

Computadores em Química

Uma nova Secção Temática do Boletim

O director do Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, Professor Moura Ramos, solicitou-nos que coordenássemos esta nova secção temática.

É um trabalho sem dúvida aliciante numa altura em que os computadores são uma ferramenta importante no ensino e na investigação em Química. Todavia é, simultaneamente, uma tarefa árdua se quisermos, como é a nossa intenção, manter um equilíbrio entre a sobrevalorização e a subvalorização do uso dos computadores no ensino e na investigação.

Neste sentido, pensamos que é fundamental dirigir esta secção temática sobretudo às *aplicações* em Química e áreas afins. De acordo com a classificação do Chemical Abstracts, sugerimos aos leitores que as suas contribuições sejam fundamentalmente nos seguintes temas:

- a) Análise de Sistemas Físico-Químicos
- b) Controlo de Processos
- c) Bioquímica e Ciência da Informação

onde as componentes pedagógica e científica se devem aliar tanto quanto possível. De facto, nem o Boletim da Sociedade Portuguesa de Química, nem os químicos em geral, estão certamente vocacionados para problemas específicos da Informática e Ciências da Computação, à parte, evidentemente, os aspectos que possam estar relacionados com as aplicações em Química.

Gostaríamos de sugerir aos leitores que evitassem, tanto quanto possível, a apresentação das listagens dos seus programas. Na verdade, a experiência tem mostrado que a listagem dum programa, numa linguagem de programação particular, torna a análise do algoritmo subjacente difícil e desmotivada, muitas vezes, a aplicação do método. Uma alternativa que nos parece mais aliciante é a explicação sucinta do método utilizado e a apresentação do respectivo algoritmo numa forma clara que passaremos a designar por *notação algorítmica*. A utilização desta notação, que exemplificamos no artigo seguinte: "Si-

mulação duma curva de titulação ácido fraco-base forte" (que pode ser classificado no tema a) referido anteriormente) liberta o leitor do conhecimento duma linguagem de programação particular ao mesmo tempo que torna claro o algoritmo e possibilita, muito mais facilmente, a sua codificação na linguagem que o utilizador prefira ou tenha, no momento, à sua disposição.

Tal não significa que consideremos inúteis as listagens dos programas. De facto, um dos objectivos desta secção temática é constituir uma biblioteca de programas de aplicações em Química. Neste momento, ainda não temos completamente assente qual o melhor suporte físico para essa biblioteca e quais as suas regras de utilização. No entanto, os leitores serão certamente solicitados, na devida altura, a enviarem-nos as listagens dos seus programas para que sejam arquivados e possam ser utilizados, dentro das regras estabelecidas, por todos os interessados.

Um outro objectivo desta secção temática é manter um levantamento actualizado, a nível nacional, dos meios computacionais em Química utilizados pelas Universidades e Escolas Secundárias. Tal levantamento tem o propósito de dar a conhecer aos leitores os meios computacionais de que os químicos dispõem, das suas dificuldades e ainda de despoletar esforços para que a comunidade química portuguesa possa dispor de meios computacionais de nível internacional.

Para terminar a abertura formal desta nova secção temática do Boletim, queremos sublinhar a nossa firme vontade de que a Sociedade Portuguesa de Química passe a dispor de uma secção que dinamize e apoie as aplicações dos computadores em Química e que intervenha activamente na criação de meios computacionais dignos para a comunidade científica portuguesa. Para tal contamos, desde já, com o interesse de todos os químicos portugueses.

Fernando M. S. Silva Fernandes

Departamento de Química e CECUL
Faculdade de Ciências de Lisboa

