições iniciais* ou, como tornaria célebre uma analogia exposta por Lorenz, o “efeito borboleta”.

Todo instrumento de medida, das réguas aos satélites que captam dados atmosféricos, possui imprecisões. No contexto meteorológico, tais incertezas nos valores iniciais (coletados

para alimentar as simulações), minúsculas como o bater de asas de um animal, são suficientes para afetar previsões para além de três dias, inviabilizando-as para além de uma semana. Em sistemas hipersensíveis às condições iniciais, como o clima terrestre, apenas medidas infinitamente precisas permitiriam o determinismo laplaciano! Palavras de Lorenz:

*Quando a instabilidade de um fluxo uniforme em relação às perturbações infinitesimais foi sugerida, pela primeira vez, como explicação para a presença de ciclones e anticiclones na atmosfera, a ideia não foi universalmente aceita. Um meteorologista observou que, se a teoria estivesse correta, um bater de asas de uma gaivota seria suficiente para alterar o curso do clima para sempre. A controvérsia ainda não foi resolvida, mas as evidências mais recentes parecem favorecer as gaivotas (Lorenz, 1963, p. 431, tradução nossa).*

#### A geometria fractal

O matemático Benoit Mandelbrot (1924-2010) estudava problemas em que, em meio à desordem, padrões insistiam em aparecer. Um deles foi a distribuição de preços de algodão, a princípio, aleatória. Em qualquer escala de tempo usada para examinar preços (uma década, um ano, um mês), as curvas de variação pareciam semelhantes. Outro problema foi a presença de ruídos, também aleatórios, nas linhas de transmissão de dados da IBM. O matemático notou que, em qualquer intervalo de tempo (uma hora, um minuto, vinte segundos), haveria períodos ruidosos e períodos limpos. Mandelbrot começou, então, a construir a ideia de *simetria em diferentes escalas* nos sistemas dinâmicos. Particularmente no

caso dos dois fenômenos em questão, uma imagem capaz de traduzi-los é o Conjunto de Cantor: infinitos fragmentos de um segmento de reta que, somados, não possuem comprimento (Figura 1).

Foi a terceira revolução científica do século XX, já em suas décadas finais, que agravou os empecilhos às concepções científicas deterministas, reorientando os estudos da recorrência para a inovação, da estabilidade para a instabilidade, da ordem para a desordem.

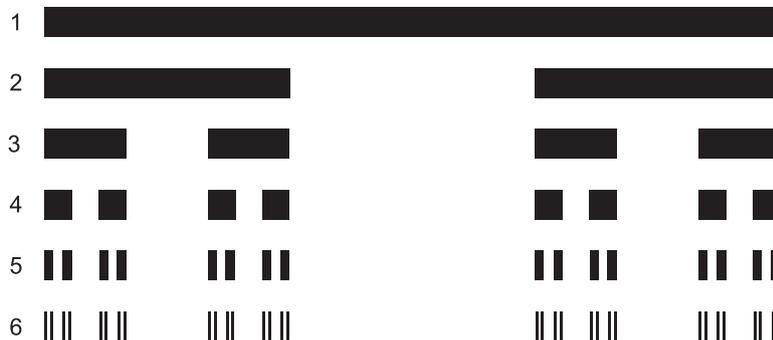


Figura 1: Conjunto de Cantor. A operação representada consiste em, dado um segmento de reta, dividi-lo em três segmentos iguais e excluir a terça parte do meio. Faz-se o mesmo nos dois segmentos restantes, e assim por diante. Na imagem, o processo foi interrompido em sua quinta iteração. Prosseguindo-se até a iteração  $n \rightarrow \infty$ , obtém-se um objeto composto por infinitos pontos e comprimento nulo, com dimensão fracionária (0,6309... – ou seja, intermediária entre a dimensão pontual nula e a dimensão unitária de uma reta).

Na mesma década, o pesquisador estudou a extensão das fronteiras territoriais. Apesar de a questão parecer simples, um sintoma de sua complexidade era o fato de diferentes enciclopédias apontarem extensões, para as fronteiras europeias, discordantes em até 20%. Isso porque tais valores dependem da escala eleita para medi-los. Uma gradação de 1 km não cobre reentrâncias e demais irregularidades menores – que, surpreendentemente, se manifestam das escalas mais diminutas às mais gigantescas.

Em 1975, Mandelbrot cunhou o termo *fractal* para designar entes com simetria em diversas escalas, ou auto-similaridade. Ainda, desenvolveu o conceito de dimensão fractal, associado ao grau de aspereza, fragmentação e irregularidade de um objeto. Enquanto as dimensões a que estamos acostumados são números inteiros, a dimensão de um objeto fractal pode ter valor fracionário. Exemplos e respectivas dimensões, entre objetos fractais matemáticos, são a Curva de Koch (1,2618) e o mencionado Conjunto de Cantor (0,6309). A mesma análise vale para artefatos reais aproximadamente fractais, incluindo exemplares de interesse químico. O carvão ativado pode ter um valor dimensional entre 3,0 e 2,3, a depender de sua granulidade (Jaroniec *et al.*, 1993). Já uma proteína como a lisozima possui dimensão fractal próxima a 2,2 (Pfeifer *et al.*, 1985). Os dois exemplos se referem a objetos com enorme área superficial em comparação com seus volumes.

A onipresença dos fractais é evidente: no feto de uma samambaia, na frequência dos terremotos, na hidrografia de um território, no aspecto ramificado de nosso sistema circulatório. Por isso, fala-se dos fractais enquanto “uma geometria da natureza” – como disse Mandelbrot, “Nuvens não são esferas, montanhas não são cones, litorais não são círculos, a casca das árvores não é lisa, nem a luz viaja em linha reta” (c1983, p. 1, tradução nossa).

#### A turbulência

Imagine uma torneira escoando um líquido viscoso, como a água. Conforme aumenta a potência do fluxo proporcionalmente ao grau de abertura da torneira, o sistema atravessa os seguintes estados: escoamento estacionário como filete d’água, pulsações periódicas na coluna fluida e, finalmente, turbulência. Essas observações são conhecidas há tempos; as águas em movimento mereceram a atenção de ninguém menos que Leonardo da Vinci (1452-1519), que inclusive integrou o estudo da turbulência a investigações anatomo-fisiológicas sobre a passagem do sangue pela válvula aórtica do coração<sup>1</sup>.

Por algum tempo, a interpretação teórica de Landau (1944) sobre o fenômeno pareceu satisfatória. Segundo ela, o aumento da potência de escoamento promove a excitação de diferentes modos de vibração da coluna d’água: no escoamento estacionário, nenhum modo é excitado; nas oscilações periódicas, excitam-se um ou poucos modos, num equilíbrio

dinâmico; a turbulência representaria, por fim, a excitação de muitos modos que, de toda forma, não se acoplam (não interagem entre si), num estado já afastado do equilíbrio.

O belga David Ruelle (1935-), influenciado pelas ideias matemáticas de René Thom (1923-2002) e Steve Smale (1930-), passou a questionar a teoria dos modos, segundo ele, capaz de explicar apenas evoluções temporais desinteressantes (Ruelle, 1993). Pelo contrário, a análise do fluxo turbulento revelava um espectro contínuo de frequências, e não uma sobreposição de modos discretos sem acoplamento. No artigo *On the nature of turbulence*, Ruelle, junto de Floris Takens (1940-2010), reexaminou o problema por meio de uma ferramenta geométrica conhecida como espaço de fases, demonstrando que uma modelagem mais realista do escoamento conduziria ao conceito de *atrator estranho*.

Para explicá-lo, retornemos à pesquisa de Lorenz. Outro sistema por ele estudado, ainda no âmbito meteorológico, foi a formação de correntes de convecção, que surgem quando há um gradiente de temperatura num fluido. A porção mais quente do fluido se expande (ficando menos densa) e, assim, sobe; ao subir, entra em

contato com porções mais frias, se contrai (ficando mais densa) e, então, volta a descer. Imagina-se que, após certo tempo, o sistema se estabilize numa oscilação periódica ou num estado estacionário. Porém, com um modelo de apenas três equações diferenciais, Lorenz mostrou haver condições em que isso jamais acontece, fixando-se um regime de oscilações não-periódicas. Graficamente, as três equações geravam uma curva que, continuamente desenhada, não se repetia em nenhum ponto, apesar de restrita a um formato e a uma região bem definida: o Atrator de Lorenz, que se tornaria o mais célebre dos atratores estranhos propostos, paralelamente, por Ruelle e Takens.

Além de revelar um contínuo de frequências temporais, como demonstrou Ruelle, um atrator estranho tem duas propriedades de que já falamos: hipersensibilidade às condições iniciais e dimensão fracionária. De fato, *On the nature of turbulence* menciona a presença do Conjunto de Cantor enquanto componente da formulação matemática do primeiro exemplo de atrator estranho assim nomeado (Ruelle e Takens, 1971).

A Figura 2 mostra, num espaço de fases, um sistema atravessando estados cada vez mais afastados do equilíbrio, conforme um de seus parâmetros é alterado. Chama-se *bifurcação* cada mudança qualitativa na evolução de um regime estacionário para oscilações periódicas, e então para o comportamento caótico: de um ponto fixo a um ciclo limite, e daí a um atrator estranho.

#### A consolidação do paradigma, repercussões na química e considerações até aqui

Segundo Ruelle, com a aceitação dos atratores estranhos e o reconhecimento de Lorenz,

A onipresença dos fractais é evidente: no feto de uma samambaia, na frequência dos terremotos, na hidrografia de um território, no aspecto ramificado de nosso sistema circulatório.

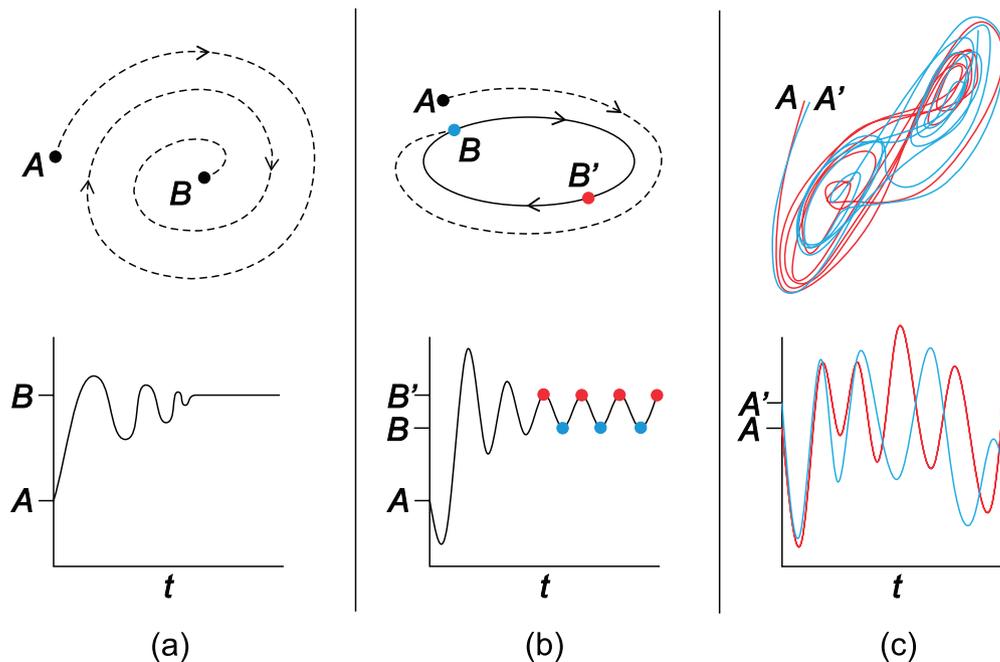


Figura 2: Três momentos da evolução de um sistema dinâmico. Na parte de cima, representações típicas de espaços de fase, simplificadas. Abaixo, representações aproximadamente equivalentes em coordenadas cartesianas. a) *ponto fixo atrator*: o sistema, partindo de um estado qualquer A, espontaneamente caminha em direção ao estado B, em equilíbrio; b) *ciclo limite*: a partir do estado A, o sistema caminha em direção a um regime de oscilações periódicas entre os estados B e B'; e c) *atrator estranho*: as oscilações não-periódicas mantêm o sistema num regime caótico, longe do equilíbrio e hipersensível às condições iniciais – os estados próximos A e A', representados por cores diferentes, divergem rapidamente, à medida que a dinâmica prossegue. Os eixos não estão em escala e a diferença entre B e B' é muito maior que a diferença entre A e A'.

*Surge um novo paradigma, batizado como caos por Jim Yorke [1941-], um matemático aplicado da Universidade de Maryland. O que agora chamamos de caos é uma evolução temporal com dependência hipersensível às condições iniciais. O movimento sobre um atrator estranho é, portanto, caótico. Fala-se também de ruído determinista quando se observam oscilações irregulares de aparência aleatória, mas que são produzidas por um mecanismo determinista. Nos fenômenos caóticos, a ordem determinista cria, portanto, a desordem do acaso* (1993, p. 93, grifo do autor).

Aos poucos, foram sendo propostos modelos matemáticos capazes de explicar a sucessão de bifurcações – de estados estacionários, passando por oscilações periódicas, até o caos. Esses modelos, estudados por Mitchell Feigenbaum (1944-2019), Robert May (1936-2020) e o próprio Yorke, entre outros, mostram como a variação de um único parâmetro do sistema pode levá-lo a bifurcar, com o regime oscilatório atravessando períodos múltiplos de 2 (4, 8, 16...) até alcançar um estado de oscilações não-periódicas, caótico.

São modelos tão elementares quanto a chamada equação logística, na forma  $x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$ . Nessa simples equação quadrática discreta, o valor de cada variável  $x_{n+1}$  depende de um valor anterior  $x_n$ . Trata-se, portanto, de uma dinâmica

retroalimentada. Observou-se que o incremento do parâmetro  $r$  leva a sucessivas bifurcações, dado um valor de partida para  $x_n$ :

- se  $0 < r \leq 1$ ,  $x \rightarrow 0$ ;
- se  $1 < r < 3$ ,  $x$  converge para um único valor (ponto fixo atrator);
- se  $3 \leq r < 1 + \sqrt{6}$  ( $\cong 3,45$ ),  $x$  oscila entre dois valores;
- se  $1 + \sqrt{6} \leq r < 3,57$  (aproximadamente), ocorrem sucessivas duplicações de período a cada incremento em  $r$ , e cada vez mais rapidamente;
- se  $r \geq 3,57$  (aproximadamente), as oscilações são caóticas. (Ao leitor, fica o exercício de verificar, aqui, a hipersensibilidade às condições iniciais).

Curiosamente, o incremento de  $r$ , daí em diante, pode conduzir a oscilações de período múltiplo de 3, 5, 7... – janelas de ordem ou ilhas de estabilidade que, repentinamente, podem ceder novamente ao caos. Ainda, é possível demonstrar que um diagrama representando os valores de  $x_{n \rightarrow \infty}$ , em função de  $r$ , possui auto-similaridade, quer dizer, propriedades fractais.

O estudo de modelos com essa forma foi, aos poucos, se trasladando da hidrodinâmica para outras áreas. De fato, a equação

logística é adequada para estudos ecológicos sobre relações entre presas e predadores, podendo ser aplicada em diversos outros casos. Há de se perguntar, assim, se é possível falar de tais modelos no âmbito químico.

**Aos poucos, foram sendo propostos modelos matemáticos capazes de explicar a sucessão de bifurcações – de estados estacionários, passando por oscilações periódicas, até o caos.**

Quadro 1: características do empreendimento científico, em seus diferentes paradigmas, da Antiguidade às revoluções científicas da física moderna.

Período	Campo	Conceitos	Anomalia ou desafio	Ferramentas matemáticas	Tema
Antiguidade a Idade Média	filosofia da natureza	cosmos, Ser, movimento (mudança), origem/essência	paradoxos lógicos, movimento retrógrado	lógica, aritmética, álgebra, geometria euclidiana	ordem (comunidade jurídica, equilibrada e bela)
Idade Moderna	mecânica	Universo, movimento (deslocamento), órbita, experimento, predição/controlado	problema dos três corpos	cálculo infinitesimal, geometria analítica	ordem (equilíbrio mecânico, estático)
transição para a Idade Contemporânea	termodinâmica	máquina, movimento (atômico/molecular), estado, calor, energia, conservação, entropia	evolução num universo tendente à desordem	diferenciais de função de estado, séries	ordem (em resistência à dissipação entrópica)
Idade Contemporânea	física moderna	descontinuidade, orbital, quantização, probabilidade	paradoxos quânticos e relativísticos	operadores, matrizes, geometria não euclidiana	ordem (espaço-temporal probabilística)

A resposta é afirmativa. O próprio Ruelle, tendo conhecimento de um artigo de Pye e Chance (1966) sobre reações oscilantes de origem biológica, vislumbrou a hipótese de que as oscilações químicas pudessem se dirigir à turbulência. No entanto, suas ideias foram recebidas com frieza – o que ilustra, eloquentemente, a resistência da comunidade científica em lidar com temas e fenômenos afins a um novo paradigma:

*[...] fui à Filadélfia ver o professor Chance e um grupo de seus colaboradores, e lhes expliquei ser possível observar oscilações químicas não-periódicas, ou “turbulentas”, tanto quanto oscilações periódicas. Infelizmente, o “perito matemático” do grupo deu uma opinião negativa e Chance se desinteressou de minha ideia. Um pouco mais tarde, tive oportunidade de explicar minhas ideias a Pye, que deu mostras de maior compreensão. Mas ele me explicou que, se estudasse uma reação química e obtivesse um resultado “turbulento” e não-periódico, consideraria fracassada a experiência e jogaria seu registro no lixo (Ruelle, 1993, p. 96-97).*

Anos depois, o próprio Ruelle publicaria um artigo sobre o tema, conjecturando que uma dinâmica caótica, nos sistemas químicos de interesse biológico, poderia ter grande significado fisiológico, ou mesmo patológico (Ruelle, 1973). De fato, mais tarde, não só as reações caóticas foram observadas (Roux *et al.*, 1980), como deram ensejo à “primeira reconstrução explícita de um atrator estranho” (Ruelle, 1993, p. 97). Na segunda parte desta publicação, analisaremos tais regimes oscilatórios e suas consequências para além da química.

Como considerações provisórias, ressaltamos que, nesta primeira parte, buscamos mostrar que o tema da desordem

– e, conseqüentemente, da passagem do tempo, abarcando comportamentos não apenas aperiódicos, como inovadores – é passível de ser incorporado à ciência sem que ela abdique de seu compromisso com a exatidão e a objetividade. Mesmo a equação logística, cujas duplicações de período constituem uma “rota para o caos”, não deve ser encarada para além do que ela própria se mostra ser: um modelo que, se não realiza o determinismo laplaciano, ao menos favorece um diálogo mais profícuo entre homem e natureza.

Um resumo diagramático de nossa exposição, até o desenvolvimento da física moderna, é apresentado no Quadro 1, que será retomado e complementado na próxima publicação.

### Nota

1. O capítulo “Leonardo da Vinci 500 anos depois”, na obra de Koyré (1991), discorre sobre as contribuições do italiano para a história da ciência e da tecnologia. Infelizmente, não aborda os estudos de Leonardo sobre a turbulência.

### Agradecimentos

À Fapesp (processo 2016/01817-9) e ao CNPq (processo 405235/2018-6). Este artigo é dedicado à memória do professor Ernesto Rafael Gonzalez (1938-2020), quem apresentou-nos os conceitos aqui abordados.

**Rafael Cava Mori** (rafael.mori@ufabc.edu.br), bacharel e licenciado em Química, mestre e doutor em Físico-Química pela Universidade de São Paulo. É docente do Centro de Ciências Naturais e Humanas, da Universidade Federal do ABC. Santo André, SP – BR. **Raphael Nagao** (nagao@unicamp.br), bacharel em Química, mestre e doutor em Físico-Química pela Universidade de São Paulo. É docente do Instituto de Química, da Universidade Estadual de Campinas. Campinas, SP – BR.

## Referências

BENSAUDE-VINCENT, B.; STENGERS, I. *História da química*. Tradução de Raquel Gouveia. Lisboa: Instituto Piaget, 1992.

CHALMERS, A. F. *O que é ciência afinal?* Tradução de Raul Filker. São Paulo: Brasiliense, 1993.

JAEGER, W. *Paidéia: a formação do homem grego*. Tradução de Artur M. Parreira. 3. ed. São Paulo: Martins Fontes, 1994.

JARONIEC, M.; GILPIN, R. K.; CHOMA, J. Correlation between microporosity and fractal dimension of active carbons. *Carbon*, New York, v. 31, n. 2, p. 325-331, 1993.

KOYRÉ, A. *Estudos de história do pensamento científico*. Tradução de Marcio Ramalho. 2. ed. Rio de Janeiro: Forense Universitária, 1991.

KUHN, T. S. *A estrutura das revoluções científicas*. Tradução de Beatriz Vianna Boeira e Nelson Boeira. 1. reimpr. da 6. ed. São Paulo: Perspectiva, 2007.

LANDAU, L. D. On the problem of turbulence (in Russian). *Doklady Akademii Nauk Armjanskoj SSR*, Erivan, v. 44, p. 339-342, 1944.

LORENZ, E. N. The predictability of hydrodynamic flow. *Transactions of the New York Academy of Sciences*, New York, v. 25, n. 4, p. 409-432, 1963.

MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. New York: W. H. Freeman & Company, c1983.

PFEIFER, P.; WELZ, U.; WIPPERMANN, H. Fractal surface

dimension of proteins: Lysozyme. *Chemical Physics Letters*, Amsterdam, v. 113, n. 6, p. 535-540, 1985.

PYE, K.; CHANCE, B. Sustained sinusoidal oscillations of reduced pyridine nucleotides in cell-free extracts of *Saccharomyces calshbergensis*. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Washington, v. 55, p. 888-894, 1966.

ROUX, J. C.; ROSSI, A.; BACHELART, S.; VIDAL, C. Representation of a strange attractor from an experimental study of chemical turbulence. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 77, p. 391-393, 1980.

RUELLE, D. *Acaso e caos*. Tradução de Roberto Leal Ferreira. São Paulo: Unesp, 1993.

RUELLE, D. Some comments on chemical oscillations. *Transactions of the New York Academy of Sciences*, v. 35, n. 1, p. 66-71, 1973.

RUELLE, D.; TAKENS, F. On the nature of turbulence. *Communications in Mathematical Physics*, Berlin, v. 20, p. 167, 1971.

## Para saber mais

GLEICK, J. *Caos: a criação de uma nova ciência*. Tradução de Waltensir Dutra. 17. ed. Rio de Janeiro: Campus-Elsevier, 2008.

STEWART, I. *Será que Deus joga dados?: a nova matemática do caos*. Tradução de Maria Luiza X. de A. Borges. 2. ed. Rio de Janeiro: Jorge Zahar, 2011.

**Abstract:** *From order to chaos: a reorientation of sciences and chemistry.* In the pairs of subjects stability/instability, determination/indetermination, predictability/unpredictability, recurrence/innovation and order/chaos, the physical sciences have traditionally focused on the former terms of each pair. However, mainly from the 20<sup>th</sup> century onwards, three scientific revolutions contributed to a thematic rearrangement. With the advent of the chaos paradigm, in the second half of that century – thanks to studies on meteorology, fractal geometry and turbulence –, research of nature began to increasingly consider the importance of the latter terms. It would not be long before these new subjects (instability, indetermination, unpredictability, innovation and, in a word, chaos) would be admitted also in chemistry.

**Keywords:** paradigm, chaos, oscillating reactions