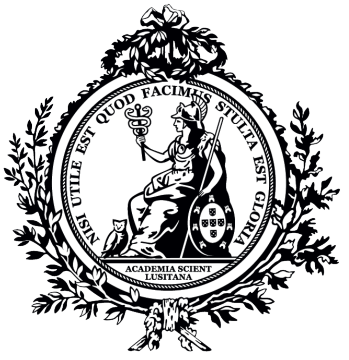
MEMÓRIAS
DA
ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
DE
LISBOA

CLASSE DE CIÊNCIAS

TOMO XLVII
Volume 2



ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
DE LISBOA

LISBOA • 2020

MEMÓRIAS
DA
ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
DE
LISBOA

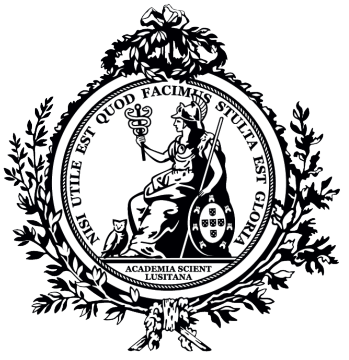
O tomo XLVII das *Memórias da Academia das Ciências de Lisboa – Classe de Ciências* reúne as comunicações apresentadas nas sessões académicas da Classe de Ciências nos anos de 2017 e 2018. O presente volume 2 reúne as comunicações apresentadas em 2018.

Título:	Memórias da Academia das Ciências de Lisboa Classe de Ciências Tomo XLVII – Volume 2
Edição:	Academia das Ciências de Lisboa
Impressão:	Gráfica 99
Data de impressão:	Dezembro 2020
ISBN:	978-972-623-393-0
Depósito legal:	447397/18

MEMÓRIAS
DA
ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
DE
LISBOA

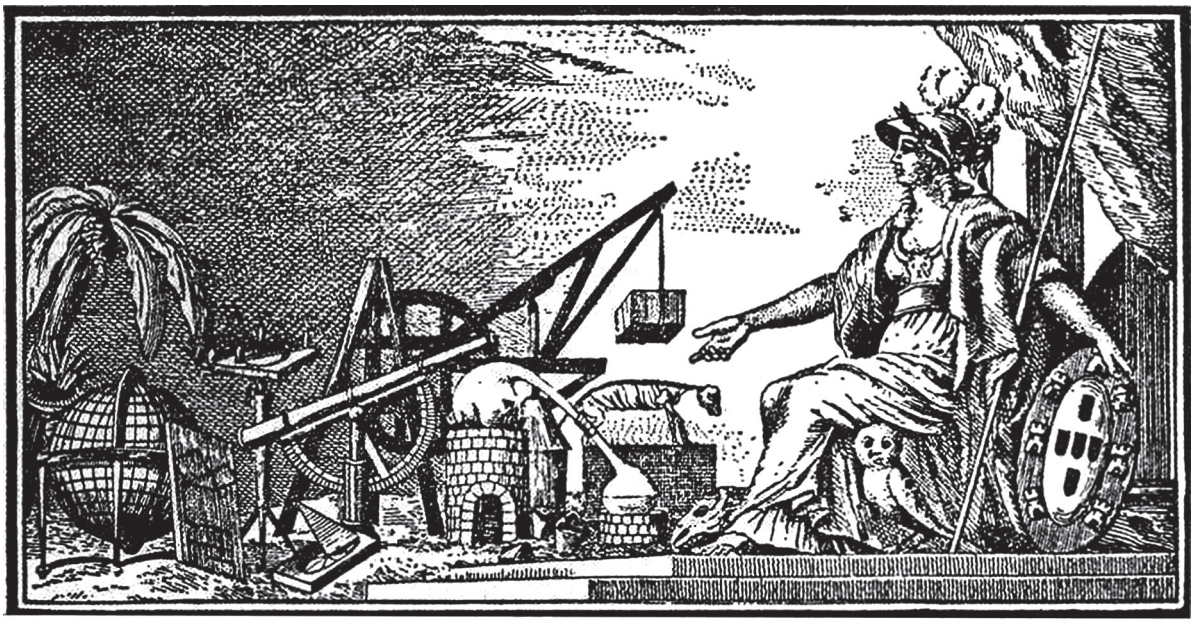
CLASSE DE CIÊNCIAS

TOMO XLVII
Volume 2



ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
DE LISBOA

LISBOA • 2020



4 Décadas *a Falar* com Computadores

Isabel Trancoso[1]

Esta apresentação pretende ser não só uma retrospectiva sobre a investigação em tecnologias da fala nos últimos quarenta anos, e a panóplia de aplicações que o progresso recente nestas tecnologias potencia, mas também uma reflexão sobre o futuro desta área.

A retrospectiva cobre apenas duas tecnologias cruciais – a conversão de fala para texto e a conversão de texto para fala – distinguindo em qualquer delas quatro gerações. A primeira geração de sistemas de conversão de fala para texto (mais conhecida como reconhecimento automático de fala, ou ASR – *Automatic Speech Recognition*), cobre a década de 60 (e anteriores), em que as abordagens eram sobretudo heurísticas. Na segunda, ao longo da década de 70, predominaram as abordagens baseadas em reconhecimento de padrões. A terceira geração estendeu-se pelas três décadas seguintes, com um sem número de abordagens estatísticas em que predominaram os modelos de Markov não observáveis. A quarta geração surgiu cerca de 2010 e é hoje em dia completamente dominada pelas abordagens de aprendizagem automática baseadas em *deep learning*.

A primeira geração dos sistemas de síntese de fala a partir de texto (ou TTS – *Text-to-Speech Synthesis*) pode considerar-se como abrangendo as décadas de 60 a 80, com o predomínio dos sistemas de síntese por regra. A segunda geração cobre as décadas de 80 e 90, e é dominada pelas abordagens de síntese por concatenação que, do ponto de vista comercial, são ainda muito importantes hoje em dia. A terceira

[1] INESC-ID / Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa

geração surgiu na primeira década deste século numa tentativa de conciliar modelos estatísticos e paramétricos. Tal como nos sistemas de reconhecimento de fala, também em síntese as abordagens baseadas em *deep learning* marcam a quarta geração, cujo início podemos novamente situar na presente década. Apesar da enorme complexidade destes sistemas, sobretudo os do tipo *end-to-end*, é importante não os encarar como "caixas negras", mas antes procurar captar o que eles estão internamente a aprender.

Ao longo das quatro gerações temos podido observar interessantes mudanças de paradigma que conduziram a reduções cada vez maiores da taxa de erro dos reconhecedores de fala que em certas condições se aproximam do comportamento humano. Também na síntese da fala, as tecnologias da quarta geração têm vindo a permitir progressos de tal ordem que se corre o risco de deixar de ser possível distinguir entre a fala real e sintética de uma pessoa, o que pode colocar questões de autenticidade graves, por exemplo, na esfera judiciária.

Todo este progresso permitiu nesta última década uma verdadeira explosão de aplicações destas tecnologias da fala, com um grande destaque para os assistentes virtuais (incluindo os robóticos), embora ainda existam muitos problemas de usabilidade. As aplicações destas tecnologias a outras áreas como a da saúde e a do ensino da língua são bem menos conhecidas, mas com um enorme impacto potencial.

A reflexão sobre o futuro desta área deixa no ar uma pergunta: "Chegámos lá?", em que se questiona quão perto ou longe estamos do desempenho de um humano, e o tipo de abordagens que melhor tentam lá chegar, salientando no entanto as diferenças entre os progressos alcançados em tarefas do tipo percetivo e cognitivo, e alertando para os perigos da má utilização destas tecnologias.

(Resumo da comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 11 de janeiro de 2018)

O *Ensaio* de 1939 de António Monteiro, o seu contexto e a sua importância

José Francisco Rodrigues[1]

O inédito e ignorado "Ensaio sobre os FUNDAMENTOS da ANÁLISE GERAL" de 1939, prémio Artur Malheiros de 1938 atribuído pela Academia das Ciências de Lisboa a António Aniceto Ribeiro Monteiro, é uma monografia que introduz o modernismo matemático e prepara uma viragem na investigação matemática em Portugal, antecedendo a criação do Centro de Estudos Matemáticos de Lisboa, em 1940, apoiado pelo Instituto para a Alta Cultura.

Regressado de Paris, onde se doutorara em 1936 com Maurice Fréchet (1878-1973), Monteiro faz uma extraordinária e original síntese, em quatro capítulos abstratos, que vai da *Teoria dos Conjuntos* à *Análise Geral*, passando pela *Álgebra Moderna* e pela *Topologia Geral*, e estabelece, em bases firmes, a via da investigação do movimento matemático português no início da década de quarenta do século XX. Nesta comunicação, motivada pela reorganização dos arquivos da Academia em fins de 2015, apresentamos uma introdução e uma análise preliminar deste importante *Ensaio*, agora publicado em *fac-símile*, das suas fontes e da sua influência que se pode identificar nos posteriores trabalhos de Monteiro e dos seus discípulos.

ANTÓNIO ANICETO MONTEIRO (1907-1980) – *MATEMÁTICO MODERNISTA, FUNDADOR E PROFESSOR*

Em 2007, no centenário de António Monteiro, a Sociedade Portuguesa de Matemática (SPM) prestou-lhe uma justíssima homenagem, publicando uma notável fotobiografia [AAM_Fb2007] e organizando um Colóquio Internacional na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL), do qual resultou um número especial do seu Boletim [AAM_Bc2007].

Fig. 1. Capas do livro fotobiográfico [AAM_Fb2007] e do Boletim especial [AAM_Bc2007]

[1] ACL, Faculdade de Ciências/ULisboa.

No ano seguinte, foi publicada uma extensa compilação das suas *Obras,* em oito volumes com cerca de 2800 páginas, onde não foi possível incluir o seu *Ensaio* de 1939, pois na altura não era conhecida nenhuma cópia. Na apresentação das *Obras* [AAM_O2008], Jean-Pierre Kahane, da Academia das Ciências de Paris, iniciou o seu significativo elogio escrevendo:

> *The works of António A. Monteiro belong to the world history of mathematics. They cover a large variety of topics from classical analysis to topology and from advanced algebra to logic in its more modern chapters. Some of them come from courses and synthetic presentations, but the majority of them are research papers. They are presented in different styles, occasionally handwritten, and also in different languages. Despite their intrinsic value, these works are a testimony of an age and of an exceptional life. They were written, in four different countries: France, Portugal, Brazil and Argentina. Monteiro was the founder of mathematical journals and various mathematical institutions, first in Portugal, then in Latin America. He had to emigrate from Portugal because of Salazar's regime and was also affected by the military dictatorship in Argentina. His life testifies the link between the struggle for science and the struggle for freedom.*

Nascido em Moçâmedes (Angola) a 31 de maio de 1907, filho de um oficial do exército colonial português, de quem fica orfão em 1915, vem para Lisboa frequentar o Colégio Militar entre 1917 e 1925, ano em que se inscreve na Faculdade de Ciências de Lisboa nos cursos preparatórios para uma carreira militar. Aluno de Pedro José da Cunha (1867-1945) em *Cálculo Diferencial, Integral e das Variações,* ainda antes da sua licenciatura em 1930 na Universidade de Lisboa, já em Ciências Matemáticas, revelou as suas tendências e aptidões para a investigação, tendo obtido no ano seguinte uma bolsa da Junta de Educação Nacional (JEN) para estudar em Paris onde apresentou a sua tese de doutoramento em junho de 1936, sob a orientação de Maurice Fréchet (1878-1973).

Nos primeiros quatro anos da sua estada de cinco anos letivos em Paris (1931-36), Monteiro, ultrapassou as deficiências da sua preparação em Portugal, frequentando vários cursos das "*principais teorias da especialidade que modernamente se têm criado e desenvolvido*", de G. Julia, A. Denjoy, E. Goursat, P. Montel e M. Fréchet, mas só em 1934 e em 1935, já sob a orientação deste último professor, é que publica os seus primeiros resultados de investigação em duas notas nos *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences de Paris*, os quais irão determinar a sua tese de 1936 *Sur l'additivité des noyaux de Fredholm*, na Universidade de Paris. Conforme revela a sua correspondência e os seus relatórios de bolseiro da JEN em Paris, naturalmente influenciado pelo seminário de J. Hadamard no *Collège de France* e pela frequência dos cursos e da biblioteca no *Institut Henri Poincaré*, Monteiro assume a sua missão de "*também estudar em Paris a organização dum Centro de Estudos Matemáticos que teria, entre outros, o objectivo de realizar o ressurgimento completo das tradições matemáticas portuguesas*", chegando mesmo a referir a aquisição de livros para o "*Instituto de Matemática*", revelando a sua preocupação e empenho nessa missão [AF, p.109].

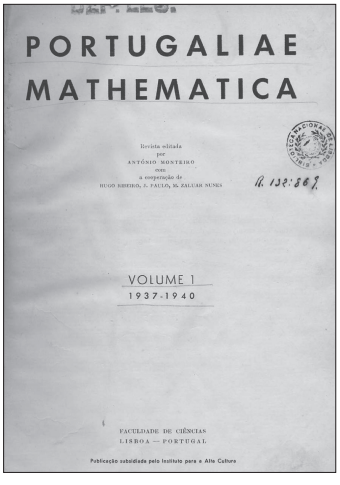
O seu regresso a Portugal é marcado pelo início da guerra civil em Espanha e pela publicação, a 14 de setembro de 1936, do Decreto-lei n.º 27003, que obrigava os funcionários públicos e, por extensão os bolseiros do Instituto para a Alta Cultura (IAC), que havia substituido a JEN no novo Ministério da Educação Nacional, a assinar a declaração salazarista de compromisso político: "*Declaro, por minha honra que estou integrado na ordem social estabelecida pela Constituição política de 1933, com activo repúdio do comunismo e de todas as idéas subversivas*". Com a sua corajosa e honrosa recusa em assinar essa declaração, decorrente da sua rigorosa coerência intelectual que, durante toda a sua vida e apesar de não se lhe serem conhecidas filiações partidárias, o faria afirmar-se como anti-fascista convicto [JR2], Monteiro, teria dito:

"*não aceito limitações à minha inteligência*". Fica assim impossibilitado de prosseguir em Portugal a carreira universitária que irá desenvolver no seu exílio, em 1945 no Brasil, e na Argentina, de dezembro de 1949 até à sua jubilação e afastamento, também por razões políticas, da Universidad Nacional del Sur a 31 de março de 1975, onde era *Profesor Emérito* desde 1972 [AAM_Fb2007].

Apesar das dificuldades económicas de ter de viver de explicações em Lisboa, com o espírito de missão e com a capacidade de iniciativa que lhe eram patentes, a fortíssima influência e a determinante atividade de Monteiro ficaram indeléveis na breve década do *Movimento Matemático Português* (1936-46), iniciada com as atividades do *Núcleo de Matemática, Física e Química*, em finais de 1936, com a fundação da revista científica *Portugaliae Mathematica* em 1937, com o início do *Seminário de Análise Geral* em 1939, a criação em 1940 do *Centro de Estudos de Matemática de Lisboa*, pelo IAC e anexo à FCUL sob a presidência de Pedro José da Cunha e sob a direção científica de Monteiro, e também com a fundação da *Gazeta de Matemática* e da SPM, a 12 de dezembro de 1940.

Entre junho de 1937 e dezembro de 1942, a atividade científica e académica de Monteiro em Lisboa é efetuada na qualidade de tarefeiro do IAC como inventariador de bibliotecas científicas em Portugal, sendo autor de um trabalho pioneiro cujo relatório foi publicado em 1939 pelo IAC [IP], na altura presidido por A. Celestino da Costa [AAM_O2008]. A notável atividade científica e de orientação de jovens matemáticos nos três anos iniciais da atividade do *Centro de Estudos de Matemática de Lisboa*, foi marcada pela influência das ideias modernistas do *Ensaio* de um tarefeiro/inventariador do IAC, culminando com a visita de Maurice Fréchet, no início de 1942, e com a sucessiva partida dos jovens bolseiros para o estrangeiro, incluindo os dois primeiros discípulos portugueses de Monteiro, Hugo Ribeiro para a ETH de Zurique e de José Sebastião e Silva para a Universidade de Roma.

Iniciou, ainda em 1941, a sua colaboração com a Faculdade de Ciências do Porto com uma conferência de *Introdução à Topologia Geral*, seguido de um curso no outono do ano seguinte sobre *Introdução à Noção de Função Contínua*, já no âmbito do *Centro de Estudos de Matemática do Porto*, criado em 1942. Para aí transferiu-se em finais de 1943 e iniciou Alfredo Pereira Gomes, o seu terceiro discípulo em Portugal, na Análise Geral, tendo dirigido o *Seminário de Topologia Geral* durante o ano seguinte até à sua partida com a família para o Rio de Janeiro, em fevereiro de 1945. A sua estada no Porto foi subsidiada pela *Junta*


PORTUGALIAE
MATHEMATICA

Revista editada
por
ANTÓNIO MONTEIRO
com
a cooperação de
HUGO RIBEIRO, J. PAULO, M. ZALUAR NUNES

VOLUME 1
1937-1940

FACULDADE DE CIÊNCIAS
LISBOA — PORTUGAL

Publicação subsidiada pelo Instituto para a Alta Cultura

Fig. 2. Frontespíscio do vol. 1 da Portugaliae Mathematica. **Fig. 3.** M. Fréchet, P. J. da Cunha e A. Monteiro na Faculdade de Ciências de Lisboa no início de 1942 (Fonte [AAM_Fb2007]).

de Investigação Matemática (JIM), criada em 4 de outubro de 1943, conjuntamente com Ruy Luis Gomes e Aureliano Mira Fernandes, uma notável associação patrocinada por fundos privados, que, reunindo a quase totalidade dos (poucos) investigadores portugueses no país, tinha como objetivo primeiro "*promover o desenvolvimento da investigação matemática*" e teve um papel muito importante no financiamento das publicações científicas, em particular à *Portugaliae Mathematica* depois do IAC deixar de lhe dar o apoio inicial que se limitou aos três primeiros volumes [RLG].

Entre 1945 e 1948, Monteiro foi professor de Análise Superior na Universidade do Brasil, hoje Universidade Federal do Rio de Janeiro, onde lecionou Topologia Geral, Análise Funcional e Conjuntos Ordenados, Reticulados e Álgebras de Boole. Aí teve forte influência em jovens como Maurício Peixoto, que foi seu co-autor, Maria Laura Mouzinho Leite Lopes, cuja tese de 1949 resolveu uma questão colocada pelo mestre, e ainda em Leopoldo Nachbin [LN], a quem emprestou os dois primeiros volumes de *Topologie Générale* de Bourbaki [BII-III] e que lhe sucedeu na direção da série brasileira de monografias *Notas de Matemática.* Esta notável série, que Monteiro havia fundado em 1948 e que se publicou no Rio de Janeiro até 1972, foi prosseguida, a partir do volume 48, pela *North-Holland Publishing Company* e atingiu em 2008, já na *Elsevier*, o número 208 da coleção. Ainda no Rio de Janeiro, foi membro fundador do *Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas* em 1949, tendo partido no fim desse ano para a Argentina, por a Embaixada de Portugal no Rio de Janeiro ter convencido o Reitor da Universidade do Brasil a não lhe renovar o contrato devido às suas intervenções cívicas contra o regime português.

Nomeado Professor da Universidad Nacional de Cuyo, San Juan, Argentina, em 1950, Monteiro funda aí a *Revista Matemática Cuyana,* com M. Cotlar e E. Zarantonello em 1955. É daí que envia o interessante artigo *Problemas da cultura matemática portuguesa* [AAM_O2008], publicado em 1954 na revista *Ciência*, da Associação de Estudantes da Faculdade de Ciências de Lisboa, onde conclui "*que o problema principal do momento consiste na criação de um INSTITUTO PORTUGUÊS DE MATEMÁTICA que se dedique fundamentalmente à realização de trabalhos de investigação matemática e ao ensino da investigação matemática*". Apesar de ter sido convidado para a Universidade de Buenos Aires, Monteiro, com alguns dos seus novos discípulos argentinos, muda-se em 1957 para a recém criada *Universidad Nacional del Sur*, em Bahía Blanca, onde funda o Instituto e a Biblioteca de Matemática, prosseguindo a sua investigação que, entretanto, se tinha centrado na Lógica Algébrica e em Estruturas Algébricas Ordenadas (Reticulados). Aí inicia uma profunda renovação da Licenciatura em Matemática com impacto em toda a Argentina [EO], cria uma nova série de *Monografias de Matemática* e funda as *Notas de Lógica Matemática*, em 1964, e as *Notas de Álgebra e Análisis* (1966). Em 1974 é nomeado membro honorário da *Unión Matemática Argentina*.

Apesar de ter passado um ano sabático na Europa, entre setembro de 1969 e agosto de 1970, visitando colegas em várias universidades em França, Roménia, Bélgica, Itália e Inglaterra, só regressa a Lisboa em março de 1977, como Bolseiro do Instituto Nacional de Investigação Científica, onde retoma a sua investigação no Centro de Matemática e Aplicações Fundamentais (C.M.A.F.) durante cerca de dois anos. Aí orienta o doutoramento de M. Isabel Loureiro, o seu quarto discípulo português, e elabora o extenso trabalho *Sur les Algèbres de Heyting Symétriques*, que em 1979 obtém o Prémio Gulbenkian de Ciência e Tecnologia, referido a 1978. Esta memória foi publicada no volume 39 de *Portugaliae Mathematica* [AAM_PM1980], o qual lhe foi dedicado postumamente. Numa carta de 5 de junho de 1978 enviada a Alfredo Pereira Gomes, o seu antigo discípulo do Porto, então professor da FCUL e diretor da *Portugaliae Mathematica,* na altura em recuperação pela SPM com o apoio do C.M.A.F., apesar do seu

estado de saúde, Monteiro escreveu "*Estou realmente satisfeito com os resultados da minha actividade científica em Portugal. Isto deve-se sobretudo ao Centro de Matemática (C.M.A.F.), que me proporcionou o tempo livre para estudar.*" [APG].

De regresso a Bahía Blanca, Monteiro faleceu em 29 de outubro de 1980, no país do seu segundo exílio onde se radicara com a família e onde deixou uma influência intelectual marcante. Nas palavras do matemático argentino Eduardo Ortiz, Monteiro pertence "*to an old tradition of Argentinian progressive and independent thought to which the country owes some of its most valuable achievement*". Numa das últimas cartas, escreveu-lhe: "*asi es la vida caro Ortiz. Uno se usa y se gasta en tareas que no pueden terminarse: y a pesar de eso se inician con entusiasmo y dedicación, porque las esperanzas y certezas nunca se pierden. Tristezas de Bahia Blanca! nas margenes del Napostá; entre vientos y tormentas en que la tierra nos ahoga, veo Lisboa distante – recuerdos de mi infancia!*" [EO].

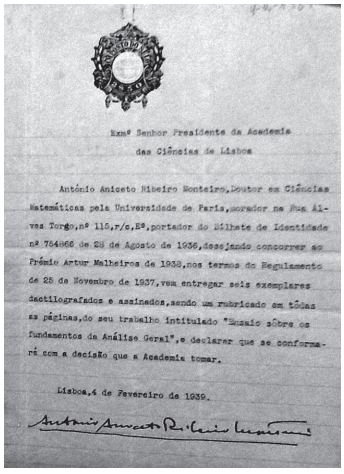
O PRÉMIO ARTUR MALHEIROS DE 1938

Em 1937 foi instituído na Academia das Ciências de Lisboa, um prémio científico anual no valor de 5000 escudos, destinado a estimular o progresso das ciências em Portugal e atribuível, por concurso, "*a autor português de obra original e inédita sobre o ramo de conhecimentos científicos*" que fosse indicado no edital de abertura. As áreas do conhecimento eram sete e abrangiam, em regra pela ordem seguinte: as ciências matemáticas, as ciências físicas e químicas, as ciências naturais, as ciências médicas, as ciências aplicadas, as ciências jurídicas, políticas e sociais e, concluindo, as ciências económicas e financeiras.

A abertura da primeira edição do *Prémio Artur Malheiros,* de 1938, é anunciada oficialmente a 5 de fevereiro de 1938 no Diário do Governo, "*pelo prazo de trezentos e sessenta e cinco dias*", solicitando que os candidatos entregassem *"até às dezasseis horas do dia em que terminar o prazo do concurso, seis exemplares dactilografados do seu trabalho, assinados e um dêles rubricados em tôdas as folhas, acompanhados de requerimento de admissão, dirigido ao presidente da Academia*".

O *Ensaio,* dedicado à memória de seu pai, é submetido por António Monteiro no último dia do prazo, a 4 de fevereiro de 1939, na sequência da sua participação no *Núcleo de Matemática, Física e Química de Lisboa* havia mais de dois anos. Um mês depois, o Secretário Geral da Academia comunica-o aos quatro membros da Secção de Matemática, juntamente com um outro trabalho a concurso, da autoria de Jayme Araújo, sobre *"Algumas Modalidades teórico-práticas na Resolução e discussão do problema de Pothenot"*, uma questão clássica de topografia plana, também conhecido como problema de Snellius-Pothenot, cuja primeira solução data do século XVII e consiste em determinar a posição de um ponto acessível desconhecido a partir de medições angulares a três outros pontos conhecidos.

Em cerca três meses, o júri examinou os trabalhos e deliberou o vencedor do prémio e, posteriormente, na sessão da Classe de Ciências de 6 de julho de 1939, foi aprovado, por unanimidade, o parecer e a atribuição do primeiro *Prémio Artur Malheiros – 1938* ao *Ensaio* de António Monteiro. O prémio só lhe foi entregue na Sessão da Classe de Ciências a 16 de novembro de 1939, após lhe ter sido comunicado oficialmente por carta de 4 de novembro pela Secretaria da Academia. Entretanto, é de registar a publicação a 1 de julho de 1939, no jornal *O Diabo* [AAM_O2008], de um desenho de Monteiro por Manuel Mendes, artista plástico, escritor e resistente anti-fascista, ligado ao grupo da Seara Nova, com uma nota de M. Zaluar Nunes celebrando o prémio da Academia das Ciências.



Exmº Senhor Presidente da Academia
das Ciências de Lisboa

António Aniceto Ribeiro Monteiro, Doutor em Ciências Matemáticas pela Universidade de Paris, morador na Rua Alves Torgo, nº 116, r/c, Dº, portador do Bilhete de Identidade nº 784866 de 25 de Agosto de 1936, desejando concorrer ao Prémio Artur Malheiros de 1938, nos termos do Regulamento de 28 de Novembro de 1927, vem entregar seis exemplares dactilografados e assinados, sendo um rubricado em tôdas as páginas, do seu trabalho intitulado "Ensaio sôbre os fundamentos da Análise Geral", e declarar que se conformará com a decisão que a Academia tomar.

Lisboa, 4 de Fevereiro de 1939.

DR. ANTÓNIO ANICETO RIBEIRO MONTEIRO
(Desenho de Manuel Mendes)

O Diabo, *1-07-1939*

Fig. 4. Requerimento assinado por A. Monteiro em papel selado.(Fonte ACL). **Fig. 5.** A. Monteiro desenhado por Manuel Mendes em 1939 (Fonte [AAM_Fb2007]).

Os dois principais contributos originais de Monteiro, referidos no Prefácio e enunciados no capítulo 4 do seu *Ensaio,* foram reconhecidos pelo parecer de 14 de junho de 1939, redigido por Aureliano Mira Fernandes. O relatório é também assinado pelos três outros matemáticos da Secção de Matemática da Academia, sendo a primeira assinatura de Pedro José da Cunha, enquanto presidente da Secção, e as outras de Santos Lucas e Manuel Peres.

O relatório/parecer é uma carta dirigida ao Presidente da Classe de Ciências da Academia que resumidamente expõe o que de essencial Mira Fernandes encontrara no *Ensaio,* por um lado, reconhecendo o seu valor e a sua atualidade e, por outro, revelando que o relator estava muito razoavelmente a par dos progressos recentes da matemática, apesar da pobreza da bibliotecas científicas em Portugal na época. No entanto, elabora numa pequena confusão histórica quando refere no início do relatório que "*O nome de Análise Geral foi criado pelo professor Fréchet*", apesar de Monteiro ter escrito, logo na primeira linha do Prefácio do *Ensaio* e com mais rigor, que a *Análise Geral* fora fundada no princípio do século XX por Maurice Fréchet. De facto, Fréchet adotou mas não criou a expressão, hoje caída em desuso, de *Análise Geral*, pois ela aparece, pela primeira vez, nas lições do matemático norte-americano E. H. Moore sobre *Introduction to a form of General Analysis,* efetuadas na Universidade de Yale em setembro de 1906, as quais são citadas no livro de Fréchet de 1928 [F]. Contudo, Mira Fernandes reconhece que a Análise Geral *"é uma ciência de criação recente cujos progessos podem justificar àmanhã uma acertada mudança de nome"*, algo que efetivamente veio a acontecer.

Efetivamente, Maurice Fréchet foi pioneiro ao propor, na sua tese de 1906 sob orientação de Jacques Hadamard (1865-1963), uma abordagem abstrata da Análise Matemática baseada em estruturas gerais: *classe (L)*, espaços com convergência; *classe (E),* espaços com *écart*, i.e. com distância, renomeados espaços métricos por F. Hausdorff, em 1914, como uma subclasse de espaços topológicos, e *classe (V),* uma generalização dos espaços *(E)* munidos de vizinhanças (*voisinages*). Estas noções foram evoluindo e Fréchet expôs os seus resultados no influente livro *Les Espaces Abstraits* [F], o qual marcou fortemente a atividade matemática inicial de Monteiro e, em particular, o seu *Ensaio*.

O testemunho auto-biográfico do matemático norte-americano Norbert Wiener (1894-1964), que interagiu diretamente com Fréchet na sua segunda viagem à Europa, por ocasião do Congresso

Internacional de Matemáticos realizado em Estrasburgo em 1920, é eloquente: "*The scholar I chose was Maurice Fréchet. It was Fréchet more than anyone else who had seen what was implied in the new mathematics of curves rather than points (…) One of the specific things which attracted me in Fréchet was that the spirit of his work [spirit of abstract formalism] was very closely akin to the work I had tried to do at Colombia on topology (…) My training with Russell and my later contact with the work of Whitehead had sensitized me to to the use of formal logic tools in mathematics, and there was much in Fréchet's work which was suited from the very beginning to be embodied in the peculiar and highly original mathematical-logical language which Whitehead and Russell had devised for the Principia Mathematica.*" [NW].

O *Ensaio* de 1939 reflete claramente o *"espírito de formalismo abstrato"*, que Monteiro absorveu de Fréchet e aí antecipou a Bourbaki, tendo ficado inédito e perdido no arquivo da Academia das Ciências de Lisboa. Por isso, não foi possível integrá-lo na publicação da sua obra (quase) completa em 2008 [AAM2008] e apenas, na sequência duma organização daquele arquivo se encontrou, em finais de 2015, o seu processo e quatro dos seis exemplares do *Ensaio*.

O ENSAIO SOBRE OS FUNDAMENTOS DA ANÁLISE GERAL DE 1939

Na frase inicial do Prefácio, Monteiro não podia ser mais claro: "*A Análise Geral foi fundada no princípio deste século por Maurice Fréchet, com o objectivo de generalizar o cálculo diferencial e integral para as funções em que a variável independente – e eventualmente a própria função – são elementos de natureza qualquer*"; a qual, citando uma frase de 1933 numa *Notice sur les travaux scientifiques* do seu professor, visa "*o estudo das correspondências entre variáveis de natureza qualquer*" (sublinhado no original).

Monteiro descreve de seguida o conteúdo do seu *Ensaio* que, com cerca de 130 páginas datilografadas, consiste em quatro capítulos: *A Teoria dos Conjuntos Abstractos* (13 p.); *Álgebra Abstracta* (52 p.); *Topologia Abstracta* (26 p.) e *Análise Abstracta ou Análise Geral* (38 p.). Completa o relativamente longo Prefácio, de nove páginas, com um parágrafo programático, que vai pôr em prática de imediato, com o *Curso de Introdução à Análise Geral*, do segundo semestre do ano académico de 1938-39, ainda no âmbito do *Núcleo de Matemática, Física e Química de Lisboa*, e no terceiro ano do *Seminário de Análise Geral*, em abril de 1940, já no âmbito do recém criado Centro de Estudos Matemáticos de Lisboa, a funcionar na Faculdade de Ciências sob a presidência de Pedro José da Cunha. Nesse parágrafo final escreve: "*Se*

Núcleo de Matemática, Física e Química
ANO 1938-39
Curso de Introdução à
Análise Geral
por António Monteiro
PROGRAMA
1.º Ano — Noções fundamentais da teoria dos conjuntos, da álgebra, da topologia e da análise abstractas
Primeira lição - 27 de Fevereiro
As lições dêste curso realizar-se-ão às 17 horas e meia das 2.as feiras no novo Anfiteatro de Matemática da
FACULDADE DE CIÊNCIAS DE LISBOA

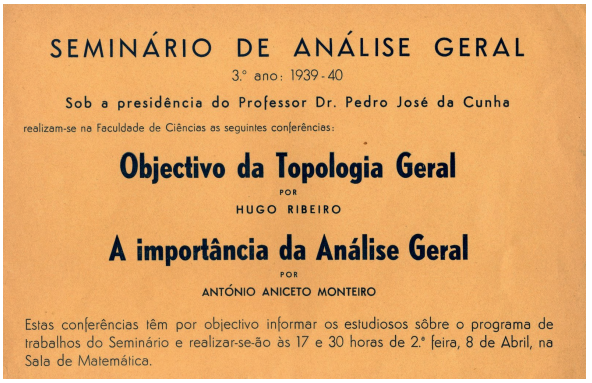

SEMINÁRIO DE ANÁLISE GERAL
3.º ano: 1939-40
Sob a presidência do Professor Dr. Pedro José da Cunha
realizam-se na Faculdade de Ciências as seguintes conferências:
Objectivo da Topologia Geral
POR
HUGO RIBEIRO
A importância da Análise Geral
POR
ANTÓNIO ANICETO MONTEIRO
Estas conferências têm por objectivo informar os estudiosos sôbre o programa de trabalhos do Seminário e realizar-se-ão às 17 e 30 horas de 2.ª feira, 8 de Abril, na Sala de Matemática.

Fig. 6. Anúncios do curso de 1939 e do seminário de 1940, já no âmbito do Centro de Estudos de Matemática, de A. Monteiro na Faculdade de Ciências de Lisboa (Fonte [AAM_Fb2007]).

com a realização dêste trabalho conseguirmos chamar à atenção dos jóvens estudiosos do nosso país para a importância sempre crescente da Análise Geral, fundada por M. Fréchet, cujos métodos tendem a dominar a estruturação da matemátca moderna, podemos considerar o nosso objectivo atingido porque pensamos que nestas condições servimos a ciência de uma maneira geral e os estudiosos portuguêses em particular. Por essa razão apresentamos êste trabalho à Academia das Ciências de Lisboa para o concurso ao Prémio Científico Artur Malheiros de 1938."

Considerando, como Fréchet, a Teoria dos Conjuntos Abstratos como um capítulo da Análise Geral, Monteiro carateriza-a como sendo a teoria que "*se ocupa das propriedades dos conjuntos de pontos que se mantêm invariantes em relação ao grupo das transformações biunívocas*", tal como a Álgebra Abstrata, "*um dos capítulos mais recentes da matemática moderna*" trata das propriedades "*que se mantém invariantes em relação ao grupo dos isomorfismos (correspondências biunívocas que respeitam a operação considerada)*" e a Topologia, também ela um capítulo da Análise Geral, é a teoria "*que estuda as propriedades dos conjuntos de pontos que se mantêm invariantes em relação ao grupo das transformações bicontínuas ou homeomorfias*."

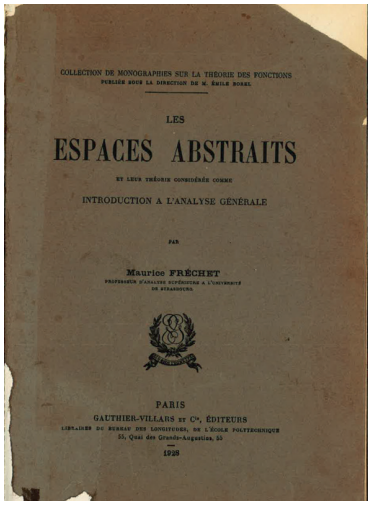
Finalmente no quarto e principal capítulo, Monteiro introduz "*a noção de espaço algébrico-topológico – que podemos definir como um espaço onde existe simultâneamente uma álgebra e uma topologia*", com o objetivo de tratar do "*estudo das propriedades invariantes para um topo-isomorfismo, isto é, por uma correspondência biunívoca que é simultâneamente uma homomorfia e um isomorfismo*", em especial no que designa por *espaços analíticos*, ou seja aqueles para os quais a operação algébrica seja contínua. Entre estes, introduz os *grupos abelianos topológicos perfeitamente decomponíveis*, para os quais demonstra "*um teorema de estrutura*", que sendo "*análogo aos teoremas de Banach e de Cantor-Bernstein*" (sobre a equivalência de dois conjuntos com a mesma potência), estabelece, em particular, que se dois daqueles grupos "*têm a mesma dimens*ão algébr*ica êles são topo-isomorfos*". A nova noção de *dimensão algébrica* é uma generalização da "*dimensão linear de um espaço (vetorial) de tipo (F) introduzida recentemente por Banach*" no seu livro clássico de 1932, sobre *Théorie des opérations linéaires*. Culminando uma moderna síntese de algumas estruturas algébrico-topológicas, incluindo grupos topológicos e espaços (B) de Banach, é levado a definir anéis vetoriais normados, noção também considerada em 1936 pelo matemático japonês M. Nagumo, com o objetivo de generalizar os resultados da sua tese sobre a aditividade dos núcleos de Fredholm, obtendo condições necessárias e suficientes para a aditividade das resolventes no âmbito dos anéis de operadores lineares em espaços de Banach.

A clareza com que as novas ideias abstratas são descritas e concretizadas por Monteiro no seu *Ensaio* são notáveis e representam um progresso significativo, certamente, independente e desconhecido do coletivo dos matemáticos que, sob o nome de N. Bourbaki, estavam a criar os Éléments de Mathématique que só se começariam a publicar um ano mais tarde em Paris. Na sua autobiografia, André Weyl (1906-1998), um dos fundadores e mais influentes matemáticos desse coletivo, regista o espírito da época ao escrever [AW2, p.114]: "*In establishing the tasks to be undertaken by Bourbaki, significant progress was made with the adoption of the notion of structure, and of the related notion of isomorphism. Retrospectively these two concepts seem ordinary and rather short on mathematical content, unless the notions of morphism and category are added. At the time of our early work these notions cast new light upon subjects which were still shrouded in confusion: even the meaning of the term "isomorphism" varied from one theory to another. That there were simple structures of group, of topological space, etc., and then also more complex structures, from rings to fields, had not to my knowledge been said by anyone before Bourbaki, and it was something that needed to be said.*" Que era

relevante dizê-lo, Monteiro também o sabia e descreveu-o claramente não só no Prefácio do seu *Ensaio* como também ao longo dos seus quatro capítulos.

No primeiro capítulo, sobre "A TEORIA DOS CONJUNTOS ABSTRACTOS", Monteiro começa por introduzir a relação dos "*elementos abstractos ou indefinidos*" pertencerem ou não ao conjunto, usando a notação de Peano, hoje banal, e com a noção de igualdade, com a possibilidade de num mesmo conjunto poderem existir várias relações de igualdade, caso em que uma delas, a fundamental em relação às outras, é a "*identidade e a outra ou as outras têm o nome de equivalências*", caraterizadas pelas propriedades de reflexividade, de simetria e de transitividade. Após descrever a inclusão de conjuntos, a noção de função, de homomorfismo em relação à identidade e de transformações biunívocas, conclui que "*as propriedades de que se ocupa a teoria dos conjuntos abstractos, isto é aquelas que se mantêm invariantes para uma equivalência, são aquelas que se podem enunciar recorrendo apenas às noções primitivas da teoria dos conjuntos $x = y$ e $x \in A$ e às funções proposicionais da Lógica formal*." O capítulo prossegue com uma descrição da potência de um conjunto infinito ou número cardinal enunciando o Teorema de Cantor-Berstein sobre dois conjuntos serem equivalentes se e só se têm a mesma potência, deixando a demonstração para o segundo capítulo, para onde também remete o estudo da álgebra dos subconjuntos de um dado conjunto. Termina com algumas propriedades sobre os números cardinais, referindo a equivalência entre o problema da tricotomia (<, >,=) e do axioma de Zermelo que enuncia da seguinte forma: "*Se os elementos de um conjunto A são conjuntos E, não vazios e sem elementos comuns dois a dois, então existe pelo menos um conjunto A' que contém um elemento e um só de cada conjunto E.*"

O segundo capítulo, o mais longo do *Ensaio*, é a primeira exposição moderna em português sobre "ÁLGEBRA ABSTRACTA", "*um dos capítulos mais recentes da Matemática Moderna, visto que o início do seu desenvolvimento se pode localizar por volta de 1920*" (p.14). Depois de introduzir uma operação algébrica num conjunto abstrato e a noção de espaço algébrico, define homomorfismo entre dois espaços algébricos, que é isomorfismo se for biunívoca, quando essa correspondência respeita as respetivas operações, e estabelece o objectivo da álgebra abstracta como aquela "*que estuda as propriedades dos espaços algébricos que se mantém invariantes quando se passa de um espaço algébrico para outro que lhe seja isomorfo*" e que se ocupa das propriedades "*que se podem enumerar recorrendo apenas às noções primitivas da Álgebra*". Depois



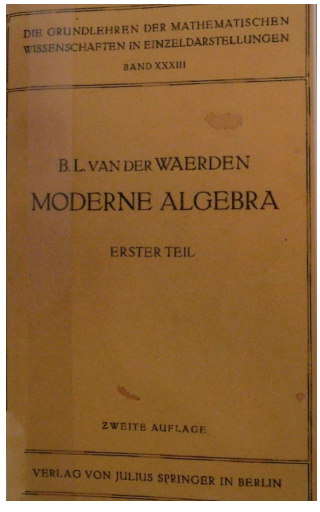


Fig. 7. As capas dos livros de M. Fréchet e do de B.L. van der Waerden (Fonte Biblioteca da FCUL).

de introduzir os axiomas da adição e da multiplicação, trata da álgebra dos conjuntos abstractos, onde à adição corresponde a união de conjuntos e à multiplicação a intersecção, e demonstra um teorema de Banach de 1924 sobre a possibilidade da decomposição de dois conjuntos em duas partes disjuntas que são respetivamente equivalentes, ou isomorfas. Deste conclui o teorema de Schröder-Cantor-Berstein: "*se o conjunto A é equivalente a um sub-conjunto de B e se B é equivalente a um sub-conjunto de A, os conjuntos A e B são equivalentes*". Em seguida define as noções de Grupo, de Grupo Abeliano, de "*Espaço Vectorial Abstracto*", de Anel, onde estuda transformações e as suas propriedades, e de "*Anel Vectorial*", tendo em vista o anel dos operadores lineares definidos num espaço vetorial, terminando o capítulo com o "*Tipo algébrico de um espaço*", a noção "*que desempenha em Álgebra Abstracta o mesmo papel que a noção de potência de um conjunto desempenha na teoria dos conjuntos abstractos*".

No Capítulo III, dedicado à "TOPOLOGIA ABSTRACTA", Monteiro coloca-se na perspetiva de Fréchet [F] utilizando como noção primitiva a noção de vizinhança que lhe "*parece a mais intuitiva muito embora existam noções da topologia que não se sabem aínda exprimir por intermédio da noção de vizinhan*ça", centrando esse capítulo na estrutura de *Espaço (V)*. Apesar de iniciar o capítulo com uma breve referência aos espaços topológicos baseados na operação de derivação de conjuntos, i.e. a passagem ao conjunto de pontos limites ou de acumulação de um dado conjunto, Monteiro distancia-se de Pedro José da Cunha, o seu mentor em Lisboa [PJC], e demarca-se de alguma terminologia de Mira Fernandes [AMF], dois dos primeiros introdutores em Portugal destas noções que não faziam ainda parte dos cursos da época. É interessante ler na página 67, como Monteiro refere que "*a topologia pode ser baseada sobre outras noções primitivas, por exemplo: vizinhança, conjunto fechado, conjunto aberto, "fermeture" (ou conjunto de inclusão, na terminologia do Prof. Mira Fernandes) ponto interior, etc.*", sem contudo citar o artigo de divulgação [AMF], resultado de uma conferência realizada por aquele professor do I.S.T. no dia 26 de novembro de 1934 na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, e que certamente conhecia, apesar de não ter assistido à conferência por se encontrar em Paris. Na exposição das 26 páginas do capítulo III da sua monografia, Monteiro faz um interessante resumo e uma original síntese da *Topologia Abstracta*, onde, sendo patente a influência estruturalista na Matemática absorvida na sua estada em Paris, não deixa de seguir a terminologia e a abordagem de Fréchet (*Espaços (V)* e *(L)*, funções contínuas, espaços distanciados), apesar de procurar integrar alguns dos desenvolvimentos da década posterior ao livro [F] de 1928.

Finalmente, no quarto capítulo, Monteiro apresenta a *ANÁLISE ABSTRACTA,* designação por si proposta, ou *ANÁLISE GERAL*, como uma síntese das "*mais recentes da matemática moderna, visto que ela se pode considerar ainda em plena formação*", apresentando-se "*como lògicamente subordinada à Álgebra Abstracta e à Topologia Abstracta e portanto à teoria dos Conjuntos Abstractos*". Assim, entre os espaços algébrico-topológicos, i.e. aqueles que forem simultaneamente dotados de uma "álgebra" (uma ou mais operações algébricas) e de uma topologia que estejam relacionadas entre si, ou seja, onde as operações algébricas forem contínuas, chama "espaços analíticos". Nestes podem ser definidas propriedades importantes, como, por exemplo, limites de somas ou de produtos de sucessões num grupo topológico, ou de séries absolutamente convergentes e de derivadas em grupos abelianos normados e completos. Introduzindo os espaços de Banach [B], Monteiro apresenta o teorema deste matemático polaco sobre os operadores lineares serem contínuos se e só se forem limitados. Mas o culminar deste capítulo está na generalização a anéis vetoriais abstratos, normados e com unidade, onde é possível estabelecer uma teoria abstrata da resolvente e onde estabelece condições necessárias e suficientes sobre a aditividade das resolventes de

operadores lineares, que havia obtido no verão de 1936 e que generalizam resultados da sua tese sobre a aditividade das resolventes de dois núcleos de Fredholm [AAM]. Este resultado novo é reconhecido por Mira Fernandes no seu relatório à Academia, que contudo dá mais relevo à observação de Monteiro na última página do *Ensaio* sobre a equivalência de dois conjuntos arbitrários implicar a equivalência dos conjuntos de todos os seus subconjuntos, determinando então a existência de um *"topo-isomorfismo"* entre estes, pois isso "*inculca, sobretudo, a função primacial da Análise Abstracta dentro da Análise Geral de Fréchet*".

De facto, Monteiro deu mais importância àquela generalização do último capítulo do *Ensaio,* que publicou posteriormente em 1940 numa pequena nota de quatro páginas sobre *Sur l'additivité dans un anneau*, nas páginas 289-292 do volume 1 da *Portugaliae Mathematica* [AAM_O2008]. Numa nota da página 291 deste artigo, Monteiro refere o seu *Ensaio* e regista a sua intenção de o publicar naquela revista. Nesse artigo não apresenta demonstrações, tal como não o fizera no *Ensaio,* pois refere que são análogas às da sua tese de 1936 [AAM]. É interessante observar que a sua tese foi composta na Imprensa Portuguesa do Porto, tendo sido também publicada nos *Anais da Faculdade de Ciências do Porto* no volume desse ano, cuja *Introduction* termina na página 8 com o agradecimento: "*Nous remercions également la* Junta de Educação Nacional *et le peuple de notre pays, à qui nous devons d'avoir pu entreprendre et terminer ce travail sans préocupations matérielles, pendant notre long séjour à Paris*", cuja expressão sublinhada por nós é omitida na edição de [AAM] publicada em 1937 na *Portugaliae Mathematica* e reproduzida nas suas *Obras* [AAM_O2008].

AS FONTES, A ÉPOCA E BOURBAKI (1935-1942)

Se a influência de Fréchet, em particular do livro [F] referido na Bibliografia do *Ensaio*, é indelével, na teoria de conjuntos Monteiro sofre a influência da escola polaca, citando o livro de Sierspinski, também publicado em Paris em 1928 e na álgebra da escola alemã, através da primeira edição do influente livro de van der Waerden [vW], desenvolvido a partir das lições de Emil Artin e de Emmy Noether numa linguagem precisa e moderna, cuja segunda edição iria ser traduzida em português na década seguinte por Hugo Ribeiro e publicada pela Sociedade Portuguesa de Matemática.

O livro de Sierspinki, apesar do título se referir aos números transfinitos e constituir uma introdução muito clara à teoria de Cantor e dos seus seguidores, contendo resultados recentes, é também inovador por se basear no método axiomático, que Monteiro segue no seu *Ensaio.*

Contudo na topologia geral, onde as influências polaca e russa também se fazem sentir, Monteiro procura manter-se fiel à terminologia de Fréchet não indo além dos espaços (V), que lhe bastam, apesar de adoptar uma exposição mais abstrata e algo inovadora. No entanto, Monteiro refere as dificuldades do conceito de vizinhança, citando em particular, o curto ensaio de 1938, com apenas 39 páginas, de André Weil [AW1], onde este, para além de estabelecer as propriedades básicas dos espaços uniformes, uma classe de espaços topológicos adaptada aos conceitos de convergência e continuidade uniformes, suscita um conjunto de observações sobre os axiomas da topologia geral onde procura estabelecer uma distinção entre aqueles com mero interesse histórico dos verdadeiramente importantes que irão fixar a exposição moderna do primeiro livro de N. Bourbaki *Topologie Générale*, publicado em Paris em 1940.

Mas é sobretudo no último capítulo sobre análise abstrata que a exposição de Monteiro é original, pois não só efetua uma breve e clara síntese entre a álgebra moderna e a topologia geral, pois, sem esquecer os espaços de Banach [B], desenvolve a teoria dos grupos topológicos e sobretudo introduz, de forma independente do matemático japonês M. Nagumo, os anéis vetoriais topológicos. É importante referir que, já na segunda metade do século XIX, Sophus Lie havia lançado as bases dos grupos de Lie, que são uma classe particular de "grupos contínuos", mas a teoria geral dos grupos topológicos foi iniciada apenas em 1926, por O. Schreier, e que o primeiro livro, da autoria de Lev Pontryagin, sendo de 1938 só iria ser publicado em inglês em 1939 e não era conhecido por Monteiro.

Desde a sua chegada a Paris em 1931, António Monteiro trabalhou na biblioteca do *Institut Henri Poincaré*, recém-criado em 1928, tendo assistido regularmente aos seminários que aí se realizavam. Em particular, o seminário de Gaston Julia, que na década de trinta era frequentado pelos jovens que iriam fundar o grupo Bourbaki, nos três últimos anos académicos da estada de Monteiro em Paris tratou dos seguintes temas: Grupos e Álgebras, em 1933/34; Espaços de Hilbert, em 1934/35; e Topologia em 1935/36. Nos seus relatórios, Monteiro, refere explicitamente as conferências de Claude Chevalley, André Weil, Jean Delsarte e Jean Leray, que no ano académico de 1934/35 também se reuniam periodicamente em Paris no café *Capoulade* em discussões matemáticas. Estas reuniões, que incluíam ainda Jean Dieudonné, Henri Cartan, René de Poussel e Szolem Mandelbrojt, que substituiu Leray, iriam dar lugar à reunião fundadora do pseudónimo coletivo Nicolas Bourbaki, realizada numa aldeia de Auvergne, no centro da França, em julho 1935.

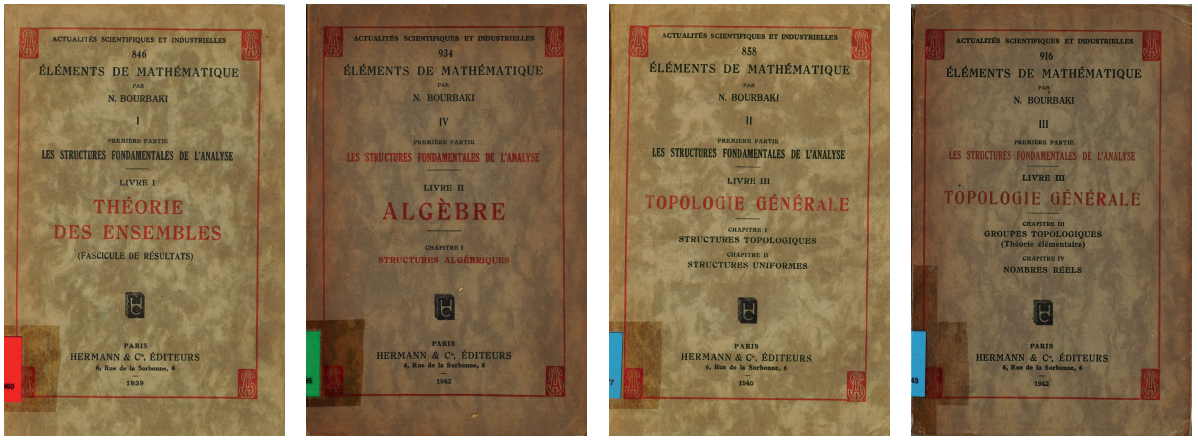


Fig. 8. As capas dos quatro primeiros fascículos de N. Bourbaki (Fonte Biblioteca da FCUL).

Se o objetivo inicial do grupo daqueles jovens professores saídos da *École Normale Supérieur* de Paris era escrever um novo curso de Cálculo Diferencial e Integral, sob a forma de um moderno tratado de Análise Matemática que substituísse os clássicos *Cours d'analyse* da escola francesa, ao longo das várias reuniões e discussões coletivas, o grupo Bourbaki evoluiu para uma apresentação axiomática e abstrata de algumas noções gerais e essenciais, "*les structures fondamentales de l'analyse*", cujos quatro primeiros livros que constituem os *ÉLÉMENTS DE MATHÉMATIQUE* são [BI,II,III,IV]:

Livre I – *THÉORIE DES ENSEMBLES* (*Fascicule de résultats*) Paris, 1939 (1-2-1940)

Livre II – *ALGÈBRE* (*Structures algèbriques*) Paris, 1942

Livre III – *TOPOLOGIE GÉNERALE* (*Chapitres I et II*) Paris, 1940

Livre III – *TOPOLOGIE GÉNERALE* (*Chapitres III et IV*) Paris, 1942.

O fascículo sobre a Teoria dos Conjuntos, apesar de datado de 1939, tem a data de impressão de 1 de fevereiro de 1940, e começa por explicar o "*mode d'emploi de ce traite*", que "*toma as matemáticas do seu início, dá demonstrações completas e, em princípio, não supõe nenhum conhecimento matemático particular, mas apenas um certo hábito de raciocínio matemático e um certo poder de abstracção*". Contém apenas cerca de 45 páginas de definições e resultados sobre elementos e partes de um conjunto, funções, produtos de vários conjuntos, reunião, intersecção e produto de uma família de conjuntos, relações de equivalência, conjunto quociente, conjuntos ordenados, potências, conjuntos numeráveis e termina com escalas de conjuntos e estruturas, tendo adotado uma notação e uma terminologia consistentes e duráveis.

O segundo livro, sobre Álgebra, é o quarto volume e só é publicado em 1942 na Paris ocupada. Compreende o primeiro capítulo das estruturas algébricas, tratando das leis de composição internas, associatividade, comutatividade, elemento neutro, elementos regulares, elementos simétricos, leis de composição externas, estuturas algébricas, relações entre leis de composição, grupos e grupos de operadores, grupos de transformação, anéis e anéis de operadores, terminando com corpos. A sua introdução abre com a descrição sobre "*fazer álgebra, é essencialmente calcular, isto é, efetuar, sobre os elementos de um conjunto, 'operações algébricas', cujo exemplo mais conhecido é dado pelas 'quatro regras' da aritmética elementar*", e a sua nota histórica, depois de identificar três correntes – a teoria das substituições na resolução das equações algébricas, o cálculo vetorial e matricial e a teoria dos números algébricos – termina na síntese da álgebra moderna como resultado "*sobretudo da obra da escola alemã moderna: começada por Dedekind e Hilbert nos últimos anos do século XIX, o trabalho da axiomatização da Álgebra foi vigorosamente prosseguido por E. Steinitz, e depois, a partir de 1920, sob o impulso de E. Artin, E. Noether e dos algebristas da sua escola (Hasse, Krull, O. Schreier, van der Waerden)*", e reconhece o livro [vW] como fonte de inspiração.

O terceiro livro de Bourbaki, dedicado à Topologia Geral, é, de facto, o segundo a ser publicado em 1940 e compõe-se de dois capítulos que tratam das estruturas de outro tipo que "*dão um sentido matemático às noções intuitivas de limite, de continuidade e de vizinhança*". O primeiro, sobre estruturas topológicas, inicia-se com conjuntos abertos, que determinam a definição de espaço topológico, prosseguindo com vizinhanças e outras noções, como homomorfismos e a continuidade das transformações, produtos, compacidade e espaços conexos, e baseia a noção de convergência no conceito de filtro, uma generalização das sucessões introduzida por H. Cartan em 1937, obtendo a completa equivalência entre vizinhança, conjunto aberto e a topologia da convergência. O segundo capítulo trata das estruturas uniformes, um conceito introduzido por A. Weil em [AW1], que permite estender a estrutura dos espaços métricos introduzidos por Fréchet em 1906, e generalizar para os espaços uniformes importantes resultados, em particular de compacidade e de completação.

Os capítulos III e IV da "Topologia Geral", que também se publicaram num fascículo em 1942, tratam da teoria elementar dos grupos topológicos e dos números reais, respetivamente. O capítulo III, começa pela definição de grupo topológico, enquanto conjunto munido de uma topologia compatível com os axiomas algébricos de grupo, desenvolve a teoria baseada nos filtros e nas suas convergências e nas propriedades das estruturas uniformes, e conclui com alguns tópicos sobre anéis e corpos topológicos. O capítulo IV introduz o grupo $\boldsymbol{R}$ os números reais como o completado do grupo ordenado $\boldsymbol{Q}$, dos números racionais munido da topologia dos intervalos abertos, demonstra as propriedades topológicas

usuais de $\boldsymbol{R}$ e das respetivas séries e funções numéricas, e termina com uma extensa e bastante completa nota histórica com doze páginas.

Comparando a estrutura dos quatro capítulos e das respetivas secções do *Ensaio* de António Monteiro, entregue a 4 de fevereiro de 1939 na Academia das Ciências de Lisboa, com os conteúdos destes quatro primeiros livros de Bourbaki, que são uma obra de outra dimensão e com outra ambição, ficamos surpreendidos pela coincidência do seu encadeamento e mesmo pela sobreposição de muitos dos seus conteúdos. Naturalmente que Monteiro absorveu em Paris, durante a sua estada entre 1931 e 1936, as novas ideias e os resultados mais recentes das matemáticas modernas e que os seus objetivos tinham, numa escala e num contexto completamente diferentes, algum paralelismo com o ambicioso programa do coletivo Bourbaki, mas não podia conhecer nem os planos nem os conteúdos dos *Éléments de Mathématiques*. No entanto, apesar de Monteiro nunca ter sido "bourbakista" nem ter revelado simpatias pelos trabalhos dos discípulos de Bourbaki, ousamos considerar que o seu *Ensaio* é, de facto, uma obra precursora do grande projeto daquele autor coletivo, que também é caraterizada por um modernismo e um estruturalismo notáveis.

A INFLUÊNCIA DO *ENSAIO* NO CEML E NA JIM, ENTRE 1939-1944, E NO BRASIL EM 1945-48

A elaboração do *Ensaio* aparece na sequência dos cursos que Monteiro professou no âmbito do *Núcleo de Física, Matemática e Química* em Lisboa, nomeadamente no iniciado a 2 de março de 1937 no Instituto Superior Técnico sobre *Teoria das Matrizes*, já na perspetiva da Álgebra Moderna, nas duas conferências sobre *Os Fundamentos da Análise Moderna*, realizadas a 20 e 21 de dezembro de 1938, e no *Curso de Introdução à Análise Geral*, iniciado a 27 de fevereiro de 1939 com um programa que cobre exatamente os quatro capítulos do *Ensaio*, estes dois últimos lecionados na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa [AAM_Fb2007].

A 17 de março de 1939, a convite do "Grupo de Estudos dos alunos da Faculdade de Ciências de Coimbra", Monteiro inaugurou as atividades efémeras e sem consequências desse grupo com uma conferência sobre *O objectivo da Análise Moderna*, a qual foi relatada em notícia do *Diário de Coimbra* de 19 de março desse ano da seguinte forma [MCA]: "*Toma, então, a palavra o Dr. Monteiro, que revelando uma cultura matemática invulgar e com raro poder sugestivo e clareza cristalina (...) fala sôbre o objectivo da teoria dos conjuntos, da álgebra abstracta, etc., prendendo sempre o numeroso auditório, em que se viam muitos estudantes e professores, que tributaram ao conferente uma calorosa salva de palmas ao terminar a sua brilhantissima exposição, que durou cêrca de hora e meia*."

O *Seminário de Análise Geral* foi englobado no *Centro de Estudos Matemáticos de Lisboa* (CEML), que foi criado em 1940 pelo Instituto para a Alta Cultura (IAC), anexo à Faculdade de Ciências de Lisboa, sob a presidência de Pedro José da Cunha, e funcionou durante um período inicial de três anos, sob a direção científica de António Monteiro, tendo trazido a Portugal M. Fréchet, que a 17 de janeiro de 1942 foi recebido como primeiro sócio honorário da Sociedade Portuguesa de Matemática pelo seu primeiro presidente e secretário-geral, figurando os três na fotografia da Fig. 3 [AAM_Fb2007]. O CEML contribuiu de modo significativo para o arranque da revista e da biblioteca da *Portugaliae Mathematica* e desenvolveu uma atividade pioneira de investigação, com alguns jovens bolseiros, entre os quais Hugo Ribeiro e José

Sebastião e Silva, os principais discípulos de António Monteiro do seu período em Lisboa, criando um movimento intermitente, sem precedentes, de modernização da Matemática em Portugal. Assim, por exemplo, aquele seminário funcionou em abril de 1940 com uma conferência de Hugo Ribeiro sobre *Objectivo da Topologia Geral* e outra sobre *A importância da Análise Geral* por António Monteiro. No entanto, o CEML só retomaria atividades uma década mais tarde, em 1952, sob a direção de José Sebastião e Silva.

A atividade do *Seminário de Análise Geral* foi descrita por Monteiro no seu relatório de fevereiro de 1940: "*O Seminário tem por objetivo fundamental a realização de trabalhos de investigação e para esse efeito existe um plano de estudos. O objetivo fundamental* é estudar os E*spaços Analíticos isto é aqueles em que existe simultaneamente uma Álgebra e uma Topologia. Trata-se de um ramo pouco estudado da Análise Geral. Para esse efeito impõe-se estudar os fundamentos da Álgebra Abstracta e da Topologia e os Espaços Analíticos particulares que têm sido estudados até hoje. Este ano será consagrado fundamentalmente à Topologia, muito embora se realizem outros assuntos ao mesmo tempo. O estudo dos fundamentos da Topologia foi empreendido no princípio deste ano por A. Monteiro e H. Ribeiro, posteriormente ingressaram neste grupo Sebastião e Silva e José Paulo. Os resultados já obtidos excederam toda a expectativa. Há neste momento dois trabalhos publicados na Portugaliae Mathematica: H. Ribeiro* "Sur l'Axiomatique des Espaces Topologiques de M. Fréchet" *e A. Monteiro e H. Ribeiro* "Sur l'axiomatique des Espaces (V)"*. Além deste há outros trabalhos realizados este ano no Seminário. Sebastião Silva, que começou a trabalhar há muito pouco tempo, descobriu um princípio de dualidade nas noções da Topologia, destinado a desempenhar, na minha opinião, um grande papel simplificador no estudo da Topologia e a esclarecer as suas noções fundamentais. O mesmo estudioso conseguiu obter já alguns resultados no estudo do problema de Wiener (Topologia)*."

Com a partida dos jovens bolseiros para o estrangeiro e com as dificuldades criadas em Lisboa nos finais de 1942 com o fim da sua bolsa de arquivista do IAC, Monteiro, que ainda em 1941 e 1942 havia começado a colaboração com a Faculdade de Ciências do Porto, desloca a sua atividade para essa cidade em 1943, com o apoio da *Junta de Investigação Matemática* (JIM), começando uma colaboração com Alfredo Pereira Gomes que se torna co-autor duma monografia, com cerca de 150 páginas, sobre *Introdução ao Estudo da Noção de Função Contínua*, publicado em 1944 onde as noções de Topologia e de Análise Geral são desenvolvidas com clareza e profundidade.

A partir de 1945 Monteiro ensina em cursos e seminários tópicos modernos de Análise Superior no Rio de Janeiro, começa a interessar-se e a publicar em estruturas ordenadas e teoria de reticulados e exerce uma influência nos seus novos discípulos brasileiros, entre os quais se destaca Leopoldo Nachbin que publica duas das cinco primeiras *Notas de Matemática,* a coleção fundada em 1948 pelo matemático português no Brasil, nomeadamente o fascículo n.º 1, sobre *Combinação de Topologias* e o n.º 4 sobre *Espaços Vetoriais Topológicos*. O n.º 2 dessa coleção, sobre *Filtros e Ideais,* é do próprio Monteiro e o n.º 5, sobre *Aneis de funções contínuas,* de Marshal H. Stone, sendo todos os cinco sobre temas de *Análise Geral,* na terminologia do *Ensaio* que começava então a cair em desuso.

É notória a influência do conteúdo do *Ensaio* e do seu autor que, com as atividades intensas de investigação matemática de apenas três anos do CEML, em Lisboa, e de cerca de um ano no CEMP, no Porto, juntamente com os seus colaboradores vão constituir um esboço de uma Escola Portuguesa de Topologia Geral, influência essa que se estende ao Rio de Janeiro por cerca de quatro anos. No clássico livro de Topologia Geral de 1955 [K], o matemático norte-americano John L. Kelley, no seu Prefácio, não só faz um agradecimento a Hugo Ribeiro, como cita na Bibliografia três artigos deste e dois de Monteiro, todos

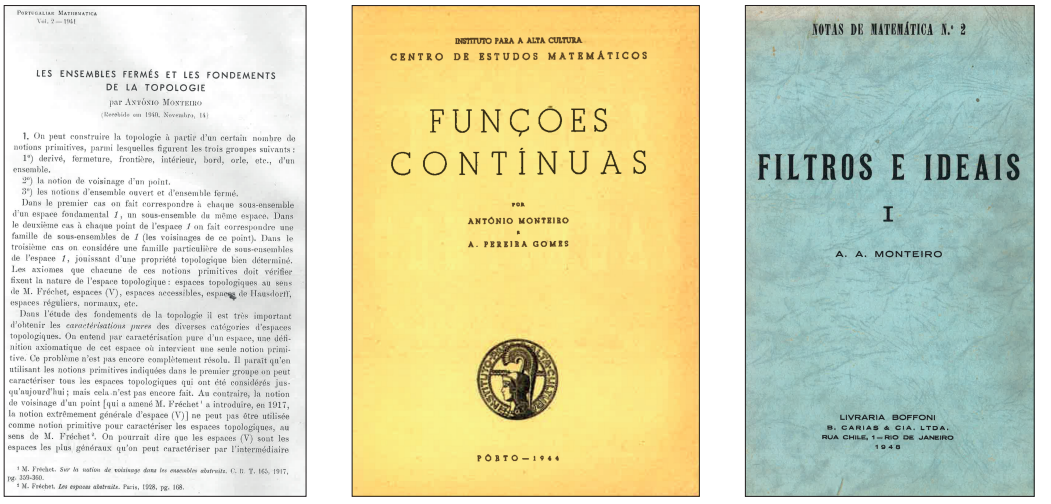


Fig. 9. a) Artigo de Topologia na *Portugaliae Mathematica*, v, 2 (1941), pp. 56-66. b) Frontispício da monografia também publicada nos *Anais da Faculdade de Ciências do Porto*, v. 28, 1944. c) Primeiro volume da coleção NOTAS DE MATEMÁTICA, publicado no Rio de Janeiro em 1948.

publicados na *Portugaliae Mathematica* entre 1940 e 1945, uma nota aos *C.R. Acad. Sc. Paris* de 1948 de A. Pereira Gomes e a monografia n.º 4 das *Notas de Matemática* de L. Nachbin sobre *Espaços Vetoriais Topológicos*, ambos publicados em 1948.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Professor Miguel Telles Antunes o ter proporcionado a redescoberta do Ensaio perdido nos arquivos da Academia, aos colegas Jorge Rezende e Luís Saraiva pelas sugestões e comentários, à Cristina Bernardino e à Anabela Teixeira por me ajudarem a obter referências bibliográficas e ao Professor João Paulo Carvalho Dias por me ter proporcionado em 1978 um encontro único com o Professor António Anieto Monteiro na Biblioteca Geral da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 15 de fevereiro de 2018)

REFERÊNCIAS

[AAM_PM1980] *Portugaliae Mathematica*, vol. 39 (1980), Edição da Soc. Port. Mat. dedicada a A.A.Monteiro (jan 1985), sob a direção de Alfredo Pereira Gomes.

[AAM_Bc2007] *Boletim da Sociedade Portuguesa de Matemática, N.º* Especial, com as Atas do Colóquio de Centenário na Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa de junho de 2007, editadas por Luís Saraiva.

[AAM_Fb2007] *António Aniceto Monteiro, uma fotobiografia a várias vozes*, Sociedade Portuguesa de Matemática, Lisboa 2007, *Coordenadores:* Jorge Rezende, Luiz Monteiro e Elza Amaral.

[AAM_O2008] *The Works of António A. Monteiro, Vol.s I-VIII,* Edited by Eduardo L. Ortiz and Alfredo Pereira Gomes, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisbon and The Humboldt Press, London 2008.

[AAM] António Monteiro, *Sur l'additivité des noyaux de Fredholm*, Thèse Univ. Paris, Junho 1936. (Portugaliae Math. 1 (1937), 1-172, in [AAM_O2008]).

[AF] Augusto Fitas, *As relações entre António Ribeiro Monteiro e a Junta de Educação Nacional ou um bolseiro português na cidade de Paris (do Outono de 1931 à Primavera de 1936)*, in [AAM_Bc2007], 89-127.

[AMF] Aureliano de Mira Fernandes *Distância e Vizinhança*, Técnica, Revista de Engenharia, n.º 62 (1934), 511-515, n.º 63 (1935), 1-5.

[APG] Alfredo Pereira Gomes, *O regresso de António Monteiro a Portugal de 1977 a 1979*, Portugaliae Math. 29 (1980), XXXIII-XLI.

[AW1] André Weil, *Sur les espaces à structure uniforme et sur la topologie générale,* Hermann, Paris 1938.

[AW2] André Weil, *The Apprenticeship of a Mathematician*, Springer, Basel, 1992.

[B] S. Banach, *Théorie des opérations linéaires*, Monografie Matematyczne, Warszawa, 1932.

[BI,II,III,IV] N. Bourbaki, *Éléments de Mathématiques – Les Structures Fondamentales de l'Analyse,* Hermann, Paris*:* I – *THÉORIE DES ENSEMBLES (Fascicule de résultats)*, 1939; II – *TOPOLOGIE GÉNERALE (Chapitres I et II),* 1940; III – *TOPOLOGIE GÉNERALE (Chapitres III et IV),* 1942; IV – *ALGÈBRE*, 1942.

[EO] Eduardo Ortiz, *Professor António Monteiro and Contemporary Mathematics in Argentina*, Portugaliae Math. 29 (1980), XIX-XXXII.

[F] Maurice Fréchet, *Les Espaces Abstraits, et leur théorie considérée comme Introduction à l'Analyse Générale*, Gauthier-Villars, Paris, 1928.

[IP] Ilda Perez, *António Monteiro e um relatório de 1939 para o Instituto para a Alta Cultura,* Boletim da Soc.Port.Mat. 68, Maio 2013, pp. 137–150

[JR1] Jorge Rezende, *Blogue <António Aniceto Monteiro>* http://antonioanicetomonteiro.blogspot.com/

[JR2] Jorge Rezende, *António Aniceto Monteiro – lutas, perseguições e exílios*, Bol.Soc.Port.Mat. 74 (nov.2016), 135-172.

[K] J. L. Kelley, *General Topology*, Van Nostrand, New York, 1955.

[LN] Leopoldo Nachbin, *The influence of António A. Ribeiro Monteiro in the development of Mathematics in Brazil,* Portugaliae Math. 29 (1980), XV-XVII.

[MCA] M. C. Almeida, *Centro de Estudos Matemáticos de Coimbra, 1938: um projecto*, Suplemento do Boletim da SPM 65, Outubro 2011, pp. 49-51.

[NW] N.Wiener, *I am a Mathematician,* The M.I.T. Press, 1956.

[PJC] Pedro José da Cunha, *Relexões sôbre a teoria dos conjuntos,* Extracto do Jornal Sciências Matemáticas, Físicas e Naturais, 3.ª série, n.º10 (1922), 62 pp.

[RLG] Ruy Luis Gomes, *Tentativas feitas nos anos 40 para criar no Porto uma Escola de Matemática*, Boletim SPM, 6 (out/1983), 29-48.

[S] W. Sierpinski, *Leçons sur les nombres transfinis*, Gauthier-Villars, Paris, 1928.

[vW] B.L. van der Waarden, *Modern Algebra*, Vol. 1, Springer, Berlin, 1930.

ANEXO

ÍNDICE do ***"Ensaio sobre os FUNDAMENTOS da ANÁLISE GERAL"***
***Memórias da Academia das Ciências de Lisboa,* XLVII – Volume 2, pp. 27-169**

Autógrafo I (27)
Prefácio (9 p.) III (29)
Bibliografia (2 p.) XII (38)

Capítulo I – **A Teoria dos Conjuntos Abstractos** (13 p.) 1 (40)
1 – Conjuntos abstractos; 2 – Noção de Igualdade; 3 – Sub-conjuntos; 4 – Igualdade de conjuntos; 5 – Observação; 6 – Determinação de um conjunto; 7 – Noção de função; 8 – Homomorfismo em relação à igualdade; 9 – Transformações biunívocas; 10 – Objectivo da teoria; 11 – Potência de um conjunto infinito ou número cardinal; 12 – O problema da tricotomia e o axioma de Zermelo.

Capítulo II – **Álgebra Abstracta** (52 p.) 14 (53)
§1 – *Operações algébricas* – 1 – Definições; 2 – Sub-espaço algébrico; 3 – Homomorfismos; 4 – Isomorfismos e Automorfismos; 5 – Objectivo da Álgebra Abstracta; 6 – Espaço algébrico universal; 7 – Axiomas fundamentais; 8 – Axiomas da Adição; 9 – Axiomas da multiplicação; 10 – Axiomas que relacionam a multiplicação com a adição.
§2 – *Álgebra dos Conjuntos Abstractos* – 11 – algebrização de *E*; 12 – Adição de Conjuntos; 13 – Intersecção de conjuntos; 14 – Teorema fundamental sôbre a álgebra dos conjuntos abstractos; 15 – Subtracção de conjuntos; 16 – Teorema de Banach; 17 – Definições e Teorema de Schröder-Cantor-Berstein.
§3 – *Sistemas com multiplicação* – 17 – Definição; 18 – Inversos à direita e à esquerda; 19 – Sub-espaço algébrico; 20 – Potências; 21 – Exemplos.

§4 – *A Noção de Grupo* – 22 – Definição; 23 – Sub-grupos; 24 – Exemplo de grupos.
§5 – *Algebrização do espaço dos sub-grupos de um grupo dado* – 25 – Multiplicação de sug-grupos; 26 – Intersecção de sub-grupos; 27 – Produtos Directos; 28 – Propriedades do produto directo; 29 – Grupos decomponiveis; 30 – Automorfismos interiores.
§6 – *Grupos Abelianos* – 31 – Definição; 32 – Álgebra dos sub-grupos de G; 33 – Soma directa de sub-grupos de G; 34 – Álgebra das transformações definidas em G; (35) – Resultado de Mazur e Ulam; 36 – Transformações aditivas.
§7 – *Espaços Vectoriais Abstractos* – 37 – Definição; 38 – Algebrização do conjunto das variedades lineares de E; 39 – Transformações aditivas e homogéneas
§8 – *Aneis* – 40 – Definição; Sub-anel; 41 – Anel das transformações aditivas de um grupo abeliano; 42 – Nota; 43 – Teorema de Hellinger-Toeplitz; 44 – Noção de aditividade.
§9 – *Aneis Vectoriais* – 45 – Definição; 46 – Sub-anel vectorial; 47 – Anel dos operadores lineares definidos num espaço vectorial.
§10 – *Tipo algébrico de um espaço* – 48 – Definição.

Capítulo III – **Topologia Abstracta** (26 p.) 66 (105)
§1 – *Espaços (V)* – 1 – Espaços topológicos; 2 – Espaços (V); 3 – Funções contínuas; 4 – Homeomorfias; 5 – Objectivo da Topologia.
§2 – *Tipo de dimensão de um espaço topológico* – 6 – Definição.
§3 – *Espaços (V) particulares* – 7 – Espaço acessível; espaço de Hausdorff.; 8 – Espaços L.
§4 – *Topologia dos conjunto abstractos* – 9 – Limite de uma sucessão de conjuntos; 10 – Equivalência e homeomorfia.
§5 – *Espaços distanciados* – 11 – Noção de distância; 12 – Axiomática de Lindenbaum; 13 – Espaços não distanciados.

Capítulo IV – **Análise Abstracta ou Análise Geral** (38 p.) 92 (131)
§1 – *Espaços algébrico-topológicos* – 1 – Definição; 2 – Topo-isomorfismo; 3 – Objectivo da Análise Geral; 4 – Dimensão algébrica de um espaço.
§2 – *Espaços Analíticos* – 5 – Definição; 6 – Propriedades dos espaços analíticos; 7 – Algebrização das variedades fechadas.
§3 – *Grupos topológicos* – 8 – Definição; 9 – Grupos abelianos topológicos; 9 – Variedades fechadas; 10 – Grupos abelianos perfeitamente decomponiveis.
§4 – *Dimensão algébrica dos grupos abelianos perfeitamente decomponiveis* – 12 – Teorema.
§5 – *Grupos abelianos* – 13 – Definição; 14 – Noção de série; 15 – Espaço G^2_∞; 16 – Grupos normados perfeitamente decomponiveis; 17 – Noção de derivada.
§6 – *Espaços de Banach* – 18 – Definição; 19 – Funções analíticas; 20 – Operadores lineares; 21 – Variedades fechadas.
§7 – *Aneis vectoriais normados* – 22 – Definição; 23 – Resolvente; 24 – Espaços de Banach com operadores.
§8 – *Análise dos conjuntos abstractos* – 25 – Sucessões de conjuntos e limites; 26 – Equivalência e topo-isomorfismo.
– *FIM na* página 130 (169).

E N S A I O

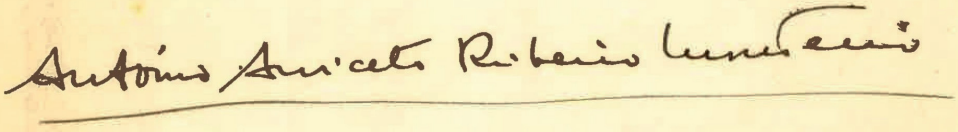
sobre

os

F U N D A M E N T O S da A N Á L I S E G E R A L

por

Antonio Aniceto Ribeiro Monteiro
Douter em Ciencias Matemáticas
pela Universidade de Paris



À MEMÓRIA

DE

MEU PAI

PREFÁCIO

A Análise Geral foi fundada no princípio dêste século por Maurice Fréchet, com o objectivo de generalizar o cálculo diferencial e integral para as funções em que a variável independente - e eventualmente a própria função - são elementos de natureza qualquer.

M.Fréchet considera a Análise Geral como tendo por objectivo o estudo das correspondências entre variáveis de natureza qualquer (veja NOTICE SUR LES TRAVAUX SCIENTIFIQUES DE M. FRÉCHET , Paris 1933 e l'ARITHMÉTIQUE DE L'INFINI, Paris 1934) . Em particular nêste último trabalho diz que (p.8): " L'essentiel de ma contribuition à cette nouvelle théorie " est sans doute d'avoir montré comment on peut étudier les " transformations où, sans connaître la nature des éléments, " on en supposait au moins défini le voisinage " .

Cantor nos fins do século XIX fundou a teoria dos conjuntos abstractos , que Fréchet considera como um capítulo da Análise Geral.

Podemos dizer que a teoria dos conjuntos abstractos se ocupa das propriedades dos conjuntos de pontos que se mantêm invariantes em relação ao grupo das transformações biunívocas B .

Um segundo capítulo da Análise Geral é a Topologia que estuda as propriedades dos conjuntos de pontos que se mantêm

invariantes em relação ao grupo das transformações bicontínuas ou homeomorfias. É claro que H é um sub-grupo de B. Os espaços de que se ocupa a topologia têm o nome de espaços topológicos.

Por outro lado a Álgebra Abstracta, que é um dos capítulos mais recentes da matemática moderna, estuda os conjuntos abstractos E onde se define pelo menos uma operação que a cada par ordenado (a, b) de elementos de E faz corresponder um único elemento de E ; daremos a um conjunto nestas condições o nome de espaço algébrico . As propriedades de que se ocupa a álgebra abstracta são aquelas que se mantêm invariantes em relação ao grupo I dos isomorfismos (correspondências biunívocas que respeitam a operação considerada) . I é evidentemente um sub-grupo de B.

A noção de espaço é aqui tomada no sentido que lhe atribuiu Uryshon - isto é: um espaço é um conjunto onde se define pelo menos uma relação entre os seus elementos. Essa relação é na teoria dos conjuntos abstractos a relação de igualdade, na topologia a operação de derivação e na álgebra abstracta uma ou mais operações algébricas. M. Fréchet considera que estas noções : " lorsqu'on voudra passer à la généralisation de l'Algébre e du calcul différentiel ne sont pas suffisantes ", (veja L'ARITHMÉTIQUE DE L'INFINI pgs. 10). E M. Fréchet é assim levado, com o objectivo de generalizar a noção de diferencial abstracta, a estudar espaços vectoriais em que se define uma métrica ou mais geralmente uma topologia. Por outro lado o desenvolvimento da teoria dos operadores lineares e da Álgebra

Abstracta tem levado os analistas a considerar uma série de espaços da mesma natureza que nos interessa caracterizar dizendo que na sua definição intervêm simultâneamente noções de álgebra e da topologia.

Foi o reconhecimento dêste facto que nos levou a introduzir a noção de espaço algébrico-topológico - que podemos definir como um espaço onde existe simultâneamente uma álgebra e uma topologia, e a considerar um novo capítulo da Análise Geral; a que podemos chamar Análise Abstracta, que terá por objectivo o estudo das propriedades invariantes por um topo-isomorfismo, isto é, por uma correspondência biunívoca que é simultâneamente uma homeomorfia e um isomorfismo.

O conjunto T dos topo-isomorfismos formam um grupo que é simultâneamente um sub-grupo de H e de I. As propriedades que se estudam na Análise Abstracta são portanto simultâneamente propriedades algébricas e propriedades topológicas. A análise abstracta apresenta-se assim como um capítulo da Análise Geral, se considerarmos esta última como o estudo das correspondências entre elementos de natureza qualquer.

No capítulo IV damos também à Análise Abstracta o nome de Análise Geral, porque esta foi fundada por M. Fréchet com o objectivo de generalizar o cálculo diferencial e integral, e porque essa generalização só é possivel precisamente nos espaços analíticos.

X

A noção fundamental da teoria dos conjuntos abstractos é a noção de potência de um conjunto, e a sua definição é tal que dois conjuntos com a mesma potência são necessàriamente equivalentes, isto é: existe entre êles uma correspondência biunívoca (Teorema de Cantor - Bernstein).

A noção fundamental da topologia é a noção de tipo de dimensão de um espaço, introduzido ainda por Fréchet. Se dois espaços E e F têm o mesmo tipo dimensional, êles não são necessàriamente homeomorfos; mas em todo o caso Banach demonstrou que é sempre possivel decompôr E e F em dois conjuntos

$$E = E_1 + E_2$$

$$F = F_1 + F_2$$

(onde E_1 e E_2 bem como F_1 e F_2 são disjuntos) tais que E_i é homeomorfo a F_i ($i = 1,2$).

Fômos levados a introduzir na álgebra a noção de tipo algébrico de um espaço, cuja definição é indicada no capítulo II, mas não conseguimos nenhum resultado análogo ao teorema de Cantor - Bernstein ou ao teorema de Banach.

Na Análise Abstracta (capítulo IV) fômos levados a introduzir a noção fundamental de dimensão algébrica de um espaço algébrico-topológico, e a sua definição é tal que se dois espaços têm a mesma dimensão algébrica êles têm necessàriamente o mesmo tipo algébrico e o mesmo tipo dimensional e portanto a mesma potência.

A noção de dimensão algébrica contém como caso particular a noção de dimensão linear de um espaço do tipo (F) introduzida recentemente por Banach (veja: TÊORIE DES OPÊRATIONS LINÉAIRES, VARSÓVIA, 1932; pgs. 193), é a única noção particular de dimensão algébrica que com nosso conhecimento foi até hoje considerada.

Êste exemplo mostra-nos que a noção de dimensão algébrica é de facto uma noção fundamental da Análise Abstracta.

A noção de espaço algébrico-topológico, tal como a noção de espaço (V), não é susceptivel de nos conduzir a propriedades muito numerosas e por isso fômos levados a particularizá-la introduzindo a noção de espaços analíticos (veja capítulo IV, § 2), para os quais é já possivel indicar um certo número de resultados importantes nas aplicações.

Nos espaços analíticos existe uma conexão entre a Álgebra e a topologia do espaço, o que não acontece necessàriamente nos espaços algébrico-topológicos. Encontramo-nos assim perante/a realização de uma ideia que M. Fréchet foi levado a formular no estudo dos espaços vectoriais nos seguintes têrmos:

" Si, logiquement, on peut associer de manière quelconque
" dans un même espace les proprietés vectorielles et les pro-
" priétés de continuité, on risquerait de produire des mons-
" tres. En introduisant dans un même espace deux principes
" d'ordre, ceux-ci doivent coopérer et non s'opposer."

Particularizando a álgebra e a topologia do espaço analítico considerado poderiamos indicar um conjunto numeroso de espaços particulares. Limitá-mo-nos a indicar os mais importantes. Fômos também levados a procurar um teorema de estruc-

tura análogo ao teorema de Banach ou ao teorema de Cantor - Bernstein. Um tal teorema não deve existir no caso de um espaço analítico qualquer, mas existe para espaços particulares. Com êste objectivo introduzimos a noção de grupos abelianos topológicos perfeitamente decomponiveis para os quais conseguimos demonstrar um teorema análogo aos teoremas de Banach e de Cantor - Bernstein. Em particular podemos afirmar que se dois grupos abelianos topológicos perfeitamente decomponiveis têm a mesma dimensão algébrica êles são topo-isomorfos.

*

Foi à luz destas ideias gerais que procedemos à redacção dêste trabalho consagrado aos fundamentos da Análise Geral.

Um estudo crítico das noções fundamentais da teoria dos conjuntos abstractos mostra-nos que o conjunto $\mathfrak{E}$ dos sub-conjuntos de um conjunto dado E é um espaço analítico, quando se definem em E as noções habituais de adição, intersecção e limite de uma sucessão de sub-conjuntos de E. Como estas noções são indispensáveis no desenvolvimento daquela teoria e em particular na demonstração do teorema fundamental de Cantor - Bernstein, fica assim demonstrado que a noção de espaço analítico é essencial na Análise Geral.

A algebrização dos sub-conjuntos de um conjunto desempenha portanto um papel importante na teoria dos conjuntos abstractos, onde ela é feita de tal maneira que toda a equivalência é necessàriamente um isomorfismo. Mais geralmente mostrámos que toda a

equivalência é um topo-isomorfismo.

Na álgebra abstracta fômos também levados a pôr em evidência o problema da algebrização de um espaço algébrico dado e não encontrámos, mesmo na teoria dos grupos, uma algebrização que gosasse de todas as propriedades encontradas na teoria dos conjuntos.

A melhor algebrização conhecida é aquela que se obtém com a relação do produto directo, ou de soma directa no caso dos grupos abelianos.

No capítulo consagrado à Topologia tomámos como noção fundamental a noção de espaço (V) que nos parece a noção primitiva mais intuitiva, dentre todas aquelas sôbre as quais se pode basear a topologia.

O estudo na noção de espaço (V), introduzida por Fréchet, leveu-nos à conclusão de que é possivel definir de uma infinidade de maneiras diferentes a noção de ponto limite de um conjunto situado num espaço (V) e que portanto um espaço (V) pode dar origem a uma infinidade de topologias diferentes. É interessante notar que esta circunstância se pode mesmo apresentar em espaços (V) bastante particulares, como sejam por exemplo os espaços de Hausdorff. Fômos assim levadòs a introduzir duas condições suficientes (que devem verificar as vizinhanças) para que no espaço considerado haja apenas uma topologia. Uma dessas condições é já conhecida, ela intervém por exemplo na definição de espaço de Hausdorff, enquanto que a outra não a vimos indicada em parte alguma, muito embora ela represente uma ideia muito simples e intuitiva.

Uma categoria importante de espaços (V) são aqueles em que existe uma conexão entre a operação de derivação e a adição de conjuntos, em particular aquêles para os quais

$$(1) \qquad D(A+B) = D(A) + D(B)$$

$$D^2(A) = D[D(A)] \subset D(A)$$

onde $D(A)$ representa um conjunto derivado de A. É o que acontece nos espaços acessiveis e nos espaços de Hausdorff.

Nos espaços analíticos importa sobretudo relacionar a topologia com a álgebra dos sub-espaços algébricos do espaço dado e em particular, na teoria dos grupos abelianos, com os conjuntos que estão em relação de soma directa.

Fômos com êsse fim levados a considerar os grupos abelianos prefeitamente decomponiveis para os quais

$$D(A \oplus B) = D(A) \oplus D(B)$$

relação análoga à condição (1).

x

Além dos resultados já indicados apresentamos no decorrer dêste trabalho um certo número de proposições e de noções novas que o leitor reconhecerá sem dificuldade, limitando-nos a indicar aqui a generalização para um anel da noção de aditividade, de que tratámos com desenvolvimento na nossa Tése de Doutoramento na Universidade de Paris. Não damos qui a demonstração dessas propriedades que são em tudo análogas às indicadas no referido trabalho.

Na teoria dos grupos normados mostrámos ràpidamente que é possivel fazer uma teoria das séries.

Do mesmo modo é possivel uma teoria Weierstrassiana das funções analíticas de uma variavel complexa cujo contra-domínio é um elemento dum espaço completo de Banach.

Na teoria dos anéis métricos é possivel fazer uma teoria da resolvente análoga à de Fredholm para a qual indicamos ainda uma generalização dos núcleos aditivos.

x

Se com a realização dêste trabalho conseguirmos chamar à atenção dos jóvens estudiosos do nosso país para a importância sempre crescente da Análise Geral, fundada por M. Fréchet, cujos métodos tendem a dominar a estruturação da matemática moderna, podemos considerar o nosso objectivo como atingido porque pensamos que nestas condições servimos a ciência de uma maneira geral e os estudiosos portuguêses em particular. Por essa razão apresentamos êste trabalho à Academia das Ciências de Lisboa para o concurso ao Prémio Científico Artur Malheiros de 1938.

BIBLIOGRAFIA

S. Baanach(1) Un théorème sur les transformation biunivoques. F. M. T. 6(p.236-239)

(2)-Théorie des opérations linéaires.Da colecção Monografje Matematyczne, Warszawa 1932.

(3)-Sur les opérations dans les ensembles abstraits et leur application aux équations intégrales.F. M. T. 3 (p.133-181)

M. Fréchet.(1) Les espaces Abstraits et leur théorie considerée comme introduction à l'Analyse Générale. Collection de Monographies sur la théorie des fonctions de M. Émile Borel. Paris.1928.

(2)- Sur la notion de voisinage dans les ensembles abstraits. Bulletin des Sciences Mathématiques.(2), T. 42, (1918) (p.138-156)

Hellinger und Teeplitz.(1). Mathematischen Annalen.vol. 69(1910).(p.289-330).

C. Kuratowski(1) Topologia I. Espaces métrisables, espaces complets. Da colecção:Monografje Matematyczne. Warzawa. 1933

A. Lindenbaum.(1). Sur les espaces métriques. Fund. Math. T 8 (1926) p.211.

Mazur et Ulam(1). Annales de la Société Polonaise de Mathématiques . Tome 9. p. 204.

A. Monteiro. (1).Sur les novaux additifs dans la théorie des équations intégrales de Fredholm.Comptes Rendus. t. 198, 1 sem. 1934(p.1737)

(2) Sur l'additivité des noyaux de Fredholm Portugaliae Mathematica, tome 1, (pag. 1-172)

M. Nagumo(1) Einige analytische Untersuchungen in linearen metuschen Räumen. Collected papers from the Faculty of Science, Osaka Imperial University, Series A Mathematics. vol. IV. 1936.

Sierpinski(1)- Leçons sur les nombres transfinis. Collection de monographies sur la théorie des fonctions de M. E. Borel. Paris. 1928.

(2)- Sur la non existence d'opérations universelle pour les ensembles dénombrables. F. Math. T. 29. p. 9 (1937)

Tychonoff e Vedenissoff.(1)-Sur le développement moderne de la théorie des espaces abstraits.Bulletin des Sciences Mathématiques. (2) Tome 50, 1926: (p. 15-27).

B. L.van der Waerden-(1) Moderne Algebra.Band 1-2 Berlin 1930

H. Weil. (1)Sur les espaces à structure uniforme et la topologie générale. Hermann-Paris. 1938.

CAPITULO I

A TEORIA DOS CONJUNTOS ABSTRACTOS

1- Conjuntos abstractos. A noção de conjunto abstracto é a noção fundamental da matemática moderna. Ela intervém, por exemplo, como teremos ocasião de vêr, na Álgebra Abstracta, na Topologia Geral e na Análise Geral. A exposição do objectivo da teoria dos conjuntos abstractos deve portanto preceder uma exposição relativa a cada uma daquelas teorias.
Dá-se o nome de conjunto abstracto a todo o conjunto em que se abstrai da natureza dos seus elementos. Um conjunto abstracto pode portanto ser constituido por pontos, funções, números, rectas, equações, operadores, etc, sem que nos importe especificar que se trata de elementos desta ou daquela natureza.
Nestas condições os elementos do conjunto tem o nome de elementos abstractos ou indefinidos. Para indicar que um elemento a pertence a um conjunto A escrevemos (segundo G. Peano)

$$a \in A$$

e para indicar que a não pertence ao conjunto A, escreveremos

$$a \notin A$$

Para representarmos o conjunto formado pelo elemento a usaremos a notação (a).

2-Noção de igualdade. Dado um conjunto abstracto A, diremos que a noção de igualdade está definida sôbre A, quando para cada par ordenado (a,b) de elementos de A existe uma relação que verifica as seguintes

condições:

I_1- Determinação: Para cada par ordenado (a,b) de elementos de A ou existe a relação em questão, e então escreveremos a=b (leia-se a igual a b) ou então não existe essa relação e escreveremos $a \neq b$ (leia-se a diferente de b).

I_2 - Propriedade reflexiva: para cada elemento a de A tem-se a=a

I_3 - Simetria. Se a=b será tambem b=a.

I_4 - Transitividade. Se a=b e b=c então será: a=c, quaisquer que sejam a, b e c de A.

Num mesmo conjunto A podêm existir várias relações de igualdade. (É o que acontece, por exemplo, na teoria dos vectores onde se definem diferentes relações de igualdade que dão origem ás noções de vectores livres, deslizantes e aplicados).

Se uma das relações de igualdade deve ser considerada como fundamental em relação a outras aquela tem o nome de identidade e a outra ou as outras têm o nome de equivalências.

Para notar a identidade será então usado um dos símbolos = ou $\equiv$, e para as equivalências um dos símbolos $\sim$, $\simeq$, $\approx$, $\eqsim$, $\Bumpeq$, $\thickapprox$, etc.

33 Sub-conjuntos. Se todos os elementos de um conjunto A são elementos de outro conjunto B, diremos que A é um sub-conjunto de B e escreveremos para indicar êsse facto:

$$A \subset B$$

ou $$B \supset A$$

relações que se lêm respectivamente: o conjunto A é um sub-conjunto de B ou A é uma parte de B, e B tem A como sub-conjunto ou B contém A.

A relação entre dois conjuntos A e B que representamos pelo símbolo $\subset$ dá-se o nome de relação de inclusão.

É evidente que a relação de inclusão gosa da propriedade transitiva, isto é: se A é um sub-conjunto de B e B é um sub-conjunto de C, A é ainda um sub-conjunto de C, isto é:

$$A \subset B \text{ e } B \subset C$$

implicam

$$A \subset C$$

4- Igualdade de conjuntos. Seja E um conjunto abstracto qualquer e seja $\mathcal{C}$ o conjunto dos sub-conjuntos de E. Diremos que dois conjuntos $A \in \mathcal{C}$ e $B \in \mathcal{C}$ são iguais (e escreveremos $A = B$) quando fôrem verificados simultâneamente as duas seguintes condições:

$$A \subset B \qquad B \supset A$$

Como todo o elemento de A é um elemento de B e reciprocamente, vê-se imediatamente que A e B contém os mesmos elementos, isto é, os dois conjuntos A e B são idênticos. O leitor pode verificar sem dificuldade que são verificados, para a relação de igualdade assim definida, os axiomas I_1, I_2, I_3 e I_4. Para indicar que dois conjuntos A e B não são idênticos escreveremos $A \neq B$

5- Observação. Cada relação de igualdade definida sôbre um conjunto A, define simultâneamente uma classe de sub-conjuntos de A sem elementos comuns dois a dois, ou ainda como se costuma dizer uma classe de sub-conjuntos disjuntos de A.

Com efeito consideremos o conjunto $\mathcal{A}$ dos elementos de A que são iguais a um elemento a de A; daremos a $\mathcal{A}$ o nome de classe gerada por a. É evidente que as duas classes geradas pelos elementos a e b só podem ser idênticas se fôr $a \sim b$.

Pode acontecer que a classe gerada por $a \in A$ seja constituida únicamente pelo elemento a, no caso contrário diremos que a é um elemento representativo da classe $\mathcal{A}$.

Esta observação vai-nos permitir precisar a noção de conjunto. Para que um conjunto A, seja determinado, é necessario que sejam verificadas as seguintes condições.

1º) Dado um elemento a qualquer, mas bem determinado, das duas uma ou $a \in A$, ou $a \notin A$.

2º) No conjunto A existe uma relação de igualdade tal que a classe gerada por um elemento qualquer $a \in A$ é constituida únicamente pelo elemento a.

Assim por exemplo: no conjunto constituido pelos números 1,3,3, os dois números 3 que nêle figuram devem ser considerados como elementos diferentes, e nestas condições a relação de igualdade a que se refere a condição 2º) não pode ser a relação de igualdade entre números inteiros.

A teoria dos conjuntos abstractos ocupa-se dos conjuntos A que verificam as duas condições 1º e 2º), isto é, ocupa-se dos conjuntos A para os quais: 1º) nós podemos decidir se um elemento dado pertence ou não ao conjunto A

2º) sabemos distinguir uns dos outros os elementos que pertencem ao conjunto A.

7- Noção de função. Sejam X e Y dois conjuntos em cada um dos quais foi definida uma relação de igualdade que podemos representar pelo mesmo símbolo = , sem perigo de confusão, se tivermos o cuidado de indicar as letras que utilizamos para representar os elementos de X e de Y.

Suponhamos que a cada elemento $x \in X$ fazemos corresponder um elemento y e um só de Y que representaremos pela notação $f(x)$

$$y = f(x)$$

de tal maneira que todo e qualqer elemento y de Y é o correspondente

de um elemento pelo menos de X. Nestas condições diremos que $y = f(x)$ é uma função uniforme cujo dominio é X e cujo contra-dominio é Y. Também é costume dar-se a X o nome de <u>conjunto dos argumentos</u> e a Y o nome de conjunto dos valores da função $y = f(x)$. Podemos ainda dizer que a função f transforma X em Y.

Se $X \subset X$ representaremos por $f(X) \subset Y$ o conjunto dos elementos de Y que dorrespondem aos elementos de X.

Se fôr $Y \subset Y$ representaremos por $f^{-1}(Y)$ o conjunto de todos os elementos de X cujos valores pertencem a Y.

8- <u>Homomorfismos em relação à igualdade</u>. Diremos que f define um homomorfismo de X em Y relativamente às relações de igualdade anteriormente consideradas quando fôr verificada a seguinte condição: $x_1 = x_2$ implica $f(x_1) = f(x_2)$ qualquer que sejam x_1 e x_2 de X.

A função f é portanto uma transformação que respeita as relações de igualdade definidas em X e Y.

Como na teoria dos conjuntos dois elementos distinctos pertencentes a um mesmo conjunto devem ser considerados como diferentes ($\neq$) toda a transformação de um conjunto X num conjunto Y será sempre um homomorfismo relativamente às relações de igualdade definidas em X e Y. ( )

9- <u>Transformações biunívocas</u>. Diremos que $y = f(x)$ transforma X em Y de uma maneira biunívoca quando a igualdade

$$(1) \quad f(x_1) = f(x_2)$$

implicar a igualdade

$$(2) \quad x_1 = x_2$$

nestas condições as igualdades (1) e (2) são equivalentes.

Nêste caso existe a função inversa $x = f^{-1}(y)$ que transforma Y em X de uma maneira biunívoca.

Dados dois conjuntos X e Y, se existir uma transformação biunívoca

de X em Y (ou o que é o mesmo de Y em X) diremos que os dois conjuntos X e Y são <u>equivalentes</u> e escreveremos:

$$X \sim Y$$

A relação de equivalência gosa de todas as propriedades da relação de igualdade, com efeito:

I - Dados dois conjuntos X e Y ou é verificada a relação $X \sim Y$ ou não é verificada $(X \not\sim Y)$

I - $X \sim X$, basta considerar a transformação $x = f(x)$ onde $x \in X$.

I - Se $X \sim Y$ será $Y \sim X$ como vimos precedentemente.

I - Se $X \sim Y$ e $Y \sim Z$ será $X \sim Z$. Como efeito seja $f(x) = y$ uma transformação biunívoca de X em Y e $z = g(y)$ uma transformação biunívoca de Y em Z. A transformação

$$z = g[f(x)] = h(x)$$

é uma transformação biunívoca de X em Z, como é fácil de verificar.

10- <u>Objectivo da teoria dos conjuntos abstractos.</u> A teoria dos conjuntos abstractos estuda as propriedades dos conjuntos abstractos que se mantêm invariantes quando se passa de um conjunto para um outro que lhe seja equivalente, ou o que é o mesmo, quando se efectua sobre um conjunto uma transformação biunívoca.

Podemos portanto dizer que na teoria dos conjuntos é impossivel distinguir dois conjuntos equivalentes; todas as propriedades de um dos conjuntos pertencem ao outro conjunto e reciprocamente.

Na teoria dos conjuntos quando estudarmos as propriedades de um conjunto determinado A, estudamos ao mesmo tempo as propriedades comuns a todos os conjuntos equivalentes a A.

Podemos ainda apresentar a mesma ideia da seguinte maneira: seja $\mathcal{F}(A)$ a família (isto é o conjunto) de todos os conjuntos equivalentes ao comjunto A; a teoria dos conjuntos estuda as propriedades d P de cada uma das famílias $\mathcal{F}$ que gosam da seguinte propriedade 1º)

1º) Se existe um elemento da família $\mathcal{F}$ que tem a propriedade $\mathcal{P}$, todos os elementos da familia $\mathcal{F}$ tem a mesma propriedade $\mathcal{P}$.

As funções proposicionais primitivas da teoria dos conjuntos são: a igualdade $x = y$ e a noção de elemento de um conjunto $x \in A$. Com aas operações fundamentais da Lógica formal e com estas duas noções primitivas da teoria dos conjuntos pode-se construir tôda a teoria dos conjuntos abstractos; toda a função proposicional assim obtida será uma funcão proposicional conjuntiva.

Se f fôr uma transformação biunívoca de X em Y, tivemos ocasião de ver que $x_1 = x_2$ é equivalente a $f(x_1) = f(x_2)$

Por outro lado é evidente que se $x \in X$ será $f(x) \in f(X) = Y$.

Isto é a relação de igualdade e a propriedade de ser elemento de um conjunto mantêm-se quando se passa de um conjunto para outro equivalente. Nestas condições de toda a proposição que se possa enunciar para o conjunto A em que intervenham apenas as noções primitivas $x = y$ e $x \in A$, se pode deduzir uma outra relativa ao conjunto $f(A)$ que se obtem substituindo x por $f(x)$.

Podemos ainda dizer que as propriedades de que se ocupa a teoria dos conjuntos abstractos, isto é aquelas que se mantêm invariantes por uma equivalência, são aquelas que se podem enunciar recorrendo apenas às noções primitivas da teoria dos conjuntos $x = y$ e $x \in A$ e às funções proposicionais da Lógica formal.

Exemplo I- Um conjunto formado por um único elemento pode ser caracterisado como um conjunto A que gosa das seguintes propriedades

1º) existe um objecto x tal que $x \in A$

2º) se $y \in A$ será $x = y$.

Se f fôr uma equivalência, o conjunto f (A) gosa ainda das duas propriedades:

1º) existe um objecto $f(x)$ tal que $f(x) \in f(A)$

2º) Se $f(y) \in f(A)$ será $f(x) = f(y)$

donde se conclui que f(A) é formado por um único elemento.

Exemplo II. Dados dois conjuntos $A \in \mathcal{X}$ e $B \in \mathcal{X}$ diz-se que êles são disjuntos se não têm nenhun elemento comum, propriedade que pode ser caracterizada pela seguinte condição:

c) Não existe nenhum objecto x tal que $x \in A$ e $x \in B$

Se f fôr uma equivalência que transforma x em y podemos dizer:

c) Não existe nenhum objecto f(x) tal que $f(x) \in f(A)$ e $f(x) \in f(B)$

Nestas condições f (A) e f(B) são disjuntos.

11- Potência de um conjunto infinito ou número cardinal.

Vamos agora abordar o estudo da noção de número cardinal ou de potência de um conjunto, que é a noção fundamental da teoria do dos conjuntos abstractos.

Definições :I-Diremos que dois conjuntos abstractos infinitos A eB têm o mesmo número cardinal ou a mesma potência, se A for equivalente a um sub-conjunto $B_1 \subset B$ e se B fôr equivalente a um sub- conjunto $A_1 \subset A$.

Nestas condições escreveremos

$$\overline{\overline{A}} = \overline{\overline{B}}$$

(leia-se: potência de A igual à potência de B)

II- Diremos que a potência ou o número cardinal do conjunto A é superior á potencia do conjunto B se A fôr equivalente a um sub-conjunto $B_1 \subset B$ e se B não fôr equivalente a nenhum sub-conjunto $A_1 \subset A$, Então escreveremos

$$\overline{\overline{A}} > \overline{\overline{B}}$$

Nestas mesmas condições também é costume dizer-se que a potência do conjunto B é inferior à potência do conjunto A e escrever

$$\overline{\overline{B}} < \overline{\overline{A}}$$

Há ainda lógicamente dois casos possiveis.

III-A potência de A é inferior à potência de B e então escreveremos

$$\overline{\overline{A}} < \overline{\overline{B}}$$

cuja definição acaba de ser dada.

IV- Diremos que a potência de A é incomparavel com a potência de B se A não fôr equivalente a nenhum sub-conjunto $B_1 \subset B$ e se B não fôr equivalente a nenhum sub-conjunto, $A_1 \subset A$.

É necessário fazer algumas observações sobre as definições precedentes. 1º) Em primeiro lôgar é evidente que se dois conjuntos A e B são equivalentes êles têm a mesma potência, isto é: se $A \sim B$ será $\overline{\overline{A}} = \overline{\overline{B}}$

Ora a recíproca desta proposição também é verdadeira, isto é: se dois conjuntos A e B têm a mesma potência êsses dois conjuntos são equivalentes, isto é:

se $\overline{\overline{A}} = \overline{\overline{B}}$

será $A \sim B$

Esta proposição é conhecida pelo nome de Teorema de Cantor-Bernstein e ela domina toda a teoria dos conjuntos abstractos. A sua demonstração será indicada mais adiante no capitulo II, e será baseada num teorema de Banach.

O que é importante dizer nêste momento é que é impossivel demonstrar o teorema de Cantor-Bernstein antes de estudarmos a Álgebra dos sub-conjuntos de um conjunto dado; porque nessa teoria se introduzem noções que são indispensáveis para a demonstração do referido teorema, em particular as noções de soma e de intersecção de dois ou mais conjuntos. Ora como nós pretendemos fazer um estudo crítico das noções fundamentais da Análise Moderna é natural que não estudemos a Álgebra dos conjuntos antes de definirmos com precisão o objectivo da Álgebra Abstracta, e de indicarmos as noções fundamentais dessa doutrina.

10

Em tôdas as exposições que conhecemos da teoria dos conjuntos abstractos, as noções de soma e de intersecção de dois ou mais conjuntos costumam ser apresentadas logo de início e estudadas com tôdo o detalhe. Veja-se por exemplo o curso de Sierpinski (pag 5 e seguintes). Nestas condições poder-se-ia preguntar se essas condições devem ou não figurar numa exposição da teoria dos conjuntos abstractos.

É claro que nós estamos em condições de dar uma resposta a esta questão, visto que já definimos (nº 1º) o objectivo da teoria dos conjuntos abstractos e possuimos mesmo um critério que nos permite reconhecer se uma noção determinada deve ser ou não estudada na teoria dos conjuntos abstractos. As noções de que se ocupa a teoria dos conjuntos abstractos são aquelas que podem ser definidas recorrendo apenas às noções primitivas da teoria dos conjuntos $x = y$ e $x \in A$ e às funções proposicionais da Lógica formal.

Ora é facil de reconhecer como teremos ocasião de vêr que as noções de soma e de intersecção de dois conjuntos, estão precisamente nessas condições; trata-se portanto de duas noções que pertencem à teoria dos conjuntos abstractos, na qual são estudados habitualmente.

Mas é preciso também dizer, que essas noções são ao mesmo tempo noções de Álgebra, como teremos ocasião de vêr, e que portanto também é possivel sem inconveniente estudá-las no capítulo consagrado à Algebra Abstracta. E decidimos proceder assim, não só para simplificar a exposição, mas também porque nos pareceu que melhor poderiamos nessa altura pôr em evidência certas caracteristicas da Algebra dos conjuntos. Por outro lado ficará assim em evidência a ideia de que: a algebrização dos sub-conjuntos de um conjunto dado desempenha um papel de primeira importância no desenvolvimento da teoria dos conjuntos

abstractos.

Se admitirmos provisóriamente o teorema de Cantor-Bernstein, podemos dizer que para que dois conjuntos A e B tenham a mesma potência é necessário e suficiente que êles sejam equivalentes. A noção de potência de um conjunto A apresenta-se assim como uma propriedade comum a todos os conjuntos equivalentes ao conjunto A.

A concretização da noção de potência pode então ser apresentada da seguinte maneira: Seja A um conjunto infinito determinado, para fixar ideias podemos supôr que A é o conjunto formado pela sucessão natural dos números inteiros.

A) 0, 1, 2, 3, 4,..., n ,...

diremos que um conjunto qualquer B tem a potência do númerável (ou é um conjunto númerável) se êsse conjunto fôr equivalente ao conjunto A). Seja b_0 o elemento de B que corresponde ao número zéro, b_1 aquêle que corresponde ao número 1,..., b_n aquêle que corresponde ao número inteiro n , etc. O conjunto B será

$$b_0,\ b_1,\ b_2,\ldots,b_n,\ldots$$

A potência do númeravel representa-se pelo símbolo $\aleph_0$ (alefa indice zéro).

Um outro exemplo de concretização da noção potência é o seguinte: seja C o conjunto dos números reais a que passaremos a dar o nome de contínuo, diremos que um conjunto C′ tem a potência do contínuo se C′ fôr equivalente a C.

A potência do contínuo será representada pela letra gótica $\mathfrak{c}$.

A possibilidade da existência de uma teoria dos números cardinais transfinitos baseia-se no facto de existirem conjuntos infinitos com potências diferentes, porque no caso contrário existiria um único número cardinal transfinito e portanto nada mais haveria a dizer sobre os números cardinais transfinitos.

Prova-se por exemplo que $\aleph_0 < \mathfrak{c}$

12- O Problema da tricotomia e o axioma de Zermelo. Dados dois números cardinais m e n é evidente, em virtude das definições dadas no nº precedente, que qualquer das condições

$$m < n \; ; \; m > n \; ; \; m = n$$

exclui as duas outras. Portanto dois números cardinais podem estar relacionados quando muito por um dos três sinais

$$<, \; >, \; =$$

o que não quer dizer que seja sempre possível reunir dois números cardinais quaisquer dados por um dos três sinais $<, >, =$, (problema da tricotomia). Para que assim seja é necessario e suficiente que não existam dois conjuntos de potências incomparaveis.
Se o problema da tricotomia se resolve pela afirmativa então: se pudermos afirmar que não se verifica a condição

$$m < n$$

Podemos afirmar que é verificada a desigualdade

$$m \geqslant n$$

Um dos resultados mais importantes da teoria dos conjuntos é o seguinte: a tricotomia é equivalente ao axioma de Zermelo.
O Axioma de Zermelo, sempre tão discutido, pode enunciar-se da seguinte maneira:

Se os elementos de um conjunto A são conjuntos E, não vazios e sem elementos comuns dois a dois, então existe pelo menos um conjunto A' que contem um elemento e um só de cada conjunto E.

12- Propriedades da desigualdade de potências. A desigualdade de potências verifica as seguintes propriedades formais das desigualdades ordinárias. Representaremos, para simplificar a escrita, a potência de um comjunto A pelo símbolo p (A).

1º) Se $A = B$ $\quad p(A) = p(B)$

2º) Se $p(A) = p(B) \leqslant p(B) = p(A)$

3º) Se $p(A) = p(B)$ e $p(B) = p(C)$ será $p(A) = p(C)$.

4º) Se [illegible] será $p(A)$ $p(\;)$

4º) Se $A \subset B$ será $p(A) \leq p(B)$

5º) Se $p(A) \leq p(B) \leq p(C)$ será $p(A) \leq p(C)$

6º) Se $p(A) \leq p(B) < p(C)$

ou $p(A) < p(B) \leq p(C)$

será $p(A) < p(C)$

CapítuloII

Álgebra, Abstracta

§1-Operações algébricas.

1-Definições.A Álgebra Abstracta é um dos capítulos mais recentes da Matemática Moderna, visto que o início do seu desenvolvimento se pode localizar por volta de 1920. Teremos ocasião de definir com todo o rigor o objectivo da álgebra abstracta mas podemos desde já dizer que ela se ocupa de certas propriedades dos conjuntos abstractos onde além da noção de igualdade foram definidas uma ou mais operações algébricas.

Operação algébrica.Dado um conjunto abstracto E onde existe uma relação de igualdade, diremos que em E foi definida uma operação algébrica $\odot$ quando a cada par ordenado (a,b) de elementos (iguais ou diferentes) de E se faz corresponder uma entidade que representaremos pela notação $a \odot b$ e que verifica as seguintes condições:

Existência.

Axioma O. Se $a \in E$ e $b \in E$ será

$$a \odot b \in E$$

quaisquer que sejam a e b de E.

Uniformidade.

Axioma O: Se $a = a_1$ e $b = b_1$ será:

$$a \odot b = a_1 \odot b_1$$

A noção de uniformidade de uma operação definida em E está portanto intimamente relacionada com a noção de igualdade definida em E. Isto é: uma operação pode ser uniforme relativamente a uma relação de igualdade e não o ser relativamente a outra.Seria facil indicar vários exemplos.

Quere-nos parecer que êste facto ainda não foi convenientemente assinalado.

Definir uma operação algébrica no conjunto abstracto E equivale a definir uma função de duas variaveis f(a,b) onde a e b são elementos de E e cujos valores pertencem ao conjunto E.

Dá-se o nome de espaço algébrico a todo o conjunto abstracto onde foi definido pelo menos uma operação algébrica. É claro que num espaço algébrico podem ser definidos duas ou mais operações algébricas.

2-Sub-espaço algébrico. Seja E_1 um sub-conjunto de E, diremos que E_1 é um sub-espaço algébrico de E se E_1 fôr um espaço algébrico relativamente á operação $\odot$ definido em E e para isso é necessario e suficiente que se a e b forem dois elementos de E_1 o elemento $a \odot b$ seja ainda um elemento de E_1 quaisquer que sejam a e b de E_1.

Para indicarmos que E é um espaço algébrico relativamente à operação $\odot$ definida em E utilizaremos a notação $E(\odot)$, nestas condições para indicarmos que $E_1(\odot)$ é um sub-espaço algébrico de $E(\odot)$ escreveremos

$$E_1(\odot) < E(\odot)$$

É evidente que se $E_1(\odot)$ é um sub-espaço algébrico de $E_2(\odot)$ e se $E(\odot)$ é um sub-espaço algébrico de $E(\odot)$, $E_1(\odot)$ é ainda um sub-espaço algébrico de $E_3(\odot)$, isto é se fôr:

$$E_1(\odot) < E_2(\odot) \text{ e } E_2(\odot) < E_3(\odot)$$

será ainda

$$E_1(\odot) < E_3(\odot)$$

os sub-espaços algébricos de um espaço algébrico dado desempenham na Álgebra Abstracta o mesmo papel que a noção de sub-conjunto na teoria dos conjuntos abstractos.

3-Homomorfismos-Sejam $E(\odot)$ e $E'(\odot')$ dois espaços algébricos e consideremos indicaremos uma transformação T cujo domínio é E e cujo contra-domínio é E'. Té é uma transformação da forma

$$a' = T(a)$$

onde $a \in E$ e $a' \in E'$.

Diremos que T define um homomorfismo de E em E' relativamente às operações $\circ$ e $\circ'$, se T respeita as operações definidas em E e E'. Duma maneira mais precisa seja:

$$a' = T(a)$$

$$b' = T(b)$$

e

$$c = a \circ b$$

$$c' = a' \circ' b'$$

A transformação T será um homomorfismo se fôr

$$e' \quad T(e)$$

quaisquer que sejam a e b de E, isto é se fôr

$$T(a) \circ' T(b) = T(a \circ b)$$

Se em cada um dos espaços E e E' forem definidos duas ou mais operações, Θ_1 e Θ_2 em E, Θ'_1 e Θ'_2 em E' diremos que T define um homomorfismo de E(Θ_1, Θ_2) em E (Θ'_1, Θ'_2) se T fôr simultâneamente um homomorfismo relativamente às operações Θ_1 e Θ'_2 e às operações Θ_2 e Θ'_2, isto é se fôr:

$$T(a) \quad \Theta'_1 \quad T(b) = T(a \Theta_1 b)$$

$$T(a) \quad \Theta'_2 \quad T(b) = T(a \; \Theta_2 b)$$

4-Isomorfismos e Automorfismos. Diremos que dois espaços E($\odot$) e E'($\odot$) são isomorfos se existe uma correspondência biunívoca entre E e E' que respeita as leis da composição $\odot$ e $\odot'$.

Para indicar que E ($\odot$) e E' ($\odot'$) são dois espaços isomorfos escreveremos

$$E\ (\odot) \cong E'\ (\odot')$$

Se E' é um espaço idêntico a E e se $\odot'$ é a mesma operação que $\odot$ o isomorfismo toma então o nome de automorfismo.

É fácil verificar que a relação de isomorfismo gosa de todas as propriedades da relação de igualdade.

5-Objectivo da Álgebra Abstracta. A álgebra abstracta estuda as propriedades dos espaços algébricos que se mantêm invariantes quando se passa de um espaço algébrico para outro que lhe seja isomorfo. Na Álgebra Abstracta é impossivel distinguir dois espaços algébricos isomorfos; todas as propriedades algébricas de um dos espaços pertencem ao outro e reciprocamente. Em Álgebra Abstracta quando estudamos as propriedades de um espaço algébrico determinado E(e) estudamos ao mesmo tempo as proppiedades comuns a todos os espaços algébricos isomorfos a E(e).

Nestas condições podemos dizer que as noções e propriedades de que se ocupa a Álgebra Abstracta são aquelas que se podem enunciar recorrendo apenas às noções primitivas da Álgebra $a = b$, $a \in E(e)$ e $c = a \odot b$ e às funções proposicionais da Lógica formal.

É o que acontece às noções de sistema com multiplicação, grupo, grupo abeliano, anel corpo, etc, de que nos vamos ocupar.

6-Espaço álgébrico Universal. Seja E(e) um espaço algébrico e seja m a potência de conjunto E.

Diremos que E(e) é um espaço algébrico universal, se dado um espaço algébrico qualquer $E'(e')$ de potência m, existir um sub-espaço algébrico $E''(e) \subset E(e)$, que seja isomorfo a $E'(e')$.

W. Sierpinski [2] demonstrou que não existe um espaço algébrico numerável universal. Será importante abordar o estudo dêste problema para espaços com uma potência diferente da do numerável e para espaços algébricos com mais do que uma operação.

Se a operação não fôr completamente arbitrária pode acontecer como t teremos ocasião de indicar que existam espaços algébricos universais.

7-Axiomas Fundamentais. Nos sistemas algébricos mais importantes nas aplicações intervêm em regra uma ou duas operações; a uma delas da-

remos o nome de adição e será representada pelo sinal (+), e à outra daremos o nome de multiplicação e será representada pelo sinal (·).
Em regra essas operações não são completamente arbitrárias, satisfazem pelo contrário a um certo número de axiomas que caracterizam os espaços algébricos correspondentes.

Vamos indicar uma lista dêsses axiomas que nos permitirá definir com facilidade os espaços algébricos mais importantes que teremos a considerar.

8-Axiomas da Adição.

A_1 - Existência. Dados dois elementos arbitrários a e b de E, o elemento $a+b$ pertence a E.

A_2 - Unicidade. Se $a=a_1$ e $b=b_1$ será: $a+b=a_1+b_1$

A_3 - Lei associativa. $(a+b)+c=a+(b+c)$

A_4 - Existência de um zéro. Existe um elemento $\theta \in E$ tal que

$a+\theta=\theta+a$ a, qualquer que seja o elemento a de E. Ás vezes é útil substituir êste axioma pelos dois seguintes:

A'_4 - Existência de um zéro à esquerda. Existe um elemento $\theta' \in E$ (zéro à esquerda) tal que $\theta+a=a$ qualquer que seja $a \in E$

A''_4 - Existência de zéro à direita. Existe um elemento $\theta'' \in E$ (zéro à direita) tal que $a+\theta''=a$ qualquer que seja $a \in E$.

A_5 - Existência de um simétrico. Para cada elemento $a \in E$ existe um outro $(-a)$, simétrico de a, tal que $(-a)+a=a+(-a)=\theta$

Às vezes é útil substituir êste axioma pelos dois seguintes:

A'_5 - Existência de um simétrico à esquerda. Para cada elemento $a \in E$ existe um outro $(-a_e)$, simétrico à esquerda, tal que $(-a_e)+a=\theta'$

A''_5 - Existência de um simétrico à direita. Para cada elemento $a \in E$ existe um outro $(-a_d)$, simétrico à direita, tal que $a+(-a_d)=\theta''$.

A_6- Lei comutativa: $a+b=b+a$ quaisquer que sejam os elementos a e b de E.

A_7- Existência de um elemento absorvente ω. Existe um elemento $\omega \in E$ tal que:

$$a+\omega = \omega + a\omega$$

qualquer que seja $a \in E$.

9- Axiomas da multiplicação.

M_1- Existência. Dados dois elementos arbitrários a e b de E, o elemento a b pertence a E.

M_2- Unicidade. Se $a = a_1$ e $b = b_1$ será: $ab = a_1 . b_1$

M_3- Lei associativa. $(a . b) . c = a . (b . c)$

M_4- Existência de uma unidade. Existe um elemento $e \subset E$ tal que $ae = ea = a$ qualquer que seja o elemento a de E. Às vezes é util substituir êste axioma pelos dois seguintes:

M_4'- Existência de uma unidade à esquerda. Existe um elemento $é \in E$ (unidade à esquerda) tal que $é . a = a$ qualquer que seja $a \in E$.

M_4''- Existência de uma unidade à direita. Existe um elemento $e' \in E$ (unidade à direita) tal que $ae'' = a$ qualquer que seja $a \in E$.

M_5- Existência de um inverso. Para cada elemento $a \in E$ existe outro a^{-1}, inverso de a, tal que $a^{-1} a = a . a^{-1} = e$. Às vezes é útil substituir êste axioma pelos dois seguintes:

M_5'- Existência de um inverso à esquerda. Para cada elemento $a \in E$ existe um outro a_e^{-1}, inverso à esquerda tal que:

$$a_e^{-1} . a = e'$$

M_5''- Existência de um inverso à direita. Para cada elemento $a \in E$ existe um outro a_d^{-1}, inverso à direita, tal que:

$$a . a_d^{-1} = e'$$

M_6- Lei comutativa. $a . b = b . a$ quaisquer que sejam os elementos a e b de F.

M_7- Existência de um elemento absorvente. Existe um elemento $\Omega \in E$

tal que:

$$a \cdot \Omega = \Omega \cdot a = \Omega$$

qualquer que seja $a \in E$.

1º-Axiomas que relacionam a multiplicação com a adição.

M A_1- Lei distributiva da multiplicação em relação à adição.

$$a \cdot (b+c) = a \cdot b + a \cdot c$$

$$(b+c) \cdot a = b \cdot a + c \cdot a.$$

M A_2- Lei de absorção da multiplicação em relação à adição.

$$a(a+b) = a$$

$$(a+b)a = a$$

A M_1-Lei distributiva da adição em relação à multiplicação.

$$a \cdot b + c = (a+c) \cdot (b+c)$$

$$c + a \cdot b = (c+a) \cdot (c+b)$$

A M_2-Lei de absorção da adição em relação à multiplicação.

$$a + a \cdot b = a$$

$$a \cdot (a+b) = a$$

§2- Álgebra dos Conjuntos Abstractos

11- Antes de indicarmos os espaços algébricos mais importantes, vamos abordar o estudo da Algebra dos conjuntos, estudo que servirá ao mesmo tempo de exemplificação das noções anteriormente definidas. Seja E um conjunto abstracto dado. Os conjuntos A, B,.. que vamos considerar serão todos sub-conjuntos dum conjunto E, isto é vamos estudar o espaço $\mathcal{E}$ formado por todos os sub-conjuntos de E, incluindo o conjunto vazio $\emptyset$ e o proprio conjunto E. O espaço $\mathcal{E}$ será um espaço algébrico quando se definir em $\mathcal{E}$ uma operação que a cada par ordenado A,B de elemento de $\mathcal{E}$ faz corresponder um elemento de $\mathcal{E}$. A algebrização do espaço $\mathcal{E}$ pode fazer-se da seguinte maneira.

12-Adição de Conjuntos. Dados dois sub-conjuntos A e B de E, consideremos o conjunto C dos elementos de E que pertencem pelo menos a um dos conjuntos A e B, diremos que C é a soma dos conjuntos A e B e escreveremos $C = A + B$.

É claro que C é um sub-conjunto de E e é portanto um elemnto de $\mathcal{E}$.

Nestas condições a defenição que acabamos de dar equivale a defenir uma operação algébrica no espaço $\mathcal{E}$, e é facil de verificar que esta operação gosa das seguintes propriedades.

A_1-Existência. Dados dois elementos arbitrarios A e B de $\mathcal{E}$ (isto é: dois sub-conjuntos A e B de E) o elemento $C = A + B$ pertence a $\mathcal{E}$.

A_2-Unicidade. Se $A = A_1$ e $B = B_1$ será $A + B = A_1 + B_1$

A_3-Lei associativa $(A + B) + C = A + (B + C)$

A_4-Existência de um zéro. Existe um elemento $O \in \mathcal{E}$ (a saber o conjunto vazio o) tal que $A + O = O + A = A$ qualquer que seja A.

A_5- Lei comutativa. $A + B = B + A$

A_6-Existência de um elemento absorvente. O elemento $E \in \mathcal{E}$ (isto é o conjunto E) é tal que $A + E = E + A = E$, visto que A é sempre um sub-conjunto de E.

Podiamos ainda indicar outras propriedades da adição de conjuntos, por exemplo:

Se A é sub-conjunto de B será $A + B = B$, que como caso particular contém a seguinte propriedade da adição: $A + A = A$ qualquer que seja A

A demonstração desta propriedades faz-se mostrando que todo o elemento do conjunto que está escrito do lado esquerdo da fórmula é um elemento de conjunto que está escrito do lado direito e vice-versa.

Não nos interessa nêste momento explorar as consequências destas propriedades. O que pretendemos é pôr em evidência as propriedades que se seguem.

Em primeiro logar notemos que na defenição de soma de dois sub-conjuntos A e B de E, intervêm apenas funções proposicionais da lógica for-

mal e as noções primitivas da teoria dos conjuntos $a=b$ e $a\in E$; portanto a noção de soma de dois sub-conjuntos de E é uma noção da teoria dos conjuntos abstractos. Por outro lado consideremos uma transformação unívoca de E num outro conjunto E' [$f(E)=E'$],

Se fôr $A\subset E$ o conjunto A' dos transformados $a'=f(a)$ dos elementos $a\in A$ é um sub-conjunto de E', Diremos que A' é a imagem de A relativamente à transformação f e escreveremos $A'=f(A)$ isto é ~~A um~~ elemento do conjunto $\mathcal{E}'$ formado por todos os sub-conjuntos de E';

isto é a transformação f define ao mesmo tempo uma transformação unívoca de $\mathcal{E}$ em $\mathcal{E}'$ $f(\mathcal{E})=\mathcal{E}'$. Se $f(E)=E'$ fôr uma transformação biunívoca($E'\sim E$): $f(\mathcal{E})=\mathcal{E}'$ é ainda uma transformação biunívoca($\mathcal{E}'\sim\mathcal{E}$). Como $\mathcal{E}$ é um espaço algébrico, é natural verificar se $f(\mathcal{E})=\mathcal{E}'$ é um homomorfismo. Se fôr $A\in\mathcal{E}$ e $B\in\mathcal{E}$ (isto é: $A\subset E$ e $B\subset E$) é facil de verificar que

$$f(A+B)=f(A)+f(B)$$

isto é a imagem duma soma é a soma das imagens das parcelas, e portanto f é um homomorfismo de $\mathcal{E}$ em $\mathcal{E}'$, relativamente à adição definida em $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$.

Se $f(E)=E'$ fôr uma equivalência $f(\mathcal{E})=\mathcal{E}'$ é um isomorfismo relativamente à adição definida em $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$.

Acabamos portanto de verificar que: Se E' fôr um conjunto qualquer equivalente a E [$E'=f(E)$ onde f é uma transformação biunívoca] a definição de adição de conjuntos anteriormente dada é tal que os espaços $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'=f(\mathcal{E})$ são isomorfos relativamente à adição, qualquer que seja a equivalência f.

Podemos ainda dizer que: tôda a equivalência entre dois conjuntos abstractos E e E' é ao mesmo tempo um isomorfismo relativamente à

adição dos sub-conjuntos de E ⊂ E; propriedade que é extremamente notável e que nos explica a razão pela qual a noção de soma de conjuntos desempenha um papel tão importante na teoria dos conjuntos abstractos. Nestas condições podemos dizer que as propriedades da adição de conjuntos se mantem quando se passa de um conjunto E para outro E' que lhe seja equivalente.

A noçao de soma estende-se sem dificuldade a uma família de conjuntos $\mathcal{F}(A)$. Dá-se o nome de soma dos conjuntos da família $\mathcal{F}(A)$, e representa-se pela notação $\sum_{\mathcal{F}} A$ ao conjunto S dos elementos que pertencem a um pelo menos dos conjuntos da família $\mathcal{F}$. Se $\mathcal{F}$ for formada por uma infinidade numerável de conjuntos $A_1, A_2, A_3, \ldots, A_n, \ldots$ a sua soma costuma representar-se pela notação

$$S = \sum_{i=1}^{\infty} A_i = A_1 + A_2 + \cdots + A_n + \cdots$$

Se f transforma E em E' = f (E), a cada $A \subset E$ corresponde um $A' = f(A) \subset E'$ e portanto à família $\mathcal{F}(A)$ corresponde uma família $\mathcal{F}'(A')$ de sub conjuntos de E', escreveremos então $\mathcal{F}' = f(\mathcal{F})$.

Nestas condições era ainda fácil de verificar que

$$f\left(\sum_{\mathcal{F}} A\right) = \sum_{\mathcal{F}'} f(A)$$

isto é: a imagem duma soma é ainda a soma das imagens.

13 6 Intersecção de conjuntos.

Vamos agora definir uma nova operação no espaço algébrico $\mathcal{E}$, a que daremos o nome de intersecção e que representaremos pelo símbolo $\wedge$. Sejam A e B dois sub-conjuntos dados de E, isto é: $A \in \mathcal{E}$ e $B \in \mathcal{E}$. Ao Ao conjunto C dos elementos que pertencem simultâneamente a A e a B dá-se o nome de intersecção dos conjuntos A e B, o que representaremos pela notaçãao $C = A \wedge B$. É claro que sendo C um sub-conjunto de E, C é um elemento de $\mathcal{E}$.

Nestas condições a definição que acabamos de dar equivale a definir uma operação algébrica no espaço $\mathcal{E}$, e é fácil de verifi-

car que esta operação goza das seguintes propriedades:

M_1 - Existência. Se $A \in \mathfrak{C}$ e $B \in \mathfrak{C}$, será $A \wedge B \in \mathfrak{C}$

M_2 - Unicidade. Se $A = A_1$ e $B = B_1$ será $A \wedge B = A_1 \wedge B_1$

M_3 - Lei associativa. $(A \wedge B) \wedge C = A \wedge (B \wedge C)$

M_4 - Existência de uma unidade. O conjunto $E \in \mathfrak{C}$ é tal que $A \wedge E = E \wedge A = A$ qualquer que seja $A \in \mathfrak{C}$.

M_5 - Lei comutativa. $A \wedge B = B \wedge A$

M_6 - Existência de um elemento absorvente. O conjunto vazio $\underline{O}$ é tal que $A \wedge O = O \wedge A = O$

Estas propriedades são análogas às propriedades correspondentes da adição, note-se apenas que os papeis dos elementos E e O estão trocados. Seria ainda fácil de verificar que as propriedades análogas a $M A_1$, $M A_2$, $\overset{A M_1}{\vee}$ e $A M_2$ são verificadas, propriedades que relacionam a adição com a intercepção de conjuntos.

Destas propriedades podiam-se deduzir outras, assim por exemplo:

como $A \wedge (A + B) = A$

Se fizermos $B = O$ vem

$A \wedge (A + O) = A$

ou $A \wedge A = A$

Não nos interessa nêste momento explorar as consequências destas propriedades, pretendemos apenas pôr em evidência as ideias que se seguem.

A noção de intersecção de dois conjuntos é uma noção da teoria dos conjuntos abstratos porque ela se pode introduzir recorrendo apenas às noções primitivas da teoria dos conjuntos $a \neq b$ e $a \in E$ e às funções proposicionais da lógica formal.

Consideremos uma transformação de E em $E' = f(E)$; sejam $A' = f(A)$ e $B' = f(B)$. É evidente que se $A \subset B \rightarrow f(A) \subset f(B)$ isto é a i-

imagem de um sub-conjunto de um conjunto é um sub-conjunto da imagem dêsse sub-conjunto.

Como $A \wedge B$ é um sub-conjunto de A e de B será $f(A \wedge B)$ um sub-conjunto de f (A) e de f (B) e portanto f $(A \wedge B)$ está contido em f (A) $\wedge$ f (B),

$$f(A \wedge B) \subset f(A) \wedge f(B)$$

isto é: a imagem da intercepção de dois conjuntos está contida na intersecção das imagens. Não podemos portanto afirmar que uma transmação f unívoca de E em E' (que induz nos espaços $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ uma transformação f unívoca de $\mathcal{E}$ em $\mathcal{E}'$) seja um homomorfismos do espaço algébrico $\mathcal{E}$ em $\mathcal{E}'$ em relação à operação de intersecção ($\wedge$).

[é o que acontece por exemplo se f transforma dois elementos diferentes a $\in$ E e b $\in$ E no mesmo elemento c' $\in$ E'. Pondo $A = (a)$ e $B = (b)$ é evidente que $A \wedge B = 0$ e portanto f $(A \wedge B) = f(0) = 0$; por outro lado f (A) $\wedge$ f (B) = (c')].

Teorema. Se f é uma equivalência entre E e E', a equivalência correspondente entre $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ é um isomorfismo em relação à intersecção de conjuntos, isto é:

$$f(A \wedge B) = f(A) \wedge f(B)$$

quaisquer que sejam os elementos A e B de $\mathcal{E}$.

Para demonstrar êste teorema, basta-nos mostrar que

$$f(A \wedge B) \supset f(A) \wedge f(B).$$

Temos portanto que provar que todo o elemento c' de f (A) $\wedge$ f (B) é um elemento de f $(A \wedge B)$. Seja $C = A \wedge B$, $A' = f(A)$, $B' = f(B)$ e $C' = A' \wedge B'$, a condição precedente escreve-se:

$$f(C) \supset C'$$

Se c' $\in$ C' será: c' $\in$ A' e c' $\in$ B', isto é: c' $\in$ f (A) e c' $\in$ f (B). Como f é uma correspondência biunívoca será c' = f (c), onde c pertence a A e a B e a $A \wedge B$, e portanto c' = f (c) é elemento de f $(A \wedge B)$,

Seja $C \subseteq A \wedge B$, $A' = f(A)$, $B' = f(B)$ e $C' = A' \wedge B'$, a condição precedente escreve-se:

$$f(C) \supset C'$$

Se $c' \in C'$ será: $c' \in A'$ e $c' \in B'$, isto é: $c' \in f(A)$ e $c' \in f(B)$. Como f é uma correspondência bionívoca será $c' = f(c)$, onde c pertence a A a B e a $A \wedge B$, e portanto $c' = f(c)$ é um elemento de $f(A \wedge B)$, como queríamos provar.

Podemos dizer que <u>toda a equivalência entre dois conjuntos abstratos E e E' é ao mesmo tempo um isomorfismo (relativamente à intersecção dos sub-conjuntos) entre $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$.</u>

Podemos afirmar que as propriedades da intersecção de conjuntos se mantêm quando se passa de um conjunto abstrato E para outro E' que lhe seja equivalente.

A noção de intersecção de conjuntos estende-se sem dificuldade a uma família de conjuntos $\mathcal{F}(A)$. Dá-se o nome de intersecção dos conjuntos da família $\mathcal{F}(A)$ (e representa-se pela notação $\bigcap_{\mathcal{F}} A$) ao conjunto I dos elementos comuns a todos os conjuntos da família $\mathcal{F}$.. Se $\mathcal{F}$ fôr formada por uma infinidade numerável de conjuntos $A_1, A_2, \ldots, A_n, \ldots$ a sua intersecção costuma representar-se pela notação:

$$I = \bigcap_{(i=1)}^{\infty} A_i = A_1 \wedge A_2 \wedge A_3 \ldots \wedge A_n \wedge \ldots .$$

Se f transforma E em $E' = f(E)$ a cada $A \subset E$ corresponde um $A' = f(A) \subset E'$ e portanto à família $\mathcal{F}(A)$ corresponde uma família $\mathcal{F}'(A')$ de sub-conjuntos de E'; escreveremos então $\mathcal{F}' = f(\mathcal{F})$.

Será fácil de verificar que

$$f\left(\bigcap_{\mathcal{F}} A\right) \subset \bigcap_{\mathcal{F}} f(A)$$

e que se f representa uma equivalência é ainda:

$$f\left(\bigcap_{\mathcal{F}} A\right) = \bigcap_{\mathcal{F}} f(A)$$

14 - Teorema fundamental sôbre a álgebra dos conjuntos abstratos. Como tivemos ocasião de verificar, as noções de soma e de intersecção de conjuntos são noções da teoria dos conjuntos abstratos. Se considerarmos estas duas operações simultâneamente definidas num conjunto abstrato E, o espaço abstrato $\mathfrak{E}$ (formado pelos sub-conjuntos de E) é um espaço algébrico no qual são definidas duas operações algébricas distintas $+$ e $\wedge$; para indicar êste facto escreveremos $\mathfrak{E}(+,\wedge)$.

O teorema fundamental sôbre a álgebra dos conjuntos abstratos pode enunciar-se dizendo que se f fôr uma equivalência entre dois conjuntos abstratos E e E' , a equivalência correspondente entre os espaços algébricos $\mathfrak{E}(+,\wedge)$ e $\mathfrak{E}'(+,\wedge)$ é um isomorfismo relativamente às operações $+$ e $\wedge$.

Podemos ainda dizer que a algebrização dos conjuntos abstratos é feita de tal maneira que dois conjuntos abstratos equivalentes são sempre isomorfos. Era evidente, à priori, que uma álgebra dos conjuntos abstratos só poderia ser estudada na teoria dos conjuntos abstractos se satisfizesse a esta condição. A-pesar do caracter evidente destas observações , não temos conhecimento de que elas tivessem sido feitas.

15 - Subtração de conjuntos. Dá-se o nome de diferença de dois conjuntos A e B ao conjunto C dos elementos que pertencem a A e não pertencem a B, conjunto que se representa pela notação $C = A - B$. Esta operação goza das seguintes propriedades:

$$A - (B + C) = (A - B) - C$$

$$(A - B) \wedge C = A \wedge C - B \wedge C$$

$$(A + B) - C = (A - C) + (B - C)$$

$$A \wedge B - C = (A - C) \wedge (B - C)$$

$$(A - B) \wedge B = 0$$

Se A é um sub- conjunto de E, à diferença E - A dá-se o nome de complementar de A relativamente a E (em notação $\mathcal{C}(A) = E - A$), e é evidente que

$$\mathcal{C}(A) \wedge A = 0$$

$$\mathcal{C}[\mathcal{C}(A)] = A$$

$$\mathcal{C}(A \wedge B) = \mathcal{C}(A) + \mathcal{C}(B)$$

$$\mathcal{C}(A + B) = \mathcal{C}(A) \wedge \mathcal{C}(B)$$

Se f transforma E em $E' = f(E)$ e se A e B são sub-conjuntos de E tem-se

$$f(A - B) \supset f(A) - f(B)$$

isto é: a imagem duma diferença contém a diferença das imagens. Mas se f fôr uma equivalência, pode-se demonstrar que

$$f(A - B) = f(A) - f(B)$$

isto é: toda a equivalência é um isomorfismo em relação à subtração. Podiamos aqui fazer observações análogas às que fizemos a respeito da adição e da intersecção. Estamos agora em condições de poder demonstrar o seguinte teorema.

16 - Teorema de Banach. Se a função φ transforma de uma maneira biunívoca o conjunto A num sub-conjunto de B e se a função ψ transforma de uma maneira biunívoca o conjunto B num sub-conjunto de A, existe

uma decomposição dos conjuntos A e B

$$A = A_1 + A_2 \qquad B = B_1 + B_2$$

satisfazendo às seguintes condições:

$$A_1 \wedge A_2 = 0 \qquad B_1 \wedge B_2 = 0$$

$$\psi(A_1) = B_1 \quad \psi(B_2) = A_2$$

Isto é: os dois conjuntos A e B podem-se decompôr em duas partes disjuntas que são respectivamente equivalentes.

Se A' é um sub-conjunto de A, isto é: se

$$A' \subset A$$

Será

$$\psi(A') \subset \psi(A)$$

e $A' \sim \psi(A')$

Do mesmo modo se vê que:

se $B' \subset B$

Será $\psi(B') \subset \psi(B)$

e $B' \sim \psi(B')$

Como $\psi(A) \subset B$ será $\psi(A') \subset B$ e

portanto $\psi[\psi(A')] \subset \psi(B)$

$\psi(A') \sim \psi[\psi(A')]$

Como $A \sim \psi(A')$ e $\psi(A') \sim \psi[\psi(A')]$ será

$A' \sim \psi[\psi(A')]$

Por outro lado, como $\psi(B) \subset A$ será $\psi(B') \subset A$ se $B' \subset B$ e portanto como $\psi(A') \subset B$ será $\psi[\psi(A')] \subset A$. Ponhamos:

$$\Phi(A') = \psi[\psi(A')]$$

Φ é definida sobre todos os sub-conjuntos de A e transforma $A' \subset A$ num sub-conjunto $\Phi(A')$ de A, que é equivalente a A. Em resumo, se

$A' \subset A$ será

$\Phi(A') \subset A$ e $A' \sim \Phi(A')$

Podemos portanto afirmar que

$$\Phi^2(A') = \Phi[\Phi(A')] \subset A$$

e

$$\Phi^2(A') \sim \Phi(A') \sim A'$$

Duma maneira geral:

$$\Phi^n(A') = \Phi[\Phi^{n-1}(A')] \subset A$$

e

$$\Phi^n(A') \sim A'$$

Seria ainda fácil de verificar que

$$A \supset \Phi(A) \supset \Phi^2(A) \supset \Phi^3(A) \supset \ldots \supset \Phi^n(A) \supset \ldots$$

Ponhamos

$$(1) \qquad \boxed{R = A - \Psi(B)}$$

será

$$R \wedge \Psi(B) = 0$$

Como $R \subset A$ será $\Phi^n(R) \subset A$ e portanto o conjunto

$$(2) \qquad A_1 = R + \Phi(R) + \Phi^2(R) + \Phi^3(R) + \ldots + \Phi^n(R) + \ldots$$

é um sub-conjunto de A. Seria ainda fácil de vêr que $\Phi^i(R) \wedge \Phi^j(R) = 0$ se $i \neq j$ (supômos que $\Phi^0(R) = R$). Ponhamos agora:

$$A_2 = A - A_1$$

será

$$(3) \qquad \boxed{A = A_1 + A_2} \quad \text{e} \quad \boxed{A_1 \wedge A_2 = 0}$$

Seja

$$(4) \qquad B_1 = \Psi(A_1)$$

e

$$B_2 = B - B_1$$

isto é

$$(5) \qquad \boxed{B = B_1 + B_2} \quad \text{e} \quad \boxed{B_1 \wedge B_2 = 0}$$

E evidente que

$$B_1 = \Psi(A_1) \subset \Psi(A) \subset B$$

isto é

$B_1 < B$.

Resta-nos agora provar que

(6) $$\boxed{\Psi(B_2) = A}$$

Para isso notemos que, sendo Φ uma equivalência, será em virtude de (2):

$$\Phi(A_1) = \Phi(R) + \Phi^2(R) + \cdots + \Phi(R) + \cdots$$

Portanto

(7) $$\boxed{A_1 = R + \Phi(A_1)}$$

onde $$R \wedge \Phi(A_1) = 0$$

Como Ψ é uma equivalência será:

$$\Psi(B_2) = \Psi(B - B_1) = \Psi(B) - \Psi(B_1)$$

Ora em virtude de (1) será

(8) $$\Psi(B) = A - R$$

e

(9) $$\Psi(B_1) = \Psi[\varphi(A_1)] = \Phi(A_1)$$

Substituindo na expressão precedente, (8) (9) e (7) tem-se:

$$\Psi(B_2) = (A-R) - \Phi(A_1) = A - [R + \Phi(A_1)] =$$
$$= A - A_1 = A_2$$

Como queriamos mostrar.

Este teorema foi demonstrado por Banach [1], (sobre a demonstração que indicamos veja-se Sierpinski ([1] pag. 90.)

Banach tirou dêste teorema as seguintes consequências muito importantes [loc. cit.]

17- Definição. Dizemos que a relação R possui a propriedade (A) quando:

1º) a relação R só pode ter logar entre conjuntos

2º) a condição A R B (leia-se entre os dois conjuntos A e B existe a relação R) implica a existência de uma função φ, que transforma de uma maneira biunívoca A em $B = \varphi(A)$ de tal

maneira que $A' R \varphi(A')$ qualquer que seja o sub-conjunto $A' \subset A$.

Do teorema de Banach deduz-se imediatamente o seguinte corolario:

Corolario: Se a relação R possui a propriedadd (α) e se fôr

$$A_1 \subset A \qquad B_1 \subset B$$
$$A R B_1 \quad e \quad A_1 R B$$

podem-se decompor os conjuntos A e B em dois sub-conjuntos disjuntos:

$$A = A_1 + A_2 \qquad A_1 \wedge A_2 = 0$$
$$B = B_1 + B_2 \qquad B_1 \wedge B_2 = 0$$

tais que: $A_1 R B_1$ e $A_2 R B_2$

Teremos ocasião de indicar uma aplicação dêste teorema ao caso em que a relação R é a relação de homeomorfismo entre conjuntos de pontos situados num espaço topológico.

Definição. Diremos que a relação R possui a propriedade (β) se:

1º) a relação R só pode ter logar entre conjuntos.

2º) as condições: $A_1 R B_1$, $A_2 R B_2$ e $A_1 \wedge A_2 = 0$, $B_1 \wedge B_2 = 0$ implicam que:

$$(A_1 + A_2) R (B_1 + B_2)$$

De teorema de Banach deduz-se imediatamente o seguinte corolario:

Corolario 2. Se a relação R possui as propriedades (α) e (β) e se fôr:

$$A_1 \subset A \qquad B_1 \subset B$$
$$A R B_1 \quad e \quad A_1 R B$$

será $A R B$

Aplicando esta proposição à relação de equivalência [illegible] entre dois conjuntos, obtem-se imediatamente o

Teorema de Schröder-Cantor-Bernstein: se o conjunto A é equivalente a um sub-conjunto de B e se B é equivalente a um sub-conjunto de A, os conjuntos A e B são equivalentes,

visto que a relação de equivalência gosa das propriedades (α) e (β).

§ 3- Sistemas com multiplicação

17- Definição. Diz-se que E (.) é um sistema com multiplicação se forem verificados os axiomas M_1, M_2, M_3, M'_4 e M''_4 .

Vamos mostrar que os sistemas com multiplicação gozam das seguintes propriedades.

Teorema 1- Toda a unidade à esquerda é igual á unidade á direita.

Com efeito fazendo $a = e''$ no axioma M'_4 e $a = e'$ no axioma M''_4 , tem-se respectivamente $e'.e'' = e''$, $e'.e'' = e'$ e portanto $e' = e''$ o que demonstra o teorema.

Corolario. A unidade à direita e à esquerda são únicas.

Com efeito se existirem duas unidades à esquerda (por exemplo) e'_1 e e'_2 seria $e'_1 = e''$ e $e'_2 = e''$ e portanto $e'_1 = e'_2$. Daqui resulta que na definição de sistema com multiplicação se podem substituir os axiomas M'_4 e M''_4 pelo axioma M_4

18- Inversos à direita e à esquerda. Diremos que $a \in E$ tem um inverso à direita se existe um elemento $a_d^{-1} \in E$ tal que $a.\, a_d^{-1} = e$. Do mesmo modo diremos que $a \in E$ tem um inverso à esquerda se existe um elemento $a_e^{-1} \in E$ tal que $a_e^{-1}.\, a = e$.

Teorema 2 - Se $a \in E$ tem um inverso dos dois lados, êsses dois inversos são iguais e únicos. Com efeito: se multiplicarmos à direita a igualdade $a_e^{-1}.\, a = e$ por a_d^{-1} vem

$(a_e^{-1}.\, a).\, a_d^{-1} = e.\, a_d^{-1}$, ou $a_e^{-1}.\, (a.\, a_d^{-1}) = a_d^{-1}$, ou $a_e^{-1}.\, e = a_d^{-1}$ ou finalmente $a_e^{-1} = a_d^{-1}$; o que demonstra que um inverso à esquerda é sempre um inverso à direita (se êste existir) e que êstes dois inversos são iguais. Daqui resulta a unicidade do inverso. Nestas condições diremos que a tem um inverso bilateral, ou mais simplesmente que a tem um inverso, que representaremos pela nota-

ção a^{-1}, e então teremos: $a\,a^{-1} = a^{-1}\,a = e$. Em E há sempre pelo menos um elemento que tem um inverso bilateral a saber o elemento e, mas a existência de um inverso à esquerda não implica sempre a existência de um inverso à direita e vice-versa.

Podemos a êste respeito demonstrar a seguinte proposição.

Teorema 3. Se $a \in E$ tem um inverso à direita a_d^{-1}, que tem por sua vez um inverso à direita $(a_d^{-1})_d^{-1}$ então a tem tambem um inverso à esquerda. Com efeito, por hipótese:

$$a\,a_d^{-1} = e$$

$$(a_d^{-1})\,(a_d^{-1})_d^{-1} = e$$

Esta última igualdade pode escrever-se:

$$a_d^{-1} \cdot e \cdot (a_d^{-1})_d^{-1} = e$$

ou

$$a_d^{-1} \cdot (a \cdot a_d^{-1}) \cdot (a_d^{-1})_d^{-1} = e$$

$$(a_d^{-1} \cdot a) \cdot \left[a_d^{-1} \cdot (a_d^{-1})_d^{-1}\right] = e$$

$$(a_d^{-1} \cdot a) \cdot e = e$$

$$a_d^{-1} \cdot a = e$$

e que mostra que a_d^{-1} é um inverso à esquerda de a. Será fácil de ver que se a e b têm um inverso à direita a . b também tem um inverso à direita que é: $(a\,b)_d^{-1} = b_d^{-1} \cdot a_d^{-1}$. Do mesmo modo se via que se a_e^{-1} e b_e^{-1} existem será: $(a\,b)_e^{-1} = b_e^{-1} \cdot a_e^{-1}$

19 - Sub-espaço algébrico. Para que $E' \subset E$ seja um sub-espaço algébrico de E, isto é, para que E' seja um sistema com multiplicação, é necessário e suficiente que: 1º) $a.\,b \in E'$ se $a \in E'$ e $b \in E'$, 2º) que $e \in E'$. Pode acontecer que a multiplicação seja comutativa em E' sem que o seja em E. É o que acontece com o sub-espaço algébrico formado pela unidade.

20 - Potências. Por definição a^n, onde n é um inteiro positivo, é um produto de factores todos iguais a n. É fácil de verificar que:

1º) $a^m \cdot a^n = a^{m+n}$ 2º) $(a^m)^n = a^{mn}$. Se a tiver um inverso ponhamos por definição $a^{-n} = (a^n)^{-1} = (a^{-1})^n$ e convencionaremos que $a^0 = e$,

então as regras de cálculo 1º) e 2º) são válidas para expoentes inteiros, positivos, negativos ou nulos.

21 - Exemplos. 1º) Seja E um conjunto abstrato e seja $T(a)$ uma transformação unívoca definida em E e cujo contra-domínio é um sub-conjunto de E. O conjunto de todas as transformações T formam um sistema com multiplicação quando se define a igualdade de duas transformações $T_1(a)$ e $T_2(a)$ (em símbolos $T_1 = T_2$) pela condição: $T_1(a) = T_2(a)$ quàlquer que seja $a \in E$, e produto ($T = T_1 . T_2$) de duas transformações T_1 e T_2 como sendo a transformação

$$T(a) = T_1 \left[T_2 (a) \right]$$

A demonstração é imediata em particular a transformação unidade U(isto é tal que $TU = UT = T$, qualquer que seja T) é a tranformação identidade, isto é: aquela que não altera os elementos de E. [$U(a) = a$ para qualquer $a \in E$].

§ 4 - A Noção de Grupo

22 - Definição. Dado um espaço algébrico $\mathcal{G}$ (.) diremos que ela forma um grupo se forem verificados os axiomas M_1, M_2, M_3, M'_4 e M'_5 (ou então os axiomas M_1, M_2, M_3, M''_4 e M''_5). É facil de demonstrar que estes axiomas são equivalentes aos axiomas M_1, M_2, M_3; M_4, M_5. Também se demonstra que a unidade e é unica bem como o inverso a^{-1} de cada elemento $a \in E$.

Da igualdade $a\,x = a\,y$ resulta imediatamente que $x=y$; basta multiplicar à esquerda ambos os membros da igualdade precedente por a^{-1}.

Do mesmo modo se demontra que de $xa = xy$ resulta $x=y$.

As equações $a\,x = b$ e $y\,a = b$ têm uma única resolução a saber $x = a^{-1}b$ e $y = b\,a^{-1}$

Diz-se que $\mathcal{G}$ é abeliano se fôr $a\,b = b\,a$ qualquer que sejam a e b de $\mathcal{G}$.

23- Sub-grupos Diremos que $\mathcal{G}' \subset \mathcal{G}$ é um sub-grupo de $\mathcal{G}$ se $\mathcal{G}'$ fôr um grupo em relação á operação definida em $\mathcal{G}$; para que assim seja é necessario e suficiente que: 1º) $a\,b \in \mathcal{G}'$ se $a \in \mathcal{G}'$ e $b \in \mathcal{G}'$ 2º) $a^{-1} \in \mathcal{G}'$ se $a \in \mathcal{G}'$.

Um sub-conjunto $\mathcal{G}'$ pode ser abeliano sem que $\mathcal{G}$ o seja; é o que acontece com o sub-grupo formado pelo elemento unidade.

24- Exemplo de grupos: I-Seja E um conjunto abstracto qualquer e consideremos o conjunto de todas as transformações T biunívocas de conjunto E em si proprio. Como vimos no parágrafo anterior o conjunto de todas as transformações T forma um sistema com multiplicação quando se define a igualdade e o produto de duas transformações da maneira indicada. Para mostrar que elas formam um grupo basta mostrar que a cada transformação T corresponde uma transformação T^{-1} tal que $T\,T^{-1} = U$. Com efeito, seja: $a' = T(a)$. Como T é uma transformação biunívoca será $a = S(a')$

tal que: $a = S\left[T(a)\right] = S\,T\,(a)$ e portanto $S\,T = U$ c.q.d.

Seria ainda facil de vêr que o conjunto de todas as transformações de um conjunto E num outro equivalente formam um grupo a que se dá o nome de grupo das equivalencias que é o grupo fundamental da teoria dos conjuntos abstractos. Vemos assim mais uma vez que na teoria dos conjuntos abstractos se é levado a introduzir noções de álgebra.

II-Seja E um espaço algébrico qualquer e consideremos o conjunto de todas as transformações isomorfas de E em si proprio. O conjunto de todos êstes isomorfismos formam um grupo se definirmos igualdade e produto de dois isomorfismos duma maneira análoga á anterior.

Dem mesmo modo se vê que o conjunto de todos od isomorfismos de um espaço algébrico formam um grupo a que se dá o nome de grupo dos isomorfismos que é o grupo fundamental da Álgebra abstracta.

Dois espaços algébricos isomorfos são sempre equivalentes mas a recíproca não é verdadeira e portanto o grupo dos isomorfismos associados a um espaço algébrico dado é um sub-grupo do grupo das equivalências associadas do mesmo espaço. Podemos portanto considerar a álgebra abstracta como subordinada lógicamente à teoria dos conjuntos abstractos

III- O conjunto dos elementos de um sistema com multiplicação que têm um inverso formam evidentemente um grupo em relação à multiplicação.

§5-Algebrização do espaço dos sub-grupos de um grupo dado.

25- Multiplicação de sub-grupos. A algebrização dos sub-grupos de um grupo dado desempenha um papel tão importante na teoria dos grupos como a algebrização dos sub-conjuntos de um conjunto dado.

Sejam $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$ dois sub-grupos de $\mathcal{G}$; utilizaremos a notação $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2$ para representar o conjunto dos elementos $(a_1 . a_2)$ onde $a_1 \in \mathcal{G}_1$ e $a_2 \in \mathcal{G}_2$:

É claro que

$$\mathcal{G}_1 < \mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2 > \mathcal{G}_2$$

visto que $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$ contêm a unidade.

Se $\mathcal{G}_1 < \mathcal{G}_2$ será $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2 = \mathcal{G}_2$ exactamente como acontecia na adição de conjuntos. Por outro lado $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G} = \mathcal{G}$ qualquer que seja $\mathcal{G}_1$ ($\mathcal{G}$ é um elemento absorvente). No caso geral $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2$ contêm elementos que não pertencem a $\mathcal{G}_1$ nem a $\mathcal{G}_2$.

O grupo formado pelo elemento unidade é tal que $\mathcal{G}_1 = e\,\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_1\,e$, qualquer que seja $\mathcal{G}_1 < \mathcal{G}$, e portanto e desempenha o papel de uma unidade.

Diremos que $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2$ é o produto dos sub-grupos $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$ (considerados nesta ordem). Aqui aparece uma dificuldade muito importante; o produto de dois sub-grupos de $\mathcal{G}$ não é em geral um sub-grupo de $\mathcal{G}$ e $\mathcal{G}_1\,\mathcal{G}_2 \neq \mathcal{G}_2\,\mathcal{G}_1$.

É esta a razão pela qual esta operação desempenha um papel pouco importante na teoria dos grupos, e mesmo não acontece na teoria dos grupos abelianos como veremos. A noção de produto directo de dois sub-grupos que estudamos mais adiante resolve precisamente uma parte dessas dificuldades.

O que seria importante era algebrizar o espaço dos sub-grupos de $\mathcal{G}$ por uma operação que gozasse das mesmas propriedades que a adição dos sub-conjuntos de um conjunto dado.

Ora uma tal algebrização não é possivel em geral pela operação que aca-

hamos de indicar e não conhecemos nenhuma algebrização dessa natureza

26- Intersecção de sub-grupos. Se $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$ são dois sub-grupos de $\mathcal{G}$ daremos o nome de intersecção de $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$ ao conjunto $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ dos elementos que pertencem simultâneamente a $\mathcal{G}_1$ e $\mathcal{G}_2$. Vamos mostrar que $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ é um sub-grupo de $\mathcal{G}$. Com efeito se a e b são elementos de $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ será

$$a \in \mathcal{G}_1 \qquad a \in \mathcal{G}_2$$
$$b \in \mathcal{G}_1 \qquad b \in \mathcal{G}_2$$

e portanto

$$a\,b \in \mathcal{G}_1 \qquad a\,b \in \mathcal{G}_2$$

isto é $a\,b \in \mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ Por outro lado se a é um elemento de $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ será $a \in \mathcal{G}_1$ e $a \in \mathcal{G}_2$ e portanto $a^{-1} \in \mathcal{G}_1$ e $a^{-1} \in \mathcal{G}_2$ isto é $a^{-1} \in \mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$. A unidade é um elemento de $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ e portanto $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ é ainda um sub-grupo $\mathcal{G}_3 \subset \mathcal{G}$, então escreveremos

$$\mathcal{G}_3 = \mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$$

Será facil de verificar que esta operação gosa das seguintes propriedades em tudo análogas às propriedades que indicámos para a intersecção dos sub-conjuntos de um conjunto dado.

M_1- Existência $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2$ é um sub-grupo de $\mathcal{G}$.

M_2- Unicidade. Se $\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_1'$ e $\mathcal{G}_2 = \mathcal{G}_2'$ é $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2 = \mathcal{G}_1' \wedge \mathcal{G}_2'$

M_3- Lei associativa. $(\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2) \wedge \mathcal{G}_3 = \mathcal{G}_1 \wedge (\mathcal{G}_2 \wedge \mathcal{G}_3)$

M_4- Existência de uma unidade. O sub-grupo $\mathcal{G}$ é tal que

$$E \wedge \mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_1 \wedge E = \mathcal{G}_1$$

qualquer que seja o sub-grupo $\mathcal{G}_1$

M_6- Lei comutativa. $\mathcal{G}_1 \wedge \mathcal{G}_2 = \mathcal{G}_2 \wedge \mathcal{G}_1$

M_7- Existencia de um elemento absorvente. O sub-grupo E formado pelo elemento unidade e é tal que $E \wedge \mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_1 \wedge E = E$ qualquer que seja o sub- grupo $\mathcal{G}_1$

A unidade desempenha aqui o papel do conjunto vazio.

Consideremos o conjunto $\mathcal{H}$ dos sub-grupos de um grupo $\mathcal{G}$; $\mathcal{H}$ será um

40

espaço algébrico em relação á operação de intersecção de sub-grupos de $\mathcal{G}$ que acabamos de definir. Se $\mathcal{G}'$ é um grupo isomorfo a $\mathcal{G}$ o espaço algébrico correspondente $\mathcal{H}'$ será isomorfo a $\mathcal{H}$ em relação á operação de intersecção. A operação de intersecção é invariante por isomorfismo.

27- Produtos Directos. Diremos que o grupo $\mathcal{C}$ é o produto directo dos grupos Av e B se fôrem verificadas as seguintes condições:

1º) Todo o elemento c de $\mathcal{C}$ é o produto de um elemento a de A por um elemento b de B, isto é $c = a\,b$, e reciprocamente $\mathcal{C} = A\,B$

2º) A decomposição a que se refere o número precedente é única isto é: se $a\,b = a'b'$ será $a = a'$ e $b = b'$

3º) os elementos de A são permutáveis com os elementos de B, isto é $a\,b = b\,a$ quaisquer que sejam $a \in A$ e $b \in B$.

Para indicar que $\mathcal{C}$ é o produto directo de A e B escreveremos:

$$C = A \times B$$

É evidente que nestas condições 1º) o produto de todos os elementos de A pelos elementos de B é o grupo C. 2º) os grupos A e B só podem têr como unico elemento comum a unidade e.

Com efeito se a fôsse comum a A e B nós poderiamos escrever $a = a\,e$ e $a = e\,a$ e portanto $e = a$ c. q. d.

A noção de produto directo pode generalizar-se ao caso de vários factores. Diremos que A é o produto directo dos sub-grupos $A_1, A_2 \ldots An$ se forem verificadas as seguintes condições:

1º) Todo o elemento a de A é o produto de n factores $a_1, a_2, \ldots, an$ que pertencem respectivamente a $A_1, A_2, \ldots, An$

2º) A decomposição a que se refere o número precedente é única, isto é: se $a = a_1 \cdot a_2 \ldots, an$ e $a = a_1' \cdot a_2' \ldots an$ será $a_i' = a_i$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$

3º) Todos os elementos $a_i \in A_i$ são permutaveis com todos os elementos $a_j \in A_j$ $(\text{se } i \neq j)$

Para indicar que A é o produto directo de A_1, A_2, ..., An escreveremos

$A = A_1 \times A_2 \times A_3 \times \ldots \times A_n$.

28-Propriedades do produto directo. O produto directo goza das seguintes propriedades análogas às propriedades da adição dos sub-conjuntos de um conjunto dado.

A_2 - Unicidade. Se $A = A_1$ e $B = B_1$ será : $A \times A_1 = B \times B_1$

A_3 - Lei associativa. $(A \times B) \times C = A \times (B \times C)$

A_4 - Existência de uma unidade. Existe um sub-grupo de G, a saber o grupo formado pelo elemento unidade e, tal que $e \times A = A \times e = A$ qualquer que seja o sub-grupo A .

A_6 - Lei comutativa. $A \times B = B \times A$

É fácil de vêr que as propriedades A_1 e A_7 não são verificadas:

Teorema: Se o grupo G é o produto directo de dois sub-grupos A e B respectivamente isomorfos a dois sub-grupos A' e B' dum grupo G_1, o grupo G_1 admite um sub-grupo G' isomorfo a G e que é o produto directo de A' e B' . Isto é : se $A \cong A'$ e $B \cong B'$ será $A \times B \cong A' \times B'$:

Vamos agora abordar o estudo das relações entre o produto directo e a intersepção dos sub-grupos de G: Em primeiro logar consideremos a lei

M A_1 - Lei distributiva da intersepção em relação ao produto directo de sub-grupos.

$$A \wedge (B \times C) = (A \wedge B) \times (A \wedge C)$$

$$(B \times C) \wedge A = (B \wedge A) \times (C \wedge A)$$

Será esta lei verdadeira ? Se a primeira fôr verdadeira é evidente que a segunda o será em virtude da propriedade comutativa do produto directo e da intersepção de sub-grupos . Para estudarmos esta lei, vamos considerar dois casos:

1º caso. O sub-grupo A contem o sub-grupo $B \times C$. Isto é

$$A \supset B \times C$$

então será

$$A \wedge (B \times C) = B \times C$$

42

$$A \wedge (B \times C) = B \times C$$

$$A \wedge B = B$$

$$A \wedge C = C$$

visto que: A, contendo $B \times C$ contém o sub-grupo B e C. A lei em questão pode portanto, neste caso escrever-se:

$$B \times C = B \times C$$

relação que é evidentemente verificada.

2º caso. O sub-grupo A será contido em $B \times C$.

então teremos

$$A \wedge (B \times C) = A$$

e portanto a lei M A, escreve-se sob a forma

$$A = (A \wedge B) \times (A \wedge C)$$

É facil encontrar exemplos que nos mostram que esta igualdade nem sempre é verificada. Em todo o caso se A contem um dos sub-grupos B e C esta igualdade é verificada e pode escrever-se por exemplo no caso em que $A > B$ (caso em que $A \wedge B = B$):

$$\boxed{A = B \times (A \wedge C)}$$

Para a demonstração deste teorema veja-se: Van der Waerden (1). vol.1 p. 143.

29- Grupos decomponiveis. Diremos que um grupo $\mathcal{G}$ é decomponivel quando sendo dado um sub-grupo qualquer $\mathcal{G}_1$ de $\mathcal{G}$ existe um sub-grupo $\mathcal{G}_2 \subset \mathcal{G}$ tal que:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_1 \times \mathcal{G}_2$$

Teorema 1- Todo o sub-grupo $\mathcal{G}_1$ de um grupo $\mathcal{G}$ decomponivel é um grupo perfeitamente decomponivel.

Seja $\mathcal{G}_1$ um sub-grupo qualquer de $\mathcal{G}$. Seja $\mathcal{G}'$ um sub-grupo qualquer de $\mathcal{G}_1$, então existe $\mathcal{G}''$ tal que:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}' \times \mathcal{G}''$$

Como $\mathcal{G}_1$ contem $\mathcal{G}'$ será:

$$\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}' \times (\mathcal{G}_1 \cap \mathcal{G}'')$$

Ora $\mathcal{G}_1 \cap \mathcal{G}'' = \mathcal{G}_1'$ é um sub-grupo de $\mathcal{G}_1$ e portanto existe $\mathcal{G}_1'$ tal que:

$$\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}' \times \mathcal{G}_1'$$

Como queriamos mostrar.

Teorema 2. Todo o espaço algébrico isomorfo a um grupo decomponivel é um grupo decomponivel.

Esta propriedade resulta imediatamente de teoremas anteriormente demonstrados

30- Automorfismos interiores. Dá-se o nome de automorfismo interior de um grupo $\mathcal{G}$ ao automorfismo definido pela transformação.

$$f(a) = s^{-1} a\, s = a'$$

onde s é um elemento fixo de $\mathcal{G}$ e a um elemento arbitrario. Trata-se evidentemente de um automorfismo visto que :

$$f(a\,b) = s^{-1} a\, b\, s = s^{-1} a\, s.\, s^{-1} a\, s = f(a).f(b)$$

O conjunto dos automorfismos interiores formam evidentemente um grupo em relação à multiplicação dos automorfismos.

§ 6- Grupos Abelianos.

31- Definição. Se num grupo G, a multiplicação for comutativa ($a\,b = b\,a$) o grupo diz-se abeliano. Dá-se também o nome de módulo aos grupos abelianos. Usaremos a notação aditiva ($+$) para representar a operação correspondente, a que daremos o nome de adição. Um grupo abeliano verifica portanto os axiomas: A_1, A_2, A_3, A_4, A_5 e A_6 do nº 8

32- Algebra dos sub-grupos de G. Dados dois sub-grupos G_1 e G_2 de G daremos o nome de soma de G_1 e G_2 ao conjunto G_3 de todos os elementos da forma:

$$a_3 = a_1 + a_2$$

onde $a_1 \in G_1$ e $a_2 \in G_2$, conjunto que representaremos pela notação

$$G_3 = G_1 \dot{+} G_2$$

Teorema. A soma de dois sub-grupos de um grupo abeliano G é um sub-grupo de G. Representaremos por $\mathcal{O}$ o sub-grupo nulo formado pelo elemento θ, e por $(-G_1)$ a que chamaremos grupo simétrico de G_1. Conjunto dos elementos $(-a_1)$ onde $a_1 \in G_1$.

É claro que $(-G_1) = G_1$ e portanto:

$$(-G_1) \dot{+} G_1 = G_1 \dot{+} G_1 = G_1$$

e portanto o conjunto $\mathcal{G}$ dos sub-grupos de G não formam um grupo abeliano em relação á adição. O único axioma que não é verificado é o axioma da existência de um simétrico. A algebrização dos sub-grupos de G que acabamos de fazer não transforma $\mathcal{G}$ num grupo abeliano, mas em todo o caso temos já mais propriedades que no caso dos grupos não abelianos.

A intersecção de sub-grupos define-se como no parágrafo precedente e goza das mesmas propriedades. A intersecção de dois grupos abelianos é um grupo abeliano.

33- Soma directa de sub-grupos de G. A definição é análoga á que demos para o produto directo. Para indicar que G é a soma directa de G_1 e G_2 escreveremos

$$G = G_1 \dot{\oplus} G_2$$

ou

$$G_2 = G \ominus G_1$$
$$G_1 = G \ominus G_2$$

Podemos interpretar o símbolo $A \ominus B$ como uma subtracção desde que B seja um sub-grupo de A e que A seja decomponivel, então o símbolo indicado tem sentido qualquer que seja o sub-grupo B de A.

A soma directa gosa de todas as propriedades do produto directo.

Sob certo aspecto podmos considerar $\oplus$ e $\ominus$ como operações inversas visto que:

$$G = G_1 \oplus (G \ominus G_1)$$
$$G \ominus (G \ominus G_1) = G_1$$

estas fórmulas são sempre exactas se G fôr decomponivel e G_1 um sub-grupo qualquer de G.

Notemos ainda que

$$(A \ominus B) \ominus C = A \ominus (B \oplus C)$$

é verificada se fôr: B um sub-grupo de A e C um sub-grupo de $A \ominus B$

Com efeito: ponhamos:

$$(1) \quad A \ominus B = B_1$$

donde

$$(2) \quad A = B \oplus B_1$$

Como C é um sub-grupo de B_1 ponhamos

$$(3) \quad B_1 \ominus C = C_1$$

donde

$$(4) \quad B_1 = C_1 \oplus C$$

Substituindo em (2) vem:

$$A = B \oplus (C_1 \oplus C) =$$
$$= B \oplus (C \oplus C_1) =$$
$$= (B \oplus C) \oplus C_1$$

donde

$$(5) \quad C_1 = A \ominus (B \oplus C)$$

Atendendo a (1) e (2) tem-se

$$(6) \quad C_1 = B_1 \ominus C = (A \ominus B) \ominus C$$

comparando (5) e (6) vê-se imediatamente que o resultado anunciado é

verdadeiro, resultado que utilizaremos no capítulo IV.

Indiquemos algumas razões que nos mostrem a importância da noção de soma directa. Em primeiro logar não podemos falar da soma directa de dois sub-grupos quaisquer de G, trata-se portanto de uma operação que só é definida para certos pares de elementos de $\mathcal{G}$ (conjunto dos sub-grupos de G), emquanto que a adição de sub-grupos era definida em todo o espaço $\mathcal{G}$. O axioma A_1 não é portanto verificado. Por outro lado a soma directa gosa de todas as propriedades da soma.

Parece portanto que nada ganhámos com a introdução desta noção.

Mas não é assim visto que se pode definir uma operação inversa da soma directa, relativamente ao elemento absorvente G, para todos os grupos abelianos decomponiveis, visto que dado G_1 existe $G_2 = G \ominus G_1$ tal que

$$G = G_1 \oplus G_2$$

o que é evidentemente importante.

34-Álgebra das transformações definidas em G. Seja $\mathcal{C}$ o conjunto das transformações $y = f(x)$ definidas em G e cujo contra-dominio pertence a G. Definiremos a soma de duas transformações $F_1(x)$ e $F_2(x)$ como sendo a transformação $F(x)$, tal que

$$F(x) = F_1(x) + F_2(x)$$

(então escreveremos $F = F_1 + F_2$) o espaço $\mathcal{C}$ é um grupo abeliano em relação á operação que acaba de ser definida.

Note-se que: o zéro de $\mathcal{C}$ é a transformação Θ definida por:

$$\theta = \Theta(x)$$

qualquer que seja x de G, e que a transformação simétrica de $F(x)$ é a transformação $H(x)$ definida por

$$H(x) = -\left[F(x)\right]$$

Para representar H usaremos a notação $(-F)$.

Teremos ocasião de completar a álgebra de $\mathcal{C}$, pela introdução de uma nova operação, no § consagrado á teoria dos anéis.

Nada mais diremos sobre os grupos abelianos porque não teremos a utilizar outros resultados.

Para terminar limitamo-nos a indicar o seguinte resultado de Mazur e Ulam. Existe um grupo abeliano numerável universal. (veja nº6), isto é um grupo abeliano numerável U tal que todo e qualquer grupo abeliano numerável é isomorfo a um sub-grupo de U. Êste resultado é devido a Mazur e Ulam. (1).

36- Transformações aditivas. Diremos que uma trnasformação T definida em G e cujo contra-dominio Δ pertence a G é uma transformação aditiva se:

$$(1) \qquad T(a+b) = T(a) + T(b)$$

quaisquer que sejam a e b de G. Como T respeita a lei de composição definida em G, T define um homomorfismo de G em Δ, que é um sub-grupo de G. Para demonstrar que Δ é um grupo abeliano, basta mostrar que Δ é um grupo e portanto que: 1º) se $a' \in \Delta$ e $b' \in \Delta$ é: $a'+b' \in \Delta$ 2º) $\theta \in \Delta$ 3º) se $a' \in \Delta$ será $(-a') \in \Delta$. O leitor verificará, sem dificuldade, que assim é utilizando a relação (1).

Teorema. o conjunto de todos as transformações aditivas definidas em G e cujo contra-dominio pertence a G formam um grupo abeliano relativamente à adição das transformações.

Basta para isso mostrar que: 1º) se T_1 e T_2 são aditivas $T_1 + T_2$ é aditiva 2º) O é uma transformação aditiva 3º) se T é aditiva (-T) tambem o é; o que é imediato.

Em tudo o que acabamos de dizer (nºs 34 e 35) podiamos supôr que T(x) era uma transformação definida em G e cujo contra-dominio era um outro grupo abeliano G_1.

Nestas condições se G_1 é o contra-dominio de T (x) aditiva, e se

$$T(x_1) = T(x_2)$$

equivale a $x_1 = x_2$

T é um isomorfismo entre G e G_1 ($G \cong G_1$)

§ 7 - Espaços Vectoriais Abstractos

37 - Definição - Dá-se o nome de espaço vectorial abstracto a tôdo o grupo abeliano E onde a cada número real ou complexo α e a cada elemento $a \in E$ se pode fazer corresponder um elemento que representaremos pela notação αa : tal que:

1º.) - $\alpha a \in E$

2º.) - Se $a_1 = a_2$ $\quad \alpha a_1 = \alpha a_2$

3º.) - $\alpha(\beta a) = (\alpha\beta) a$

4º.) - $\alpha(a+b) = \alpha a + \alpha b$

5º.) - $(\alpha+\beta) a = \alpha a + \alpha b$

6º.) - $1 . a = a$

A αa dá-se o nome de produto do número α pelo elemento a.

A álgebra dum espaço desta natureza é exactamente a álgebra dos vectores do plano, e tôdas as propriedades algébricas se deduzem fácilmente dos axiomas da definição de grupo abeliano e dos seis axiomas precedentes.

Estes 12 axiomas não são certamente independentes mas não nos interessa nêste momento procurar uma lista de axiomas independentes. Veja, por exemplo, Banach (2), p. 26, onde se indica uma axiomática mais reduzida. A um espaço vectorial costuma ás vezes dar-se o nome de espaço linear.

Sub - espaços vectoriais - Diz-se que um conjunto $E_1 \subset E$ é um sub - espaço vectorial de E ou uma variedade linear imersa em E, quando E_1 fôr um espaço vectorial, e para isso é necessário e suficiente que $\alpha a + \beta b$ seja um elemento de E_1 quando $a \in E_1$ e $b \in E_1$, sendo α e β números quaisquer. É claro que: se $a_1 \in E_1$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \quad a_1$$

é ainda um elemento de E_1.

38 - Algebrização do conjunto das variedades lineares de E -

Como uma variedade linear é um grupo abeliano define-se de uma maneira análoga a noção de soma $E_1 + E_2$ e de intersecção $E_1 \wedge E_2$ de duas variedades lineares, e esta noção goza das propriedades indicadas. $E_1 + E_2$ e $E_1 \wedge E_2$ são variedades lineares imersas em E. Diz-se que os elementos $a_1 \in E$ são linearmente independentes, quando:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_1 = 0$$

implica que $\alpha_i = 0$

Duas variedades lineares E_1 e E_2 dizem-se linearmente independentes quando $E_1 \wedge E_2 = 0$

É claro que nestas condições:

$$\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 = 0$$

onde $a_1 \in E_1$ e $a_2 \in E_2$ implica, se $a_1 \neq 0 \neq a_2$ que $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, porque no caso contrário $\alpha_1 a_1 = (-\alpha_2) a_2$ pertenceria simultâneamente a E_1 e E_2 e portanto $\alpha_1 a_1 = (-\alpha_2) a_2 = 0$ e então seria $a_1 = 0 = a_2$ o que é impossível.

Recíprocamente se

$$\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 = 0$$

implica $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, quaisquer que sejam $a_1 \in E$ e $a_2 \in E_2$ então: $E_1 \wedge E_2 = 0$

Com efeito se assim não fôsse existiria um elemento $a \neq 0$ comum a E_1 e E_2. Ora então αa é ainda um elemento de $E_1 \wedge E_2$, qualquer que seja $\alpha \neq 0$ e era

$$\alpha a + (-\alpha) a = (\alpha - \alpha) a = 0 . a = 0$$

onde $\alpha \neq 0$ e $(-\alpha) \neq 0$, o que é impossível.

Podemos portanto definir de duas maneiras a independência linear de duas variedades lineares.

Se E_1 e E_2, bem como E_2 e E_3, são linearmente independentes não podemos afirmar que E_1 seja linearmente independente de $E_2 + E_3$ visto que em geral:

$$E_1 \wedge (E_2 + E_3) \neq E_1 \wedge E_2 + E_1 \wedge E_3 = \theta$$

Em tôda a casa o que podemos afirmar é que se E_1 é linearmente independente de E_2 e se E_3 é uma variedade linear contida em E_2, E_1 é linearmente independente de E_3.

Podemos ainda definir independência linear de n variedades lineares da seguinte maneira.

Diremos que as n variedades lineares $E_1, E_2, \ldots\ldots, E_n$ são linearmente independentes, se:

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_i = 0 \qquad a_i \in E_i$$

implica que $\alpha_i = 0$ ($i = 1, 2, \ldots\ldots\ldots\ldots, n$),

ou então, o que é equivalente, se

$$E_i \wedge (E_1 + E_2 + \ldots\ldots + E_{(i-1)} + E_{(i+1)} + E_n = 0$$

$i = 1, 2, \ldots\ldots, n.$

Um caso importante é aquêle em que:

$$E = E_1 + E_2 + \ldots\ldots\ldots + E_n$$

então diremos que as variedades $E_1, E_2, \ldots\ldots E_n$ determinam uma decomposição do espaço E.

Vamos mostrar que nestas condições todo o elemento a de E se pode escrever de uma única maneira sob a forma:

$$a = \sum_{i=1}^{n} a_i \qquad \text{onde: } a_i \in E_i$$

com efeito se

$$a = \sum_{i=1}^{n} b_i \qquad \text{onde: } b_i \in E_i$$

será

$$0 = \sum_{i=1}^{n} (b_i - a_i)$$

onde $b_i - a_i \in E_i$

Como os E_i são linearmente independentes, será

$$b_i - a_i = 0$$

isto é

$$b_i = a_i$$

Isto mostra-nos que E é a soma directa de $E_1, E_2, \ldots\ldots E_n$; para indicar êste facto, escreveremos:

$$E = E_1 \oplus E_2 \oplus \ldots\ldots \oplus E_n$$

Se E_i coincide com a variedade linear gerada por um único vector a_i, isto é: se E_i é formado pelos vectores da forma αa_i onde α é um número qualquer, diremos que os a_i são <u>vectores linearmente independentes</u> e que E é um <u>espaço vectorial abstracto a n dimensões</u>. E é então formado pelo conjunto dos vectores, da forma:

$$a = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_i$$

onde os α_i são números quaisquer. Diremos então que os a_i formam um <u>sistema de vectores de base</u> (ou uma base) do espaço E.

Um espaço vectorial E diz-se <u>decomponível</u> quando dado um sub - espaço vectorial $E_1 \subset E$ existe um sub - espaço vectorial E_2 tal que:

$$E = E_1 \oplus E_2$$

Tudo quanto dissemos atraz sôbre os grupos decomponíveis se poderia aqui repetir para os espaços vectoriais decomponíveis.

39 - <u>Transformações aditivas e homogéneas</u> - Seja $T(\mathcal{x})$ uma transformação de E em E. Se definirmos $T_1 + T_2$ e αT onde α é um número, pelas condições

$$(T_1 + T_2)(\mathcal{x}) = T_1(\mathcal{x}) + T_2(\mathcal{x})$$
$$\alpha T(\mathcal{x}) = \alpha [T(\mathcal{x})]$$

então o conjunto $\mathcal{C}$ das transformações dêste tipo formam um espaço vectorial como é fácil de vêr.

52

Diremos que $T(x)$ é aditiva e homogénea (ou linear) se:

$$T(x+y) = T(x) + T(y)$$

$$T(\alpha x) = \alpha T(x)$$

Verifica-se imediatamente que o conjunto destas transformações formam um espaço vectorial, e que o centro - domínio de cada uma delas é um espaço vectorial.

§ 8 - Aneis

40 - **Definição** - Consideremos um sistema algébrico $\mathcal{E}$ onde são definidas duas operações: uma adição e uma multiplicação; diremos que $\mathcal{E}(+,\cdot)$ é um anel quando $\mathcal{E}$ fôr um grupo abeliano em relação á adição e quando a multiplicação verificar alguns dos axiomas M_i.

Para cada sistema de axiomas M_i teremos uma categoria de aneis. Vamos indicar o tipo de aneis que teremos a considerar, serão aquêles em que a multiplicação verificar os seguintes axiomas:

M_1 - **Existência** $\quad AB \in \mathcal{E}$

M_2 - **Unicidade** $\quad A = A_1 \text{ e } B = B_1$ implicam $AB = A_1B_1$

M_3 - **Lei associativa** $\quad (AB)C = A(BC)$

MA_1 - **Lei distributiva da multiplicação em relação á adição**

$$A(B+C) = AB + AC$$

$$(B+C)A = BA + CA$$

A multiplicação não será em geral comutativa. Teremos por vezes necessidade de supôr que existe uma unidade, isto é, um elemento E tal que $AE = EA = A$. Diremos que se trata de um anel com uma unidade. Neste caso se cada elemento de $\mathcal{E}$, excepto 0, tem um inverso $A^{-1} \in \mathcal{E}$ em relação á multiplicação, diremos que $\mathcal{E}$ é um corpo.

41 - **Sub - anel** - Um sub - conjunto $\mathcal{C} \in \mathcal{E}$ é um **sub - anel** de $\mathcal{E}$ se $\mathcal{C}$ é um anel; para isso é necessário e suficiente que:

1º) Se A e B são elementos de $\mathcal{C}$ $A+B$, AB, e $(-A)$ sejam ainda elementos de $\mathcal{C}$.

2º.) $\mathcal{C}$ contenha 0

É evidente que 0 é um sub - anel de $\mathcal{E}$. Se $\mathcal{E}$ tem uma unidade E, não é ne

cessário supôr que $\mathcal{OC}$ contenha E, mas pode acontecer que em $\mathcal{OC}$ exista um elemento E' tal que: E'A = AE' = A para todos os elementos A $\in \mathcal{OC}$. Então E' é uma unidade em $\mathcal{OC}$ o que não quere dizer que o seja em $\mathcal{C}$.

41 - Anel das transformações aditivas de um grupo abeliano - Seja $\mathcal{C}$ o conjunto de todas as transformações de um grupo abeliano G em si próprio. Já algebrizámos $\mathcal{OC}$ pela introdução de uma adição e vimos então (nº. 54) que $\mathcal{C}$ é um grupo abeliano. Definamos em $\mathcal{OC}$ uma multiplicação ao modo ordinário, o produto de duas transformações $T_1(\varphi)$ e $T_2(\varphi)$ é por definição a transformação $T_1(T_2(\varphi))$.

Então $\mathcal{C}$ forma um sistema com multiplicação, isto é: são verificados os axiomas M_1, M_2, M_3 e além disso existe uma unidade (ET = TE = T) onde E é definida pela condição: $\varphi = E(\varphi)$ qualquer que seja $\varphi \in \mathcal{C}$. É ainda fácil de vêr que é verificada a condição:

$$(B+C)A = BA + CA$$

onde A, B e C são transformações quaisquer, mas em regra não é verificada a condição:

$$(1) \qquad A(B+C) = AB + AC$$

e portanto não é um anel. É portanto importante determinar a condição necessária e suficiente que devem verificar as transformações de $\mathcal{C}$ para que a condição (1) seja verificada. É fácil de reconhecer que essa condição é a seguinte:

$$T(\varphi+\psi) = T(\varphi) + T(\psi)$$

isto é: T (φ) deve ser um homomorfismo de G em G. Com efeito seja:

$$\psi_1 = B(\varphi)$$
$$\psi_2 = C(\varphi)$$
$$\chi_1 = A(\psi_1)$$

55

$$\mathfrak{L}_2 = A(\mathcal{Y}_2)$$

Façamos $D = B + C$ então

$$\mathcal{Y}_1 + \mathcal{Y}_2 = D(\mathcal{Y})$$

$$AD = A(B+C)$$

$$AD(\mathcal{Y}) = A(D(\mathcal{Y})) = A(\mathcal{Y}_1+\mathcal{Y}_2)$$

$$AB(\mathcal{Y}) = A(B(\mathcal{Y})) = A(\mathcal{Y}_1)$$

$$AC(\mathcal{Y}) = A(C(\mathcal{Y})) = A(\mathcal{Y}_2)$$

Se (1) é verificada será:

$$A(\mathcal{Y}_1+\mathcal{Y}_2) = A(\mathcal{Y}_1) + A(\mathcal{Y}_2)$$

e reciprocamente, c. q. d..

Se notarmos que o produto de duas transformações aditivas é ainda uma transformação aditiva, fica assim provado que o conjunto $\mathcal{A}$ dos homomorfismos de G em G formam um anel com uma unidade. Um automorfismo de G é representado por um elemento de $\mathcal{A}$ que tem um inverso em relação à multiplicação.

O conjunto de tais isomorfismos formam um grupo (.) mas não formam um anel porque a soma de dois isomorfismos não é em geral um isomorfismo.

42 - Nota. - As operações (adições e multiplicações) com elementos de um anel efectuam-se exactamente como as operações correspondentes da álgebra vulgar exceptuando-se apenas a lei comutativa. Assim

$$(A+B)^2 = (A+B)(A+B) = A^2+AB+BA+B^2$$

e em regra não será

$$(A+B)^2 = A^2+2AB+B^2$$

43 - Teorema de Hellinger - Teeplitz - Pode-se demonstrar o seguinte teorema, veja-se Hellinger und Teeplitz (1).

Teorema -Se A tem um único inverso á direita, êsse inverso á direita é ainda um inverso á esquerda.

Com efeito seja X o inverso á direita de A, que por hipotese é único, tem-se:

$$(1) \quad AX = E$$

Multiplicando á direita por A ambos os membros desta igualdade, tem-se

$$AX\,A = A$$

ou

$$(2) \quad AX\,A - A = 0$$

Adicionando (1) e (2) vem:

$$AX + AX\,A - A = E$$

ou

$$A\,(X + XA - E) = E$$

e como o inverso á direita é único, será:

$$X + XA - E = X$$

e portanto

$$XA - E = 0$$

ou

$$XA = E$$

o que nos mostra que X é ainda um inverso á esquerda de A, c. q. d..

Se atendermos a um teorema que demonstrámos no § consagrado aos sistemas com multiplicação concluímos, que um elemento A qualquer de um anel só pode estar num dos seguintes quatro casos:

	Número de inversos á esquerda	Núm. de inversos á direita
1º. caso	1	1
2º. caso	∞	0
3º. caso	0	∞
4º. caso	0	0

Basta para isso demonstrar que se A tem dois inversos, á direita por exemplo, distintos, A tem uma infinidade de inversos. Com efeito:

seja $AB = E$

e $AC = E$ $\qquad B \neq C$

Então $B + n(B - C)$, onde n é um número inteiro qualquer, é ainda um inverso á direita de A, com efeito:

$$A(B + n(B - C)) = AB + A(nB - nC) =$$

$$= E + n\,AB - n\,AC = E + nE - nE = E$$

C. q. d.. Estes resultados são importantes na teoria dos operadores lineares limitados do espaço abstracto de Hilbert.

44 - Noção de aditividade - Diremos que dois elementos A e B de um anel são aditivos quando fôr verificada a condição:

$$(\alpha) \qquad (A + B)^n = A^n + B^n$$

qualquer que seja o número inteiro e positivo n. Não é necessário supor que o anel contém uma unidade, nos seguintes teoremas:

Teorema 1 - Para que dois elementos A e B de um anel sejam aditivos é necessário e suficiente que:

$$(A + B)^2 = A^2 + B^2$$

$$(A + B)^3 = A^3 + B^3$$

Isto é que a condição (α) seja verificada para $n = 1$ e 2.

Teorema 2 - Para que dois elementos A e B de um anel sejam aditivos é necessário e suficiente que sejam verificadas as duas condições:

$$(I) \qquad AB + BA = 0$$

$$(II) \qquad ABA + BAB = 0$$

Teorema 3 - Se A e B são aditivos será $A^m B^n = 0$ para todos os valores de m e n que satisfazem á condição á condição $m + n \geqslant 4$.

5 8

Um caso paticularmente simples em que as condições (I) e (II) são verificadas é o caso em que $AB = BA = 0$. Então diremos que A e B são ortogonais.

Teorema 4 - Para que o elemento A aditive a B_1 e B_2 seja aditivo a $B = B_1 + B_2$ é necessário e suficiente que:

$$B_2 \, AB_1 + B_1 \, AB_2 = 0$$

Teorema 5 - Se A é aditivo aos elementos $B_1, B_2, \ldots\ldots\ldots B_n$ aditivos entre si dois a dois, A é aditivo a

$$B = \sum_{i=1}^{n} B_i$$

A noção de aditividade num anel generaliza a noção de aditividade de matrizes finitas e de núcleos de Fredholm que introduzimos num trabalho sôbre as equações integrais de Fredholm veja: A. Monteiro ([1], [2]). As demonstrações dos teoremas anteriores, são em tudo análogas ás demonstrações indicadas em ([2], p. 29 - 54); não as reproduzimos para não alongar a exposição.

Suponhamos agora que o anel considerado contém uma unidade. Podemos enunciar o seguinte teorema:

Teorema - Se A e B são aditivos e se S tem um inverso, S^{-1} os elementos:

$$A_1 = S^{-1} AS$$
$$B_1 = S^{-1} BS$$

são ainda aditivos.

Isto é: a relação de aditividade é invariante em relação ao grupo dos automorfismos interiores do anel considerado.

A demonstração é análoga aquela que indicámos para as matrizes finitas Veja-se : A. Monteiro ([2] p. 92).

Uma parte da teoria da aditividade dos núcleos de Fredholm e das matrizes finitas aparece-nos assim como um caso particular da teoria da aditividade num anel.

Trata-se, pertanto, de propriedades puramente algébricas. Fica assim determinado o domínio de causalidade dos teoremas indicados.

§ 9 - Anéis Vectoriais

45 - Definição - Dá-se o nome de anel vectorial a todo o sistema algébrico $\mathfrak{E}$ onde são definidas três operações, uma adição (+), uma multiplicação (.), e uma terceira operação que a cada número α (real ou complexo) e a cada elemento $A \in \mathfrak{E}$ faz corresponder um elemento $\alpha A \in \mathfrak{E}$ (producto dum número α por A), que verificam as seguintes condições:

1º.) - E é um espaço vectorial

2º.) - E é um anel no sentido do parágrafo precedente.

3º.) - São verificadas as seguintes condições:

$$(\alpha\beta)\,A = \alpha\,(\beta\,A)$$

$$(\alpha\,A)\,(\beta\,B) = (\alpha\beta)\,AB$$

Um anel vectorial diz-se real ou complexo conforme os multiplicadores α forem reais ou complexos.

Êstes axiomas são em particular verificados pelas matrizes finitas, e pelos núcleos de uma equação integral de Fredholm, etc..

A axiomática que indicamos não é possívelmente a mais simples. Alguns autores dão a um anel nestas condições o nome de anel linear.

46 - Sub - anel vectorial - Dá-se êste nome a todo o conjunto $\mathfrak{A} \subset \mathfrak{E}$ que fôr um anel vectorial; para isso é necessário e suficiente que:

Se A e B são elementos de $\mathfrak{A}$ e α um número qualquer, $A+B$, αA e AB sejam ainda elementos de $\mathfrak{A}$.

47 - Anel dos operadores lineares definidos num espaço vectorial - Consideremos o conjunto $\mathfrak{G}$ das transformações definidas num espaço vectorial E e cujo campo-domínio pertence a E. Vimos no nº. 39 que se definirmos $T = T_1 + T_2$ e αT pelas condições:

$$T(x) = T_1(x) + T_2(x)$$

$$\alpha T(x) = \alpha [T(x)]$$

o espaço $\mathcal{C}$ é um espaço vectorial. Por outro lado vimos no nº. 41 que: para que $\mathcal{C}$ seja um anel, é necessário e suficiente que tôdas as transformações $T \in \mathcal{C}$ verifiquem a condição:

$$(1) \quad T(\varphi + \psi) = T(\varphi) + T(\psi)$$

Para que as transformações T formem um anel vectorial resta-nos exprimir que são verificadas as condições:

$$(\alpha\beta)\,T = \alpha(\beta T)$$
$$(\alpha T_1)\,(\beta T_2) = (\alpha\beta)\,T_1 T_2$$

A primeira destas condições é sempre verificada e para que a segunda o seja é necessário e suficiente que as transformações T satisfaçam à condição:

$$(2) \quad T(\alpha\varphi) = \alpha T(\varphi)$$

isto é: que T seja uma transformação homogénea. Para a demonstração desta propriedade (e de outros resultados apenas indicados)veja-se o nosso livro em preparação Álgebra das Matrizes. Consideremos um conjunto $\mathcal{L}$ das transformações definidas num espaço vectorial, que gosa das propriedades (1) e (2), a que daremos o nome de <u>transformações aditivas e homogéneas</u> ou <u>operadores lineares</u>.

O centro - domínio de um operador linear é um <u>espaço vectorial</u> imerso em E; um tal operador define por tanto um homomorfismo de E num sub - espaço de E.

Um resultado importante, e que justifica a introdução da noção de anel vectorial é a seguinte:

<u>Teorema - O conjunto $\mathcal{L}$ dos operadores lineares definidos num espaço vectorial formam um anel vectorial.</u>

62

O estudo dos operadores lineares é um dos capítulos mais importantes da matemática moderna. Julgamos que na exposição precedente mostrámos bem como é que, por consideração de ordem puramente algébrica, se pode ser levado naturalmente a conceber a noção de operador linear.

Um resultado elementar que convém assinalar é o seguinte: se E for um espaço vectorial abstracto a n dimensões, $\mathcal{L}$ é um espaço isomorfo ao conjunto das matrizes quadradas de ordem n. Veja-se uma demonstração desta propriedade no nosso livro já citado.

§ 10 - Tipo algébrico de um espaço

48 - Definição - Vamos agora introduzir a noção de tipo algébrico de um espaço, que desempenha em Álgebra Abstracta o mesmo papel que a noção de potência de um conjunto desempenha na teoria dos conjuntos abstractos. Esta noção aplica-se, como veremos, exclusivamente a espaços algébricos. Para fixar ideias suporemos que se trata de espaços algébricos A, B, C, etc, em cada um dos quais se supõe definita uma única operação algébrica; mas é claro que as mesmas definições são aplicáveis ao caso em que existe mais do que uma operação em cada um dêles.

I - Diremos que dois espaços algébricos A e B têm o mesmo tipo algébrico, se A fôr isomorfo a um sub - espaço $B_1 \subset B$ e se B fôr isomorfo a um sub - espaço $A_1 \subset A$.

Nestas condições, escreveremos:

$$t(A) = t(B)$$

(leia-se: o tipo algébrico de A é igual ao tipo algébrico de B).

II - Diremos que o tipo algébrico do espaço A é superior ao tipo algébrico do espaço E se A fôr isomorfo a um sub - espaço $B_1 \subset B$ e se B não fôr isomorfo a nenhum sub - espaço $A_1 \subset A$.

Então escreveremos:

$$t(A) > t(B)$$

Nestas condições também podemos dizer que o tipo algébrico do espaço B é inferior ao tipo algébrico do espaço A e escreveremos:

$$t(B) < t(A)$$

Há ainda lógicamente dois casos possíveis.

64

III - O tipo algébrico de A é inferior ao tipo algébrico de B e então escreveremos:

$$t(A) < t(B)$$

IV - Diremos que os tipos algébricos de A e B são incomparáveis se A não fôr isomorfo a nenhum sub - espaço $B_1 \subset B$ e se B não fôr isomorfo a nenhum sub - espaço $A_1 \subset A$.

Vamos indicar exemplos em que dão estes quatro casos.

1º. exemplo - Suponhamos que A é o conjunto dos números inteiros: 1, 2, 3,....., n,..... e que a operação algebrizante é a adição no sentido ordinário. Seja por outro lado B o conjunto dos números inteiros pares: 2, 4, 6,.....,2n,..... com a mesma operação algebrizante. A e B são espaços algébricos visto que a soma de dois números inteiros (resp. pares) é um número inteiro (resp. par). Como B é um sub - espaço de A podemos dizer que A é isomorfo a um sub - espaço de B. Existe ainda um isomorfismo entre B e um sub - espaço $A_1 \subset A$. Podemos por exemplo supôr que A_1 é formado pelos múltiplos de 4.

2º. exemplo - Se A for o conjunto dos números reais e B o conjunto dos números racionais é evidente que $t(A) > t(B)$ relativamente á adição e á multiplicação. Como $B \subset A$ é claro que B é isomorfo a B e portanto a um sub - espaço de A. A não pode ser isomorfo a um sub - espaço de B, porque então existiria uma correspondência biúnivoca entre o conjunto dos números reais e um sub - conjunto dos números racionais, o que é impossível.

3º. exemplo - Todo o grupo que contém um sub-grupo finito tem um tipo algébrico incomparável com o espaço A indicado no primeiro exemplo.

É necessário fazer algumas observações sôbre as definições precedentes.

a) Em primeiro logar é evidente que se A e B são dois espaços isomor-

fos será t (A) = t (B), isto é: o tipo algébrico de um espaço mantém-se por isomorfismo; não sabemos se a recíproca desta proposição é verdadeira, em todo o caso parece-nos pouco provável que assim seja. As dificuldades no estudo desta questão provêm do facto de não existir em regra uma algebrização conveniente dos sub - espaços de um espaço algébrico.

a) O problema da tricotomia resolve-se pela negativa pois a noção de tipo algébrico visto que há espaços de tipos algébricos incomparáveis.

b) Se A e B têm o mesmo tipo algébrico, os conjuntos A e B têm a mesma potência, mas a recíproca não é verdadeira.

c) Se $t(A) \leq t(B)$ a potência do conjunto A é quando muito igual á potência do conjunto B.

d) Tôdas as propriedades da igualdade e da desigualdade que indicámos para a noção de potência são ainda verificadas para a noção de tipo algébrico.

e) Como existe um grupo abeliano numerável universal $\mathfrak{C}$ é evidente que tôdo o grupo abeliano numerável A tem um tipo algébrico igual ou menor que o tipo algébrico de $\mathfrak{C}$. Seria importante indicar um exemplo de um grupo abeliano numerável A tal que $t(A) < t(\mathfrak{C})$; em qualquer dos casos não existe nenhum grupo abeliano numerável com um tipo algébrico superior a $\mathfrak{N}$.

Capítulo III

Topologia Abstrata

§ 1 - Espaços (V)

1 - Espaços topológicos. Diz-se habitualmente que um conjunto abstrato E é um espaço topológico se existe uma operação D (a que se dá o nôme de derivação) que a cada sub - conjunto $A \subset E$ faz corresponder um outro conjunto A' (a que se dá o nôme de conjunto derivado de A). Aos elementos de A' dásse o nôme de elementos de acumulação ou pontos limites de A. É evidente que $A' = D(A)$. Não nos parece que esta noção corresponda á noção intuitiva de espaço topológico, visto que se E (O) fer um espaço algébrico e se fizermos corresponder a cada sub - conjunto $A \subset E$ o conjunto A' dos elementos da forma a_1 e a_2 onde $a_1 \neq a_2$ são dois elementos quaisquer de A, o espaço algébrico E (O) aparece-nos assim como um espaço topológico. Estamos portanto de acôrdo com Fréchet quando êle restringe a noção de espaço topológico.

Um espaço topológico é um sistema (E, D) formado por um conjunto abstrato E e por uma Operação D definida sobre o conjunto $\mathcal{E}$ dos sub - conjuntos de E e que a cada elemento $A \in \mathcal{E}$ faz corresponder um conjunto qualquer $A' = D(A)$ de tal maneira que sejam verificadas as seguintes condições:

1ª.) - Unicidade - se $A_1 = A_2$ será $D(A_1) = D(A_2)$

isto é: D (A) é um conjunto único e bem determinado.

2ª.) - Para que $a \in A'$ é necessário e suficiente que A - (a) não seja vazio e que $a \in D(A - (a))$. Isto é, o facto de a pertencer a D (A) só depende dos pontos de A distinctos de a, ou ainda: se a

é um ponto limite de A êle é ainda ponto limite de A - (a) e recíprocamente.

Trata-se evidentemente de uma restrição importante, mas em tôdo o caso a teoria dos espaços que satisfazem apenas a estas duas condições não nos conduziria muito longe.

Esta noção permite-nos porém pôr em evidência a ideia de que a operação de derivação é uma noção fundamental da topologia.

A topologia pode ser baseada sôbre outras noções primitivas, por exemplo: vizinhança, conjunto fechado, conjunto aberto, "fermeture" (ou conjunto de inclusão, na terminologia do Prof. Mira Fernandes) ponto interior, etc..

Nós vamos aqui definir o objectivo da topologia utilizando como noção primitiva a noção de vizinhança que nos parece a mais intuitiva muito embora existam noções da topologia que se não sabem ainda exprimir por intermédio da noção de vizinhança.

2 - Espaços (V) -Vamos agora considerar umas das classes mais importantes de espaços topológicos, classe que foi considerada pela primeira vez por M. Fréchet e na qual a noção de ponto limite ou ponto de acumulação é definida por intermédio da noção vizinhança.

Definição - Diremos que um conjunto abstracto E é um espaço (V) se a tôdo o elemento $a \in E$ corresponde uma família $\{V(a)\}$ de sub - conjuntos de E, a cada um dos quais daremos o nome de vizinhanças do elemento a, e que satisfazem à seguinte condição:

V_1 - Tôdo o elemento $a \in E$ pertence a cada uma das suas vizinhanças, isto é: $a \in E(a)$.

Definição L_0 - Diremos que a é um ponto de acumulação do conjunto $A \subset E$ se tôda a vizinhança V (a) contém pelo menos um ponto de A, diferente de a . Conjunto derivado de A é o conjunto dos seus elementos de acumulação, em notação A'.

É claro que nestas condições todo o espaço (V) é um espaço topológico.

A definição que acabamos de dar de ponto limite num espaço (V) é devida a M. Fréchet, veja por exemplo (1) p. 172. Esta definição em todo o caso merece-nos alguns reparos.

Consideremos, por exemplo, o conjunto E dos pontos de um plano e consideremos como vizinhanças de um ponto a o conjuntos formados pelo ponto a e pelos pontos de coordenadas racionais interiores a um circulo de centro a e de raio δ. O conjunto $A \subset E$ de todos os pontos que têm uma das coordenadas irracionais não teria em face da definição anterior nenhum ponto limite. Em todo o caso todo o ponto de conjunto A é um ponto limite de espaço E.

A topologia que acabamos de indicar não tem nada de artificial, ela intervém por exemplo quando se quere completar o corpo dos números racionais. Podemos portanto concluir que é a definição de ponto limite de um conjunto A que não está formulada de uma maneira conveniente. Vamos portanto modificá-la.

Definição L_1 - Diremos que α é um ponto limite do conjunto $A \subset E$ (supomos é claro que E é um espaço (V)) quando para cada vizinhança $V(\alpha)$ existe um ponto $a \in A$ e uma vizinhança $V(a)$ tais que todos os pontos de $V(a)$, excepto eventualmente o ponto a, estão contidos em $V(\alpha)$, isto é, tais que:

$$V(\alpha) \supset V(a) - a$$

É claro que nestas condições, no exemplo anteriormente indicado um conjunto de pontos de coordenadas irracionais já pode ter um ponto limite.

Em virtude da condição 2ª de nº 1, podemos supor sem alterar a topologia de E que $V(a)$ não contém o ponto a, isto é, podemos suprimir

a condição V_1 na definição de espaço (V), então podemos dizer mais simplesmente que α é ponto limite de A se a cada V (α) corresponde um elemento $a \in A$ e uma vizinhança V (a) tal que

$$V(\alpha) \supset V(a)$$

O que acabamos de dizer põe em evidência a ideia de que um espaço abstrato em que se toma como noção primitiva a noção de vizinhança a topologia dêsse espaço depende da definição que adoptarmos para a noção de ponto limite.

Para reforçar esta ideia vamos apresentar um outro exemplo. Consideremos ainda o conjunto dos pontos de um plano e suponhamos que definimos as vizinhanças de um ponto da seguinte maneira:

Se $a = o$ (respectivamente $a \neq o$) consideremos como vizinhanças de a o conjunto dos pontos de coordenadas racionais (resp. irracionais) interiores a um círculo de centro a ~~o conjunto dos pontos~~ e de raio δ

A origem não é um ponto limite do conjunto dos pontos de coordenadas irracionais quando se adoptam as definições de ponto limite L_0 ou L_1. Porém a origem é um ponto limite do conjunto dos pontos de coordenadas racionais quando se adopta a definição L_0 e não o é na definição L_1. Estas circunstâncias parecem-nos extraordinàriamente graves atendendo a que existem espaços (V) bastante particulares, como sejam os espaços de Hausdorff, em que as duas definições L_0 e L_1 não são topològicamente equivamentes, isto é: não definem uma única operação de derivação como seria de esperar. Note-se que os exemplos que acabamos de indicar são exemplos de espaços de Hausdorff.

Por outro lado A. Weil, [1] - pg 5, num trabalho recente, obriga as famílias de vizinhanças de cada ponto a verificarem a condição V_1 e V_4 - A cada V (a) corresponde uma vizinhança V_1 (a) da mesma família, tal que V (a) contenha pelo menos uma vizinhança V (b) da

da família associada a cada um dos elementos b de $V_1(a)$.

É claro que nos exemplos que indicámos anteriormente esta condição é verificada e o axioma V_1' não elimina portanto as dificuldades que indicámos.

As dificuldades provêm do facto de existirem pontos vizinhos de um ponto a que são todos pontos vizinhos de outro ponto α sem que a seja um ponto vizinho de α.

É claro que esta condição já se não dá se obrigarmos as vizinhanças a satisfazerem á seguinte condição:

V_1^* - Se dada uma vizinhança $V(\alpha)$ existe um ponto a ao qual corresponde uma vizinhança $V(a)$ tal que: $V(a) - a \subset V(\alpha)$, então o ponto a pertence a $V(\alpha)$.

Nestas condições se α é um ponto limite de A segundo a definição L_1 α é ainda um ponto limite segundo a definição L_0, mas a recíproca pode não ser verdadeira, como o mostra o 2º exemplo que indicámos anteriormente. Se as vizinhanças satisfazem aos axiomas V_1 e V_1^* e se α não é um ponto limite de A segundo a definição L_0, α não é ainda um ponto limite de A segundo a definição L_1 como é fácil de verificar. Portanto a definição L_0 conduz no caso em que os axiomas V_1 e V_1^* são verificados a atribuir a todo o conjunto A um conjunto derivado máximo, isto é: a operação de derivação obtida por L_0 em geral conduz a mais pontos limites que aquela que é obtida por L_1.

Se um espaço (V) só satisfaz ao axioma V_1 sem satisfazer a V_1^* é sempre possível modificar a primeira família das vizinhanças $V(a)$ dadas no espaço considerado, de tal maneira que seja verificado o axioma V_1^* basta para isso incluir em cada $V(a)$ todos os pontos b para os quais existe uma vizinhança $V(b)$ tal que $V(b) - b \subset V(a)$. Representemos por $V'(a)$ as novas vizinhanças assim obtidas; é claro que para a família $V'(a)$ são verificadas as condições V_1 e V_1^*. Ficam assim resolvidas em parte as dificuldades que apresentámos.

Seria importante determinar as condições necessárias e suficientes a que devem satisfazer as vizinhanças para que as definições L_0 L_1 conduzam á mesma topologia.

Vamos agora indicar uma condição suficiente para que todo o ponto limite L_0 seja um ponto limite L_1. A condição é a seguinte:

V_3 - se o ponto a pertence á vizinhança V (α) existe sempre uma vizinhança V (a) contida em V (α).

Encontraremos mais adiante esta condição.

As dificuldades não param aqui. Com efeito aínda é possível dar uma nova definição de ponto limite num espaço (V).

Definição L_2 - Diremos que α é um ponto limite de um conjunto A de um espaço (V) quando dada uma vizinhança qualquer V (α) existe um ponto $a \in A$ ao qual corresponde uma vizinhança V (a) tal que: para cada um dos seus pontos exista uma vizinhança contida contida em V (α) .

Pode acontecer que α não seja ponto limite de A segundo as definições L_0 e L_1 e que o seja segundo a definição L_2.

Consideremos o conjunto E dos números riais e definamos vizinhanças de um ponto a como um certo conjunto V (a) que será um sub - conjunto dos números b tais que $|b - a| < \delta$ definido da seguinte maneira:

1ª.) - Se a é racional os b b são racionais

2ª.) - Se a é algébrico os b b são racionais

3ª.) - Se a é transcendente os b b são algébricos

Então os números racionais não são limites L_0 nem L_1 dos números transcendentes, mas são limites L_2 dos números transcendentes.

Êstes resultados podem-se generalizar.

Definições - Chamemos vizinhanças de ordem zéro de um ponto a (em notação V^0 (a)) ao conjunto formado pelo elemento a. Chamemos vizinhança de ordem 1 de a a todo o conjunto V (a) - a (em notação

$V^{(1)}(a)$). Chamemos vizinhança de ordem n de ponto a a todo o conjunto $V^{(n)}(a)$ que é soma de um conjunto de vizinhanças de ordem 1 de cada um dos pontos de $V^{(n-1)}(a)$. Diremos que α é ponto limite L_n de um conjunto de A se dada a vizinhança $V(\alpha)$ existir sempre um ponto a, para o qual existe $V^{(n)}(a) \subset V(\alpha)$.

A cada definição de ponto limite corresponde uma topologia.

As condições suficientes V_1^* e V_3 para que as topologias L_0 e L_1 sejam idênticas podem agora enunciar-se da seguinte maneira:

V_1^* - Se uma vizinhança de α $V(\alpha)$ contém uma vizinhança de 1ª ordem de a, então $V(\alpha)$ contém a.

V_3 - Para cada ponto a de $V(\alpha)$ existe uma vizinhança de a de 1ª ordem contida em $V(\alpha)$.

Um resultado interessante é o seguinte:

Teorema I - Se um espaço (V) verifica a condição V_1^* todo o ponto limite L_n é ainda um ponto limite L_0.

Teorema II - Se um espaço (V) verifica a condição V_3 todo o ponto limite L_0 é um ponto limite L_n.

A demonstração dêste teorema é imediata e portanto as condições V_1^* e V_3 são suficientes para que as topologias definidas por L_0 e L_n sejam idênticas.

Por isso parece indispensável obrigar as vizinhanças, dadas à priori, a satisfazerem áquelas duas condições se quizermos obter resultados simples, e evitar as complicações que resultam do facto de uma mesma família de vizinhanças não conduzir em regra ao mesmo espaço topológico. A noção de espaço (V) é extremamente geral.

Tôdo o conjunto abstrato E é um espaço (V); com efeito basta definirmos as vizinhanças por meio da condição:

$V(a) = E$ qualquer que seja $a \in E$.

Pode acontecer que num espaço E existam duas famílias diferentes de vizinhanças $\{ V(a) \}$ e $\{ W(a) \}$. Cada uma delas define uma topologia em E a que chamaremos topologia V e topologia W. Diremos que as duas famílias de vizinhanças são topológicamente <u>equivalentes</u> quando elas definem em E a mesma topologia, isto é: quando o derivado de $A \subset E$ qualquer seja A_1, é o mesmo em relação ás topologias V e W.

<u>Teorema</u> - Para que dois sistemas de vizinhanças V (a) e W (a) sejam topológicamente equivalentes é necessário e suficiente que tôda a vizinhança V (a) da primeira família contenha pelo menos uma vizinhança W (a) da segunda e recíprocamente.

Demonstração: A condição é evidentemente suficiente. Que é necessária resulta do seguinte: suponhamos que V (a) não continha nenhum W (a) Em cada W (a) existiria um elemento b não pertencente a V (a), e o conjunto B dos elementos b teria a como ponto limite na topologia W, circunstância que não seria verificada na topologia V (veja M. Fréchet [2]).

Podemos introduzir as seguintes definições num espaço (V):

Diremos que A é um <u>conjunto</u>:

1º.) - <u>fechado</u> se $A' \subset A$

2º.) - <u>denso em si mesmo ou condensado</u> se $A \subset A'$

3º.) - <u>perfeito</u> se $A = A'$

Diremos que a é um <u>ponto de condensação</u> do conjunto A se existe uma infinidade não numerável de pontos de A em toda a vizinhança V (a). Para que num espaço (V) possam existir pontos de condensação é necessário e suficiente supôr que V (a) tem uma potência superior á do numerável.

Quando assim não fôr é ainda possível definir ponto de condensação da seguinte maneira (utilizando a definição de ponto limite L_1): a é um ponto de condensação de A se qualquer que seja V (a) existir uma

uma infinidade não numerável de pontos $b \in A$ para cada um dos quais existe uma vizinhança $V(b)$ tal que

$$V(b) - b \subset V(a)$$

Obrigando os espaços (V_1^*) a satisfazerem ao axioma V_1 esta duplicidade na definição de ponto de condensação desaparece.

Diz-se que a é um ponto interior de A se existe uma vizinhança V (a) tal que $V(a) \subset A$ donde resulta que a é interior a V (a),

Diz-se que a é um ponto exterior de A se a é interior ao seu complementar $\mathcal{C}(A)$.

Diz-se que a é um ponto fronteiro de A se a não é nem interior nem exterior a A, isto é se cada V (a) contém um ponto de A e outro de $\mathcal{C}(A)$.

Um conjunto diz-se aberto se todos os seus pontos interiores são pontos interiores. Se um espaço (V) satisfaz á condição V_3 todos os pontos de V (a) são pontos interiores a V (a).

Podíamos introduzir muitas outras definições habituais na teoria dos conjuntos, mas nós não pretendemos fazer uma teoria completa da topologia abstrata, pretendemos apenas nêste capítulo definir o objectivo da topologia abstracta e fazer algumas observações.

3 - Funções contínuas - sejam $\mathcal{X}$ e $\mathcal{Y}$ dois espaços (V) e $X \in \mathcal{X}$, $Y \in \mathcal{Y}$. Diremos que a transformação

$$y = f(x)$$

de $\mathcal{X}$ em $\mathcal{Y}$ é contínua no ponto x de X se qualquer que seja V (y) existe uma vizinhança V (x) tal que o conjunto transformado de V (x) seja um sub - conjunto de V (y).

Diremos que f é uma transformação contínua de X em Y = f (X) se

ela é contínua em todos os pontos de X.

4 - Homeomorfias - Se a transformação f de que falámos no número precedente estabelecer uma correspôndencia biunívoca entre X e Y e se ela fôr contínua, diremos que se trata de uma homeomorfia . Para indicar que os conjuntos A e B pertencentes a dois espaços (V) são homeomorfos usaremos a notação:

$$A \approx B$$

o leitor verificará sem dificuldade que a relação de homeomorfia goza de todas as propriedades da relação de igualdade.

5 - Objectivo da Topologia - A topologia tem por objectivo o estudo das propriedades dos espaços topológicos que se mantêm invariantes quando se transforma E por meio de uma homeomorfia. É impossível distinguir na topologia dois espaços homeomorfos, visto que tôdas as propriedades topológicas de um dos espaços pertencem ao outro espaço e recíprocamente. As noções primitivas da topologia são as noções primitivas da teoria dos conjuntos a = b, $a \in A$ e a noção de ponto limite definida por intermédio de uma família de vizinhanças. Recorrendo apenas a estas noções e às funções proposicionais da Lógica formal é possível construir toda a topologia. Toda a função proposicional assim obtida será chamada topológica .

Todas as proposições que se podem enunciar por meio de funções proposicionais topológicas, são invariantes por uma homeomorfia. Assim se $A \subset X$ é um conjunto fechado isto é se $A' \subset A$ e se f for uma homeomorfia será $f(A') \subset f(A)$, $f(X) = Y$ e portanto $f(A)$ é um conjunto fechado no espaço Y.

Já dissemos que podiamos tomar como noções primitivas da topologia outras noções. É o que se faz por exemplo Kuratowski [1] que constrói

76

a topologia baseando-se na noção de fermeture ou conjunto de inclusão.

§ 2 - Tipo de dimensão de um espaço topológico.

6 - Definição - A noção de tipo de dimensão de um espaço topológico foi introduzida por M. Fréchet [1] no princípio dêste século, da seguinte maneira:

I - Diremos que o tipo de dimensão de um espaço topológico A é igual ao tipo de dimensão do espaço topológico B quando existir uma homeomorfia entre A e um sub - conjunto $B_1 \subset B$ e uma homeomorfia entre B e um sub - conjunto $A_1 \subset A$. Para indicar êste facto, escreveremos:

$$d_A = d_B$$

II - Diremos que o tipo de dimensão de A é inferior ao tipo de dimensão de B quando existir uma homeomorfia entre A e um sub - conjunto $B_1 \subset B$ e não existir nenhuma homeomorfia entre B e um sub - conjunto $A_1 \subset A$. Para indicar êste facto, escreveremos:

$$d_A < d_B$$

III - Diremos que o tipo de dimensão de A é superior ao tipo de dimensão de B quando fôr $d_B < d_A$, e então escreveremos:

$$d_A > d_B$$

IV - Diremos que os tipos de dimensão de A e B são incomparáveis quando não existir nenhuma homeomorfia entre A e um sub - conjunto $B_1 \subset B$ nem entre B e um sub - conjunto $A_1 \subset A$.

Êstes quatro casos podem efectivamente dar-se.

Notemos que a noção de tipo de dimensão é absolutamente análoga às noções de potência de um conjunto e de tipo algébrico de um espaço.

Vamos agora indicar algumas das propriedades do tipo de dimensão.

1º.) - O tipo de dimensão goza de tôdas as propriedades da desigualdade e da igualdade que indicámos para a noção de potência, no capítulo I.

2º.) - Se $dA = dB$ os conjuntos A e B têm a mesma potência, isto é: $\bar{\bar{A}} = \bar{\bar{B}}$

3º.) - Se $dA < dB$ será $\bar{\bar{A}} < \bar{\bar{B}}$

4º.) - O conjunto das homeomorfias forma um grupo de transformações quando se defâne produto de duas transformações ao modo ordinário (grupo que é um sub - grupo do grupo das equivalências). Daremos a êste grupo o nome de grupo das homeomorfias . A topologia está pertanto lógicamente subordinada á teoria dos conjuntos abstratos.

5º.) - Se A e B são homeomorfos ($A \approx B$) será $dA = dB$, mas a recípro ca não é verdadeira. Em todo o caso em virtude do corolário 1 do Teorema de Banach (capº II, número 16) podemos afirmar: Se $dA = dB$ é possível decompôr cada um dos conjuntos A e B em conjunto disjuntos respectivamente homeomorfos. Basta verificar que a relação de homeomorfia possui a propriedade (d) naquele local definida. A noção de tipo de dimensão de um espaço desempenha (1) na teoria dos conjuntos pela noção de potência, e por isso ela tem sido tão profundamente estudada nêstes últimos tempos. Como se vê ela pode ser concedida num espaço (V) qualquer e era sêb êste ponto que nos interessava aqui indicar.

O teorema de Banach que acabamos de indicar é o teorema fundamental sobre a estrutura da noção de tipo de dimensão e desempenha na topologia um papel análogo ao que o teorema de Cantor - Bernstein desempenha na teoria dos conjuntos abstratos.

(1) na topologia um papel análogo ao papel desempenhado

§3-Espaços (V) particulares.

7- Mesmo que obriguemos os espaços (V) a verificarem os axiomas V_1, V_1^*, e V_3, a noção de espaço (V) pode ainda ser verdadeiramente patológica; é o caso de um espaço E em que todos os pontos tivessem como única visinhança o proprio espaço E; num tal espaço (V) qualquer ponto tem por derivado o espaço inteiro E. Deve-se portanto obrigar um espaço (V) a satisfazer as condições restrictivas escolhidas de tal modo que a topologia assim definida tenha as propriedades mais importantes da topologia ordinaria do plano euclidiano e ainda que essas categorias de espaços topológicos contenham como caso particular a topologia dos espaços funcionais mais importantes.

A topologia abstrata tem estado permanentemente no decorrer do seu desenvolvimento sob a influência desta duas correntes, uma que obriga a restringir o seu campo de estudo outra que a obriga a alargá-lo tanto quanto possivel.

Vamos agora indicar uma primeira lista de axiomas que nos permitirá definir os espaços (V) mais importantes.

V_1 - Todo o ponto a de E pertence a cada uma das suas visinhanças: $a \in V(a)$

V_1^* - Se V (a) contém completamente o conjunto V(b)-b, então V(a) contém o ponto b.

V_2 - Aparte comum a duas vizinhanças de um ponto a qualquer, contém sempre uma terceira vizinhança do mesmo ponto a.

V_3 - Se o ponto b pertence a V (a), existe sempre uma vizinhança V(b) contida em V(a)

V_4' - Quaisquer que sejam os dois pontos diferentes a e b, existe V(a) que não contém b e existe V(b) que não contém a.

V_4'' - Quaisquer que sejam os dois pontos diferentes a e b, existem duas vizinhanças V(a) e V (b) sem pontos comuns.

Notemos que fomos levados a obrigar as vizinhanças a satisfazerem aos axiomas V_1, V_1^*, e V_3.

Diz-se [illegible] de espaço [illegible]

Dá-se em toplogia o nome de espaço acessivel (Fréchet) a todo espaço(V) em que as vizinhanças verificam os axiomas V_1, V_2, V_3 e V_4'. 80

Num espaço (V) que satisfaz ao axioma V_1 pode-se definir um espaço acessivel como um espaço (V) onde os pontos limites L_0 dos sub-conjuntos do espaço sarisfazem ás seguintes condições:

A_1 - A operação de derivação é distributiva em relação á adição de conjuntos, isto é

$$D(A+B) = D(A) + D(B)$$

ou

$$(A+B)' = A' + B'$$

A_2 - Um conjunto formado por um número finito de pontos não pode ter nenhum ponto limite

A_3 - Todo o conjunto derivado é fechado, isto é:

ou $$D\,D\,(A) \subset D(A)$$

$$(A')' \subset A'$$

A recíproca é verdadeira. Se num espaço topológico a operação de derivação verifica os axiomas A_1, A_2 e A_3, E é um espaço(V) acessivel. Basta para isso definir V(a) como um conjunto aberto arbitrário contendo a.

Nos espaços acessiveis uma sucessão de pontos $a_1, a_2, \ldots a_n \ldots$ que tende para um limite a, pode tender ao mesmo tempo para outro limite $b \neq a$, mas esta circunstância já não se verifica num espaço de Hausdorff [espaço (V) em que são verificados os axiomas V_1, V_2, V_3 e V_4''].

Existem ainda outras categorias de espaços como sejam os espaços regulares e normais de Alexandroff e espaços completamente normais.

Vêr sobre este assunto Frechet, [1] pag.204, e o magnífico resumo dos estudos feitos no seminário de Moscou no ano 1924-25 de Tychonoff e Vedenissoff [1], discípulos de Alexandroff.

8- Espaços L - Um conjunto E é um espaço L(Fréchet) quando se faz corresponder a certas sucessões de elementos de E

$$a_1, a_2, \ldots a_n, \ldots$$

81

(a que daremos o nome de sucessões convergentes) um elemento $a = \lim_{n=\infty} a_n$ de xxx tal maneira que sejam verificadas as seguintes condições:

L_1) qualquer que seja a sucessão extraida da sucessão dada ela converge para a.

L_2) Se os elementos da sucessão dada são todos iguais a a, a sucessão converge para a.

Se fôr ainda verificado o axioma:

L_3 - Se uma sucessão não converge para a, ela contém uma sucessão parcial da qual é impossivel extrair uma sucessão convergente para a (Alexandroff e Uryshon).

Diremos que se trata de um espaço L^* (notação de Kuratowski) [1] pag. 76

Diz-se que f(x) é uma função continua num espaço L^* se

$$\lim_{n=\infty} x_n = x \quad \text{implica} \quad \lim_{n=\infty} f(x_n) = f(x)$$

É claro que supômos que o contra-dominio de f(x) é um espaço L^*.

Todo o espaço L é evidentemente um espaço topológico, mas não é necessariamente um espaço de Hausdorff.

Todo o espaço de Hausdorff é porém um espaço L^* se admitirmos que o ponto a é limite de sucessão a_n quando a cada vizinhança V(a) corresponde um indice N tal que

$$a_n \in V(a) \text{ para } n > N$$

Para as propriedades destes espaços veja-se o livro de Fréchet já citado.

§ 4 - Topologia dos conjuntos abstractos

9 - Limite de uma sucessão de conjuntos.

- Seja E um conjunto abstracto qualquer e $\mathscr{E}$ o conjuntos dos seus sub-conjuntos. Já mostrámos que é possivel definir uma Álgebra em $\mathscr{E}$, vamos agora ver que $\mathscr{E}$ é um espaço topológico, mais precisamente $\mathscr{E}$ é um espaço $\overline{L}$.

Seja: $A_1 , A_2 , \ldots, A_n , \ldots$

uma sucessão qualquer de conjuntos.

Dá-se o nome de maior dos limites (de la Vallée Poussin) ou limite superior (Hausdorff) da sucessão A_n ao conjunto formado pelos elementos que pertencem a uma infinidade de conjuntos da sucessão dada, conjunto que representaremos pela notação

$$\overline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

Dá-se o nome de menor dos limites ou limite inferior da sucessão A_n ao conjunto formado pelos elementos que pertencem a todos os conjuntos da sucessão dada, salvo quando muito a um número finito dêles, conjunto que representaremos pela notação:

$$\underline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

Em face destas definições vê-se imediatamente que:

1º) Qualquer que seja a sucessão dada A_n, o seu limite superior e o seu limite inferior são conjuntos bem determinados.

2º) Se $A_n = A$ qualquer que seja n , será

$$A = \overline{\lim_{n=\infty}} A_n = \underline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

3ª) Se A_i fôr uma sucessão parcial extraída da sucessão dada é:

$$\overline{\lim_{i=\infty}} A_i \subset \overline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

$$\underline{\lim_{i=\infty}} A_i \supset \underline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

4ª) É sempre verificada a condição

$$\underline{\lim_{n=\infty}} A_n \subset \overline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

Diremos que uma sucessão de conjuntos A_n tende para <u>um limite</u> se

$$\overline{\lim_{n=\infty}} A_n = \underline{\lim_{n=\infty}} A_n$$

e que será representado pela notação

$$\lim_{n=\infty} A_n$$

Nestas condições são verificadas as seguintes propriedades:

L_1 -Se A_i fôr uma sucessão parcial extraida da sucessão dada A_n, que por hipótese tende para um limite, então será:

$$\lim_{i=\infty} A_i = \lim_{n=\infty} A_n$$

L_2 - Se $A_n = A$, qualquer que seja <u>n</u>, então

$$\lim_{n=\infty} A_n = A$$

Podemos portanto afirmar que $\mathcal{E}$ é um espaço L. A noção de limite superior e de limite inferior não transformam $\mathcal{E}$ num espaço L porque a condição L_1 não é verificada como acabamos de ver.

10 - <u>Equivalência e homeomorfia.</u>

Como $\mathcal{E}$ é um espaço topológico é possivel definir homeomorfia entre dáis espaços $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ associados a E e E', e tipo de dimensão de um espaço $\mathcal{E}$.

Suponhamos que E e E' são equivalentes $[E' = f(E),\ E = f^{-1}(E')]$ então $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ também o são?

É curioso observar que a correspondência biunívoca que existe entre $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ é uma homeomorfia quando se consideram $\mathcal{E}$ e $\mathcal{E}'$ como espaços topológicos, sendo a topologia definida por

$$\lim_{n=\infty} A_n$$

visto que se f é uma equivalência e se

$$A = \lim_{n=\infty} A_n$$

será

$$f(A) = \lim_{n=\infty} f(A_n)$$

Parece-nos que esta observação tem a sua importância, e que ela nos explica a razão pela qual a noção de limite de uma sucessão de conjuntos desempenha um papel importante na teoria dos conjuntos abstractos.

As razões atrás indicadas justificam a preferência que se dá à noção de limite e não às noções de limite superior e de limite inferior, mas existem outras razões que só poderão ser indicadas no capítulo seguinte consagrado à Análise Geral.

2 85-

§ 5 - Espaços distanciados

11 - **Noção de distância.** Diremos que um espaço E é distanciado relativamente a uma dada relação de igualdade definida em E, quando a cada par ordenado (x, y) de elementos de E se faz corresponder um número real que representaremos pela notação d (x, y) - a que daremos o nome de distância de x a y - que verifique os seguintes axiomas:

D_1 - Axioma de igualdade. $x = x'$ implica $d(x, y) = d(x', y')$

D_2 - $d(x, y) \geq 0$ quaisquer que sejam x e y de E

D_3 - $d(x, y) = 0$ se e só se $x = y$

D_4 - Axioma de simetria. $d(x, y)$ $d(y\ x)$ quaisquer que sejam x e y de E.

D_5 - Axioma da desigualdade triangular.

$$d(x,y) \leq d(x,z) + d(z,y)$$

quaisquer que sejam x e y e z de E.

Esta noção é devida a M. Frechet [1, pgs. 55] e desempenha um papel de primeira importância na análise moderna. A designação de espaço distanciado foi proposta por Bouligand, que abreviaremos utilizando, como Frechet, a expressão "espaço (D)". Hausdorf dá a um espaço (D) o nome de espaço métrico.

12 - **Axiomática de Lindenbaum.** Os 5 axiomas anteriores que caracterizam a noção de distância são equivalentes aos dois axiomas seguintes [Lindenbaum - 1, pgs. 211]

D_3^* - $d(x, y) = 0$ equivale $x = y$

D_5^* - Desigualdade triangular

$$d(x,y) \leq d(x,z) + d(y,z)$$

É evidente que os axiomas $\underline{D}^*$ são uma consequência dos axiomas $\underline{D}$. Vamos agora demonstrar que os axiomas D são uma consequência dos axiomas D^* ; Para isso substituindo na desigualdade precedente y por x , vem

$$d(x, x) \leq d(x, z) + d(x, z)$$

ou

$$0 \leq 2\, d(x, z)$$

donde

$$\boxed{d(x, z) \geq 0 \quad \text{(axioma } D_2\text{)}}$$

Substituindo agora, na desigualdade $D_{5'}^*$, z por $\underline{x}$ vem:

$$d(x, y) \leq d(x, x) + d(y, x)$$

ou

$$(1) \qquad d(x, y) \leq d(y, x)$$

Consideremos a desigualdade análoga a $D_{5'}^*$

$$d(y, x) \leq d(y, z) + d(x, z)$$

Substituindo z por x vem

$$(2) \qquad d(y, x) \leq d(y, x)$$

As desigualdades (1) e (2) mostram que

$$(3) \qquad d(x, y) = d(y, x) \quad \text{(axioma } D_4\text{)}$$

Finalmente o axioma $D_{5'}^*$ e a igualdade (3) mostram que o axioma $D_{5'}$ é também verificado.

Resta-nos finalmente demonstrar D_1. Seja então $x = x'$

$$d(x, y) \leq d(x, x') + d(x', y)$$

ou, em virtude de D_3^*

$$(4) \qquad d(x, y) \leq d(x', y)$$

Do mesmo modo se vê que

$$d(x', y) \leq d(x', x) + d(x, y)$$

ou

(5) $\quad d(x', y) \leq d(x, y)$

Das desigualdades (4) e (5) resulta

$$d(x, y) = d(x', y) \qquad \text{c. q. d.}$$

Observação: Todo o conjunto abstracto é um espaço (D) se se define a distância entre dois dos seus elementos x e y como sendo igual a 1 se $x \neq y$ e igual a zéro se $x = y$. Pelo contrário em todos os espaços (D) que desempenham um papel importante na Análise Moderna a distância $d(x, y)$ toma um conjunto de valores denso no intervalo $(0, +\infty)$

13 - Espaços não distanciados. A noção de igualdade desempenha um papel importante na definição de distância com a qual está intimamente relacionada - é o que acontece por exemplo no axioma D_3^* de Lindenbaum. Não admira portanto que existam espaços não distanciados em relação a uma noção de igualdade que possam ser consideradas como espaços distanciados quando se modifica convenientemente a noção de igualdade. É o que acontece sempre que se pode fazer corresponder a cada par ordenado (x, y) de elementos de E num número real $d(x, y)$ satisfazendo às seguintes condições:

1ª) $\quad d(x, x) = 0$

2ª) $\quad d(x, y) \leq d(x, z) + d(y, z)$

Nestas condições $d(x, y) = 0$ não implica que $x = y$ [1]. Seja $x_0 \in E$ e X_0 o conjunto dos elementos $x \in E$ tais que:

$$d(x_0, x) = 0$$

a que daremos o nome de classe gerada por x_0.

(1) Para um espaço nestas condições são verificadas ainda as propriedades D_2) $d(x, y) \geq 0$, D_4) $d(x, y) = d(y, x)$ e D_1) Se $x = x'$ e $y = y'$ $\quad d(x, y) = d(x', y')$

2 88

Nestas condições vamos demonstrar o seguinte

Lema I . Se $x'_o \in X_o$ e $x''_o \in X$ será $d(x'_o \; x''_o) = o$

Com efeito

$$d(x'_o , x''_o) \leqslant d(x'_o , x_o) + d(x''_o, x_o)$$

e portanto

$$d(x'_o , x''_o) \leqslant o$$

logo

$$d(x'_o , x''_o) = o \quad \text{c. q.d.}$$

Nestas condições se x'_o pertence à classe X_o gerada por x_o , todo o elemento de X_o pertence ainda à classe gerada por x'_o .

Lema II . Se duas classes X_o e X_1 têm um elemento comum essas duas coincidem. Seja α um elemento comum a X_o e X_1 então será

$$d(x_o , \alpha) = d(x_1 , \alpha)$$

$$d(x_o , x_1) \leqslant d(x_o , \alpha) + d(x_1 , \alpha)$$

logo

$$d(x_o , x_1) = o$$

isto é x_1 pertence à classe X_o e x_o pertence à classe X_1. Vamos agora mostrar que todo o elemento da classe X_1 pertence à classe X_o . Seja β_1 um elemento qualquer da classe X_1 como x_o pertence também à classe X_1 podemos afirmar, em virtude do lema I, que $d(x_o , \beta_1)$, isto é, β_1 pertence à classe X_o. Do mesmo modo se demonstra que todo o ponto de X_o pertence à classe X_1 c. q. d.

Corolário. Se $d(x_o , x_1) \neq o$, a distância de um ponto qualquer α_o da classe X_o a um ponto qualquer α_1 da classe X_1 é também diferente de zéro. com efeito se assim não fôsse seria $d(\alpha_o , \alpha_1) = o$ e portanto α_1 pertenceria à classe gerada por α_o , isto é, α_1 pertence à classe X_o e então X_o e X_1 seriam

idênticos, e portanto $d(x_0, x_1) = 0$, o que é impossível por hipótese.

Lema III. Se $k = d(x_0, x_1) \neq 0$ qualquer que sejam os pontos $\alpha_0 \in X_0$ e $\alpha_1 \in X_1$ é

$$d(x_0, x_1) = d(\alpha_0, \alpha_1)$$

com efeito

$$d(\alpha_0, x_1) \leq d(\alpha_0, x_0) + d(x_1, x_0)$$

como

$$d(\alpha_0, x_0) = 0$$

$$(1) \quad \boxed{d(\alpha_0, x_1) \leq d(x_1, x_0)}$$

Por outro lado

$$d(x_1, x_0) \leq d(x_1, \alpha_0) + d(x_0, \alpha_0)$$

e portanto

$$(2) \quad \boxed{d(x_1, x_0) \leq d(x_1, \alpha_0)}$$

De (1) e (2) resulta:

$$(3) \quad \boxed{d(x_1, x_0) = d(\alpha_0, x_1)}$$

Finalmente de:

$$d(\alpha_0, \alpha_1) \leq d(\alpha_0, x_1) + d(\alpha_1, x_1)$$

tira-se

$$(4) \quad \boxed{d(\alpha_0, \alpha_1) \leq d(\alpha_0, x_1)}$$

e de

$$d(\alpha_0, x_1) \leq d(\alpha_0, \alpha_1) + d(x_1, \alpha_1)$$

tira-se

$$(5) \quad \boxed{d(\alpha_0, x_1) \leq d(\alpha_0, \alpha_1)}$$

Finalmente de (3), (4) e (5) resulta

$$\boxed{d(\alpha_0, \alpha_1) = d(x_0, x_1)} \quad \text{c. q. d.}$$

Podemos agora definir em E uma nova relação de igualdade,

290

a que daremos o nome de equivalência, da seguinte maneira:

Definição. Diremos que dois elementos x e y de E são equivalentes e escreveremos $x \sim y$ leia-se x equivalente a y se

$$d(x, y) = o$$

Em virtude dos lemas precedentes é evidente que

I_1 - $x \sim x$

I_2 - Se $x \sim y$ será $y \sim x$

I_3 - Se $x \sim y$ e $y \sim z$ será $x \sim z$

Nestas condições o espaço (E) ser considerado como um espaço distanciado relativamente à relação de equivalência; com efeito, são verificados os seguintes axiomas

Axioma D_3^* $d(x, y) = o$ equivale a $x \sim y$. Se $x \sim y$ é por definição $d(x, y) = o$, reciprocamente se $d(x, y) = o$ é $x \sim y$

Axioma D_5^*. $d(x, y) \leqslant d(x, z) + d(y, z)$

Exemplo. O conjunto E das funções f (x) de uma variavel real definidos no intervalo (o, 1) cujo módulo é de quadrado somável, isto é, tais que

$$\int_0^1 |f(x)|^2 dx < +\infty$$

formam um espaço distanciado, quando se define a distância d (f , g) de duas funções f (x) e g (x) pela condição

$$d(f, g) = \int_0^1 |f(x) - g(x)|^2 dx$$

Mas para isso é necessário modificar a definição vulgar de igualdade de duas funções visto que:

(1) $$\int_0^1 |f(x) - g(x)|^2 dx = o$$

não implica que

$$f(x) = g(x)$$

Quando a condição (1) fôr verificada diremos que f(x) e g(x) são equivalentes e escreveremos f(x) ~ g(x) 91

É claro que nêste caso f(x) e g(x) diferem apenas sôbre um conjunto de pontos do intervalo (0,1) de medida nula.

14 — Um espaço (D) é evidentemente um espaço (V) quando se definem as vizinhanças de um ponto a como sendo o conjunto de pontos b do espaço considerado que verificam a condição

$$d(a, b) \leqslant r$$

(esfera de centro a e de raio r).

Então E é um espaço de Hausdorff.

Se convencionarmos que

$$\lim_{n\to\infty} a_n = a$$

significa que

$$\lim_{n\to\infty} d(a, a_n) = 0$$

podemos considerar E como um espaço L^*.

Os espaços (D) gosam de um grande número de propriedades do plano Euclideano que não nos interessa nêste momento considerar.

A determinação das condições necessárias e suficientes a que deve satisfazer um espaço topológico determinado para que êle seja um espaço (D) (problema da metrização) é uma das questões mais importantes da topologia.

Entre os espaços (D) são particularmente importantes os chamados espaços completos, isto é, aqueles para os quais se pode afirmar que uma sucessão a_n convergente [isto é que verifica a condição $\lim_{n\to\infty} d(a_n, a_m) = 0$] tende necessàriamente para um limite. [isto é: existe no espaço considerado um elemento a tal que

$$\lim_{n\to\infty} d(a_n, a) = 0$$]

CAPITULO IV

Análise Abstracta ou Análise Geral

§4-Espaços algébrico-topológicos

1-**Definição.** A Análise Abstracta é um dos capítulos mais recentes da matemática moderna, visto que ela se pode considerar ainda em plena formação. Os resultados já obtidos, embora muito numerosos, resolvem apenas uma pequena parte dos problemas fundamentais da Análise Abstracta.

Para podermos definir o objectivo da Análise Abstracta, ou Análise Geral na terminologia do seu fundador o professor M. Frechet, necessitamos de introduzir um certo número de noções o que passamos a fazer.

Diremos que o conjunto abstracto E é um espaço algébrico-topológico quando E fôr simultâneamente um espaço algébrico e um espaço topológico, isto é quando forem definidas em E uma álgebra $\mathcal{A}$ e uma topologia $\mathcal{T}$.

Para que indicarmos que E é um espaço algébrico-topológico usaremos a notação:

$$E(\mathcal{A}, \mathcal{T})$$

Trata-se portanto de uma noção extremamente geral, que pode dar origem a um conjunto numeroso de espaços algébrico-topológicos particulares que se obtêm especificando a natureza de $\mathcal{A}$ e $\mathcal{T}$.

Tal e qual como acontece na Álgebra Abstracta e na Topologia tratando-se de uma noção extremamente geral é natural que um espaço nestas condições não gose de propriedades muito numerosas, e nestas condições seremos levados em breve a particularisar a álgebra $\mathcal{A}$ e a topologia $\mathcal{T}$ de modo a obtermos os espaços algébrico-topológicos mais importantes nas aplicações.

Notemos por outro lado que a definição que acabamos de dar não estabelece nenhuma relação entre $\mathcal{A}$ e $\mathcal{T}$; ora acontece precisamente que na Análise Clássica os espaços mais importantes são sempre espaços em que exist

te uma correlação entre a álgebra e a topologia do espaço considerado. Em todo o caso a noção que acabamos de dar de espaço algébrico-topológico, permite-nos definir com todo o rigor qual é o objectivo da Análise geral.

2-Topo-isomorfismo. Dados dois espaços algébrico-topológicos E $(\mathfrak{A}, \mathfrak{T})$ e E′$(\mathfrak{A}', \mathfrak{T}')$ diremos que êles são topo-isomorfos quando existir uma correspondência bionívoca entre os dois conjuntos E e E′ que seja simultâneamente um isomorfismo entre E $(\mathfrak{A})$ e E′$(\mathfrak{A}')$ e uma homeomorfia entre ~~Entre~~ E $(\mathfrak{T})$ e E′$(\mathfrak{T}')$. Para indicar êste facto escreveremos:

$$E(\mathfrak{A}, \mathfrak{T}) \cong E'(\mathfrak{A}', \mathfrak{T}')$$

É claro que a relação de topo-isomorfismo goza de todas as propriedades da relação de igualdade.

É conveniente notarmos que $\mathfrak{A}$ e $\mathfrak{A}'$ devem conter o mesmo número de operações algébricas.

3 - Objectivo da Análise Geral. A Análise geral estuda as propriedades dos espaços algébrico-topológicos que se mantêm invariantes quando se passa de um espaço algébrico-topológico para outro que lhe seja topo-isomorfo.

Nestas condições podemos dizer que as noções e as propriedades de que se ocupa a Análise Geral são aquelas que se podem enunciar recorrendo apenas às noções primitivas da Álgebra e da Topologia (a saber: a = b, $a \in E$, $c = a \odot b$ e ponto de acumulação ou conjunto de inclusão etc.) e às funções proposicionais da lógica formal.

É fácil de verificar que o conjunto dos topo-isomorfismos formam um grupo em relação à multiplicação dos topo-isomorfismos. (a definição de multiplicação é análoga à que demos para as equivalências, isomorfismos e homeomorfismos) . A êste grupo dá-se o nome de grupo dos topo-isomorfismos, que é simultâneamente um sub-grupo do grupo dos isomorfismos e do grupo dos homeomorfismos, e portanto do grupo das equivalências.

A Análise Geral apresenta-se portanto como lògicamente subordinada à Álgebra Abstracta e à Topologia Abstracta e portanto à teoria dos Conjuntos Abstractos .

É evidente que entre as propriedades de E invariantes por topo-isomorfismo figuram certamente tôdas as propriedades algébricas de E e tôdas as propriedades topológicas de E. Parece portanto à primeira vista que a Análise Abstracta se limitaria a estudar isoladamente o espaço E quer como espaço algébrico quer como espaço topológico. Na realidade não é assim porque existem noções que não podem ser formuladas isoladamente na Álgebra Abstracta ou na Topologia Abstracta, que só têm sentido num espaço algébrico-topológico.

Daremos o nome de <u>analíticas</u> a tôdas as noções que estiverem nestas condições; e são elas que devem ser consideradas como as noções de que se ocupa verdadeiramente a Análise Abstracta.

Uma proposição será considerada como uma proposição de Análise Abstracta quando no seu enunciado figurar necessàriamente uma noção analítica.

4 - <u>Dimensão algébrica de um espaço</u>. Vamos agora introduzir a noção de dimensão algébrica de um espaço algébrico-topológico.

<u>Definições.</u>

I - <u>Diremos que dois espaços algébrico-topológicos A e B têm a mesma dimensão algébrica se existir um topo-isomorfismo entre A e um sub-conjunto de B e entre B e um sub-conjunto de A</u>.

Então escreveremos: $d_a(A) = d_a(B)$

II - <u>Diremos que a dimensão algébrica de um espaço A é inferior à dimensão algébrica de B, se existir um topo-isomorfismo entre A e um sub-conjunto de B e não existir nenhuma topo-isomorfismo entre B e um sub-conjunto de A</u> . Então escreveremos:

$$d_a(A) < d_a(B)$$

III - <u>Diremos que a dimensão algébrica de um espaço A é maior que a dimensão algébrica de B</u> se fôr:

95-

$d_a(B) < d_a(\dot{A})$ e então escreveremos $d_a(A) > d_a(B)$?

IV - Diremos que as dimensões algébricas dos espaços A e B são incomparáveis, se não existir nenhum topo-isomorfismo entre B e um sub-conjunto de B, nem entre B e um sub-conjunto de A.

Se dois espaços A e B têm a mesma dimensão algébrica, êsses dois espaços têm necessàriamente a mesma potência, o mesmo tipo algébrico e o mesmo tipo de dimensão à Fréchet.

Se dois espaços são topo-isomorfos êles têm necessàriamente a mesma dimensão algébrica, mas a recíproca desta proposição não deve ser verdadeira.

Como exemplo de dois espaços com a mesma dimensão algébrica, podemos indicar o conjunto dos números complexos e o conjuntos dos vectores de um plano que têm por origem um ponto fixo O, quando nêsses conjuntos se dão as definições habituais de adição e limite de uma sucessão de números ou de vectores. A dimensão algébrica do corpo dos numeros reais é inferior à dimensão algébrica do corpo dos numeros complexos.

A relação de igualdade e desigualdade entre dimensões algébricas goza de todas as propriedades que indicaremos no nº 13 do capítulo I, para o caso da noção de potência de um conjunto.

Mais adiante indicaremos para certas categorias de grupos abelianos topológicos um teorema de estrutura análogo ao teorema de Cantor-Bernstein na Álgebra e ao teorema de Banach na Topologia.

Daremos o nome ~~de propriedades que se mantêm invariantes~~ de propriedades algébrico-dimensionais às propriedades que se mantêm invariantes quando se passa de um espaço para outro de dimensão algébrica igual e daremos o nome de propriedades topo-isomorfas aquelas que se mantêm invariantes quando se passa de um espaço para outro que seja topo-isomorfo ao primeiro.

96

§ 2- Espaços Analíticos

5- Definição. Na definição que demos de um espaço algébrico-topológico E ($\mathcal{A}$, $\mathcal{T}$) não estabelecemos nenhuma relação entre a álgebra e a topologia do espaço E.

Suponhamos que em E é definida uma única operação, por exemplo uma multiplicação e que sob o ponto de vista topológico E é um espaço (V).

A cada par de elementos (a,b) de elementos de E a operação considerada faz corresponder um outro elemento de E, c = a b. $\mathcal{A}$ define portanto em todo o espaço E uma função c = f(a,b) de dúas variáveis cujo contra-domínio está contido em E.

Diremos que E ($\mathcal{A}$, $\mathcal{T}$) é um espaço analítico se f(a,b) é uma função contínua do ponto (a,b), quaisquer que sejam os pontos a e b de E.

Sejam A e B dois sub-conjuntos de E, representaremos pela notação A B o conjunto de todos os produtos de um elemento de A por um elemento de B; se B se reduz a um único elemento b o mesmo conjunto será representado pela notação A·b. Se fôr A = V(a) e B = V(b) porêmos A B = V(a) V(b).

Nestas condições para que E seja um espaço analítico é necessário e suficiente que dada uma vizinhança qualquer V(c) de c = f(a,b) = a b existam duas vizinhanças V(a) e V(b) tais que

$$V(a)\ V(b) \subset V(c)$$

Fica assim estabelecida uma connexão entre a álgebra e a topologia de E.

Vamos agora indicar algumas

6-Propriedades dos espaços analíticos. Seja A um sub-espaço algébrico de E, A′ o seu conjunto derivado e $\bar{A} = A + A'$.

Teorema 1-Se A é um sub-espaço algébrico de E, $\bar{A} = A + A'$ será ainda um sub-espaço algébrico de E. Temos que provar que se $a \in \bar{A}$ e $b \in \bar{A}$ será a $b \in \bar{A}$.

1º caso. suponhamos que $a \in A$ e $b \in A$ então a $b \in A$ por hipótese, e portanto $a \in \bar{A}$.

2º caso. Suponhamos que $a \in A$, $b \in A'$ e $b \notin A$.

Vamos mostrar que a b é um elemento de $\overline{A}$; basta para isso provar que $a\,b \in A'$. Seja dada uma vizinhança qualquer $V(a\,b)$; por hipótese existem $V(a)$ e $V(b)$ tais que:

$$V(a)\ V(b) \subset V(a\,b)$$

em particular

$$a\ V(b) \subset V(a\,b)$$

Ora qualquer que seja $V(b)$

$$V(b) \supset B = [V(b) \wedge A] \neq 0$$

visto que b é um ponto de acumulação de A. Note-se que B é um sub-conjunto de A e o mesmo acontece a

$$a\,B \subset a\,.V(b)$$

Portanto

$$a\,B \subset V(a\,b)$$

isto é: qualquer vizinhança de a b contêm pontos de A e portanto $a\,b \in A'$ c. q. d. . Do mesmo modo se mostrava que se $a \in A'$, $a \notin A$ e $b \in A$: $a\,b \in A'$ e portanto $a \in \overline{A}$.

3º caso. Suponhamos finalmente que $a \in A'$, $b \in A'$, $a \notin A$ e $b \notin A$. Mostremos que $a\,b \in A'$.

Dada a vizinhança $V(a\,b)$ existem $V(a)$ e $V(b)$ tais que

$$V(a)\ V(b) \subset V(a\,b)$$

sejam

$$B_1 = V(a) \wedge A \neq 0$$

$$B_2 = V(b) \wedge A \neq 0$$

Será

$$B_1\ B_2 \subset A$$

e

$$B_1\ B_2 \subset V(a)\ V(b) \subset V(a\,b)$$

isto é: qualquer vizinhança de a b contém pontos de A; logo $a\,b \in A'$ e portanto $a\,b \in \overline{A}$. Podemos mesmo afirmar em face da demonstração anterior que :

Corolário . Se A é um sub-espaço algébrico de um espaço analítico E,

o conjunto derivado $A' = \mathcal{C}(A)$ é ainda um sub-espaço algébrico de E .

Não poderemos em regra afirmar que o espaço $\overline{A} = A + A'$ seja um conjunto topològicamente fechado a não ser que E seja, por exemplo, um espaço acessível ou um espaço de Hausdorff, relativamente à família de vizinhanças que definem a topologia em E; quando assim fôr o conjunto A goza das seguintes propriedades:

1º) $\overline{A}$ é algèbricamente fechado, isto é: o produto de dois elementos de $\overline{A}$ é ainda um elemento de $\overline{A}$.

2º) $\overline{A}$ é topològicamente fechado, isto é: os pontos limites de $\overline{A}$ são ainda pontos de $\overline{A}$.

Para exprimir êste facto diremos que $\overline{A}$ é a variedade fechada gerada pelo sub-espaço algébrico A . Uma variedade fechada é portanto um sub-espaço algébrico que é topològicamente fechado. São êstes os sub-conjuntos que mais interessam, no estudo dum espaço analítico.

7 - Algebrização das variedades fechadas.

É possível obter uma algebrização das variedades fechadas contidas num espaço analítico E , da seguinte maneira:

Dadas duas variedades fechadas A e B dá-se o nome de intersecção das duas variedades ao conjunto $A \wedge B$.

Teorema. A intersecção de duas variedades fechadas é ainda uma variedade fechada.

É evidente visto que 1º) $A \wedge B$ é um sub-espaço algébrico de E . 2º) $A \wedge B$ é fechado visto que a intersecção de dois conjuntos fechados é ainda um conjunto fechado.

A intersecção de variedades fechadas, sendo definida como a intersecção de dois conjuntos, goza portanto de todas as propriedades da intersecção de conjuntos.

Dá-se o nome de variedade fechada gerada por um conjunto A de elementos de E à intersecção F de todas as variedades fechadas que contêm A , po-

demos chamar-lhe a menor das variedades fechadas que contêm A. No caso em que A é um sub-espaço algébrico de E nem sempre se pode afirmar que $F \simeq E+E'$; podemos indicar como exemplo o conjunto A das funções contínuas; nêste caso F é o conjunto de tôdas as funções de Baire. (Note-se que A é um grupo abeliano e que F é um espaço $\mathcal{L}$). Porém se E é um espaço de Hausdorff $F \simeq E+E'$.

O produto A B de duas variedades fechadas A e B não é em geral uma variedade fechada, e seria esta a algebrização mais importante. Mais adiante indicaremos para os grupos abelianos uma algebrização conveniente das variedades fechadas.

Em tôdo o caso nós podemos demonstrar que

$$A' \; B' \subset (A \; B)'$$

Com efeito sejam a e b dois pontos limites que pertencem respectivamente a A' e B'.

Então quaisquer que sejam V (a) e V (b) será

$$A_1 = V(a) \wedge A - (a) \neq 0$$
$$B_1 = V(b) \wedge B - (b) \neq 0$$

Consideremos o elemento a b e uma vizinhança qualquer V (ab), então existem V (a) e V (b) tais que:

$$V(a) \; V(b) \subset V(ab)$$

por outro lado:

$$A_1 \subset A \qquad A_1 \subset V(a)$$
$$B_1 \subset B \qquad B_1 \subset V(b)$$

logo

$$A_1 \; B_1 \subset A \; B$$
$$0 \neq A \; B \subset V(a) \; V(b) \subset V(ab)$$

e portanto existem pontos de A B em qualquer vizinhança V (a b), c. q. d.

200

Em geral não se verifica a condição

$$A' B' \neq (A B)'$$

isto é: a derivação não é distributiva em relação à multiplicação de conjuntos. Nos casos em que esta circunstância se der é de esperar que apareçam simplificações importantes.

§3- Grupos topológicos.

8- **Definição** Se um grupo G fôr um espaço(V) diremos que é é um grupo topológico se fôrem verificados os seguintes dondições:

G_1 - G é um espaço de Hausdorff.

G_2 - a b é uma função contínua do ponto (a.b) quaisquer que sejam a e b.

G_3 - a^{-1} é uma função contínua de a.

Estas três condições podem resumir-se nas seguintes:

G^* - G é um espaço de Hausdorff.

G^{**} - a função f(a b)= a^{-1} b é contínua.

Com efeito para b = e será: f(a) = a^{-1} uma função contínua e pertanto G_3 é verificado.

Seja A um sub-conjunto qualquer de G, representemos por A^{-1} o conjunto dos elementos a^{-1} onde a $\in$ A. Para que G_1 e G_2 sejam verificadas é necessário e suficiente que sejam satisfeitas as condições:

H_1 - Dada a vizinhança V(a b) existem duas vizinhanças V(a) e V(b) tais que

$$V(a)\ V(b) \subset V(a\ b)$$

H_1 - Dada a vizinhança $V(a^{-1})$ existe V(a) tal que

$$V(a)^{-1} \subset V(a^{-1})$$

A condição H_1 exprime que G é um espaço analítico.

Vamo-nos ocupar nêste parágrafo exclusivamente dos grupos abelianos, mas alguns dos resultados que vamos obter estendem-se sem dificuldades aos grupos não abelianes.

9- **Grupos abelianos topológicos** Como vamos tratar de grupos abelianos adoptaremos a notação aditiva (a + b) para representar a operação do grupo. Suponhamos então que G é um grupo abeliano topológico, e que G é fechado.

2 102

Para um grupo abeliano as condições H_1 e H_2 tomam a forma:

H_1 - Dada a vizinhança $V(a+b)$ existem duas vizinhanças $V(a)$ e $V(b)$ tais que

$$V(a) \dot{+} V(b) \subset V(a+b)$$

H_2 - Dada a vizinhança $V(-a)$ existe $V(a)$ tal que

$$-V(a) \subset V(-a)$$

9- Variedades fechadas. Diremos que G_1 é uma variedade fechada de G se G_1 fôr um grupo fechado.

Teorema 1-Se G_1 é um sub-grupo de G, o conjunto $\overline{G}_1 = G_1 + G'_1$ é uma variedade fechada.

Em primeiro logar $\overline{G}_1$ é um conjunto fechado porque G é um espaço de Hausdorff.

Já mostramos que se a e b são elementos de $\overline{G}_1$, a + b não é ainda um elemento de $\overline{G}_1$ (veja nº6).

Resta-nos mostrar que se $a \in \overline{G}_1$ é $(-a) \in \overline{G}_1$.

1º caso. Se a é um elemento de grupo G_1, $(-a)$ é ainda um elemento de G_1 e portanto de $\overline{G}_1$.

2º caso. Suponhamos que a é um elemento de G'_1 que não pertence a G_1. Então, dada uma vizinhança qualquer $V(a)$ o conjunto $H \cdot V(a) \wedge G_1$ não é vazio. (Veja continuação na pagina seguinte)

Hilbert.

10- Grupos abelianos perfeitamente decomponiveis. Um grupo abeliano topológico e fechado G diz-se decomponivel quando dada uma variedade fechada qualquer $G_1 \subset G$ existe uma variedade fechada G_2 tal que G seja a soma directa de G_1 e G_2 isto é tal que:

$$G = G_1 \oplus G_2 \quad \text{ou} \quad G \ominus G_1 = G_2$$

Diremos então que G_2 é a variedade complementar de G_1.

Note-se que são verificadas as seguintes condições:

Dada uma vizinhança qualquer de (-a), a saber V(-a) existe uma vizinhança V(a) tal que

$$-V(a) \subset V(-a)$$

Como H é um sub-conjunto de V(a), -H é um sub-conjunto de -v(a) e portanto

$$-H \subset V(-a)$$

Ora os elementos de -H são elementos de G_1 e portanto (-a) é ponto limite de G_1, logo pertence a G_1' e portanto a $\overline{G}_1$, c. q. d.

Seria agora fácil de reconhecer que

Teorema 2 - A intersecção de duas variedades fechadas é uma variedade fechada. Dá-se o nome de variedade fechada gerada por um conjunto A de elementos de E à intersecção de todas as variedades fechadas que contêm A.

A soma $A \dot{+} B$ de duas variedades fechadas não é em regra uma variedade fechada; podem-se indicar exemplos no espaço abstracto de Hilbert.

(continua no nº 10 da pagina anterior)

704

1º) $G = G_1 \dot{+} G_2$

2º) $G_1 \wedge G_2 = \Theta$

3º) Todo o elemento $a \in G$ decompõe-se de uma única maneira sob a forma:

$$(1) \quad a = a_1 + a_2$$

onde

$$a_1 \in G_1 \text{ e } a_2 \in G_2$$

4º) Se $a = \lim_{n=\infty} a_n$ e $b = \lim_{n=\infty} b_n$ onde a_n e b_n são elementos pertencentes respectivamente a G_1 e G_2 será:

$$a + b = \lim_{n=\infty} (a_n + b_n)$$

Nota-Diremos que o conjunto $A \subset G$ é soma directa das variedades fechadas A_1 e A_2 se

1º) $A = A_1 \dot{+} A_2$

2º) $A_1 \wedge A_2 = \Theta$

3º) Todo o elemento $a \in G$ decompõe-se de uma maneira única sob a forma $a = a_1 + a_2$

onde $a_1 \in A_1$ e $a_2 \in A_2$

É claro que A é um sub-grupo abeliano de G em virtude de 1º).

Mas não podemos afirmar que A é um conjunto fechado, isto é em regra

$$\overline{A} = A + A' \neq A.$$

Compreende-se assim a importância das considerações seguintes.

Seja a um elemento qualquer de $G = G_1 \oplus G_2$ e

$$(1) \quad a = a_1 + a_2$$

Consideremos uma vizinhança qualquer V(a); cada elemento de V(a) admite uma decomposição da forma (1). Seja $V_1(a)$ o conjunto dos a_1 e $V_2(a)$ o conjunto dos a_2.

Diremos que o grupo G é <u>perfeitamente decomponível</u> quando:

1º) G fôr decomponível.

2º) Qualquer que seja a decomposição $G = G_1 \oplus G_2$ e dado um elemento a qualquer de G

$$A = a_1 + a_2 \qquad a_i \in G_i \ (i = 1, 2)$$

e duas vizinhanças quaisquer $V(a_1)$ e $V(a_2)$ existe uma vizinhança $V(a)$ tal que

$$V_1(a) \subset V(a_1)$$
$$V_2(a) \subset V(a_2)$$

nestas condições vamos demonstrar o seguinte:

Teorema 3- Se G é perfeitamente decomponível; qualquer que seja a decomposição $G = G_1 \oplus G_2$ a operação de derivação de conjunto é distributiva em relação à adição dos sub-conjuntos que pertencem respectivamente a G_1 e G_2, isto é se:

$$A_1 \subset G_1 \ e \ A_2 \subset G_2$$

será

$$\boxed{(A_1 + A_2)' = A_1' + A_2'}$$

Já mostrámos, no nº 7, que:

$$A_1' + A_2' \subset (A_1 + A_2)'$$

Resta-nos mostrar portanto que

$$(A_1 + A_2)' \subset A_1' + A_2'$$

Seja a um ponto limite de $A_1 + A_2$, então dada $V(a)$ o conjunto

$$B = V(a) \wedge (A_1 + A_2)$$

não é vazio, qualquer que seja $V(a)$. Seja $a = a_1 + a_2$

Dadas as vizinhanças $V(a_1)$ e $V(a_2)$ existe uma vizinhança $V(a)$ tal que:

$$V_1(a) \subset V(a_1)$$
$$V_2(a) \subset V(a_2)$$

Seja b um elemento qualquer de B e $b = b_1 + b_2$; o conjunto B_1 dos elementos b_1 e o conjunto B_2 dos elementos b_2 não são vazios e

$$B_1 \subset V_1(a)$$
$$B_2 \subset V_2(a)$$

Isto significa que em qualquer vizinhança de a_1 existem pontos de A_1 e portanto a_1 é ponto limite de A_1; do mesmo modo se vê que a_2 é ponto

limite de A_2.
Nestas condições

$$a_1 \in A'_1$$
$$a_2 \in A'_2$$

logo

$$a = a_1 + a_2 \in A'_1 + A'_2 \qquad \text{c. q. d.}$$

Podemos mesmo afirmar que:

Corolário. Se G é perfeitamente decomponivel ; e dada uma decomposição qualquer $G = G_1 \oplus G_2$ se uma sucessão de elementos $a^{(n)}$ tende para a e se puzermos

$$a^{(n)} = a_1^{(n)} + a_2^{(n)}$$
$$a = a_1 + a_2$$

então podemos afirmar que:

$$a_1 = \lim_{n=\infty} a_1^{(n)}$$
$$a_2 = \lim_{n=\infty} a_2^{(n)}$$

Daremos daqui por diante o nome de variedades fechadas aos sub-~~xxxxx~~ grupos de G que são topológicamente fechados

Dados duas varieades fechadas G' e G'' contidos em G, diremos que elas estão em relação de soma directa, se existe uma decomposição de G,

$$G = G_1 \oplus G_2$$

tal que

$$G' \subset G_1$$
$$G'' \subset G_2$$

Então $H = G' + G''$ é uma variedade fechada de G e podemos escrever

$$H = G' \oplus G''$$

isto é:

Teorema 4- Se duas variedades fechadas G' e G'' estão em relação de soma directa existe uma variedade fechada H que é a soma directa de G' e G''.

Este teorema é uma consequência dos resultados anteriores

Definição: Diremos que dois conjuntos A e B estão em relação de soma directa

quando existir uma decomposição de G

$$G = G_1 \oplus G_2$$

tal que:

$$A \subset G_1$$

$$B \subset G_2$$

Então podemos enunciar o seguinte :

Teorema 5. Se dois conjuntos A e B estão em relação de soma directa, as menores variedades fechadas geradas respectivamente por A e B estão em relação de soma directa.

Resultado que é evidente se atendermos a que as menores variedades fechadas geradas por A e B estão respectivamente contidas em G_1 e G_2 e estão portanto em relação de soma directa.

Se A fôr um sub-grupo de G representaremos por $\mathcal{V}(A)$ a menor variedade fechada gerada por A, é claro que no nosso caso como G é um espaço de Hausdorff, será:

$$\mathcal{V}(A) = \overline{A} = A + A'$$

Teorema 6- Se dois sub-grupos A e B de G estão em relação de soma directa será

$$\mathcal{V}(A \dot{+} B) = \mathcal{V}(A) \oplus \mathcal{V}(B)$$

Em primeiro logar $\mathcal{V}(A)$ e $\mathcal{V}(B)$ estão em relação de soma directa em virtude do teorema 5.

Existe portanto uma variedade fechada H tal que

$$H = \mathcal{V}(A) \oplus \mathcal{V}(B)$$

Resta-nos portanto mostrar que

$$H = \mathcal{V}(A \dot{+} B)$$

ora

$$\mathcal{V}(A \dot{+} B) = (\overline{A \dot{+} B}) = (A \dot{+} B) + (A \dot{+} B)'$$

era em virtude do teorema 3

$$(A \dot{+} B)' = A' \dot{+} B'$$

e portanto

(1) $$\nabla(A \dot{+} B) = (A \dot{+} B) + (A' \dot{+} B')$$

Por outro lado

$$\nabla(A) = A + A'$$

$$\nabla(B) = B + B'$$

e

$$H = \nabla(A) \oplus \nabla(B) = (A + A') \dot{+} (B + B')$$

e portanto H é formado pelo conjunto dos elementos, que pertencem a:

$$A \dot{+} B$$

$$A' \dot{+} B'$$

$$A \dot{+} B'$$

$$A' \dot{+} B$$

Logo

(2)

$$H = (A \dot{+} B) + (A' \dot{+} B') + (A \dot{+} B') + (A' \dot{+} B)$$

Comparando (1) e(2) vê-se imediatamente que:

$$\nabla(A \quad B) \subset H$$

Para provarmos o teorema resta-nos mostrar que os elementos de $(A \dot{+} B')$ e $(A' \dot{+} B)$ são ainda elementos de $(A \dot{+} B)$ ou $(A' \dot{+} B')$.

1º)Mostremos que os elementos de $(A \dot{+} B')$ são elementos de $(A \dot{+} B)$ ou de $(A' \dot{+} B')$

Com efeito, seja $a \in A$ e $b \in B'$ então $a + b$ é um elemento $(A \dot{+} B')$.

Por outro lado

$$b = \lim_{n=\infty} b^{(n)} \quad \text{onde } b^{(n)} \in B$$

logo

$$a + b = \lim_{n=\infty} (a + b^{(n)})$$

Ora

$$(a+b^{(\omega)}) \in A \dot{+} B$$

e então a+b é limite de uma sucessão de elemento de $A \dot{+} B$ e portanto:

$$a+b \in (A \dot{+} B)' = (A' \dot{+} B')$$

Do mesmo modo se mostrava que os elementos ~~xxxx~~ de $(A' \dot{+} B)$ são elementos de $(A' \dot{+} B')$.

Acabamos portanto de mostrar que

$$H = (A \dot{+} B) + (A' \dot{+} B')$$

e portanto c.q.d. que:

$$\sqrt{(A)} \dot{+} \sqrt{(B)} = \sqrt{(A \dot{+} B)}$$

Resultado que se pode escrever sob a forma:

$$\overline{(A \dot{+} B)} = \overline{A} \dot{+} \overline{B}$$

Resultado que é válido para os sub-grupos de G que estão em relação de ~~xx~~ soma directa. Note-se que a hipótese de que G é um grupo perfeitamente decomponivel intervém efectivamente na demonstração dêste teorema. Existe portanto uma connexão entre a relação de "fermeture" e a relação de soma directa análoga a relação da topologia abstracta:

$$\overline{(A+B)} = \overline{A} + \overline{B}$$

que desempenha um papel tão importante em topologia abstracta, veja Kuratowski [1] pag. 15 e seguintes.

Concebe-se assim que a noção de grupo abeliano topológico perfeitamente decomponivel desempenhe em Análise abstracta um papel importante.

Teorema 7-Se A e B são dois grupos abelianos perfeitamente decomponiveis e se

$$A = A_1 \oplus A_2$$

$$B = B_1 \oplus B_2$$

onde A_1 e B_1, bem como A_2 e B_2 são topo-isomorfos, então A e B são ~~ainda~~ também topo-isomorfos.

110
2

Com efeito sejam

$$B_1 = \varphi(A_1)$$
$$B_2 = \varphi(A_2)$$

dois topo-isomorfismos. Seja

$$a = a_1 + a_2$$

onde

$$a \in A \ , \ a_1 \in A_1 \ , \ a_2 \in A_2$$

Consideremos a transformação definida em A

$$\Phi(a) = \varphi(a_1) + \varphi(a_2) = b = b_1 + b_2$$

onde

$$b_1 = \varphi(a_1) \in B_1$$
$$b_2 = \varphi(a_2) \in B_2$$

É fácil de vêr que $\Phi(a)$ transforma A em B e que existe a transformação inversa

$$\Phi^{-1}(b) = \varphi^{-1}(b) \neq \varphi^{-1}(b_2)$$

Reconhece-se imediatamente que $\Phi(a)$ é um isomorfismo.

Demonstraremos agora que $\Phi(a)$ é uma transformação continua de A em B. Para isso seja b um ponto qualquer de B e V(b) uma vizinhança qualquer de de b. Consideremos a decomposição

$$b = b_1 + b_2$$

Por hipótese existem duas vizinhanças $V(b_1)$ e $V(b_2)$ tais que

$$V(b_1) + V(b_2) \subset V(b)$$

Sejam $V_1(b_1) = B \wedge V(b_1)$

$$V_2(b_2) = B_2 \wedge V(b_2)$$

Será ainda

$$V_1(b_1) + V_2(b_2) \subset V(b)$$

Seja

$$a = \Phi^{-1}(b)$$

$$a = a_1 + a_2$$

onde

111

$$a_1 = \varphi^{-1}(b_1)$$
$$a_2 = \varphi^{-1}(b_2)$$

Como φ e ψ são funções bicontinuas existem

$$V_1(a_1) \subset A \quad e \quad V_2(a_2) \subset A_2$$

tais que

$$\varphi[V_1(a_1)] \subset V_1(b_1)$$
$$\psi[V_2(a_2)] \subset V_2(b_2)$$

Por outro lado como A é perfeitamente decomponivel existe V(a) tal que

$$V_1(a) \subset V_1(a_1)$$
$$V_2(a) \subset V_2(a_2)$$

O que nos permite reconhecer imediatamente que

$$\Phi[V(a)] \subset V(b)$$

isto é que Φ é uma função continua de A em B. Do mesmo modo se demonstrava que Φ^{-1} é uma função continua de B em A.

Teorema 8 Se um grupo abeliano G perfeitamente decomponivel é topo-isomorfo ao grupo abeliano $H = \Phi(G)$ (onde Φ é um topo-isomorfismo) e se

$$G = G_1 \oplus G_2$$

será

$$H = H_1 \oplus H_2$$

onde

$$H_1 = \Phi(G_1)$$
$$H_2 = \Phi(G_2)$$

A demonstração é imediata.

Topologia induzida num sub-grupo fechado. Seja G_1 um sub-grupo fechado contido em G, então $G = G_1 \oplus G_2$. É as vezes conveniente substituir as familias de vizinhanças dos elementos de G_1 por outras que só contenham elementos de G_1 e que constituam em G, uma familia equivalente à primeira. Seja V(a) uma vizinhança qualquer de $a \in G_1$; V(a) contém em regra pontos que não pertencem a G_1.

Seja $V_{(1)}(a) = G_1 \wedge V_1(a)$. Seja A um conjunto qualquer contido em G_1; se α é um ponto de acumulação de A em relação à familia de vizinhanças de V(a), α é ainda um ponto de acumulação de A em relação à familia de vizinhanças $V_{(1)}(a)$ e reciprocamente. Diremos que $V_{(1)}(a)$ são as vizinhanças induzidas em G_1, e que a topologia assim determinada em G_1 é induzida pela primeira.

Teorema 9- Toda a variedade fechada G_1 de um grupo G perfeitamente decomponivel é um grupo perfeitamente decomponivel.

Seja G' um sub-grupo fechado de G_1 então existe G'' tal que

$$G = G' \oplus G''$$

Como G_1 contém G' será:

$$G_1 = G' \oplus (G_1 \wedge G'')$$

ora $G_1' = G_1 \wedge G''$ é um sub-grupo fechado de G_1, logo existe G_1' tal que

$$G_1 = G' \oplus G_1'$$

portanto G_1 é decomponivel. Seja $\underline{a}$ um elemento qualquer de G_1, será

$$a = a' + a''$$

onde

$$a' \in G' \text{ e } a'' \in G''$$

Dadas as vizinhanças $V(a')$ e $V(a'')$ existe uma vizinhança $V(a)$ tal que

$$V'(a) \subset V(a')$$

$$V''(a) \subset V(a'')$$

onde $V'(a)$ e $V''(a)$ representam o conjunto dos componentes de V(a) segundo as variedades G e G.

É evidente que $a'' \in G_1'$. Seja:

$$V_1(a'') = V(a'') \wedge G_1$$

$$V_1(a') = V(a') \wedge G_1$$

$$V_1(a) = V(a) \wedge G_1$$

Na topologia induzida em G_1 $\underline{a}$, $\underline{a}'$ e $\underline{a}''$ têm por vizinhanças $V(a)$ e $V(a)$ e $V_1(a'')$.

113
2

Seja por outro lado:

$$V'_1(a) = V''(a) \wedge G'_1$$

é claro que

$$V'(a) \subset V_1(a')$$
$$V'_1(a) \subset V_1(a'')$$

onde $V'(a)$ e $V'_1(a)$ representam o conjunto dos componentes de $V_1(a)$ segundo as variedades G' e G'_1; e portanto G_1 é perfeitamente decomponível.

§ 4 - Dimensão algébrica dos grupos perfeitamente decomponíveis

12 - Estamos agora em condições de poder demonstrar o seguinte teorema:

Teorema. Se dois grupos abelianos A e B peefeitamente decomponíveis têm a mesma dimensão algébrica é possivel decompôr cada um dêles na soma directa de duas variedades fechadas respectivamente topo-isomorfas. Isto é: é possivel determinar duas decomposições:

$$A = A_1 \oplus A_2$$
$$B = B_1 \oplus B_2$$

tais que

$$A_1 \cong B_1$$
$$A_2 \cong B_2 .$$

Demonstração. Por hipótese A e B têm a mesma dimensão algébrica e portanto existe um topo-isomorfismo φ que transforma A num sub-conjunto de B, a saber $B^{(1)} = \varphi(A)$ e existe outro topo-isomorfismo ψ que transforma B num sub-conjunto de A, a saber $A^{(1)} = \psi(B)$. Por outro lado como A e B são topologicamente fechados, isto é, $A = \overline{A}$ e $B = \overline{B}$ será também $A^{(\omega)} = \overline{A^{(1)}}$ e $B^{(\omega)} = \overline{B^{(1)}}$ e portanto $A^{(\omega)}$ e $B^{(\omega)}$ são variedades fechadas contidas respectivamente em A e em B. Seja F_1 uma variedade fechada contida em A

$$(1) \qquad F_1 \subset A$$

teremos

$$(2) \qquad \varphi(F_1) \subset \varphi(A)$$

e

$$(3) \qquad F_1 \cong \varphi(F_1)$$

Do mesmo modo se F_2 é uma variedade fechada contida em B

$$(4) \qquad F_2 \subset B$$

teremos

$$(5) \quad \Psi(F_2) \subset \Psi(B)$$

e

$$(6) \quad F_2 \cong \Psi(F_2)$$

Por outro lado como $\Psi(A)$ é variedade fechada contida em B

$$(7) \quad \Psi(A) \subset B$$

de (2) e (7) resulta que

$$(8) \quad \Psi(F_1) \subset B$$

e portanto

$$(9) \quad \Psi[\Psi(F_1)] \subset \Psi(B)$$

e de (4), (5) e (6), resulta que

$$(10) \quad \Psi(F_1) \cong \Psi[\Psi(F_1)]$$

como por hipótese

$$(11) \quad \Psi(B) \subset A$$

de (4), (5), (8), (9) e (11) resulta que

$$(12) \quad \Psi[\Psi(F_1)] \subset A$$

De (3), (6) e (10) resulta que

$$(13) \quad F_1 \cong \Psi[\Psi(F_1)]$$

Ponhamos para simplificar a escrita

$$\Phi = (F) \qquad \Psi = (F)$$

É claro que Φ sendo o produto de dois topo-isomorfismos é um é um topo-isomorfismo. As relações (12) e (13) mostram-nos que Φ transforma toda e qualquer variedade fechada F_1 contida em A numa outra variedade fechada $\Phi(F_1)$ contida em A e que é topo-isomorfa a F_1. Em resumo, se F_1 é uma variedade fechada contida em A, será:

$$F_1 \subset A$$

$$\Phi(F_1) \subset A$$

$$F_1 \cong \Phi(F_1)$$

onde $\Phi(F_1)$ é uma variedade fechada.

Podemos portanto ainda afirmar que

$$\Phi^2(F_1) = \Phi[\Phi(F_1)] \subset A$$

e

$$\Phi^2(F_1) \cong \Phi(F_1) \cong F_1$$

Duma maneira geral

$$\Phi^{(n)}(F_1) = \Phi[\Phi^{(n-1)}(F_1)] \subset A$$

e

$$\Phi^{(n)}(F_1) \cong F_1$$

onde $\Phi^{(n)}(F_1)$ é uma variedade fechada. Daqui resulta imediatamente que :

$$A \supset \Phi(A) \supset \Phi^2(A) \supset \ldots \supset \Phi^{(n)}(A) \supset \ldots$$

e que

$$A \cong \Phi^{(n)}(A)$$

Posto isto consideremos a variedade fechada $\Psi(B)$ contida em A. Como A é um espaço decomponível será:

$$(14) \qquad A = R \oplus \Psi(B)$$

onde

$$(15) \qquad R = A \ominus \Psi(B)$$

é a variedade fechada complementar de $\Psi(B)$.

Notemos que

$$(16) \qquad \Phi(A) \subset \Psi(B) \subset A$$

E que

$$(17) \qquad \Phi(A) = \Phi(R) + \Phi[\Psi(B)]$$

visto que Φ é um topo-isomorfismo, $\Phi(R)$ está em relação de soma directa com R, visto que

$$\Phi(R) \subset (B)$$

De (16) resulta que :

$$(18) \qquad \Phi^{(2)}(A) \subset \Phi[\Psi(B)] \subset \Phi(A)$$

e de um modo geral que

$$\Phi^n(A) \subset \Phi^{n-1}[\Psi(B)] \subset \Phi^{n-1}(A) \tag{19}$$

De (17) resulta que

$$\Phi^2(A) = \Phi^2(R) \oplus \Phi^2[\Psi(B)] \tag{20}$$

e de um modo geral que:

$$\Phi^n(A) = \Phi^n(R) \oplus \Phi^n[\Psi(B)] \tag{21}$$

De (16), (18) e (19) resulta que $\Phi^n(A)$ está em relação de soma directa com R visto que:

$$\Phi^n(A) \subset \Psi(B) \tag{22}$$

e portanto o mesmo acontece com $\Phi^n(R)$ em virtude de (21). Podemos mesmo afirmar que $\Phi^i(R)$ está em relação de soma directa com $\Phi^j(R)$ se $i \neq j$.

Seja então

$$A^{(n)} = R \oplus \Phi(R) \oplus \Phi^2(R) \oplus \ldots \oplus \Phi^n(R)$$

$A^{(n)}$ é uma variedade fechada de A.

Representaremos por

$$A_1 = R \overset{\vee}{\oplus} \Phi(R) \overset{\vee}{\oplus} \Phi^2(R) \overset{\vee}{\oplus} \ldots \overset{\vee}{\oplus} \Phi^n(R) \overset{\vee}{\oplus} \ldots$$

a mesma variedade fechada que contém $A^{(n)}$ qualquer que seja n, e seja

$$S = \Phi(R) \overset{\vee}{\oplus} \Phi^2(R) \overset{\vee}{\oplus} \ldots \overset{\vee}{\oplus} \Phi^n(R) \overset{\vee}{\oplus} \ldots$$

a mesma variedade fechada que contém

$$S^{(n)} = \Phi(R) \oplus \Phi^2(R) \oplus \ldots \oplus \Phi^n(R)$$

qualquer que seja n. Em virtude de (22) é evidente que

$$S^{(n)} \subset \Psi(B)$$

e portanto que

$$S \subset \Psi(B)$$

Nestas condições R e S estão em relação de soma directa.

Representaremos por

$$A_0 = R \dot{\oplus} \underline{\Phi}(R) \dot{\oplus} \underline{\Phi}^2(R) \dot{\oplus} \cdots \dot{\oplus} \underline{\Phi}^n(R)$$

o conjunto dos elementos da forma

$$a = a_0 + a_1 + \cdots + a_n \qquad (n \text{ qualquer})$$

onde

$$a_0 \in R$$

$$a_i \in \underline{\Phi}^i(R)$$

É claro que A_0 é um sub-grupo de A.

Representaremos por

$$S_0 = \underline{\Phi}(R) \dot{\oplus} \underline{\Phi}^2(R) \dot{\oplus} \cdots \dot{\oplus} \underline{\Phi}^n(R) \dot{\oplus} \cdots$$

o conjunto dos elementos da forma

$$s_0 = a_1 + a_2 + \cdots + a_n \qquad (n \text{ qualquer})$$

então S_0 é um sub-grupo de $\Psi(R)$ que está portanto em relação de soma directa com R. É evidente que

$$A_0 = R \dotplus S_0$$

Nestas condições A é a menor variedade fechada que contém A_0 e S é a menor variedade fechada que contém S_0.

Em virtude do teorema 6 do parágrafo precedente podemos portanto afirmar que:

$$(23) \quad A_1 = \overline{A_0} = \overline{(R \dotplus S_0)} = \overline{R} \dotplus \overline{S_0}$$

$$= \overline{R} \dotplus \overline{S} = R \oplus S$$

isto é:

$$(24) \quad A_1 = R \oplus [\underline{\Phi}(R) \overset{\cdot}{\oplus} \underline{\Phi}^2(R) \overset{\cdot}{\oplus} \cdots \overset{\cdot}{\oplus} \underline{\Phi}^n(R) \overset{\cdot}{\oplus} \cdots]$$

Notemos agora por outro lado que

$$\underline{\Phi}(A^n) = \underline{\Phi}(R) \oplus \underline{\Phi}^2(R) \oplus \cdots \oplus \underline{\Phi}^{n+1}(R) = S^{n+1}$$

Como A_1 é a menor variedade fechada que contém $A^{(n)}$ qualquer que seja n, $\underline{\Phi}(A_1)$ é a menor variedade fechada que contém $\underline{\Phi}(A^n) = S^{n+1}$ qualquer que seja n e portanto

$$(25) \quad \underline{\Phi}(A_1) = S$$

Nestas condições podemos escrever, em virtude de (23) e (25)

(26) $A_1 = R \oplus \Phi(A_1)$

Seja A_2 a variedade fechada complementar de A_1, isto é:

$$A_2 = A \ominus A_1$$

ou (27) $\boxed{A = A_1 \oplus A_2}$

Como A_1 é uma variedade fechada de A, $\psi(A_1)$ será uma variedade fechada de B, seja:

(28) $\boxed{B_1 = \psi(A_1)}$

Seja B_2 a variedade fechada complementar de B_1, isto é:

$$B_2 = B \ominus B_1$$

ou (29) $\boxed{B = B_1 \oplus B_2}$

daqui se deduz

$$\psi(B) = \psi(B_1) \oplus \psi(B_2)$$

isto é:

$$\psi(B_2) = \psi(B) \ominus \psi(B_1)$$

ora de (14) deduz-se que

$$\psi(B) = A \ominus R$$

e portanto:

$$\psi(B_2) = (A \ominus R) \ominus \psi(B_1)$$

Por outro lado de (28) resulta que

$$\psi(B_1) = \psi[\psi(A_1)] = \Phi(A_1)$$

e portanto

$$\psi(B_2) = (A \ominus R) \ominus \Phi(A_1)$$
$$= A \ominus [R \oplus \Phi(A_1)]$$

ou em virtude de (26)

$$\psi(B_2) = A \ominus A_1 = A_2$$

isto é:

(30) $\boxed{\psi(B_2) = A_2}$

As fórmulas (27), (28), (29) e (30) demonstram o teorema enunciado.

Corolário - Se dois grupos abelianos A e B perfeitamente decomponíveis têm a mesma dimensão algébrica então A e B são topo-isomorfos. É uma consequência imediata do teorema 7 do parágrafo precedente.

§5- Grupos abelianos

13 - **Definição.** Um grupo abeliano diz-se normado se existe um funcional - a que daremos o nome de norma de x e que representaremos pela notação $\|x\|$ - que satisfaz às seguintes condições:

N_0 - Se $x=y$ será $\|x\|=\|y\|$

N_1 - $\|x\|\neq 0$ se $x\neq\theta$

N_2 - $\|\theta\|=0$

N_3 - $\|x\|=\|-x\|$

N_4 - $\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$

Verifica-se imediatamente que G é um espaço distanciado se definirmos a distância entre dois dos seus elementos pela condição

$$d(x,y)=\|x-y\|$$

Além disso G é um grupo abeliano topológico.

Diz-se que G é completo se toda a sucessão convergente [isto é tal que dados $\varepsilon>0$ existe $N(\varepsilon)$ tal que

$$\|x_p-x_q\|<\varepsilon$$

para

$$p,q>N(\varepsilon)\ ]$$

tender para um limite; isto é existe $x\in G$ tal que dado $\varepsilon>0$ existe $N(\varepsilon)$ que verifica a condição

$$\|x-x_p\|<\varepsilon$$

$$p>N(\varepsilon)$$

14 - **Noção de Série.** A noção de grupo abeliano normado e completo é importante porque nêste espaço se pode fazer uma teoria das séries em que se demonstram muitos dos resultados elementares conhecidos na teoria das séries de números.

Seja x_n uma sucessão de elementos de G, se

$$A_n=x_1+x_2+\cdots+x_n$$

tende para um limite S quando n aumenta diremos que a série

$$\sum_{i=1}^{\infty} x_i$$

é convergente e que a sua soma é S.

Para que uma série seja convergente é necessário e suficiente que dado $\delta > 0$ exista $N(\delta)$ tal que

$$\| s_m - s_n \| < \delta$$

para

$$m, n > N(\delta)$$

Uma série diz-se absolutamente convergente se a série

$$\sum_{i=1}^{\infty} \| x_i \|$$

fôr convergente. Demonstra-se então que a série dada é convergente.

Teorema. Se a série Σy_n é absolutamente convergente e se $\| x_n \| \leq c \| y_n \|$ a série Σx_n é absolutamente convergente.

Teorema de Cauchy. Se $\overline{\lim}_{n=\infty} \sqrt[n]{\| x_n \|} < 1$ a série Σx_n é absolutamente convergente.

Teorema de Alembert. Se existe $\theta \geq 1$ e N tal que para $n > N$ seja $\frac{\| x_{n+1} \|}{\| x_n \|} < \theta < 1$ a série dada é absolutamente convergente.

Indicaremos êstes teoremas a título de exemplo, mas a maior parte dos teoremas sôbre séries absolutamente convergentes são ainda válidos.

15 - Espaço G_{∞}^{2}. A partir do espaço G é possivel construir outros. Consideremos por exemplo o espaço G_{∞}^{2} das sucessões de elementos de G

$$X = (x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots)$$

tais que

$$\sum_{i=1}^{\infty} \|x_i\|^2 < +\infty$$

é fácil mostrar que G_∞^2 é um grupo abeliano normado de acôrdo com as seguintes definições

1ª) **Igualdade.** $X = Y$ se $x_i = y_i$

2ª) **Adição.** $X + Y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \ldots, x_n + y_n, \ldots)$

3ª) **Norma.** $\|X\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{\infty} \|x_i\|^2}$

Não sabemos se G_∞^2 é um espaço completo.

16 - **Grupos normados perfeitamente decomponiveis.** G é um grupo perfeitamente decomponivel quando êle fôr decomponivel e quando

$$G = G_1 \oplus G_2$$
$$x = x_1 + x_2$$

implicar que

$$\|x\| = \|x_1\| + \|x_2\|$$

Todos os resultados do § precedente se aplicam a êstes grupos.

17 - **Noção de derivada.** Seja t uma variável real e x um elemento de um grupo abeliano G normado e completo, seja x (t) uma função contínua de t definida num certo intervalo (t_0, t_1), diremos que x (t) tem uma derivada x' (t) no ponto t se existir o limite

$$\lim_{h=0} \frac{x(t+h) - x(t)}{h} = x'(t) = \frac{d}{dt} x(t)$$

qualquer que seja a maneira como h tende para zéro.

Demonstra-se imediatamente que

$$\frac{d}{dt}[x(t) + y(t)] = \frac{d}{dt} x(t) + \frac{d}{dt} y(t)$$

É também possivel definir a noção de integral de x (t). Também se define a noção de derivada de x (z) onde z é um número completo etc.

§ 6 - Espaços de Banach

18 - **Definição.** Diz-se que (B) é um espaço de Banach se (B) fôr um espaço vectorial, onde se define uma norma que gosa das seguintes propriedades

1ª) (B) é um grupo abeliano normado

2ª) $\|\alpha x\| = |\alpha| \, \|x\|$ qualquer que seja o número α.

3ª) O espaço é completo em relação à norma.

Como caso particular podemos indicar o espaço de Hilbert.

19 - **Funções analíticas.** É possível num espaço (B) fazer uma teoria das funções analíticas análoga à teoria de Weierstrass. Seja z um número complexo e a_0 , a_1, ..., a_n, ... uma sucessão de elementos de (B), consideremos a série

(1) $$f(z) = \sum_{n=1}^{\infty} z^n a_n$$

Teorema de Abel. Se $\|z_0^n a_n\| < M$ **onde M é positivo e** $z_0 \neq 0$ **a série é convergente para** $|z| < |z_0|$.

Pode-se definir o raio de convergência da série (1) como sendo o maior número positivo r tal que a série (1) é convergente para $|z| < r$ e mostrar que

$$r = \lim_{n=\infty} \sqrt[n]{\|a_n\|}$$

teorema análogo ao de Cauchy - Hadamard. A aparelhagem de Cauchy é aplicavel em grande parte a estas funções.

20 - **Operadores lineares.** Diz-se que o operador T (x) definido em (B) e cujo contra-domínio pertence a (B), ou a outro espaço (B), é linear quando

1ª) $T(x+y) = T(x) + T(y)$

2ª) $T(\alpha x) = \alpha \, T(x)$

3ª) $T(x)$ é contínuo

Na realidade pode-se suprimir a condição 2º).

É fundamental o seguinte:

Teorema de Banach. Para que T (x) seja um operador linear é necessário e suficiente que exista um número real $K > 0$ tal que

$$\| T(x) \| \leq K \| x \|$$

Veja Banach (3), pag. 151 - 153.

Pôsto isto é facil de verificar que:

Teorema. O conjunto dos operadores lineares definidos num espaço (:B), formam um espaço vectorial normado quando se define a norma de um operador linear T (x), como sendo o menor número positivo K que verifica a condição

$$\| T(x) \| \leq K \| x \|$$

Representaremos a norma de um operador linear T (x) pela notação $|T|$.

21 - Variedades fechadas. Diremos que um sub-conjunto A de (B) é uma variedade fechada se A fôr um espaço vectorial e se $A' \subset A$. O contra-domínio de um operador linear T (x) é uma variedade fechada, e portanto T (x) representa um homomorfismo de (B) em A. Se T (x) admite um inverso, então T (x) é um isomorfismo.

Compreende-se assim a importância que tem o estudo da inversão dos operadores lineares.

A teoria dos operadores lineares definidos em (B) contém como caso particular a teoria das equações integrais de Fredholm, a teoria das matrizes infinitas etc.

§ 7 - Aneis vectoriais normados

22 - **Definição.** Um anel vectorial $\mathcal{A}$ diz-se normado quando existe um funcional - a que daremos o nome de norma do elemento T de $\mathcal{A}$ e que representaremos pela notação $|T|$ - que satisfaz às seguintes condições:

1º) $\mathcal{A}$ é um espaço de Banach em relação à norma.

2º) $|ST| \leq |S|\,|T|$

Suporemos que $\mathcal{A}$ é completo.

Esta noção também foi considerada por M. Nagumo [1] e dêste facto tivemos apenas conhecimento ha poucos mêses. Tinhamos sido levados a considerar esta noção como o objectivo de generalizarmos os resultados obtidos sôbre a aditividade dos núcleos de Fredholm e no verão de 1936, já tinhamos obtido os resultados que vamos indicar, nos números seguintes. Mas antes disso notemos que:

Teorema. - O conjunto dos operadores lineares definidos num espaço (B) formam um anel vectorial normado.

23 - **Resolvente.** Suporemos que $\mathcal{A}$ contém uma unidade E . Seja $A \in \mathcal{A}$ daremos o nome de resolvente de A à função de parâmetro complexo λ definida por

$$R(A;\lambda) = A + \lambda A^2 + \cdots + \lambda^{n-1} A^n + \cdots$$

que é uma função holomorfa de λ , cujo contra-domínio pertence a $\mathcal{A}$, no interior do círculo

$$|\lambda| < \frac{1}{|A|}$$

É fácil de mostrar que

$$(E + \lambda A)^{-1} = E + \lambda R(A;\lambda)$$

Diremos que A e B são elementos aditivos se

$$R(A+B;\lambda) = R(A;\lambda) + R(B;\lambda)$$

e para isso é necessário e suficiente que

$$(A+B)^n = A^n + B^n$$

ou ainda que (veja-se capítulo II)

$$AB + BA = 0$$
$$ABA + BAB = 0$$

Os resultados que obtivemos, A. Monteiro [2] pag. 54, sôbre a aditividade das resolventes de dois núcleos de Fredholm são ainda válidos em $\mathfrak{A}$

24 - **Espaços de Banach com operadores.**

Seja $\mathfrak{E}$ um espaço de Banach completo, diremos que $\mathfrak{E}$ admite $\mathfrak{A}$ como domínio de operadores à esquerda se a cada elemento $x \in \mathfrak{E}$ e $A \in \mathfrak{A}$ corresponde um elemento y de $\mathfrak{E}$

$$y = A(x) = Ax$$

tal que:

1º) $A(x+y) = A(x) + A(y)$

2º) $A(\alpha x) = \alpha\,[A(x)] = \alpha\, A(x)$

3º) $(A+B)(x) = A(x) + B(x)$

4º) $AB(x) = A\,[B(x)]$

5º) $E(x) = x$

6º) $\|A(x)\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$

Consideremos então as duas equações

$$E(x_1) - \lambda\, A(x_1) = E(y)$$
$$E(x_2) - \lambda\, A(x_2) = E(y)$$

ou

(1) $(E - \lambda A)\, x_1 = y$

(2) $(E - \lambda B)\, x_2 = y$

e a equação

(3) $[E - \lambda(A+B)]\, x = y$

Estas três equações admitem soluções para valores de λ situados no interior do menor dos três círculos

$$|\lambda| \leq \frac{1}{|A|}\ ,\ |\lambda| \leq \frac{1}{|B|}\ ,\ |\lambda| \leq \frac{1}{|A+B|}$$

Para que as soluções

$$(1')\quad x_1 = [E + \lambda R(A;\lambda)]\, y$$

$$(2')\quad x_2 = [E + \lambda R(A;\lambda)]\, y$$

$$(3')\quad x = [E + \lambda R(A+B;\lambda)]\, y$$

Verifiquem a condição:

$$x - y = (x_1 - y) + (x_2 - y)$$

é necessário e suficiente que A e B sejam aditivos.

§ 8 - Análise dos conjuntos abstractos

25 - Seja E um conhjunto abstracto qualquer, e $\mathscr{E}$ o conjunto dos sub-conjuntos de E.

Já mostrámos que é possivel definir em $\mathscr{E}$ uma álgebra $\mathscr{A}$ e uma topologia $\mathscr{T}$ e portanto $\mathscr{E}$ é um espaço algébrico-topológico.

Vamos agora mostrar que $\mathscr{E}(\mathscr{A}, \mathscr{T})$ é um espaço analítico.

Sob o ponto de vista algébrico $\mathscr{E}$ é um anel especial e sob o ponto de vista topológico $\mathscr{E}$ é um espaço L .

Seria fácil de verificar que dadas duas sucessões de conjuntos

$$A_1, A_2, \dots, A_n, \dots$$
$$B_1, B_2, \dots, B_n, \dots$$

se tem:

1º) $\overline{\lim_{n=\infty}} (A_n + B_n) = \overline{\lim_{n=\infty}} A_n + \overline{\lim_{n=\infty}} B_n$

2º) $\underline{\lim_{n=\infty}} (A_n + B_n) \supset \underline{\lim_{n=\infty}} A_n + \underline{\lim_{n=\infty}} B_n$

3º) $\overline{\lim_{n=\infty}} (A_n \wedge B_n) \subset (\overline{\lim_{n=\infty}} A_n) \wedge (\overline{\lim_{n=\infty}} B_n)$

4º) $\underline{\lim_{n=\infty}} (A_n \wedge B_n) = (\underline{\lim_{n=\infty}} A_n) \wedge (\underline{\lim_{n=\infty}} A_n)$

5º) $\underline{\lim_{n=\infty}} (A_n - B_n) \in \underline{\lim_{n=\infty}} A_n - \underline{\lim_{n=\infty}} B_n$

6º) $\underline{\lim_{n=\infty}} (A_n - B_n) \supset \underline{\lim_{n=\infty}} A_n - \overline{\lim_{n=\infty}} B_n$

Nestas condições se existirem

$$\lim_{n=\infty} A_n$$

$$\lim_{n=\infty} B_n$$

será $\lim_{n=\infty} (A_n + B_n) = \lim_{n=\infty} A_n + \lim_{n=\infty} B_n$

$\lim_{n=\infty} (A_n - B_n) = \lim_{n=\infty} A_n - \lim_{n=\infty} B_n$

$\lim_{n=\infty} (A_n \wedge B_n) = (\lim_{n=\infty} A_n) \wedge (\lim_{n=\infty} B_n)$

portanto

$$F(A,B) = A+B$$
$$G(A,B) = A-B$$
$$H(A,B) = A \wedge B$$

são três funções contínuas de A e B e portanto $\mathfrak{E}$ é um espaço analítico. Fica assim mais uma vez posta em evidência a importância da noção de limite de uma sucessão de conjuntos.

26 - Equivalência e topo-isomorfismo

Como $\mathfrak{E}$ é um espaço algébrico-topológico, é possivel definir um topo-isomorfismo entre dois espaços $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{E}'$ associados a E e E', e dimensão algébrica de um espaço $\mathfrak{E}$.

Se E e E' são equivalentes $\mathfrak{E}$ e $\mathfrak{E}'$ também o são e é curioso notar que a equivalência que então existe entre $\mathfrak{E}$ e $\mathfrak{E}'$ é um topo-isomorfismo; portanto se E e E' são equivalentes $\mathfrak{E}$ e $\mathfrak{E}'$ têm a mesma dimensão algébrica.

Acabamos portanto de mostrar que na teoria dos conjuntos abstractos existe uma análise, que é indispensável considerar no estudo dessa teória.

O primeiro computador digital automático em universidades portuguesas (1968): A realização pioneira do Professor Doutor Rogério Silva de Sousa Nunes

José Joaquim Pereira Osório[1]

RESUMO

Esta comunicação tem lugar no dia 15 de fevereiro de 2018, dia em que se assinalam **50 anos da inauguração oficial** da entrada em funcionamento do **primeiro computador digital automático em Universidades Portuguesas**, na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, e da criação do Laboratório de Cálculo Automático (LACA) da mesma Faculdade.

O Computador foi instalado, em 1967, na sequência da atividade que vinha sendo desenvolvida pelo seu **Professor Catedrático Rogério Silva de Sousa Nunes**, oferecendo condições para a organização e o desenvolvimento do Laboratório.

Dada a importância dessa realização, não só na vida da Faculdade como também noutras instituições da época, a comunicação será iniciada com alguns dados biográficos daquele ilustre e saudoso Professor, apresentando-se, seguidamente, as características mais salientes do Computador e diferentes aspetos da sua Exploração.

ABSTRACT

This presentation takes place, today, 15 February 2018, the day of the **50th anniversary of the official opening** of service of the **first automatic digital computer in Portuguese Universities,** in the Faculty of Sciences, University of Porto, and giving rise to the Laboratory of Automatic Computing (LACA) of the Faculty.

The Computer was installed, in 1967, following the activity of its **Professor Rogério Silva de Sousa Nunes**, creating conditions for the organization and development of the Laboratory.

By taking into account the importance of such achievement, not only to the Faculty itself but also to many other institutions, this communication begins with some biographic data of so distinguished and remembered Professor, followed by references to the main characteristics of the Computer and to some details of its Exploitation.

[1] Professor Catedrático Jubilado da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (jposorio@fc.up.pt)

1. INTRODUÇÃO

Em primeiro lugar, cumpre-me agradecer à Senhora Secretária-Geral da Academia, Professora Doutora Maria Salomé Pais, a oportunidade que me dá para apresentar esta comunicação, hoje, dia em que se assinalam exatamente **50 anos** da inauguração oficial da entrada em funcionamento do **primeiro computador digital automático em Universidades Portuguesas**, na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, e da criação do Laboratório de Cálculo Automático (LACA) da mesma Faculdade (Figura 1).

Figura 1
Sala do Computador.

Figura 2
Professor Doutor Rogério Silva de Sousa Nunes.
8.10.1920-10.2.2000

O Computador foi instalado, em 1967, na sequência da atividade que vinha sendo desenvolvida pelo seu **Professor Catedrático Rogério Silva de Sousa Nunes**, oferecendo condições para a organização e desenvolvimento do Laboratório de Cálculo Automático.

Dada a importância dessa realização, não só na vida da Faculdade como também noutras instituições da época, a apresentação será iniciada com dados biográficos daquele ilustre e saudoso Professor, seguindo-se alguns dos aspetos mais salientes do Computador e da sua Exploração, terminando com referência a outras atividades do Professor até ao seu falecimento, no ano 2000.

2. O PROFESSOR DOUTOR ROGÉRIO SILVA DE SOUSA NUNES

O Professor Doutor Rogério Silva de Sousa Nunes nasceu em Lisboa, em 8 de Outubro de 1920. Frequentou o Liceu de Viana do Castelo até ao último ano desse Liceu, ou seja, o 6.º ano. No contexto desta apresentação será oportuno referir que, ainda durante essa fase, foi convidado pelo seu professor de Física a proferir uma palestra, dirigida aos colegas, que intitulou "**A Fada Electricidade**", revelando já aí especial atenção por uma área, então, em fase de grande desenvolvimento. Concluiu o terceiro ciclo no Liceu Nacional Sá de Miranda, em Braga, em 1939, com a classificação de 16 valores.

Nesse mesmo ano, 1939, matriculou-se no curso de Preparatórios Militares da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Com o início da Segunda Guerra Mundial, depois de alguns períodos de instrução, foi chamado, em 1 de Agosto de 1942, a prestar serviço militar, como oficial miliciano, ininterruptamente até 29 de Janeiro de 1946. Durante este período, para além de diferentes atividades que lhe mereceram alguns louvores, teve a oportunidade de frequentar um curso de **Oficial de Transmissões**, curso que lhe permitiu não só atingir o posto de Capitão Miliciano mas, principalmente, tomar contacto com o domínio da **Eletrónica**, o que se viria a revelar de grande utilidade na sua futura carreira docente.

Terminado o serviço militar obrigatório, licenciou-se em **Ciências Matemáticas**, em 1946, na Faculdade de Ciências da Universidade de Coimbra, e em **Engenharia Geográfica**, no ano seguinte, na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto.

Tendo sido contratado como Assistente da Secção de Matemática desta última Faculdade, regeu, até ao seu doutoramento, aulas práticas (como escreveria mais tarde, *por vezes **36 horas** de aula por semana*) de disciplinas tão diversas como Geometria Descritiva, Cálculo Infinitesimal, Análise Superior, Geodesia e Desenho Topográfico. Durante este período teve, ainda, a oportunidade de colaborar com os Professores Augusto Queiroz e Rios de Souza na edição do 1.º volume da publicação *Exercícios de Geometria Descritiva*.

Em 1949, transferiu-se para o **2.º Grupo (Matemática Aplicada) da 1.ª Secção da Faculdade (Matemática)** onde, para além da sua atividade docente no 1.º Grupo, passou a colaborar também na organização e desenvolvimento do novo Observatório Astronómico no Monte da Virgem, sob a direção do, então Primeiro Assistente, Doutor Manuel Gonçalves Pereira de Barros [1]. De salientar, a sua intervenção no projeto e montagem da parte elétrica do Círculo Meridiano de Espelho [2], onde, entre outras coisas, surgiu a necessidade de criar um Serviço de Tempo para o Observatório [3]. Como escreveria mais tarde, salientando as condições de trabalho nesse tempo – "*Iniciei sozinho o meu trabalho de investigação para criar, a partir do zero, o Serviço de Tempo para o novo Observatório Astronómico, que acabava de nascer.* ***Devo dizer que realizei todo o tipo de trabalho: desde electricista ou ferreiro até cientista de electrónica ou matemática...".***

Entretanto, participou na Assembleia Geral da União Astronómica Internacional (Roma, 1952), onde foi eleito **Membro da União**, e no Congresso Luso-Espanhol para o Progresso das Ciências (Coimbra,1956), onde apresentou uma comunicação intitulada *Micro-indicador eléctrico*. Estagiou durante os meses de Agosto e Setembro de 1957 no *Royal Greenwich Observatory*, Inglaterra; aproveitando esta deslocação, visitou os laboratórios de padrões de frequência dos *British Post Office* e *National Physical Laboratory*, procurando familiarizar-se com as técnicas de construção de Relógios de Quartzo de elevada precisão.

Concluiu as suas provas de doutoramento, em Ciências Matemáticas, em 16 de Maio de 1959, com a Dissertação ***A Conservação da Hora no Observatório Astronómico da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto*** [4], tendo sido aprovado com a elevada classificação de **19 valores**.

Por curiosidade e em ligação com o tema desta apresentação, recordamos o que o Professor Rogério Nunes escreveu numa outra ocasião, a propósito dos cálculos que teve de efetuar: "(…), *por exemplo, todos os cálculos da minha tese de doutoramento (sobre Astronomia instrumental, utilizando Matemática Aplicada e Electrónica), concluída em 1959, foram feitos usando* ***tabelas numéricas e máquinas de calcular manuais****…*".

Enquanto se dedicava, prioritariamente, à preparação da sua dissertação de doutoramento, desenvolveu, ainda, notável atividade no domínio das aplicações da eletrónica, o que conduziu não só à publicação de alguns trabalhos científicos como também à concretização de equipamento diverso no Observatório Astronómico.

Dentro da mesma área de trabalho prestou, também, apoio técnico ao Observatório Meteorológico da Faculdade, na Serra do Pilar, e a alguns serviços da Faculdade de Medicina, nomeadamente aos laboratórios de Radioisótopos e de Anatomia Patológica.

Depois do seu doutoramento regeu aulas teóricas e práticas de diferentes disciplinas, como são exemplo: Matemáticas Gerais para Economia e para Biologia; Probabilidades, Erros e Estatística; Análise Superior; Equações em Derivadas Parciais; Análise Numérica; Topografia; Tratamento Matemático de Observações; **Programação Automática**; Seminários Anuais destinados a alunos de Engenharia Geográfica e orientação científica de núcleos de Estágio de Matemática.

3. O COMPUTADOR DIGITAL AUTOMÁTICO NCR-ELLIOTT 4130

Interessando-se cada vez mais pelo domínio da computação automática, o Professor Rogério Nunes assistiu, na Holanda, nas férias da Páscoa de 1963, como representante da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, a um simpósio sobre **Cálculo Automático**, destinado a professores universitários.

Mantendo aquela mesma orientação, no ano académico seguinte, 1963/64, trabalhou em Ciência de Computadores e Análise Numérica, como *Senior Visitor*, no *Mathematical Laboratory* da Universidade de Cambridge, Inglaterra. Entre outras atividades, dedicou-se particularmente à investigação em *"GOTO Pairs"* para a memória rápida de **um novo computador** que vinha sendo desenvolvido. Os resultados desta investigação, incluindo trabalho laboratorial e o estudo do modelo matemático, foram apresentados numa publicação interna da Universidade de Cambridge intitulada *"Experiments with GOTO Pairs"*.

Regressado à Faculdade, passou a desenvolver esforços visando a aquisição de um **Computador Digital** destinado a apoiar o ensino e a investigação. Como consequência, voltou a Inglaterra, durante as férias de verão de 1966, com a missão de analisar as condições para a eventual escolha de um computador. Assistiu, junto de um fabricante inglês (Elliott), a cursos sobre programação e utilização do computador, bem como, procedeu à análise de questões técnicas ligadas com o possível fornecimento daquele equipamento. Aproveitando essa deslocação, visitou novamente o *Royal Greenwich Observatory* e, ainda, o Centro de Cálculo Automático da Universidade de Reading e o *Physical Department* do *Westfield Technical College* da Universidade de Londres.

No mesmo ano, 1966, regeu na Faculdade o primeiro curso livre de **Programação de um Computador Digital**. Posteriormente criou diversos ***programas*** para a exploração do Computador e organizou vários cursos livres com o fim de facilitar o futuro acesso a entidades públicas e privadas interessadas.

Foi, então, encarregado do estudo e da elaboração de parecer sobre eventuais propostas de fornecimento de um computador digital automático, ficando, ainda, responsável pela receção e instalação do computador bem como do seu arranque e manutenção em funcionamento.

Depois de conversações com representantes, no país, de fabricantes de computadores e após concurso público, foi entregue à Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, em **Dezembro de 1967**, o computador de 3.ª geração **NCR-ELLIOTT 4130 (*floating point*)** de **16k (24 bits)** (Figura 3).

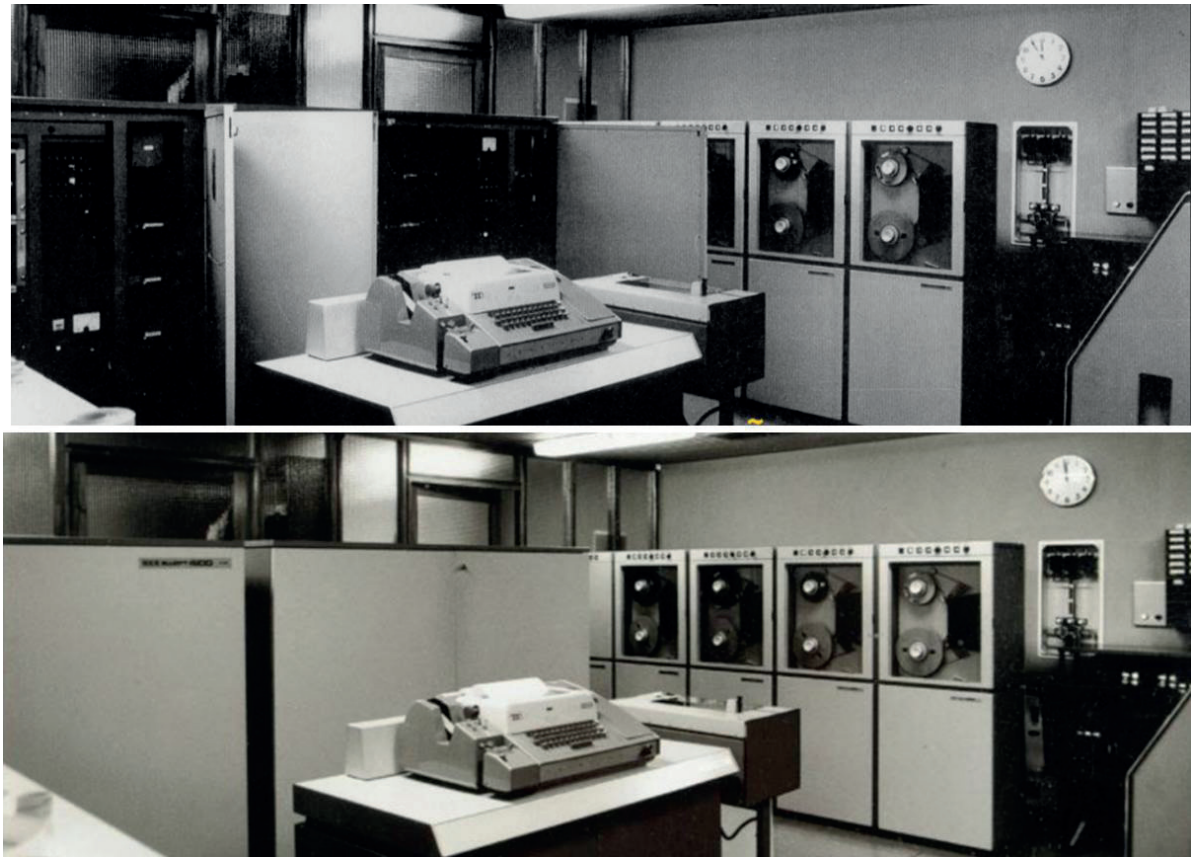


Figura 3
Dois aspectos da Sala do Computador.

Será oportuno salientar, neste momento, um comentário do Professor Rogério Nunes a propósito daquela aquisição, comentário que revela bem o cuidado e a atenção postos na escolha da melhor solução – *aquando do referido estágio, aquele fabricante propunha-se vender um sistema controlado pelo processador central 4120, cujas operações em vírgula flutuante se faziam por "software". Sabendo-se que daí a cerca de um ano podia ser entregue um processador com vírgula flutuante em "hardware", optou-se pela espera:* ***assim o computador trabalhou durante cerca de 15 anos, satisfatoriamente atualizado****.*

A configuração inicial do computador era a seguinte:
– Processador Central (operações em vírgula flutuante executadas por *hardware*);
– Memória (16 k palavras de 24 bits, 2 microssegundos de tempo de ciclo);
– Leitor (1000 caracteres/segundo);
– Perfurador de fita (100 caracteres/segundo);
– Máquina e Consola de Comando (Figura 4);
– 9 Máquinas *Teletype* (Figura 5).

Figura 4
Máquina e Consola de Comando.

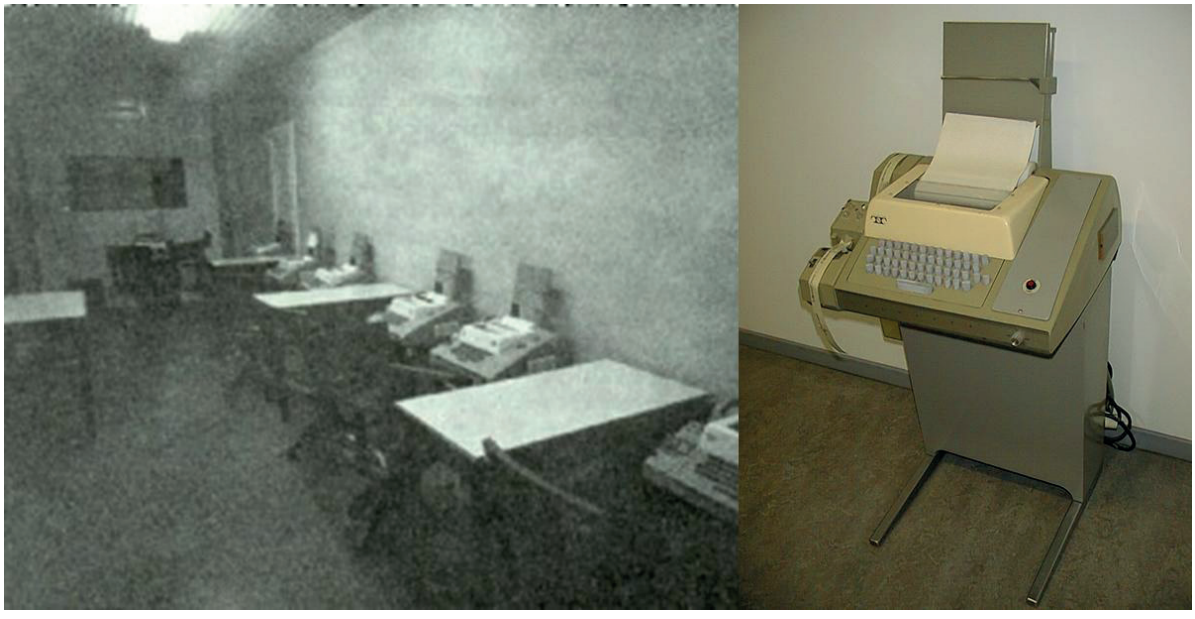


Figura 5
Máquinas *Teletype.*

Em princípios de 1969 foram adquiridas quatro unidades de Fita Magnética (33 k caracteres/segundo) (Figura 6), um Impressor de Linhas (1250 linhas/minuto, 160 caracteres/linha), um Traçador de Gráficos e uma máquina elétrica de comando (Figura 7).

Na sua **configuração mais avançada** o Sistema era constituído globalmente:
– 1 Processador Central (com unidade de vírgula flutuante e de transferência autónoma)
– 1 Memória (64 k palavras de 24 bits, 2 microssegundos)
– 4 Bandas Magnéticas
– 2 Unidades de Disco
– 1 Traçador de Gráficos
– 1 Impressor por Linhas

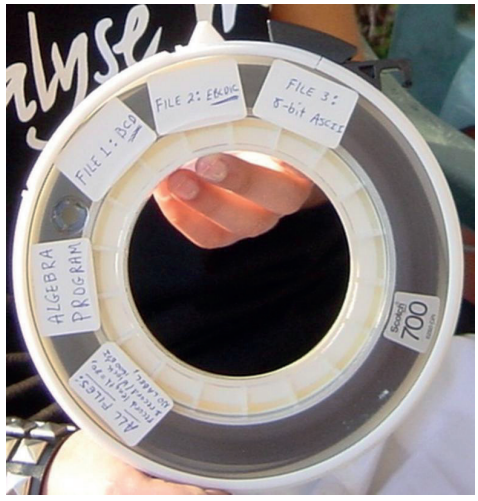


Figura 6
Fita Magnética.

Figura 7
Impressor por Linhas.

O acesso dos utilizadores era feito por um corredor ao lado da Sala do Computador (Figura 8).

Figura 8
Acesso dos utilizadores à Sala do Computador.

O Computador foi instalado, provisoriamente, no rés-do-chão da Biblioteca Geral da Faculdade de Ciências, ao tempo, no Edifício da Praça dos Leões (hoje Edifício da Reitoria da Universidade do Porto) (Figura 9).

Figura 9
Edifício onde ficou instalado, inicialmente, o Computador.

Como se disse anteriormente, **em 15 de Fevereiro de 1968**, faz hoje precisamente **50 anos**, foi inaugurado oficialmente pelo então Ministro da Educação Nacional, Professor Doutor Inocêncio Galvão Telles, o **Laboratório de Cálculo Automático (LACA) da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto**, *a primeira instituição universitária portuguesa a dispor de um computador digital automático* (Figuras 10 e 11).

Figura 10
O Ministro da Educação Nacional ouvindo as explicações do Professor Rogério Nunes na presença do autor desta comunicação.

Figura 11
Continuação das explicações junto do Computador.

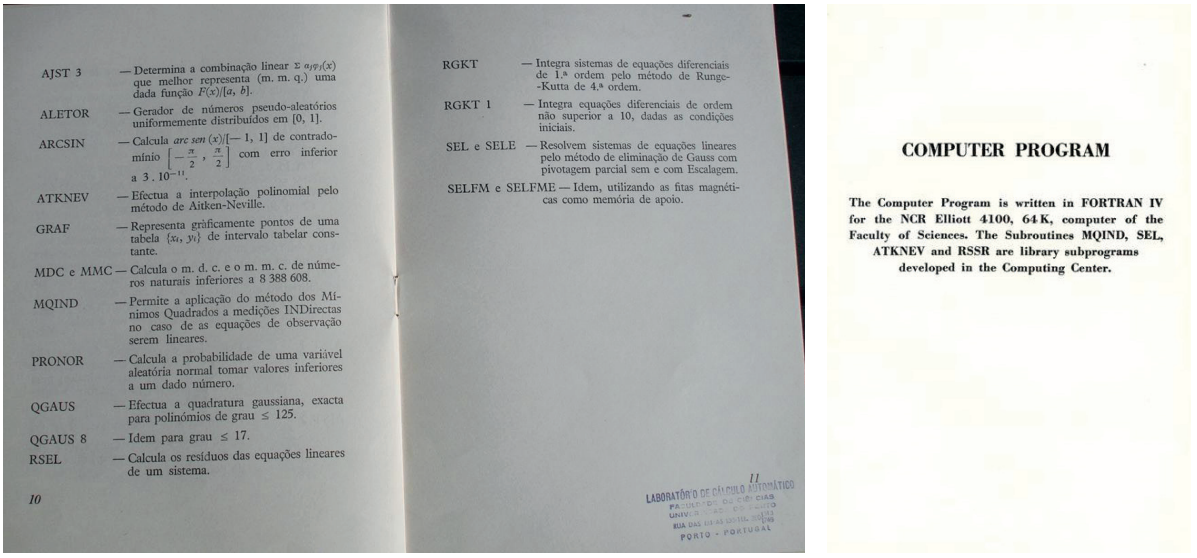
Como escreveu o próprio Professor Rogério Nunes, o *computador foi adquirido, fundamentalmente, para fins de Cálculo Científico. Dele podiam utilizar-se (e utilizaram-se, efectivamente) não só elementos da Faculdade como da própria Universidade do Porto e de outras universidades, bem como ainda entidades particulares. Para divulgar o seu uso – tratava-se de um dispendioso bem nacional, no então elevado valor de cerca de 20 mil contos – fizeram-se* ***dezenas de cursos livres de programação****, de grande abertura e larga audiência e desenvolveram-se cerca de* ***uma centena de subprogramas para utilização corrente no Cálculo Científico*** (Figura 12).

E mais adiante acrescentava, *após a inauguração oficial, o Computador passou a ser explorado em dois turnos de operação, das 8 às 20 horas. Cerca de um ano depois, tinham já trabalhado com o computador, em regime obrigatório, mais de 500 alunos de diversos cursos da Faculdade de Ciências. Tinham sido realizados 6 cursos livres de programação, frequentados por mais de 300 alunos, e estágios, no período de férias, para alunos de uma outra Faculdade. Além disso, o computador tinha sido usado intensamente por membros dos corpos docente e investigador de outras Universidades bem como por entidades oficiais e particulares diversas.*

Um outro aspeto a salientar, relativamente a este período de arranque das atividades, diz respeito aos tempos de utilização do computador no primeiro ano do seu funcionamento: o computador trabalhou cerca de 2100 horas, das quais 530 horas extraordinárias; em serviço didático foi utilizado durante cerca de 500 horas; em serviço de Institutos Universitários cerca de 100 horas e número análogo para o serviço individual universitário.

A partir do ano letivo 1967/68, o Professor Rogério Nunes introduziu no programa da disciplina de Elementos de Análise Numérica, frequentada por cerca de 300 alunos, um capítulo de programação em

FORTRAN IV, com uso intensivo do computador; no exame final, cada aluno era submetido a uma prova prática, no computador, com a duração de 3 horas.



AJST 3 — Determina a combinação linear $\Sigma a_j \varphi_j(x)$ que melhor representa (m. m. q.) uma dada função $F(x)/[a, b]$.

ALETOR — Gerador de números pseudo-aleatórios uniformemente distribuídos em [0, 1].

ARCSIN — Calcula *arc sen* $(x)/[-1, 1]$ de contradomínio $\left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$ com erro inferior a $3 \cdot 10^{-11}$.

ATKNEV — Efectua a interpolação polinomial pelo método de Aitken-Neville.

GRAF — Representa gràficamente pontos de uma tabela $\{x_i, y_i\}$ de intervalo tabelar constante.

MDC e MMC — Calcula o m. d. c. e o m. m. c. de números naturais inferiores a 8 388 608.

MQIND — Permite a aplicação do método dos Mínimos Quadrados a medições INDirectas no caso de as equações de observação serem lineares.

PRONOR — Calcula a probabilidade de uma variável aleatória normal tomar valores inferiores a um dado número.

QGAUS — Efectua a quadratura gaussiana, exacta para polinómios de grau ≤ 125.

QGAUS 8 — Idem para grau ≤ 17.

RSEL — Calcula os resíduos das equações lineares de um sistema.

10

RGKT — Integra sistemas de equações diferenciais de 1.ª ordem pelo método de Runge-Kutta de 4.ª ordem.

RGKT 1 — Integra equações diferenciais de ordem não superior a 10, dadas as condições iniciais.

SEL e SELE — Resolvem sistemas de equações lineares pelo método de eliminação de Gauss com pivotagem parcial sem e com Escalagem.

SELFM e SELFME — Idem, utilizando as fitas magnéticas como memória de apoio.

11

LABORATÓRIO DE CÁLCULO AUTOMÁTICO
PORTO - PORTUGAL

COMPUTER PROGRAM

The Computer Program is written in FORTRAN IV for the NCR Elliott 4100, 64 K, computer of the Faculty of Sciences. The Subroutines MQIND, SEL, ATKNEV and RSSR are library subprograms developed in the Computing Center.

Figura 12
Alguns dos subprogramas desenvolvidos pelo Professor Rogério Nunes.

Entretanto, em 15 de Janeiro de 1969, o Professor Rogério Nunes concluiu as suas Provas para Professor Extraordinário do 2.º Grupo da 1.ª Secção. Posteriormente, após concurso, tomou posse no lugar de **Professor Catedrático** do mesmo Grupo, mantendo a Direção do Laboratório de Cálculo Automático (LACA).

Ainda em 1969, organizou e dirigiu um Curso de Verão da NATO, sobre Investigação Operacional, que teve lugar, de 1 a 5 de Setembro, na cidade do Porto. A propósito deste Curso, em sessão de 11 de Novembro, o Conselho da Faculdade de Ciências exarou em Ata "*um voto de congratulação e felicitação ao director e colaboradores pelo êxito obtido*".

Depois do incêndio no Edifício Central da Faculdade de Ciências (Figura 9), em 19 de Abril de 1974, o Computador foi transferido para edifício próprio na Rua das Taipas, onde ficou instalado, também, o LACA (Figura 13).

Recordemos o que, mais tarde, escreveu o Professor Rogério Nunes: ***até 1974, para além de muitos outros utentes, mais de dois mil alunos utilizaram o computador durante, pelo menos, um semestre***. E mais adiante afirmava, *o LACA foi sempre uma unidade moderna, disciplinada, eficiente, com óptimos colaboradores – cujo número não excedia a dezena e meia – que mereceu o apoio unânime da Faculdade. Um ano houve em que, para aumento da memória de 16 K para 64 K (no valor aproximado de 5 milhares de contos!) a Faculdade, num gesto hoje inimaginável, se sacrificou, na quase totalidade, a fim de que tal melhoria se levasse a cabo*.

E acrescentava, em 1979, quando do seu afastamento da Direção do LACA: *face à coesão, aprumo, isenção, boa vontade e competência da generalidade dos seus elementos, foi possível ultrapassar, com insignificantes "estremeções", a época revolucionária de base de 1974/75.*

Figura 13
Edifício da Rua das Taipas para onde foram transferidos o Computador e o LACA.

Manteve a responsabilidade da Direção do Laboratório de Cálculo Automático desde a sua criação até, como se disse, 1979, altura em que, uma vez mais segundo as suas próprias palavras, *profunda e naturalmente desgostoso com os acontecimentos e com a política local*, após um diferendo com o Conselho Diretivo, *mau grado seu e por uma questão de dignidade*, se viu forçado a abandonar essas funções. A partir de então, *por razões não científicas, nem profissionais – mas apenas de "política local" – o LACA deixou de estar sob a direção de um professor de Matemática Aplicada.*

Em 1982, após cerca de 15 anos de bom e permanente serviço, o computador NCR 4130, **primeiro Computador Digital Automático nas Universidades Portuguesas**, terminava a sua tão importante missão na Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. Seria substituído pelo CYBER 170 720 [5].

Enquanto desenvolvia as atividades ligadas à Direção do LACA e à função docente, o Professor Rogério Nunes foi encarregado, simultaneamente, de várias outras e importantes missões, tanto na Faculdade como noutras estruturas oficiais. Por exemplo, entre 1971 e 1974 foi Diretor do Observatório Astronómico Prof. Manuel de Barros da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto; fez parte de várias Comissões, entre as quais a de Reestruturação da Faculdade de Economia da Universidade do Porto, de que foi Presidente, e a de Ciências Exatas do Instituto Nacional de Investigação Científica (INIC), sendo de destacar que, *naquele tempo*, todas essas funções eram desempenhadas *sem qualquer remuneração*…

Publicou diversos trabalhos nas áreas de Matemática, Análise Numérica, Ciência de Computadores e Astronomia, dirigiu Centros e Linhas de Investigação naqueles domínios, tendo sido membro de diversas Instituições Internacionais ligadas àquelas especialidades.

Visitou, a *expensas próprias* vários Centros de Cálculo, Observatórios e outros Laboratórios em diferentes países europeus: cerca de uma dezena em Inglaterra, meia dezena na Alemanha, duas na Suíça e na Espanha e uma na Holanda. No âmbito de um projeto subsidiado pelo Governo Francês visitou os Observatórios de Haute-Provence, Nice e Grasse [6].

Após a sua jubilação, em 1990, foi convidado pela Universidade Portucalense como Professor Catedrático, tendo mantido a sua atividade até ao princípio do ano letivo 1999-2000.

4. CONCLUSÃO

Durante os mais de quarenta anos em que lecionou na Universidade do Porto, o Professor Rogério Nunes foi responsável por disciplinas de planos de estudo de diferentes cursos, mesmo em diferentes Faculdades. Por isso, os seus antigos alunos distribuem-se hoje por um vasto campo de atividades profissionais, um pouco por toda a parte. Todos recordam, com profunda admiração, a clareza e o rigor das suas exposições, a permanente preocupação no aproveitamento dos alunos e a sua incondicional disponibilidade para os ajudar.

Em conclusão, recordo, também aqui, o que escrevi num jornal diário (JN – 8.03.2000), quando do seu tão sentido falecimento:

> *Num período dominado pelo egoísmo, cada vez mais agudizado, a atividade do Professor Rogério Nunes ficará, para aqueles que mais diretamente o conheceram, como um exemplo notável de dedicação à carreira universitária e aos seus alunos, de lealdade e de colaboração com os seus colegas, de respeito e de incentivo para todos os que tiveram o privilégio de com ele trabalhar.*

E mais adiante:

> *Entre as múltiplas realizações de uma vida devotada à sua Universidade, contam-se* ***a criação do primeiro Centro de Cálculo Científico em Universidades Portuguesas, em 1967, com a aquisição e a instalação do computador digital da Faculdade de Ciências e a organização do respetivo Laboratório de Cálculo Automático (LACA)****, a conceção e a concretização do Serviço de Conservação da Hora do Observatório Astronómico e a implantação de uma cultura de aplicações no âmbito da Matemática no Departamento cuja organização foi, também, da sua responsabilidade.*

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 15 de fevereiro de 2018)

BIBLIOGRAFIA

[1] Osório, J. Pereira, *Professor M. G. Pereira de Barros and the Astronomical Observatory of the University of Porto*, Anais da Faculdade de Ciências do Porto, Fascs. 1.º e 2.º do Volume LV, 1972.

[2] Osório, J. Pereira, *A missão GAIA da Agência Espacial Europeia (ESA)*, Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências, T. XLV, pp. 313-322, 2012.

[3] Osório, J. Pereira, *Sistemas de Medida de Tempo*, Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências, T. XLV, pp. 425-442, 2013.

[4] Nunes, R. S. Sousa, *A Conservação da Hora no Observatório Astronómico da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto*, Dissertação de Doutoramento, 1958.

[5] Nunes, R. S. Sousa, *O Laboratório de Cálculo Automático (LACA)*, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, 1911-1986, Os Primeiros 75 anos, Imprensa Portuguesa, Porto, 2000.

[6] Osório, J. Pereira, *Professor Doutor Rogério Silva de Sousa Nunes, Notável Professor e Grande Amigo,* Memória das Tecnologias e dos Sistemas de Informação, Braga, 2005.

Extrapolation in Theoretical Chemistry: Approximating Reality from Matters-of-fact

A. J. C. Varandas*

RESUMO

The use of extrapolation methods in Quantum Chemistry is overviewed. Two topics are addressed, both lying at the heart of chemistry: electronic structure and quantum reaction dynamics. In the first, we address the problem of extrapolating the energy obtained by solving the Schrödinger equation to the limit of a complete one-electron basis set. With the uniform-singlet-and-triplet-extrapolation (USTE) scheme at the focal point, the emphasis is on recent updates. Secondly, we address the extrapolation of quantum mechanical reactive scattering probabilities from zero total angular momentum to all *J* values by running quasiclassical trajectories, QCT/QM-αJ. Some implications and prospects for future work conclude the overview.

Analiza-se o uso de métodos de extrapolação em Química Quântica focando em duas áreas fundamentais: estructura electrónica e dinâmica quântica. Sobre a primeira, tal necessidade advém do facto dos valores próprios da energia serem obtidos por solução da equação de Schrödinger com bases finitas, requerendo por isso extrapolação para o limite da base completa (infinita). Com ênfase no método USTE (Uniform-Singlet-and-Triplet-Extrapolation), limita-se por brevidade a análise aos estudos mais recentes. Sobre a segunda, discute-se o método QCT/QM-αJ com vista ao cálculo de secções eficazes e constantes de velocidade, *i.e.* extrapolação pelo método das trajectórias quasi-clássicas (QCT) para qualquer valor do momento angular total das probabilidades de reacção calculadas para momento angular total nulo J = 0 por métodos mais elaborados (e por isso dispendiosos) da mecânica quântica (QM). Sumariam-se as implicações e linhas de actuação futura.

I. INTRODUCTION

It is well known that no problem in physics and chemistry can ever be solved exactly. Approximations are unavoidable, with the adiabatic approximation due to Born and Oppenheimer[1] (BO) being most fundamental. Owing to the disparity of masses (nuclei are at least 1837 times heavier than electrons), BO proposed that their motions could be disentangled and considered separately: the nuclei are said to move adiabatically governed by the potential energy surface (PES) created by the electrons. In fact, even a smaller disparity of masses than the one encountered between a proton and an electron may suffice to justify such an approximation. By considering four equally charged fermions, two positive and two negative, we have shown[2] that a mass ratio of 200 (which is approximately the muon to electron mass ratio) validates the separation of their motions up to ~ 80 %.

* School of Physics and Physical Engineering, Qufu Normal University, 273165 Qufu, China and Department of Chemistry, and Chemistry Centre, University of Coimbra, 3004-535 Coimbra, Portugal. Electronic address: varandas@uc.pt

As an outcome of the BO approximation, the electronuclear Schrödinger equation splits into two: one for the electrons moving in a fixed arrangement of the nuclei (electronic Schrödinger equation: eSE), the other for the nuclei moving in the PES created by the electrons (nSE). In this adiabatic formulation of molecular quantum mechanics, one solves pointwise the eSE to get the PES, and then the nSE to obtain the ro-vibrational energy levels of the supermolecule (thence any observable of the system depending on them: bulk properties, cross sections in molecular scattering, and rate constants in chemical kinetics just to mention a few). Because the nuclei have commonly heavy masses, their motion is also often approximated by solving the fundamental laws of classical mechanics, *i.e.*, Hamilton's equations.[3]

Two major difficulties (known as "explosions") arise in theoretical and computational chemistry.[4]

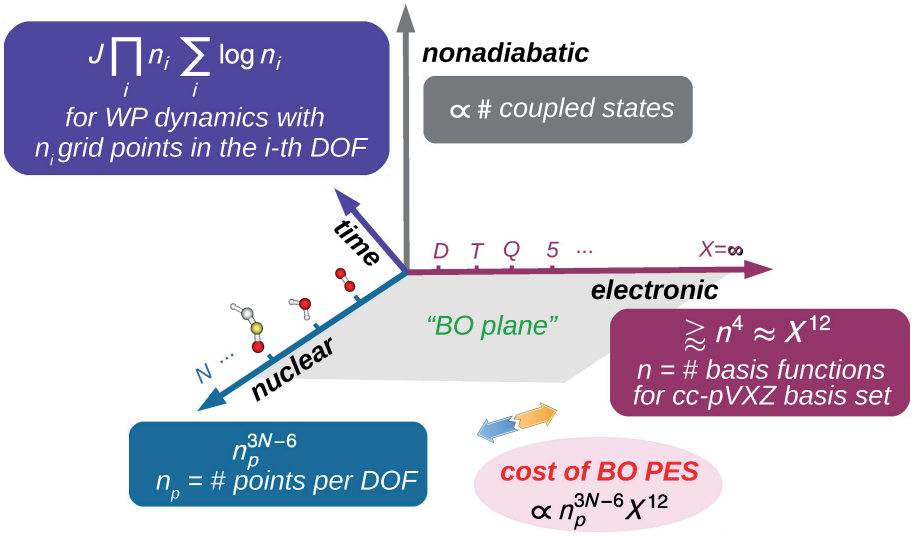


Fig. 1: "Explosions" in molecular computational chemistry. The formulas illustrate the cost scaling with physical variables such as the total angular momentum (J), number of points n_p calculated per degree of freedom (DOF), and hierarchical number of the one-electron basis set (X).

As shown in Figure 1, the so-called n_p^{3N-6} explosion indicates how many points need to be calculated to represent the PES of a N-atom system if n_p points are required per dimension. In turn, the X^{12} explosion tells how the cost/point raises with basis set enhancement which is commonly implied by its cardinal number X.[5] Added to such "explosions" is the fact that reliable results in reaction dynamics demand PESs with chemical accuracy (< 1 kcal mol^{-1}), which implies the use of large basis sets (typically quadruple-zeta, QZ, or larger). If the aim is accurate vibrational calculations, then a PES with spectroscopic accuracy (≤ 1 cm^{-1}) is needed, which is an even more difficult task. Ideally, both require PESs calculated at the one-electron complete basis set (CBS) level. Extrapolation methods are then mandatory as schematized in Figure 2. Embedding in principle no empiricism, this can be done at a pure mathematical level (using polynomials and rational fractions) or, preferably, guided by physically motivated asymptotic theories as here endorsed.

As Figure 2 indicates, extrapolation is also key in reaction dynamics[6], a topic at the core of chemical kinetics which is discussed in section III. Because the correspondence principle states that for very large

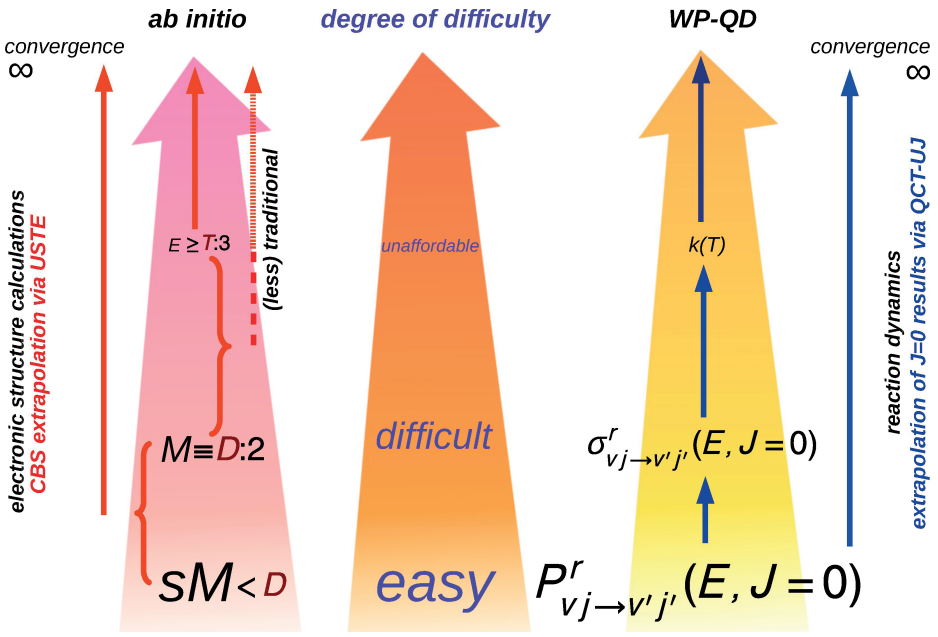


Fig. 2: Extrapolation in electronic structure calculations and quantum reaction dynamics. The arrow in dashed indicates what is traditionally done in electronic structure.

quantum numbers the laws of quantum theory merge with those of classical physics[7], classical mechanics is shown to be of help on this endeavour. In the following, we provide a brief survey of our progress in both such topics.

II. EXTRAPOLATION IN ELECTRONIC STRUCTURE

Methods for solving the eSE have long been of utmost importance in computational molecular science.[8,9] Without any attempt to completeness, the most popular ones are sketched in Figure 3, including valence-bond (VB) type and semi-empirical. The simplest is Hartree-Fock (HF), a mean-field theory where electron correlation is ignored. The error due to its disregard is significant, with other more sophisticated single-reference (SR) MO-based approaches being of variational (configuration interaction, CI), perturbative Møller-Plesset (or many-body perturbation theory type assumed at second-order, MP2), and couple-cluster (CC) types. Among them, the CC singles and doubles with perturbative triples method, CCSD(T), is commonly viewed as the golden rule of quantum chemists due to its accuracy and affordability even for moderate-sized systems. Yet, SR methods miss the static (nondynamical) correlation, which can only be recovered with multireference (MR) methods. These may use complete-active-space-self-consistent-field (CASSCF or CAS) or MRCI wave functions, the latter commonly accounting for the dynamical correlation by inclusion of single and double excitations (MRCISD). Because integration of the eSE with accuracy at demand is unreachable, extrapolation of raw energies to converged values will then be key and the focal point here.

As noted above, the need for going beyond HF arises from the correlated motion of the electrons. Because the electron-electron repulsion operator shows a singularity at r_{12}=0, the exact wave function must have a discontinuous derivative as implied by Kato's[10] cusp condition. However, conventional

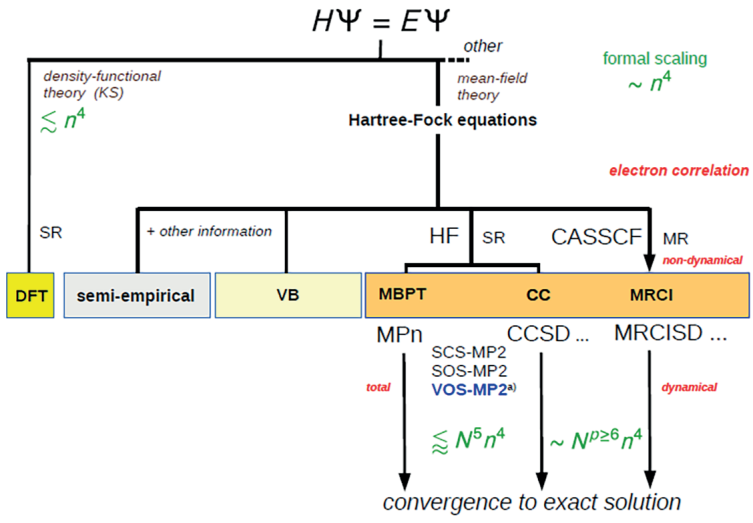


Fig. 3: Some popular methods in electronic structure theory. For acronyms, see text and references therein.

methods expand the wave function in terms of Slater determinants built from orbitals, and hence fail to obey such a condition. This may explain the extremely slow convergence of the conventional correlated methods. Although the purist approach to solve this problem would be to make the many-electron wave function depend explicitly on r_{12}[9,11], the alternative is to systematize the error made by conventional methods and seek an extrapolation to predict the inherent error.

From a partial-wave expansion for two-electron atoms, Kutzelnigg and Morgan[12] established the following: a) for natural-parity singlet states, the leading contribution to the energy at second-order of perturbation theory is $\propto (\ell+\frac{1}{2})^{-4}$ with no odd-terms either $\propto (\ell+\frac{1}{2})^{-5}$ or $\propto (\ell+\frac{1}{2})^{-7}$; b) for triplet states, the leading term is $\propto (\ell+\frac{1}{2})^{-6}$. The above results were also shown to be valid for the MP2 energy of atoms with any number of electrons.[12,13] Such findings followed Schwartz' pioneering work[14] who analyzed the partial-wave expansion of the second-order energy expression and obtained only the coefficients of powers −4 and −6, since the $(l + 1/2)^{-5}$ term vanishes. If $\Delta E_l \propto \sum_{m=4} a_m (l + 1/2)^{-m}$, the convergence error when all the terms with $l \geq L$ are omitted will then assume the form:

$$\Delta E = \sum_{l}^{\infty} \Delta E_l \sim \sum_{m=4} a_m \int_{L+\frac{1}{2}}^{\infty} \left(l+\frac{1}{2}\right)^{-m} dl$$
$$= \sum_{m=4} A_{m-1}(L+1)^{-m+1} \qquad (1)$$

where the first two leading asymptotic terms are $A_3(L+1)^{-3}$ and $A_5(L+1)^{-5}$. Considering just the first may be accuracy-limiting,[13] an issue recently dissected through MP2 calculations on He and Ne using basis

sets with converged radial extent and values of l up to 14[15]. While the form $(L + 1)^{-3}$ was reached for Ne, higher-order terms were normally important in molecular calculations.

Largely motivated by the above, modern basis sets[16–22] are commonly built according to a principal expansion (thus by systematic inclusion of all ~ n^2 functions in the next shell), with each shell contributing an amount of energy $\propto n^{-4}$. An example are the popular correlation-consisted basis sets cc-pV*X*Z (or V*X*Z), aug-cc-pV*X*Z (AV*X*Z) when augmented with diffuse functions, etc., of the Dunning family.[16,17,23] Because the cardinal number (*X*=2:*D*, 3:*T*, 4:*Q*…) is identifiable with $L + 1$, the popular X^{-3} power-law error[24,25] arises. Its slow convergence compounds with the time required for MP2, CCSD, and CCSD(T) calculations which scale as[26] $N^5N_b^4$, $N^6N_b^4$, and $N^7N_b^4$; N_b is the number of basis functions per atom, which for a V*X*Z basis is $N_b \simeq X^3$.[5,25] Note that correlated calculations beyond *QZ* become unaffordable for many interesting systems, which leave the raw energies far from a safe point for extrapolation with some popular CBS schemes.

We focus on the current work on the correlation energy, with the reader being addressed elsewhere for extrapolation of the Hartree-Fock component.[4] Suffice it to note here that the Hartree-Fock energy is found numerically and analytically to converge exponentially.[27] In fact, CBS extrapolation from many basis sets beyond the minimal is feasible,[4,28] with direct convergence of the raw *ab initio* energy being also affordable in many cases.

A. The USTE scheme: update 2018

Two ways stand to obtain accurate energies: solution of the eSE after explicit introduction of correlation in the wave function,[9] and exploitation of the convergence of hierarchized correlation consistent basis sets toward the CBS limit. Despite the fast convergence of the former (believed to be as high as $\propto X^{-7}$ but also noted as $\propto X^{-3.8}$), such R12/F12 methods appear to perform inefficiently with small basis sets.[9] Besides, both conventional and the so-called R12/F12 methods converge to the same asymptotic energy, with CBS extrapolation doing well and often outperforming, a merit recognized[29] by the number of CBS schemes (see elsewhere[30] for an extrapolation calculator with some popular ones) vying the above purist techniques.

CBS extrapolation of the electronic energy is best performed by first splitting the total energy into its Hartree-Fock and correlation components. The latter varies asymptotically as an inverse cubic power of *X* for opposite spin electron pairs and as an inverse quintic power for pairs with the same spin. The USTE scheme[31] accounts for both as

$$E_X^{\mathrm{cor}} = E_\infty^{\mathrm{cor}} + \frac{A_3}{(X+\alpha)^3}\left[1 + \frac{\tau_{53}}{(X+\alpha)^2}\right] \qquad (2)$$

here $\tau_{53} = (A_5^{\mathrm{o}} / A_3) + cA_5^{\mathrm{m-1}}$; α, A_5^{o}, and c are parameters to be determined from *ab initio* data. Thus, it is an empirical-free dual-level scheme which shows the correct asymptotic behavior.[4] Besides allowing to determine the CBS energy from only two raw energies for distinct cardinal numbers, it allows a prediction of the (mostly unknown) ratio $\tau_{53}=A_5/A_3$. When based on the highest affordable cardinal numbers, it allows an accuracy for the CBS extrapolated energy as high as one possibly can get. Because use of the

(5, 6) pair is affordable only for few electron systems, a CBS scheme using at most (*D*, *T*) is key for larger systems. This was the goal of GUSTE,[32] where τ_{53} is kept invariant over the configuration space once determined from raw data calculated with $X \geq Q$. Although only one extra raw point is required, the task gets out of reach for large molecules.

Eq. (2) may be rewritten[33,34] as

$$E_X^{\mathrm{cor}} = \eta E_\infty^{\mathrm{cor}} + \frac{A_3}{\tilde{X}^3} \qquad (3)$$

where the hierarchical number x= $\tilde{X}$ is defined by

$$\tilde{X} = (X + \alpha)\left[1 + \frac{A_5/A_3}{(X+\alpha)^2}\right]^{-1/3} \qquad (4)$$

and η is a tolerance factor to be defined later, also from the raw *ab initio* data. The concept is then to "educate" the basis such as to account for its deficiencies in composition according to the recovered correlation energy. Stated differently, a hierarchical staircase as straight as possible in X^{-3} will enhance the reliability in extrapolating from any step(s) of the ladder. Although various possibilities exist for the above hierarchical reassignment,[33,35] we have determined[35] the new hierarchical numbers as statistical averages of the values obtained from the condition that the $X \leq 6$ values fall on the straight line obtained by fitting USTE(5, 6) correlation energies.[31] The method has kept the same acronym[35] but specifies the hierarchical number-pair used for the extrapolation: USTE(x_1, x_2); typically, $x_1 = x_2 - 1$. The hierarchical numbers so obtained, $x = d, t, q, p, h\ldots$, are real positive but still universal as they apply equally well to any correlation-consistent-type basis sets.[36] For subminimal (sM) basis sets [smaller than V*DZ* or AV *DZ*, which are minimal (M), with larger ones called extended (E)], such hierarchical numbers may not be easy to identify (they are $X = D$ for minimal and $x \geq T$ for extended), the basis may alternatively be indicated. The average deviations $X - x$ so obtained are well mimicked by[4]

$$\Delta\chi = p_0 + \frac{1}{2}\tanh\left[\frac{(X - X_0)}{p_1}\right] \qquad (5)$$

where $\Delta\chi = X - x$ and $X_0 = 1.75$; with p_0 constrained at −0.2057, one gets $p_1 = 1.7816$ for MP2 and $p_1 = 0.3678$ for CC. Note that the cardinal number always exceeds the hierarchical number for the CC method, but is smaller for MP2 with the *DZ* basis (and for MP2 and CC with even smaller *X* values). Equivalently stated, the *DZ* basis is statistically better than a true double-zeta for MP2, with a corresponding implication applying to sM basis sets at both MP2 and CC levels of theory. Conversely, larger basis sets perform poorer than the bases they represent. Furthermore, the above results show that *x* tends to a value ~0.26 smaller than *X*, both for CC and MP2. Indeed, both methods tend to show the same $X - x$ asymptotic deviation. Thus, Eq. (5) entails the concept that Δχ should not vary with the method (Møller-Plesset *vs* couple-cluster) at the CBS limit.

The most recent version of USTE includes the η tolerance factor.[34] Named USTE$_\alpha$(x–1, x), where α stands for "analytic", the protocol yields high quality predictions while allowing to CBS extrapolate from any pair of hierarchical numbers. Its reliability has actually been checked by comparing predictions with the best available estimates, also often employed as reference to scrutinize raw energies obtained from MP2-F12 and CCSD(T)-F12 calculations.[37] To enhance further the agreement and delve into subchemical accuracy (< 1 kcal mol^{-1}), the correlation versus x^{-3} straight lines were allowed to slide down by 1.5‰ for MP2 and up by 1.0‰ for CCSD(T) in E_∞^{cor} (*i.e.*: η≈1.0015, and 0.999). Such a slight scaling not only helps to level off the effect of having used CBS(*V*5Z, *V*6Z) energies as reference, but also the fact that the calculations were not performed at optimized geometries but at all-electron CCSD(T)/CVTZ ones.[35] Clearly, they enhance the USTE$_\alpha$ agreement with the reference raw F12 energies:[37] rmsd of 0.180 and 0.086 cal mol^{-1} for MP2/CBS and CCSD(T)/CBS. To go beyond this (*i.e.*, to attain spectroscopic accuracy: cm^{-1}) would imply including many other corrections (core and core-valence effects, perturbative contributions for connected quadruple excitations, relativistic effects, etc) which lies outside the scope of model. Because it is highly reliable, the USTE$_\alpha$(x–1, x) scheme may itself be used to assign a cardinal number to any basis, a key capability just recently explored.[34] With it, basis sets from Huzinaga's MINI to the most advanced extended V*X*Z-F12 anstazes have been ranked from their ability to capture correlation energy. USTE has also been extensively applied, and much of the early work has been recently reviewed.[4] Most recently, it has been used[38] to assess how correlated MO calculations can perform vs Kohn-Sham density functional theory (DFT) by testing the performance of both methods on the calculation of 38 hydrogen transfer barrier heights and 38 non-hydrogen transfer barrier heights/isomerizations extracted from extensive databases, in addition to four 2p isomerization reactions and six others for large organic molecules.

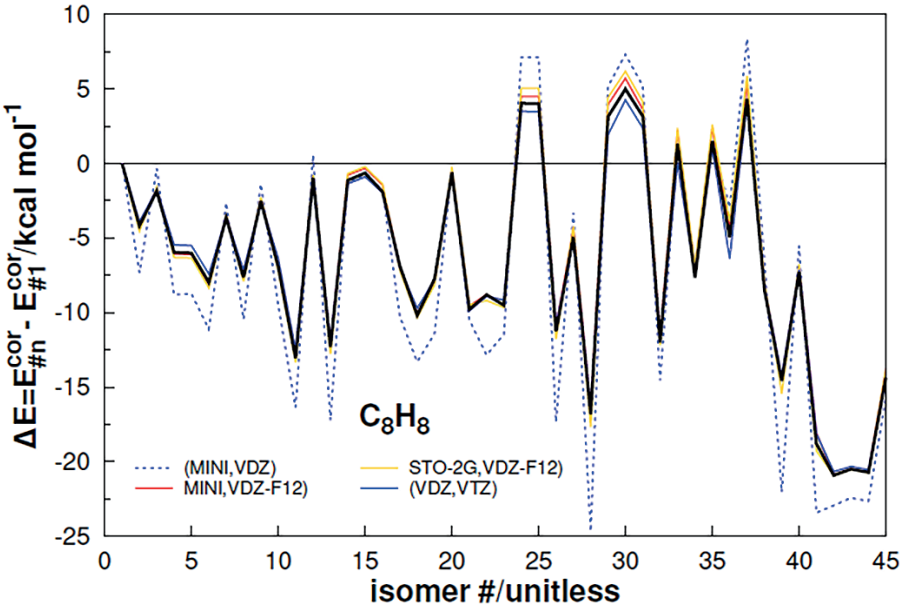


Fig. 4: Energy separation of C_8H_8 isomers. Shown in solid black is the accurate, yet expensive, CCSD(T)/CBS(V*DZ*-F12,V*T* Z-F12) data;[45] see reference for names of all 45 C_8H_8 isomers and their geometries. Adapted from the literature.[34]

All Kohn-Sham DFT calculations employed the popular M06-2X functional, while the correlated MO-based ones used single-reference MP2 and CCSD(T) methods with the raw MO energies subsequently CBS (*d, t*) extrapolated. It was found[38] that MP2/CBS(*d, t*) is as cost effective as DFT/M06-2X and often slightly more while showing a satisfactory accuracy when compared with the reference data. A similar performance has been demonstrated[39] in the study of even-numbered carbon clusters (C_n; n=4–10). Moreover, once such MP2/CBS(*d, t*) calculations were combined with variable-scaling opposite spin[40] (VOS) theory, the results approximated couple cluster quality at no additional cost.[39]

As a case study, we consider here an organic molecule with multiple isomers since these are known to pose a challenging problem to DFT.[41–44] Specifically, we consider the full set of 45 isomers of C_8H_8 for which accurate isomerization energies have been reported[45] by means of accurate high-level *ab initio* methods and the W1-F12 thermochemical protocol.[46] Besides covering a whole range of hydrocarbon functional groups [which include (linear and cyclic) polyacetylene, polyyne, and cumulene moieties, as well as aromatic, anti-aromatic, and highly-strained rings] they have been studied by a variety of composite semiempirical procedures, and a panoply of DFT functionals. Figure 4 compares some of our CBS extrapolated correlation energies[34] with the most accurate results thus far reported. Suffice it to note that the trends observed with MP2 are similar to the ones found in CCSD(T) calculations, but obviously at a much lower cost. Specifically, we highlight the following:[34] (a) use of a (sM,M) basis-set pair is enough to mimic the CCSD(T) reference data[46] with high accuracy [rmsd of 3.01, 0.42, and 0.64 kcal mol^{-1}, respectively from (MIN,V*DZ*), (MINI,V*DZ*-F12), and (STO-2G,V*DZ*-F12) pairs], which compares with the value 0.49 kcal mol^{-1} from our recently[38] recommended CBS(V*DZ*,V*TZ*) scheme; (b) the wall-times for the first three pairs [in the same order: (761±103), (17357±1783) and (11803 ± 1294) s] are much smaller than the references,[45] and are essentially the time spent with the extended basis set calculation, which is a fiftyfold factor less expensive than CCSD(T)/CBS(V*DZ*-F12,V*TZ*-F12) for the cheapest combination; (c) the CBS results slightly outperform in one case the CCSD(T)/CBS(V*DZ*,V*TZ*) ones, although they are far less expensive and outperform DFT/M06-2X by 2.8 kcal mol^{-1}, which performs itself similarly to MP2/CBS(MINI,V*DZ*-F12); (c) CBS(sM,M) schemes are general and pseudo-single-level type, thus extending and probably outperforming genuine single level[4,47] ones; (d) CBS(sM,sM) extrapolation schemes show somewhat modest performances, but at a drastically smaller cost while occasionally performing at levels of accuracy comparable to some DFT functionals. Such a performance is partly expected from the excessive proximity of the involved hierarchical numbers, which tend to spoil the accuracy of the CBS extrapolation. Yet, a reliable prediction is observed for the ups and downs observed in the evolution of the isomers' energy from styrene (isomer #1) to ethynyl-bicyclo [3.1.0] hex-2-ene[45] (#45). Such "educated" prediction contrasts with the highly mismatched pattern that is observed at raw *ab initio* level with sM bases, whose correct ordering is judged difficult to get also at DFT level of theory.[45]

III. EXTRAPOLATION IN REACTION DYNAMICS

Despite all progress made in performing quantum reactive scattering calculations, many practical difficulties persist. The most prominent concerns the calculation of the cross-section which requires converged quantum mechanical (QM) reaction probabilities for all contributing total angular momenta partial waves, thence a large number of total angular momenta *J* with Coriolis coupling taken into

account. This is extremely computationally intensive due to the proliferation of angular momentum states as J increases. It implies therefore a huge labor, particularly in obtaining the thermal rate coefficient,

$$k(T) = \frac{1}{\hbar \mathcal{Z}(T)} \int_0^\infty dE P(E) \exp(-E/k_B T) \qquad (6)$$

where E is the total energy, ħ the Planck constant, k_B the Boltzmann constant, and $\mathcal{Z}(T)$ the total partition function (translational, rotational and vibrational). Since there are no $J = 0$ experimental rate constants, it is desirable to be able to obtain accurate rate constants without having to carry out explicit quantum dynamics calculations for many total angular momentum partial waves. A common approach is to employ the so-called sudden approximations[48,49] for dynamics calculations at high J values which significantly reduces the amount of computational effort. An even simpler approach is to use the so called J-shifting method.[50] This enables to evaluate cross-sections and rate constants using only the accurate results for $J = 0$. It consists of assuming that non-zero total angular momentum probabilities can be derived from $J = 0$ ones using the approximation

$$P^J_{v_i,j_i;v_f,j_f} \sim P^{J=0}_{v_i,j_i;v_f,j_f}(E^J_{tr}) \qquad (7)$$

where v_i (v_f) and j_i (j_f) are the reactant (product) vibrational and rotational quantum numbers, and

$$E^J_{tr} = E_{tr} - B^\dagger J(J+1) \qquad (8)$$

In principle, the energy shift should be estimated from the rotational energy of the intermediate complex, and hence $B^\dagger$ should be the rotational constant at the transition state. A more rational J-shifting approach is to compute the reaction probabilities at a number of nonzero total angular momentum values of J. By comparing the reaction probabilities computed explicitly at these nonzero values of J with those obtained by applying the J-shifting method, one may obtain more realistic values for the shifting constant(s) B. However, if the reactions are not dominated by a simple transition state[51], it is not obvious which geometry should be used. Moreover, for nonlinear molecules, there are generally three distinct rotational constants, and it is not easy to decide which (if any) is the most appropriate. The shifting constant so obtained can therefore produce large errors in the calculated rate constant and it is generally difficult to ascertain its accuracy without knowing the exact result. This is the case particularly for reactions governed by deep potential wells, an example being the prototypical H + O_2 reaction. For such reactions, time-independent methods require large basis sets representing the open and closed states to solve accurately the dynamical problem while the time-dependent ones need long integration times for propagation of the wave packet until the reaction is complete. An alternative idea that we have long suggested[52] is whether the higher-J reaction probabilities can be extrapolated from $P^{J=0}$ to values as large as they are necessary at high energies (these are predicted to reach $J_c \sim 50$ for the reaction H + O_2 → OH + O) such as to attain full convergence.

Classical mechanics is deemed ideal as the extrapolation tool, since the QM and CM results should approach each other at high energies by the correspondence principle, which states that quantum mechanics reproduces classical physics in the limit of large quantum numbers.

A. Extrapolation with QCT/QM-αJ method

Consider the quantum mechanical reactive cross section for the transition from the initial (v, j) state to v' (*i.e.*, over all final j' states)

$$\sigma_{vj,v'}(E_{tr}) = \frac{1}{g}\frac{\pi}{\bar{k}^2}\sum_{J=0}^{\infty}(2J+1)P^J_{vj,v'}(E_{tr}) \qquad (9)$$

where $k^{-2} = (2j+1)k^2_{vj} = 2\mu E_{tr}$, $1/g$ is the electronic degeneracy factor, and μ is the reactants reduced mass. By summing over all final vibrational states, one gets

$$\sigma_{vj}(E_{tr}) = \frac{1}{g}\frac{\pi}{\bar{k}^2}\sum_{J=0}^{\infty}(2J+1)P^J_{vj}(E_{tr}) \qquad (10)$$

where

$$P^J_{vj}(E_{tr}) = \sum_{\Omega}\sum_{v'j'\Omega'}^{\infty} P^J_{vj\Omega,v'j'\Omega'}(E_{tr}) \quad J = 0, 1, 2, \ldots \qquad (11)$$

with the summation in this equation being over all energetically open channels; Ω (or Ω′) is the projection of J on the body-fixed z axis for the reactant (product), and its range is –min ($j<$, J) to min($j<$, J) where $j<$ is the lesser of j and j'.[48,53]

Consider next the following approximation

$$P^J_{vj}(E_{tr}) = P^0_{vj}(E_{tr})\mathcal{F}(J) \qquad J \le J_c \qquad (12)$$

$$= 0 \qquad J > J_c \qquad (13)$$

where F(J) is some distribution of the reaction probability with J at a given value of the energy E_{tr}. The simplest approximation is to assume it uniform, QM-UJ, thence unit probability for all values of J below a critical value J_c (which approximately mimics the maximum impact parameter in the trajectory approach). Indeed, a more flexible expression is a distribution such as

$$\mathcal{F}(J) = 1 - \left(\frac{J}{J_c}\right)^{\alpha} \qquad (14)$$

where α is some power to be specified by the user. Possible shapes are illustrated in Figure 5 for various integer powers, including the uniform α = ∞ distribution.

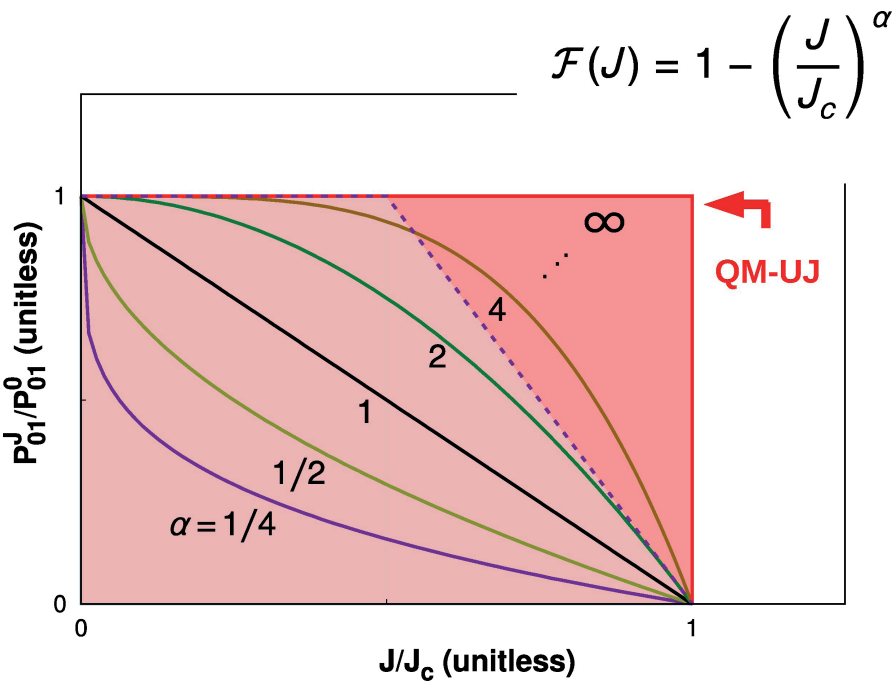


Fig. 5: The model distribution $F(J)$ in Eq. (14).

Although some $vj \rightarrow v'$ partial reactive probabilities may display a maximum at some intermediate value of J,[54,55] such details more likely average out during the summation procedure, and may therefore be of no great concern. By using the Euler-MacLaurin summation formula,

$$\sum_{\ell=1}^{n-1} = \int_0^n f(\ell)d\ell - \frac{1}{2}\left[f(0) + f(n)\right] + \frac{1}{12}\left[f'(n) - f'(0)\right] - \frac{1}{720}\left[f'''(n) - f'''(0)\right] + \ldots + (-1)^{p-1}\frac{B_p}{(2p)!}\left[f^{(2p-1)}(n) - f^{(2p-1)}(0)\right] + \ldots \quad (15)$$

where B_p is a Bernoulli number, a prime denotes a derivative of f with respect to ℓ, and $f^{(2p-1)}(n)$ its $(2p-1)$--th derivative. The general extrapolation scheme is then denoted QCT/QM-αJ, which for α=2 (Q from quadratic) assumes the form:

$$\sigma_{v,j}(E_{tr}) = \frac{1}{g}\frac{\pi}{k^2}\left(\frac{1}{2}J_c^2 + \frac{2}{3}J_c - \frac{1}{6J_c}\right)P_{vj}^{J=0}(E_{tr}) \quad (16)$$

The results for this case (α = 2) and ∞ should perhaps bracket most expectations and give essentially the same results, even if necessarily predicting different J_c values.

The above extrapolation scheme has been originally utilized[52] for the H + O_2 reaction using the DMBE IV PES,[56] and the cut-off total angular momentum J_c obtained from the requirement that the $P_{01}^{J=0}$ QCT reactive probabilities when replaced in Eq. (16) should mimic the corresponding calculated total reactive cross-sections. As the results suggest, the simplest assumption of an E_{tr}-independent α appears justified for this reaction. For example, the well known semiclassical result $J \sim (2\mu E_{tr})^{1/2}\, b/\hbar$, suggests that J_c and the maximum impact parameter used for the trajectory calculations (b_{max}) should have a related dependence on E_{tr}, which was actually verified numerically to be the case.[52] In fact, for such a reaction,[57] and probably others,[54,58,59] a value α ~ 2 turns out to be satisfactory, although some $vj \rightarrow v'$ partial reactive probabilities[54,59] may call for the use a form of $F(J)$ showing a peak at some intermediate value of J. Suffice it to emphasize that the value of α is not decisive for predicting the cross-section. Of course, it has influence on the cut-off total angular momentum J_c but this may not be so relevant in the context of the proposed extrapolation technique.

The performance of the J-shifting[50] and extrapolation[60] schemes in calculating integral cross sections and rate constants has been recently revisited[61] for the H + O_2 reaction using the DMBE IV and CHIPR PESs.[62] The QD J = 0 calculations where performed using a three-dimensional time-dependent wave packet formalism based on hyperspherical coordinates approach developed by Billing and Markovic[63] for J = 0, 1, and extended to arbitrary J by Adhikari and Varandas.[64] Figure 6 depicts the results obtained when using J-shifting[50] versus extrapolation with the help of QCT calculations for specific J values.[60] As shown, the integral cross sections calculated on the CHIPR PES by J-shifting are in excellent agreement with the integral cross sections obtained via extrapolation. Moreover, Figure 6 shows that the cross sections calculated by those two approaches on the DMBE IV PES are also in close agreement with each other, except for the fact that the J-shifted cross sections slightly overestimate the extrapolated results for E_{tr} values beyond 1.5 eV. In fact, we are led to believe that the extrapolation scheme is probably more reliable for high collision energies, since the correspondence principle tells that quantum results should approach their classical counterparts. Of course, it should not be surprising that unlike J-shifting, the extrapolated cross section curve exhibits a marked oscillatory pattern, which originates from the rich resonance structure of the $P^{J=0}(v = 0, j = 1)$ profile. Thence, it should be viewed on an averaged sense.

Once obtained the reaction probability for J=0, one can easily calculate the integral cross section. The results are displayed in Figure 7 for the v=0, j=1 rovibrational state of O_2 on both the CHIPR and DMBE PESs over the collision energy range 0.0–2.5eV. Other calculations by the author[60] on the DMBE IV PES[65], Quéméner *et al.* on the DIMKP PES[66] as well as XXZLG PES[67] are also shown together with the experimental findings by Keβler *et al.*[68], Abu Bajeh *et al.*[69] and Seeger *et al.*[70]. Generally, there is good agreement between the calculated profile on the most recent and likely accurate CHIPR PES which shows a broad maximum around ~1.7 eV, and the experimental measurements by Keβler *et al.*[68] and Seeger *et al.*[70]. Notably, the present profile calculated on the CHIPR PES overestimates previous theoretical calculations by Quéméner *et al.*, who had performed time-dependent quantum mechanical scattering calculations based on hyperspherical coordinates and the J-shifting approximation to calculate integral cross-sections. On the other hand, the calculated integral cross section on the DMBE IV PES are in reasonably good

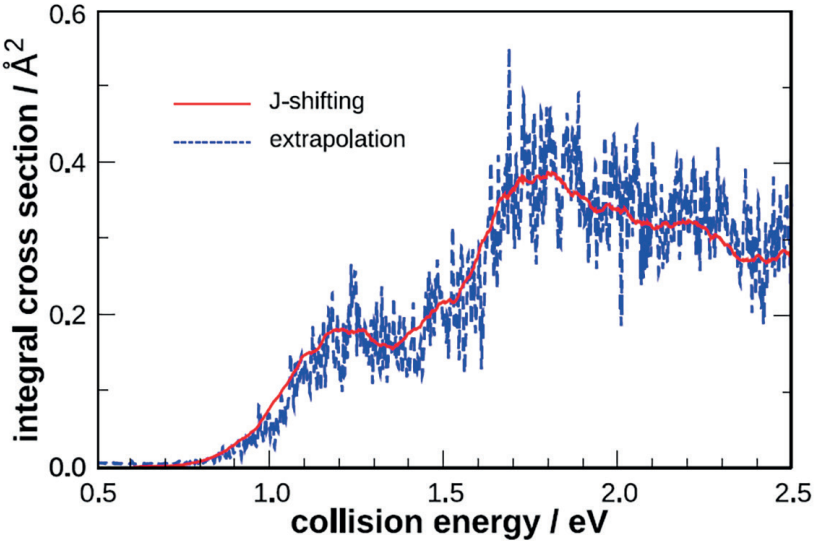


Fig. 6: Total integral cross section for H + O_2(v = 0, j = 1) reaction as a function of the collision energy computed on the CHIPR PES by utilizing both the J-shifting approximation and the extrapolation method. Adapted from the literature.[61]

agreement with the most recent results. In addition, the calculations on CHIPR seem to be in good agreement with the experimental measurements of Keβler *et al.* and Seeger *et al.*, specifically in the lower collision energy range, whereas the profile for DMBE IV case matches well with the same experimental profiles[68,70] in the higher energy regime. Interestingly, it also agrees in shape with our earlier results,[60] with any quantitative differences attributable both to the methodology and PESs that have been utilized. The reader is addressed to the original papers for further details as well as for thermal rate coefficient calculations.

Expectedly, a more rigorous approach could be to obtain v-specific values of J_c as a function of the translational energy. This could be done by choosing at each value of E_{tr} the value of J_c that once replaced in Eq. (16) could mimic the value of σ_{vj} calculated at the QCT level of theory. From this, a sequence of J_c^v (E_{tr}) would be obtained that could be used together with the QM values of $P_v^J = 0$ to predict the corresponding QM vibrational specific cross sections. Boltzmann-averaging would then yield a prediction of the total QM cross section and subsequently the thermal rate coefficient. Such a procedure might have the further advantage of more effectively washing out some of the rotational structure inherent to the calculated $P_{v1}^J = 0$ quantum reaction probabilities, thus yielding a more realistic representation of the excitation function prior to any data smoothing. Of course, the values of J_c may show some dependence on E_{tr}, although the results obtained thus far show that they vary little with the type of quasiclassical trajectory approach that has been employed in the calculations. Thus, the dependence of J_c on E_{tr} has been neglected, although this is not a model requirement.

IV. CONCLUDING REMARKS

Saturating a basis of functions is key to achieve chemical accuracy in electronic structure calculations but unaffordable for medium and large molecules. CBS extrapolation offers a cost-effective and reliable

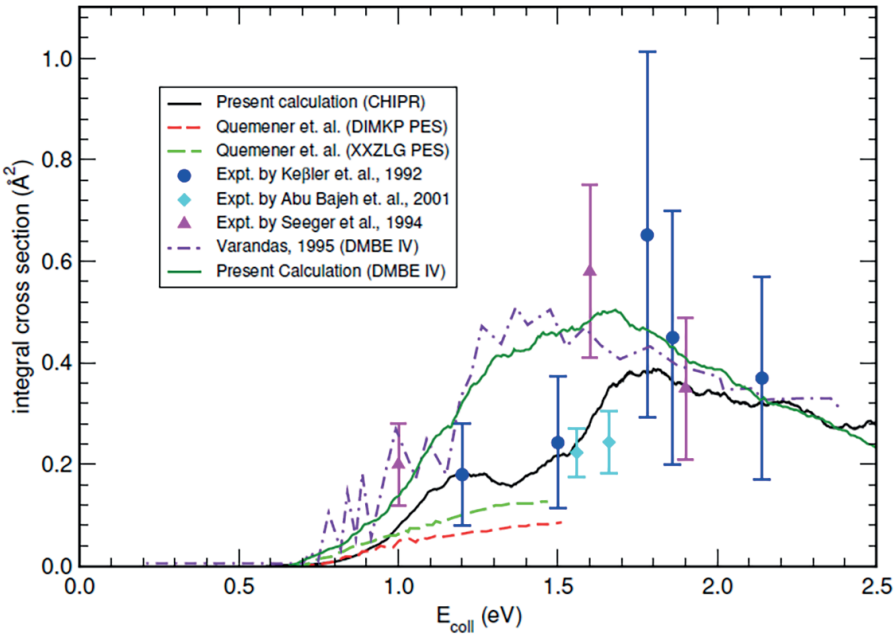


Fig. 7: Integral cross section for H + O_2(v = 0, j = 1) reaction as a function of collision energy in comparison with previous theoretical results and experimental measurements. Adapted from the literature.[61]

way out, and we have recently[4,34] shown how correlated calculations with cost-effective sM and M basis sets can help on the endeavour. This has been made easier with our novel USTE$_\alpha$ scheme,[34] which allows to hierarchize any available basis sets from the recovered correlation energy. Because the joint use of a SM and M or E basis sets costs about as much as the calculation of a single-point with the latter, USTE$_\alpha$ has become as efficient (and likely more reliable) than true single-level schemes despite being dual level.[4] The same reasoning applies to the Hartree-Fock energy component although in a less severe manner, since CBS extrapolation from larger basis sets may be feasible[4,28] and even affordable a direct convergence to satisfactory accuracy of the raw *ab initio* energy. Due to their low-cost and reliability, MO-based MP2/CBS(sM,M) and MP2/CBS(M,M) methods get comparable if not less expensive than KS DFT calculations with popular functionals. This opens a wealth of research topics to revisitation, ranging from CBS extrapolations in large-sized systems to on-the-fly dynamics calculations. They may then, *per se* or jointly with cost-free MP2-VOS[40] theory, have a broad impact in chemistry and even materials science.

Regarding reaction dynamics, QCT calculations have been suggested to offer a convenient way to extrapolate QM reactivities. This is not unexpected given the good agreement found (away from the threshold regions where tunneling dominates) between the QCT and QM results even in the most unfavorable case of the H + H_2 reaction. In fact, such an expectation bears a solid ground on the correspondence principle, with applications of the method to polyatomic reactions[6] being highly desirable.

ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by Fundação para a Ciência e a Tecnologia and Coimbra Chemistry Centre, Portugal, through the project UI0313/QUI/2013, co-funded by FEDER/COMPETE 2020-EU. The support from China's Shandong Province "Double-Hundred Talent Plan" (2018) is also gratefully acknowledged.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 15 de março de 2018)

REFERENCES

1 M. Born and J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys.*, 1927, 84, 457-484.
2 A. J. C. Varandas, J. P. da Providência, M. Brajczewska, and J. da Providência, *Chem. Phys. Lett.*, 2014, 610, 167-172.
3 A. J. C. Varandas, *Chem. Phys. Lett.*, 2007, 439, 386-392.
4 A. J. C. Varandas, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 2018, 69, 177-203.
5 A. J. C. Varandas, *J. Chem. Phys.*, 2000, 113, 8880-8887.
6 B. Fu, X. Shan, D. H. Zhang, and D. C. Clary, *Chem. Soc. Rev.*, 2017, 46(24), 7625-7649.
7 N. Bohr, *Zeitschrift fu¨r Physik*, 1920, 423, 423-469.
8 T. Helgaker, P. Jørgensen, and J. Olsen, *Molecular Electronic-Structure Theory*, Wiley, Chichester, 2000.
9 C. H¨attig, W. Klopper, A. Köhn, and D. P. Tew, *Chem. Rev.*, 2012, 112, 4-74.
10 T. Kato, *Commun. Pure Appl. Math.*, 1957, 10, 151-177.
11 W. Kutzelnigg and W. Klopper, *J. Chem. Phys.*, 1991, 94, 1985-2001.
12 W. Kutzelnigg and J. D. Morgan III, *J. Chem. Phys.*, 1992, 96, 4484-4508.
13 J. R. Flores, R. Slupski, and K. Jankowski, *J. Chem. Phys.*, 2006, 124, 104107.
14 C. Schwartz, *Phys. Rev.*, 1962, 126, 1015-1019.
15 D. W. Schwenke, *Mol. Phys.*, 2012, 110, 2557-2567.
16 T. H. Dunning, Jr., *J. Chem. Phys.*, 1989, 90, 1007-1023.
17 T. H. Dunning Jr., K. A. Peterson, and D. E. Woon in *Encyclopedia of Computational Chemistry*, ed. P. v. R. Schleyer, N. L. Allinger, T. Clark, J. Gasteiger, P. A. Kolman, and H. F. Schaefer III; Wiley, Chichester, 1998; p. 88.
18 F. Weigend and R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2005, 7(18), 3297-3305.
19 A. C. Neto, E. P. Muniz, R. Centoducatte, and F. E. Jorge, *J. Mol. Struct.*:{*THEOCHEM*}, 2005, 718, 219-224.
20 S. Zhong, E. C. Barnes, and G. A. Petersson, *J. Chem. Phys.*, 2008, 129, 184116.
21 D. S. Ranasinghe and G. A. Petersson, *J. Chem. Phys.*, 2013, 138, 144104.
22 F. Jensen, *Advanced Review*, WIREs Comput. Mol. Sci., p. 1.
23 T. H. Dunning Jr., *J. Phys. Chem. A*, 2000, 104, 9062-9080.
24 T. Helgaker, W. Klopper, H. Koch, and J. Noga, *J. Chem. Phys.*, 1997, 106(23), 9639-9646.
25 A. Halkier, T. Helgaker, P. Jørgensen, W. Klopper, H. Koch, J. Olsen, and A. K. Wilson, *Chem. Phys. Lett.*, 1998, 286, 243-252.
26 K. Raghavachari and J. B. Anderson, *J. Phys. Chem.*, 1996, 100, 12960-12973.
27 W. Kutzelnigg, *Int. J. Quantum Chem.*, 1994, 51, 447-463.
28 F. N. N. Pansini, A. C. Neto, and A. J. C. Varandas, *Theor. Chem. Acc.*, 2016, 135, 261.
29 D. Feller, K. A. Peterson, and T. D. Crawford, *J. Chem.Phys.*, 2006, 124, 054107.
30 V. Vasilyev, *Comput. Theor. Chem.*, 2017, 1115, 1-3.
31 A. J. C. Varandas, *J. Chem. Phys.*, 2007, 126, 244105.
32 A. J. C. Varandas, *J. Phys. Chem. A*, 2008, 112, 1841-1850.
33 A. J. C. Varandas, *J. Phys. Chem. A*, 2010, 114, 8505-8516.
34 A. J. C. Varandas, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 22084-22098.
35 A. J. C. Varandas and F. N. N. Pansini, *J. Chem. Phys.*, 2014, 141, 224113.
36 F. N. N. Pansini, A. C. Neto, and A. J. C. Varandas, *Chem. Phys. Lett.*, 2015, 641, 90-96.
37 J. G. Hill, K. A. Peterson, G. Knizia, and H.-J. Werner, *J. Chem. Phys.*, 2009, 131, 194105.
38 A. J. C. Varandas, M. M. González, L. A. Montero-Cabrera, and J. M. G. de la Vega., *Chem. Eur. J.*, 2017, 23, 9122-9129.

39 A. J. C. Varandas, *Eur. Phys. J. D*, 2018, 72(10), 180.
40 A. J. C. Varandas, *J. Chem. Phys.*, 2010, 133, 064104.
41 S. Grimme, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, 45, 4460-4464.
42 P. R. Schreiner, A. A. Fokin, R. A. Pascal Jr, and A. de Meijere, *Org. Lett.*, 2006, 8, 3635-3638.
43 P. R. Schreiner, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, 46, 4217-4219.
44 M. S. S. Grimme and M. Korth, *J. Org. Chem.*, 2007, 72, 2118.
45 A. Karton and J. M. L. Martin, *Mol. Phys.*, 2013, 110, 2477-2491.
46 A. Karton and J. M. L. Martin, *J. Chem. Phys.*, 2012, 136, 124114.
47 F. N. N. Pansini and A. J. C. Varandas, *Chem. Phys. Lett.*, 2015, 631-632, 70-77.
48 R. T. Pack, *J. Chem. Phys.*, 1974, 60(2), 633-639.
49 P. McGuire and D. J. Kouri, *J. Chem. Phys.*, 1974, 60, 2488-2499.
50 J. M. Bowman, *J. Phys. Chem.*, 1991, 95, 4960-4968.
51 C. Leforestier and W. H. Miller, *J. Chem. Phys.*, 1994, 100, 733-735.
52 A. J. C. Varandas, *Mol. Phys.*, 1995, 85, 1159-1164.
53 G. C. Schatz and A. Kuppermann, *J. Chem. Phys.*, 1976, 65, 4642-4667.
54 F. J. Aoiz, L. Banãres, V. J. Herrero, and V. S. Rábanos, *Chem. Phys. Lett.*, 1994, 218, 422-432.
55 J. M. Launay and M. L. Dourneuf, *Chem. Phys. Lett.*, 1990, 169, 473-481.
56 M. R. Pastrana, L. A. M. Quintales, J. Brandão, and A. J. C. Varandas, *J. Phys. Chem.*, 1990, 94, 8073-8080.
57 A. J. C. Varandas, *J. Chem. Phys.*, 1993, 99, 1076-1085.
58 F. Aoiz, L. Banãres, M. D'Mello, V. Herrero, V. S. Rábanos, L. Schnieder, and R. Wyatt, *J. Chem. Phys.*, 1994, 101, 5781-5791.
59 H. Szichman, A. J. C. Varandas, and M. Baer, *Chem. Phys. Lett.*, 1994, 231, 253-256.
60 A. J. C. Varandas, *Molec. Phys.*, 1995, 85(6), 1159-1164.
61 S. Ghosh, R. Sharma, S. Adhikari, and A. J. C. Varandas, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 478-488.
62 A. J. C. Varandas, *J. Chem. Phys.*, 2013, 138, 054120.
63 G. D. Billing and N. Markovic, *J. Chem. Phys.*, 1994, 100(2), 1085-1093.
64 S. Adhikari and A. J. C. Varandas, *Comput. Phys. Comm.*, 2013, 184(2), 270-283.
65 M. R. Pastrana, L. A. M. Quintales, J. Brandao, and A. J. C. Varandas, *J. Phys. Chem.*, 1990, 94(21), 8073-8080.
66 B. K. Kendrick and R. Pack, *J. Chem. Phys.*, 1995, 102, 1994-2012.
67 G. Quemener, B. K. Kendrick, and N. Balakrishnan, *J. Chem. Phys.*, 2010, 132(1), 014302/1-10.
68 K. Keβler and K. Kleinermanns, *J. Chem. Phys.*, 1992, 97(1), 374-377.
69 M. A. Bajeh, E. M. Goldfield, A. Hanf, C. Kappel, A. J. H. M. Meijer, H. R. Volpp, and J. Wolfrum, *J. Phys. Chem. A*, 2001, 105(13), 3359-3364.
70 S. Seeger, V. Sick, H. R. Volpp, and J. Wolfrum, *Isr. J. Chem.*, 1994, 34(1), 5-18.

Self-Avoiding Random Paths and Macromolecules

Ludwig Streit[1]

INTRODUCTION

Let us think about a New York tourist wandering aimlessly through the grid of Manhattan streets and avenues.

The *Stubborn Tourist* will go straight ahead all day and so the distance R from his hotel will be proportional to the time T he has been walking:

$$R \sim T.$$

The *Aimless Tourist* on the other hand will change directions randomly at each street crossing, so he will not get very far, in fact his average distance <R> from the hotel after long walks will grow much more slowly in time. The mathematics of random walks tells us that

$$< R > \sim T^{1/2}.$$

The *Discriminate Tourist* also changes directions randomly, but always avoiding those street crossings where she had been before.

For all we know her average distance from the hotel will grow in time as follows:

$$< R > \sim T^{3/4}.$$

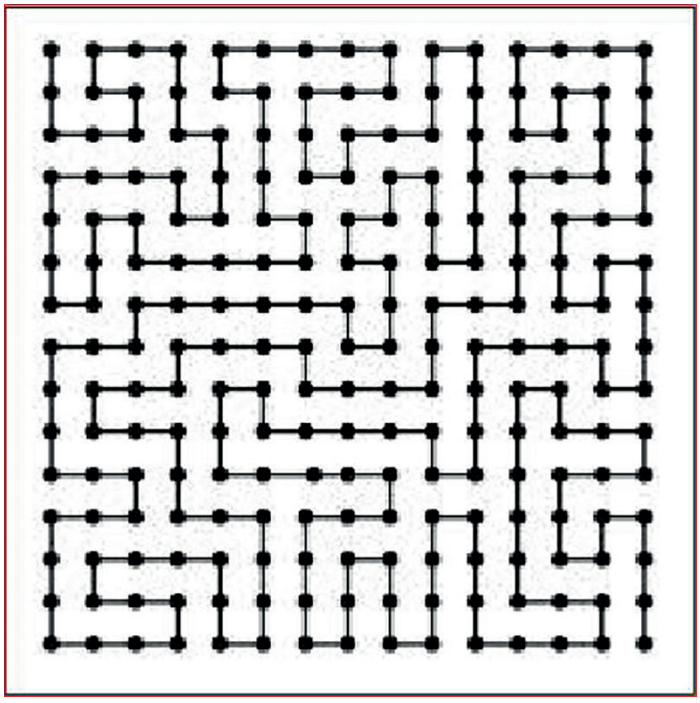
If you can prove this, you may expect a Nobel Prize or a Fields medal, depending on whether you come from a physics or mathematics department.

SELF-AVOIDING RANDOM WALKS

Now we are talking of these "self-avoiding random walks". Here[2] is a special one that touches every street crossing or "grid point":

[1] BiBoS, Univ. Bielefeld, CCM, Univ. da Madeira.

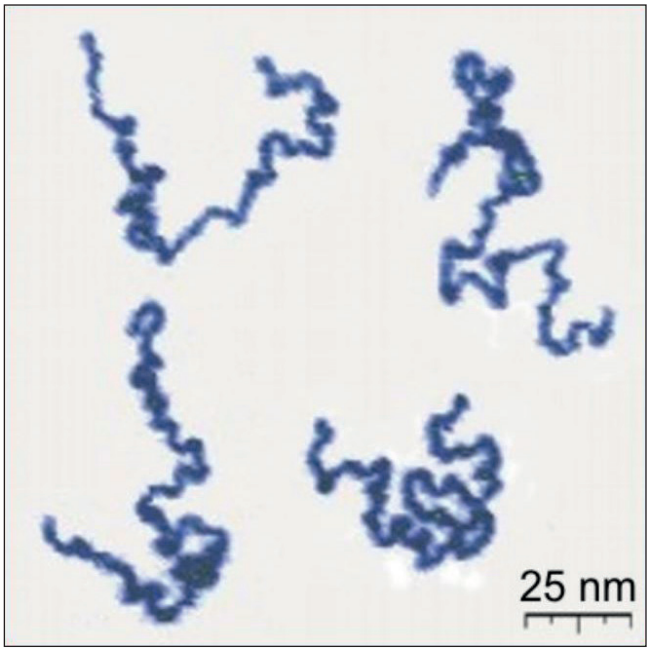
[2] From https://en.wikipedia.org/wiki/Self-avoiding_walk



No doubt a pretty tough task to do, see e.g. Madras, Slade (1996).

In the 1950s, Paul Flory (Chemistry Nobel Prize 1974) was interested in chain polymers, in particular in their shape when they are floating in a good solvent.

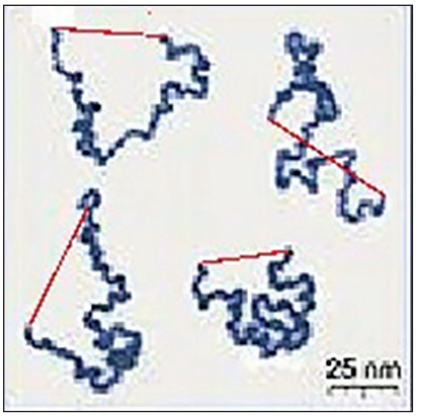
By now, with atomic force microscopes, we can have a look at them.[3]



[3] *https://en.wikipedia.org/wiki/Polymer*

Actually these are almost 2d conformations, of poly (2-vinylpyridine) molecules in water, clinging to a surface (Roiter, 2005).

A characteristic quantity of such conformations is their "end-to-end length" R,



In particular one wants to know how it grows when the number N of constituent monomers becomes large.

For a freely floating polymer (in 3 dimensions) Flory predicted

$$< R > \sim N^{v}$$

with

$$v = 3/5$$

and later M. Fisher extended this to other dimensions d with the formula

$$v = \frac{3}{d+2}.$$

SCALING: THE CONTINUUM LIMIT

Let us have another look at the aimless walker and his position R_N after N turns on some large quadratic grid. Now imagine you shrink the grid length by a factor ε. The path will get more wiggly, but also shorter. To compensate that, we let him make more turns. If we set

$$R_{\varepsilon}(N) = \varepsilon R(\varepsilon^{-2}N)$$

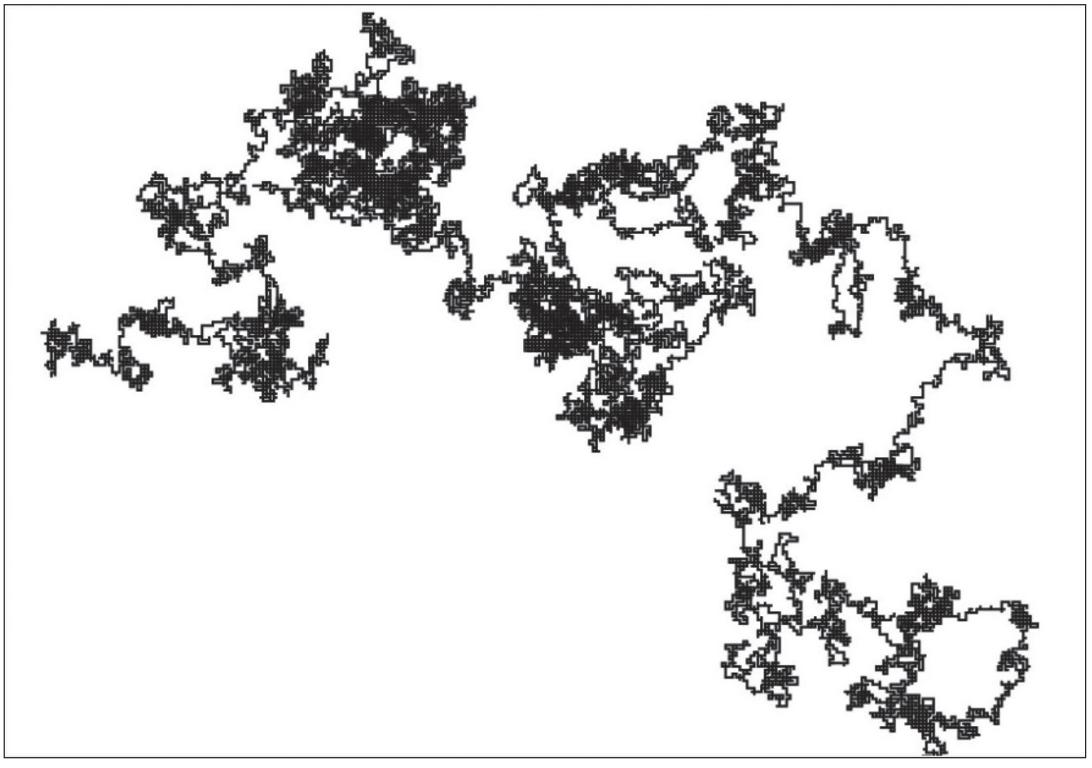
then it is easy to see that the mean square length of the new path is equal to N as before:

$$< R_{\varepsilon}(N) >^{2} = \varepsilon^{2} < R(\varepsilon^{-2}N) >^{2} = N$$

Now consider the limit ε→0:

$$B(t) = \lim_{\varepsilon \to 0} R(\varepsilon^{-2} t)$$

The paths get VERY wiggly in this limit – they change direction at every instant



In fact they are a mathematical model for Brownian motion, the "Wiener process" in mathematical terminology.

These paths are continuous lines without derivatives, in physical terms they describe motion without a proper velocity. Prompted by Einstein's famous paper, Perrin observed of the "Brownian motion" of dust specks under the microscope:

> "..,the particle tracks are so convoluted that the observed track is always infinitely simpler and shorter than the real one. In particular velocity in a short time interval does not converge to a well-defined limit; rather it keeps growing and changes direction in a crazy manner… Also, in no point can one fit a tangent, thus observing in nature objects previously imagined only by mathematicians, and up to now considered to be just mathematical curiosities…"[4]

These Brownian trails are actually fractals. While lines and "nice" curves have dimension one, the Brownian paths have fractal dimension D=2.

[4] My translation from J. Perrin (1913).

From our construction we see that Brownian motion is scale invariant in the following sense

$$B(nt) \sim n^{1/2}\, B(t),$$

I.e. its scaling index is v=1/2.

This is a special case of the formula

$$v = 1\ /D$$

connecting fractal dimension D and scaling index v for scale invariant paths in general.

For the outer contours surrounding a Brownian trail in the plane, Mandelbrot[5] predicted the dimension D=4/3.

Note that these contours are by definition self-avoiding. Assuming that they are scale invariant the above formula would produce

$$v = 1\ /D = 3\ /4$$

in accordance with Flory's prediction (for much more on this see Lawler, Schramm, Werner).

Mathematically the random process B(t)

1. conventually starts at zero:

$$B\{0) = 0\ ,$$

2. is Gaussian as a consequence of the Central Limit Theorem

3. has mean zero:

$$< B(t) > = 0\ ,$$

4. has increments of the form

$$<(\ B\ (t) - B(s))^2 > =\ t - s\ \ for\ \ t > s$$

From this it is easy to show that

$$<(\ B(t) - B(s))\ B(\sigma) > \ =\ 0\ \ for\ \ t > s \geq \sigma$$

meaning that the increment B(t)-B(s) from time s to time t is uncorrelated with the position B(σ) at earlier time σ. Like our walkers, this process moves on without memory of the past.

[5] It is enjoyable to hear Mandelbrot himself about this observation in a TED lecture on Youtube: "Benoit Mandelbrot: Fractals and the art of roughness"

In introductory treatises of polymer physics Brownian motion trails are often used to describe polymer conformations, but then quickly abandoned: they have MANY self-crossings – realistic models must suppress these.

We can do this as follows. Consider the so-called self -intersection local time

$$L = \int dt_1 \int dt_2 \, \delta(B(t_2) - B(t_1)).$$

δ is the Dirac delta function, positive when $B(t_2)=B(t_1)$,and zero otherwise so L gets positive contributions whenever the path returns at some time t_2 where it was at time t_1. Hence a weight function

$$(1/Z)exp(-gL)$$

will not eliminate self-crossings completely but will suppress them exponentially.

This basically is the famous Edwards Model for "weakly self-avoiding Brownian motion". An analogous model can be constructed for weakly self-avoiding walks on a lattice (Domb-Joyce model).

The great advantage is that one does not have to struggle with the complicated question of strictly self-avoiding paths, while on the other hand universality arguments from physics make it plausible that the scaling behavior of paths will be the same in both cases.

Informally, the overall probability density for the random paths is then

$$\varrho \sim exp(-H)$$

with

$$H = \; H_1 + H_2 = \; \frac{1}{2}\int dt(\dot{B}(t))^2 + \; g\int dt_1 \int dt_2 \, \delta(B(t_2) - B(t_1))$$

and so paths with a small H will be most probable. To minimize H we will take a very crude approach.

The 1st term has the physical dimension of $(\text{Length})^2/\text{Time}$, the second has $(\text{Time})^2/(\text{Length})^d$. Now look at the sum:

$$f(R) \; = \; R^2/T + \; T^2/R^d$$

And lo and behold: the minimum of this function is at

$$R \sim T^v \;\; with \;\; v = \;\; 3/(d+2)$$

suggesting that the weakly self-avoiding paths scale just like Flory and Fisher predicted for the chain polymers.

A CLOSER LOOK AT THE INTERSECTION LOCAL TIME

Mathematically the local time L is a rather singular object because of the Dirac delta. One needs to replaces it by a nice function δ_ε and study the limit:

$$L_\varepsilon = \int d^2t\ \delta_\varepsilon(B(t_2) - B(t_1)) \ \rightarrow\ \int d^2t\ \delta(B(t_2) - B(t_1)) = L.$$

as ε goes to zero.

This works fine for d=1. For d=2 however, the expectation of the local time becomes divergent in the limit:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} < L_\varepsilon > \ = \infty,$$

but when subtracted, the "centered" limit

$$L_\varepsilon - < L_\varepsilon > \rightarrow\ L_c$$

is finite and gives rise to a well-defined Edwards model (Varadhan, 1970). For d=3 more complicated renormalizations are required.

HOW GOOD IS FLORY'S PREDICTION?

Let us now inspect Flory's formula $R \sim T^\nu$ with $\nu = 3/(d+2)$. For d = 1 the prediction v=1 is obvious: in one dimension the self-avoiding walker can only move forward, so distance R will be proportional to travel time T.

The first and last case are more or less obvious: in one dimension the self-avoiding walker can only move forward, so distance R will be proportional to travel time T. In four dimensions it is known that Brownian motion has no double points, so self-crossings do not happen and we have the $R \sim T^{1/2}$ of ordinary Brownian motion. So what is known about the other cases?

For d=2,3 there have been extensive computer simulations of long self-avoiding random paths on lattices. For d = 2 Li, Madras, Sokal (1995) found

$$\nu = 0.74967 \pm 0.0001$$

to be compared with Flory's v=0.75.

For d = 3 enumerations of self-avoiding walks gave

$$\nu = 0.5876 \pm 0.0006$$

which definitely does not agree with Flory's v=0.60.

Predictions from Physics – Theory and Experiment

For d = 2 Nienhuis (1982), based on arguments from quantum field theory (provided by de Gennes, physics Nobel prize 1991) and on the assumption that there exists a conformal invariant scaling limit, argued that indeed $\nu = 3/4$. (There are experiments, e.g. on DNA in fluid films, which give $\nu \approx 0.79$.)

For d=3 field theoretic renormalization group calculations give $\nu = 0.588...$ in accord with the lattice simulations above. Experimental measurements on polymers in good solvents produce $\nu \approx 0.586$.

Mathematical Results

For d=1 there is something to prove for weakly self-avoiding paths, they can go back, if only with a low probability, but R. v. d. Hofstad, F. den Hollander, W. Koenig (1997) have indeed proven $\nu = 1$.

For d=2 G. F. Lawler, O. Schramm, W. Werner (Fields Medal) have proven in 2004 that if a conformally invariant scaling limit exists, it is a so-called Schramm-Loewner evolution $SLE_{8/3}$.

For d = 5 Hara and Slade (1992) showed that the self-avoiding random walk is asymptotically Brownian and thus obeys $\langle R \rangle \sim T^{1/2}$.

The borderline case d = 4 is actually more subtle, with an expected logarithmic correction to $\langle R \rangle \sim T^{1/2}$.

Nothing is rigorously proven for d=3.

PATHS WITH A MEMORY

Fractional Brownian motion

Recall our definition of Brownian motion via its increments

$$\langle (B(t) - B(s))^2 \rangle = t - s \quad for \quad t > s$$

from which we concluded that those paths have no memory, or in polymer language, there is no long--range interaction along the chain.

To describe the latter we now change the rules:

$$\langle (B^H(t) - B^H(s))^2 \rangle = (t-s)^{2H} \quad for \quad t > s,$$

introducing thus a new class of processes $B^H(t)$, called "fractional Brownian motion" where the "Hurst parameter" H may take values between zero and one, usual Brownian motion corresponding to H=½.

A closer look reveals that, for $t>s>\sigma$ $\langle (B^H(t)-B^H(s))\, B^H(\sigma) \rangle$ is negative for $H < ½$, zero for $H = ½$, and positive for $H > ½$.

This implies that for large H the trajectories tend to advance, while for small H they are curlier than those of Brownian motion. In this way we can study curled up or persistent paths through the choice of H.

Existence, Scaling

(Weakly) self-avoiding fractional paths are presently being studied in a joint project between groups in Kaiserslautern, Lisbon, Iligan, Madeira and Bielefeld. A first step in this direction was a mathematical one and produced the following theorem (M. Grothaus *et al.*, 2011)

THEOREM: "For the regime Hd ≤ 1 and sufficiently small g>0

$$exp(-gL_c) \in L_1(d\mu(B^H))$$

Hence, suitably normalized by a constant Z, the function

$$\rho(B^H) = (1/Z)exp(-gL_c(B^H))$$

is a well-defined probability density, suppressing self-intersections of fractional Brownian motion.

The Scaling Index

Using the heuristic dimensional argument as above, Bornales *et al.* (2013) predicted the scaling index to be

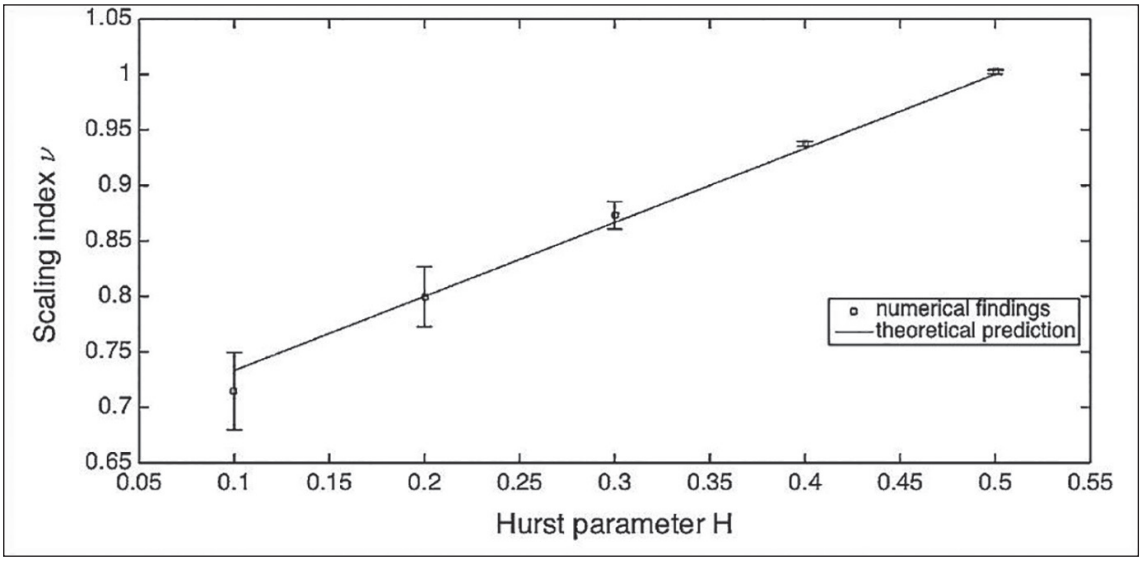
$$v = (2H + 2)/(d + 2)$$

and computer simulations were started by Bock *et al.*, first for d=1. Recall that in the Brownian case the trajectories become straight in d=1.

But for small Hurst index the trajectories tend to be curlier, and the above heuristic formula would predict

$$v = (2/3)(H + 1) \quad for \quad H \leq 1/2.$$

Here is what we found in simulations (Bock *et al.* 2015), with the straight line representing the prediction:



OUTLOOK

The Kaiserslautern-Lisbon-Iligan-Madeira-Bielefeld collaboration is now further looking at self--avoiding fractional Brownian motion regarding in particular

- more detail for the d=1 case, the so-called radius of gyration (Bock, Cabahug, Streit in preparation),
- improved, faster simulation algorithms, in particular for d>1,
- more on mathematical questions: "stochastic quantization" formulas for the fractional self-avoiding trails (Bock *et al.*, 2017, 2018),
- periodic and branching trajectories (Bock, Bornales, Streit, in preparation),
- extension to a larger class of random processes (Silva, Streit, 2018).

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 15 de março de 2018)

REFERENCES

W. Bock, J. Bornales, C. O. Cabahug, S. Eleutério, L. Streit, "Scaling Properties of Weakly Self-Avoiding Fractional Brownian Motion in One Dimension". *J. Stat. Phys*. 161, 1155–1162 (2015).

W. Bock, T. Fattler, L. Streit, "Stochastic Quantization for the Fractional Edwards Measure". Acta Applicandae Mathematicae 151, 81-88 (2017).

W. Bock, J.L. Silva, T. Fattler, "Analysis of Stochastic Quantization for the fractional Edwards Measure". *Rep. Math. Physics 82*, 187-202 (2018).

J. Bornales, M.J. Oliveira, L. Streit, "Self-repelling fractional Brownian motion – a generalized Edwards model for chain polymers". *In* L. Accardi, W. Freudenberg, M. Ohya (Eds.), *Quantum Probability and White Noise Analysis* 30, 389-401. World Scientific Singapore (2013).

S. F. Edwards, "The theory of polymer solutions at intermediate concentration". *Proc. Phys. Soc. London* 88, 265 (1966).

A. Einstein, „Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen". *Annalen der Physik*. 17,549–560 (1905).

P. Flory, Principles of Polymer Chemistry. Cornell University Press (1953).

M. Grothaus, M. J. Oliveira, J. L. Silva, L. Streit. J. Stat. Phys. 145, 1513–1523 (2011).

T. Hara, G. Slade, "Self-avoiding walk in five or more dimensions. I. The critical behaviour". *Comm. Math. Phys*. 147,101–136 (1992).

R. van der Hofstad, F. den Hollander, W. König, "Central limit theorem for the Edwards model", *Ann. Probab*. 25, 573–597 (1997).

G. F. Lawler, O. Schramm, W. Werner. "The Dimension of the Planar Brownian Frontier is 4/3". *Math.Res.Lett*. 8, 401-411 (2001).

G. F. Lawler, O. Schramm, W. Werner, "On the scaling limit of planar self-avoiding walk, inFractal geometry and applications: a jubilee of Benoît Mandelbrot", Part 2, *Proc. Sympos. Pure Math.*, vol. 72, Amer. Math. Soc. 339–364 (2004).

B. Li, N. Madras, A. D. Sokal, "Critical Exponents, Hyperscaling and Universal Amplitude Ratios for Two- and Three-Dimensional Self-Avoiding Walks". *J.Stat.Phys.* 80, 661-754 (1995).

N. Madras, G. Slade, The Self-Avoiding Walk. Birkhäuser. (1996).

B. Nienhuis, "Exact critical point and critical exponents of O(n) models in two-dimensions". *Phys. Rev. Lett*. 49, 1062 (1982).

J. Perrin, *Les Atomes*. Librairie Félix Alcan (1913).

Y. Roiter, S. Minko, "AFM Single Molecule Experiments at the Solid−Liquid Interface: In Situ Conformation of Adsorbed Flexible Polyelectrolyte Chains". *J. Am. Chem. Soc.* 127, 15688–15689 (2005).

J.L. Silva, L. Streit, "Form Factors for Generalized Grey Brownian Motion". Accepted for publication, *FCAA*, Dec. 2018.

S.R.S. Varadhan, in Local quantum theory, Academic Press, New York, p. 285 (1970).

Post 'OMICS. Contribution for a sustainable viticulture

Andreia Figueiredo[1]

ABSTRACT

The reduction of phytochemicals used to control pests and diseases is one of modern agriculture's demands. Grapevine is one of the most important crops grown in temperate climates where Europe's wine industry represents 40% of the world production. The cultivated grapevine, *Vitis vinifera* is prone to several diseases, being downy mildew one of the most devastating. Preventive fungicide applications are used on each growing season to control disease incidence with major environmental and economic constrains. A deeper knowledge on the grapevine – *P. viticola* interaction is needed to define alternative disease control strategies. A first approach based on 'OMIC technologies, allowed us to fully characterize this interaction and to identify several resistance associated candidates and mechanisms that should be further exploited. Of them, lipid-associated signaling mechanisms linked to the modulation of chloroplast associated lipids is important for photosynthetic machinery protection and jasmonic acid (JA) biosynthesis leading to the establishment of the incompatible interaction. Also, subtilisin-like proteases (subtilases) appear as key players for pathogen recognition and immune priming activation. All the knowledge generated by the 'OMIC approaches also highlighted the need to explore natural grapevine biodiversity, to identify novel inducers of disease resistance (priming or elicitor agents) in order to enhance grapevine defense mechanisms and ultimately to identify biocontrol agents. All of these approaches will allow us to define new phytochemical-free disease control measures for a greater sustainability of viticulture practices.

Keywords: grapevine, downy mildew, serine proteases, Lipid signaling, microbiome

VITIS VINIFERA L.

Grapevine (*Vitis vinifera* L.) represents a great agricultural and economic value worldwide, with deep ties to human culture for more than 5000 years. In 2017, grapevine plantation areas reached 7.6 mha, with Spain, Italy and France leading the grapevine plantation areas in Europe (OIV report, 2018). Its fruit is mostly processed into wine, but is also consumed fresh (grape) and dried (raisins). With lower economic expression, it is also processed into nonalcoholic juice, and distilled into spirits (OIV report, 2018).

Fungi and oomycetes are considered to be responsible for major crop losses in all grapevine-growing countries. One of the most threatening diseases is caused by the obligate biotrophic oomycete *Plasmopara viticola* (Berk. et Curt.) Berl. et de Toni, the grapevine downy mildew disease. This pathogen was

[1] Biosystems & Integrative Sciences Institute (BioISI), Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 1749-016 Lisboa, Portugal (aafigueiredo@fc.ul.pt)

introduced in Europe in the 19th century becoming one of the most devastating diseases for today's viticulture. The main specie cultivated in Europe for wine and berry production is the domesticated grape, *Vitis vinifera* subsp. Vinifera with around 10 000 varieties being selected for their quality and adaptation to different climatic conditions and developed by vegetative propagation and by crosses (OIV report, 2018). By evolving without pathogen pressure, *V. vinifera* is highly susceptible to pathogens, particularly to downy mildew. Disease management relies widely on the extensive use of synthetic chemicals, bearing high economic and environmental costs (Gessler *et al.*, 2011). American grapevine species exhibit natural host resistance against this pathogen and have been used in breeding programs resulting on *V. vinifera* varieties such as 'Regent' and 'Solaris' (Vitis International Variety Catalogue 2011) that harbor high resistant traits to grapevine pathogens. However, the defense mechanisms of these newly bred hybrids are being overcome by new *P. viticola* resistance-breaking isolates in Europe (Peressotti *et al.*, 2010).

Plants employ sophisticated mechanism to defend themselves from pathogens (reviewed in Jones and Dangl, 2006). On a first level, plants recognize conserved molecules and/or molecular patterns from pathogens activating the Pathogen Associated Molecular Patterns (PAMP) – Triggered Immunity (PTI). This first response is sufficient to overcome the invading pathogen, but in some cases, pathogens are able to counteract PTI through effector molecules secretion, manipulating host mechanism. These effector molecules may be specifically recognized by plant resistance proteins receptors (R) and a second line of defense occurs (reviewed in Bozkurt *et al.*, 2012). This interaction between plant R proteins and pathogen effectors triggers an immunity based on effectors (ETI). To overcome ETI, pathogens evolve their effectors and counteracting plants evolve new receptors – "zigzag" model (Jones and Dangl, 2006).

New strategies for plant improvement rely on the accurate characterization of grapevine resistance mechanisms against *P. viticola*.

We have previously used a system biology based on 'OMICS approaches, transcriptome, proteome and metabolome analysis (Figure 1), to identify mechanisms and resistance-associated candidates differentiating two grapevine cultivars were selected as our study model, 'Regent' a resistant hybrid and 'Trincadeira', a Portuguese traditional variety highly susceptible to *P. viticola*. Both genotypes are inherently different at a constitutive level, both at metabolite level, where 'Regent', presents higher accumulation metabolites related with primary and secondary metabolism (Figueiredo *et al.*, 2008) and at transcriptome level, where several genes associated to plant immunity are constitutively expressed, as the case of those encoding subtilisin-like proteases (Figueiredo *et al.*, 2012; Monteiro *et al.*, 2013). In the first hours of interaction with the pathogen, several transcripts and proteins related to lipid signaling events are more accumulated in 'Regent' (Figueiredo *et al.*, 2012; Ali *et al.*, 2012; Figueiredo *et al.*, 2015; Guerreiro *et al.*, 2016; Figueiredo *et al.*, 2017a). At the metabolome level the response of the resistant genotype is also characterized by accumulation of phenolic metabolites such as trans-caftaric acid (caffeoyl derivative), trans-fertaric acid (feruloyl derivative) and quercetin-3-O-glucoside (Ali *et al.*, 2012). Moreover, lipid signalling events and the activation of the octadecanoid cascade leading to jasmonic acid production seem to be a key event on the establishment of the incompatible interaction. We have recently shown that after *P. viticola* challenge 'Regent' presents modulation of chloroplastidial lipids (MGDG and DGDG) leading to the increase of C18:3 fatty acid content which may be either associated to photosynthetic membranes protection or JA synthesis (Laureano *et al.*, 2018).

Moreover, recent research has pointed out the potential of alternative control methods together with the exploitation of plant immunity. These may be associated to the use of inducers of disease resistance (elicitors or priming agents) that lead to the production of antimicrobial proteins, accumulation of secondary metabolites, generation of reactive oxygen species (ROS), reinforcement of cell wall, callose deposition, HR-like cell death or to the use of biocontrol agents. Both rhizosphere and phyllosphere microbiomes are known to provide protection against plant pathogens through a variety of mechanisms (Marssat *et al.*, 2016). One of the most attractive aspects of the use of microbial biocontrol agents as alternatives to chemical fungicides is related to their multiple modes of action, thus preventing or at least delaying the build-up of fungicide-resistant strains.

We will further focus on our Post 'OMICS studies associated to the key players associated to resistance traits against *P. viticola* and on the soil metagenomics approach to identify biocontrol agents.

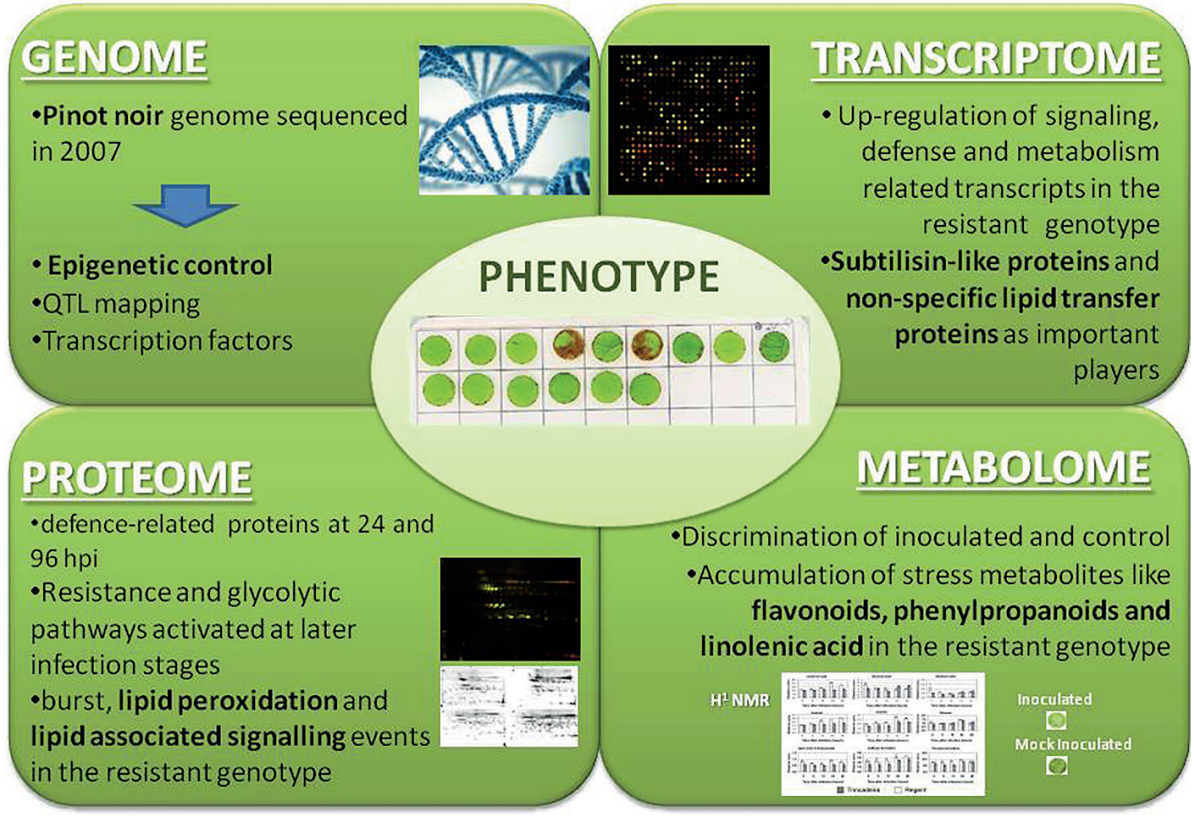


Figure 1 – 'OMICS approaches transcriptome, proteome that enable the identification of tolerance mechanisms and resistance-associated candidates in *V. vinifera* cv Regent.

LIPID SIGNALING AND SERINE PROTEASES AS KEY PLAYERS ON GRAPEVINE DEFENCE AGAINST *P. VITICOLA*

The function of phytohormones in plant defense mechanisms has received considerable attention, it is assumed that salicylic acid (SA) is involved in the activation of defense responses against biotrophic and hemi-biotrophic pathogens and the establishment of systemic acquired resistance, jasmonic acid (JA)

is generally assumed to be involved in defense against leaf-chewing insects and necrotrophic pathogens (Glazebrook, 2005). However, we have previously shown that JA is also involved in the signaling events against *P. viticola*, a biotroph pathogen (Figueiredo *et al.*, 2015; Guerreiro *et al.*, 2016). Several enzymes involved in JA biosynthesis and signaling are up-regulated on the first hours of *P. viticola* challenge together with JA, JA-ILE and SA accumulation (Guerreiro *et al.*, 2016). Lipid transport also occurs as suggested by the early accumulation of non-specific lipid transfer proteins and fibrillins (Figueiredo *et al.*, 2017). A study by Polesani and co-workers (2010) also corroborates our results on this pathosystem by showing an increase of jasmonates and their biosynthetic enzymes in the resistant grapevine specie *V. riparia* after inoculation with *P. viticola*.

Moreover, our results point out to a preponderant role of serine proteases (subtilases) highlighting a possible participation of some subtilases on lipid signaling events. Subtilases are serine proteases that are synthesized as inactive proteins, suffer glycosylation during protein maturation and are secreted to the plant extracellular matrix (ECM) where they accumulate and presumably recognize and process substrates (reviewed in Figueiredo *et al.*, 2017). Over the past five years, subtilases have been associated to immune priming events in plants, namely an Arabidopsis thaliana, an extracellular subtilase, SBT3.3, was identified and associated with enhanced innate immune response. Indeed, SBT3.3 expression promotes the chromatin remodelling in a durable auto-induction mechanism and activates a salicylic acid-dependent mechanism for amplified response of defence genes (Ramirez *et al.*, 2013). In grapevine, the first clues highlighting subtilase participation in defence mechanisms were reported by Figueiredo and co-workers (2008), where a subtilase, XM_010660203.1, was shown to be highly expressed on the first hours after *P. viticola* inoculation (Figueiredo *et al.*, 2008, 2012; Monteiro *et al.*, 2013). We have also characterized the subtilase gene family and analysed the gene expression modulation of some members after inoculation with *P. viticola* (Figueiredo *et al.*, 2016; Figueiredo *et al.*, 2017c). We have found that the same subtilase was 300-fold enhanced in the resistant grapevine genotype 6 hours post inoculation (hpi) with *P.viticola* in 'Regent' and in the susceptible grapevine genotype, the expression induction of this subtilase suffers a time delay (Figueiredo *et al.*, 2016). This subtilase is predicted to be an extracellular protein that shares high sequence identity with other plant defence-associated subtilases, particularly with the pathogenesis-related protein 69 (P69) from tomato (Tornero *et al.*, 1996) and SBT3.3 from *A.thaliana* (Ramirez *et al.*, 2013), described as being associated to an effective resistance response and priming events.

Further work must be conducted to validate this hypothesis, and particularly in the grapevine – *P. viticola* pathosystem, were both subtilases and JA seemed to be key players in the establishment of an incompatible interaction.

BIOCONTROL AGENTS

To control the major fungal diseases, synthetic fungicides are intensively applied on each growing season, leading to severe environmental and health costs. Moreover, emerging of new fungal strains with increased resistance to different active ingredients should also be taken into account. Producers and consumers are gaining more conscience and new viticulture trends are appearing.

Bacteria and fungi live in complex co-associations with plants and have important roles in shaping the quality of the soil and in promoting the productivity and health of the plant itself. Plant microbiome has both direct and indirect relationships with its host, from transforming the availability of organic matter and essential nutrients in the soil, including nitrogen fixation, mitigating the impact of environmental stresses (such as drought or the presence of phytotoxic contaminants), to preventing the growth or activity of plant pathogens through competition for space and nutrients, antibiosis, production of hydrolytic enzymes, inhibition of pathogen-produced enzymes or toxins, and through systemic induction of plant defense mechanisms (Turner *et al.*, 2013).

The viticulture industry has been selectively growing grapevine cultivars with different traits for millennia, and small variations in soil composition, water management, climate, and the aspect of vineyards have long been associated with shifts in these traits. As our understanding of bacterial and fungal influence on plant characteristics improves, it is possible that also microbial flora that coexists with the plant may be one of the key factors that influence these traits. Recent advances on DNA sequencing technologies allowed vineyard microbiome characterization illustrating that different wine-growing regions maintain different microbial communities, with some influences from the grape variety and the year of production (Bokulich *et al.*, 2014). Also, the concept of soil as a source of microorganisms inhabiting grape surfaces was pointed out by the work of Zarraonaindia *et al.*, (2015). This study has shown that bacterial communities associated with grape leaves, flowers, and fruit shared a greater proportion of taxa found in soil compared with each other, which they suggested as evidence of soil serving as a bacterial reservoir in vineyards (Zarraonaindia *et al.*, 2015).

Understanding microbiome effect may help to determine sustainable production strategies. Soil microbiome manipulation can improve soil quality and, hence, crop productivity. This practice can also be used to help improve the wine terroir or even reproduce those terroirs in sites a priori not suitable for generating a wine with such characteristics. It is expected that climatic factors could constrain the biogeographic distribution of grape microbiome, the soil characteristics (e.g., availability of nutrients for the plant) and soil structure still has a great impact on constraining the microbiota that could colonize the remaining plant niches (reviewed in Gilbert *et al.*, 2013). Moreover, microbial biocontrol agents (BCAs) could be an alternative tool in organic grapevine downy mildew management. Microorganisms used in biocontrol are fungi, yeast and bacteria which, in addition to their antagonistic activity, can also be able to induce plant growth increase by either controlling minor pathogens or producing growth-stimulating factors (Vecchione *et al.*, 2007). We have started exploiting soil microbiome and the association soil-plant on a phytochemical-free vineyard in the Portuguese Douro region. So far, following a metagenomics approach based on a 4th generation sequencing technology, Oxford nanopore technology, we were able to sequence up to 1 million reads and to discriminate between soils of different locations (terroir effect) and different depths. The majority of the taxa found were identified as Bacteria, 6% and Eukaryota with <1% representation as Archaea and Viruses (unpublished data).

ACKNOWLEGDMENTS

This work was supported by projects PEst-OE/BIA/UI4046/2014, PEst-OE/QUI/UI0612/2013, UID/MULTI/00612/2013, PTDC/BIA-BQM/28539/2017, Investigator FCT program IF/00819/2015 from Fundação para a Ciência e Tecnologia, (FCT/MCTES/PIDDAC, Portugal).

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 5 de abril de 2018)

REFERENCES

Ali, K.; Maltese, F.; Figueiredo, A.; Rex, M., Fortes, A.M.; Zyprian, E.; Pais, M.S.; Verpoorte, R. e Choi, Y.H. (2012). "Alterations in grapevine leaf metabolism upon inoculation with *Plasmopara viticola* in different time-points". *Plant Science*, vol.191, p.100-107. DOI: 10.1016/j.plantsci.2012.04.014.

Bozkurt, T.O.; Schornack S.; Banfield M.J.; Kamoun S (2012). "Oomycetes, effectors, and all that jazz". *Current Opinion Plant Biology*. 15:483–492. DOI:10.1016/j.pbi.2012.03.008.

Bokulich N.A.; Thorngate J.H.; Richardson P.M.; Mills D.A. (2014). "Microbial biogeography of wine grapes is conditioned by cultivar, vintage, and climate". *Proceedings Natural Academy of Sciences USA*. 111:139–148.

Figueiredo, A.; Fortes, A.M.; Ferreira, S.; Sebastiana, M., Choi, Y.H., Sousa, L.; Acioli-Santos, B., Pessoa, F.; Verpoorte, R. e Pais, M.S. (2008). "Transcriptional and metabolic profiling of grape (*Vitis vinifera* L.) leaves unravel possible innate resistance against pathogenic fungi". *Journal Experimental Botany*, vol.59, n.12, p.3371-3381. DOI: 10.1093/jxb/ern187.

Figueiredo, A.; Monteiro, F.; Fortes, A., Bonow-Rex, M.; Zyprian, E.; Sousa, L. e Pais, M. (2012). "Cultivar-specific kinetics of gene induction during downy mildew early infection in grapevine". *Functional & Integrative Genomics*, vol.12, n.2, p.379-386. DOI:10.1007/s10142-012-0261-8.

Figueiredo, A., Monteiro, F., and Sebastiana, M. (2015). "First clues on a jasmonic acid role in grapevine resistance against the biotrophic fungus *Plasmopara viticola*". European Jounal Plant Pathology 142, 645–652. DOI:10.1007/s10658-015--0634-7.

Figueiredo, J., Costa, G. J., Maia, M., Paulo, O. S., Malhó, R., Sousa Silva, M., *et al.* (2016). "Revisiting *Vitis vinifera* subtilase gene family: a possible role in grapevine resistance against *Plasmopara viticola*". *Frontiers Plant Science*, 7. DOI:10.3389/fpls.2016.01783.

Figueiredo A, Martins J, Sebastiana M, Guerreiro A, Silva A, Matos AR, Monteiro F, Pais MS, Roepstorff P, Coelho AV (2017a). "Specific adjustments in grapevine leaf proteome discriminating resistant and susceptible grapevine genotypes to *Plasmopara viticola*". *Journal of Proteomics*, 152: 48–57. DOI: 10.1016/j.jprot.2016.10.012.

Figueiredo, J., Sousa Silva, M., and Figueiredo, A. (2017b). "Subtilisin-like proteases in plant defence: the past, the present and beyond". *Molecular Plant Pathology*. DOI:10.1111/mpp.12567.

Figueiredo, J., Maia, M., Sousa Silva, M. and Figueiredo, A. (2017). "Grapevine Subtilase Family: Update on New Sequences and Nomenclature Proposal". *Frontiers in Plant Science*, vol.8, p.716. DOI:10.3389/fpls.2017.00716.

Glazebrook, J. (2005). "Contrasting Mechanisms of Defense Against Biotrophic and Necrotrophic Pathogens". *Annual Review Phytopathology*. 43, 205–227. DOI: 10.1146/annurev.phyto.43.040204.135923.

Gessler, C.; Pertot, I. e Perazzolli, M. (2011). "*Plasmopara viticola*: a review of knowledge on downy mildew of grapevine and effective disease management". *Phytopathologia Mediterranea*, vol.50, n.1, p.3-44.

Guerreiro, A., Figueiredo, J., Sousa Silva, M., and Figueiredo, A. (2016). "Linking jasmonic acid to grapevine resistance against the biotrophic oomycete Plasmopara *viticola*". *Frontiers Plant Sciences*, vol. 7. DOI:10.3389/fpls.2016.00565.

Jones, J.D.G., Dangl, J.L. (2006). "The plant immune system". *Nature*. Vol. 444. p.323–329. DOI:10.1038/nature05286.

Monteiro, F.; Sebastiana, M.; Pais, M.S. e Figueiredo, A. (2013). "Reference Gene Selection and Validation for the Early Responses to Downy Mildew Infection in Susceptible and Resistant *Vitis vinifera* Cultivars". *Plos One*, vol.8, n.9, p. e72998.

OIV Statistical Report on World Vitiviniculture (2018), International Organisation of Vine and Wine (OIV).

Peressotti, E.; Wiedemann-Merdinoglu, S.; Delmotte, F.; Bellin, D.; Di Gaspero, G.; Testolin, R.; Merdinoglu, D. e Mestre, P. (2010). "Breakdown of resistance to grapevine downy mildew upon limited deployment of a resistant variety". BMC Plant Biology, vol.10, p.147.

Polesani, M.; Bortesi, L.; Ferrarini, A.; Zamboni, A.; Fasoli, M.; Zadra, C.; Lovato, A.; Pezzotti, M.; Delledonne, M. e Polverari, A. (2010). "General and species-specific transcriptional responses to downy mildew infection in a susceptible (*Vitis vinifera*) and a resistant (*V. riparia*) grapevine species". *BMC Genomics*, vol.11, p.117.

Ramírez, V., López, A., Mauch-Mani, B., Gil, M.J. and Vera, P. (2013). "An Extracellular Subtilase Switch for Immune Priming in Arabidopsis". Xu, J.R., Ed., *PLoS Pathogens*, 9, e1003445. Https://doi.org/10.1371/journal.ppat.1003445.

Turner T.R., James E.K. and Poole P.S. (2013). "The plant microbiome". *Genome Biology*, vol. 14, p.209.

Tornero, P., Conejero, V. and Vera, P. (1996). "Primary Structure and Expression of a Pathogen-Induced Protease (PR-P69) in Tomato Plants: Similarity of Functional Domains to Subtilisin-like Endoproteases". *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol.93, p.6332–6337.

Vecchione, A., Zulini, L., Pertot, I.; Musetti, R. (2007). "Biological control of Plasmopara *viticola*: a multisite approach". *Acta Horticulturae*, vol. 754, p.361-366. DOI: 10.17660/ActaHortic.2007.754.47.

Zarraonaindia I., Owens S.M., Weisenhorn P., West K., Hampton-Marcell J., Lax S., Bokulich N.A., Mills D.A., Martin G., Taghavi S., van der Lelie D., Gilberta J.A. (2015). "The Soil Microbiome Influences Grapevine-Associated Microbiota". *mbio.asm*, 6:2.

O Sudário de Turim – fonte de extraordinária informação científica

Victor Lobo[1]

RESUMO

Na Catedral de Turim, Itália, está um pano que a tradição diz ter envolvido o corpo de Jesus de Nazaré após a sua crucificação. Tem sido feito um grande trabalho científico para determinar a sua autenticidade, usando os mais avançados e complexos métodos de investigação. Veremos os fundamentos e capacidades científicas de alguns destes sofisticados métodos de análise química que nos garantem que o Sudário não pode ser uma fraude, bem como a extraordinária informação científica que se tem tirado de análises baseadas na física, na química, na mineralogia, na botânica, na anatomia, etc. Por exemplo, temos uma imagem do rosto do homem do Sudário; este teve morte por crucificação, os médicos podem, a partir desses registos, explicar as causas dessa morte, e prova-se que tal aconteceu pela Páscoa e em Jerusalém; vê-se que tinha 175 ± 2 cm de altura, levou 120 chicotadas, com um chicote usado pelos romanos; caiu no solo numa rua provadamente de Jerusalém e, além de bater com o joelho no chão, também se prova que bateu com a face e o nariz; determina-se o local, no corpo, onde os pregos foram espetados, bem como o local onde uma lança o atravessou; o sangue é similar ao do pano de Oviedo, Espanha, bem documentado desde o Séc. VIII e cujo percurso se conhece; detectam-se muitas flores e 58 espécies de pólen que provam terem esses factos ocorrido na Páscoa, em Jerusalém, ter sido utilizada uma coroa de uma planta com espinhos fortes, e depois ter o Sudário viajado por Edessa, Constantinopla (944-1204), e Europa; detectam-se também resíduos de frutos usados em rituais fúnebres de Jerusalém; etc.

INTRODUÇÃO

Na Catedral de Turim, Itália, está, desde 1578, um pano (4,36 m x 1,10 m) que a tradição cristã diz ter envolvido o corpo de Jesus de Nazaré, após a sua crucificação.

Será uma falsificação feita ca. 1355, ou será verdadeiramente um pano que envolveu o corpo de alguém sujeito a morte traumática, por crucificação, na área de Jerusalém, pela Páscoa, há uns 20 séculos?

Sabe-se que, na Europa, esse pano começou a ser exibido em Lirey (Troyes) (196 km a Sudeste de Paris), cerca de 1355. Houve um bispo, Pierre d'Arcis, que escreveu ao Papa dizendo ser uma fraude, isto é, alguém teria pintado aquela imagem num pano, para exibir ao público e assim ganhar dinheiro. Ora, está cientificamente muito bem demonstrado por várias vias que a imagem não pode resultar de pintura; por exemplo, ensaios químicos mostram que não há componentes proteicos das pinturas ou de revestimentos nas imagens (Rogers 1978-1981; Heller 1981; Pellicori 1980, 1981; Gilbert 1980; Accetta

[1] Departamento de Química da Universidade de Coimbra, 3004-535 Coimbra (vlobo@ci.uc.pt)

1980; Miller 1981 segundo [1]). Também as fibras das imagens não mostram fluxo capilar de líquido colorido (Evans 1978; Pellicori 1981 segundo [1]), há total ausência de pinceladas (Lorre 1977 segundo [1] em B35) e a cor não é dissolvida por agentes químicos, como seria qualquer tipo de tinta usada por pretensos falsários ([1] em A9, A18, A81).

Testes de datação pelo carbono 14 (e.g., Damon *et al.*, 1989 segundo [1]), feitos em Zurique, Oxford, e Tucson (Arizona, Estados Unidos da América), divulgados de forma muito publicitada numa conferência de imprensa em 13 de Outubro de 1988, em Zurique, indicavam ter sido o linho do pano produzido entre 1260 e 1390. Assim, "parecia" que era uma certeza ser o Sudário uma fraude. Tal foi amplamente divulgado nos telejornais em toda a parte. Eu também acreditei nisso, pois ouvi a notícia. E muitas pessoas, incluindo bispos e sacerdotes, académicos, etc., ainda pensam que o Sudário é uma falsificação, dado o forte impacto da notícia. Extensa investigação científica, incluindo médica, iniciada logo após as fotografias de Secondo Pio em 1898, e intensificadas após 1988, mostram bem que não é, garantidamente, uma falsificação da Idade Média, ou de qualquer outra época. Note-se que é o artefacto cientificamente mais estudado em toda a História da Humanidade, (incluindo pelo grupo STURP [Shroud of Turin Research Project]) e a referida datação pelo carbono 14 ainda veio intensificar mais essa investigação. Logo após a divulgação da datação, muitos cientistas questionaram os resultados indicados, pois já havia muito forte evidência que não podia ser uma fraude. Como iremos ver, houve um erro de amostragem que inviabiliza os resultados dessas datações, isto é, o carbono datado não foi só o carbono do linho original mas foi uma mistura do original com carbono desde o século I ao século XX, tal que a média caiu entre 1260 e 1390. Aliás, logo se viu que 130 anos era um intervalo demasiado grande, pois naquelas circunstâncias a incerteza deveria ser ± 30 anos. Há artigos que mostram claramente que as amostras não foram representativas (Adler 1999 e 2000, Marino 2000 e 2002, Rogers 2002 e 2005, segundo [1]). Também, havia heterogeneidade nas 3 amostras, o que explica ser o intervalo 1260-1390 demasiado longo. Note-se que o problema não é o método de datação, que é certamente muito bom, nem incúria dos investigadores que o aplicaram às amostras que lhes foram dadas: essas amostras é que não eram representativas do linho original do pano, como posteriormente foi visto pelos restos que sobraram dos testes, o que irá ser esclarecido.

Ora, já depois de 1988, um investigador (R. David) datou osso e ligaduras de uma múmia egípcia: o osso correspondeu ao historicamente documentado, mas para as ligaduras, obviamente da mesma data, obteve-se um resultado cerca de 800 anos depois! Viu-se que essa discrepância resultou da enorme quantidade de micro-organismos (um complexo biológico de fungos e bactérias aderentes aos fios, bioplasma) que se foram depositando ao longo dos séculos, isto é, carbono muito posterior ao carbono original das ligaduras, e daí o resultado da datação ser uma média entre a data original do linho e o século XX. Logo se relacionou com o Sudário! Dos restos que tinham sobrado das experiências da datação, viu-se estarem os fios de linho do Sudário muito carregados de organismos depositados ao longo de 20 séculos (Moroni 1997, Garza Valdes 2001 segundo [1])! Em Edessa, Constantinopla (aí conhecido por Mandylion), etc. o sudário era exposto (944-1204) em condições de molde a apanhar muita humidade, o que potenciava a formação desse bioplasma. Assim, aqueles resultados que apontam para o período de 1260 a 1390 são uma mera média entre o Séc. I e o XX.

Além disso, verificou-se também que as amostras dadas aos experimentalistas de Zurique, Oxford e Arizona tinham muitas partículas de carbono resultantes do fogo de 1532, isto é, carbono do século XVI,

muito posterior ao carbono original. Também se verificou haver carbono resultante da queima de velas de cera, normal em igrejas, bem como da respiração dos visitantes, i.e., carbono muito posterior ao do linho original.

Uma outra fonte de erro na amostragem resultou dos fios de linho usados no restauro das partes queimadas no fogo de 1532, linho do século XVI, e não de linho do tempo de tecelagem do pano. Também dos referidos restos depressa se concluiu haver muitos desses fios do restauro. É óbvio que os cientistas de Zurique, Oxford e Arizona analisaram as amostras que lhes deram, e não sabiam que não eram válidas.Tinham sido obtidas por pessoas escolhidas pelos responsáveis religiosos mas sem sensibilidade para a complexa ciência da amostragem, e também ainda não se sabia do referido bioplasma. Hoje sabe-se que não é, em geral, viável datar-se panos pelo carbono 14, pois não se consegue limpar os muito finos fios sem os destruir. A não representatividade das amostras dadas para datação está bem documentada (e.g., Adler 1999 e 2000, Marino 2000 e 2002, Rogers 2002 e 2005 segundo [1]).

As coincidências dos dados fotográficos e científicos com antigas moedas e mosaicos, e sobretudo com o pano na Catedral de Oviedo, Espanha, (Whanger e Whanger segundo [1]) (diremos "pano de Oviedo" e não "sudário" para evitar confusão com o de Turim) também provam inequivocamente que o Sudário de Turim é muito anterior a 1260-1390, i.e., não pode ser uma fraude desse período (nem de período nenhum). Por exemplo, o espectro dos minúsculos grãos de calcário do Sudário coincide com os do pano de Oviedo [e.g., 2], e com o do calcário de Jerusalém. Abaixo serão focadas outras provas que datam o Sudário como muito anterior a 1260-1390. Contudo, e infelizmente, muitas obras ainda defendem erroneamente a hipótese de fraude ou deixam-na como provável, como é o caso da muito consultada Wikipedia. Note-se que patologistas forenses provam que seria impossivel imitar fraudulentamente, e.g., as marcas das feridas (e.g., Fanti e Moroni 2002 segundo [1]).

É significativo que até à data todas as tentativas para reproduzir o Sudário de modo similar em todas as características detectadas tenham falhado (Carreira 1998, Fanti 2004 segundo [1]), o que também contribui para a impossibilidade de falsários o terem feito entre 1260 e 1390, ou cerca de 1355 quando começou a ser exibido em Lirey.

O percurso do Sudário desde Jerusalém até Turim (1578) está descrito nas fontes abaixo indicadas, e não será aqui referido, excepto na contribuição dada pelo estudo científico do pólen e vegetação detectados no pano para a sua permanência em Jerusalém, Edessa (agora Urfa), Constantinopla, Lirey, Chambéry, e respectivos percursos.

A questão da formação da imagem: há muitas hipóteses (e.g., [1] indica 11) mas ainda não há explicação incontroversa. Não abordaremos aqui essa problemática.

O presente texto está relacionado com a comunicação do autor proferida na Sessão Académica da Classe de Ciências de 19 de Abril de 2018, com tempo limitado, pretendendo apenas focar os aspectos aí citados, e não ser mais completo quanto à problemática do Sudário de Turim. O objectivo era só provar que o pano de Turim não é uma fraude, como dito em Zurique em 1988. Assim, refere simplesmente uma pequeníssima parte da informação conhecida sobre o Sudário, e não considerando a área médica, talvez a mais importante.

CONSIDERAÇÕES SOBRE AS FONTES DA LITERATURA SOBRE O SUDÁRIO

Em português, a obra mais significativa talvez seja a do Sr. Dr. Antero de Frias Moreira [3], um médico com muitos conhecimentos de anatomia, dada a sua especialidade, e um profundo estudioso da bibliografia referente ao Sudário, tendo participado em muitos congressos internacionais dedicados a esta problemática e contactado com investigadores desta área. Tem um enorme espólio e a responsabilidade do Centro Português de Sindologia, pois o Presidente, Sr. Dr. Lagrifa Fernandes, que também é autor de um livro sobre esta matéria [4], tem mais de 90 anos e problemas de saúde. A obra *O Santo Sudário à Luz da Ci*ência, por Euripides C. Menezes [5], não é tão relevante como as duas acima indicadas.

Em inglês há muitos livros sendo [2] talvez o mais relevante, sbretudo na área histórica. A extensa obra do catedrático de anatomia Pierre Barbet [6] é também muito importante. Via internet vê-se mais de 1000 livros e muitos milhares de artigos científicos. Um deles *Evidences for testing hypotheses about the body image formation of the Turin Shroud* por Giulio Fanti *et al*.**,** faz um bom resumo do apresentado no congresso "The Third Dallas International Conference on the Shroud of Turin: Dallas; Texas, September 8-11, 2005", e o facto de haver congressos científicos regulares (este já é o 3.º) sobre esta problemática mostra bem o seu interesse. Recomendamos a sua leitura: a qualidade científica dos 24 autores é impressionante, está muito bem escrito e tem 196 referências. Há também muitos documentários (ver, e.g., "YouTube") em suporte electrónico, incluindo um DVD, em português, "O Mistério do Santo Sudário", do Canal Discovery, que podemos facultar.

CONSIDERAÇÕES SOBRE ALGUNS MÉTODOS CIENTÍFICOS USADOS, E SOBRE A ENORME INFORMAÇÃO FORNECIDA A PARTIR DO SUDÁRIO

Fotografia

Até 1898, não havia significativa informação científica sobre o Sudário e a sua autenticidade era discutível. Mas as fotografias tiradas por Secondo Pio em 24 de Maio de 1898, em Turim, tudo alteraram, pois mostraram uma enorme riqueza de dados não visíveis à vista desarmada, dado que os produtos químicos então usados para as chapas fotográficas de vidro eram sensíveis a comprimentos de onda não detectáveis pela vista humana. Pouco depois, em 1902, um membro da Academia de Ciências Francesa, Yves Délage (embora agnóstico) apresentou nessa Academia uma comunicação mostrando a grande informação anatómica extraída daquelas fotografias, evidenciando tratar-se de um homem crucificado de modo similar ao relatado nos evangelhos do Cristianismo. Calculou a probabilidade de 1 em 10^{13} de não ser Jesus de Nazaré (cálculos recentes dão probabilidade de mais de 10^{20}), i.e., é altamente provável ser o crucificado Jesus de Nazaré. Logo então ficou claro não poder tratar-se duma fraude medieval, pois não era possível os seus autores terem os necessários conhecimentos de anatomia, só muito mais tarde descobertos (e técnicas de impressão de imagem susceptíveis de transmitir tais dados para o pano). Mais tarde, o Prof. Pierre Barbet [6] (de anatomia) escreve uma extensa obra recentemente confirmada, também baseada nessas fotos. O cirurgião Pierre Barbet não baseou os seus estudos apenas nas fotografias e negativos fotográficos do Sudário de Turim, ele também utilizou o método experimental com cadáveres e peças de amputação de membros para o estudo das lesões do Homem do Sudário.

Desde 1898, muitas outras fotografias têm sido tiradas, como logo em 1931 as de G. Enrie, de alta resolução, com técnicas cada vez mais sofisticadas quer para o visível quer para outros comprimentos de onda, e fornecendo muito mais dados.

Datação pelo carbono 14, ^{14}C, e por outras vias

Na atmosfera há dióxido de carbono, CO_2, onde o átomo de carbono é o isótopo ^{12}C, que é estável, mas há também $^{14}CO_2$ contendo um átomo de carbono, o isótopo ^{14}C, que é instável, isto é, vai lentamente decaindo (vida média 5730 anos) segundo

$$^{14}_{6}C \rightarrow {}^{14}_{6}N + {}^{0}_{-1}\beta \qquad (1)$$

Note-se que o $^{14}_{6}C$ foi formado por bombardeamento do azoto atmosférico com raios cósmicos segundo

$$^{14}_{7}N + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{14}_{6}C + {}^{1}_{1}H \qquad (2)$$

Ora, o método baseia-se no princípio que, na atmosfera, a relação entre ^{14}C e ^{12}C é constante, $^{14}C/^{12}C = 1/10^{12}$, isto é, a relação $^{14}CO_2/^{12}CO_2$ é constante.

Sendo assim, quando um ser vivo (e.g., uma planta como o linho) se forma, fica a ser constituído por ^{12}C e ^{14}C, naquela proporção. Mas quando o linho é cortado, isto é, quando o ser vivo morre, deixa de absorver carbono, e assim a sua radioactividade vai diminuindo, pois o ^{14}C está a desaparecer segundo (1). Assim, quanto menos radioactivo (i.e., menos ^{14}C) for um pedaço de linho, de madeira, de um osso, ou de qualquer resto de um ser vivo, mais antigo este é. Portanto, medindo-se a radioactividade de uma amostra do linho do Sudário, é possível determinar a sua idade. Em vez de medir a radioactividade, pode medir-se, por espectrometria de massa, a quantidade de ^{14}C e de ^{12}C, o que é muito mais sensível. Foi o que se fez, e foi publicado em 1988. Contudo, como já referido, houve problemas de amostragem e as medidas não têm qualquer validade.

Porém, têm sido usados outros métodos de datação que apontam para o Séc. I ou, no caso da lignina (ou lenhina), garantidamente posterior a 1300 anos, i.e., o pano é muito anterior a 1260-1390, pois a cinética química da decomposição da lignina, dando vanilina, etc., assim o garante (Rogers 2005 segundo [1]).

Um deles, o processo de datação por Raman, baseia-se no quociente das intensidades das bandas de Raman que surgem a 1121 e 1096 cm^{-1}, atribuídas aos modos de elongação simétrico e antissimétrico da ligação glicosídica C-O-C da celulose constituinte do linho. Com o tempo essa ligação glicosídica sofre degradação química. Esta alteração estrutural é detectável por micro-Raman: a relação I1121/I1096 mantém-se constante (ca. 0.86) para linhos recentes e diminui com a "idade" do material, isto é, a relação indica o envelhecimento do linho. Via curva de calibração com amostras datadas é possível obter a "idade" da amostra desconhecida. Para o caso do Sudário, obtem-se o valor ano 30 A. D. Também por FT-ATR se obtém ano 90 A. D. ± 200 anos, o que abrange o ano 30 A. D.

Há também factos históricos que garantem ser o pano muito anterior a 1260-1390. Por exemplo, vê-se bem que foi usado um chicote romano para bater no crucificado, e esses chicotes deixaram de ser usados

com o fim do Império Romano do Ocidente. Embora inicialmente controverso, está hoje bem demonstrado que colocaram sobre os olhos do condenado, já morto, moedas: esquerdo "*Pilate lepton simplum*" ([1] em C11) cunhada por Pilatos, ano 29 A.D.; direito "*dileptum lituus*" (Balossino 1997; Barbesino 1997 segundo [1]) datando o uso do pano para cerca do ano 30 A.D. Além de outros, colaboraram nas avançadas técnicas de "fotografia tridimensional" os cientistas da NASA, J. Jackson, E. Jumper, e Bill Motern. Também o método usado para tecer o pano ([1] em B8), e a espécie botânica (*Gossipium herbaceum*, [1] em B7) são de Jerusalém do Séc. I e não do Séc. XIV, e os presumíveis "falsários" nunca o poderiam imitar. Características da face e do pé direito são semelhantes a moedas bisantinas do séc. VII-XIII A.D. (Moroni 1986 segundo [1]).

Indícios de muitas flores e 58 espécies de pólen ([1] em C4, C5, C15, etc.) mostram ter a crucificação acontecido na Páscoa, em Jerusalém, o crucificado ter tido uma coroa concebida a partir de uma planta com espinhos fortes, e depois ter o Sudário viajado por Edessa, Constantinopla e Europa; tem resíduos de frutos usados em rituais fúnebres de Jerusalém ([1] em C15), etc. O grupo sanguíneo é similar ao detectado no pano em Oviedo, do qual há documentos desde o séc. VIII; sinais da face neste pano também coincidem com os do Sudário de Turim; estes dois panos vieram para a Europa por vias e em épocas totalmente distintas, pelo que o de Turim não pode ser uma falsificação do Séc. XIV. Descobriu-se recentemente uma pintura numa igreja britânica, trazida por um cruzado muito antes do séc. XIV, e coincidente com a imagem do Sudário.

E muitos, muitos outros factos cientificamente observados naquele pano provam inegavelmente que nunca poderia ter sido uma fraude de Séc. XIV. Além disso, dão enorme informação não existente em bibliografia da época, e.g., sabe-se que o crucificado tinha 175 ± 2 cm de altura (Simionato 1998-99; Faraon 1998-1999; Basso 2000 segundo [1]), estava muito rígido ([1]), não iniciou putrefacção, etc.

ESPECTROMETRIA E OUTRAS TÉCNICAS

A espectrometria envolve a análise da interacção da energia radiante (e.g., luz) com a matéria, o que pode ser feito por muitos processos e com vários comprimentos de onda (espectrofotometria de emissão e de absorção, desde raios X até micro-ondas, atómica e molecular, etc.) e não cabe aqui explanar esse vasto campo da ciência, aliás, extensivamente documentado na literatura. Para este objectivo, interessa dizer que, em geral, pode obter-se um espectro que é característico de uma dada substância, e.g., carbonato de cálcio, e pode obter-se um espectro que identifique os componentes de um calcário de um dado local (digamos, é uma "impressão digital" desse calcário). Como a composição química do calcário varia com a sua origem, é possível dizer que o calcário de pequeníssimos grãos do Sudário é o mesmo do pano de Oviedo e de Jerusalém, i.e., ambos os panos estiveram em Jerusalém ([1] em A79, B57). Também isto é mais uma prova que não pode ser uma fraude. Foi encontrado calcário com aragonite, estrôncio e ferro nos pés (Kohlbeck 1986, Nitowski 1986, 1998, Antonacci 2000, Levi-Setti 1985 segundo [1]), no nariz e joelho esquerdo (Pellicori 1981 segundo [1]) do crucificado. Assim, o Sudário dá-nos mais uma informação não descrita: o crucificado quando caiu bateu também com a face no chão.

A vasta e preciosa informação que se retira via estudo das 58 espécies de pólen encontradas no Sudário está muito bem descrita na bibliografia indicada (e.g., Frei 1979, 1983; Danin 1999 segundo [1]), e não cabe aqui detalhar, pois não é da nossa área científica. Como testemunhou a Sr.ª Secretária-geral, Prof.ª

Doutora Maria Salomé Pais, na Sessão Académica da Classe de Ciências de 19 de Abril de 2018, diríamos só que são resistentes por milénios, podem identificar os locais e por vezes aproximadamente datar a sua formação. E daí a informação já indicada quanto ao percurso do Sudário, sendo mais uma prova da impossibilidade de ser uma falsificação.

Muitas outras técnicas têm sido utilizadas, por exemplo, fotografia no visível infra-vermelho e ultra-violeta, fotografia de emissão e absorção no ultra-violeta, fotomicrografia de contraste de fase, microscopia directa, análise quantitativa de espectrometria por fluorescência com Raios-X, espectrometria de Raman com micro-sonda laser, espectrometria de massa, termografia, descoloração por redução com diimida, etc. Não caberia aqui analisar estes aspectos.

CONCLUSÕES

O Sudário de Turim não é, garantidamente, uma fraude (como indevidamente dito em 1988).

É realmente um pano que envolveu um homem de 175 ± 2 cm de altura, após morte por crucificação, ca. de 30 A.D.

A probabilidade de que esse homem seja Jesus de Nazaré é similar à da identificação via ADN.

A riqueza de informação é enorme: coincide com os 4 evangelhos, e é ainda muito superior (e.g., dá feições, altura e outros aspectos físicos, mostra que o crucificado levou 120 chicotadas (sendo o normal só 39), mostra que nas quedas a face e o nariz tocaram o chão…).

É pois um testemunho histórico e científico altamente relevante.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 19 de abril de 2018)

REFERÊNCIAS

[1] Giulio Fanti, *et al.* "Evidences for testing hypotheses about the body image formation of the Turin Shroud", The Third Dallas International Conference on the Shroud of Turin: Dallas; Texas, September 8-11, 2005.

[2] Ian Wilson, *The Shroud*, com 480 páginas, Bantom Books, London, etc., 2011 mas com similares publicações anteriores.

[3] Antero de Frias Moreira, *Sudário de Turim*, com 215 páginas, A. S. Castelo Branco, 2012.

[4] Lagrifa Fernandes, *Santo Sudário*, com 80 páginas, Cidade do Imaculado Coração de Jesus, Fátima, 2.ª ***edição***, 2002.

[5] Euripides C. Menezes, *O Santo Sudário à Luz da Ciência*, Edições Loyola.

[6] Pierre Barbet, *A Paixão de Nosso Senhor Jesus Cristo Segundo o Cirurgião*, Alexandriacatolica ou *La Passion de N.S. Jesus Christ selon le chirurgien*, (já com a 12.ª edição em 1952).

O Diário do Suíço Leonhard Thurneysser e os Africanos na Lisboa Renascentista

Bernardo Jerosch Herold[1]

Um manuscrito alemão de meados do século XVI contém numerosas descrições de plantas e animais observados por um suíço, Leonhard Thurneysser (Basileia, 1531 – Colónia, 1596), em Portugal, bem como uma miscelânea de outras informações recolhidas durante a sua estada em Lisboa, em casa de Damião de Góis.

O presente ensaio apresenta e comenta a tradução portuguesa do capítulo dessa miscelânea referente aos africanos negros de Lisboa. Neste capítulo, Thurneysser descreveu pormenorizadamente as suas características somáticas e os seus hábitos. Também relatou a sua venda como escravos nas ruas de Lisboa e apresentou um conjunto de especulações sobre a razão da sua negridão, em que recorreu à alquimia e à astrologia. Baseado numa carta do imperador da Etiópia mencionou as relações entre a Etiópia, Portugal e a Igreja Católica Romana.

INTRODUÇÃO

Segundo um manuscrito[2] existente no espólio[3] do médico, alquimista e aventureiro Leonhard Thurneysser zum Thurn (Basileia, 1531 – Colónia, 1596)[4], este passou uma temporada em casa de Damião de Góis em Lisboa nos anos 1555 e 1556. A *Fig. 1* mostra um recorte do frontispício desse manuscrito, em que afirma que este foi «iniciado em Lisboa no Ano de Cristo 1555 e 1556 na habitação do nobre senhor e cavaleiro lusitano Senhor Damião de Góis, na altura do solstício estival».

Thurneysser deixou nesse manuscrito um relato de mais de trezentas páginas sobre a flora e a fauna de Portugal, bem como uma miscelânea de outras informações que recolheu durante a sua estada em Lisboa.[5] As suas descrições da morfologia de plantas e animais, na maior parte dos casos, parecem resultar da sua observação direta e registam meticulosamente pormenores, mesmo que ínfimos, que prenderam a sua atenção. Manifesta muitas vezes a surpresa e a admiração de quem descobre algo que lhe era desconhecido. Nota-se o desejo de partilhar essas sensações com os seus leitores de língua alemã, ao selecionar as espécies que, nas suas próprias palavras, «se encontram sobretudo na Lusitânia, mas que na nossa terra só raramente ou poucas vezes foram vistas». O estilo da sua escrita tem um ar de

[1] Centro de Química Estrutural do Instituto Superior Técnico/Universidade de Lisboa e Academia das Ciências de Lisboa

[2] *Staatsbibliothek zu Berlin*, cota *Ms. Germ. Fol. 97*.

[3] Gabriele Kaiser, «Leonhard Thurneysser zum Thurn (1531–1596) und sein Nachlass in der Staatsbibliothek zu Berlin.» in Thomas Horst, Marília dos Santos Lopes and Henrique Leitão (eds.) *Renaissance Craftsmen and Humanistic Scholars*, (Frankfurt am Main: Peter Lang 2017), 121–132.

[4] Informações biográficas em Y. Schumacher (2011), *Leonhard Thurneysser, Arzt – Alchemist – Abenteurer*, Zürich e G. Spitzer (1996),... *und die Spree führt Gold: Leonhard Thurneysser zum Thurn, Astrologe – Alchimist – Arzt und Drucker im Berlin des 16. Jahrhunderts* (Beiträge aus der Staatsbibliothek zu Berlin, Preußischer Kulturbesitz 3). Ausstellungskatalog. Wiesbaden.

[5] O manuscrito encontra-se descrito em B.J. Herold, Th. Horst, H. Leitão, A «História Natural de Portugal» de Leonhard Thurneysser zum Thurn, ca. 1555-1556, *Ágora, Estudos Clássicos em Debate 19* (2017) 305-334, republicado em Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências, Tomo XLVI, 227-248 (2019) e Th. Horst, «A Rediscovered Manuscript about Portuguese Plants and Animals: Preliminary Observations», in Horst, Lopes, Leitão (eds.) *Ibid.*, 131–74.

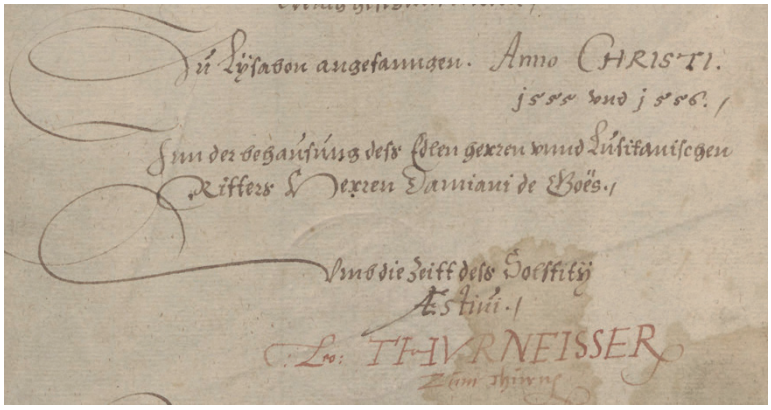


Fig. 1. Pormenor do frontispício do manuscrito de Thurneysser.

ingenuidade de quem, na falta de uma, na altura ainda inexistente, terminologia científica, usa um vocabulário mais próprio dum camponês ou artífice. O vernáculo alemão da época (o *Frühneuhochdeutsch*, alto-alemão pre-moderno), muito semelhante à linguagem usada por Lutero, tem um caráter muito rústico e muitas vezes até grosseiro. Thurneysser não se formou em nenhuma universidade. O seu domínio da língua latina não era comparável ao dos grandes humanistas da sua época.

O pai de Thurneysser era ourives em Basileia e iniciou o seu filho no mesmo ofício. Ele foi, durante algum tempo, fâmulo do Professor Johannes Huber (1507-1571), médico e hebraísta de Basileia. Aí teve contacto com as doutrinas de Paracelso, o que o levou a preferir o empirismo baseado na observação e na experiência ao saber escolástico. A personalidade irrequieta de Thurneysser não se coadunava, porém, com a dedicação a estudos livrescos numa universidade e levou-o, em vez disso, a praticar sucessivamente uma variedade grande de ofícios e de empreender muitas viagens. Adquiriu assim a fama de sábio distinto em domínios tão diversos como a metalurgia, alquimia, botânica, iatroquímica, farmacologia, medicina e astrologia. Atingiu o cume do seu prestígio quando foi nomeado médico pessoal do Príncipe João Jorge, Eleitor do Brandenburgo (1525-1598). Este cedeu-lhe um mosteiro em Berlim, «Graues Kloster», que tinha sido abandonado em consequência da reforma da Igreja. Aí instalou uma botica e uma tipografia em que empregou cerca de 200 servidores. Acumulou uma grande fortuna, não se sabendo se teria sido por inveja, também foi acusado de ser um vigarista e um

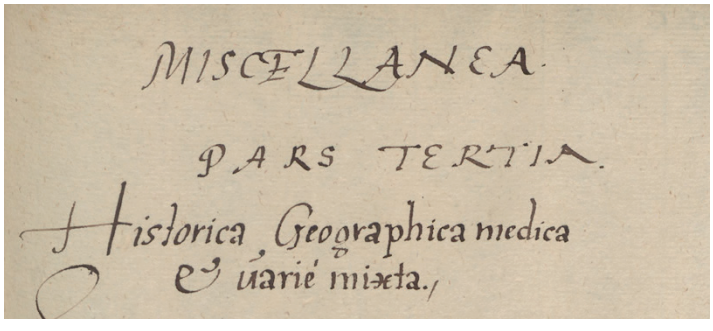


Fig. 2. Pormenor do frontispício da parte terceira do manuscrito de Thurneysser com uma miscelânea «histórica, geográfica, médica e vários mistos».

charlatão. Deixou uma obra impressa monumental sobre alquimia, astrologia e medicina. Do seu espólio também fazem parte manuscritos inéditos da sua autoria, um dos quais contém, ao longo de mais de trezentas páginas, uma descrição de plantas e animais que observou em Portugal. Esse manuscrito continua presentemente a ser transcrito e traduzido, tarefa que, dada a extensão do texto, ainda vai demorar até ser completada. O mesmo manuscrito também contém um conjunto de 48 páginas (ver frontispício na *Fig. 2*) com uma curiosa miscelânea de uma variedade de outras informações recolhidas em Lisboa.

Dentro dessa miscelânea, destaca-se um surpreendente capítulo de 16 páginas com o título (*Fig. 3*) ÆTHIOPUM VEL *Nigritarum descriptio* [Descrição dos mouros, negritas e etíopes].

Neste capítulo, Thurneysser, com a mesma atenção aos pormenores que usou nas suas descrições da morfologia de plantas e animais, descreve os carateres somáticos dos africanos negros que observou em Lisboa. As designações de «mouros, negritas e etíopes» eram usadas naquela época muitas vezes indistintamente como sinónimas de «negros». Estima-se que, em meados do século XVI, perto de 10 por cento da população de Lisboa era de pele negra.[6] Assim, Thurneysser teve amplas oportunidades de os observar, tanto em locais públicos, como na própria casa de Damião de Góis que era proprietário de alguns escravos negros.[7]

Como anexo do presente artigo, apresenta-se a tradução portuguesa deste texto, cuja transcrição, feita em colaboração com Thomas Horst, já se encontra publicada noutra revista como anexo, juntamente com a respetiva tradução inglesa comentada.[8]

AS FACES DOS AFRICANOS NEGROS

O texto inicia-se sem rodeios com a frase seca de que «têm geralmente uma face larga, e todos [têm] cabelo crespo negro retinto ou de carvão, [isto] tanto os homens, bem como as mulheres». No seguimento, já afirma acerca do cabelo deles, «que o rapam e cortam até à pele, e o qual, logo que volte a crescer um pouquinho, se encrespe de um modo estranho. O mesmo também se sente muito rijo ao tocar.» Esta passagem mostra que, além do que lhe era percetível visualmente, Thurneysser relata aqui algo que só pode ter verificado pelo tato. Se o seu contacto com negros se tivesse limitado a cruzar-se com negros na rua, não se podia explicar esta passagem. Mas vivendo em casa de Damião de Góis com os seus escravos domésticos, deve-se lhe ter proporcionado a possibilidade de passar a sua mão pelas cabeças dos mesmos. Depois de descrever com imenso pormenor o aspeto dos olhos dos negros, acrescenta uma observação, cujo alcance pode escapar a uma leitura superficial: «Costumam baixar os olhos logo para o solo, mas quando estão sozinhos arregalam-nos muito horrivelmente e devagar.» Os negros evitarem o contacto com os olhos quando se cruzam com um branco demonstra claramente a relação de submissão a que os escravos negros estavam sujeitos.

---

[6] Jorge Fonseca, *Escravos e Senhores na Lisboa Quinhentista* (Lisboa: Edições Colibri, 2010); Kate Lowe, «The Global Population of Renaissance Lisbon», in Annemarie Jordan Gschwend and Lowe (eds.) *The Global City on the Streets of Renaissance Lisbon*, (London: Paul Holberton 2015), 57-75. Arlindo Manuel Caldeira, *Escravos em Portugal das origens ao século XIX* (Lisboa: A Esfera dos Livros 2017).

[7] Dos registos da freguesia de Santa Cruz do Castelo consta que um escravo adulto de Damião de Góis foi batizado em 1554 com o nome António, segundo Edgar Prestage, Pedro d'Azevedo, *Registo da Freguesia de Santa Cruz do Castelo desde 1536 a 1628* (Coimbra 1913), 32. Também se sabe de uma escrava. Outro escravo de nome Sebastião é mencionado no processo da inquisição contra Damião de Góis, de acordo com Raul Rêgo, *O Processo de Damião de Goes na Inquisição* (Lisboa: Assírio & Alvim, 2007).

[8] B.J. Herold, The Diary of the Swiss Leonhard Thurneysser and Black Africans in Renaissance Lisbon, *Renaissance Studies*, *32(3)*, 2017, 463-488.

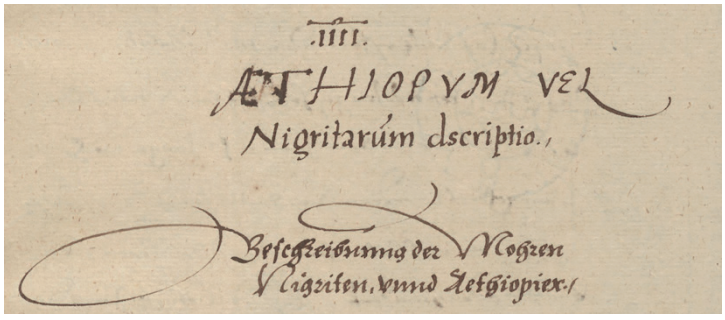


Fig. 3. Pormenor do título capítulo quarto da parte terceira ÆTHIOPUM VEL Nigritarum descriptio [Descrição dos mouros, negritas e etíopes].

Thurneysser não vê nenhuma beleza na contemplação das feições dos negros: «têm narizes chatos ou espalmados, tal como se tivessem sido esborrachados ou partidos por um soco, de maneira a haver um espaço largo sem nenhum alto entre ambos os olhos. Assim também têm um orifício muito grande e repugnante, isto é, o buraco da boca, com beiços carnudos muito mais saídos do que a ponta do nariz. Também a ponta do nariz tem uma forma alargada, repugnante e feia. A boca sobressai de baixo do nariz, como se fosse o focinho de um animal quadrúpede; o interior é muito grande e alargado.» Terá sido desta forma que a generalidade dos europeus do século XVI se referia às feições dos negros?

OUTRAS REPRESENTAÇÕES

Como existem poucas outras fontes escritas desta época, a pergunta não é fácil de responder. As representações verbais de africanos encontram-se bastante dispersas na literatura de viagens da época e foram compiladas e analisadas por vários autores.[9] Quanto a representações pictóricas[10], existem, no entanto, retratos que revelam que os artistas que os criaram sentiram a beleza dos seus modelos. Quem olha, por exemplo, para dois retratos (*Figs. 4* e *5*) da autoria do pintor alemão Albrecht Dürer (1471-1528) fica com a impressão de ele ter olhado para os negros como seres humanos com toda a sua dignidade e de ter sido capaz de os aperceber com empatia. O retrato datado de 1508 de um africano anónimo (*Fig. 4*) representa presumivelmente alguém de posição social elevada, talvez um emissário dum país africano, enquanto Thurneysser, na sua descrição chocantemente drástica, se devia estar a referir às feições de escravos usados em trabalhos braçais, incluindo escravos forros, que viu em Lisboa. Dürer, como artista, manifesta uma sensibilidade que certamente estava acima da média dos europeus da época, enquanto que em Thurneysser nada indica a existência de uma sensibilidade comparável, ao descrever os negros como se fossem espécies zoológicas, e sem manifestar nenhuma empatia com os objetos das suas descrições.

[9] José da Silva Horta, «A Representação do Africano na Literatura de Viagens, do Senegal à Serra Leoa (1453-1508)». *Mare Liberum* 2 (1991), 209–339; Vanessa Thomas, *Représentations européennes des corps africains au cours des premiers contacts sur les rives atlantiques (1341–1508)* (Lisboa: Universidade de Lisboa, Faculdade de Letras, 2013); Diogo Gomes de Sintra, *Descobrimento Primeiro da Guiné*, ed. Aires A. Nascimento (Lisboa: Edições Colibri, 2002); Gomes Eanes de Azurara, *Chronica do Descobrimento e Conquista de Guiné*, ed. Torquato de Sousa Soares, 2 vols. (Lisboa: Academia Portuguesa de História, 1978–1981); Duarte Pacheco Pereira, *Esmeraldo de Situ Orbis*, ed. Joaquim Barradas de Carvalho (Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1991).

[10] Jean Devisse, Michel Mollat, *L'Image du Noir dans l'Art Occidental*, 3 vols. (Fribourg: Office du Livre, 1976), Joaneath Spicer (ed.), *Revealing the African Presence in Renaissance Europe* (Baltimore: The Walters Museum, 2012).

Fig. 4. Retrato dum africano anónimo. Desenho a carvão de Albrecht Dürer, 1508. Grafische Sammlung Albertina, Viena.

Fig. 5. Retrato de Catarina, escrava com 20 anos de idade, do feitor português em Antuérpia, João Brandão Sanches. Desenho a ponta de prata de Albrecht Dürer, 1521. Galleria degli Uffizi, Florença.

Há mais um exemplo, em que Dürer dá a impressão de se ter apercebido daquilo que o seu modelo africano estava a sentir. Trata-se do retrato da escrava Catarina do feitor português em Antuérpia, João Brandão Sanches, datado de 1521 (*Fig. 5*), em que Dürer nos transmitiu algo do estado de alma dessa pessoa.

É curioso que, quem olha para esse desenho e conhece as «Endechas a Bárbara Cativa» de Camões, até pode ser levado a imaginar que estes versos se referiam à mesma pessoa que foi retratada por Dürer:

«[…]
Rosto singular,
Olhos sossegados,
Pretos e cansados
[…]
Leda mansidão,
Que o siso acompanha;
Bem parece estranha,
Mas Bárbara não.
[…]»

É óbvio que aquilo que Thurneysser quis transmitir com a sua descrição não foi resultado de nenhuma tentativa de compreender as pessoas a que estava a observar, mas antes de se gabar junto dos seus leitores de ter testemunhado nas suas viagens coisas maravilhosas, exóticas e extraordinárias, e de os convencer de que assim adquiriu uma sabedoria que o punha acima de outras pessoas.

TENTATIVAS DE CLASSIFICAÇÃO

Mais adiante, Thurneysser reconhece que há negros com tipos físicos diferenciados, conforme as regiões de onde foram importados. Parece, no entanto, não ter ideias claras quanto à geografia, conforme sugere a frase inicial obscura: «Na província da Etiópia ou da Arábia, os habitantes são chamados da Mina[11]. Estes que vieram das costas do Mar Vermelho são os de maior peso e beleza. Têm uma pele macia e mesmo brilhante e lisa, e igualmente no seu corpo são mais perfeitos e mais fortes que os outros mouros, os quais o rei de Portugal não deixa levar daí para outros países por causa das excessivas abastanças dessas províncias. Por isso manda poupá-los tanto. Porém os mouros que vêm, e são trazidos das ilhas de São Tomé ou do Cabo Verde ou cabeça verde e de Malagueta[12], não são tão negros, mas têm uma cor castanha escura e sobretudo nas suas faces. No entanto, de uma maneira geral, têm as mesmas feições, tipos e figuras dos cabelos, narizes, lábios, pele, vergonhas e dos pés.»

À medida que o texto prossegue torna-se cada vez mais claro que Thurneysser vê os negros em larga medida como uma mercadoria que classifica conforme as suas qualidades relativas.

Thurneysser continua o seu relato com a descrição de cicatrizes decorativas ou rituais que viu nas caras de certos negros: «A muitos entre eles fizeram, como estranho adorno, um corte de ambos os lados da boca, desde a testa ou cabeça até à boca, de forma a que as cicatrizes ou nervuras dos cortes se prolonguem até aos cantos da boca, ficando [os bordos] das feridas muito afastados, o que acham ser um adorno muito importante.»

Um contributo curioso para o conhecimento de certas práticas africanas relacionadas com a medicina tradicional é dado na seguinte passagem: «Às vezes também se golpeiam, como curativo de doenças, nas faces ou bochechas ao pé das orelhas com três ou quatro golpes atravessados, de maneira a deixar escoar o sangue libertado, tal como entre nós acontece na flebotomia ou sangria.» Reparou também noutros costumes como: «Muitos deles desbastam e afiam os dentes com uma lima, de maneira a torná-los tão bicudos como os dos cães, para poderem comer melhor e mastigar a comida.»

Continua a referir-se a características somáticas diferenciadoras, mas em certos aspetos duma forma exagerada e visivelmente contaminada com preconceitos: «Muitos deles também têm uma cabeça alongada e uma testa alta, ombros estreitos e contraídos, uma barriga cova ou metida para dentro, um peito liso ou plano, assim também têm possantes genitálias, nomeadamente um escroto desumanamente grande, e mais um vergalho possante.»

OS AFRICANOS COMO TRABALHADORES E OS SEUS COSTUMES

Descreve muitos outros aspetos morfológicos com muito pormenor. Mais adiante refere-se às suas capacidades de trabalho da seguinte maneira: «São além disso muitíssimo fortes, de tal maneira que, em Lisboa, nos lugares ou mercados comuns, carregam muitas vezes pesos incríveis e transportam volumes grandes e pesados, tal que se se dissesse ou [d]escrevesse ninguém acreditaria. Por isso podem aguentar pacientemente muito trabalho e canseiras.» Esta observação condiz, descontando os exageros, com outros relatos contemporâneas e vê-se ilustrada em várias representações pictóricas (*Fig. 6*).

[11] São Jorge da Mina, fortaleza no atual Gana.
[12] Costa da Malagueta na atual Libéria.

Quanto às características de sociabilidade dos negros, ele refere-se certamente a escravos quando escreve: «são muito irascíveis, e não se entendem uns com os outros, e lutam ou batem-se violentamente uns aos outros. Muitos deles, ou quase todos, têm cabeças tão duras que pouco sentem e se importam, quando nelas se bate ou malha. Pois, aqueles que arremessam e batem voltam com os punhos e gritam. E quando se disputam e se zangam, fazem muita gritaria e discussão e usam palavras ofensivas. Assim também são exageradamente vingativos, não se esquecendo facilmente do ódio, nem [são capazes] de dominar a ira e desistir.» Tudo indica que Thurneysser se baseou naquilo que se podia observar nas ruas de Lisboa. As frequentes rixas entre os escravos também são relatadas noutras fontes. Compreendem-se por várias razões, como seja a penúria em que viviam na sua qualidade de escravos, a ausência de agentes arbitrais e no facto de os escravos, por virem muitas vezes de regiões da África muito distantes entre si, habitadas por povos que não falavam a mesma língua, nem observavam os mesmos costumes, fatores que não favoreciam a formação de laços de solidariedade.

Fig. 6. Escravo, transportando um odre de vinho em Castela. Do *Trachtenbuch*, de Christoph Weiditz, Germanisches Nationalmuseum Nürnberg.

Nem tudo o que Thurneysser menciona se baseia na sua observação própria. Como nunca viajou na África, os costumes no comércio entre navegadores portugueses e os africanos só lhe podem ter sido relatados por outras pessoas: «Nas suas terras não usam moeda ou numerário algum, mas só têm umas conchinhas brancas, a que chamam *dentales*, isto são conchinhas escolhidas, que usam entre eles em lugar de dinheiros, na província da Arábia ou Etiópia, tal como foi mencionado antes. Quando lhes são trazidas e propostas pelos navegadores e comerciantes lusitanos vestes e vários e múltiplos utensílios, dão-lhes em troca ouro puro, nativo, em pepitas que trazem na boca. E quando lhes mostram ou indicam mercadoria que lhes sirva ou de que necessitem, cospem na mão a quantidade de pepitas que acham que vale a mercadoria, conforme a sua opinião. Se o comerciante ou mercador não aceitar esse ouro à primeira, afastam-se imediatamente e não juntam mais ouro ao anterior.»

Quanto à alimentação, é possível que o que descreve tenha resultado daquilo que observou diretamente em Lisboa: «A maior parte […] deles alimenta–se de raízes ou legumes […] chamados inhame, banana e batata, os quais comem, por vezes crus, e outras vezes cozidos ou fritos. As mesma raízes e legumes também são trazidos daquelas terras a Lisboa e aí vendidos em público.

Para bebida, usam, porém água ou vinho que preparam a partir de frutinhos e cascas de palmeira, porque na sua terra crescem variadas espécies e géneros. Essa bebida é muito mais forte que um vinho o possa ser na Europa.»

O MERCADO DE ESCRAVOS DE LISBOA

A parte mais impressionante do texto sobre os africanos negros é a descrição do mercado de escravos de Lisboa: «são trazidos, anualmente muitos tais mouros ou negritas para Lisboa, que foram retirados a

Fig.7. Vista sobre o Largo do Pelourinho Velho a partir da Rua Nova dos Mercadores. Recorte de pintura de anónimo. © Cortesia da Society of Antiquaries of London, Kelmscott Manor.

pedido, ou contra mercadoria ou dinheiro das suas terras. Os mesmos são depois vendidos em Lisboa. O preço de venda dum homem jovem é normalmente de 20 ou 18 coroas ou ducados, duma mulher, mas virgem, 12 ou ainda menos. Quando são postos à venda são exibidos pela cidade fora e depois levados e exibidos na Rainoba, o lugar onde os comerciantes se reúnem.»

O significado de «Rainoba» pode parecer misterioso à primeira vista, mas sabe-se de outras fontes que o mercado de escravos de Lisboa funcionava no Largo do Pelourinho Velho, contíguo à Rua Nova dos Mercadores (*Fig. 7*). Aparecer no manuscrito a designação «Rainoba» quer dizer que Thurneysser tinha ouvido o topónimo «Rua Nova» e escreveu essa expressão com uma grafia que corresponde à representação da sua perceção auditiva. Revela-se assim que nunca viu escrito o nome daquela rua, o que naquela época não surpreende, porque não havia letreiros com os nomes das ruas, tal como passou a ser normal, pelo menos a partir do século XVIII. Do mesmo modo também não havia um serviço de correio organizado que exigisse escrever-se o nome da rua no endereço duma carta. Isso está de acordo com Thurneysser ter registado aquilo que tinha observado e ouvido e que os seus relatos não serem cópias de textos de outro autor ou autores. Continua a sua descrição da venda de escravos da forma seguinte: «À frente deles vai sempre o pregoeiro, que com uma voz percetível e clara, anuncia e confirma o preço […] pelo qual se vai vender. Entre os mesmos que foram mostrados e estão à venda, há vários homens e mulheres, homens jovens e mulheres virgens todos nus ou descobertos, mas alguns com as vergonhas tapadas e o resto do corpo todo nu. Os comerciantes tocam e apalpam-nos em todas as partes e sobretudo ao pé do umbigo que quando está saído e o ventre está dilatado e inchado não os compram, porque acham que isso é sinal duma enfermidade perigosa. Também lhes têm de mostrar e abrir as vergonhas ou genitálias, esticarem os pés e levantar e baixar os braços repetidamente, de onde deduzem a sua força e mostrarem a capacidade de levantarem pesos (examinam-lhes também os dentes, tal como se faz com os cavalos) para os comprarem, mexem nas suas mamas e apalpam os mamilos. Perguntam--lhes quantos filhos já pariram, ao que respondem conforme os seus *cauponibus* ou vendedores lhes

ensinaram antes, mostrando um número de dedos [da mão]. E mostram dois, três, quatro ou cinco dedos, segundo tinham entendido, quantos filhos terão parido.»

Existe uma outra descrição do comércio de escravos em Lisboa que no essencial coincide com a de Thurneysser. Trata-se do relato da estada em Lisboa, em 1514, do peregrino flamengo Jan Taccoen de Zillebeke.[13] A caminho de Jerusalém, alojou-se em casa do seu filho que era comerciante em Lisboa. A descrição que faz de Lisboa inclui o desembarque de uma remessa de escravos vinda de África e a sua venda. Os relatos de Thurneysser e Zillebeke quanto à venda são quase idênticos, mas o de Zillebeke, contrariamente a Thurneysser tem uma descrição do desembarque com pormenores da maneira de lhes ser dada água e comida à chegada, como se fossem animais. O relato mais antigo dum desembarque de escravos é o de Gomes Eanes de Zurara, na praia de Lagos, em 1444, que se diferencia dos outros dois por comentar a crueldade do ato, sobretudo a separação das famílias e apresentar uma espécie de justificação moral pelo facto de haver escravos que, uma vez vendidos, passaram a trabalhar, a andar vestidos, terem aprendido a falar português, terem sido instruídos na fé cristã e finalmente sido batizados.[14]

AS RAZÕES DA NEGRIDÃO

Thurneysser também desenvolve no manuscrito as suas ideias sobre as razões da negridão dos africanos, embora reconheça logo de entrada: «[…] a razão de terem uma cor ou pele preta de carvão em todo o corpo […] quase que escapa à razão humana, e é quase impossível, nem é fácil de fundamentar ou compreender perfeitamente, por que são paridos pretos do ventre da mãe, e isso não só quando nascem nas suas terras, mas também na Hispânia Lusitana e todas as outras [terras] para onde são levados.» Reconhece, portanto, que a cor da pele é hereditária e não adquirida após o nascimento, e estabelece a analogia entre os resultados da miscigenação humana com a dos animais: «E quando um homem branco se mistura com uma moura preta, as crias da mesma são meio pretas, o que os lusitanos chamam *mulatos*. Tal como na mesma forma aos animais, os nascidos da cópula de um garanhão ou cavalo e duma burra, se chamam mulas, embora estas sejam em geral inférteis. Enquanto [nos mulatos e mulatas] em muitos [casos] se verifica que são férteis.»

Concluiu com toda a razão que a cor negra da pele não é adquirida após o nascimento por ação da luz solar e do calor intenso de África: «De tudo isto se colige e conclui suficientemente que a causa perfeita da negridão dos pretos e etíopes não pode ser a *elevatio solis* e *aducti* ou *fervens æstus regionis,* isto é, a elevação do Sol acima das suas terras e o seu calor imenso.» A partir daí o seu raciocínio torna-se, porém, mais confuso: «Acho, antes, que isso resulta da natureza particular e das propriedades da terra que habitam e que isso seja a causa mais importante da sua negridão. No entanto, também não nego de todo que contribuam muito para a sua negridão as referidas circunstâncias de ϖροδϕερομενα, isto é, *adiuvamenta* ou coadjuvação efetiva, nomeadamente a notícia da elevação do ⊙ acima das suas cabeças que provocaria a combustão e transmutação do sémen.» Esta passagem é bastante enigmática, mas certamente o vocábulo orosferomena foi derivado do grego orosfera (parte sólida da superfície terrestre), não se sabendo onde Thurneysser o pode ter lido ou se o inventou. Curiosa é também a utilização do símbolo «⊙», porque, na astrologia e na alquimia, este símbolo tanto significava Sol como ouro. Isto

[13] Eddy Stols, Jorge Fonseca, Stijn Manhaege, *Lisboa em 1514: O Relato de Jan Taccoen van Zillebeke* (V. N. Famalicão: Edições Húmus, 2014).
[14] Azurara, *Chronica do Descobrimento e Conquista de Guiné.*

sugere que Thurneysser, ao reconhecer que a fundamentação e a compreensão da negridão «escapa à razão humana», procura uma explicação nos astros ou na alquimia. Nas doutrinas da alquimia, o conhecimento reclama muitas vezes como origem uma revelação a um iniciado em vez de uma explicação racional baseada na observação e na experiência. Mais curiosa ainda é a afirmação de que «Esta opinião também é a do bem douto e nobre Damião de Góis, do supremo governador lusitano das Índias, que atribui a negridão dos etíopes a sobretudo três causas, como seja a *elevationem* ou elevação do ☉, depois disso a *adustionem spermatis parentum*, isto é o esperma dos seus pais ter sido queimado, e em terceiro lugar que a *regionis humiditatem*, isto é a secura ou os frutos da terra possuírem uma propriedade negrejante, com a exceção (diz ele) dos *mulis* (que se entendem como povos originários de uma província etíope especial), que transmigraram e vieram de *æthiopiam per colonias*, por estes originalmente não terem sido pretos, mas em geral terem ficado queimados pelo grande calor do Sol e se terem tornado negros. Por isso, não há dúvida de que a verdadeira causa da sua negridão é a vizinhança e elevação do Sol, de tal forma que o seu esperma pode ter ficado queimado e muitos outros ϖροδφερομενα produzirem uma matéria que confere a cor negra, e em especial a grande secura e aridez das mesmas terras. Além disso também acredito, e considero adquirido ou aceito totalmente que a principal causa da sua negridão é uma certa posição de várias estrelas, com que aquelas terras têm uma certa familiaridade de onde [a sua negritude] nasce e flui.

[Isto] porque também vemos que os índios ou indianos que agora se chamam *Brysili* que habitam no mesmo *Tractatu* das *zonæ torridæ*, isto é abaixo da linha dos equinócios, são muito mais, mas não completamente brancos, e antes mais amarelos ou pálidos do que pretos.»

A referência explícita a uma troca de ideias com Damião de Góis em si já é interessante, por revelar que este não só acolheu Thurneysser em sua casa (na altura no Paço das Alcáçovas, já abandonado por D. Manuel quando passou a residir no Paço da Ribeira), como o envolveu em colóquios filosóficos. Thurneysser tinha sido batizado numa igreja então já luterana da Basileia. Embora ele não apareça mencionado no processo de inquisição de Damião de Góis, sem dúvida que pertencia ao grupo de frequentadores da casa de Góis que levantaram suspeitas aos denunciantes. Nas especulações sobre as razões da negridão dos africanos como resultante de o sémen dos antepassados ter ficado torrado, reconhece a incompatibilidade dessa explicação com o facto de os povos naturais do Brasil em latitudes semelhantes terem peles mais claras. Essa contradição já tinha sido apontada em 1506 pelo cosmógrafo Duarte Pacheco Pereira em *Esmeraldo de Situ Orbis*.[15] No final do capítulo sobre os negros, Thurneysser mencionou, em estilo de adenda a seguinte nota acerca dum africano albino que deve ter adensado as suas dúvidas acerca da doutrina do sémen torrado: «Finalmente vi, no entanto, em Lisboa, um homem, que nascera e fora concebido não longe da Mina de dois pais negros de carvão e que, apesar disso, era todo branco, pois muito mais branco que um alemão [alguma vez] pode ser, mas que em todos os membros tinha feições semelhantes às dos mouros e egípcios ou negritas.»

[15] Pereira, *Esmeraldo*.

O «REI DOS ETÍOPES»

Nas últimas páginas do capítulo sobre os negros, Thurneysser menciona informações sobre as relações da Etiópia com Portugal. Damião de Góis, como responsável da Torre do Tombo, pode lhe ter mesmo facultado o acesso aos documentos diplomáticos em causa[16]:

> «O rei dos etíopes ou dos negritas, isto é dos mouros negros, é devoto de uma religião que é semelhante à religião da Igreja Romana, porque eu vi a carta dirigida pelo mesmo à santidade papal e ao rei da Lusitânia, na qual pede vários auxiliares, artesãos e mestres e solicita que lhe sejam enviados; na qual carta e missiva ele testemunha a sua fé, e relata o início e a origem [da mesma], embora também se queixe sobretudo dos reis e príncipes da Europa estarem desunidos e inválidos uns para os outros, quando deviam constituir um só corpo, uma vez que têm a mesma religião e uma única cabeça em Cristo. Tal como também é o caso do rei das Índias, que por isso dá muito amor e valor aos francos (porque é assim que chamam todos os povos europeus) quando vieram ter com ele para, na proteção e defesa da cidade de Cambaia, derrotarem e afugentarem centenas de milhares de turcos, pelo que escreve e testemunha expressamente que *Deum nobiscum esse*, isto é, que Deus está connosco e no meio de nós.»

PORQUE TERÁ THURNEYSSER ESCRITO O SEU RELATO, MAS NÃO O PUBLICOU?

Tudo o que se sabe sobre Thurneysser revela-o como uma pessoa com uma curiosidade insaciável, o que o levou a aproveitar todas as oportunidades de alargar o seu conhecimento do mundo. Assim viajou muito pela Europa e trabalhou em vários ofícios, preferindo essa forma de se instruir, em comparação com os ensinamentos que poderia colher em universidades e academias. Como paracelsiano que era, valorizava o conhecimento empírico pela observação e a experiência, considerando que quem mais sabia de um ofício era quem o praticava. Exprime estas convicções no frontispício da parte do manuscrito chamada «Miscelânea». Apresenta o seu relato afirmando: «As viagens e caminhadas de uma pessoa pensadora profunda e hábil são superiores a quase todos os *Academiarum studijs* ou diligência na filosofia.»

Para legitimar essa convicção, cita Plutarco (*Fig. 8*), de maneira a se apresentar como alguém que, através das suas viagens, ganhou muita sapiência. Esse género de autopublicidade resultava muito bem e contribuiu certamente para ser convidado como médico pessoal do Príncipe Eleitor do Brandenburgo. A sua fama espalhou-se por outras cortes europeias e levou, por exemplo, a rainha Isabel de Inglaterra a enviar o seu famoso conselheiro John Dee com uma amostra da sua urina a Berlim de onde voltou com um diagnóstico, receitas, um horóscopo e uma arca cheia de drogas, tudo pago a peso de ouro. Acumulou uma grande fortuna com negócios de exportação internacional dos produtos fabricados na sua botica, das obras que imprimiu na sua tipografia, sobretudo dos almanaques que continham entre muitas informações também horóscopos. É evidente que a habilidade com que criou a sua fama de sábio lhe serviu lindamente.

Não admira assim que, à medida que ia viajando e estudando, registasse as suas observações. Embora não se conheçam nenhuns destinatários específicos destes relatos, a sua leitura sugere que desejava impressionar os seus leitores germânicos com tudo o que lhe parecia maravilhoso, exótico e até insólito.

[16] Damião de Góis, *Fides, religio, moresque Aethiopum sub imperio pretiosi Ioannis…* (Leuven, Ex officina Rutgeri Rescij, 1540).

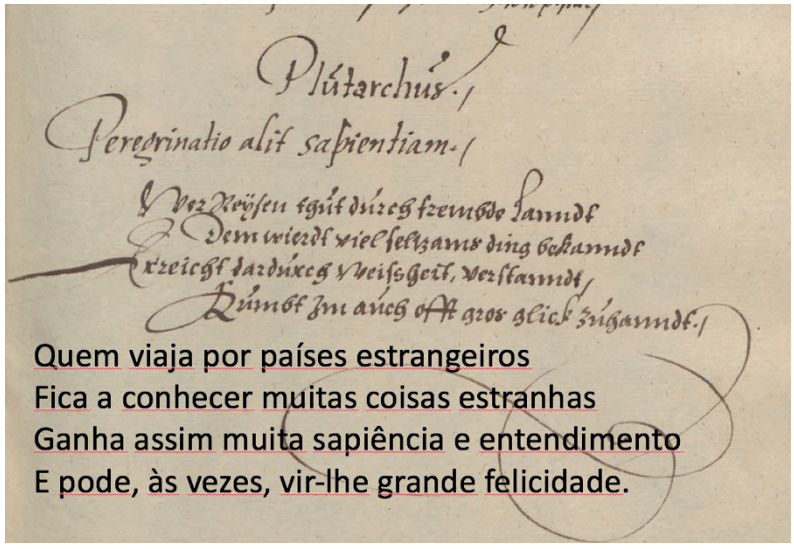


Fig. 8. Recorte do frontispício da parte do manuscrito com o título «Miscelânea».

Qual teria sido a razão de nunca ter publicado este manuscrito? O manuscrito que se conhece não é um autógrafo de Thurneysser, mas uma cópia feita por um dos seus servidores, cerca de 15 a 20 anos depois da sua viagem a Lisboa. Estaria a planear a sua publicação? Thurneysser publicou muitos livros, usando para esse fim a sua própria tipografia. Comparando a qualidade desses livros com este manuscrito verifica-se que, para se utilizar os textos para efeitos de publicação, havia ainda um longo caminho a percorrer. No que respeita à descrição da flora e fauna de Portugal, também se verifica que seria difícil competir com a qualidade de livros que outros autores publicaram naquela época, por exemplo herbários como o de Konrad Gessner (1516-1565) *Enchiridion historiae plantarum* e *Catalogus plantarum* (1542).

Thurneysser estava envolvido em muitos projetos simultâneos, pelo que não admira que alguns seriam adiados para mais tarde. Não só era o médico pessoal do Príncipe Eleitor, como também era responsável pela saúde pública em Berlim, nomeadamente durante a epidemia de peste bubónica de 1576.[17] Também era industrial e exportador de medicamentos, tipógrafo e autor de uma série de livros sobre alquimia, medicina e astrologia luxuosamente ilustrados, para o que dispunha de cerca de 200 empregados. Além disso, a sua partida precipitada de Berlim, por motivos pouco claros, obrigou-o a deixar para traz uma grande parte do seu espólio, o que o impossibilitou de sobre ele trabalhar. Isto seria uma explicação plausível, mas não suficientemente fundamentada para se poder desvendar as verdadeiras razões do manuscrito ter permanecido em Berlim, onde ficou incorporado na biblioteca do principado eleitor do Brandenburgo.

[17] Diethelm Eikermann, Gabriele Kaiser, *Die Pest in Berlin 1576*, 2012, Basiliskenpresse, Rangsdorf.

Tradução de excertos do manuscrito da *Staatsbibliothek zu Berlin ref. Ms. Germ. Fol. 97*

Excerto fol. 129r:

MISCELÂNEA
PARTE TERCEIRA
Histórica, geográfica, médica
e de várias [matérias] mistas
O que foi tudo depreendido e consignado
por um excelente e mui douto senhor
nas suas caminhadas e viagens
Ano de CRISTO
1555 e 1556
As viagens e caminhadas de uma pessoa pensadora profunda e hábil
são superiores a quase todos os *Academiarum*
studijs ou diligência na filosofia
Plutarco
Peregrinatio alit sapientiam
Quem viaja por países estrangeiros
Fica a conhecer muitas coisas estranhas,
Ganha assim muita sapiência e entendimento
E pode, às vezes, vir-lhe grande felicidade.

Excerto fol. 133v-142r:
Fol. 133v:

IIII.
ÆTHIOPUM VEL
Nigritarum descriptio
Descrição dos mouros
negritas e etíopes

Têm geralmente uma face larga, e todos [têm] cabelo crespo negro retinto ou de carvão,

Fol. 134 r:

[isto] tanto os homens, bem como as mulheres, que o rapam e cortam até à pele, e o qual, logo que volte a crescer um pouquinho, se encrespe de um modo estranho. O mesmo também se sente muito rijo ao tocar. Assim os homens também têm barbas tão negras como carvão e igualmente rijas, que não lhes ficam muito compridas. Muitos deles têm faces achatadas ou espalmadas. Muitos têm olhos muito grandes. Muitos outros têm olhos desmesuradamente pequenos, e são todos negros incluindo o globo e todos os círculos do mesmo. Porém o branco dos seus olhos tem pontinhos e estriazinhas vermelhas. Também os olhos, incluindo as pálpebras e sobrancelhas, sobressaem muito da cabeça. Assim também têm as pestanas e os pelos das sobrancelhas bastante curvados, isto é muito negros, curvados acima e

abaixo dos olhos. Costumam baixar os olhos logo para o solo, mas quando estão sozinhos arregalam-nos muito horrivelmente e devagar.

Fol. 134 v (276):

Também têm narizes chatos ou espalmados, tal como se tivessem sido esborrachados ou partidos por um soco, de maneira a haver um espaço largo sem nenhum alto entre ambos os olhos. Assim também têm um orifício muito grande e repugnante, isto é o buraco da boca, com beiços carnudos muito mais saídos do que a ponta do nariz. Também a ponta do nariz tem uma forma alargada, repugnante e feia.

A boca sobressai de baixo do nariz, como se fosse o focinho de um animal quadrúpede; o interior é muito grande e alargado. Também têm lábios com beiços muito carnudos e inchados, que eles não conseguem apertar ou puxar para dentro. Parecem como se as suas rugas tivessem sido

Fol. 135 r (277):

alisadas soprando por dentro ou que uma fitinha sedosa do lado de fora tivesse inchado, embora por dentro sejam muito secos e gretados. Têm dentes muito brancos e a ponta do queixo[?] muito achatada; os queixos ficam ensombrados pelos beiços ou por uma barba. Também são negros retintos como carvão ou pez no resto do corpo, embora haja uns mais pretos que os outros.

Na província da Etiópia ou da Arábia, os habitantes são chamados da Mina. Estes que vieram das costas do Mar Vermelho são os de maior peso e beleza. Têm uma pele macia e mesmo brilhante e lisa, e igualmente no seu corpo são mais perfeitos e mais fortes que os outros mouros, os quais o rei de Portugal não deixa levar daí para outros países por causa das excessivas abastanças dessas províncias. Por isso manda

Fol. 135 v (278):

poupá-los tanto. Porém os mouros que vêm, e são trazidos das ilhas de São Tomé ou do Cabo Verde ou cabeça verde e de Malagueta,[18] não são tão negros, mas têm uma cor castanha escura e sobretudo nas suas faces. No entanto, de uma maneira geral, têm as mesmas feições, tipos e figuras dos cabelos, narizes, lábios, pele, vergonhas e dos pés. A muitos entre eles fizeram, como estranho adorno, um corte de ambos os lados da boca, desde a testa ou cabeça até à boca, de forma a que as cicatrizes ou nervuras dos cortes se prolonguem até aos cantos da boca, ficando [os bordos] das feridas muito afastados, o que acham ser um adorno muito importante.

Às vezes também se golpeiam, como curativo de doenças, nas faces ou bochechas ao pé das orelhas com três ou quatro golpes atravessados, de maneira a deixar

Fol. 136 r (279):

escoar o sangue libertado, tal como entre nós acontece na flebotomia ou sangria. Às vezes também golpeiam e fendem as mãos e os pés. Muitos deles desbastam e afiam os dentes com uma lima, de maneira a torná-los tão bicudos como os dos cães, para poderem comer melhor e mastigar a comida. Muitos deles

[18] Costa da Malagueta, atualmente na Libéria.

também têm uma cabeça alongada e uma testa alta, ombros estreitos e contraídos, uma barriga cova ou metida para dentro, um peito liso ou plano, assim também têm possantes genitálias, nomeadamente um escroto desumanamente grande, e mais um vergalho possante. Além disso têm canelas bastante curtas e coxas e pés pequenos, mas sendo os pés mais largos junto aos dedos. Os dedos dos pés porém são quase igualmente compridos e grandes. Assim também

Fol. 136 v (280):

têm calcanhares pequenos e gretados que têm um aspecto mais esbranquiçado, mas que, juntamente com a planta do pé, são muito duros, como se tivessem sido secados. Também têm mãos bastante proporcionadas que por dentro não são assim tão negras como carvão. Assim, sobretudo nos homens, a pele das palmas das mãos é tão dura e áspera que nelas se podem afiar navalhas. Podendo considerar-se que a pele de quase todo o seu corpo seria também tão seca, gretada e dura, a [restante] pele do seu corpo é [no entanto] muito macia e não tem nenhum cabelo em qualquer sítio. A estatura ou a proporção do seu corpo é mediana. Assim alguns também se tornam grisalhos nas suas cabeças com a idade. São além disso muitíssimo fortes, de tal maneira que, em Lisboa, nos lugares ou mercados comuns, carregam muitas vezes pesos incríveis e transportam volumes grandes e pesados, tal que se se dissesse ou [d]escrevesse ninguém acreditaria. Por isso podem aguentar pacientemente muito trabalho e canseiras.

Fol. 137 r (281):

Assim também são muito irascíveis, e não se entendem uns com os outros, e lutam ou batem-se violentamente uns aos outros. Muitos deles, ou quase todos, têm cabeças tão duras que pouco sentem e se importam, quando nelas se bate ou malha. Pois, aqueles que arremessam e batem voltam com os punhos e gritam. E quando se disputam e se zangam, fazem muita gritaria e discussão e usam palavras ofensivas. Assim também são exageradamente vingativos, não se esquecendo facilmente do ódio, nem [são capazes] de dominar a ira e desistir. Nas suas terras não usam moeda ou numerário algum, mas só têm umas conchinhas brancas, a que chamam *dentales*, isto são conchinhas escolhidas, que usam entre eles em lugar de dinheiros, na província da Arábia ou Etiópia,

Fl. 137 v (282):

tal como foi mencionado antes. Quando lhes são trazidas e propostas pelos navegadores e comerciantes lusitanos vestes e vários e múltiplos utensílios, dão-lhes em troca ouro puro, nativo, em pepitas que trazem na boca. E quando lhes mostram ou indicam mercadoria que lhes sirva ou de que necessitem, cospem na mão a quantidade de pepitas que acham que vale a mercadoria, conforme a sua opinião. Se o comerciante ou mercador não aceitar esse ouro à primeira, afastam-se imediatamente e não juntam mais ouro ao anterior.

A maior parte ou grupo deles alimenta-se de raízes ou legumes, conforme as imagens que se desenharam[19], chamadas INHAME, BANANA e Batata,

[19] Deve referir-se a desenhos que constavam dum original perdido de que este manuscrito foi copiado.

Fol. 138 r (283):

os quais comem, por vezes crus, e outras vezes cozidos ou fritos. As mesmas raízes e legumes também são trazidos daquelas terras a Lisboa e aí vendidos em público.

Para bebida, usam porém água ou vinho que preparam a partir de frutinhos e cascas de palmeira, porque na sua terra crescem variadas espécies e géneros. Essa bebida é muito mais forte que um vinho o possa ser na Europa.

São muitíssimo incastos, desejosos, voluptuosos, lúbricos e desavergonhados, e especialmente as mulheres são mais divertidas, hábeis e mimosas nas *opere venereo*, pois são mais divertidas, sabidas e desejosas. E então têm especial pendor, desejo e amor por homens brancos e desejam concubinar e se miscigenar com os mesmos.

Nas suas terras não cresce nenhum gengibre,

Fol. 138 v (284):

mas muita malagueta a que podemos chamar *Paradeiß*.[20]

Mas são trazidos, anualmente muitos tais mouros ou negritas para Lisboa, que foram retirados a pedido, ou contra mercadoria ou dinheiro das suas terras. Os mesmos são depois vendidos em Lisboa. O preço de venda dum homem jovem é normalmente de 20 ou 18 coroas ou ducados, duma mulher, mas virgem 12 ou ainda menos. Quando são postos à venda são exibidos pela cidade fora e depois levados e exibidos na RAINOBA[21], o lugar onde os comerciantes se reúnem. À frente deles vai sempre o pregoeiro, que, com uma voz percetível e clara, anuncia e confirma o preço, isto é o dinheiro pelo qual se vai vender. Entre os mesmos que foram mostrados e estão à venda, há vários homens e mulheres, homens jovens e mulheres virgens

Fol.139 r (285):

todos nus ou descobertos, mas alguns com as vergonhas tapadas e o resto do corpo todo nu. Os comerciantes tocam e apalpam-nos em todas as partes e sobretudo ao pé do umbigo que quando está saído e o ventre está dilatado e inchado não os compram, porque acham que isso é sinal duma enfermidade perigosa. Também lhes têm de mostrar e abrir as vergonhas ou genitálias, esticarem os pés e levantar e baixar os braços repetidamente, de onde deduzem a sua força e mostrarem a capacidade de levantarem pesos (examinam-lhes também os dentes, tal como se faz com os cavalos) para os comprarem, mexem nas suas mamas e apalpam os mamilos. Perguntam-lhes, quantos filhos já pariram, ao que respondem conforme os seus *cauponibus* ou vendedores lhes ensinaram antes, mostrando um número de dedos [da mão]. E mostram dois, três, quatro ou cinco dedos, segundo tinham entendido,

Fol. 139 v (286):

quantos filhos terão parido. E sobretudo as mulheres.

No que respeita e é relativo à sua cor preta, e qual a razão de terem uma cor ou pele preta de carvão em todo o corpo, esta quase que escapa à razão humana, e é quase impossível, nem é fácil de

[20] Expressão alemã de significado obscuro dentro do contexto e que, por isso, não se traduziu. «*Paradeiser*» é uma expressão regional (Áustria) que significa tomate. Neste contexto, não é este com certeza o significado. Em inglês «*grains of paradise*» é um sinónimo antiquado de malagueta.
[21] Rua Nova dos Mercadores?

fundamentar ou compreender perfeitamente, por que são paridos pretos do ventre da mãe, e isso não só quando nascem nas suas terras, mas também na Hispânia Lusitana e todas as outras [terras] para onde são levados. E quando um homem branco se mistura com uma moura preta, as crias da mesma são meio pretas, o que os lusitanos chamam *mulatos*. Tal como na mesma forma aos animais, os nascidos da cópula de um garanhão ou cavalo e duma burra, se chamam mulas, embora estas sejam em geral

Fol. 140 r (287):

inférteis. enquanto [nos mulatos e mulatas] em muitos [casos] se verifica que são férteis.

De tudo isto se colige e conclui suficientemente que a causa perfeita da negridão dos pretos e etíopes não pode ser a *elevatio solis* e *aducti* ou *fervens æstus regionis,* isto é a elevação do Sol acima das suas terras e o seu calor imenso. Acho, antes, que isso resulta da natureza particular e das propriedades da terra que habitam e que isso seja a causa mais importante da sua negridão. No entanto, também não nego de todo que contribuam muito para a sua negridão as referidas circunstâncias de ϖροδφερομενα[22], isto é *adiuvamenta* ou coadjuvação efetiva, nomeadamente a notícia da elevação

Fol. 140 v (288);

do ⊙[23] acima das suas cabeças que provocaria a combustão e transmutação do sémen. Esta opinião também é a do bem douto e nobre Damião de Góis, do supremo governador lusitano das Índias, que atribui a negridão dos etíopes a sobretudo três causas, como seja a *elevationem* ou elevação do ⊙, depois disso a *adustionem spermatis parentum*, isto é o esperma dos seus pais ter sido queimado, e em terceiro lugar que a *regionis humiditatem*, isto é a secura ou os frutos da terra possuirem uma propriedade negrejante, com a exceção (diz ele) dos *mulis* (que se entendem como povos originários de uma província etíope especial[)], que transmigraram e vieram de *æthiopiam per colonias*, por estes originalmente não terem sido pretos, mas em geral terem ficado queimados pelo grande calor do Sol e se terem tornado negros. Por isso, não há dúvida que a verdadeira causa da sua negridão é a vizinhança e

Fol. 141 r (289):

elevação do Sol, de tal forma que o seu esperma pode ter ficado queimado e muitos outros ϖροδφερομενα produzirem uma matéria que confere a cor negra, e em especial a grande secura e aridez das mesmas terras. Além disso também acredito, e considero adquirido ou aceito totalmente que a principal causa da sua negridão é uma certa posição de várias estrelas, com que aquelas terras têm uma certa familiaridade de onde [a sua negritude] nasce e flui.

[Isto] porque também vemos que os índios ou indianos que agora se chamam *Brysili* que habitam no mesmo *Tractatu* das *zonæ torridæ*, isto é abaixo da linha dos equinócios, são muito mais, mas não completamente brancos, e antes mais amarelos ou pálidos do que pretos.

O rei dos etíopes ou dos negritas, isto é dos mouros negros, é devoto de uma religião que é semelhante à religião da Igreja Romana,

[22] Orosferomena, vocábulo de significado obscuro, mas que certamente está relacionado com orosfera (parte sólida da superfície terrestre).
[23] ⊙ é o símbolo alquimístico do ouro e do Sol, também usado na astrologia. Segundo as doutrinas da alquimia, ⊙ tem a virtude de causar transformações noutros corpos.

Fol. 141 v (290):

porque eu vi a carta dirigida pelo mesmo à santidade papal e ao rei da Lusitânia, na qual pede vários auxiliares, artesãos e mestres e solicita que lhe sejam enviados; na qual carta e missiva ele testemunha a sua fé, e relata o início e a origem [da mesma], embora também se queixe sobretudo dos reis e príncipes da Europa estarem desunidos e inválidos uns para os outros, quando deviam constituir um só corpo, uma vez que têm a mesma religião e uma única cabeça em Cristo. Tal como também é o caso do rei das Índias, que por isso dá muito amor e valor aos francos (porque é assim que chamam todos os povos europeus) quando vieram ter com ele para, na proteção e defesa da cidade de Cambaia, derrotaram e afugentarem centenas de milhares de turcos, pelo que escreve e testemunha expressamente que *Deum nobiscum esse*, isto é que Deus está connosco e no meio de nós.

Finalmente vi, no entanto, em Lisboa, um homem, que nascera e fora concebido não longe da Mina de dois pais negros de carvão e que, apesar disso, era todo branco, pois muito mais branco que um alemão [alguma vez] pode ser, mas que em todos os membros tinha feições semelhantes às dos mouros e egípcios ou negritas.

(Comunicação apresentada às Classes de Ciências e Letras
na sessão conjunta de 3 de maio de 2018)

The Central Argument from Newton's *Principia Mathematica* and some Essential Prerequisites of Classical Physics

Josef Bemelmans*

ABSTRACT

By determining the force of attraction that a spherical mass exerts on a mass point Newton succeeded in proving that gravitation is the reason for both the motion of the moon around the earth (and the planets around the sun) and for bodies falling down to the ground. In order to describe these motions in classical physics it was necessary to understand space, time, and matter such that these concepts could be quantified in a way that made an analysis possible by the methods of mathematics; in this development both new mathematical concepts were initiated as well as existing ones extended.

§1. Introduction. Survey of the talk

The first topic in this lecture will be a theorem from Newton's Principia Mathematica which is considered to be the central argument of this treatise: Newton determines the gravitational force that a spherical body exerts on a point outside of it. With this result Newton showed in particular that the same gravitational law governs the motion of the moon around the earth as well as the motion of a material body that falls down towards the surface of the earth.

When we ask under what assumptions such a statement is possible we recall how motion was understood in Antiquity. Then we present in particular Aristotle's concept of quantity that is basic for any description of physical phenomena by mathematical methods. Archimedes' law of the lever is an example from Antiquity that indicates how this concept was used; then we show in what sense it was extended to make modern physics possible.

§2. Newton's Principia Mathematica: The Central Argument

(i) Formulation of the Theorems: In the *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* by Isaac Newton, we find in Book I (*The Motion of Bodies*), Chapter XII ("The Attractive Forces of Spherical Bodies") the following statements:

> *"Proposition LXX. Theorem XXX: If toward each of the separate points of a spherical surface there tend equal centripetal forces as the squares of the distances from the point, I say that a corpuscle placed inside the surface will not be attracted by these forces in any direction."*

* Institute for Mathematics, RWTH Aachen, 52062 Aachen, Germany, bemelmans@instmath.rwth-aachen.de

"Proposition LXXI. Theorem XXXI: With the same conditions being supposed as in Prop. LXX, I say that a corpuscle placed outside the spherical surface is attracted to the center of the sphere by a force inversely proportional to the square of its distance from that same center."

(ii) The Central Argument: When we call these results (and others that follow from them) central argument then there must be a good reason to do so. Newton himself supports this claim as his letter to E. Halley from June 20, 1686 shows: "I never extended y^e duplicate proportion lower than to y^e superficies of y^e earth & before a certain demonstration I found y^e last year have suspected it did not reach accurately enough down so low... There is so strong an objection against y^e accurateness of this proportion, y^t without my Demonstrations... it cannot be beleived by a judicious Philosopher to be any where accurate."[1)] The Principia appeared in 1687, so these results were found rather late.

The law of the duplicate proportion means that the attraction $\mathcal{F}(\mathrm{R})$ of a mass point at position R towards a mass at S is directed towards S, and its size equals.

$$\mathcal{F}(\mathrm{R}) = \frac{c}{RS^2}$$

Based on this law Newton could determine the path that a planet takes around the sun at position S, e.g. one focal point of an ellipse. Because the distances between the sun and a planet (or the earth and the moon) are very large compared to their diameters it is reasonable to consider these as mass points.

But if one now considers a body of centimeter size about 1m above the ground here on earth, and if one assumes that every point of the earth exerts a force of the size above, then it is by no means obvious

Fig. 1. Isaac Newton

that all this results in the rather simple statement that the force is porportional to the distance of the material body from the center of the earth to the power of (-2). And it was this point that Newton didn't understand initially, namely that the law could be applied to points of the earth that are deep under the surface. But as soon as there are demonstrations, i.e. mathematical theorems, the question is settled, regardless what some "judicious Philosopher" might believe.

There is another reason for calling these propositions the central argument. In the portrait of Isaac Newton, painted towards the end of his life by "the studio of Enoch Seeman"[2], the light shines on Newton, on the terrestrial globe in the back and on the book that lies on the desk. This is the third edition of the Principia Mathematica from 1727, opened up on pp. 204-205, where consequences of Theorems XXX and XXXI are discussed. It is quite likely that this is not a coincidence, so it stresses the importance of Newton's results about the gravitational force of a spherical body.

(iii) Proof of Theorem XXXI:

It is not possible to present a detailed proof in this lecture, but I will hint at some characteristic points of the procedure. The figures that belong to Theorem XXXI are really striking because the spherical body is shown twice, and the distances of the points P and p, where the force exerted by the spherical body is to be determined, are different. That already reminds us on proofs from classical Greek geometry; when the area $\mathcal{A}$(R) of a disc of radius R was to be determined, the statement would read like

$$\mathcal{A}(\mathrm{R}) : \mathcal{A}(\mathrm{r}) = R^2 : r^2,$$

thus avoiding the quantity π, the area of the unit disc, which could not be determined.

Now consider the lines PK and PL that determine the arcs *a(HI)* and *a(KL)* of the circle; rotation of *a(HI)* about the axis PB gives the spherical ring *R(HI)*. Newton compares the contribution of *R(HI)* with the corresponding one in the second configuration, where the point, now called p lies closer to the sphere. We draw lines pk and pl such that the corresponding arcs *a(hi)* and *a(kl)* have the same lengths as *a(HI) and a(KL).* This construction and many other steps can be done by using classical geometry. A detailed proof is given by Dana Densmore in her book *Newton's Principia: The Central Argument*[3], where in particular the theorems from Euclid's elements are quoted that Newton used.

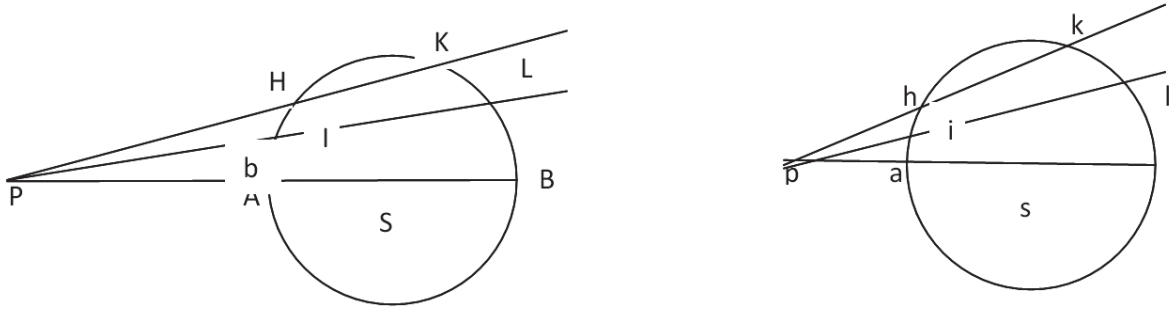


Fig. 2. Proof of Theorem XXXI

So eventually Newton shows that the force $\mathcal{F}(P)$, acting on a mass point at P, or p, resp. satisfies

$$\mathcal{F}(P) \;:\; \mathcal{F}(p) \;=\; ps^2 \;:\; PS^2;$$

This is a comparison of the forces acting on different points rather than an equation like

$$\mathcal{F}(P) = \frac{c}{PS^2},$$

as we would write nowadays.

There are variants of Newton's proof that give the same result but are closer to modern arguments, e.g. by J. E. Littlewood[4], who characterizes Newton's original reasoning by the statement: "The proof leaves the reader in helpless wonder." This may be taken as an invitation to study this beautiful piece of mathematics line by line.

§3. Motion in Classical Greek Philosophy and the Category of Quantity (Aristotle)

Newton's theorems are the basis for describing the motion of the planets around the sun and of the motion of a material body here on earth. In order to investigate our concept of nature that makes this description possible, we briefly consider motion as it was understood in classical antiquity.

(i) Motion in Aristotle's Physics

Neither in the work of Aristotle nor of any other philosopher from Antiquity or the Middle Ages has motion of material bodies been analyzed in a satisfactory way, but comparing our concepts with the classical ones (from which they developed) helps to understand them better. With this aim in mind I shall not concentrate on the deficiencies of ancient physics.

In the first sentence of *Physics*, Book III, Aristotle states that the phenomena in nature cannot be understood, if motion is not understood:

"Nature is the underlying principle of motion and change, and it is the object of our inquiry. We must therefore see that we understand the meaning of "motion"; for if it were unknown the meaning of "nature" too would be unknown."[5]

This statement was at the time of Aristotle far from trivial, because there were other philosophers who considered change to be an illusion, and they held that knowledge must aim at ideas that do not change at all. From Aristotle on, it was more and more accepted that motion is the truly basic concept of nature, as Albert of Saxony (1316-1396) states: "Ignorato motu ignoratur natura."

And the next sentences in *Physics*, Book III, give already the connection with mathematics:

"When we have determined the nature of motion our next task will be to attack in the same way the terms which are involved in it. Now motion is supposed to belong to the class of things which are continuous; and the infinite presents itself first in the continuous – that is how it comes about that "infinite" is often used in definitions of the continuous (what is infinitely divisible is continuous). Besides these, place, void, and time are thought to be necessary conditions of motion."[6]

When we investigate the motion of material bodies we can ask for the causes that produce – and stop – it, and we can analyze quantitatively which means that we concentrate on how slow or fast a motion is.

(ii) Motion of heavenly bodies and motion on earth: With respect to the causes of motion I will state only one point. Aristotle distinguishes the motion of a body here on earth strictly from the motion of the sun, the moon, and the stars. A motion on earth starts at some point and at some well-defined time, and it ends at some point and time, both due to certain causes. (And then one may characterize the causes, as Aristotle does: causa materialis, finalis, efficiens, and formalis.) The motion of a heavenly body is of a completely different nature: it has no beginning and no end, because it proceeds in circles, which implies that it does not change; and only this type of motion is appropriate to its divine character. And because of this property they are not to be investigated as are things here on earth. The example of Anaxagoras (499-428) shows the radical difference between the divine and the profane region. He claimed that the sun is a hugh, hot mass, and that the moon is cold mass that does not shine by itself but reflects the light from the sun. Because of such statements he was accused in 430 of ἀσέβεια[7]: he was not accused of making some incorrect statement; because of their divine character the sun and the moon are not objects of our investigation at all – this was considered committing a sacrilege –, hence we have to face them with respect and devotion. Anaxagoras was sentenced to death; his friend Perikles could arrange that he was safed from this punishment, but he had to go into exile.

It was monotheism that changed this attitude, as we can see from the biblical story of the creation in Gen 1,1 – 2,4a which was written around 500 BC. Israel at that time was dominated by the Babylonians, and for them Isis, the goddess of the moon, was the highest deity. Now Gen 1,14-19 states that God created a big lamp and a small lamp, so the deities of the sun and the moon are not even mentioned by name, and they are created for certain purpuses, in particular to indicate the years and the holy days of obligation, when Israel should celebrate their god, because the calender in Israel is determined by the phases of the moon. Clearly an object with such a purpuse can be investigated like any other object here on earth.

§3 (iii) The Category «how much» (ποσόν): In the quotation from *Physics*, Book III, above, Aristotle speaks of "continuity", a mathematical concept, at which we now look in more detail.

"Quantity is either discrete or continuous. (...) Instances of discrete quantities are number and speech; of continuous lines, surfaces solids, and, besides these time and place.

In the case of the parts of a number, there is no common boundary at which they join. For example: two fives make ten, but the two fives have no common boundary but are separate. (...) Number, therefore is a discrete quantity.

A line, on the other hand, is a continuous quantity, for it is possible to find a common boundary at which its parts join. In the case of the line, this common boundary is the point; in the case of the plane it is the line: for the parts of the plane have also a common boundary."[8]

"Quantum" means that which is divisible into more constituent parts of which each is by nature a "one" and a "this". A quantum is a plurality (multitude) if it is numerable, a magnitude (quantity), if it is measurable. "Plurality" means that which is divisible potentially into non-continuous part, "magnitude" that which is divisible into continuous parts; of magnitude, that which is continuous in one dimension is lenght; in two breath, in three depth. Of these, limited plurality is number, limited lenght is a line, breath a surface, depth a solid."[9]

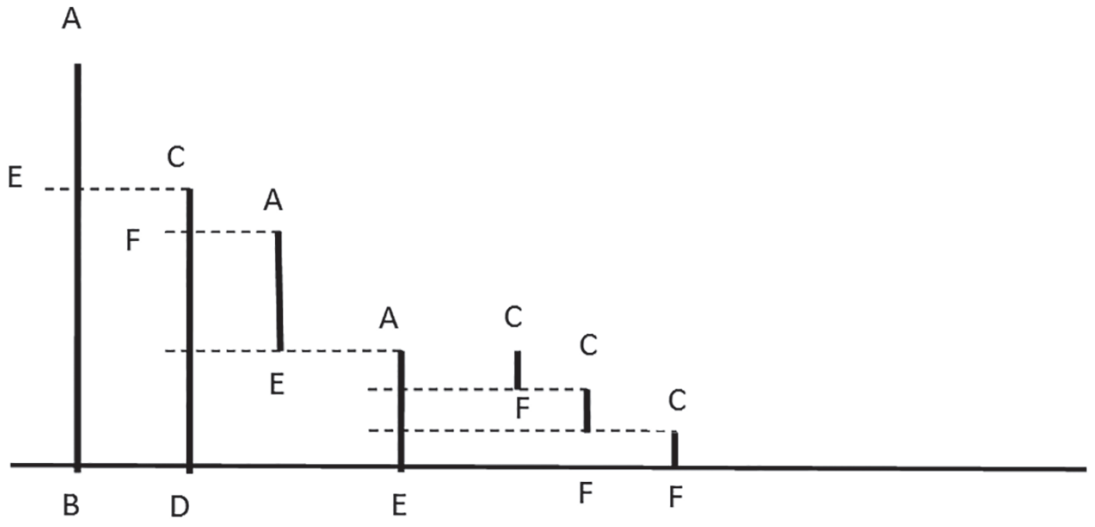


Fig. 3. Method of Subtracting in Turn.

For us the distinction between multitude and quantity is evident, but in Antiquity the occurrence of incommensurate lines was a truly sensational event; therefore I will briefly recall some aspects of this development. The greek geometers had found a method, called subtracting in turn, to compare two lines AB and CD, essentially by counting. We subtract the shorter line CD from the longer one AB as often as possible; here we can subtract it once, because the rest AE is shorter than CD. Then we subtract AE from CD two times; that leaves the rest CF. And CF fits three times into AE, and the procedure stops. So we have shown CD = 7 · CF and AB = 10 · CF, which means that the lines have a common measure CF, and their length satisfy AB : CD = 10 : 7.

When we now ask for a common measure of certain lines like a side and a diagonal in a regular polygon we may proceed in the same way, but now these lines as well as their differences are part of a geometric figure. Hippasos of Metapont (ca. 510-440) found in this case for the side s=AB and the diagonal d=BD that the difference

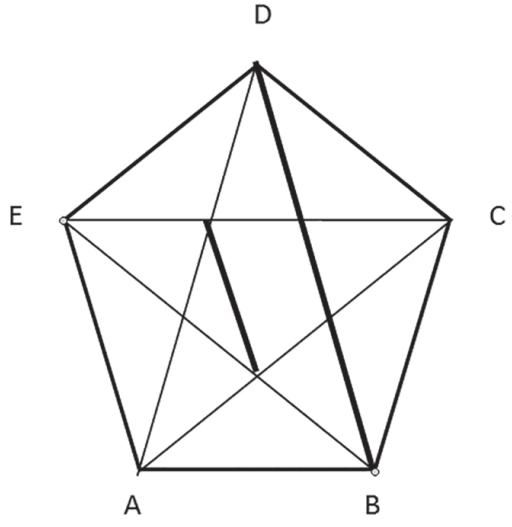


Fig. 4. Regular pentagon.

d_1:= d-s is the length of the diagonal of the inner, smaller pentagon, and s_1:= s-d_1 is its side.[10] Therefore the process of subtracting in turn does not stop, it gives in every step the same relation for the side and the diagonal of a smaller pentagon, and there cannot exist a common measure for the side and the diagonal of a pentagon.

The same phenomenon occurs in the square, and here we can give in addition to a geometric proof like the one above also an algebraic one that was also well known in classical times. In the unit square the length of the diagonal equals $\sqrt{2}$, so if the diagonal and the side of length 1 are commensurate, there must hold

$$\sqrt{2} = \frac{p}{q},$$

for some numbers p, q∈ ℕ; we may assume that p and q have no common divisor. Squaring this equation gives

$$2 \cdot q^2 = p^2,$$

hence p is even: p = 2r for some r. If we insert this into the last equation we obtain

$$2 \cdot q^2 = 4 \cdot r^2,$$

so q is an even number, too, which is a contradiction to our assumption that p and q have no common divisor.

Incommensurability was definitely a phenomenon that made a lasting impression on everyone in Antiquity, not just on the Pythagoreans who claimed that the world is ordered according to number. We present some examples that show how Aristotle referred to this item.

"For all who affect an argument per impossible infer syllogistically what is false, and prove the original conclusion hypothetically when something impossible results from the assumption of its contradictory; e.g. that the diagonal of the square is incommensurate with its side, because odd numbers are equal to evens if it is supposed to be commensurate."[11)]

Aristotle discusses the reductio ad absurdum, and as an example he chooses to the proof that we just presented, namely that $\sqrt{2}$ cannot be equal to a fraction of natural numbers. But he refers to the punch line only, namely that a number cannot be both even and odd – this is not to be expected in a text that is part of the Organon, which contains introductory topics of Philosophy.

The Metaphysics of Aristotle starts with the statement "All men by nature desire to know."[12)], and they do so for the following reason: "For it is owing to their wonder that men both now begin and at first began to philosophize."[13)] Here wondering means that we do not understand why things are as they are.

"For all men begin, as we said, by wondering that things are as they are, as they do about self-moving marionettes, or about the solstices or the incommensurability of the diagonal of a sqare with its side; for it seems wonderful for all who have not yet seen the reason, that there is a thing which cannot be measured even by the smallest unit. But we must end in the contrary and, according to the proverb, the better state, as is the case in these instances, too, when men learn the cause; for there is nothing that would surprise a geometer so much as if the diagonal turned out to be commensurate."[14)]

The examples that Aristotle presents are figures that can move by themselves, these are things that are made by man, then the solstice as a phenomenon that is investigated in astronomy, and eventually incommensurability, an example from theoretical knowledge, and this point is discussed much longer that the other two.

Aristotle uses the concept of quantity in his work "On the Heavens", e.g. when he proves that there cannot be a body of infinite weight in the universe[15)], but this does not lead to an equation involving several quantities which states some law of physics. This step was done first by Archimedes, who extends the concept of magnitude and uses it in a way that is still valid today.

§4. Quantity and the Law of the Lever (Archimedes)

In the work of Archimedes we find several contributions where the concept of quantity plays an essential role. He calculated the area of certain figures like the segment of the parabola, thus extending the quantity "area", which was first defined for elementary figures only, to more general situations.

(i) Area of the Segment of a Parabola

Consider a parabola $\mathcal{P}$(ACB) and define the segment $\mathcal{S}$(ABC) to be that part below the parabola which is bounded by the line AB

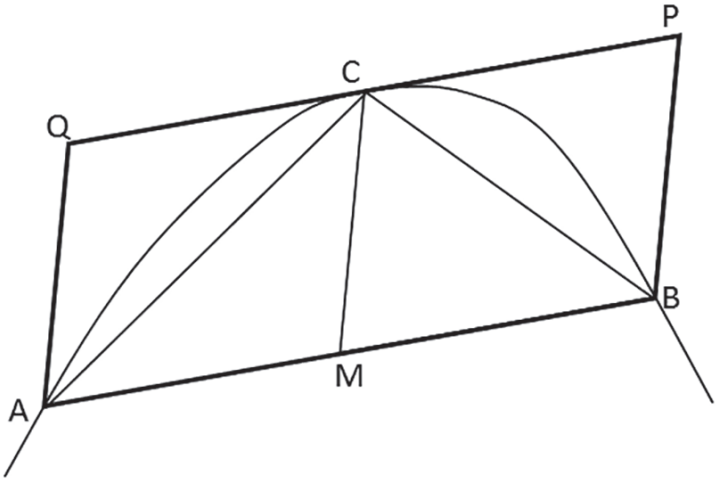


Fig. 5. Segment of a parabola.

The area of this segment equals the area of the triangle $\Delta(ABC)$ multiplied by ⅓, where the point C of the parabola is chosen in such a way that the tangent in C is parallel to the segment AB:

$$|\mathcal{S}(ABC)| = 4/3 \cdot |\Delta(ABC)|.$$

The proof is truly ingeneous: The triangle $\Delta(ABC)$ defines two smaller segments of the parabola, determined by the sides AC and BC and in these parts one defines new triangles as before; each one has ⅛ of the area of $\Delta(ABC)$. If we continue in this way we get a geometric series:

$$1+\ \frac{1}{4}+\frac{1}{4^2}+\frac{1}{4^3}+\ldots=\ \frac{4}{3}\,.$$

How does Archimedes prove this result? Today we would argue like this: the geometric series $\sum_0^\infty q^n$ is convergent for $|q|<\ 1$, and its limit is $S=\frac{1}{1-q}$, which gives $^4/_3$ for q=¼. Archimedes shows that $S>\ ^4/_3$ as well as $S\ <\ ^4/_3$ are impossible, hence there must hold equality; he does not indicate how he found this value.

In the „Works of Archimedes"[16], edited by T.L. Heath, one finds the following drawing that is certainly an elegant geometric argument that gives the limit $^4/_3$.

From the unit square we remove the square with sides of length ½ and get the region A, whose area is ¾. If we proceed in this way in the smaller square we obtain the region B of size ¾-¼. Continuing in this way we get C, D, etc. whose area is always ¾ of the previous one. As A, B, C, D, (…) fill the unit square we have

$$1 = \frac{3}{4} \cdot \left(1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{4^3} + \ldots \right) ,$$

which is the result. It must be noted, however, that this figure is not contained in the critical edition[17] of the works of Archimedes; here and on many other places Heath goes his own way in editing and translating classical texts.

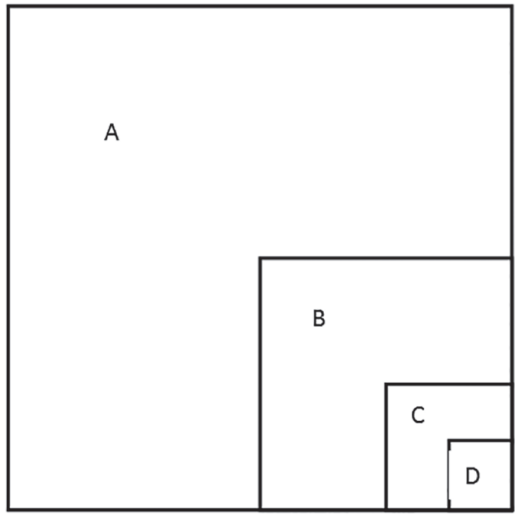


Fig. 6. Limit of the series.

(ii) The Law of the Lever: Archimedes determined the area of a segment of a parabola twice, the proof by exhaustion being the second one. His first proof is based on the law of the lever: Two weights A and B are in equilibrium in if their distances from the fulcrum Γ of the lever are inversely proportional.

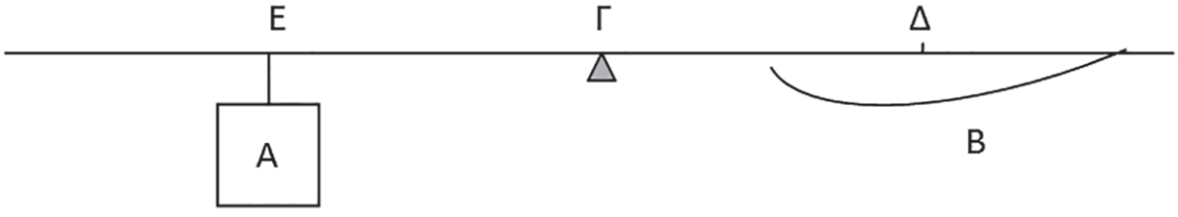


Fig. 7. Area determined by law of the lever

The first question is: How are the distances of the weights A and B to Γ defined? Distances are defined between points, hence one must associate to the weights A, e.g. a square, and B, e.g. a segment of a parabola, two points – and this is done by introducing the center of gravity: the weights A and B are replaced by points E and Δ that are supposed to have the same weight than the square and the segment.

$$A : B = \Gamma\Delta : \Gamma E$$

The proof shows how Archimedes works with this concept, but it is too long to be included here.

The main point that makes this mathematical formulation of a physical law possible is the concept of the center of gravity. This abstraction allows for introducing a quantity, namely a distance between two points; one then can formulate proportions between these quantities and finally write the law of the lever as a mathematical equation.

This is another example that shows how Archimedes extended the concept of quantity, and this procedure became later the model for formulating physical laws in mathematical terms.

§5. Quantity in Newton's Principia Mathematica

(i) Definitions I – V: Eduard Jan Dijksterhuis, historian of Science from Utrecht (who worked for a long time as a teacher at a high school in Tilburg) once suggested that we should memorize the first sentences of the important books of Science as we did in school with the works of authors like Caesar and Homer. So let's look at the first sentences in Newton's Principia:

„Quantitas materiae est mensura ejusdem orta ex illius densitate et magnitudine conjunctim."[18)]

In the following line he explains by a very elementary example that the quantity of matter is the product of the density and the volume of a material body. What is new here with respect to the examples from the work of Archimedes, will become clear when we look at the second definition.

„Quantitas motus est mensura ejusdem orta ex velocitate et quantitate conjunctim."[19)]

The concept of quantity has been developed over the centuries, in particular during the Middle Ages, such that in Newton's time a quantity can be defined as a product of other quantities. The difference to Archimedes' use of quantities is significant: now one can define the product of the weight A and its distance ΓE from the fulcrum as a new quantity A· ΓE, which we call the momentum of the weight, and doing the same for the weight B, we can now formulate the law of the lever in a very elegant way:

$$A \cdot \Gamma E = B \cdot \Gamma \Delta.$$

So the notion of quantity, as we see it in Newton's definitions I and II is clearly a further step of abstraction which took a long way to do.

Definition III „The innate force of matter is a power of resisting, by which every body, as much as it has, continues in its present state, whether it be of rest, or of moving uniformly forward in a right line."[20)] Some lines later the innate force of matter is called „nomine significantissimo" the inertial force. The principle of inertia is probably the best topic to point out the fundamental difference in the concept of motion in modern science and in antiquity. The main point is that the acceleration of a mass is proportional to the exterior force acting on it, and consequently the state of rest and the uniform motion are equivalent. Therefore the uniform motion can now be called a state (status), a term that literally means the absence of motion. Aristotle defined motion to be the opposite of the state of rest, and each motion starts at some position and some time from rest – and it ends at some position and time.

Then in Definition IV „An impressed force is an action exerted upon a body, in order to change its state, whether of rest or of uniform motion in a straight line."[21)] Newton defines the forces that produce some motion, and he gives the following examples:

a) A shock may cause a motion.

b) The pressure exerted on an object by a moving fluid results in some motion of the object.

c) The centripetal force generates a motion.

The last one is defined in Definition V: „A centripetal force is that by which bodies are drawn or impelled or any way tend towards a point as to a center."[22)] Here he lists three forces, namely d) gravity by which bodies tend towards the center of the earth, e) the magnetic force, and f) the force that keeps the planets in their orbits rather than moving away on a straight line.

(ii) Concluding Remarks: Now we can come back to Newton's theorems and the Central Argument, as it was outlined in §2. The main step consists of determing the "impressed forces", in particular the centripetal forces in such a way that these quantities and the corresponding acceleration of bodies are coupled in mathematical equations from which the orbits of planets, comets or projectiles can be deduced. I tried to show some new properties of the description of processes in nature by modern means, in particular as far as the application of mathematics is concerned. In doing so, I was somewhat unfair to Newton because I stressed the mathematical proof of Theorem XXXI. For Newton this was not the end of an investigation but the starting point for studying much more general configurations like the attraction od non-spherical bodies, the shape of a gravitating body that rotates about an axis and is therefore flattened at the poles, the attraction of two spherical bodies etc. Later, in Book II, he investigates the motion in resisting media, and all these topics show that the applications to various physical problems are his main concern. When I entered this lecture hall here in the academy I saw a beautiful faience stating: *Nisi utile est quod facimus, stulta gloria*. In the sense of this proverb, Newton's glory was definitely superb, because he established a theory that is certainly very useful.[23)]

These new methods of investigation have replaced elder ones, and they changed the way we look at nature. This is the topic of an intense philosophical discussion, about which I cannot report here. But I would like to present an example by Newton himself about this philosophical background; it is taken from a letter to Roger Cotes, who worked with Newton when the second edition of the *Principia* was prepared which appeared in 1713.

"Indeed, I have not been able to deduce the reason of these properties of gravity from phenomena, & I do not feign hypotheses. For whatever is not deduced from phenomena is to be called an hypothesis; and I do not follow *Hypotheses*, whether Metaphysical or Physical whether of occult qualities or Mechanical. It is enough that gravity should really exist, & act according to the laws expounded by us, & should suffice for all motions of the celestial bodies & and of our sea."[24)]

According to ancient philosophy it was the quality of some material body that induced a motion that eventually led the body to its appropriate place. Newton rejects such a conception; it is enough to formulate the laws by certain quantities, and it is not necessary to follow some hypotheses. Here he probably thinks of a mechanical hypothesis like the one introduced by Descartes, who assumed that the space between the central body and the planets is filled with some material that eventually generates the motion of the planets. And Huygens, a strict Cartesian, calculated that these vortices move around the earth with 14-times the rotational velocity of the earth.

I would like to close with a short remark about the last word of the citation from Newton's letter; here, as well as in the Principia on various places, he says "our sea", when "the sea" would be appropriate. It was probably a common, but certainly not modest phrase in England at that time. Floris Cohen, a dutch historian of science has investigated the time of the scientific revolution in a broader context.[25)] He not only analyzes the new way we look at the processes in nature but also many other attitudes that have changed. What is our place here on earth? How do we use the resources? Clearly the new science was the basis for a great technical development that enabled big economical changes. And, according to Cohen, there must first be some idea that gives a new picture. As an example he refers to seafaring and asks: What is necessary to cross the ocean and to reach new continents? Navigation, building of ships, providing the means to live on a ship for a long time, and many more solutions to practical problems

must be found, before the crossing of the ocean can be tried. But the truly revolutionary idea consists in a different view of the world, in setting new goals that will be pursued. And this was achieved first by the Portuguese nation, as we all know well. R. Hooykaas has shown that these Voyages of Discovery were an important step that made the scientific revolution possible.[26)]

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 17 de maio de 2018)

REFERENCES

1) The Correspondence of Isaac Newton, vol. II, Cambridge, 1960, pp.435f.
2) Printed with permission of the National Portrait Gallery, London.
3) Dana Densmore, Newton's Principia: The Central Argument. Translation, Notes and Expanded Proofs, Green Lion Press, Santa Fe, NM. 1999, pp. 356-372. This book is used in regular courses in St. John's College, Anapolis, MD, and Santa Fe, NM. Here the students learn a subject by studying the original texts, e.g. elementary geometry from Euclid's elements, conic sections from the work of Apollonius, and for these topics there are textbooks like the one by Densmore that explain the classical texts in a truly detailed manner.
4) J.E. Littlewood, Newton and the attraction of the sphere, Math. Gazette 32 (1948) No. 300, reprinted in B. Bollobas (ed.), Littlewood's miscellany, Cambridge, 1986, pp. 169-174.
5) Aristotle, Phys.III.1.200b12-15.
6) Aristotle, Phys. III.1.201b15-21.
7) εὐσέβεια denotes the reverence towards the gods or parents, hence ἀσέβεια expresses the opposite attitude, cf. H. G. Liddell & R. Scott, Greek-English Lexicon, Oxford, 1996, pp. 255, 731.
8) Aristotle, Cat. VI. 4b20-28.38-40.
9) Aristotle, Met. V.13.1020a7-12.
10) K. von Fritz, The Discovery of Incommensurability by Hippasos of Metapont, Ann. Math. 46 (1945)242-264.
11) Aristotle, An.Pr.I.23.41a23-27.
12) Aristotle, Met.I.1.980a21.
13) Aristotle, Met.I.2.982b12-13.
14) Aristotle, Met.I.2.983a12-23.
15) Aristotle, De caelo I.6.273a7-274b30.
16) T.L. Heath, The Works of Archimedes, Mineola, NY, 2002 (Dover reprint of the edition from 1897, Cambridge).
17) I.L. Heiberg, Archimedes, Opera Omnia, vol. II, Stuttgart, 1972, p.310.
18) Isaac Newton's Principia Mathematica, ed. by A. Koyré and I.B. Cohen, vol. I, Cambridge, MA, 1972, p.39 (The quantity of matter is the measure of the same, arising from its density and bulk conjointly.).
19) ibid., p. 40 (The quantity of motion is the measure of the same, arising from the velocity and quantity of matter conjointly.).
20) Sir Isaac Newton's Principia, Motte's Translation, revised by F. Cajori, vol. I, Berkeley, 1962, p.2.
21) ibid., p. 40.
22) ibid., pp. 2-3.
23) In Book II, Section VII of the Principia (The motion of fluids, and the resistance made to projected bodies) Newton determines the shape of least resistance for rotationally symmetric bodies of given length and base, thus solving a variational problem that is much harder to deal with than the one that J. Bernoulli proposed almost 10 years later, and which is regarded as the starting point of the modern calculus of variations. In the Scholium to Theorem XXVIII Newton says: „This proposition I conceive may be of use in the building of ships.", ibid. p.333
24) This is part of the Scholium that Newton included in his letter to Cotes from 2 March 1712/13, cf. The Correspondence of Isaac Newton, vol. V, Cambridge, 1975, pp.241f.; see also I.B. Cohen, Introduction to Newton's Principia, Cambridge, MA, 1971, pp. 241f.
25) H.F. Cohen, The Scientific Revolution. A Historiographical Inquiry, Chicago, 1978.
26) ibid., pp. 354-357, and the literature cited there.

As equações de Navier-Stokes enquanto "millennium problem"

H. Beirão da Veiga

ABSTRACT

The "Clay Mathematics Institute" (CMI) has named seven "Millennium Prize Problems". The Scientific Advisory Board selected these problems, focusing on important classical questions that have resisted solution over the years. The board of Directors of CMI designated a 7 million prize fund for the solution of these problems, with 1 million allocated to each. The Millennium problems are the following: Yang-Mills and Mass Gap; Riemann Hypothesis; P vs NP Problem; Navier-Stokes Equation; Hodge Conjecture; Poincaré Conjecture; Biirch and Swinnerton-Dyer Conjecture. In the meantime the famous Poincaré Conjecture (1904) was solved by the Russian mathematician Grigoriy Perelman.

In the following we are interested on considering the above fourth problem, the Navier-Stokes existence and smoothness problem. These equations describe the motion of a viscous fluid in the three dimensional space. The existence of a regular solution, for all times, in correspondence to any smooth initial data, is not known. The resolution of this problem (or the proof of its negation) is the purpose of the prize.

A very elementary introduction to this problem, mostly to the techniques, is the aim of these notes.

For more information see the official statement of the problem http://www.claymath.org/sites/default/files/navierstokes.pdf.

1. INTRODUÇÃO AO TEXTO ESCRITO

O "Clay Mathematics Institute" (CMI), Cambridge-Massachusetts, selecionou sete "Millennium Prize Problems", tendo em conta importantes questões clássicas em aberto de há muito no campo da Matemática. O CMI dedicou um prémio de um milhão de dólares a cada uma das soluções (completas) dum dos problemas.

Os sete problemas escolhidos foram os seguintes: Yang-Mills and Mass Gap; Riemann Hypothesis; P vs NP Problem; Navier-Stokes Equation; Hodge Conjecture; Poincaré Conjecture; Biirch and Swinnerton-Dyer Conjecture. Dos sete problemas propostos apenas um foi entretanto resolvido, a famosa conjectura de Poincaré (1904), pelo matemático russo Grigoriy Perelman. Para uma descrição mais completa recomendamos o site: http://www.claymath.org/sites/default/files/navierstokes.pdf.

O quarto desafio, ao qual dedicamos estas notas, requer essencialmente uma demonstração da existência duma solução regular, para todos os tempos, e para quaisquer dados regulares, das equações de Navier-Stokes que descrevem o movimento dum fluido, viscoso e incomprimível, ao longo do tempo. Ou, alternativamente, uma demonstração da falsidade de tal afirmação. Não existe uma conjectura aceite

pela maioria da comunidade científica a propósito deste problema, razão pela qual mereceu uma situação particular no que diz respeito a possíveis contra-exemplos. Não é possível expor tal dilema sem um qualquer recurso às técnicas usadas. Uma exposição demasiado elementar seria aqui mistificadora. Optamos pois por apresentar um programa simplificado, mas através do qual introduzir as técnicas necessárias para um estudo mais profundo do problema. Noções tais como derivada fraca, solução fraca, espaços funcionais abstractos, em particular espaços de Sobolev, etc. Esta constitui talvez a parte mais interessante para o não especialista, ao qual a comunicação foi dedicada. Entendemos um ouvinte com alguns conhecimentos da teoria elementar das equações da Física-Matemática. O texto que segue é aquele escrito antes da intervenção, e que achamos por bem não modificar. É pois, prevalentemente, uma introdução à metodologia e às técnicas necessárias para iniciar um estudo mais profundo do problema. Só no final faremos a ligação com as equações de Navier-Stokes, numa forma necessariamente sucinta. Um seu desenvolvimento, sendo inevitavelmente informal e não rigoroso, não teria cabimento em notas escritas. Por esta razão foi previsto ser apresentado apenas durante a exposição oral, com recurso a instrumentos de comunicação de maior elasticidade, ardósia e giz, ou equivalentes.

Por fim, para o estudo, e relativa bibliografia, das equações de Navier-Stokes recomendamos o artigo de G.P. Galdi "An introduction to the Navier-Stokes initial-boundary value problem", in *Fundamental Directions in Mathematical Fluid Mechanics*, Adv. Math. Fluid Mech., pág. 1-70. Birkhäuser, Basel, 2000.

2. ESPAÇOS FUNCIONAIS "ABSTRACTOS"

Vamo-nos concentrar sobre funções $u(x_1, x_2, x_3)$ de três variáveis reais que representam as usuais coordenadas cartesianas do ponto x num sistema de eixos tri-ortogonais no espaço tridimensional $\mathbb{R}^3$.

Dadas duas funções quaisquer $u,\ v\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ define-se soma e produto por uma constante

$$(u+v)(x) = u(x) + v(x)\,, \quad (c\,v)(x) = c\,v(x)\,.$$

Desta forma, o conjunto de todas estas funções torna-se num espaço vectorial "abstracto" de dimensão infinita.

Um exemplo fundamental. O espaço

$$L^2(\mathbb{R}^3)\text{: Funções de quadrado integrável em } \mathbb{R}^3, \int |\,u(x)|^2 dx < \infty\,.$$

Neste espaço definimos o PRODUTO ESCALAR de dois vectores

$$(u,\ v) =: \int u\,(x)\,v(x)\,dx\,,$$

que dá origem a uma NORMA $\|u\|$, através da clássica relação $\|u\|^2 = (u,\ u)$.

Portanto, $\|u\|^2 =: \int |\,u(x)|^2 dx$.

São verificadas todas as propriedades requeridas pela definição de norma num EV. Em particular vale a desigualdade triangular

$$\|u+v\| \le \|\,u\| + \|v\|\,.$$

Associada à norma fica definida uma distância entre dois "pontos" u e v: dist(u,v) = $\|u - v\|$. Dispômos assim duma noção de CONVERGÊNCIA:

$$u_N \to u \text{ se } \lim_{N\to\infty} \|u_N - u\| = 0.$$

3. PRELIMINARES

Num espaço vectorial normado X, para além da noção pré-existente de base algébrica (base de Hamel) introduzimos uma segunda noção de base (algébrico-topológica): um subconjunto B de elementos linearmente independentes de X dir-se-á aqui simplesmente uma BASE se todo o elemento de X é limite de combinações lineares finitas de elementos de B.

Por exemplo, as funções

$$1,\ x,\ x^2,\ x^3,\ldots,\ x^n,\ldots$$

para todo o expoente n, são uma base algébrica para o espaço dos polinómios reais e nada mais. Mas, são uma base algébrico-topológica no espaço das funções representadas por séries de potências uniformemente convergentes num dado intervalo. O seu alcance resulta pois, deste modo, muito mais vasto.

No que se segue os símbolos $\forall$ e $\in$ significam respectivamente "qualquer que seja" e "pertencente ao conjunto".

4. DERIVADAS FRACAS

A definição clássica de derivada obtida a partir do limite da razão incremental não resulta suficientemente geral no estudo de muitos problemas, em particular no caso de equações diferenciais não lineares. Passemos pois ao estudo de tal problema.

Seja $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ o subespaço linear das funções nulas fora de um qualquer conjunto limitado, e que admitem derivadas contínuas de todas as ordens, e seja dada uma função $u \in C^1(\mathbb{R}^3)$, espaço constituído pelas funções contínuas com primeiras derivadas contínuas em $\mathbb{R}^3$. Tem-se, com uma integração por partes,

$$\int u(x)\,\frac{\partial\,\phi(x)}{\partial\,x_i}\,dx = -\int \frac{\partial\,u(x)}{\partial\,x_i}\,\phi(x)\,dx, \quad \forall\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3), \tag{1}$$

e reciprocamente, se existe uma função integrável $g(x)$ tal que

$$\int u(x)\,\frac{\partial\,\phi(x)}{\partial\,x_i}\,dx = -\int g(x)\phi(x)\,dx, \qquad \forall\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3), \tag{2}$$

tem-se necessariamente $g = \partial_i\,u$. É pois natural utilizar a (2) para generalizar a noção de derivada.

Definição de Derivada Fraca:
Sejam $u(x)$ e $g(x)$, duas funções a valores reais integráveis em $\mathbb{R}^3$. Então $g = \frac{\partial u}{\partial x_i}$ *no sentido fraco* se

$$\int u(x)\,\frac{\partial \phi}{\partial x_i}\,dx = -\int g(x)\,\phi(x)\,dx\,, \qquad \forall \phi \in C_0^\infty(R^3)\,. \tag{3}$$

Vê-se facilmente que a derivada fraca, se existe, é única.
Notação:

$$\partial_i u = \frac{\partial u}{\partial x_i}.$$

5. O ESPAÇO $\boldsymbol{H^1(\mathbb{R}^3)}$

No estudo de equações diferenciais é natural, mesmo necessário, introduzir espaços funcionais que tenham em conta a noção de derivada duma função. No que se segue estamos interessados em espaços funcionais ligados ao espaço L^2:

$$f \in L^2(\mathbb{R}^3) \quad \text{se} \quad \int |f(x)|^2\,dx < \infty\,,$$

e

$$(f, g) = \int f(x)\,g(x)\,dx\,, \quad \|f\|^2 = \int |f(x)|^2\,dx\,.$$

Definamos pois o seguinte subespaço de $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$f \in H^1(\mathbb{R}^3) \quad \text{se} \quad f, \partial_i f \in L^2(\mathbb{R}^3), \qquad i = 1, 2, 3\,,$$

munido do produto escalar

$$((f, g)) = (f, g) + \sum_{i=1}^{3} (\partial_i f, \partial_i g)\,,$$

e portanto da norma

$$\|f\|_1^2 =: \|f\|^2 + \sum_{i=1}^{3} \|\partial_i f\|^2 = \int |f(x)|^2\,dx + \sum_{i=1}^{3} \int |\partial_i f(x)|^2\,dx\,.$$

Do mesmo modo, se podem definir espaços $H^k(\mathbb{R}^3), k \geq 2$, que têm em conta as derivadas parciais até à ordem k. Estes espaços admitem uma base algébrico-topológica numerável de vectores $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n, \ldots$. Podemos sempre escolher uma base de vectores unitários e mutuamente ortogonais. Estes espaços são um caso particular de Espaços de Hilbert "propriamente ditos".

Demonstra-se que o subespaço $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ é DENSO em $H^1(\mathbb{R}^3)$, isto é, todo o elemento de $H^1(\mathbb{R}^3)$ é limite de uma sucessão de elementos de $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ (vale em qualquer $H^k(\mathbb{R}^3)$).

6. SOLUÇÃO FRACA DE UMA EDP

Seja $u \in C^2(\mathbb{R}^3)$ solução clássica de

$$-\Delta u(x) + u(x) = f(x). \tag{5}$$

Evidentemente

$$\int (-\Delta u + u)\, \phi \, dx = \int f(x)\, \phi \, dx, \qquad \forall \phi \in C_0^\infty(R^3).$$

E integrando por partes,

$$\begin{aligned} -\int \Delta u\, \phi \, dx &= -\int \sum_i \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}\, \phi \, dx = \int \sum_i \frac{\partial u}{\partial x_i}\, \frac{\partial \phi}{\partial x_i}\, dx \\ &= \int \nabla u \cdot \nabla \phi \, dx. \end{aligned} \tag{6}$$

Tem-se pois

$$\int \nabla u \cdot \nabla \phi \, dx + \int u\, \phi \, dx = \int f(x)\, \phi \, dx, \qquad \forall \phi \in C_0^\infty. \tag{7}$$

Reciprocamente, seguindo o caminho inverso, verifica-se que se $u \in C^2(\mathbb{R}^3)$ verifica a propriedade (7) então necessariamente verifica a (5).

É pois natural utilizar a relação (7) para generalizar a noção de solução do problema (2).

Definição:

Diremos que uma função $u(x) \in H^1(\mathbb{R}^3)$ é uma **solução fraca** do problema (5) se vale a (7).

7. DESCRIÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA

Note-se que o primeiro membro da (7) é precisamente o produto escalar no espaço $H^1(\mathbb{R}^3)$. Trata-se pois de procurar uma solução u do problema

$$((u, \phi)) = (f, \phi), \qquad \forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \tag{8}$$

no espaço $\mathbb{V} = H^1(\mathbb{R}^3)$, problema que é equivalente ao problema

$$((u, \phi)) = (f, \phi), \qquad \forall \phi \in \mathbb{V}, \tag{9}$$

visto $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ ser denso em $H^1(\mathbb{R}^3)$.

NOTA: O problema (9) pode-se resolver recorrendo ao teorema de representação de Riesz-Frechet. Mas tal método não se generaliza ao caso que aqui nos interessa.

A procura de **estimativas *a priori*** é, em geral, o ponto de partida nos problemas de existência de soluções. No nosso caso, posto $\phi = u$ na (9) tem-se $\|u\|_1^2 = (f,u) \leq \|f\|\|u\|$ por conseguinte

$$\|u\|_1 \leq \|f\|\,. \qquad (10)$$

Portanto, qualquer que seja a solução u, se existe, deve verificar a estimativa (10). A sua importância ver-se-á em seguida.

Resolução do problema (9):

O problema (9) é equivalente ao problema

$$((u,\phi_i)) = (f,\phi_i)\,, \qquad i = 1,2,..\qquad (11)$$

onde $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_k, \ldots$ constitui uma base de $\mathbb{V}$.

Comecemos por resolver um problema aproximado. Definamos a sucessão (crescente) de espaços vectoriais finito-dimensionais (dim = N)

$$\mathbb{V}_N = span\{\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N\}.$$

Tem-se

$$\mathbb{V}_1 \subset \mathbb{V}_2 \subset \ldots \mathbb{V}_N \subset \mathbb{V}_{N+1} \ldots \subset \mathbb{V}\,.$$

Procuremos um elemento $u_N \in \mathbb{V}_N$, portanto uma combinação linear da forma

$$u_N(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j^N\ \phi_j(x)\,,$$

que resolva o problema aproximado

$$((u_N,\phi_i)) = (f,\phi_i)\,, \qquad i = 1,2,\ldots,N\,, \qquad (12)$$

ou seja

$$\sum_{j=1}^{N} (\,((\phi_j,\phi_i))\,\alpha_j^N = (f,\phi_i)\,, \qquad i = 1,2,\ldots,N\,.$$

Trata-se pois dum sistema linear de N equações as N incógnitas, $\alpha_1^N, \ldots, \alpha_N^N$ que se verifica imediatamente admitir uma e uma só solução.

Problemas:

a) Existe pelo menos um elemento $u \in \mathbb{V}$ tal que

$$\lim_{N\to\infty} u_N = u\,?$$

b) Um tal elemento é solução de (11)?

Em geral, as estimativas *a priori* obtidas (formalmente) para uma hipotética solução u demonstram-se facilmente, seguindo o mesmo caminho, para as aproximantes u_N. No nosso caso verifica-se banalmente que

$$\|u_N\|_1 \leq \|f\|\,, \qquad N = 1,2,\ldots \tag{13}$$

Vejamos que a estimativa (13) é suficiente a fim de obter respostas positivas aos pontos a) e b). Mas perde-se a unicidade.

8. UM MÉTODO DE RESOLUÇÃO

Comecemos por recordar o Teorema de Bolzano-Weierstrass que afirma que, num espaço de dimensão finita, de uma sucessão limitada u_N se pode sempre extrair uma subsucessão u_M convergente. Mas num espaço finito-dimensional (base $\phi_1, \ldots, \phi_K$) a convergência em norma (dita forte)

$$\lim_{M\to\infty} \|\,u_M - u\,\| = 0$$

coincide com a convergência das K coordenadas (dita fraca)

$$\lim_{M\to\infty} (u_M, \phi_i) = (u, \phi_i)\,, \quad i = 1, \ldots, K\,.$$

Nos nossos espaços de dimensão infinita o teorema de Bolzano-Weierstrass é falso no que diz respeito à convergência forte mas válido relativamente à convergência fraca, o que para nós é suficiente.

De facto, passando ao limite na (12), escrita em termos da subsucessão fracamente convergente u_M,

$$((u_M, \phi_i)) = (f, \phi_i)\,, \qquad i = 1,2,\ldots,M\,,$$

para $M \to \infty$, obtem-se a (11) qualquer que seja a ϕ_i fixada, e portanto a (9). Obtemos deste modo a existência de pelo menos uma solução fraca do problema inicial

$$-\Delta u + u = f\,.$$

É de notar que o ponto de partida foi a estimativa *a priori*. O espaço funcional no qual convém vir a trabalhar é-nos sugerido por tal estimativa, e não o contrário.

Uma possível unicidade da solução tem que ser provada separadamente, assim como uma maior regularidade. No caso do problema considerado estas duas propriedades são bem conhecidas. Mas no caso das equações de Navier-Stokes os dois problemas estão em aberto como veremos.

9. AS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES. A ESTIMATIVA DA ENERGIA.

Equações de Navier-Stokes em $Q_T =]\,0,\ T[\ \times\ \mathbb{R}^3$:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\,\boldsymbol{u}}{\partial\,t} - \Delta\,\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{u} - \nabla p = 0\,, \\ \nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0 \qquad Q_\infty\,; \\ \boldsymbol{u}_{|t=0} = \boldsymbol{u}_0(x)\,, \quad \text{onde} \quad \nabla\cdot\boldsymbol{u}_0 = 0\,. \end{cases} \tag{14}$$

$$\boldsymbol{u}(t,x) = (u_1,u_2,u_3)\ velocidade\,; \qquad p(t,x) = pressão\,.$$

$$(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{3} u_i\,\frac{\partial\,\boldsymbol{u}}{\partial\,x_i}\,; \qquad \Delta\,\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2\,\boldsymbol{u}}{\partial\,x_i^2}\,; \qquad \nabla\cdot\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\,u_i}{\partial\,x_i}.$$

Suponhamos que $\boldsymbol{u}$ seja uma solução regular e recorramos a uma argumentação formal. Multiplicando escalarmente por $\boldsymbol{u}$ a primeira equação (14), integrando em $\mathbb{R}^3$, recorrendo a oportunas integrações por partes, e tendo presente que vale $\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0$, verificamos que, em cada instante $t > 0$, valem as seguintes igualdades formais (i.e., supondo as funções suficientemente regulares, o que não sucederá no que se segue):

$$\int \frac{\partial\,\boldsymbol{u}}{\partial\,t}\cdot\,\boldsymbol{u}\,dx = \int \frac{1}{2}\,\frac{\partial}{\partial\,t}\,|\boldsymbol{u}|^2\,dx = \frac{1}{2}\,\frac{d}{d\,t}\int |\,\boldsymbol{u}|^2\,dx\,.$$

$$-\int \Delta\,\boldsymbol{u}\cdot\,\boldsymbol{u}\,dx = \int |\,\nabla\,\boldsymbol{u}|^2\,dx\,.$$

$$\int (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{u}\cdot\,\boldsymbol{u}\,dx = \int \sum_j\,(\sum_i\,u_i\,\frac{\partial\,u_j}{\partial\,x_i})\cdot u_j\,dx = \int \sum_i\,u_i\,\frac{1}{2}\sum_j\,\frac{\partial\,u_j^2}{\partial\,x_i}\,dx$$

$$= \frac{1}{2}\int \sum_i\,u_i\,\frac{\partial}{\partial\,x_i}|\boldsymbol{u}|^2\,dx = -\frac{1}{2}\int (\sum_i \frac{\partial\,u_i}{\partial\,x_i})\,|\boldsymbol{u}|^2\,dx = 0\,.$$

$$\int (\nabla\,p)\cdot\boldsymbol{u}\,dx = \int\ \sum_i \frac{\partial\,p}{\partial\,x_i}u_i\,dx = -\int\ p\sum_i \frac{\partial\,u_i}{\partial\,x_i}\,dx = 0\,.$$

Obtemos assim a igualdade formal

$$\frac{1}{2}\frac{d}{d\,t}\int |\,\boldsymbol{u}|^2\,dx\;+\;\nu\int |\,\nabla\,\boldsymbol{u}|^2\,dx\;=\;0\,,$$

ou seja,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{d\,t}\,\|\boldsymbol{u}(t)\|^2\;+\;\nu\,\|\nabla\,\boldsymbol{u}(t)\|^2\;=\;0\,.$$

Integrando em $]0,\;t[$ deduzimos a **igualdade da energia**

$$\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{u}(t)\|^2+\;\nu\int_0^t\|\nabla\,\boldsymbol{u}(\tau)\|^2\,d\tau=\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{u}(0)\|^2\,, \tag{15}$$

que não sabemos demonstrar para soluções fracas. Para estas vale apenas a correspondente desigualdade (≤ em vez de = na equação (15)). Obtemos assim as **estimativas** ***a priori***

$$\sup_{(0,\infty)}\;\|\boldsymbol{u}(t)\|\leq\;\|\boldsymbol{u}_0\|\,;\quad\int_0^\infty\|\,\nabla\,\boldsymbol{u}(t)\|^2\,dt\leq\frac{1}{2\,\nu}\,\|\boldsymbol{u}_0\|^2\,. \tag{16}$$

Com base nas estimativas da energia (16), e seguindo a via indicada no exemplo visto precedentemente, aproximação nas variáveis espaciais através de espaços funcionais de dimensão finita $\mathbb{V}_N$, convergência fraca e passagem ao limite, demonstra-se a **existência de (pelo menos...) uma solução fraca global**. A definição de solução fraca generaliza a correspondente definição dada no parágrafo anterior. Mas a sua maior complexidade, e a finalidade destas notas, levam-nos apenas a aconselhar o leitor interessado a consultar o artigo de G. P. Galdi citado na introdução, em particular a Definição 2.1.

Note-se que as aproximantes $\boldsymbol{u}_N(t)$ são agora funções do tempo t a valores no espaco funcional finito-dimensional

$$\mathbb{V}_N\;=\;H^1(\mathbb{R}^3)\;\times\;H^1(\mathbb{R}^3)\;\times\;H^1(\mathbb{R}^3)\,,$$

visto a incógnita $\boldsymbol{u}$ ter agora 3 componentes. As $\boldsymbol{u}_N(t)$ vêm a ser soluções de sistemas de equações diferenciais ordinárias em $(0,\;\infty)$.

As **soluções fracas** que obtemos verificam evidentemente a **estimativa da energia**

$$\|\boldsymbol{u}(t)\|\leq\;\|\boldsymbol{u}_0\|\,;\quad\int_0^\infty\|\,\nabla\,\boldsymbol{u}(t)\|^2\,dt\leq\frac{1}{2\,\nu}\,\|\boldsymbol{u}_0\|^2\,.$$

Definição:

Diremos que $\boldsymbol{u}$ é uma **Solução Forte** em $[0,\;T]$ se existe uma constante C tal que

$$\sup_{(0,\infty)}\;\|\boldsymbol{u}(t)\|_1\leq C\,;\quad\int_0^\infty\|\,\nabla^2\,\boldsymbol{u}(t)\|^2\,dt\leq\;C\,, \tag{17}$$

que se pode escrever

$$\boldsymbol{u} \in L^{\infty}(0, T; H^{1}(\mathbb{R}^{3})) \cap L^{2}(0, T; H^{2}(\mathbb{R}^{3})) .$$

Demonstram-se em particular os seguintes pontos, que devem ser ilustrados durante a exposição oral:

a) Uma solução **forte** num dado intervalo de tempo $[0, T]$, é **regular** e **única**, nesse mesmo intervalo.
b) Dado $\boldsymbol{u}_0 \in H^1$ existe $T^* > 0$ tal que a solução é **forte**, e portanto **regular** e **única**, no intervalo $(0, T^*)$.
c) Existe uma constante positiva K tal que, se $\|\nabla \boldsymbol{u}_0\| < K$, a solução é forte em $[0, \infty[$, e verifica $\|\nabla \boldsymbol{u}(t)\| < K$.

Do ponto c) e da estimativa da energia segue que:

d) Dada uma solução fraca global existe um instante de tempo $T^{**} > 0$ que depende da norma do dado inicial, após o qual a solução é necessariamente forte (logo, regular e única).

De facto, se num intervalo $(0, T^{**})$ se tem sempre $\|\nabla \boldsymbol{u}(t)\| \geq K$, segue da desigualdade da energia que

$$\frac{1}{2} \|\boldsymbol{u}(0)\|^2 \geq \nu \int_0^{T^{**}} \|\nabla \boldsymbol{u}(\tau)\|^2 \, d\tau \geq \nu K^2 T^{**} ,$$

e portanto $T^{**} \leq \frac{1}{2} \nu K^2 \|\|\boldsymbol{u}(0)\|^2$.

10. O "MILLENNIUM PROBLEM"

Do que ficou estabelecido na secção anterior segue, em particular, que qualquer que seja o dado inicial $\boldsymbol{u}_0$ nas condições estabelecidas, existe pelo menos uma solução fraca, que é global relativamente à variável temporal. Mas fica em aberto a sua regularidade, e mesmo a sua unicidade. Por outro lado, em correspondência com o dado inicial regular $\boldsymbol{u}_0$, existe uma solução forte, única e regular, durante um intervalo de tempo finito. Durante tal intervalo qualquer solução fraca coincide com a solução forte. Esta situação deu origem ao quarto "Millennium Problem", a saber:

Demonstrar ou apresentar um contra-exemplo à seguinte afirmação:

No caso de três dimensões espaciais, dada uma velocidade inicial regular, com divergência nula, existe um vector velocidade, com divergência nula, e uma pressão escalar, ambos regulares e definidos globalmente (i.e., sem um limite temporal), que resolvem as equações de Navier-Stokes (14).

Note-se que se requer que a solução persista para todos os tempos.

Há duas opções: Problema em todo o espaço $\mathbb{R}^3$ e problema periódico nas variáveis espaciais. Vejamos o primeiro caso. Os dados admitem, e as soluções possíveis têm que admitir, derivadas contínuas de todas as ordens, e obedecer a certas condições de decrescimento no infinito, estabelecidas no edital.

Além disso, a energia cinética deve ser globalmente limitada, ou seja, deve existir uma constante positiva E tal que

$$\int_{\mathbb{R}^3} |u(x, t)|\, dx < E\,,$$

para todo o $t \geq 0$.

Alternativamente, demonstrar a existência de pelo menos um dado inicial para o qual não exista uma solução forte global, dados e solução obedecendo às condições de regularidade acima estabelecidas. Neste caso aceita-se o contributo duma força externa f, sob análogas condições de regularidade e comportamento no infinito.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 17 de maio de 2018)

Neuroplasticidade

Alexandre Lemos de Castro Caldas[1]

Deve-se ao trabalho de Golgi e de Ramon y Cajal a revelação de algumas das características dos neurónios. O seu trabalho viria a ser premiado com o Prémio Nobel em 1906 (Golgi, 1898: Ramon y Cajal reedição 2007). Com Golgi ficou-se a saber corar as células para as estudar ao microscópio. Com Cajal compreendeu-se a estrutura dos neurónios, a sua variedade no sistema nervoso e algumas das suas potencialidades nomeadamente no que respeita à forma de comunicar entre eles.

Os estudos realizados até hoje permitiram compreender muito melhor o que se passa com o tecido nervoso no que respeita ao tratamento da informação e à execução das tarefas. Compreendeu-se o processo de desenvolvimento embriológico do sistema nervoso, pautado por ordens provenientes do código genético e, bem assim, o desenvolvimento ao longo da vida (ver, por exemplo, May e Paxinos, 2012). Foi também possível compreender as transformações que ocorrem no tecido cerebral depois de ocorrer uma lesão (ver, por exemplo, Wieloch e Nikolich, 2006).

Sabemos hoje que a formação do sistema nervoso, no embrião humano, obedece a uma coreografia complexa pautada, nos primeiros meses, por instruções contidas no código genético. Essas instruções fazem com que as células embrionárias, que se designam por células estaminais ou células germinais, que se encontram no tubo neural, se multipliquem, se transformem e migrem para os locais apropriados. Cada coisa acontece a seu tempo e para um lugar exacto. A certa altura formam-se as glândulas endócrinas passando as hormonas a participar nesta complexa operação de formação do sistema nervoso. Pode considerar-se este um princípio de plasticidade do sistema nervoso pois à medida que vai enriquecendo a sua estrutura inicia funções de diversa natureza.

Interessa-nos, em particular, considerar os mecanismos que podemos designar por sensório-motores. Os movimentos do feto começam a registar-se cedo com a formação dos membros. Começam por ser movimentos grosseiros do corpo e evoluem para movimentos mais finos como os da boca e dos olhos e movimentos aparentemente dirigidos para objectivos específicos (D'Elia *et al.*, 2001). Estes movimentos obedecem já a informações provenientes do meio em que se encontram, podem identificar-se movimentos que se dirigem à exploração do próprio corpo e outros que exploram a parede do útero. É interessante compreender um pouco melhor a intencionalidade desses movimentos. Castello e colaboradores (2010) estudaram os movimentos realizados por fetos em situações de gravidez gemelar homozigótica e verificaram que os movimentos realizados de um feto para o outro eram muito mais frequentes do que aqueles que eram realizados para eles próprios ou para a parede do útero. Os autores consideram que isso pode significar interacção social precoce que promove um vínculo mais forte entre os gémeos ao longo da vida. O que retiramos desta experiência para o tema que estamos a tratar é a adaptação do cérebro ao ambiente moldando matrizes de actividade que sustentam o comportamento mesmo em fases muito precoces do desenvolvimento. Este trabalho chama a atenção para o ambiente muito particular

[1] Professor Catedrático de Neurologia, Diretor do Instituto de Ciências da Saúde da Universidade Católica Portuguesa

da gravidez gemelar, mas permite também inferir que a intenção do movimento como pródromo de livre arbítrio na exploração do meio surge muito cedo no desenvolvimento fetal.

Vale a pena mencionar o trabalho de Patricia Kuhl nos Estados Unidos. Esta investigadora tem trabalhado muito sobre o desenvolvimento da linguagem nas crianças e num dos trabalhos que merece destaque neste contexto foi capaz de demonstrar que as crianças recém-nascidas respondem de forma diferente aos fonemas produzidos em língua materna quando comparados com fonemas de línguas estrangeiras (Kuhl 2004). Isto significa que o cérebro se vai adaptando aos sons da fala da mãe, mesmo antes de nascer, e, por isso, com mais facilidade aprende a sua própria língua. Esta é uma plasticidade induzida por estímulos externos.

O sentido da audição está presente no último trimestre de gestação e os sons ambientes que o feto consegue detectar vão através dele preparar o cérebro para vida no mundo em que vai entrar. O que não sabemos ainda exactamente é a importância que isto tem e se haverá vantagem em criar programas de estimulação para esse período da vida. Temos alguma informação da investigação animal que revela que quando os embriões de pinto crescem com música de fundo nas incubadoras, o seu sistema nervoso encarregado da audição nasce moldado de outra forma em comparação com o sistema nervoso de embriões encubados em silêncio (Wadhwa *et al.*, 1999).

Podemos então definir plasticidade como a resposta biológica do cérebro a diversos estímulos quer sejam veiculados por orientações genéticas, endócrinas, farmacológicas ou sensoriais. Kolb e Gibb (2011) consideram 8 fundamentos relacionados com a plasticidade do sistema nervoso com implicações no comportamento e na cognição.

Em primeiro lugar é necessário compreender a que nível de processamento biológico se registam as alterações do sistema nervoso relacionadas com as modificações do comportamento. Tanto podem ocorrer ao nível molecular e, por isso, não podem ser estudadas *in vivo*, mas também as que se registam a nível celular dificilmente se podem estudar nos humanos sendo que alguma informação se pode obter por estudos realizados em animais. Nos humanos pode obter-se informação através das novas técnicas de registo funcional do cérebro, mas estão ainda longe de ser o retrato fiel daquilo que se processa no cérebro quer no que respeita à dimensão que se consegue estudar quer no que respeita à velocidade de processamento da informação. De qualquer forma alguma informação se consegue colecionar.

Em segundo lugar é necessário entender o que significam as alterações registadas, o crescimento neuronal e formação de novas sinapses pode balançar-se com a eliminação, por apoptose, de neurónios ou a eliminação de sinapses. Neste último caso, a diminuição da estrutura visível das células pode ser o resultado do desenvolvimento de novas configurações mais aptas para resolver a questão que está em causa.

As modificações resultantes da experiência tendem a ser mais focais e portanto mais avaliáveis com as técnicas de que dispomos. É o caso da aprendizagem da leitura a que faremos referência mais à frente.

Algumas modificações são dependentes do tempo, como acontece quando se colocam animais em ambientes mais ricos e mais pobres: quanto mais demorada for a exposição mais importante é a alteração generalizada da estrutura cerebral.

As alterações dependentes da experiência que se realizam num determinado período da vida podem interagir com futuras aprendizagens quer em sentido positivo quer em sentido negativo.

Os processos de plasticidade são dependentes da idade, embora se possam registar ao longo de toda a vida. Não há dúvida que quanto mais jovem for o indivíduo mais facilmente se registam. Temos, contudo, que ter em atenção que os estímulos a utilizar devem estar cronologicamente acertados com a idade dos indivíduos e com as experiências prévias.

Finalmente é necessário entender que nem toda a plasticidade tem como resultado a melhoria das funções. Muita adaptação a fármacos pode resultar em prejuízo de processos.

Estes princípios têm de ser tomados em linha de conta quando se planeia a investigação. Temos estudado nos últimos anos alguns destes aspetos relacionados com o processo de aquisição da capacidade de leitura. Neste caso fomos analisar o que não se desenvolvia quando as crianças não iam à escola na idade própria. Como é infelizmente sabido, o analfabetismo é uma realidade frequente no nosso país e foi com essa população que aprendemos que quem não aprende a ler não desenvolve determinados processos que correspondem a regiões específicas do cérebro (Castro Caldas, 1998).

Importa, também, considerar a plasticidade que resulta de uma lesão do cérebro. Aquando de uma lesão do cérebro, seja ela traumática seja resultante de um acidente vascular cerebral ou de um tumor, regista-se uma perda funcional que se relaciona com a região lesada. Com o tempo procura-se a reparação funcional com as múltiplas técnicas de reabilitação e, em geral, verifica-se alguma recuperação. Essa recuperação é feita à custa de transformações registadas no local da lesão, induzidas por substâncias relacionadas com factores de crescimento que se libertam. Infelizmente nem sempre o processo resulta em benefício para o doente tratando-se de um tema que continua a ser objecto de muita investigação sobretudo com o recurso à interação Homem-máquina que é hoje já uma realidade. O recurso a instrumentos informáticos pode hoje beneficiar muitos doentes, naturalmente ainda em fase experimental e não passível de se generalizar como técnica de rotina.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 7 de junho de 2018)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Castiello U, Becchio C, Zoia S, Nelini C, Sartori L, Blason L, D'Ottavio G, Bulgheroni M, Gallese V. "Wired to Be Social: The Ontogeny of Human Interaction". *PLoS One*. 2010; 7;5(10):e13199.

Castro-Caldas A, Petersson KM, Reis A, Stone-Elander S, Ingvar M. "The illiterate brain: learning to read and write during childhood influences the functional organization of the adult brain". *Brain.* 1998; 121:1053-1063.

D'Elia A, Pighetti M, Moccia G, Santangelo N. "Spontaneous motor activity in normal fetuses". *Early Human Development*. 2001; 65:139– 147.

Golgi, C. *Intorno alla struttura delle cellule nervose.* Pavia: Tip. Fratelli Fusi, 1898.

Kolb B1, Gibb R. "Brain Plasticity and Behaviour in the Developing Brain". *J Can Acad Child Adolesc Psychiatry*. 2011; 20(4):265-76.

Kuhl P. "Early language acquisition: cracking the speech code". *NatureReviews Neuroscience.* 2004; (5): 831–843.

May JK, Paxinos G. *The Human Nervous System*, London: Academic Press, 3th Edition; 2012.

Ramon y Cajal, S. *Histología del sistema nervioso del hombre.* Madrid: Consejo Superior de Investigaciones Científicas; 2007.

Wadhwa S, Anand P, Bhowmick D. "Quantitative study of plasticity in the auditory nuclei of chick under conditions of prenatal sound attenuation and overstimulation with species specific and music sound stimuli". *Int J Dev Neurosci.* 1999; 17(3):239-53.

Wieloch T, Nikolich K. "Mechanisms of neural plasticity following brain injury". *Current Opinion in Neurobiology*. 2006; 16:1-7.

"Agentes de contraste para Imagem Molecular – Uma ferramenta do século XXI vista por um químico"

Carlos F. Geraldes[1]

A Imagem Molecular tem por objetivo a caracterização quantitativa *in vivo* de processos biológicos aos níveis molecular e celular, estudando as anomalias moleculares que estão na base da patologia.

O estudo da localização destes marcadores das patologias combina o uso de novos agentes moleculares vetorizados com as técnicas tradicionais de imagem médica (PET/SPECT, MRI, imagiologia óptica, ultra-sons, etc.) desenvolvendo procedimentos personalizados capazes de combinar o diagnóstico com o acompanhamento dos processos terapêuticos. Deste modo, constitui a prática da imagiologia para diagnóstico em Medicina Molecular.

Nesta apresentação serão discutidos os tipos de informação obtidos em cada uma das principais técnicas de imagem médica bem como as suas vantagens e inconvenientes, com apresentação de exemplos.

(Resumo da comunicação apresentada à Classe de Ciências na sessão de 21 de junho de 2018)

[1] Universidade de Coimbra

Descoberta, invenção e acaso. Röntgen e a escola portuguesa de angiografia

Henrique Vilaça Ramos

ABSTRACT

The purpose of this communication is the history of science that goes from Conrad Röntgen to the Portuguese School of Angiography, of which Egas Moniz was the founder. The brief initial considerations on discovery, invention, and chance are no more than the introduction to the historical theme in the development of which these mechanisms are alluded to in the construction of radiological science.

Since the semantic content of the terms discovery, invention, and chance has varied over time and also varies in present time, we explain the meaning given to each of them in this communication.

We describe the discovery of X-rays, which according to Röntgen was due to chance, and sought to perceive its intervention in the scientific process of discovery. We also refer to the quarrel von Lenard raised as to the merits of Roentgen and emphasizes the undoubted value of the contribution of the latter. Mention is made to Henrique Teixeira Bastos, the scientist who obtained the first radiographs in Portugal.

Different was the scientific process followed by Egas Moniz, of pure invention, in which no revealing chance occurred. A description is made of what radiological science had advanced from the time of Röntgen's discovery for the understanding of the contribution of the Portuguese scientist. When Egas Moniz comes on the scene, many of the organic departments had been radiologically visualized with a number of contrast substances, both negative and positive. Among these scientific advances, the author highlights the visualization of the bile ducts, by Graham and Cole, emphasizing the role of invention and chance in the creation of this new imaging method. Despite these tremendous progresses, the same success was yet to be achieved in the vast vascular territory. This is where the genius of Egas Moniz comes in.

Dissatisfied with the limitations of the clinical diagnosis of brain tumors and the radiological diagnosis provided by Dandy's ventriculography as well as with the inconclusive arteriographic attempts of other authors, he investigated the possibility of opacifying the brain tissue itself with substances fixed therein, namely bromides. Not having succeeded this way, he thought of the intra-arterial injection of the contrast product, but even the designation – arterial encephalography – with which he baptized the method allowed us to suspect that he still had the hope of also obtaining the image of the opacified nervous tissue itself and not only the blood vessels.

The investigation was conducted in a perfect form: initial studies to find the best radiopacity of several contrast products, followed by arteriographic attempts in the animal, until success in the 15th dog. Later, intra-carotid contrast injection in human cadavers gave him the indispensable knowledge of the radiographic anatomy of the cerebral arterial network. Only then he did the injections in human

beings, success coming to crown the sixth attempt, but at the expense of the patient's death. After a period of comprehensible pause and review of processes, the investigation resumes, changing from contrast substance to another more radiopaque and, therefore, allowing to use it in a lower concentration and reduced vascular aggression. This is how he finally attains the desired success, which leads him to Paris, where, ten days after his success, he presents this scientific triumph to the Society of Neurology of that capital.

Mention is made of all the subsequent progress that has been achieved by several Portuguese scientists: aortography, arteriography of the limbs, Cavography, Angiopneumography, Phlebography, Portography, Lymphography, Interstitiography, Microangiography and Coronary Angiography. This set of researchers, which the author intends to honor with this communication, was consecrated under the name of Portuguese School of Angiography, and includes, other than Egas Moniz, the names of Reynaldo dos Santos, Augusto Lamas, Pereira Caldas, Lopo de Carvalho, Cid dos Santos, Álvaro Rodrigues, Sousa Pereira, Roberto de Carvalho, Aleu Saldanha, Ayres de Sousa, Luis Aires de Sousa and Eduardo Coelho.

DESCOBERTA, INVENÇÃO E ACASO. RÖNTGEN E A ESCOLA PORTUGUESA DE ANGIOGRAFIA

1 – INTRODUÇÃO

O propósito desta comunicação é percorrer o trajeto da história da ciência que vai de Conrad Röntgen à Escola Portuguesa de Angiografia, de que Egas Moniz foi o fundador. As breves considerações iniciais que farei sobre a descoberta, a invenção e o acaso não são mais que a introdução ao tema histórico, no desenvolvimento do qual aludirei a estes mecanismos na construção da ciência radiológica.

Como é bem sabido, os avanços científicos devem-se, uns à descoberta, outros à invenção e outros ainda são tributários de ambos os mecanismos. E há avanços científicos que contêm elementos que podem levar a considerá-los como descobertas e, ao mesmo tempo, como invenções, conforme o ângulo de análise. O acaso, por sua vez, é acontecimento que surge muito frequentemente no processo científico, ora na sua génese, ora no decurso de uma investigação programada, mas que nele abre uma nova luz ou suscita um novo caminho.

Descoberta, invenção e acaso andam, pois, de mãos dadas em muitas das conquistas da ciência. A descoberta dos raios X e a história dos primeiros anos da radiologia constituem um exemplo fascinante do entrelaçar destas três entidades, o que procurarei ilustrar seguindo, como disse, o percurso desde Röntgen até à Escola Portuguesa de Angiografia, afinal o objetivo desta comunicação. Antes, porém, convém definir o sentido que vou utilizar para cada um daqueles termos.

2 – PRECISÃO TERMINOLÓGICA

Com efeito, o conteúdo semântico destes vocábulos tem variado ao longo dos tempos e varia também no tempo atual.

2.1 – Um bom exemplo disto é a palavra *invenção*, que é utilizada em contextos muito diversos, desde a filosofia à economia, ou desde o direito à estética, e nem sempre com o mesmo significado.

Se considerarmos a etimologia da palavra, chegamos a *inventio,* que, para os latinos, era a descoberta, a revelação de algo desconhecido, conceito que está muito distante, mesmo em oposição, relativamente ao significado que modernamente damos à palavra invenção. Esse antigo significado está presente, ainda hoje, na celebração pela Igreja Católica da designada *Festa da Invenção da Santa Cruz*, relativa ao achamento, por Helena, mãe do imperador Constantino, do que julgou ser o madeiro onde o Nazareno Jesus foi crucificado.

Ora, o sentido em que vou usar a palavra invenção é restrito, implica criação e designa por isso, "toda a atividade humana que realiza ou produz algo de novo (uma ideia, um método, uma máquina, etc.)"[1].

2.2 – Quanto ao vocábulo *descoberta*, é sabido que o público e até os cientistas o usam também de forma ambígua, ora significando o reconhecimento de algo pré-existente, ora designando coisas não pré-existentes e, por isso, verdadeiramente novas.

Usarei a palavra descoberta para indicar o reconhecimento de algo novo, mas pré-existente. Descobre-se o que já existe, mas não era conhecido.

Neste entendimento dos dois vocábulos, *invenção* e *descobert*a, sigo afinal o ensinamento de Kant, que disse: «Inventar alguma coisa é muito diferente de descobrir. O que se descobre admite-se como pré-existente, embora nos fosse desconhecido, como por ex. a América antes de Colombo; pelo contrário, o que se inventa, por ex. a pólvora, não existia antes de ser inventado»[2].

Há, todavia, circunstâncias em que a descoberta e a invenção se misturam de tal modo que, como disse, umas vezes as mesmas novidades científicas são apresentadas como invenções e outras como descobertas. A relatividade de Einstein é um bom exemplo. Construção mental pode apresentar-se como paradigma do pensamento criativo, verdadeira invenção, na medida em que "o enunciado de uma teoria aparece como um ato de invenção singular rompendo com a norma"[3]. Mas, a relatividade existe na natureza e foi reconhecida por Einstein, o que configura o conceito de descoberta, na medida em que Einstein descobriu o que existia, mas não era conhecido. Uma simples consulta na *NET* revela a profusão de textos contraditórios, uns olhando para a relatividade como descoberta e outros com processo inventivo. Certo é que vê-la apenas como simples descoberta menoriza o pensamento genial de Einstein, o seu pensamento criativo.

2.3 – Por fim, o conceito que subjaz à palavra *acaso*.

Acaso é uma designação que tem hoje vários conteúdos semânticos, desde os ligados à filosofia ou à física, passando também pela matemática, nomeadamente no cálculo de probabilidades.

---

[1] Freitas M, *Invenção*, Encicl Luso-Brasileira de Cultura, ed Verbo, 1763.

[2] Cit por Freitas M, *idem.*

[3] Machado CJS, *Olhares acadêmicos sobre a invenção e a descoberta nas ciências*, *uma introdução,* Rio de Janeiro, ed. e-papers, 2010, 21, acedido em https://books.google.pt/books?id=fqGlrK9G6IUC&pg=PA21&lpg=PA21&dq=o+enunciado+de+uma+teoria+aparece+como+um+ato+de+inven%C3%A7%C3%A3o+singular+rompendo+com+a+norma&source=bl&ots=R8fBMm5P4V&sig=W8AeiZvFCOdrqb6lu8uD1ghKJfo&hl=ptPT&sa=X&ved=0ahUKEwiEgYXinJrcAhXIvxQKHdS5CKwQ6AEIJzAA#v=onepage&q=o%20enunciado%20de%20uma%20teoria%20aparece%20como%20um%20ato%20de%20inven%C3%A7%C3%A3o%20singular%20rompendo%20com%20a%20norma&f=false

O vocábulo originou-se no latino "a casu", que quer dizer "sem causa". Trata-se, portanto, de algo que ocorre sem que tivesse sido determinado por uma causa com a intenção de o revelar. Surge assim sem qualquer procura intencional, antes aparece inesperadamente ao observador. É, pois, um facto imprevisto, inesperado, não desencadeado por uma ação com o desígnio de o produzir.

3 – RÖNTGEN E A ESCOLA PORTUGUESA DE ANGIOGRAFIA

Esclarecidos os significados com que uso as palavras descoberta, invenção e acaso, passo agora a examinar a história das primeiras décadas da radiologia, bem demonstrativa da incidência destes eventos no processo científico.

A descoberta dos raios X – estou aqui a usar a palavra no sentido exato que referi – foi uma das maiores conquistas científicas da humanidade. Não me atrevo a afirmar, como defende alguém[4], que a mais importante descoberta científica de sempre foi a dos raios X, mas, mesmo a nível da perceção popular, a sua importância é claramente demonstrada pelo facto de, para comemorar o centenário do Museu da Ciência de Londres, ter sido promovida uma votação sobre as 10 maiores invenções e descobertas da ciência nesses 100 anos, votação em que os raios X foram a opção preferida pelos mais de 50 000 votantes. De facto, são poucos os ramos da ciência que não tenham beneficiado desta descoberta, da física à medicina ou da história de arte à investigação astronómica. Isso mesmo se revela na lista dos prémios Nobel, de que o primeiro, em 1901, foi logo atribuído a Röntgen, descobridor dos raios X, seguido por mais de duas dezenas de outros que foram concedidos a investigações sobre os novos raios ou que os utilizaram como ferramenta de trabalho[5].

No caso particular da física, "a descoberta de Röntgen lançou a comunidade dos físicos numa senda nova que marcou, afinal, o advento da física moderna, projetando-a até à intimidade dos átomos"[6]. No que à medicina diz respeito, pode afirmar-se que houve um antes e um depois desta descoberta, tal foi o impacto que ela produziu. É que, com as "novas" radiações, tornou-se possível realizar o sonho de perscrutar in vivo o interior do corpo humano, até aí só acessível pelo cruento método cirúrgico ou já post mortem, sob o escapelo do anatomista.

Por sua vez, Egas Moniz deu também um passo de gigante para a demonstração do interior do homem, usando as radiações descobertas por Röntgen. É sobre estes dois homens, Wilhelm Conrad Röntgen e António Caetano de Abreu Freire Egas Moniz, e sobre os seguidores deste último e sobre os seus trabalhos pioneiros, que venho aqui tecer algumas considerações. E é também uma reflexão sobre duas modalidades muito diferentes do modo como cada um levantou um novo marco no caminho da ciência: em Röntgen a descoberta, em Egas Moniz a invenção.

Considerarei agora em detalhe a descoberta de Röntgen. Para situar o papel de Röntgen na ciência do seu tempo, importa recordar que um dos temas mais avançados da física de então era o dos raios catódicos, assunto sobre o qual se debruçavam Röntgen e outros cientistas eminentes em vários laboratórios da Europa, inclusive em Portugal, e também nos Estados Unidos da América. O mesmo é dizer que, em vários pontos do globo, diversos investigadores estavam operando instrumentos capazes de

[4] Landwehr G, *What modern physics owes to Wilhelm Conrad Röntgen*, Actas Simp Comem Centen Descob Raios X, Univ Coimbra, 1996, 46.
[5] Landwehr G, idem, 47.
[6] Vilaça Ramos H, *Centenário da descoberta dos Raios X, Prefácio,* Livro Comemorativo da Soc Port Radiol Med Nuclear, 1995,13.

produzir esta ignorada forma de radiação. Estava assim montado o palco para um dos mais significativos avanços da ciência e muitos investigadores poderiam ter desempenhado o papel de ator único sobre o tablado. Poderiam… mas não puderam! De facto, não só os raios X estavam a ser produzidos em muitos laboratórios de física, mas também vários investigadores observaram, até, alguns dos seus efeitos, sem terem percebido que lidavam com algo novo. Tiveram na mão a possibilidade de esclarecer esses efeitos e não a souberam aproveitar, como mais adiante iremos recordar, porque é agora o momento de apresentar a figura central desta descoberta[7].

Wilhelm Conrad Röntgen foi uma personalidade rara, cuja elevação moral só teve paralelo na sua qualidade de cientista[8]. No final do ano de 1895, Röntgen já tinha feito cinquenta anos, havia sido investido recentemente no cargo de Reitor da sua Universidade de Würzburg e era um físico muito competente, que já contava com diversas contribuições importantes no âmbito da física experimental.

Sobre as circunstâncias em que se deu a descoberta, persistem algumas zonas de sombra que as investigações históricas não têm desvendado. Desde logo, a data da tão famosa descoberta: 8 de novembro de 1895. A única coisa certa é que terá sido em torno dessa data, mais dia, menos dia. A outra grande dúvida diz respeito ao tão mencionado "acaso" que levou à descoberta, acaso que foi referido pelo próprio Röntgen, mas que ele não esclareceu, ponto ao qual voltarei mais à frente. A circunstância de Röntgen ter destruído todos os seus registos de trabalho impediu os vindouros de esclarecer estas e outras incógnitas sobre a marcha dos acontecimentos de que foi protagonista.

Naquele declinar do outono da Baviera, em 1895, os seus trabalhos incidiam precisamente sobre os raios catódicos, assunto que merecera de von Lenard importantes investigações e cujas descobertas viriam a merecer-lhe o Prémio Nobel em 1905. Von Lenard tinha investigado a possibilidade de os raios catódicos serem detetáveis no exterior do tubo de Crookes, para o que criou, neste, uma janela fechada com uma delgada lâmina de alumínio. Usando materiais fosforescentes, comprovou a existência das radiações fora do tubo, radiações que chegaram a ser designadas com o seu nome, homenageando a excelente contribuição que deu para o seu conhecimento. Mais ainda: viu que uma lâmina metálica eletrizada era descarregada por aqueles raios, ainda que a distância do tubo de Crookes fosse superior à da propagação dos raios catódicos no ar[9]. Para ele, tudo isto eram efeitos dos raios catódicos.

Na sucessão das experiências que Röntgen foi fazendo, acabou por ter a ideia de envolver o tubo de raios catódicos, sem a janela de von Lenard, com um cartão preto para que não passasse para o exterior a luz proveniente do próprio tubo. Estes factos parecem indiciar que Röntgen já não estava limitado ao trajeto percorrido por von Lenard e procurava algo mais. O quê e porquê? Não sabemos exatamente. Certo é que sobre uma mesa estava colocado um ecrã de material luminescente, acessório habitual nas pesquisas sobre os raios catódicos. Foi com esse protocolo experimental e trabalhando às escuras, que viu a alguma distância, sobre a mesa, a famosa luz emitida pela placa de material fluorescente[10].

---

[7] Recolho, para este assunto, vários elementos contidos nas minhas publicações: *Raios X: a descoberta de um cientista exemplar*, Livro Comemorativo da Soc Port Radiol Med Nuclear, 93,1995; *Röntgen e a descoberta dos Raios X*, Actas do Simp Comemor Centen Descob Raios X, Univ Coimbra, 9, 1996; *Em louvor da Radiologia,* Orações de Sapiência da Faculdade de Medicina (1845-2000), Impr Universidade Coimbra, 2001, 467.

[8] Não me detenho na demonstração da sua estatura moral, podendo o leitor interessado encontrar a confirmação dela em Ramos HV, *Raios X: a descoberta de um cientista exemplar*, Livro Comem Centen Descob Raios X, ed Soc Port Radiol Med Nuclear, 1995, 93.

[9] Verificou esse efeito sobre o eletroscópio até aos 30 cm, mais que os 8 cm da propagação área dos raios catódicos.

[10] Numa entrevista a um jornalista americano, disse que tinha visto "uma linha preta" no ecrã. A ignorância do jornalista talvez tenha interpretado mal as revelações de Roentgen, mas a ser exatamente isto o que ele disse, parece que a emissão da fluorescência não foi o que mais o surpreendeu, pois era fenómeno já demonstrado com as experiências de raios catódicos (A linha preta seria, possivelmente, a sombra produzida por algum elemento situado entre a ampola e o ecrã).

Ciente de que aquele fenómeno podia estar na iminência de ser observado por outros, Röntgen entregou-se a uma verdadeira vertigem de trabalho ao longo de sete semanas, explorando todas as hipóteses explicativas até concluir pela existência real de uma nova forma de radiações. Mas, além disso, analisou e demonstrou algumas das suas características e de tal maneira o fez que, uma vez divulgado o seu estudo pioneiro, foi preciso esperar mais de uma década até que algum físico conseguisse trazer qualquer outra achega para um maior conhecimento das novas radiações.

Tem-se habitualmente a noção de que a descoberta é um processo súbito, algo que não era conhecido até ao momento em que foi observado, passando então a fazer-se luz completa sobre o que é novo, mas frequentemente a descoberta é algo que se vai prolongar no tempo, num processo evolutivo. Disso mesmo é exemplo a descoberta dos raios X, pois só com muito trabalho e sólida investigação o achado inicial se transformou em descoberta. Por outro lado e apesar de toda a magnífica investigação de Röntgen, a descoberta não ficou completa e ele mesmo confessara não saber o que eram os novos raios, por isso logo designados "raios X". Só investigações ulteriores revelaram a sua exata natureza e, por assim dizer, se completou a descoberta. Mas o protocolo experimental desenhado por Max von Laue, que lhe permitiu demonstrar a natureza ondulatória dos raios X, resultou de uma brilhante ideia, pelo que aqui se somou, à descoberta, a invenção. Com efeito, a descoberta dessas características deveu-se a investigações devidamente orientadas, pelo que o processo científico seguido por von Laue releva do mecanismo inventivo.

No que diz respeito à medicina, logo no seu trabalho inicial, Röntgen tinha produzido a radioscopia e a radiografia. Como a radioscopia resultou do acaso que levou ao aparecimento da fluorescência do ecrã, depois usada para ver a constituição interna do corpo humano colocado entre o tubo emissor e o ecrã, pode dizer-se que aqui se tratou de descoberta, mediada pelo acaso, mas na radiografia o mecanismo de invenção é notório, pois o novo método não surgiu espontaneamente, exigiu um pensamento prévio que levou a explorar o possível efeito da nova radiação sobre uma emulsão fotográfica, o que Röntgen comprovou com a famosa radiografia da mão de sua mulher, Berta.

Dito isto, regresso à questão sempre repetida do acaso, a que Röntgen tinha aludido, mas que não explicou e tem servido a alguns para minimizar a grandeza do seu trabalho, pois há sempre detratores dos que alcançam elevar-se acima deles. Sobre o que foi afinal o acaso, foram conjeturadas diversas hipóteses, mas provavelmente a mais certeira é a de que ele se deveu ao tipo de ecrã que Röntgen utilizou. Von Lenard, como vimos, já tinha realizado experiências parecidas, mas o ecrã que usou era composto de material orgânico, enquanto Röntgen tinha privilegiado o platinocianeto de bário, por emitir uma luminescência mais intensa. Ora, se bem que ambos os ecrãs respondessem aos raios catódicos com a emissão de luz, só o platinocianeto de bário fluorescia suficientemente com os raios X. A escolha do platinocianeto de bário tinha tido outro motivo, mas veio a revelar-se fundamental para a descoberta. Talvez por isso mesmo, Röntgen conseguiu ir além de von Lenard.

É claro que as investigações que se seguiram foram expressão de um processo criativo, podemos dizer inventivo, para descobrir – sublinho o verbo descobrir – algumas características das novas radiações.

Quem nunca aceitou o mérito de Röntgen foi von Lenard, que sobre este assunto abriu uma amarga querela que só o deslustrou. De início, von Lenard até pensava que todos os efeitos produzidos fora do tubo eram da responsabilidade dos "seus" raios catódicos. O que se sucedia era que, fora do tubo de raios catódicos, existiam não só estes raios, cujo trajeto no ar estava limitado a 8 cm, mas também as

radiações X. Von Lenard não ponderou a possibilidade de haver ali outra forma de radiação e deixou assim escapar por entre os dedos a magna descoberta. Mas ele não era pessoa para deixar as coisas neste pé e afirmava que os chamados raios X eram, afinal, os raios Lenard e não um novo tipo de radiação. Mesmo depois de aceitar que eram uma nova forma de radiações, ironizava dizendo: «Röntgen foi a parteira dos raios X, mas a mãe fui eu". A tal ponto chegou a animosidade contra Röntgen, que nunca mencionava o seu nome quando tinha de referir-se aos novos raios. Von Lenard era indubitavelmente um génio, mas com propensão para os conflitos, como o atesta o que também injustamente travou com Einstein.

Todavia, não foi só von Lenard quem deixou escapar a descoberta. Já aludi ao facto de, noutros laboratórios de física, nomeadamente na Inglaterra e nos EUA, terem sido igualmente observados efeitos dos raios X, mas sem que se reconhecesse como expressão de algo até aí desconhecido. Tal como von Lenard pensou que eram os raios catódicos, também todos os outros admitiram não se tratar de nada de novo. A grande diferença é que Röntgen não se limitou a pensar, como eles, numa qualquer explicação sem a fundamentar. Mais tarde, referindo-se ao momento em que Röntgen viu surgir a fluorescência no platinocianeto de bário, um jornalista perguntou-lhe: "o que pensou?". A resposta foi bem elucidativa: "eu não pensei, investiguei". Esta história é mais uma demonstração da bem conhecida asserção de Louis Pasteur: "o acaso só favorece os espíritos preparados…".

A construção da ciência só se faz com a comunicação, que permite a outros poderem comprovar ou refutar o que foi alcançado. Röntgen sentiu a necessidade urgente de comunicar o que tinha descoberto e que outros tinham debaixo dos seus olhos e não viam. Por isso, no Natal de 1895, apresentou a comunicação escrita ao editor das atas da Academia de Física e Medicina de Würzburg para que de imediato fosse publicada, ainda no último número de 1895. Entretanto, escreveu a vários cientistas enviando cópia das provas tipográficas e da imagem da mão de Berta, que tinha produzido com os novos raios.

A divulgação pública da descoberta foi dada em primeira mão num jornal austríaco, *Die Presse*, a 5 de janeiro de 1896, e a Portugal chegou pelo jornal *Novidades* em 27 do mesmo mês e de novo em 29 de janeiro, nesta última data com alguns elementos de tipo técnico. Armado com os poucos detalhes ali publicados, Henrique Teixeira Bastos, eminente físico da Universidade de Coimbra, começa a trabalhar no sentido de produzir também entre nós a emissão de radiações X e de as documentar. No dia 3 de fevereiro, já Teixeira Bastos obtinha as primeiras radiografias, em menos tempo que o exigido nos EUA[11] para o mesmo efeito, o que mostra o alto conhecimento científico e a elevada capacidade técnica deste físico português. Um dado curioso é que dois escassos meses depois, um aluno da Faculdade de Medicina de Coimbra ilustrou um trabalho escolar com a radiografia de uma fratura que ele produzira no cadáver para esse fim. O jovem, que assim se estreava no seu contacto com os raios Röntgen nesta fase precocíssima da radiologia, era Egas Moniz[12], facto quase premonitório das investigações angiográficas que depois desenvolveu e que demonstra o gosto pela ciência que sempre o acompanhou.

[11] Nos EUA, onde a notícia do jornal vienense aparecera traduzida no New York Times do dia 8 de janeiro, só no dia 3 de fevereiro foi obtida a primeira radiografia (cit. Arruda WO, *Wilhelm Conrad Roentgen, 100 anos da descoberta do raios X*, em Arq Neuropsiq 1996, 54, 525). Há todavia notícia, com fundamentação duvidosa, sobre a realização da primeira radiografia nos EUA, no dia 12 de janeiro, por três estudantes de física que, para isso, se teriam introduzido de noite ilegalmente no laboratório de física do Davidson College (Carolina do Norte). Veja-se, por exemplo, https://gizmodo.com/5731754/how-three-college-kids-illegally-captured-the-nations-first-x-ray-photograph.

[12] Veiga LA, *Do Gabinete de Física da Universidade de Coimbra ao Centenário dos Raios X*, Actas do Simp Comemor Centen Descob Raios X, Univ Coimbra, 1996, 31.

O progresso da radiologia médica após a descoberta foi admirável e, nessas primeiras décadas, a ciência portuguesa veio a desempenhar um papel de primeiro plano, mercê do génio de Egas Moniz. Para perceber a intervenção de Egas Moniz na ciência radiológica, é preciso considerar o estado da radiologia médica nesse tempo, o que me leva a recordar o que se tinha progredido desde a divulgação da descoberta dos raios Röntgen.

Nos primeiros anos, as imagens obtidas tinham pouca definição e escassa gama de contrastes. O que era possível ver nos ecrãs de radioscopia e nas chapas radiográficas eram quase só os ossos, as estruturas gasosas, nomeadamente os pulmões, e os corpos estranhos radiopacos, como as moedas ingeridas ou as balas. Com efeito, se era verdade que os raios X revelavam o interior do corpo humano, também é certo ser pouco o que se via. Os designados tecidos moles, que constituem o maior volume da estrutura corporal, produziam uma sombra uniforme, sem detalhes internos que revelassem os diversos órgãos que os compunham[13].

A ideia óbvia para suprir esta limitação era introduzir, nos órgãos até aí indistintos na imagem radiológica, substâncias com radioabsorção diversa, dando aos raios X uma imagem diferente da massa de tecidos moles. Tão óbvia era ela que nada demorou a ser posta em prática.

O ar foi o primeiro contraste a entrar em cena, no próprio ano em que a descoberta fora anunciada, 1896, tendo sido usado com a manobra inspiratória para tornar mais visíveis os pulmões. Mais tarde, não só o ar mas também outros gases foram introduzidos artificialmente em várias estruturas, de que são exemplo o peritoneu, o espaço retroperitoneal, as cavidades articulares e os ventrículos cerebrais. Por serem mais radiotransparentes que os tecidos moles, foram batizados com o nome de contrastes negativos.

A outra linha do uso dos contrastes, foi com substâncias de alto número atómico, por isso mesmo muito mais absorventes das radiações que os tecidos moles e, também por isso, chamados contrastes positivos. O primeiro destes contrastes foi usado também no ano de 1896 quando, em Viena, Haschek e Liedenthal injetaram, nos vasos sanguíneos de uma mão amputada, substâncias contendo metais pesados e realizaram assim a primeira angiografia[14]. Este sucesso teve inegável valor histórico, mas ficou ainda muito longe da angiografia *in vivo*, que teve de aguardar vários anos pela sábia e engenhosa intervenção de Egas Moniz.

Para o tubo digestivo, o ano inaugural foi 1898, quando se utilizou um sal de bismuto para estudo radiográfico experimental no gato[15]. Todavia, o progresso mais importante neste domínio, pela sua inocuidade, foi o sulfato de bário, usado sobretudo a partir da segunda década do século XX e que continua em utilização regular no século atual.

Muitos outros contrastes positivos foram sendo experimentados e introduzidos nas mais variadas estruturas orgânicas. Assim se usaram, por exemplo, para visualizar as cavidades excretoras do rim, com cateterismo retrógrado passando pela bexiga e depois pelo uréter, ou para tornar visível a cavidade do

[13] Assim era com os sistemas de registo da imagem então existentes. Atualmente, as radiografias conseguem mostrar alguns detalhes nos tecidos moles, designadamente distinguindo o tecido adiposo dos outros tecidos. Diga-se, também, que os raios X, usados não para a produção das radiografias convencionais mas para a produção de imagens de tomografia computadorizada, permitem ainda maior discriminação das estruturas moles.

[14] Quader MA, Sawmiller CJ, Sumpio BE, *Radio Contrast Agents: History and Evolution*, acedido em https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-1-4612-1190-7_63

[15] Cutler S, *Contrast media*, acedido em https://radiologykey.com/contrast-media-2/

útero e das trompas, por introdução do produto através do colo do útero. A ambição de visualizar as estruturas internas sem recorrer à injeção direta nelas do produto de contraste, levou a pensar na capacidade de alguns órgãos para concentrar diversas substâncias nas suas excreções e, concretamente, na possibilidade de assim conseguir visualizar as vias biliares e as cavidades excretoras renais.

A busca da visualização da vesícula biliar foi particularmente demonstrativa da intervenção do acaso feliz no processo científico. Vale a pena, de facto, relatar o modo como foi alcançado o primeiro êxito nesse caminho, em 1924, quando Evarts Ambrose Graham e Warren Henry Cole conseguiram visualizar as vias biliares, beneficiando da função excretora do fígado, que segregou para a bílis, em alta concentração, um derivado da fenolftaleína administrada por via intravenosa[16]. O protocolo seguido foi injetar esse produto no animal de experiência, dar tempo a que fosse captado e excretado pelo fígado e concentrado depois na vesícula para se obter, então, a radiografia. Depois de quatro meses de experiências e quase 200 cães estudados sem sucesso[17], chegou o dia em que a radiografia de um cão mostrou a almejada vesícula contrastada. A alegria inicial foi logo temperada pelo insucesso das tentativas seguintes. Reanalisando o que se estava a passar, interrogou-se o tratador do animal para saber de alguma circunstância que tivesse tornado diferente aquele único cão. Foi assim que se soube ter-se esquecido de alimentar o animal no dia do exame. A chave estava ali, na necessidade do jejum para não estimular o esvaziamento vesicular. Para a história, a colecistografia passou com justiça a receber também a designação de método de Graham e Cole ou teste de Graham e Cole.

Esta curiosa história, que mostra a enorme persistência dos investigadores, quase teimosia mesmo, na procura do resultado, é também a demonstração de que a invenção e o acaso andam por vezes de mãos dadas e do modo mais frutuoso. A invenção foi todo o desenho experimental, assente em sólidas premissas e numa bem fundada expectativa de êxito. O acaso foi o erro do tratador do animal. Não tivesse ele ocorrido e era possível que fossem outros a inventar o método que Graham e Cole tinham idealizado.

O primeiro quartel do século séc. XX foi, pois, particularmente produtivo na procura de métodos de visualização contrastada das estruturas internas. Essa procura foi especialmente fecunda no que tange às estruturas tubulares, nomeadamente, como já referi, o tubo digestivo, as vias biliares e o aparelho urinário, mas faltava conquistar o enorme território vascular. O problema maior estava na toxicidade das substâncias de contraste quando introduzidas em concentração bastante para opacificar suficientemente as artérias ou as veias. É aqui que entra o génio de Egas Moniz, que o leva à criação do método angiográfico.

António Caetano de Abreu Freire Egas Moniz, tal como Röntgen, tinha já dobrado o cabo dos 50 anos quando se dedicou à solução deste problema. Antes, **já havia construído uma sólida carreira na neurologia, tendo sido mesmo o primeiro professor desta disciplina universitária em Portugal** (em 1911)[18], e também uma carreira diplomática e política que o notabilizaram. Senhor de uma mente excecional, múltiplos foram os campos a que dedicou o seu interesse, da medicina à política, da etnografia ao

[16] Graham EA e Cole WH, *Roentgenologic examination of the gallbladder. Preliminary report of a new method utilizing the intravenous injection of tetrabromphenolphtalein*, JAMA, 1924, 82, 613.

[17] Howard JM e Hess W, *History of the Pancreas. Mysteries of a Hidden Organ*, acedido em https://books.google.pt/books?id=rlLPBgAAQBAJ&pg=PT965&lpg=PT965&dq=oral+cholecystography++history&source=bl&ots=bptbliOvQD&sig=O_sjSeyzx_02O3BODQySOhSh7Y8&hl=pt-PT&sa=X&ved=0ahUKEwjNjImi6M_WAhVBVhoKHUvRAxQQ6AEIYjAL#v=onepage&q=oral%20cholecystography%20%20history&f=false

[18] A ele se deve em grande parte a autonomia da neurologia, antes integrada com a psiquiatria, conforme recordam Pina ME e Correia M na obra *Egas Moniz (1874-1955): cultura e ciência*, in História, Ciências, Saúde, Manguinhos, Rio de Janeiro, 2012, 19, 432, acedido em http://www.scielo.br/pdf/hcsm/v19n2/05.pdf

colecionismo de arte, etc. Inconformista por natureza, abandonou a política após a revolução de 28 de maio de 1926, entregando-se de novo ao seu múnus de professor e à investigação. Diz o nosso povo que há males que vêm por bem; neste caso e para a medicina, assim foi.

Um dos grandes problemas da neurologia era a grande dificuldade de localização dos tumores cerebrais. Para o resolver, o norte-americano Dandy, tinha introduzido ar dentro do cérebro, mais precisamente nos ventrículos cerebrais, criando assim a ventriculografia gasosa[19]. Egas Moniz estava ciente dos resultados conseguidos com o novo método, mas que tinha pouca sensibilidade diagnóstica (70% dos tumores não eram detetados) e provocava importante desconforto nos doentes. Certo é que, na Europa e particularmente em França, sede de uma escola neurológica que nada devia às de outras paragens, a ventriculografia de Dandy era quase ignorada, di-lo o próprio Egas Moniz. Por isso, ele almejava criar um método melhor, que tornasse possível o diagnóstico topográfico dos tumores cerebrais e avaliar as suas dimensões.

Hoje, é habitualmente admitido que o seu objetivo residia na visualização do sistema vascular cerebral. Aliás, esta convicção reforça-se com o que ele próprio deixou escrito sobre o assunto, no seu precioso livro *Confidências de um investigador científico*, ao referir qual era então ponto da situação entre os neurologistas europeus. Diz ele: "Todos nós[20] lançávamos as nossas vistas para a opacificação dos vasos cerebrais". Porém, mais adiante revela que a sua ideia original era diferente, pois escreve que sabia "dos livros, que os brometos tinham tendência a fixar-se na massa encefálica e não ignorava que eram opacos aos Raios X". E, de facto, antes de se lançar na pesquisa arteriográfica, Egas Moniz tentou conseguir essa opacificação encefálica administrando, por via oral, brometo de lítio, mas não obteve sucesso nesta ambicionada encefalografia. Depois, pensou numa "substância opaca aos Raios X que se fixasse no tecido neoplásico de algumas espécies tumorais", também sem êxito. Só depois destas tentativas goradas, é que iniciou as investigações orientadas para os vasos cerebrais.

Como se vê, a ideia primitiva que o guiou era extremamente ambiciosa, nada menos que tornar radiologicamente visível o próprio cérebro, o cérebro vivo e funcionante, para estudar as eventuais alterações da sua imagem radiográfica em função da patologia tumoral radicada nele[21]. Admito, mesmo, que ao enveredar para o seu objetivo seguinte, isto é, tornar as artérias encefálicas radiopacas, permitindo encontrar distorções da sua arquitetura provocadas pelos tumores, ele tivesse também a esperança de encontrar, como resultado adicional, a opacificação da própria massa encefálica. Até na designação que criou de "encefalografia arterial" parece entrever-se o desejo inicial de uma verdadeira encefalografia.

A procura da demonstração radiográfica dos vasos *in vivo* já tinha sido iniciada por alguns cientistas. Em 1923, Sicard e Forestier, no mesmo ano Berberich e Hirsch e, em 1924, Brooks[22] tinham conseguido a visualização radiológica de vasos sanguíneos no vivo, mas em condições tais que não deram azo ao uso clínico que pudesse estabelecer o seu interesse[23]. Por isso, persistia a necessidade de um processo que permitisse estudar, de modo inócuo, o território arterial e que provasse, de forma inequívoca, a sua utilidade no uso clínico, nomeadamente no diagnóstico das lesões e no planeamento da sua terapêutica.

[19] Curiosamente, Egas Moniz referiu-se à "descoberta da ventriculografia", usando a palavra descoberta com sentido ambíguo.
[20] Aludia aos que desejavam melhorar o diagnóstico dos tumores cerebrais, nomeadamente, como ali esclarece, a "Sicard, Marinesco e outros".
[21] Essa aspiração veio a realizar-se com o aparecimento da tomografia computadorizada e, mais ainda, com as imagens de ressonância magnética.
[22] Usou o iodeto de sódio, mas em altíssima concentração, 100% p/v.(Brooks B, *Intra-arterial injection of sodium iodide*, *JAMA*. 1924, 82, 1016), o que provocava tal dor que o paciente não conseguia ficar imóvel e era necessário anestesia geral.
[23] O principal óbice residiu na agressividade das substâncias usadas.

Por isso, a glória da criação do método arteriográfico não é ofuscada por esses trabalhos anteriores e a prova é ser Egas Moniz universalmente reconhecido como o verdadeiro criador do método arteriográfico.

Vejamos então o caminho percorrido por Egas Moniz nesta aventura científica. É bem conhecido o percurso das suas investigações, que deixou documentado nas já referidas *Confidências*. Estas mostram bem o rigor com que registava, *pari passu*, o protocolo técnico seguido em cada tentativa, os resultados obtidos nela e as modificações que foi introduzindo para alcançar o desejado arteriograma radiográfico. A marcha da sua investigação foi modelar. Primeiro, ensaios para verificar a radiopacidade de várias substâncias contidas dentro de tubos finos que pudessem assemelhar-se aos vasos sanguíneos da cabeça. Escolhida a substância e avaliado o efeito de várias concentrações em soluto aquoso, passou à experimentação animal. Todavia, não conseguiu o objetivo nos primeiros cães. Concretamente, só no 15.º animal conseguiu ver, "finalmente, e nitidamente, a rede arterial cerebral do cão".

O passo seguinte não foi, como poderia pensar-se, fazer o mesmo num doente com tumor cerebral. Egas Moniz estava ciente de que a representação radiográfica da rede vascular da cabeça seria de interpretação difícil, não só porque se tratava da imagem bidimensional de uma realidade tridimensional[24], mas também porque os anatomistas descreviam diferentes variações dos vasos. Seria muito difícil, portanto, reconhecer eventuais alterações do mapa vascular, se não se soubesse antes como eram representados os vasos normais na projeção radiográfica bidimensional.

Para isso, Egas Moniz conduziu investigações no cadáver, aliás em condições técnicas muito difíceis, de modo a estabelecer a anatomia radiográfica das artérias cerebrais no homem[25]. Só por si, este já era um enorme contributo para a ciência. Tal com ele acentua, algumas designações por si dadas ao arteriograma cerebral, como o "sifão carotídeo" e o "grupo sílvico", tornaram-se clássicas, ainda hoje se usam. O estudo cadavérico consentiu-lhe, também, calcular o volume de produto que seria necessário injetar para visualizar a rede arterial cerebral. Armado com estes conhecimentos técnicos e de anatomia radiográfica, avançou finalmente para o homem vivo. Mais uma vez, com muitas dificuldades iniciais, de tal sorte que não teve êxito nos cinco primeiros casos. Finalmente, no sexto doente, conseguiu a arteriografia, mas a um preço terrível: a morte sobreveio ao fim de 8 horas.

Pode imaginar-se a profundidade do golpe sentido por Egas Moniz e por quem o ajudava. Egas Moniz interrompe a investigação e passa então por um período de grande conflito interior. Medita, analisa o conjunto de circunstâncias que levaram àquele desfecho, reconhece os próprios erros, ouve colegas em quem confia, procura dirimir o dilema: terminar ou continuar. Foi então, talvez mais do que em qualquer outro momento da sua vida, que se revelou a sua fibra de investigador, a confiança em si mesmo, a confiança na correção do caminho a percorrer. Ele mesmo cita Ramon y Cajal que tinha dito ser necessária ao investigador "fé robusta em si mesmo, sem a qual nenhuma investigação alcança termo feliz". Muda então de substância de contraste até aí usada, o brometo de estrôncio a 70%, para o iodeto de sódio que, por ser mais radiopaco, lhe permitiu reduzir a concentração a 25% e, assim, minorar a agressão vascular da injeção. E é desse modo que obtém o tão procurado sucesso, a 27 de junho de 1927.

---

[24] O problema do carácter bidimensional da imagem, onde se sobrepõem as artérias mais profundas e as mais superficiais, levou-o, mais tarde, a obter imagens estereorradiográficas que lhe permitiam discernir a profundidade relativa dos diferentes vasos.

[25] Em 1920, foi publicado um pouco conhecido atlas em que se contém uma arteriografia cadavérica da região cranioencefálica infantil, com estereorradiografia: Orrin HC, *The X-ray atlas of the systemic arteries of the body*, ed. Balliere, Tindall, and Cox. Mas persistiam dúvidas quanto à anatomia no adulto e sobretudo quanto às variações descritas pelos anatomistas. Na receção do trabalho de Egas Moniz, um dos factos que teve impacto nos especialistas foi a grande uniformidade do mapa arterial em todos os doentes.

A seguir, Egas Moniz sentiu a mesma premência vivida por Röntgen para anunciar o esplêndido avanço científico que conseguira, no sentido de garantir o seu primado. A notícia foi levada por ele próprio de imediato a Paris, a cuja Sociedade de Neurologia apresentou, escassos 10 dias depois (em 7 de julho de 1927), uma comunicação formal que lhe garantiu o lugar indisputável de criador da angiografia no vivo.

É curioso verificar que o nosso primeiro e até agora único prémio Nobel em medicina, atribuído em 1949, já antes havia sido indigitado por várias vezes. Após a criação da arteriografia, em 1927, foi proposto em 1928, 1929, 1930 e, depois da invenção da leucotomia pré-frontal, foi indicado novamente em 1944 e em 1949, quando lho foi finalmente atribuído. Que o prémio Nobel lhe tenha sido outorgado **não pela criação da arteriografia, a breve trecho estendida a todos os outros departamentos vasculares e, por isso, hoje com utilização diária em todas as unidades médicas dotadas do necessário equipamento radiológico, mas sim pela leucotomia pré-frontal, que tanta polémica gerou**[26]. Pode suscitar hoje alguma surpresa, embora se deva reconhecer que a leucotomia levantou questões científicas e filosóficas de maior repercussão que a arteriografia. No entanto, não é sequer comparável a repercussão que teve para a prática médica do dia-a-dia.

A angiografia criada por Egas Moniz teve rápida extensão a todos os outros departamentos vasculares e, nessa proeza, é de novo a ciência lusitana que vai na dianteira. Recordando sumariamente os factos principais, devo salientar que Egas Moniz tinha perfeita noção de que o processo por ele introduzido se poderia aplicar aos outros sectores arteriais, mas foi conscientemente que não quis enveredar por esse caminho e, ao invés, preferiu prosseguir no estudo das muitas perspetivas que, com a arteriografia, se lhe abriam na patologia encefálica. Mas não deixou de encorajar outros para que alargassem o uso do método às restantes regiões vasculares. Abriu uma única exceção na pessoa de Lopo de Carvalho, possivelmente fruto de uma maior proximidade pessoal, dado que ambos se tinham licenciado em Coimbra, ali se tinham doutorado, sido professores e ambos vieram da Lusa-Atenas enriquecer o claustro doutoral da nova Faculdade de Medicina de Lisboa. Lopo de Carvalho, em conjunto com Egas Moniz e Almeida Lima, levou o produto de contraste às artérias pulmonares, através de um cateter radiopaco, a sonda de Forssmann[27], e criou assim, em 1931, a angiopneumografia. Na mesma escola de Lisboa, Reynaldo dos Santos, com a colaboração de Augusto Lamas e Pereira Caldas, aplicou em 1929 o método de Egas Moniz ao estudo arterial dos membros[28] e, ainda no mesmo ano, criou a aortografia, com que se passou a ver também as artérias das vísceras abdominais. Deve-se-lhe também a primeira flebografia da veia cava.

Com estes trabalhos dos investigadores portugueses, estavam explorados os três grandes sectores arteriais: a cabeça, o tronco e os membros. No sector venoso, depois do trabalho pioneiro de Barberich e Hirsch, já referido, é a partir de 1930 que vários outros investigadores conseguem radiografar *in vivo* diversas veias. Todavia, fica a dever-se a outro investigador português, Cid dos Santos, a maior contribuição para o estudo do território venoso. Por sua vez, Aleu Saldanha e Aires de Sousa, ambos

[26] As questões de índole ética ligadas a esta cirurgia foram agravadas pelo uso imoderado que dela fizeram alguns neurocirurgiões, mas, excluídos aqueles excessos, não é atilado um julgamento somente negativo com base nos critérios hodiernos, tanto mais que naquela época não havia qualquer outro tratamento para alguns doentes psiquiátricos graves.

[27] A ideia de Forssmann era poder administrar medicamentos dentro do próprio coração, em doentes necessitando de cardiorressuscitação. Para isso, em 1929, documentou radiograficamente em si mesmo a colocação do cateter na aurícula direita, mas não injetou qualquer contraste radiográfico. Pouco depois, realizou angiocardiografias em coelhos e cães. Mas foi o grupo cubano de Castellano, Pereira e Garcia que primeiro realizou no homem "la angio-cardiografia radio-opaca" (Arch Soc Estudios Clin Habana, 1937, 31, 523).

[28] Santos, R, Lama A, Caldas JP, *A arteriografia dos membros*, Medicina Contemporânea, 1929.

radiologistas em Lisboa, debruçaram-se sobre novos territórios, aquele sobre a circulação intersticial, com a sua intersticiografia, e este sobre a circulação nos microvasos sanguíneos, terreno que seu filho Luís Aires de Sousa continuou a explorar.

Mas, entretanto, já tinha surgido em cena, num novo cenário, o Porto, uma outra plêiade de investigadores portugueses, igualmente de alto nível. Ali, o espírito clarividente de Hernâni Monteiro levara-o à criação, em 1927, do Laboratório de Cirurgia Experimental e de Radiologia, onde veio a ter a colaboração de Álvaro Rodrigues, Sousa Pereira e Roberto de Carvalho. O novo campo vascular explorado por este grupo foi o sistema linfático, primeiro no animal, sobretudo com o intuito de encontrar a substância de contraste mais apropriada a este departamento vascular. A Sousa Pereira devem-se também as primeiras visualizações radiográficas da veia porta. Mais tarde, de novo em Lisboa, Eduardo Coelho obtém em 1952 a primeira coronariografia.

Todo este conjunto de investigações e de resultados pioneiros alcançados pelos cientistas lusos que se lhe dedicaram deu azo à designação de Escola Portuguesa de Angiografia, hoje consagrada internacionalmente[29], porque de facto foi no nosso País que tudo isto começou. Foi uma construção alicerçada no trabalho precursor de Egas Moniz, onde o acaso não entrou, onde tudo foi feito partindo de premissas sólidas e de um método experimental bem concebido. As angiografias foram verdadeiras invenções. Olhando, hoje, para o que foi todo este processo criativo, deve reconhecer-se que, em Portugal, não terá havido muitos outros conjuntos de investigações científicas tão coerentes, sistemáticos e produtivos como este.

Dado ser a minha primeira comunicação a esta douta Academia e atendendo também à minha condição de médico radiologista, quis com ela prestar homenagem a esta plêiade de investigadores que, no caminho aberto por Röntgen, erigiram em Portugal tão notável progresso da ciência médica, progresso cujo maior mérito recai evidentemente em Egas Moniz, que esta Casa se orgulha de contar entre os seus mais prestigiados Presidentes e que, com a sua utilíssima obra angiográfica, fez honra ao lema da Academia: *Nisi utile est quod facimus stulta est gloria* (se não for útil o que fazemos, a glória é vã).

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 21 de junho de 2018)

[29] A divulgação internacional desta designação, já há muito em uso a nível nacional, muito deve ao livro *Pioneers in Angiography*, *The Portuguese School of Angiography*, com edição de Veiga-Pires JA e Grainger RG, 1982.

Bactérias 'humanizadas': expressão de genes humanos em procariotas na detecção de agentes cancerígenos

José Rueff

'Seul le cancer a gardé, dans toutes les langues son nom astrologique. La frayeur est intacte.'
Amin Mallouf, in «Samarkan»

CONTEXTO DESTA COMUNICAÇÃO FACE A ANTERIORES SOBRE O TEMA DO CANCRO

O texto da presente comunicação decorre de comunicações que já anteriormente apresentámos, assentes em trabalhos que temos desenvolvido com os nossos colegas, tendo como eixo condutor alguns aspectos da susceptibilidade genética a cancro, dos mecanismos envolvidos na terapêutica anti-neoplásica com citostáticos e o surgir da resistência e ainda sobre um tipo particularmente importante de cancerígeno representado pelas radiações ionizantes e seus efeitos genéticos.

Assim, esta comunicação surge no contexto das seguintes anteriormente apresentadas à Academia, designadamente:

a) Sobre a susceptibilidade a cancro:
O Estatuto da Doença Singular – os Mecanismos Moleculares da Genética- apresentada em Sessão em 2010;
b) Sobre as lesões genéticas por radiações e cancro:
Efeitos genéticos de radiação ionizante – apresentada em Sessão em 2016
c) Sobre a expressão genética na resistência à terapêutica no cancro:
Transportadores de membrana na resistência a fármacos em Oncologia – apresentada em Sessão em 2015.

CANCRO E LESÃO GENÉTICA

É comumente aceite que o cancro surge; ou melhor, é iniciado, pelo acumular de mutações no DNA de células sãs e que o cancro é desencadeado quando as células atingem um acervo mínimo de mutações que transformam a célula iniciadora, conferindo-lhe potencial proliferativo e, posteriormente, potencial invasivo.

Como referiu Raymond W. Ruddon: "*Cancer is essentially a genetic disease*" (1), uma vez que as lesões iniciadoras respeitam a alterações no DNA, i.e., a mutações. Estima-se que a iniciação tumoral possa depender de 4-7 (ou até 11) mutações, ou seja, o processo é multigénico e é também multifásico. Se quisermos usar linguagem formal, podemos dizer que a taxa de cancerigénese, i.e., de "êxito" de lesões génicas conducentes a tumor que podemos designar por λ^*, é o resultado da taxa basal, ou seja, aquela

atribuível a mutações espontâneas (infidelidade de replicação de DNA, reparação de DNA menos eficaz), a que se soma a taxa devida ao produto da taxa basal pelo tempo de actuação de um agente cancerígeno $\lambda c_{t,}$ em que t é o tempo de actuação do cancerígeno. Assim, temos:

$$\lambda^* = \lambda_i + \lambda_i c_t \text{ para } i = 1 \ldots k$$

em que k são as múltiplas fases do processo neoplásico, nomeadamente as diversas mutações.

Por detrás do fenótipo morfológico e da biologia de um tumor estão, porém, múltiplas mutações génicas que se vão acumulando na evolução clonal do tumor. De facto, os tumores são na sua evolução formados por oligoclones exibindo uma micro-heterogeneidade génica: não há, assim, dois tumores iguais, nem dois oligoclones de um mesmo tumor iguais, pois não há em todas as células um mesmo onco-genótipo (2).

Qualquer que seja o agente ou mecanismo que desencadeiem mutações potencialmente cancerigénicas, estas distinguem-se, porém, em duas classes funcionais, as "*driver mutations*" e as "*passenger mutations*". As primeiras constituem fenomenicamente as mutações indispensáveis ou cruciais para o desencadear do tumor, as "*passenger*" serão primariamente mutações neutras que se vão acumulando na evolução tumoral mas das quais o tumor não necessariamente carece para o seu fenótipo de multiplicação celular e invasividade.

Este conceito de mutações indispensáveis – as "*driver mutations*" – levou ao conceito de "*oncogene addiction*", termo feliz proposto por Bernard Weinstein (3, 4) para designar as mutações sem quais o tumor não prolifera e que, se inibido o seu produto génico alterado por um fármaco dirigido-a-alvo ("*target therapies*") resulta num cessar da proliferação e/ou morte celular (por exemplo por inibição de proteína mutada que bloqueie a apoptose: (3, 4).

Todavia, a instabilidade genética tumoral leva com inusitada frequência à aquisição de resistência aos fármacos dirigidos-a-alvo, pelo acumular de mutações na proteína-alvo e/ou pela sobre-expressão de proteínas transportadoras de membrana de efluxo, em particular as ABC ("*ATP-binding cassette*"). Qualquer dos possíveis mecanismos traduzir-se-á em resistência farmacológica que é a causa de morte em cerca de 90% dos doentes com cancro já metastisado (2).

Tal instabilidade genética pode mesmo traduzir-se numa alternância de funções entre "*driver*" e "*passenger mutations*" com as últimas a passarem a contribuir para a manutenção do fenótipo do tumor.

AGENTES QUÍMICOS CANCERÍGENOS

A taxa de aparição de novos cancros a nível mundial (incidência) estimada para o cômputo do ano de 2018 é de 18,1 milhões de novos casos e a mortalidade global representará 9,6 milhões de casos, projectando-se para 2030 um aumento de incidência de 61,7%. Para Portugal o número de novos casos terá sido em 2018 de 58.199 e o número de mortes de 28.960 (5, 6).

Globalmente, pode sugerir-se que a mortalidade para vários tipos de cancro terá uma tendência de diminuição mas a incidência continuará a aumentar e é sobre esta que a prevenção pela detecção de agentes cancerígenos se debruça, podendo estimar-se que cerca de 30-70% dos cancros resultam de exposições exógenas devidas a factores do meio veiculados pela inalação, a alimentação e/ou os estilos de vida, em geral.

Na formalização que acima apresentámos: $\lambda^* = \lambda_i + \lambda_i c_t$ para i = 1….k, o que a detecção de agentes cancerígenos procura contribuir para diminuir é a parcela $\lambda_i c_t$, ou seja, o excesso de contributo para a taxa global de incidência.

Desde 1971, mais de 1000 agentes químicos foram avaliados pelo IARC (International Agency for Research on Cancer) da OMS (7), tendo mais de 500 sido identificados como:

1) cancerígenos para o homem (classe 1): 120
2) como prováveis cancerígenos (classe 2A): 82
3) como possíveis cancerígenos (classe 2B): 299

A destrinça entre as classes 2A e 2B baseia-se no peso de evidência quando não há suficiente evidência do agente ser cancerígeno para o homem em estudos epidemiológicos, mas há evidência mais sólida (2A) ou menos consolidada de efeito cancerígeno em animais de experiência. Neste segundo caso, da classe 2B, estão muitas vezes misturas complexas a que o homem está exposto mas em que os efeitos sinérgicos não permitem isolar na análise de evidência um determinado agente.

Destes cerca de 500 agentes já classificados pelo IARC, cerca 88% são agentes lesivos do DNA, isto é comportam uma inequívoca actividade mutagénica ou clastogénica. Daqui a importância de utilizar na avaliação os dados que permitam concluir de genotoxicidade do agente pois tal facto, não somente é utilizado na análise de peso-da-evidência, como também permite consubstanciar o *primum movens* da actividade cancerigénica de que o cancro é iniciado pelo acumular de mutações no DNA, como acima referido.

DETECÇÃO DE PRODUTOS QUÍMICOS COMO EVENTUALMENTE CANCERÍGENOS

O mais versátil sistema de teste de mutagenicidade foi o desenvolvido por Bruce Ames (8, 9), baseado em uma colecção de estirpes de *Salmonella typhimurium* auxotróficas para histidina e que expostas a um potencial xenobiótico mutagénico revertem para autotrofia, detectando assim mutações no gene histidina--deficiente. O teste foi melhorado na sua sensibilidade pelo desenvolvimento de estirpes com níveis de lipopolissacáridos de membrana reduzidos (*rfa*) aumentando a permeabilidade membranária aos xenobióticos a testar.

Mas talvez o grande desenvolvimento foi o associar às placas de teste extractos de microssomas de fígado de rato, permitindo a metabolização de xenobióticos não directamente reactivos face a DNA. Os microssomas formam-se a partir de retículo endoplasmático pela homogeneização do tecido hepático e separação/purificação por centrifugação a 9000 g, de onde também a designação de fração S9. O retículo é rico em citocromos P450 ou *CYP*, que constituem o principal sistema de metabolização de xenobióticos potencialmente cancerígenos, constituindo a denominada Fase I de metabolismo de pré-cancerígenos que origina formas electrofílicas; a que se seguem reacções de conjugação (catalizadas, nomeadamente, por enzimas com actividade glutatião-transferase, ou acetil-transferase) que formam compostos susceptíveis de eliminação (ver Figura 1).

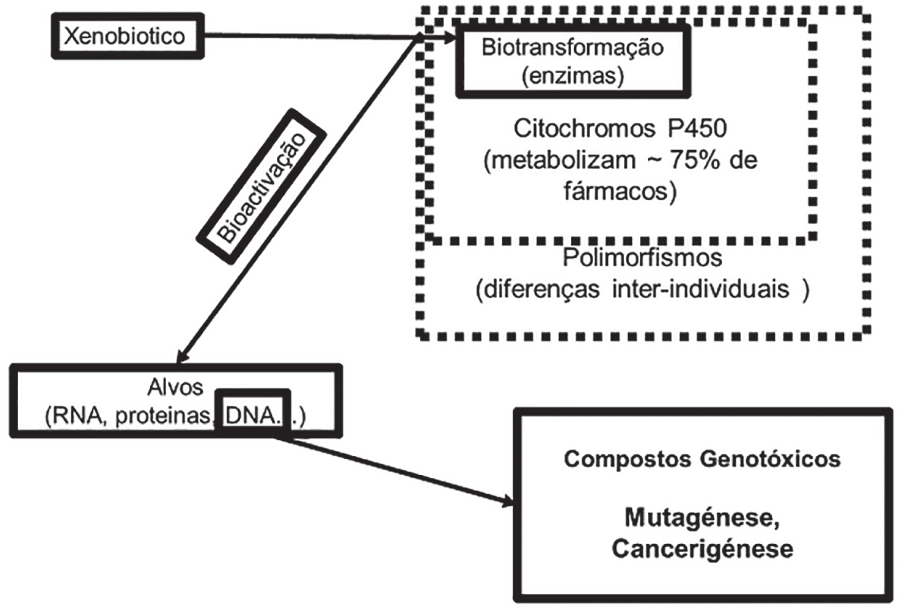


Figura 1. Esquema das vias de metabolização e acção sobre o genoma de agentes potencialmente cancerígenos.

O ciclo de catálise pelos *CYP* exige uma importante enzima que é a dadora de electrões, a citocromoP450--oxirreductase (ver também Figura 2):

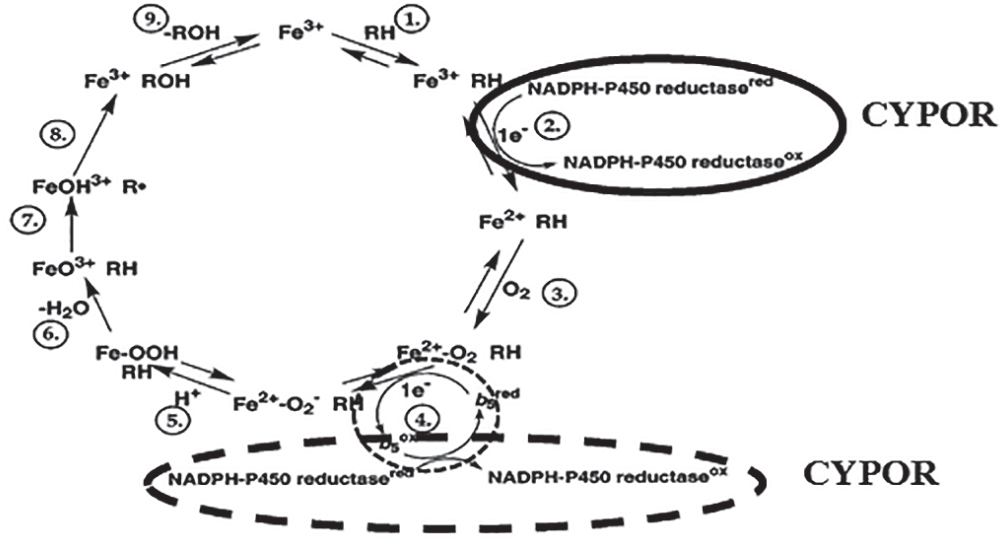


Figura 2. Ciclo catalítico do citocromo P450 (com base em B.Brito Palma, "Developmente of human Cytochrome P$% competent genetoxicity test bacterial systems for high throuput screening – Functional charactarization of huma Cytochrome P45 1A2 polymorphic variants". Tese, 2017).

Quatro importantes limitações da adição de microssomas de fígado de rato são, porém, as seguintes:

(1) não é linear que a formação de metabolitos eletrofílicos extra-celularmente nos microssomas adicionados atinja de forma sempre eficaz o DNA da bactéria;

(2) os *CYP* do fígado de rato podem ter capacidade metabolizadora diversa dos *CYP* humanos o que pode constituir uma dificuldade de extrapolação;

(3) os *CYP* de rato não mimetizam a enorme diversidade de polimorfismos efectivamente existentes nos *CYP* humanos, os quais podem constituir substrato de explicação para as diferentes susceptibilidades humanas;
(4) o uso de animais em medicina experimental está hoje sujeito ao triplo princípio RRR (*Reduce, Refine, Replace*).

ENSAIOS COM BACTÉRIAS 'HUMANIZADAS'

Pelo termo bactérias "humanizadas", referimos aqui estirpes bacterianas para as quais transferimos, por clonagem, plasmídeos gerados por engenharia genética, contendo genes humanos de *CYPs* e da reductase do citocromo P450 (CYPOR) e cuja expressão confirmámos e ainda mantendo a estequiometria fisiológica de 1 CYPOR para 5 *CYP*s, deste modo mimetizando fielmente o metabolismo na célula humana, acrescendo que não se põe o problema potencial de transferência dos metabolitos electrofílicos através da membrana e ainda contribui para o princípio RRR.

Genericamente, o sistema é bi-plasmídico, contendo num dos plasmídeos o gene CYPOR humano e uma fusão entre o gene *sulA* do sistema de reparação errónea SOS (que permite aumentar a sensibilidade de resposta) e o gene *gfp (sulA::gfp)* que permite a detecção de resposta por fluorescência da GFP (*green fluorescent protein*); sendo o segundo plasmídeo aquele em que são clonadas e expressas as isoformas de *CYP*s humanos. Cada estirpe foi transfectada com o plasmídeo indutível de resposta SOS contendo o gene GFP (estirpe I), ou o plasmídeo constitutivo de GFP (estipe C), ou ainda o plasmídeo-controlo sem o gene *gfp* (estirpe B).

O sistema, permite testar com diferentes isoformas de cada *CYP*, consentindo, assim, analisar o papel de polimorfismos génicos de diferentes *CYPs* e possível explicação da questão da susceptibilidade a cancro, uma vez que só cerca 30% embora tendencialmente 50% dos seres humanos têm cancro durante o seu tempo de vida e em condições genericamente idênticas de exposição ambiental. Ou seja, pode admitir-se que haja isoformas das enzimas de biotransformação de agentes químicos potencialmente cancerígenos que ditem diferentes níveis de formação de produtos reactivos electrofílicos e susceptíveis de reagirem com nucleófilos no DNA gerando potenciais mutações iniciadoras do processo de cancerigénese. Nestes mecanismos de susceptibilidade, há evidentemente que juntar os devidos a enzimas de reparação de DNA e enzimas de conjugação (Fase II). Este aspecto já o analisámos antes de forma mais detalhada (10). Certo é, porém, que o problema da cancerigénese e o 'êxito tumoral' não podem reduzir-se a estas fases iniciais da cancerigénese: importantes são por exemplo a EMT (*epihtelial mesenchimal transition*) que permite ás células epiteliais iniciais do tumor (e cerca de 90% dos cancros humanos são carcinomas!) adquirir características mesenquimatosas e facilitadoras da mobilidade e metastização. À EMT há que juntar o papel do micro-ambiente tumoral ou a formação do nicho de metastização. Ora, nenhum destes aspectos é coberto pela detecção e diagnóstico de agentes cancerígenos que constituem apenas a(s) fase(s) inicial(ais) do processo.

No seu todo, desenvolvemos quatro estirpes-tipo: (a) duas de *Salmonella typhimurium* (TA 1535 e TA100 isogénicas para o DNA cromossómico, excepto que TA100 possui anda um plasmídeo mutador, o pKM101) e (b) duas de *Escherichia coli* (FP401 e PD301, isogénicas excepto para o facto de PD301 possuir

também mutações nos genes *ada* e *ogt* que aumentam a sensibilidade a agentes alquilantes por défice de reparação da respectiva lesão no DNA).

A resposta é medida pela equação:

$$F_I = \frac{(f_I^x - f_B^x)/(f_I^0 - f_B^0)}{(f_C^x - f_B^x)/(f_C^0 - f_B^0)}$$

em que, representam as unidades de fluorescência medidas para as concentrações $\underline{x}$ e $\underline{0}$ de cada composto a testar para cada uma das estirpes de teste (I), de controlo (C) e de branco (B), como acima referido, e F_I o factor de indução.

As potências de lesão do DNA são avaliadas pelo SOSIP (*SOS induction potency*), calculado como o declive da parte linear da curva dose-resposta (ver Figura 3), representando a potência molar de cada composto na indução de GFP pelo gene *sulA*.

Para oito variantes génicas polimórficas não-sinónimas do CYP1A2 contruímos estirpes que permitem avaliar o papel dos respectivos polimorfismos na bioactivação de pró-cancerígenos.

A família CYP1A constitui uma das mais representativas na catálise de activação de pró-cancerígenos, tais como hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, aminas heterocíclicas e nitroso-aminas e representa cerca de 17% da bioactivação de todos os pró-cancerígenos.

O CYP1A2 é ainda responsável pela metabolização de cerca de 15% dos fármacos humanos, entre os quais a clozapina, a lidocaína, a fenacetina, ou o propanolol.

A Figura 3 apresenta um exemplo de resposta do 2-amino-3-methylimidazo[4,5-f]quinoline (IQ) em estirpe PD301 de *E. coli* contendo o plasmídeo com CYP1A2. O IQ é um produto de pirólise abundante em alimentos sujeitos a temperaturas de preparação alimentar elevadas, como grelhados.

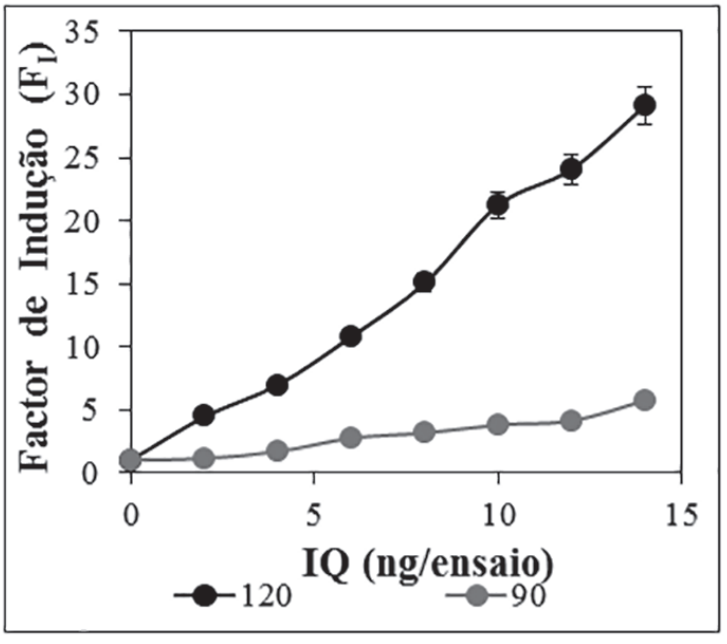


Figura 3. Exemplo de resposta do 2 -amino -3 -methylimidazo[4,5 -f]quinoline (IQ) em estirpe PD301 de *E. coli* contendo o plasmideo com tempos de incubação de 120 min. e 90 min.

Para o tratamento dos dados e atento o grande volume destes (4 estirpes, 8 variantes polimórficas, 8 pró-cancerígenos), recorremos a análise multi-variada (11), que permitiu verificar que duas das variantes polimórficas testadas apresentam diferenças muito significativas de capacidade de catálise face ao tipo selvagem: a T83M (treonina para metionina na posição 83) e a G299S (glicina para serina na posição 299) (ver Figura 4).

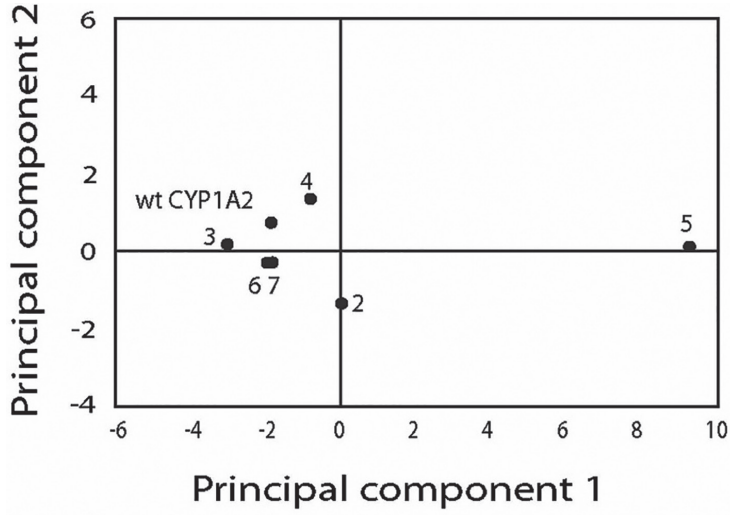


Figura 4. Análie multivarida para caracterização de polimorfismos de CYP1A2.

Este sistema permite a avaliação fidedigna de lesão de DNA por agentes do meio aos quais o homem possa estar exposto e que por essa genotoxicidade possam ser considerados potencialmente susceptíveis de actividade cancerígena.

A vantagem é, além da alta eficácia de resposta, a utilização de genes humanos de biotransformação, os *CYPs* e a CYPOR, assim mimetizando as reacções relevantes no homem, a que acresce o facto de ser um sistema bi-plasmídico em que podem ser clonadas variantes polimórficas humanas cuja frequência alélica seja significativa na espécie humana e, assim, consentir uma presunção de susceptibilidade (12, 13, 14).

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 19 de julho de 2018)

Agradecimentos: Cumpre-me agradecer aos meus colegas que contribuíram tanto com o seu saber e labor para este trabalho, designadamente: Bernardo Brito Palma e Michel Kranendonk, a que vários outros se juntaram e vêm identificados nas citações referidas. Um agradecimento especial é devido aos Doutores Gilles Truan e Philippe Urban (Universidade de Toulouse) pela inestimável colaboração na análise dos resultados.

REFERÊNCIAS:

1. Ruddon, R. W., *Cancer biology*, Oxford University Press, 2007.
2. Rueff, J. and Rodrigues, A.S. "Cancer Drug Resistance: A Brief Overview from a Genetic Viewpoint". *Methods Mol Bio*l. 1395:1--18, 2016.
3. Weinstein I. B., Joe A. K. "Mechanisms of disease: Oncogene addiction–a rationale for molecular targeting in cancer therapy. *Nat Clin Pract Oncol* **3**, 448-457, 2006.
4. Weinstein I. B. "Cancer. Addiction to oncogenes–the Achilles heal of cancer. *Science* **297**, 63-64, 2002.
5. Bray F., Ferlay J., Soerjomataram I., Siegel R.L., Torre L.A., Jemal. A. "Global cancer statistics 2018: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries". *CA Cancer J Clin.*;68(6):394-424, 2018.
6. https://www.cancerresearchuk.org/health-professional/cancer-statistics/worldwide-cancer/incidence
7. IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans. IARC. World Health Organization, 2018.
8. Ames, B.N., F.D. Lee and W.E. Durston"An improved bacterial test system for the detection and classification of mutagens and carcinogens", *Proc. Natl. Acad. Sci. (U.S.A.)*, 70, 782-786, 1973.
9. Ames, B.N., W.E. Durston, E. Yamasaki and F.D. Lee. "Carcinogens are mutagens: a simple test system combining liver homogenates for activation and bacteria for detection", *Proc. Natl. Acad. Sci. (U.S.A.)*, 70, 2281-2285, 1973.
10. Rueff J, Gaspar J, Kranendonk M. "DNA polymorphisms as modulators of genotoxicity and cancer". *Biol Chem.* 383(6):923--932, 2002.
11. Urban P, Truan G, Pompon D. "High-throughput enzymology and combinatorial mutagenesis for mining cytochrome P450 functions". *Expert Opin Drug Metab Toxicol*.;4(6):733-47. 2008.
12. Palma BB, Moutinho D, Urban P, Rueff J, Kranendonk M. "Cytochrome P450 expression system for high-throughput real-time detection of genotoxicity: Application to the study of human CYP1A2 variants". *Mutat Res Genet Toxicol Environ Mutagen*.; 806:24-33, 2016.
13. Palma BB, Silva E Sousa M, Urban P, Rueff J, Kranendonk M. "Functional characterization of eight human CYP1A2 variants: the role of cytochrome b5". *Pharmacogenet Genomics*.;23(2):41-52., 2013.
14. Palma BB, Silva E Sousa M, Vosmeer CR, Lastdrager J, Rueff J, Vermeulen NP, Kranendonk M. "Functional characterization of eight human cytochrome P450 1A2 gene variants by recombinant protein expression". *Pharmacogenomics J.* 10(6):478-88, 2010.

Homeopatia, ontem e hoje

J. M. Toscano Rico

SUMMARY

Homeopathy was one of the many currents that crossed the Medicine field. This happened in the 19th century, before the scientific method and the experimentation in the biological and biochemical domains had given knowledge a solid basis, grounded on solid, reproducible and scientifically proven data.

Homeopathy was created by a german doctor, Samuel Christian Hahnemann in 1821, in part as a reaction to the medical excesses of the 17th and 18th centuries. Hahnemann opposes the main opinions of his time that considered that "Contraria contrarii curantur" saying instead that "Similia similibus curantur". Instead of using drugs with effects opposite to the symptoms of the disease, he used drugs inducing symptoms analogous to those of the illness under treatment but in extraordinarily great dilutions, called "potentiations", reaching 10^{-60}. Although these dilutions do not allow for a number of molecules large enough to induce a biological effect, this fact is not admitted in the homeopathic paradox.

Homeopathy in present days refuses the scientific paradigm with its experimental basis and method of research and adopts a different paradigm. In the Homeopathy paradigm, the cause-effect relationship has no place and it does not make any sense.

There are two kinds of therapy, the symptomatic directed only to alleviate the symptoms of the patient, and the etiologic aimed at the cause of the disease and thus leading more directly to the cure of the illness.

The Homeopathy, denying all that science and the increasing biological knowledge brought to Medicine, may only offer a symptomatic type of treatment. This symptomatic treatment is based, in part, on the suggestion of the patient, hoping that the "vis medicatrix naturae" cures him. One of the consequences may be the delaying of a correct diagnosis and the beginning of an effective treatment.

The paradigm of current day Medicine, designated, "Allopathic" is incompatible with the Homeopathic Medicine. This incompatibility does not allow a direct comparison between the two orientations, nor to affirm a definite superiority of the Homeopathic Medicine over the current results of the present day Medicine.

RESUMO

A Homeopatia foi uma das muitas correntes que atravessaram o campo da Medicina. Começou no século XIX antes do método científico e da experimentação nos domínios biológico e bioquímico terem dado ao conhecimento médico um alicerce consistente, baseado em dados sólidos, reprodutíveis e cientificamente comprováveis.

A Homeopatia foi criada por um médico alemão, Hans Christian Hahneman em 1821 em parte como reacção aos excessos clínicos dos séculos XVII e XVIII. Hahnemann opõe-se** à **opini**ão **corrente do seu tempo que considerava que "Contraria contrarii curantur" dizendo, pelo contrário, que "Similia similibus curantur". Em vez de usar drogas que se opunham aos sintomas da doença, usava medicamentos

que induziam efeitos análogos aos da doença que pretendia tratar mas em diluições extraordinariamente elevadas, chamadas potenciações, chegando a 10^{-60}. Embora estas diluições não permitam a entrada no organismo de um número suficiente de moléculas para produzir um efeito biológico, este facto não é um relevante paradoxo homeopático.

A Homeopatia na actualidade recusa o paradigma científico com a sua base experimental e o método científico de investigação adoptando um paradigma diferente. Neste paradigma, a relação de causa a efeito não tem lugar nem faz sentido.

Há dois tipos de terapêutica: a sintomática, dirigida somente ao alívio dos sintomas do doente, e a etiológica, orientada para a causa da doença e, deste modo, conduzindo mais directamente à cura do doente.

A Homeopatia, ao negar tudo o que a ciência e o sempre crescente conhecimento biológico trouxeram à Medicina, só pode oferecer um tratamento sintomático, baseado em parte na sugestão do doente, esperando que a "Vis medicatrix naturae" o cure. Uma das consequências pode ser o atraso num diagnóstico correcto ou o início de um tratamento eficaz.

O paradigma da Medicina actual, designada como "Alopática" é incompatível com o da Medicina Homeopática. Esta incompatibilidade não permite uma comparação directa entre as duas orientações, nem afirmar uma inequívoca superioridade da Medicina Homeopática em relação aos resultados da Medicina actualmente praticada.

O espírito humano procurou sempre alargar os seus horizontes, aumentar e aprofundar uma visão do mundo e da vida; uma *Weltschauung* que lhe permitisse explicar onde estava, como era, as relações de causalidade e eventualmente, prever o futuro. No campo da arte médica, durante séculos dominou o empirismo, o conhecimento só da experiência feito, baseado essencialmente nas consequências sobre o organismo humano da administração de plantas, procurando com elas combater ou, pelo menos minimizar os sintomas das doenças.

A Homeopatia constituiu uma das muitas correntes que atravessaram a Medicina antes do método científico e da experimentação terem alicerçado o conhecimento actual em bases sólidas, experimentalmente reprodutíveis e cientificamente comprováveis. Foi iniciada por um médico alemão, Samuel Christian Hahnemann (1775-1843) em 1821, talvez em parte como reacção aos excessos de alguns médicos desde os séculos XVII e XVIII com enormes sangrias e repetida administração de eméticos violentos e de purgantes drásticos. Destes últimos, dizia-se que Broussais, em França, tinha feito correr mais sangue do que uma batalha de Napoleão. Em 1821 ainda faltavam 44 anos para surgir uma das obras mais importantes da Medicina, escrita por Claude Bernard e intitulada *Introduction à la Médecine Experimentale* (1865) que começou a colocar as bases científicas da investigação médica. Os conhecimentos e as teorias então vigentes tinham norteado o tratamento dos doentes desde a Antiguidade e da Idade Média baseados essencialmente no emprego de diversos tipos de preparados de plantas medicinais, seguindo doutrinas que vinham já de Hipócrates e Galeno.

Hahnemann opõe-se à corrente predominante ao tempo, vinda desde a Antiguidade, de que *Contraria contrarii curantur*. Tendo verificado em si próprio que a casca da quina usada no tratamento da maláriа lhe teria provocado um aumento da temperatura, considerou que os medicamentos, essencialmente extractos vegetais, capazes de provocar sintomas análogos aos da doença, se convenientemente diluídos,

deveriam curar essas enfermidades. Formulou assim o princípio de que *Similia similibus curantur*, o inverso da orientação corrente na época.

As doenças seriam provocadas por três tipos de "miasmas", designados "Psora", "Sycosis" e"Syphilis" e a terapêutica é orientada para os tratar.

Outra das leis que regem a Homeopatia é a das doses infinitesimais considerando que quanto mais diluída é uma solução maior é a sua actividade. Assim os extractos, aquosos ou alcoólicos são diluídos a 1/100 de cada vez entre 6 e 1000 ou mais vezes sucessivas e a solução fortemente agitada ("sucussão") após cada diluição, processo este a que chama potenciação. A natureza desta "potenciação" seria transmitir informação energética do extracto para o solvente durante o processo de agitação violenta a que o preparado é submetido. Os medicamentos possuiriam uma força imaterial que iria estimular o organismo e assim promover a cura.

Uma das críticas que lhe têm sido feitas deriva destas enormes diluições acabarem por administrar apenas água ao doente. Sabendo que uma molécula-grama tem o número de Avogadro $6{,}022140857*10^{23}$ de moléculas, na décima diluição, se partisse de uma molécula-grama por mililitro ficaria com $6{,}022140857x10^{23}x10^{-20}=6{,}02x10^{3}$ moléculas no mesmo volume, o que é insuficiente para induzir qualquer efeito biológico. Este argumento não é acolhido pela Homeopatia dado que é baseado na Ciência actual e não no paradigma homeopático.

Toda esta doutrina filia-se numa continuidade histórica de princípios e a alguns deles nos referiremos brevemente em seguida.

De início não se procurou conhecer a natureza das patologias ou as suas causas, até porque a Ciência ainda não existia, mas apenas tratar os sintomas. Só quando no tempo da Grécia antiga se começou a tentar ir mais longe no conhecimento é que começaram a surgir doutrinas médicas. Estas já procuravam coligir conhecimentos, articulá-los, interpretá-los e por vezes generalizá-los.

Inicialmente a Medicina e o tratamento dos doentes, seu objectivo último, estiveram muito ligadas à religião e a práticas mágicas. Surgiram na Índia os livros do Rig Veda com receitas para tratar a lepra, a tísica pulmonar, a mordedura das cobras. Destas práticas antigas resultou talvez o caduceu, mais tarde ligado a Mercúrio nos tempos gregos, e que ainda hoje se usa nas representações da Medicina e do seu mítico precursor, Asclepius.

Assim, na Antiguidade, a Filosofia, os seus princípios e a sua maneira de encarar a Vida e o Homem orientaram muito a Medicina. As grandes correntes pré-socráticas com os filósofos jónicos mais de índole materialista como Anaximandro ou Heráclito levaram ao estabelecimento dos quatro elementos fundamentais: o fogo, o ar, a água e a terra, assim como as suas qualidades: o quente, o frio, o húmido e o seco.

Uma corrente oposta, mais espiritualista, deve-se a Pitágoras de Samos que colocava o pensamento no cérebro assim como as sensações e a percepção.

No entanto, estas noções deviam-se mais à riqueza das ideias do que ao conhecimento dos factos.

As verdadeiras doutrinas médicas tiveram início nas escolas de Cortona mais de inspiração pitagórica, e nas de Cnide e de Cos, esta última personificada por Hipócrates, que, pela relevância da sua obra ficou conhecido na História como o Pai da Medicina.

Hipócrates considerava que existiam quatro humores, o sangue, a pituíta, a bílis amarela e a atrabílis ou bílis negra. A saúde resultaria de um equilíbrio entre eles, tanto na força como na quantidade. A doença, pelo contrário, acontece quando um destes princípios está em excesso ou em falta ou, por

qualquer razão, não se combina com os outros. No organismo humano existiam também quatro humores com as suas propriedades particulares e deles nasciam os quatro "temperamentos": Sanguíneo, Bilioso, Atrabiliário e Pituitoso. Do seu desequilíbrio resultam as doenças, e a arte terapêutica consiste em contrabalançar o desequilíbrio causador da doença com os medicamentos que se lhe opõem e podem restabelecer o equilíbrio normal. Considera que se é o quente ou o frio, o húmido ou o seco que prejudica o doente, deve este ser tratado com o seu contrário. Se a doença resulta de um excesso de calor igual a dois, a sua neutralização perfeita implica a administração de um medicamento com uma frialdade igual também a dois.

Hipócrates tinha uma enorme confiança na *Vis medicatrix naturae*, a força curativa da natureza, devendo o médico sobretudo auxiliá-la e apoiá-la.

Uma das suas obras mais importantes, os "Aforismas", continha máximas que se propagaram pelos séculos, tais como, entre muitas outras, *Contraria contrarii curantur*. Os medicamentos curam por se oporem às doenças.

Uma das consequências da doutrina hipocrática consistiu em tentar eliminar os designados"humores pecantes" recorrendo a sangrias, a eméticos e a purgantes drásticos. As sangrias eram sobretudo utilizadas em situações agudas ou com uma forte componente inflamatória. Os eméticos e os purgantes eram aplicados já em fases mais tardias da doença.

Hipócrates deu ainda uma particular atenção aos três elementos da arte médica: O doente, a doença e o médico, assim como às condições do seu exercício corrente, dela resultando o Juramento que todos prestamos de colocar o doente, a sua vida e os seus interesses acima de quaisquer outras considerações.

Outro dos médicos que exerceu uma influência decisiva ao longo dos tempos foi Galeno. Nasceu em Pérgamo em 133 d.C. e viveu em Roma. Pela sua dimensão e projecção ao longo dos séculos a sua obra ultrapassa os limites deste trabalho. Enquanto os seus antecessores eram clínicos como Hipócrates, ou naturalistas como Dioscórides ou Plínio, Galeno já foi clínico, anatomista, fisiologista, mas sobretudo filósofo. Uma das suas obras principais intitula-se *Quod optimus sit etiam philosophu*s e recolhe a teoria médica do tempo, critica-a, modifica-a, criando um edifício lógico que é a teoria dos temperamentos e dos graus.

Hipócrates e Galeno tinham estabelecido a constituição dos corpos em 4 elementos com as qualidades primitivas e irredutíveis de quente, frio, seco e húmido. Galeno, no âmbito do desenvolvimento de uma estrutura lógica, procura estabelecer graus destas qualidades que, reunindo-se, caracterizam ainda quinze qualidades secundárias (dureza, moleza, friabilidade, gravidade, etc.) (*De usum partium*, I Cap.9). Em cada qualidade poderiam existir quatro graus diferentes e as propriedades e virtudes de todos os corpos do universo consistem nas diferentes proporções destes graus. Assim nos ossos e nas raízes das plantas predomina a terra, o ar nos pulmões e nas flores, a água nos humores e, segundo o elemento dominante, os corpos são frios ou quentes, húmidos ou secos. O equilíbrio estável entre as diferentes propriedades é designado por "temperamento".

Só os elementos têm as propriedades de um modo absoluto. Todo o universo é relativo. Por exemplo, a criança é mais húmida do que o adulto, e este do que o ancião. Um cão é mais seco do que o homem mas mais húmido do que as abelhas ou as formigas.

A acção de um medicamento depende da sua "crase", das propriedades e graus que o compõem. Por exemplo, a camomila é quente porque evoca uma sensação de calor mas sem incómodo. As drogas quentes atenuavam, atraiam, rarefaziam e digeriam segundo o seu grau de calor. Em primeiro grau

estava a peónia, a betónica, a camomila etc., em segundo grau a genciana, a menta, a malva. Em terceiro grau a aristolóquia, o ciclâmen etc. Finalmente, em quarto grau estava o alho.

As plantas frias espessavam, adstringiam mais ou menos segundo o seu grau de frialdade. Em primeiro grau colocava o trevo, a rosa etc., em segundo grau estava a chicória, em terceiro grau incluía o meimendro e a mandrágora. O quarto grau provocava a inconsciência, tendo como exemplos a cicuta, a papoila e o ópio.

No entanto, Galeno já chama a atenção para a necessidade da observação da natureza. No seu livro "De usum partium" escreve que os seus leitores antes de se pronunciarem a favor ou contra as afirmações produzidas devem verificar as coisas com os seus próprios olhos porque a observação suplementa a descrição. Dos seus escritos depreende-se uma rara capacidade de observação aliada a um grande espírito inventivo.

Na antiguidade grega, Hipócrates apresentou a sua experiência e a recebida de outros expondo-a com simplicidade e sem reflexões filosóficas. Galeno talvez tenha feito mais observações, mas a partir de cada facto constrói uma complexa rede de raciocínios, de distinções, considerações e hipóteses, introduzindo no estudo da natureza o conceito da finalidade e do apriorismo. Galeno procurou conjugar, sistematizar e harmonizar num corpo único muitas das doutrinas médicas da Antiguidade.

Outra das autoridades na época foi Dioscórides. É considerado um dos mais importantes farmacologistas dentro dos parâmetros do seu tempo. Coevo de Plínio, sem que nenhum deles se refira alguma vez ao outro, foi autor de cinco livros de Medicina, repositório do conhecimento das plantas medicinais então utilizadas, assim como dos animais e minerais que considerava terem virtudes terapêuticas. Escreveu em grego intitulando a obra *"περι της υλιχης ιατριχης βιβλια"* a qual constituiu o alicerce da Medicina durante 1500 anos. Galeno considerava-o o melhor autor nesta matéria, embora se possa dizer, pese embora a simplicidade do estilo, que o texto está eivado de termos bárbaros. A obra de Dioscórides é um longo catálogo de medicamentos, cerca de 600, embora em muitos casos a descrição e a nomenclatura dificultem a sua identificação. Outro dos autores foi Scribonio Largo. Viveu no tempo do Imperador Cláudio. Crê-se que era cristão e tinha uma enorme admiração pelos medicamentos. O seu receituário cobre as enfermidades de todo o corpo recolhendo as fórmulas independentemente da sua proveniência.

Oribásio que viveu no século III d.C. foi outro dos autores que tratou das plantas medicinais escrevendo um grande número de receitas. Refere no prefácio da sua obra elaborada no tempo de Juliano *O Apóstata*, e por sua ordem, que se reuniram médicos de todas as regiões com a incumbência de compilar num único livro todos os ensinamentos úteis da Antiguidade. Formou-se assim uma enciclopédia com 70 livros. Os 11, 12 e 13 tratam das plantas medicinais e dos métodos terapêuticos como ventosas, escarificações, eméticos, purgantes, diaforéticos, diuréticos. Nos livros 14 e 15 classifica os fármacos pelas suas propriedades em 25 grupos.

Os médicos árabes exerceram também uma profunda influência na Antiguidade. Um dos mais importantes foi Razes ou Razis, abreviatura de Abu Baker Muhammad ben Zakarîyâ al Râzi, que por alguns autores foi considerado o Hipócrates dos árabes. Foi o primeiro dos árabes a descrever as virtudes terapêuticas do âmbar cinzento cuja origem foi controversa durante muitos anos.

Outro dos médicos árabes célebres foi Abu-Alj-el-Hosein ou Ibn Sina que ficou conhecido no Ocidente por Avicena. Nasceu num subúrbio de Bokara em 985. Desde muito cedo praticou a Medicina. Deixou uma obra imensa que constituiu a base do ensino médico até ao século XVIII. Como todas as obras

medievais consiste muito mais numa compilação do que numa inovação, apesar de manifestar já uma certa independência em relação aos autores predominantes na época. A parte dos seus escritos ligada aos medicamentos insere-se no seu sistema filosófico, procurando nos seus antecessores como Galeno e num enquadramento teórico segundo um esquema lógico, a explicação para os efeitos observados e para as indicações terapêuticas. A sua obra principal intitulada *Kanoun – Fil Thebb* ficou conhecida pelo Cânone.

Esta multiplicidade de propriedades levou até ao século XVIII a discussões intermináveis e tanto mais difíceis quanto mais complexos eram os medicamentos, por vezes associações de numerosas plantas e de partes animais como sucedia com as teriagas que continham também cabeças de víbora.

Desta orientação geral subsistiu até aos nossos dias o princípio do *Contraria contrariis curantur*.

Convém ainda referir neste breve resumo da história do uso das plantas medicinais o papel dos portugueses na época dos descobrimentos e a obra notável de Garcia de Orta *Simplices e Drogas da India* assim como as de outros como Tomé Pires.

Também, no tempo do Renascimento, as opiniões de Aureolus Philipus Theophrastus Bombastus von Hohenheim, que ficou na História com o nome de Paracelso se insurgiram contra a polifarmácia medieval, referindo que o importante era extrair os princípios activos das plantas e não misturá-las: *Nicht componieren sodern extrahieren, herausziehen*. Como sinal desta revolta queimou na praça pública os livros de Avicena e dos autores árabes que eram usados no ensino médico.

Voltando à Homeopatia, esta forma de tratar doentes e os seus aplicadores professam opiniões que actualmente se encontram algo difundidas, recusando o paradigma da Ciência com a sua base experimental, o seu método de trabalho justificado pelo enorme avanço que trouxe aos conhecimentos, a sua lógica interna e a permanente tentativa de "falsificar" os resultados na terminologia de Popper, de demonstrar que determinados dados são falsos por não descreverem a realidade com o necessário rigor ou não permitirem a generalização para situações análogas. A Homeopatia coloca-se num paradigma diferente, recusando o mecanicismo das relações causa-efeito e aproximando-se mais da noética (consciência) da "cosmologia", considerando a matéria e a energia como formas de "experienciação" onde o determinismo newtoniano não existe mas em que a consciência dá forma ao Universo.

A Homeopatia procura assim não só tratar os doentes com diluições de extractos vegetais ou animais, mas sobretudo conseguir uma abordagem holística do doente, personalizando ao máximo o tratamento. Embora seguindo esta orientação possa haver casos em que haja algum sucesso, também se torna dificilmente generalizável e, portanto, praticamente impossibilitando a comparação de casos individuais com outros ou com metodologias diferentes.

As publicações que têm surgido sobre a Homeopatia são bastante numerosas. Frequentemente referem-se a casos isolados, raramente tendo uma análise estatística que permita aquilatar do rigor ou até mesmo validar uma generalização das observações. Uma das mais curiosas deve-se a um investigador francês Benveniste que, em 1988, enviou um trabalho para a revista *Nature* trazendo resultados segundo os quais a água manteria em memória informação sobre as moléculas nela dissolvidas mesmo após diluições de 10^{-120}.

A *Nature* publicou o artigo (Davenas, E., Nature-333:816-818 (1988) – 30 June) com uma nota do editor com reservas e sugerindo a repetição das experiências em ambiente controlado. Os resultados não foram concludentes o que gerou uma enorme e prolongada controvérsia durante a qual foi dito que a "memória da água" se poderia transmitir pelo telefone e até mesmo pela internet. No entanto, no final,

já em 2008, acabou por se concluir que os resultados não eram replicáveis, uma das características importantes da investigação científica.

Mais recentemente, Edzard Ernst (Brit. J. Clin. Pharmacology, 54 (6):577-582), assim como o National Health and Medical Research Council da Austrália em 2013 (Effectiveness of Homeopathy for Clinical Conditions: Evaluation of the Evidence), este último baseado em 57 publicações entre 1997 e 2011 referentes a 68 situações clínicas apresentadas por alguns milhares de doentes, referem que não foi possível demonstrar a eficácia da terapêutica homeopática.

A terapêutica medicamentosa actual parte da definição de Fármaco como um composto com uma composição química definida, capaz de modificar o funcionamento de células, de órgãos ou do organismo por diversos mecanismos. Implica assim uma composição e uma quantificação do fármaco ou de um candidato a possível medicamento, o que não é possível com extractos vegetais ou animais. Acresce ainda que o teor de princípios activos das plantas não é constante, variando com a idade, a época do ano, o clima e o solo onde ela se encontra. Para as enormes diluições usadas na Homeopatia este facto não é relevante.

Qualquer potencial medicamento passa por uma série de estudos e ensaios para demonstrar a sua inocuidade, a sua eficácia e a sua segurança quando utilizado em seres humanos. Assim, para além de ser necessário demonstrar a sua pureza e não contaminação com moléculas intermédias provenientes da sua síntese ou de solventes que tenham sido usados no seu isolamento e purificação, a substância passa por um conjunto de estudos em células isoladas e em animais de experiência antes de poder ser administrada a seres humanos.

A investigação final de um potencial novo medicamento decorre em humanos. Procura obter dados rigorosos, analisáveis estatisticamente, não enviesados e isentos de efeitos subjectivos, quer originados no próprio doente, quer inconscientemente provocados pelos médicos e outro pessoal de saúde intervenientes no estudo e em contacto com o doente.

Os ensaios clínicos alicerçam-se em três pilares fundamentais. O primeiro destes pilares consiste na distribuição aleatória dos doentes pelos diferentes grupos em estudo, com uma randomização previamente estabelecida de modo a assegurar uma homogeneidade de composição entre os diferentes grupos e, deste modo, diminuir a influência da variação individual nas respostas.

O segundo pilar depende da comparação do medicamento em estudo com um placebo, ambos administrados sob formas idênticas e indistinguíveis. O placebo, por definição, é um composto inactivo. Os efeitos do placebo resultam directamente da interacção médico-doente e do significado que o tratamento assume para o paciente. É todo um envolvimento psicológico que influencia o estado mental do doente, sendo, por isso, diferente de pessoa para pessoa e mesmo ao longo do tempo. Nem sempre pode ser usado por razões éticas, por exemplo em situações em que a doença é seguramente mortal como o cancro, em que o termo de comparação não deve ser um placebo mas um medicamento de referência já bem conhecido e correntemente usado.

Com esta comparação com o placebo procura-se averiguar a real eficácia e segurança do medicamento em estudo, evitando simultaneamente efeitos subjectivos do doente se sentir tratado, e também averiguar se alguns dos efeitos acessórios anómalos podem ser atribuídos ao medicamento em estudo.

O terceiro pilar consiste num delineamento experimental chamado duplamente cego, em que nem o doente nem o médico que o acompanha sabem se a forma farmacêutica administrada contém o medicamento em estudo ou o placebo, ou qualquer outro composto usado com termo de comparação.

Procura-se deste modo evitar qualquer influência subjectiva que a atitude do médico possa exercer sobre o doente e a evolução do caso clínico.

Só no final do ensaio são analisados os resultados com toda a isenção procurando determinar não só as eventuais vantagens do novo composto como também avaliar os possíveis efeitos indesejáveis que tenham aparecido.

Os ensaios clínicos desenvolvem-se em quatro fases, cada uma delas permitindo rejeitar a substância em estudo.

Na Fase I, o composto é administrado a indivíduos sãos, primeiro em doses baixas, em seguida em doses próximas das que se espera vir a utilizar nos doentes. Para além de uma observação estreitamente controlada, os voluntários sujeitam-se a uma série de exames, laboratoriais e outros para verificar se não surgem sintomas inesperados ou que se possam atribuir a uma toxicidade da substância.

Na Fase II, ultrapassada a barreira eliminatória da Fase I, o composto já é administrado a grupos reduzidos de doentes, tão homogéneos quanto possível, e também estreitamente monitorizados.

Na Fase III alarga-se o âmbito da investigação aumentando o número de doentes, muitas vezes associando vários grupos de investigadores e de instituições em ensaios designados multicêntricos, sempre seguindo um protocolo de administração comum, de modo aos resultados poderem ser comparáveis e eventualmente analisados em conjunto.

A Fase IV que se inicia com a venda ao público do medicamento, é designada como Farmacovigilância. Com a generalização do uso do composto podem eventualmente surgir efeitos adversos que não se tenham manifestado nos grupos mais pequenos de doentes estudados nas fases anteriores.

Todos estes estudos duram cerca de 10 anos e com eles se pretende não só aumentar a probabilidade de encontrar um medicamento eficaz para a patologia em causa, como sobretudo minimizar o risco de surgirem efeitos adversos que possam pôr em rico a vida dos doentes.

Existem essencialmente dois tipos de terapêutica, uma dirigida directamente às causas da doença, a chamada terapêutica etiológica, outra designada sintomática que visa apenas corrigir os sintomas.

A primeira é sempre preferível quando se conhecem as causas da patologia porque levam directamente à cura do doente, enquanto o tratamento sintomático serve apenas para aliviar as queixas não modificando o curso natural da doença. Naturalmente durante quase toda a história da humanidade os tratamentos foram apenas sintomáticos dado que os conhecimentos da Fisiologia, da Bioquímica, da Anatomia Patológica, da Genética, da Microbiologia só começaram a surgir na segunda metade do Século XIX.

Mantendo-se actualmente uma prática inalterada desde há perto de duzentos anos, a Homeopatia por um lado ignora tudo o que a evolução da Ciência trouxe ao tratamento dos doentes, por outro só pode tentar oferecer um tratamento sintomático, resultante da esperança do doente na eficácia do preparado, esperando que a *Vis medicatrix naturae* o cure, deste modo atrasando eventualmente o diagnóstico e a aplicação de uma terapêutica etiológica ou eficaz.

Assim, o paradigma fundamental da Medicina actual, também conhecida por Alopática, é incompatível com o da Medicina Homeopática. Esta incompatibilidade não permite afirmar inequivocamente uma qualquer vantagem da Medicina Homeopática sobre a Medicina Alopática correntemente seguida.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 19 de julho de 2018)

Latino Coelho: releitura de um texto científico

Luís Aires-Barros

RESUMO

Latino Coelho (1825-1891) foi uma personagem notável das últimas décadas do século XIX. A sua actividade intelectual e profissional repartiu-se por diversos campos de actividade: de mineralogista, a matemático, engenheiro, militar, historiador, filósofo, político, académico e lente da Escola Politécnica de Lisboa.

Da sua actividade de professor universitário deixou-nos um "Compêndio de Mineralogia" que se tornou um livro clássico.

Tem particular interesse, inclusivamente para a História das Ciências no nosso país, fazer uma releitura da sua introdução.

Latino Coelho analisa os conceitos fundamentais da geologia (s.l.), ou seja os termos rocha, mineral e cristal. Isto permite-lhe abordar as mais modernas concepções vigentes na Ciência europeia sobre tais conceitos, em especial os de cristal e matéria cristalina.

Avizinhavam-se descobertas fundamentais como a dos raios-x, a da difração dos raios x pela matéria cristalina, a interpretação geométrica deste fenómeno e a dedução da conhecida fórmula de Bragg.

Por outro lado, os cristalógrafos debatiam-se com o conhecimento da estrutura íntima dos cristais, qual o significado profundo da poliedria dos cristais *versus* o conhecimento desta estrutura. Acabara-se de deduzir os 230 grupos espaciais, quase simultaneamente por Federof (1890), Schöflies (1891) e Barlow (1894).

Latino Coelho discorreu sobre a formulação dos conceitos básicos da cristalografia e da mineralogia aproximando-se de modo notável da visão que se veio a desenvolver principalmente após os estudos de von Laue (Prémio Nobel em 1912) sobre a estrutura reticular da matéria cristalina.

Apresenta-se uma releitura do seu texto de introdução ao *Compêndio de Mineralogia* na perspectiva de alguém que esteve próximo das novas ideias que se vieram a impor com o advento da Cristalografia estrutural, (a Radiocristalografia, a Física do Estado Sólido) e a nova visão do que é um cristal, porção homogénea de matéria cristalina, não dependendo da poliedria que tais cristais possam ou não evidenciar.

ABSTRACT

Latino Coelho (1825-1891) was a very interesting personality since mineralogist, mathematic, general, politician, academician and professor at Polytechnic School of Lisboa.

In 1892 he published a very interesting book – *Compêndio de Minerologia* – when the more recent scientific advances in Crystallography are presented and discussed.

It should be emphasized that it was discussed the meaning of polyedric crystal in the definition of a crystal.

The concept of crystalline state was in discussion. The orderly arrangements underling the well--formed crystal was in discussions. The problem of the existence of same degree of crystallinity in many minerals not existing in well-formed single crystals was also under discussions.

After close studies of all the properties of crystals, one large groups of mineralogists point out that it was not necessary the external shape as an aid to identification of minerals. A fragment of such a crystal, bounded externally only by irregular fractures, still possesses the same internal structure.

Here is the problem: what internal structure, how many structures are there?

Latino Coelho admits, as large number of mineralogist at that time, a crystal was a solid body, homogeneous bounded by natural flat faces.

The ideas of Goth (1843-1927) are accepted but only partially.

In that time mineralogist discuss Haüy´s conceptions and Bravais fourteen lattices and even the 230 different space groups defined by Federof, Schöflies and Barlow.

We present in this paper the point of view of a man that refer the crystalline state before the discovery in 1912, of the diffraction of x-rays by crystals by von Laue.

It was the time of transition of a geometric crystallography dealing with the external shape of crystal to a structural crystallography dealing with the description and the determination of the internal geometry of structure and also the structural arrangement of the atoms (ions) and of bonds between these particles.

In this paper is presented an overall view of the studies made by a scientist in transitional time between XIX and XX centuries.

Júlio Dantas no prefácio ao livro de Latino Coelho *Fernão de Magalhães* diz deste último:

"Latino leu tudo, conheceu tudo, estudou tudo, assimilou tudo, e soube arrancar a tudo aquilo que leu, que conheceu, que assimilou, que estudou, – a espuma, a flor, a scintilação, a graça. Geólogo, mineralogista, matemático, engenheiro, historiador, crítico, filólogo, homem de gabinete e homem de Estado, – tinha a mesma elegância, a mesma dextreza, o mesmo brilho incomparável de frase, classificando um minério ou fazendo um discurso político, interpretando um texto grego ou descrevendo uma fortificação de Vauban."

Latino Coelho é autor de um *Compêndio de Mineralogia* editado em 1892 que, ainda hoje, é um bom texto de cristalografia morfológica.

Trata-se de uma obra cuidadosamente bem escrita, profusamente ilustrada quanto a representações das formas cristalográficas, fácil e agradável de ler.

É um texto preparado para o seu curso da Escola Politécnica onde foi lente.

Normalmente o nome de Latino Coelho surge, ao comum das gentes, como um escritor, tradutor de obras clássicas (v.g. *A Oração da Coroa de Demóstenes*), jornalista e político. Com efeito além de polígrafo, que deixou a sua colaboração em jornais e em numerosos livros, foi deputado e ministro da Marinha, de Julho de 1868 a Agosto de 1869, num Ministério presidido por Sá da Bandeira.

Em 1885 Latino Coelho foi eleito par do reino em representação das corporações científicas. Já próximo da morte, em 1890 é eleito para a Câmara dos Pares como deputado republicano pelo círculo de Lisboa.

Esta é uma síntese do percurso curricular mais conhecido de Latino Coelho. Todavia paralelamente teve uma carreira militar tendo frequentado o Colégio Militar e a Escola do Exército. Foi engenheiro militar e a sua carreira alongou-se de 1848 (como alferes) a general de brigada em 1888. Foram quarenta anos. Desta carreira deixou-nos bibliografia importante como a *História política e militar de Portugal, desde os fins do século XVIII até 1834* em 3 volumes publicados entre 1874 e 1891.

Desde cedo e como cultor da mineralogia e da cristalografia me impressionou a versatilidade deste homem que tanto discorria sobre sistemas cristalográficos, como traçava o perfil de homens de ciência como José Bonifácio de Andrade e Silva ou de Alexandre de Humboldt, como se dedicava a evocar figuras ilustres da nossa História e Literatura como Camões, Vasco da Gama, Fernão de Magalhães, Garrett e Castilho.

Na Academia de Ciências de Lisboa deparo com um volumoso processo da sua vivência onde se salienta a sua enorme e prolixa actividade.

Com efeito foi sócio efectivo desta então Academia Real das Ciências de Lisboa e seu secretário-geral perpétuo.

Foi ainda lente da Escola Politécnica de Lisboa a que acedeu em 1851 após concurso brilhantíssimo.

Acresce que toda a sua carreira académica foi percorrida com grande notoriedade. Desde o Colégio Militar, onde foi o melhor aluno do seu curso à Escola do Exército onde foi aluno laureado, ganhando vários prémios, até atingir o posto de general de brigada em 1888. É lente da Escola Politécnica em 1851 e é eleito sócio efectivo da Academia Real das Ciências de Lisboa em 1855, sendo eleito seu Secretário em 1856.

Esta personalidade multímoda impressionou-me e debrucei-me um pouco mais sobre o seu percurso académico, principalmente como professor da Escola Politécnica de Lisboa.

Quando compulsamos o seu *Compêndio de Mineralogia* ficamos surpresos por dois factos: em primeiro lugar o seu texto a que dá o subtítulo de "Morphologia mineral" é de uma clareza meridiana e amplamente ilustrado evidenciando bem que a cristalografia morfológica, como uma verdadeira geometria angular, supõe que sejam devidamente ilustradas não só as formas cristalinas, como toda a panóplia de meios instrumentais goniométricos; em segundo lugar uma interessantíssima Introdução de 39 páginas que passo a comentar. Nestas páginas está plasmado muito do pensamento científico e cultural de Latino Coelho.

Esta introdução dá-nos uma panorâmica das ideias do autor, com base nos conhecimentos da época, destilados pelas suas reflexões sobre conceitos fundamentais como cristal, mineral e rocha que são os corpos básicos das Ciências da Terra. Seguem-se considerações sobre "analogias e differencas entre minerais e os corpos organizados". Em todas as suas considerações cita os autores mais proeminentes da época como Mohs, Zirkel, Tschermack, Naumann, von Kobell, Breithaupt, Groth, entre outros.

Encerra as suas considerações dissertando sobre "mineraes crystallisados e crystalinos" e sobre "minerais amorphos" tocando em pontos fundamentais da essência do denominado reino mineral.

Aprofundemos um pouco mais a análise desta Introdução em que Latino Coelho disserta num estilo seco e ático totalmente diferente do estilo que nos apresenta mesmo quando descreve a vida de Alexandre de Humboldt.

Agora Latino Coelho não procura um assunto para o revestir com um estilo grandiloquente e prolixo ("Latino não procurava um estilo para os seus assuntos – mas procurava assuntos para o seu estilo").

Usa equilibradamente o estilo ático. É que o homem servindo a Ciência é comedido, a despeito da sua enorme admiração pela Natureza!

Começa por definir justamente que "todas as massas inorgânicas, quando consideradas como partes componentes da crusta do globo, tem o nome de rochas". (op. cit. p. 3)

Passa, em seguida, a cingir o conceito de mineral dizendo que "um mineral é (…) um corpo cuja produção é devida exclusivamente à acção das energias da natureza sem a máxima participação da indústria humana". Esta definição é original e potencialmente explorável. Para já como considerar um cálculo renal cuja diagnose por difração dos raios X nos identifica como apatite (um clorofluor fosfato de cálcio produzido por um ser vivo como o Homem)? Aliás esta discussão sobre a latitude do conceito de mineral ainda é actual.

Latino Coelho afirma perentoriamente (op. cit. p. 4) que, "reserva-se especialmente o nome de Mineral para os corpos, que desde os princípios da sua existência foram produzidos naturalmente pelas forças chimicas e physicas sem nenhuma participação de fenómenos vitaes".

Vejamos como hoje definimos mineral: corpo natural, inorgânico, com estrutura cristalina definida e com composição química mais ou menos bem definida, mas variando entre limites rigorosamente bem definidos.

Esta definição exige quatro valências: corpo natural e inorgânico, tal como Latino Coelho afirma. As outras duas valências escapam ao nosso autor. A exigência de estrutura cristalina específica para cada espécie mineral decorre do conhecimento da estrutura intíma, última, do reticulado, esqueleto que suporta os iões constituintes químicos do mineral.

Mas Latino Coelho pressente algo de importante no conceito de mineral, pois diz que este "…quando no seu estado de pureza é homogéneo ou sempre dotado das mesmas propriedades químicas" (op. cit. p. 5 e 6). Cita como exemplo o quartzo hialino.

Latino Coelho a dada altura afirma (op. cit. p. 8): "Nos corpos chamados inorgânicos observam-se phenomenos que revelam nelles uma espécie de vida própria, uma estrutura particular, que se pode considerar como um primeiro grao de organização". É-o de facto: é a sua estrutura cristalina decorrente do arranjo recticular específico de cada mineral.

Quanto à quarta valência, a composição química, se nos cingirmos aos minerais mais simples, elementos nativos ou mesmo óxidos como o quartzo diremos com Latino Coelho "se observa um exemplar puro (…) formado por um só corpo homogénico sem mistura ou composição de corpo estranho" (op. cit. p. 6).

É notória a aproximação aos termos actuais do conceito de mineral. Falta-lhe o conhecimento das séries minerais isomórficas, bem como do fenómeno da diadoquia.

Todavia, Latino Coelho vai-se aproximando delas com as armas de que dispõe.

Assim escreveu: "…é frequente depararem-se (…) exemplares de crystal de rocha, e de outros minerais, em cujo interior se observam pequenas porções de outras substâncias, as quaes interrompem realmente o espaço ocupado pelo mineral predominante e para fazerem exepção à sua homogeneidade.

Tem de se discutir agora o conceito de homogeneidade.

Nas palavras de Latino Coelho, é um corpo "homogéneo ou sempre dotado das mesmas propriedades chimicas e physicas" (op. cit. p. 6).

Acresce ainda que Latino Coelho usa o conceito de estrutura na seguinte afirmação. "Nos corpos chamados inorgânicos observam-se fenómenos, que revelam neles uma espécie de vida própria, uma estrutura particular, que se pode considerar como um primeiro grao de organização" (op. cit. p. 8).

Convirá aprofundar as ideias de Latino Coelho sobre estrutura. Elas aparecem, de novo, quando trata do conceito de "crystal" que define como "o mineral, que reveste naturalmente uma forma polyédrica mais ou menos regular e subordinada a leis geométricas" (op. cit. p. 19).

E prossegue: "A forma exterior de crystal corresponde sempre a que pode appelidar-se a sua forma interior ou a sua estrutura (…)" (op. cit. p. 19). E continua a expor as suas ideias dizendo: "Pela íntima connexão, em que sempre se manifesta com a forma exterior do mineral, demonstra claramente que no íntimo de cada crystal as suas partículas componentes, as suas moléculas, se não dispõem de um modo acidental, antes se agregam e associam harmonicamente e segundo certos planos determinados, e que a forma externa do crystal é uma necessária consequência do seu arranjo molecular" (op. cit. p. 20). E vai continuando: "A forma geométrica do crystal não é mais do que a manifestação externa da sua forma interior, do seu tecido íntimo, da sua estrutura (op. cit. p. 20). E conclui: "o estado particular de um corpo sólido, cujas moléculas na sua disposição satisfazem a estas condições, é a cristalização" (op. cit. p. 20).

Atentemos como de forma lapidar e muito objectiva Latino Coelho define cristal, chega ao conceito importante de estrutura que define, acolhe a ideia primordial de estrutura cristalina como a de um edifício reticular ordenado (na linguagem de hoje) e caracteriza sólido como um corpo cristalizado, tal como hoje se considera.

Mas o parágrafo mais importante do texto que estamos a seguir e que é perfeitamente actual é o que se transcreve:

"*Do arranjo regular e harmonico das moléculas, de que depende a estrutura e por conseguinte a própria existência do crystal, é necessária consequência uma propriedade fundamental, que o distingue essencialmente dos corpos não crystallisados. Por isso que as meleculas estão n'elle dispostas regularmente em certas direcções determinadas, n'estas deve ser egual a distancia, que separa duas moléculas vizinhas, em quanto que n'outras direcções não pode subsistir esta egualdade. As attracções mutuamente exercidas pelas moléculas serão, pois, diversas, segunda a desigualdade nas distancias moleculares, isto é, segundo actuam em certas direcções, ou em outras, que com ellas se intersectem*." (op. cit. pp. 20 e 21).

Igualmente relevante é o que se segue:

"*A Elasticidade do crystal, ou a resistencia, que as suas meleculas opõem á separação, e o esforço, com que tendem a occupar as suas primitivas posições de equilibrio, quando por uma acção externa deslocadas, sendo dependente das attracções e também por conseguinte das distancias moleculares, deve no crystal ser egual em umas direcções e differente em outras. Os processos experimentaes confirmam plenamente estas previsões da theoria. O crystal é pois um solido, em que a elesticidade é variável com as direcções. Todas as propriedades physicas do crystal estão conexas intimamente com a Elasticidade, e como esta nos crystaes, ao contrario do que sucede nos corpos não crystallisados, é egual em todas as direcções paralelas, d'hai tiram fundamento alguns mineralogistas, e entre eles especialmente o professor Groth, para definir o crystal como um corpo solido, em que a elasticidade é egual em todas*

as direcções parallelas, e differente nas que mutuamente se intersectam. Groth, exaggerando além do que é plausível a importância, aliás incontestavel d'esta propriedade fundamental, professa ser n'ella exclusivamente que reside a essência do crystal, que a forma exterior é accessoria, e que nas suas relações physicas o crystal continua a subsistir, quando a sua figura é alterada de qualquer modo, por exemplo, quando o crystal pela fractura, ou pela maneira de o talhar adquiriu diversa forma" (op. cit. p. 21).

Já oportunamente referimos que Latino Coelho estava bem informado do que se passava no meio científico europeu, em especial no meio científico alemão, sendo amplas as citações que nesta Introdução faz dos cientistas germânicos.

Aliás na citação acabada de transcrever refere Groth, mineralogista notável do século XIX. É curioso como Groth não só mais ousado mas perspicaz ao levar às últimas consequências a importância da estrutura cristalina a desfavor da morfologia dá um passo além daquele que Latino Coelho dá. Para este o conceito de cristal supõe morfologia mais ou menos perfeita e forma geométrica percetível nas suas dimensões. Para Groth, o cristal existe independentemente da forma geométrica, dependendo apenas de ser matéria cristalina, logo organizada.

Recordemos que o livro de Latino Coelho é de 1892. Estamos em plena "corrida" para o estabelecimento da teoria das estruturas cristalinas que alargou o âmbito do conceito de cristal.

Os cientistas dos finais do século XIX, que elaboraram a teoria das estruturas da matéria cristalina, afirmaram, por deduções teóricas, que as associações possíveis dos operadores de simetria que desenham, no espaço, a disposição dos átomos que vestem as estruturas cristalinas são em número de 230. São os chamados grupos espaciais. Por meio deles, ou seja, a partir da posição de um dado átomo ou ião, em dada estrutura, podemos saber onde estão todos os restantes átomos ou iões homólogos no espaço cristalino.

Só em 1910, von Laue e colaboradores ao tentarem descobrir a natureza dessas, então, misteriosas radiações que Röntgen apelidara de raios-X, provaram que a teoria das estruturas cristalinas deduzidas quase que simultaneamente pelo russo Federof em 1890, pelo alemão Schönflies em 1891 e pelo inglês Barlow em 1894 era verdadeira. Na realidade foi com a descoberta do fenómeno da difracção dos raios-X pela matéria cristalina que valeu o prémio Nobel a von Laue, que se provou a veracidade da teoria das estruturas e que a Física do estado sólido se desenvolveu explosivamente.

Citámos dois nomes eminentes de cientistas. Ambos prémios Nobel: Röntgen pela descoberta em 1897 dos raios-x, von Laue pela descoberta do fenómeno da difracção dos raios-x pela matéria cristalina, em 1912. No entanto foi preciso esperar doze anos, para que em 1924 os Bragg, pai e filho, formulassem a explicação geométrica e estrutural do fenómeno da difracção dos raios-X pelas estruturas cristalinas, admitindo uma série de reflexões selectivas nos planos reticulares dos cristais. Esta formulação, conhecida por lei de Bragg, valeu aos seus autores o prémio Nobel em 1924.

Voltando ao texto de Latino Coelho verificamos como ele se mantem a par da evolução dos conceitos de mineral e de cristal, do final do século XIX.

Havia uma dicotomia que alinhava os defensores do valor especial da morfologia da espécie mineral sustentada pela individualidade cristalina a par daqueles que procuraram libertar-se da cintura da morfologia exterior considerando-a não essencial, e não necessária à definição de cristal.

Latino Coelho opina a desfavor de Groth em termos muito interessantes que cito:

"Ainda que o definir o crystal simplesmente pelas relações seja rigorosamente verdadeiro, no que diz respeito às suas propriedades physicas, é manifestamente incompleto, porque abstrae da forma particular, que determina a individualidade. A definição de Groth, sendo exacta, quando empregada na Physica, não pode todavia admitir-se sem nenhuma correcção ou aditamento, quando o crystal se considere nas relações histórico-naturaes como individuo. São por isso muito judiciosos os reparos, que lhe oppõe o professor Zirkel, da Universidade de Leipzig, ao sustentar que a forma externa é um elemento indispensável na determinação da ideia de crystal".

Foi a ampliação do conceito de cristal a uma porção homogénea de matéria cristalina e a consideração que esta é a matéria que possui propriedades vectoriais descontínuas tais como coesão que supõe a clivagem, a velocidade de crescimento das faces cristalinas, as geminações, os escorregamentos cristalinos e a difracção dos raios-X pela matéria cristalina.

O conceito de estrutura que Latino Coelho acolhe e usa torna-se essencial neste avanço da ciência dos cristais.

Considera-se uma estrutura um conjunto de relações entre elementos cuja identidade e a própria natureza são até certo ponto indiferentes pelo que podem ser trocados ou substituídos por outros elementos análogos ou diferentes, sem que a estrutura seja alterada ou sem que o conjunto de relações pré-consideradas sofra rotura com o consequente desmoronamento do edifício estrutural.

Tomemos alguns exemplos extremamente cómodos, simples e fecundos na sua exploração.

Um é-nos dado pela classificação periódica dos elementos químicos enunciada por Mendeleev. Este cientista ao elaborar esta classificação deixou posições vagas em função da periodicidade que subjaz à sua formulação ou seja, de acordo com o quadro estrutural imaginado.

Muito posteriormente vieram a ser descobertos elementos químicos que foram ocupar as posições vagas. Trata-se de uma das mais brilhantes especulações científicas que se revelou plena de realidade nas suas aplicações concretas.

Outro exemplo de idêntica fecundidade diz respeito à teoria das estruturas da matéria cristalina.

Deve-se a Haüy, no início do século XIX, a formulação da lei fundamental da Cristalografia. É mais uma lei dos pequenos números, mostrando que a Natureza foge da complexidade.

A lei de Haüy diz-nos quais os paralelepípedos elementares (as malhas) que suportam as formas cristalinas que a Natureza nos oferece. A Cristalografia é uma geometria angular, e pelo jogo dos elementos de simetria que caracterizam as sete malhas simples podemos deduzir as trinta e duas classes de simetria. Aqui temos como o jogo dos elementos definidores das estruturas compatíveis com a lei de Haüy determina o número de formas simples poliédricas que a Natureza sabe e pode fazer.

A dedução das trinta e duas classes de simetria que se pode fazer quer por via geométrica, associando os elementos de simetria compatíveis com a lei de Haüy, ou por via analítica, é um exemplo paradigmático das potencialidades do conceito de estrutura atrás definido. Inclusivamente evidencia um facto notável: a Natureza apenas conhece, na matéria cristalina, certos eixos de simetria, com determinados graus. São operadores que realizam operações de simetria de acordo com o seu grau. Ora o Homem é capaz de gerar poliedros artificialmente, na madeira, com o vidro ou com o plástico que a Natureza não pode. E não pode porque a caracterologia da estrutura se romperia. É o caso dos eixos de simetria quinária ou de grau superior a 6. A matéria cristalina não os admite, seja ele um belo cristal natural ou obtido artificialmente em um laboratório.

De qualquer modo, as ideias de Latino Coelho sobre os conceitos de mineral e de cristal estavam em consonância com uma das linhas de pensamento dos mineralogistas que davam larga enfase à individualização morfológica, poliédrica, do cristal. Foi a libertação do colete da poliedria que permitiu, compreendendo a riqueza das propriedades vectoriais descontínuas, definidoras da matéria cristalina, não só alargar o conceito de cristal como, com o suporte da ferramenta de compreensão do fenómeno da difracção dos raios-X pela matéria cristalina, lançar a cristalografia estrutural, a física do estado sólido e todo um ramo do saber essencial á Ciência e Tecnologia modernas.

Todavia, ainda em homenagem a Latino Coelho apresento, nas suas palavras e aqui num estilo tipicamente ático e adequado, as suas ideias sobre "condições essenciais no crystal" (op. cit. p. 22).

Vejamos a sua definição de crystal.

"Chrystal é todo o mineral solido e homogéneo, que no seu estado natural se apresenta limitado por uma forma poliédrica, que lhe é essencial e originária e está intimamente conexa com a disposição e arranjo regulares das suas moléculas e no qual em direcções paralelas é igual, em direcções não paralelas differente a elasticidade" (op. cit. p. 24).

É uma definição muito rigorosa, ao tempo marcada apenas pela cintura mental da poliedria tida como necessária.

A consideração do conceito de matéria cristalina não a limitando a poliedria macroscópica conduz-se à visão actual do conceito de cristal como porção homogénea desta matéria cristalina. Excluímos assim o conceito da poliedria, tendo-se apenas em consideração as propriedades intrínsecas da matéria cristalina considerada (cristal). Ganha aqui grande ênfase a questão da homogeneidade da matéria à escala atómica suportada pelos edifícios reticulares (estruturas) de acordo com os operadores (elementos de simetria) que a Natureza conhece. Quando falamos em homogeneidade, referimo-nos à homogeneidade verdadeira. Deste modo uma massa é homogénea se, com os meios de observação disponíveis, não distinguimos, na sua extensão, dois pontos que tenham propriedades diferentes. A homogeneidade é verdadeira quando todas as propriedades são definidas em qualquer ponto dessa massa por vectores equipolentes. Estamos a considerar um conceito de homogeneidade a uma escala superior à escala atómica. Não se trata da homogeneidade estatística.

No entanto, Latino Coelho tem passagens do seu texto introdutório ao "Compêndio de Cristalografia" de grande actualidade. Vejamos: *"Do que se acaba de dizer infere-se a divisão dos mineraes quanto à sua individualidade e agregação em dois estados ou categorias. Quando os indivíduos são não somente perceptiveis, mas também distinctos entre si e determináveis quanto à forma geométrica, o mineral diz-se crystallisado. Quando pelo contrario os indivíduos associados entre si em grande numero e em mui resumidas dimensões, estão consideravelmente deformados, mas deixam ainda aparecer* à *vista desarmada ou ao microscopio a sua existência, sem que mostrem claramente determinadas as suas formas geométricas, o mineral chama-se apenas crystallino. Um exemplar de Calcite ou de Siderite com a forma de rhomboedro ou uma associação de muitas d'estas formas variamente reunidas entre si, mas ainda facilmente determináveis, é um mineral crystallisado. A Calcite granular, o Gesso fibroso, o Quartzo na variedade chamada Silex, são apenas mineraes crystallinos. No mineral crystallisado manifesta-se ao mesmo passo a forma exterior e a estrutura. No mineral crystallino a forma aparece mais ou menos profundamente alterada, mas conserva-se a estrutura, ou este arranjo regular e harmonico das moléculas, que é o caracter essencial da crystallisação"*. (op. cit. Pp. 28 e 29).

E prossegue com uma das descrições mais conseguidas do seu texto.

"Posto que a lei geral nos corpos mineraes seja a crystallisação, assim como nos organizados é a vida, existem comtudo mineraes, que não oferecem o menor vestígio d'este arranjo e disposição harmónica e regular, em que está cifrada a crystallisação. Não há n'elles individualidade, não apresentam no exterior fórmas polyedricas naturalmente produzidas, nem oferecem no interior esta particular disposição molecular, de que depende a estrutura. A sua elasticidade é egual em todas as direcções. Denominam-se amorfos ou sem fórma e podem considerar-se quanto à sua constituição análogos aos fluidos. Tal é, por exemplo, a Opala (sílica hydratada). Estas substâncias mineraes são *comtudo excepções pouco numerosas e não invalidam a crystallisação, como lei fundamental da natureza inorgânica"*.

Mas não se fica por estas considerações a propósito do que apelida de "amorfismo". Tece então judiciosas palavras no que se refere ao fenómeno de alteração meteórica, superficial ou supergénica (como dizemos hoje) de certos minerais no geral endógenos.

Assim diz: "*certos mineraes aparecem como resultado da degradação e decomposição produzida em substancias crystalinnas preexistentes pelas acções physicas e chimicas dos agentes exteriores, principalmente da agua. Taes corpos representam em relação aos mineraes, de que provêem, o mesmo que os restos dos animaes e vegetaes considerados a respeito dos organismos, de cuja decomposição offerecem testemunho. Estes mineraes dizem-se peliticos. Taes* são os *mineraes terrosos, e argilosos, como por exemplo o Kaolin, ou Terra de porcellana, que resulta da degradação e alteração dos feldspattos (Orthoclase, Sanidina, Oligoclase) nas rochas feldspathicas (Granitos, Porphydos, Trachytes, Phonolites).*

Este processo de transformação é a kaolinisação dos feldspathos. O feldspatho Orthoclase entra como principal constituinte na composição do Granito e de outras rochas com elle estreitamente alliadas, e é um silicato de alumina e de potassa, em que na maior parte dos casos uma pequena porção d'este alkali é substituída pela soda, pela cal, ou pelo oxydo de ferro. Os individuos crystallinos de Orthoclase começam a ser atacados e alterados nas suas faces e avança pouco a pouco para o interior a sua alteração favorecida pelas soluções da continuidade no interior do crystal.

Os crystaes perdem o brilho, a sua côr rosada degenera em branca, diminue extremamente a coesão do mineral, em que em vez dos crystaes de Orthocase aparece uma simples massa branca e terrosa de silicato hydratado de alumina ou Kaolin. Pelo processo chimico da kaolinisação a potassa juntamente com as pequenas porções das outras bases, pela acção da agua contendo em dissolução o anhydride de carbónio passa a carbonato, que é levado em dissolução, juntamente com uma parte da sílica livre, enquanto que o restante silicato de alumina recebe na sua composição uma certa porção de agua".

Trata-se de uma correcta e até bela descrição do fenómeno de meteorização química de um silicato. Inclusivamente há uma descrição paulatina da transformação do mineral "são" (a ortóclase) em produtos terrosos, menos coesos e brilhantes a caminho de um mineral argiloso (a caulinite). O mais notável é que Latino Coelho acompanha a hidrólise dos silicatos no seu contacto com a água como se verifica na parte final da longa citação que se apresenta.

A presente curta análise de um texto cientifico-didático de Latino Coelho permite-nos verificar que, ao lado de uma personalidade autor de literatura exuberante e de textos da mais variada índole em que

se exprimiu com estilo de fácies barroca discorrendo sobre temas desde o dia-a-dia vivencial a dissertações biográficas de vultos maiores da nossa História e Cultura, há um autor de estilo contido, ático, pensando escorreitamente sobre as estruturas dos cristais e minerais.

Se o *curriculum vitae* de Latino Coelho é impressionante ao nos revelar uma personalidade multímoda, de militar ao político, do jornalista ao literato, do professor universitário ao académico, interessou-me olhar por dentro o Homem-Professor da Escola Politécnica, o autor da ciência dos cristais e dos minerais.

E foi com grande deleite intelectual que fiz esta abordagem.

É impressionante o modo ágil e penetrante como Latino Coelho discorre sobre o tema que acabamos de tratar.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 4 de outubro de 2018)

BIBLIOGRAFIA

Latino Coelho (1917) *Fernão de Magalhães*. Editores – Santos & Vieira. Lisboa.
_____ (1892) *Compêndio de Mineralogia*. Typografia da Academia Real das Sciencias.

Fadiga de materiais e de estruturas – com enfoque na aeronáutica

Paulo M. S. Tavares de Castro, Sérgio M. O. Tavares[1]

RESUMO

A fadiga é a principal causa de falha nos componentes mecânicos em geral, e especialmente no caso das estruturas aeronáuticas. O projecto tendo em vista a resistência à fadiga deste tipo de estruturas evoluiu ao longo do tempo, desde abordagens almejando garantir vida segura (*safe-life*) em que se procurava assegurar que não haveria crescimento de fendas até à rotura no período de vida da aeronave, passando pela subsequente filosofia de segurança na presença de falha (*fail-safe*), até ao corrente paradigma da tolerância ao dano *(damage tolerance).* A última emergiu como a principal filosofia de projecto para estruturas de aeronaves, permitindo economia de peso e aumentando a fiabilidade e a integridade estrutural na eventual presença de danos.

A aplicação da filosofia de projecto *damage tolerant* supõe um profundo conhecimento das propriedades de fadiga e fractura, resistência à corrosão, modos de falha potenciais e técnicas de inspecção não destrutivas, particularmente defeitos mínimos detectáveis e critérios para definir intervalos de inspecção.

A regra da Federal Aviation Administration (FAA) de 2010, estabelecendo um limite de validade (*limit of validity* – LOV) para a operação das aeronaves, coloca um limite na vida operacional indefinida que era permitida pelos regulamentos anteriores. Este requisito, juntamente com o papel decrescente do alumínio nas estruturas de aviões, certamente moldará as direcções da investigação sobre fadiga, fractura e dano mecânico nos próximos anos, expandindo a base de conhecimento sobre a qual a comprovação dos valores de LOV é feita e garantindo a segurança.

O aparecimento persistente da fadiga como a principal causa de falha em componentes mecânicos e estruturais pode sugerir que os outros modos de falha já sejam melhor compreendidos. Apesar do progresso do conhecimento sobre fadiga, desde os trabalhos pioneiros de William Rankine, August Wöhler e outros, passando pelas contribuições do recentemente desaparecido Paul Paris, ainda há lugar para o avanço na compreensão do fenómeno e na prevenção de falhas por fadiga.

Palavras-chave: crescimento de fendas por fadiga; fadiga de aeronaves; fractura; modo misto; regulamentos; tolerância ao dano.

INTRODUÇÃO; FADIGA E O CASO DAS ESTRUTURAS DE AERONAVES

A tolerância a danos (*damage tolerance*) é a principal abordagem de projecto para as estruturas de aeronaves, possibilitando economia de peso e garantia de integridade estrutural na presença de eventuais danos resultantes da fabricação ou desenvolvidos em serviço. A abordagem *damage tolerant* depende de

[1] Departamento de Engenharia Mecânica da Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal

bases de dados de propriedades de fadiga e fractura, comportamento de corrosão, modos de falha e inspecção não-destrutiva, particularmente tamanho mínimo de defeitos detectáveis e intervalos de inspecção. Quando a inspecção é impossível ou não existe redundância de caminhos de carga, então é usada a abordagem de projecto '*safe life*', mais antiga, como é o caso do trem de aterragem e de certos elementos da estrutura da aeronave. Uma concisa discussão das filosofias de dimensionamento à fadiga pode ser encontrada em James, [1].

A filosofia de projecto *damage tolerant* é o resultado de uma evolução paralela ao desenvolvimento do conhecimento de fadiga em geral. O projecto estrutural inicialmente era baseado em abordagens do tipo S-N (tensão *versus* número de ciclos até à rotura), e somente na segunda metade do século passado, após o trabalho pioneiro de Paul Paris, os modelos de propagação de fendas de fadiga se tornaram amplamente aceites. Paralelamente, o projecto de fadiga de aeronaves passou de abordagens baseadas em considerações *safe life* (vida segura), em que se procurava assegurar que não haveria crescimento de fendas até à rotura no período de vida da estrutura (ver, *e.g*. Grover, [2]), a abordagem *fail-safe* prevendo segurança face a roturas designadamente através de redundância estrutural (múltiplos caminhos de carga) e/ou uso de detalhes estruturais capazes de deter a propagação de fendas (*crack arresters*). A actual filosofia *damage tolerant* é também associada à danificação em serviço, mas tomando em conta a velocidade de propagação do dano, usada para a definição de intervalos de inspecção periódica. Um interessante artigo de Boller e Buderath nas *Philosophical Transactions of the Royal Society – A* ilustra bem a distinção entre estas filosofias, [3],

A filosofia de projecto baseada na tolerância ao dano (*damage tolerance*) implica que, através de inspecções periódicas, o dano que pode ter sido desenvolvido é detectado bem antes de atingir valores críticos, e a reparação é realizada restaurando a capacidade de carga. O conceito é esquematicamente sugerido na Figura 1, adaptada de Gordon e Boller, [4]. O projecto prevendo a tolerância a danos inclui, portanto, a dimensão da gestão de fadiga em serviço, já que as inspecções periódicas em serviço são inseparáveis das decisões de projecto. Um equívoco fundamental seria pensar no projecto separadamente da inspecção; o projecto tolerante a danificação envolve o ciclo de vida da aeronave, definindo intervalos de inspecção com base em modelos quantificados de crescimento do dano em serviço.

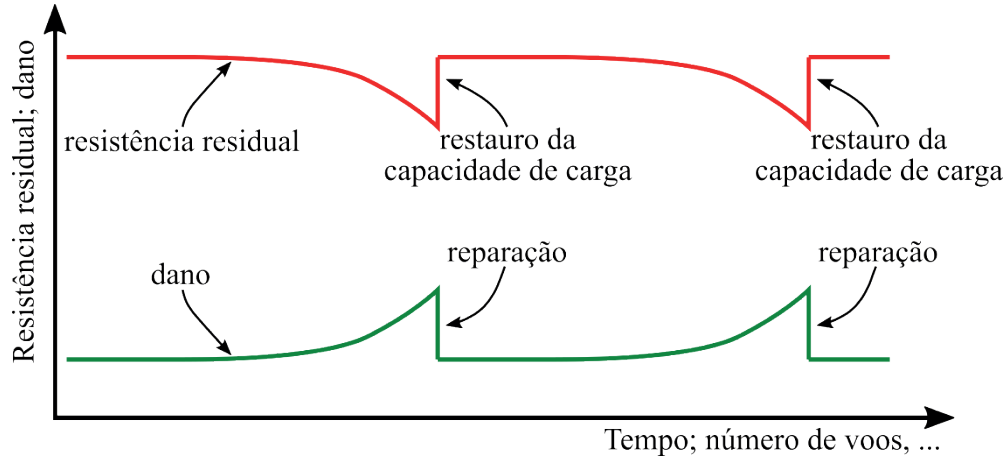


Figura 1 – Representação esquemática da evolução do dano e consequentes reparações. Adaptado de [4].

Enquanto as revisões recentes do assunto são apresentadas por Jones em 2014, [5], e em 2017 por Tavares e de Castro, [6], os estágios iniciais da evolução do dimensionamento à fadiga de aeronaves são documentados, por exemplo, em sucessivos volumes ASTM STP, *e.g.* 203, 274, 338, 404, até ao STP 486 intitulado 'Damage Tolerance in Aircraft Structures' [7] em 1971, ou publicações pioneiras da ICAF, como [8-10].

O projecto à fadiga de estruturas de aeronaves envolve a escolha de materiais (ligas de Al incluindo Al-Li, compósitos,...), ensaios e modelação de propagação de fendas em modo I e modos mistos, e tensões residuais particularmente no caso das estruturas metálicas integrais, no contexto da evolução de regulamentos aplicáveis da FAA e da European Aviation Safety Agency (EASA). Distinguem-se as estruturas integrais das diferenciais, em que as primeiras usam a soldadura (*friction stir welding* – FSW, *laser beam welding* – LBW,...) para a junção de partes estruturais com economia de peso, de estruturas diferenciais tipicamente fabricadas recorrendo à tradicional ligação por rebites.

O presente artigo constitui uma oportunidade para actualizar uma anterior comunicação à Academia das Ciências em 2007, [11].

TENSÕES RESIDUAIS

O problema das tensões residuais é de particular importância para as estruturas integrais, como as resultantes do uso de LBW ou FSW, que principiam a ter expressão no fabrico de fuselagens.

As tensões residuais têm um impacto importante no comportamento à fadiga de uma estrutura, já que a velocidade de propagação de fendas por fadiga depende da gama de tensão através das seguintes equações 1 a 4. Estas estão escritas para a situação de inexistência de tensões permanentes (como são as tensões residuais); caso existam, estas devem ser adicionadas às tensões resultantes do carregamento externo, levando a novos valores de tensão máxima e mínima, bem com a alteração da razão de tensão ou de carga $R = \sigma_{\min} / \sigma_{\max}$ ou $R = P_{\min} / P_{\max}$.

Recorda-se a solução básica para o factor de intensidade de tensão numa placa remotamente traccionada pela tensão σ, perpendicular a uma fenda central de comprimento $2a$ muito menor do que a largura da placa:

$$K = \sigma \left(\pi a \right)^{1/2} \tag{1}$$

No caso geral, a equação acima é modificada, com a introdução de uma função Y dependente da geometria e do tipo de carga,

$$K = Y \sigma \left(\pi a \right)^{1/2} \tag{2}$$

A lei de Paris relaciona a velocidade de propagação de fendas por fadiga, da/dN, em que a é o comprimento da fenda e N o número de ciclos, com ΔK, gama de valores do factor de intensidade de tensão no ciclo de carga, função de $\Delta\sigma = \sigma_{\max} - \sigma_{\min}$,

$$\frac{da}{dN} = C \left(\Delta K \right)^{m} \tag{3}$$

Na equação acima[2],

$$\Delta K = Y \Delta \sigma \left(\pi a \right)^{1/2} \tag{4}$$

A medição de tensões residuais pode ser feita com alta precisão usando técnicas de difracção de neutrões ou raios X obtidos em sincrotrão. Recentemente, o chamado método de contorno, inventado por Mike Prime no Los Alamos National Laboratory, [12], tem sido objecto de grande interesse e ganhou ampla aceitação como um método destrutivo capaz de determinar com precisão o estado de tensão residual, *e.g.* [13]. Embora de uso laborioso e demorado, o método do contorno é uma alternativa de baixo custo para a medida do estado de tensão residual, quando comparado com as técnicas mencionadas anteriormente.

O impacto das tensões residuais na velocidade de propagação de fendas por fadiga foi tratado numa comunicação à Academia das Ciências de Lisboa em 2012, [14], centrada nos problemas específicos das estruturas soldadas de aço.

MATERIAIS

As avaliações da vida de fadiga estão no cerne das considerações de segurança no projecto de fuselagens. Para enfrentar a dispersão nas propriedades dos materiais têm sido usadas abordagens conservadoras na avaliação de fadiga de estruturas, considerando o pior cenário ou métodos estatísticos que lidam com a variabilidade das propriedades do material, [15].

Depois da predominância das estruturas metálicas, as estruturas de aeronaves de transporte apresentam agora uma maior variedade de materiais, com crescente uso de materiais compósitos de fibra de carbono (*carbon fibre reinforced polymer* – CFRP). Durante décadas, as ligas de alumínio foram os materiais de escolha para estruturas de aeronaves. Presentemente, novas ligas de Al com propriedades melhoradas, particularmente as de Lítio, procuram responder à crescente competição dos compósitos, ver *e.g.* Tavares *et al.*, [16], Prasad *et al*., [17] e Prasad e Wanhill, [18, 19].

Estruturas integrais, como as fabricadas com LBW ou FSW, por contraste com estruturas diferenciais, tipicamente rebitadas, são de interesse para a redução do peso nomeadamente em resultado do menor número de componentes envolvidos, *e.g.* Moreira *et al*., [20]. O titânio também encontra um papel crescente, nomeadamente devido ao seu comportamento de corrosão nas estruturas de CFRP, [21].

Além dos laminados de metal reforçados com fibras (*fibre metal laminate* – FML), desenvolvidos nos Países Baixos – ARALL com fibras de aramida, e GLARE com fibras de vidro, ver *e.g.* Vogelesang, Gunnink, [22], Vlot e Gunnink, [23], Sinmazcelik *et al.* [24] e Alderliesten, [25] – o CFRP encontrou um enorme aumento de interesse nas últimas décadas, sendo objecto de inúmeras publicações, das quais e por exemplo se citam dois livros editados por Camanho *et al*., [26, 27], ou o trabalho de Tomblin, Seneviratne *et al.* no National Institute for Aviation Research (NIAR) da Wichita State University, [28].

[2] As equações 1 a 4 foram também incluídas em: P. M. S. T. de Castro, P. F. P. de Matos, P. M. G. P. Moreira, S. M. O. Tavares, V. Richter-Trummer, "Problemas de fractura e fadiga em estruturas de aviões fabricadas em Alumínio," *Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências*, tomo XLIII, vol. I, pp. 417-444, 2006-2007, onde por não disponibilização de provas tipográficas aos autores e erro tipográfico, foram publicadas de forma ilegível (equações 1 a 4 do artigo citado, na pág. 423). Aqui fica a respectiva errata.

MODO I E MODO MISTO

Definem-se 3 modos básicos de solicitação de um sólido com fenda. Ver Figura 2.

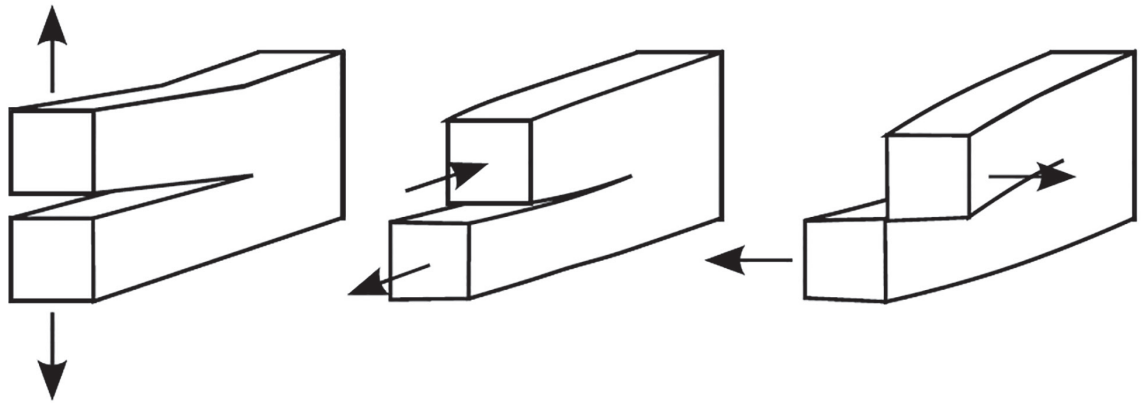


Figura 2 – Modos básicos de carregamento de um sólido fendido.

A maioria dos trabalhos sobre fadiga envolve situações de modo I, mas na prática são frequentemente encontradas situações de modo misto. A Figura 3 regista a notação utilizada em estudos de direcção de propagação de fissuras a partir de uma pré-fenda inicial. Nesta figura σ é a tensão remota aplicada, a é o semi-comprimento da pré-fenda, β é o ângulo entre a tensão σ e o plano da pré-fenda, e ψ é o ângulo da propagação relativamente à direcção da pré-fenda.

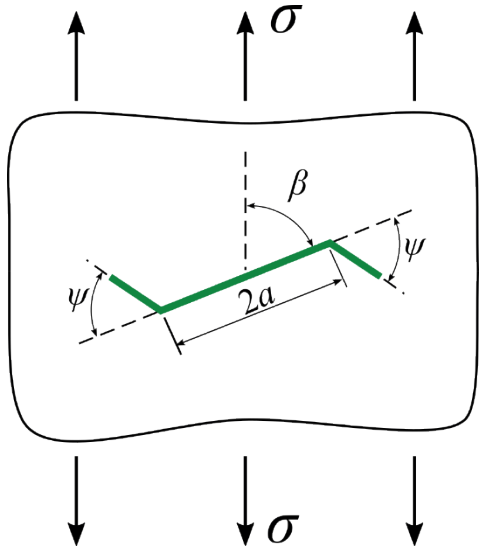


Figura 3 – Notação utilizada em estudos da direcção de propagação de fissuras a partir de uma pré-fenda inicial de comprimento 2*a*.

A investigação relativa ao modo misto é mais comum em situações de fractura instável. Recordam-se a propósito as contribuições clássicas de Erdogan e Sih, critério de tensão tangencial máxima (*maximum tangential stress* – MTS), [29], e de Sih, densidade de energia de deformação (*strain energy density* – SED), [30]. Na FEUP esses estudos foram iniciados por Rebelo *et al.*, [31].

A investigação relativa a carregamentos em modo misto é muito menos comum para estudos de crescimento de fendas por fadiga (*fatigue crack growth* – FCG), nomeadamente pela maior complexidade experimental envolvida. Vários estudos de crescimento de fendas de fadiga em modo misto I-II foram recentemente realizados na FEUP, incluindo o uso de provetes do tipo *compact tension* (CT) e flexão em 3 pontos, provetes *compact tension shear* (CTS), bem como o provete de flexão em quatro pontos. Alguns resultados experimentais foram comparados com simulações numéricas usando o método estendido dos elementos finitos (eXtended Finite Element Method – XFEM), em que foi prevista com sucesso a trajectória de propagação da fissura em situações de carregamento em modo misto.

O último tipo de provete referido (provete de flexão em 4 pontos) permite ensaiar uma faixa de valores da relação modo I / modo II (*mixity value*), e, em certas circunstâncias, permite avaliações de modo II puro (de modo semelhante ao provete entalhado Iosipescu). A Figura 4 mostra um entalhe maquinado num provete de liga de Alumínio AA6082 T6 ensaiado em flexão em 4 pontos, com carregamento cíclico e razão de carga R aprox. 0. A partir do entalhe maquinado foi feita crescer uma pré-fenda em modo I. A súbita alteração da direcção de propagação visível na Figura 3 foi causada por se ter criado uma situação de modo II puro, o que neste tipo de provetes se faz mudando de forma adequada a posição dos pontos de aplicação da carga.

A Figura 5, de trabalhos de Baganha Marques *et al*. na FEUP, [32], mostra um provete de alumínio AA6082 T6 para ensaios de flexão em 4 pontos. Em a) mostra-se uma das faces dos provetes, na qual são visíveis diversas marcações auxiliares do ensaio, e em b) a outra face do mesmo provete. De novo, a mudança de direcção de propagação ocorreu quando se criou uma situação de modo II puro.

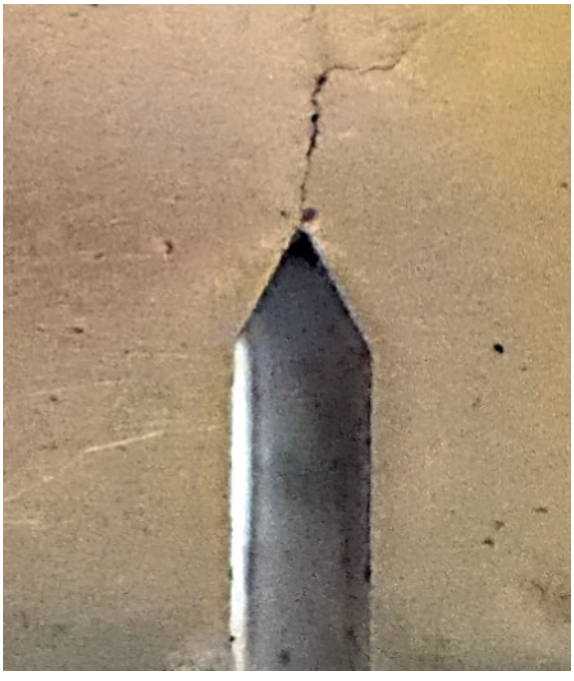


Figura 4 – Exemplo de desvio da direcção de propagação de uma fenda devido a alteração da razão modo I / modo II *(mode mixity*): detalhe de um provete de flexão em 4 pontos de AA 6082 T6 ensaiado na FEUP por L. Gicquel, 2017.

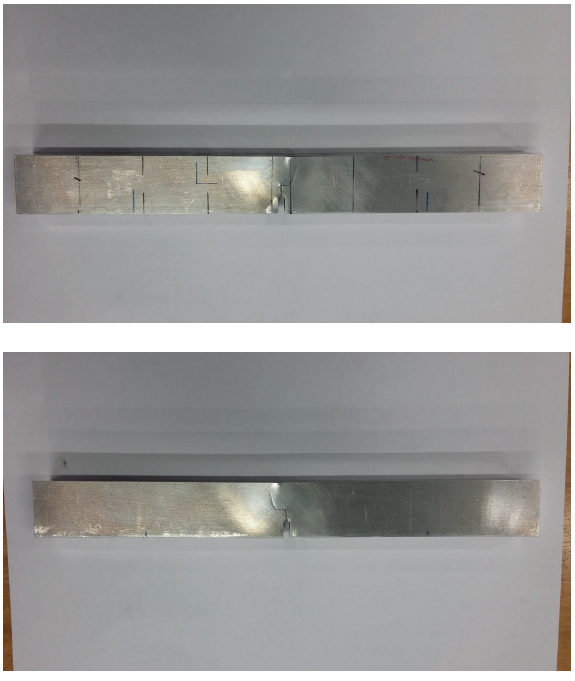


Figura 5 – Exemplo de desvio da direcção de propagação de uma fenda devido a alteração da razão modo I / modo II: provete de flexão em 4 pontos de AA 6082 T6 ensaiado na FEUP por J. Baganha Marques, 2017.

A Figura 6 apresenta resultados experimentais para o ângulo ψ_0 em função da razão K_I/K_{II}. A razão K_I/K_{II} relaciona-se com o ângulo β da situação básica da Figura 2 através da relação:

$$\beta = \arctan\left(\frac{K_I}{K_{II}}\right) \tag{5}$$

Os resultados experimentais obtidos foram comparados com previsões teóricas usando os critérios MTS e SED. Esta figura ilustra a boa concordância encontrada entre a previsão do critério SED (densidade de energia de deformação) para os ângulos da direcção de propagação no início do crescimento a partir da pré-fissura (relação ψ_0 versus β).

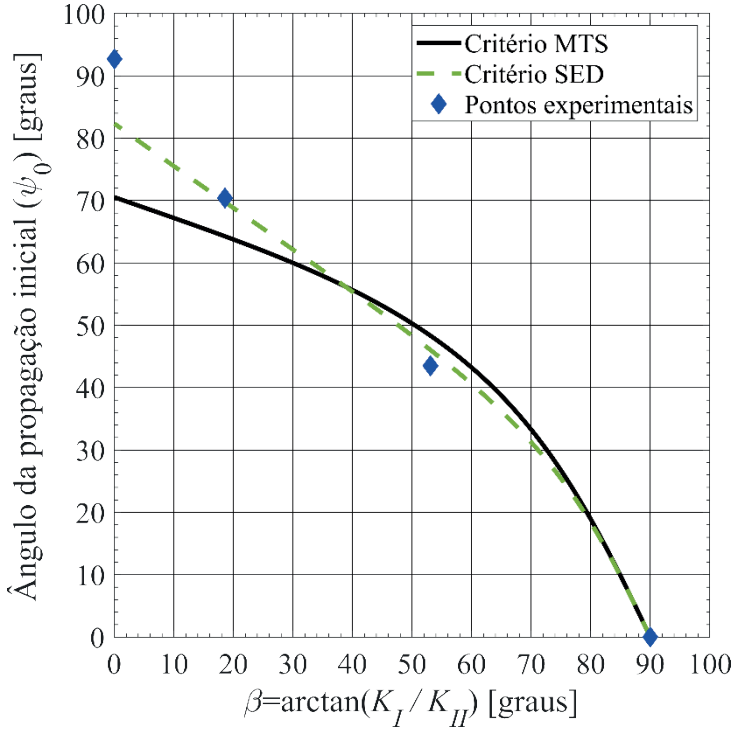


Figura 6 – Previsão teórica do ângulo de propagação a partir de uma pré-fenda inclinada; comparação com resultados experimentais de provetes de flexão em 4 pontos de AA 6082 T6; ensaios de J. Baganha Marques na FEUP [32].

APRENDER COM AS FALHAS

Conforme enfaticamente discutido por Petroski, [33], aprender com os fracassos assumiu e assume um papel importante na evolução da engenharia em geral, e do projecto de fadiga de aeronaves em particular.

Casos marcantes – de Havilland Comet em 1954, General Dynamics F-111 em 1969, Dan Air Boeing 707 em Lusaka em 1977, Aloha Airlines Boeing 737 em 1988, etc. – foram meticulosamente analisados nos relatórios oficiais de acidentes das várias autoridades envolvidas. São também discutidos em inúmeras publicações, e sínteses de amplo interesse para a engenharia incluem artigos de Wanhill *et al.*, [34, 35].

Apenas alguns acidentes, como os acima mencionados, tem um tal impacto na engenharia que levam à alteração de filosofias de projecto ou regulamentos. Porém, a aprendizagem também ocorre através de eventos que não atingem os noticiários e o grande público. A literatura especializada tem abundante cobertura dessas situações, incluindo revistas especializadas como a *Enginering Failure Analysis* e livros, por exemplo Makhlouf and Aliofkhazraei, [36].

Um problema possível da fuselagem rebitada é a danificação por fadiga ocorrendo em múltiplos locais (*multiple site damage* – MSD), motivando um surto de interesse em modelar este fenómeno, em particular após o acidente com Boeing 737 da Aloha Airlines, ver, por exemplo, Silva *et al.*, [37] e de Castro *et al.,* [38]. Dado o papel das juntas rebitadas da fuselagem numa tão grande percentagem da frota de aeronaves de transporte existente e em operação, é aqui feita referência ao livro de Skorupa e Skorupa relativo ao comportamento das juntas rebitadas da fuselagem da aeronave, [39], e ao trabalho de Matos *et al.* [40] relativo a procedimentos para melhorar a resistência à fadiga dos furos dos rebites, (*cold expansion* também designado *cold work*).

STRUCTURAL HEALTH MONITORING (SHM)

Deve ser feita distinção entre aeronaves de transporte, com condições de serviço mais estáveis, e aeronaves de combate militar, mais ágeis, com variações bruscas de trajectória, de velocidade e de cargas actuando sobre a estrutura. Estas foram, desde há muitos anos, instrumentados com sensores, tais como os 'sensores' de fadiga (*fatigue meters*) revistos por Molent e Aktepe, [41], e Molent e Agius, [42]. A designação *fatigue meters* deve ser vista com cautela, porque o que esses instrumentos registam é o número de excedências de certo valor da aceleração, e a relação dessas informações com o dano por fadiga é indirecta. Discussões introdutórias do tópico são dadas, *e.g.* por Hooke e Langford, [43], e por Payne, [44]. Discussões recentes de espectros incluem Heuler e Klätschke, [45], ou Singh e Venkatasubramanyam, [46].

A inseparável ligação entre tolerância ao dano, monitorização em contínuo (ou, no mínimo, periódica), e serviços de manutenção, é amplamente tratada na 'Encyclopedia of Structural Health Monitoring' editada por Boller, Chang e Fujino (Wiley, 2009), [47], onde alguns dos capítulos abordam especificamente a questão da tolerância ao dano e da gestão da fadiga das aeronaves, nomeadamente Boller, [48], Gordon e Boller, [4], e Farrar *et al*., [49]. Estes sublinham que, como os sensores não 'medem' danos, o processamento de sinais e a classificação estatística são necessários para converter os dados dos sensores em informações sobre danos. Como discutido por Schmidt e Schmidt-Brandecker, o uso de SHM tem um impacto positivo na redução de peso (em resultado do maior valor da tensão admissível, ou, para o mesmo nível tensão, maior intervalo entre inspecções, conforme esquematicamente sugerido na Figura 7, adaptada de [4, 50].

FONTES DE INFORMAÇÃO

As revistas dedicadas à mecânica da fractura e a tópicos afins publicam frequentemente artigos relevantes, por exemplo, *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures, International Journal of Fatigue, International Journal of Fracture, Engineering Fracture Mechanics, Theoretical and Applied Fracture*

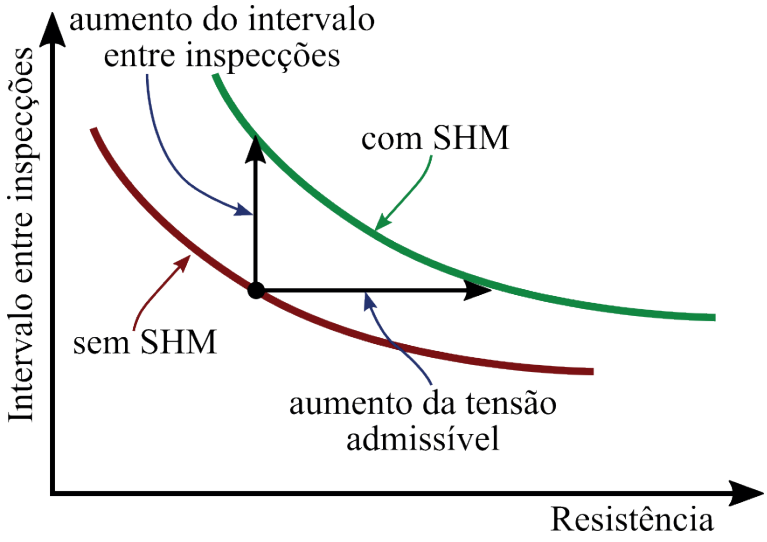


Figura 7 – Representação esquemática dos benefícios resultantes do uso de SHM; adaptado de [4, 50].

Mechanics, Frattura ed Integrità Strutturale (publicada pelo Gruppo Italiano Frattura) ou a *International Journal of Structural Integrity* publicada pela European Aeronautics Science Network (EASN). O tema fadiga é ocasionalmente abordado em revistas do American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) e de outras associações, como a revista *Aerotecnica Missili & Spazio* publicada pela Associazione Italiana di Aeronautica e Astronautica (AIDAA). O Institute of Aviation da Polónia publica uma revista especializada: *Fatigue of Aircraft Structures*. Enciclopédias como [47, 51], alguns volumes da série STP (*special technical publication*, agora designados *selected technical papers* – STP) da American Society for Testing and Materials (ASTM) e publicações do Advisory Group for Aerospace Research and Development (AGARD), substituído pela NATO-RTO (North Atlantic Treaty Organization – Research and Technology Organization, desde 2012 a Science and Technology Organisation – STO), são importantes fontes de informação sobre o assunto, incluindo apresentações históricas de fadiga de aeronaves, gestão da fadiga, [52], investigação sobre fendas de muito pequenas dimensões [53, 54] ou fadiga por corrosão, [55]. As reuniões do ICAF (International Committee on Aeronautical Fatigue and Structural Integrity) proporcionam um fórum para discutir os avanços neste campo, *e.g.* [56-60].

O acabado de publicar livro de Tavares e de Castro 'Damage Tolerance of Metallic Aircraft Structures', [61], dá uma visão geral e concisa do assunto, expandindo a revisão publicada em 2017 sob o título 'An overview of fatigue in aircraft structures' na revista *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures* (FFEMS), [6].

OBSERVAÇÕES FINAIS

A correlação dos avanços nos conhecimentos fundamentais, acidentes marcantes e a evolução dos regulamentos foi brevemente apresentada, e foram abordadas questões levantadas pelas aplicações multi-materiais e perspectivas da evolução do assunto de fadiga de aeronaves.

Uma referência final ao enquadramento regulatório: A regra da FAA de 2010 que estabelece um limite de validade (*limit of validity* – LOV) coloca um limite na vida útil indefinida permitida pelos regulamentos anteriores. Essa exigência, juntamente com o papel cada vez menor das ligas de Al nas estruturas de aeronaves, certamente moldarão as direcções da investigação sobre fadiga, fracturas e dano mecânico nos próximos anos.

Com o desenvolvimento e avanços nos domínios de *Structural Health Monitoring* e de *Self-Healing*, será expectável que surjam novas filosofias de projecto destas estruturas, permitindo um aumento de fiabilidade das mesmas e redução do peso específico, essenciais para tornar o transporte aéreo ainda mais amigável do ambiente.

AGRADECIMENTOS

Os autores reconhecem as contribuições de projectos da União Europeia (UE) e da ESA, projectos portugueses da FCT e QREN, ex-alunos, parceiros e colaboradores. Agradecem em especial os projectos da União Europeia SMAAC, ADMIRE e DATON, e o projecto ESA T401-02MC sobre Al-Li. As recentes teses na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto de Maria Hermosilla (aluna de intercâmbio da Universidad Politécnica de Cartagena, Espanha), Marco Ferreira e José Baganha Marques, e os estágios na Universidade do Porto do aluno da Polytech Lille Lucas Gicquel (2017) contribuíram para alguns aspectos do trabalho apresentado.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 4 de outubro de 2018)

REFERÊNCIAS

1. James, M.N., *Fracture-safe and fatigue-reliable structures.* Frattura ed Integrità Strutturale, 2014. **30**: p. 293-303.
2. Grover, H.J., *Fatigue of Aircraft Structures, NAVAIR 01-1A-13*. 1966: Naval Air Systems Command, Department of the Navy.
3. Boller, C. and M. Buderath, *Fatigue in aerostructures–where structural health monitoring can contribute to a complex subject.* Philosophical Transactions of the Royal Society – A, 2007. **365**: p. 561-587.
4. Gordon, G.A. and C. Boller, *Commercial fixed-wing aircraft*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*, C. Boller, F.-K. Chang, and Y. Fujino, Editors. 2009, John Wiley & Sons.
5. Jones, R., *Fatigue crack growth and damage tolerance.* Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures, 2014. **37**(5): p. 463-483.
6. Tavares, S.M.O. and P.M.S.T. de Castro, *An overview of fatigue in aircraft structures.* Fatigue and Fracture of Engineering Materials & Structures, 2017. **40**(10): p. 1510-1529.
7. ASTM, *Damage Tolerance in Aircraft Structures, ASTM STP486*. 1971: American Society for Testing and Materials.
8. Schijve, J., J.R. Heath-Smith, and E.R. Welbourne, eds. *Current Aeronautical Fatigue Problems – Proceedings of a Symposium Held in Rome, 23-25 April 1963*. 1965, Pergamon Press.
9. Gassner, E. and W. Schütz, eds. *Fatigue Design Procedures – Proceedings of the 4th Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue held in Munich, 16-18 June 1965*. 1969, Pergamon Press.
10. Mann, J.Y. and I.S. Milligan, eds. *Aircraft Fatigue Design, Operational and Economic Aspects – Proceedings of the Symposium Held in Melbourne, 22-24 May 1967*. 1972, Pergamon Press.
11. de Castro, P.M.S.T., *et al.*, *Problemas de fractura e fadiga em estruturas de aviões fabricadas em Alumínio.* Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências, 2006-2007. tomo XLIII, vol. I: p. 417-444.
12. Prime, M.B., *Cross-sectional mapping of residual stresses by measuring the surface contour after a cut.* Journal of Engineering Materials and Technology, 2001. **123**(2): p. 162-168.

13. Richter-Trummer, V., *et al.*, *Influence of the FSW clamping force on the final distortion and residual stress field.* Materials Science and Engineering A, 2012. **538**: p. 81-88.
14. de Castro, P.M.S.T., *Fadiga e fractura de um aço usado em estruturas soldadas.* Memórias da Academia das Ciências de Lisboa, Classe de Ciências, tomo XLV, p. 341-348, 2018.
15. Tavares, S.M.O. and P.M.S.T. de Castro, *Fatigue crack growth of aircraft structures: Sensitivity to material parameters.* International Journal of Terraspace Science and Engineering, 2014. **6**(2): p. 71-75.
16. Tavares, S.M.O., J.F. dos Santos, and P.M.S.T. de Castro, *Friction stir welded joints of Al–Li Alloys for aeronautical applications: butt-joints and tailor welded blanks.* Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2013. **65**: p. 8-13.
17. Prasad, N.E., A.A. Gokhale, and R.J.H. Wanhill, eds. *Aluminum-Lithium Alloys: Processing, Properties, and Applications*. 2014, Elsevier.
18. Prasad, N.E. and R.J.H. Wanhill, eds. *Aerospace Materials and Material Technologies; Volume 1: Aerospace Materials*. 2017, Springer.
19. Prasad, N. and R.J.H. Wanhill, eds. *Aerospace Materials and Material Technologies; Volume 2: Aerospace Material Technologies*. 2017, Springer.
20. Moreira, P.M.G.P., *et al.*, *Fatigue and fracture behaviour of friction stir welded Aluminium–Lithium 2195.* Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2012. **60**: p. 1-9.
21. Wanhill, R.J.H. and S. Barter, *Fatigue of Beta Processed and Beta Heat-treated Titanium Alloys*. 2012: Springer.
22. Vogelesang, L.B. and J.W. Gunnink, *ARALL: a materials challenge for the next generation of aircraft.* Materials & Design, 1986. **7**(6): p. 287-300.
23. Vlot, A. and J.W. Gunnink, eds. *Fibre Metal Laminates: An Introduction*. 2001, Springer-Science+Business Media.
24. Sinmazçelik, T., *et al.*, *A review: Fibre metal laminates, background, bonding types and applied test methods.* Materials and Design, 2011. **32**: p. 3671-3685.
25. Alderliesten, R., *Fatigue and Fracture of Fibre Metal Laminates*. 2017: Springer.
26. Camanho, P.P., *et al.*, eds. *Mechanical response of composites*. 2008, Springer.
27. Camanho, P. and L. Tong, eds. *Composite Joints and Connections: Principles, Modelling and Testing*. 2011, Woodhead Pub. Ltd.
28. Seneviratne, W. and J.S. Tomblin, *Certification of composite-metal hybrid structures using load-enhancement factors*, in *FAA Joint Advanced Materials and Structures (JAMS)*. 2014: Seattle, WA.
29. Erdogan, F. and G.C. Sih, *On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear.* Journal of Basic Engineering, 1963. **85**(4): p. 519-525.
30. Sih, G.C., *Strain-energy-density factor applied to mixed mode crack problems.* International Journal of Fracture, 1974. **10**: p. 305-321.
31. Rebelo, C.A.C.C., A.T. Marques, and P.M.S.T. de Castro, *Fracture characterization of composites in mixed mode loading*, in *Fracture Control of Engineering Structures, Proceedings of ECF6, Amsterdam 15-20 June 1986*. 1986, EMAS. p. 2195-2204.
32. Baganha Marques, J., S.M.O. Tavares, and P.M.S.T. de Castro, *Analysis of mode II and mixed mode I-II in fracture and fatigue: A numerical and experimental study*, in *2nd International Conference on Materials Design and Applications 2018 (MDA 2018), Porto, Portugal, July 5-6, 2018*, L.F.M. da Silva, Editor, "Materials Design and Applications II", 2019, Springer, p. 403-423.
33. Petroski, H., *To Engineer Is Human: The Role of Failure in Successful Design*. 1992: Penguin Random House.
34. Wanhill, R.J.H., *Milestone case histories in aircraft structural integrity, report NLR-TP-2002-521*, in *Comprehensive Structural Integrity*. 2003, Elsevier. p. 61-72.
35. Wanhill, R.J.H., *et al.*, *Milestone case histories in aircraft structural integrity – update 2015, report NLR-TP-2015-193*. 2015.
36. Makhlouf, A.S.H. and M. Aliofkhazraei, eds. *Handbook of Materials Failure Analysis with Case Studies from the Aerospace and Automotive Industries*. 2016, Elsevier.
37. Silva, L.F.M., *et al.*, *Multiple-site damage in riveted lap-joints: experimental simulation and finite element prediction.* International Journal of Fatigue, 2000. **22**: p. 319-338.
38. de Castro, P.M.S.T., *et al.*, *An overview on fatigue analysis of aeronautical structural details: Open hole, single rivet lap-joint, and lap-joint panel.* Materials Science and Engineering: A 2007. **468-470**: p. 144-157.
39. Skorupa, A. and M. Skorupa, *Riveted Lap Joints in Aircraft Fuselage: Design, Analysis and Properties*. 2012: Springer.
40. de Matos, P.F.P., *et al.*, *Numerical simulation of cold working of rivet holes.* Finite Elements in Analysis and Design, 2005. **41**: p. 989-1007.
41. Molent, L. and B. Aktepe, *Review of fatigue monitoring of agile military aircraft*. Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures, 2000. **234**: p. 767-785.
42. Molent, L. and J. Agius, *Agile Military Aircraft*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*, C. Boller, F.-K. Chang, and Y. Fujino, Editors. 2009, John Wiley & Sons.

43. Hooke, F.H. and P.S. Langford, *Australian work on aircraft fatigue and life evaluation: A historical review of Australian research in structural fatigue and life assessment of aircraft.* Aircraft Engineering and Aerospace Technology, 1956. **28**(12): p. 408-414.
44. Payne, A., *The fatigue of aircraft structures.* Engineering Fracture Mechanics, 1976. **8**(1): p. 157-203.
45. Heuler, P. and H. Klätschke, *Generation and use of standardised load spectra and load–time histories.* International Journal of Fatigue, 2005. **27**: p. 974-990.
46. Singh, K.L. and D.V. Venkatasubramanyam, *Techniques to generate and optimize the load spectra for an aircraft.* International Journal of Mechanics and Materials in Design, 2010(6): p. 63-72.
47. Boller, C., F.-K. Chang, and Y. Fujino, eds. *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*. 2009, John Wiley & Sons.
48. Boller, C., *Structural Health Monitoring–an introduction and definitions*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*, C. Boller, F.K. Chang, and Y. Fujino, Editors. 2009, John Wiley & Sons.
49. Farrar, C.R., K. Worden, and J. Dulieu-Barton, *Principles of Structural Degradation Monitoring*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring* C. Boller, F.-K. Chang, and Y. Fujino, Editors. 2009, John Wiley & Sons.
50. Schmidt, H.-J. and B. Schmidt-Brandecker, *Design benefits in aeronautics resulting from SHM*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*, C. Boller, F.-K. Chang, and Y. Fujino, Editors. 2009, John Wiley & Sons.
51. Blockley, R. and W. Shyy, eds. *Encyclopedia of Aerospace Engineering*. 2010, John Wiley & Sons.
52. AGARD, ed. *AGARD Conference Proceedings 506 – Fatigue Management (La Gestion de la Fatigue)*. Vol. AGARD-CP-506. 1991.
53. Newman Jr, J.C. and P.R. Edwards, eds. *AGARD report No.732 – Short-Crack Growth Behaviour in an Aluminum Alloy – an AGARD Cooperative Test Programme*. Vol. AGARD-R-732. 1988.
54. Edwards, P.R. and J.C. Newman Jr, eds. *AGARD report No.767 – Short-Crack Growth Behaviour in Various Aircraft Materials*. Vol. AGARD-R-767. 1990, AGARD.
55. NATO, ed. *RTO AGARDograph AG-AVT-140 – Corrosion Fatigue and Environmentally Assisted Cracking in Aging Military Vehicles*. 2011, NATO-RTO.
56. Bos, M.J., ed. *ICAF 2009, Bridging the Gap between Theory and Operational Practice -Proceedings of the 25th Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue, Rotterdam, The Netherlands, 27-29 May 2009*. 2009, Springer.
57. Komorowski, J., ed. *ICAF 2011 Structural Integrity: Influence of Efficiency and Green Imperatives – Proceedings of the 26th Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue, Montreal, Canada, 1-3 June 2011*. 2011, Springer.
58. Brot, A., ed. *ICAF 2013 Symposium: Proceedings of the 27th Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue and Structural Integrity: 5- 7 June 2013, Jerusalem, Israel, 2 vols*. 2013.
59. *ICAF 2015 Structural Integrity: Proceedings of the 34th Conference and 28th Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue and Structural Integrity, 1-5 June 2015, Helsinki, Finland*. 2015.
60. *35th ICAF Conference and 29th ICAF Symposium (ICAF 2017) – Proceedings of a meeting held 5-9 June 2017, Nagoya, Japan.* 2017. VTT Information Service; Curran Associates.
61. Tavares, S.M.O. and P.M.S.T. de Castro, *Damage Tolerance of Metallic Aircraft Structures*. SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. 2019, Cham, Switzerland: Springer International Publishing.

Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto

António Ribeiro, João Duarte, Luís Matias, Filipe Rosas, António Mateus[1]

O modelo da TECTÓNICA DE PLACAS AMOLECIDAS ("soft plate tectonics" – SPT) considera que litosfera oceânica é afectada por deformação intraplaca devido a um mecanismo de enfraquecimento: a instabilidade termodinâmica causada pelo metamorfismo hidrotermal dos fundos oceânicos. O postulado da rigidez das placas no modelo padrão tectónica de placas é substituído pela coerência e coaxialidade das placas expressa por uma lei sinusoidal da velocidade angular das placas que obedece ao Teorema de Rotação de Euler. Num modelo de projecção ortográfica esta lei resulta da quebra da velocidade axisimétrica ou do deslocamento diferencial através da geometria. Uma formulação analítica equivalente é obtida através de harmónicas esféricas (Ribeiro *et al.*, 2005). A taxa de deformação inferida aumenta com a idade devido à retroacção positiva em relação aos mecanismos de enfraquecimento. Este modelo foi proposto desde 1987 e formalizado num livro (Ribeiro & Mateus, 2002). Recentemente foi proposto um modelo alternativo: o modelo das placas em contracção ("shrinking plates" Kumar e Gordon, 2009; Kreemer e Gordon, 2014). O seu *rational* consiste na condição necessária no arrefecimento da litosfera oceânica no regime de um campo de tensão triaxial da dinâmica de placas em que estas sofrem contracção horizontal além de fendilhamento ("craking") paralelo ao vector de movimento da placa; este modelo conduz a uma taxa de deformação ("strain rate") que diminui com a idade porque a placa oceânica arrefece mais rapidamente junto à crista média oceânica. Este modelo é testado por desvios no vector de fecho da velocidade de placas num sistema cinemático de três placas. Testes geodéticos futuros permitirão escolher entre os modelos de placas soft e o *shrinking* em termos de deformação incremental intraplacas. A deformação finita pode ser modelada no exemplo da junção tripla dos Açores em que um rifte ultralento corta através litosfera oceânica previamente acrecionada e de idade variável nas placas Eurásia e Nubia; a curvatura desta estrutura favorece o modelo de *strain rate* "shrinking plates"crescente compatível com o modelo SPT.

(Resumo da comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 8 de novembro de 2018)

[1] Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, Instituto Dom Luiz

A virtual mathematical heart for non-invasive heart diagnostics

Alfio Quarteroni[1]

One day, a virtual version of your own heart pumping may help doctors diagnose heart disease and determine the best treatment for you, without the need of surgical intervention or other invasive clinical practices. With my team at Politecnico di Milano in Italy we are actually building a mathematical model to simulate heart function with increasing accuracy and that can be personalized to your heart based on medical scans.

The human heart is an extraordinarily complex organ that pumps an estimated 180 million liters of blood, which would fill more than seven Olympic-sized swimming pools in one's lifetime, thereby ensuring that oxygenated blood reaches the entire body. Cardiovascular problems may lead to malfunction, disease or death. Heart disease causes 40% of deaths in the EU and costs an estimated 196 billion a year, yet 80% of acquired heart diseases and stroke episodes are preventable.

Our aim is to help prevent or treat cardiovascular disease by providing a personalized virtual heart to patients, essentially a detailed mathematical description of a patient's heart and how it functions – or malfunctions.

Every person's heart is unique. Correctly modeling the intricacies of each individual heart therefore requires a customizable mathematical description of both its geometry and its dynamics. But doing so in a mathematically sound way is no easy task; it requires large amounts of patient-specific data and computational power to solve complex equations. Thanks to increasingly powerful computers, building a realistic virtual heart is becoming a reality.

In constructing a virtual heart that is complete and functional, the aortic valve cannot be neglected. For that, we have recently added to our heart model the way blood flows from inside the heart into the aorta, taking into account the complex shapes and properties of the aorta's physiological membranes: the valve leaflets.

From MRI scans of a patient, we reconstructed the shape of the aorta, which we represented using a 3D computational mesh. Using mathematical tools to characterize the mechanics of the valve, we described the movement of three triangular-shaped leaflets that make up the aortic valve. To determine how blood flows inside of the atria, the heart's cavities, we next approximated and numerically solved the mathematical equations dynamics, adapting them for a patient-specific geometry. Even with this preliminary work, it is a relatively easy task to personalize the model to another patient by using a new set of MRI scans.

Our long-term vision is to build patient-specific virtual models of the entire cardiovascular system, including the heart, all of the body's blood vessels, and of the approximately five liters of blood flowing through the body.

[1] MOX, Department of Mathematics, Politecnico di Milano, Milan, Italy; Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Lausanne, Switzerland (professor emeritus); Academia das Ciências de Lisboa.

If successful, our model will help clinicians to tackle important questions efficiently, both in diagnostics and treatment, with a tremendous impact for society. It will provide a unique, unprecedented research environment for exploring the heart with an immensely powerful and non– invasive mathematical microscope, making it possible to simulate cardiovascular disease, like carotid stenosis and aneurysms that can affect the heart, the abdomen, the brain and other parts the body.

We believe that a personalized virtual heart model may become clinically available in less than a decade. Earlier prototypes of the virtual model may be developed and tested sooner, possibly within a five-year horizon. This will require significant investment in the development of robust mathematical and numerical tools to simulate heart function that is tailored to a specific patient.

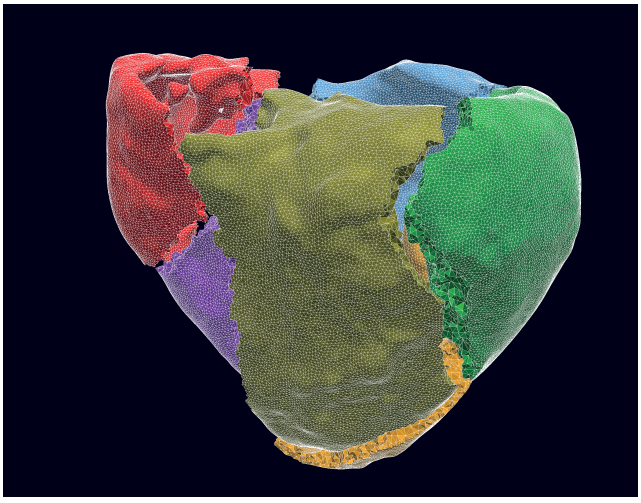


Fig. 1 The heart partitioned into multiple regions and with a finite element grid.

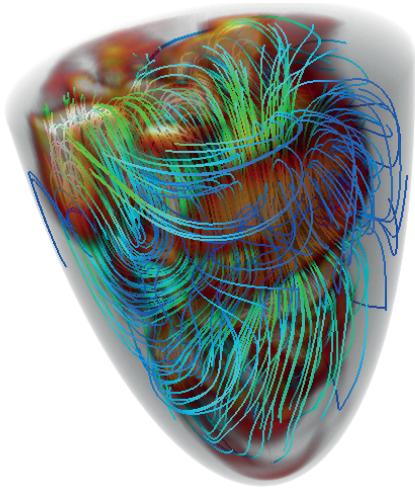


Fig.2. Blood flow streamlines in a left ventricle.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 22 de novembro de 2018)

Molybdenum and Tungsten in Biology

Luisa B. Maia and José J. G. Moura[1]

ABSTRACT

The year of 2019 was declared by UNESCO as the "International Year of the Periodic Table of Chemical Elements", commemorating the 150th anniversary of its creation by the Russian scientist Dmitry Mendeleev. This communication celebrates two chemical elements, whose involvement in biological systems is poorly recognised and largely disregarded: molybdenum and tungsten. To bring to light the biological relevance, biotechnological potential and human health implications of these two metallic elements, this communication will present an overview on the molybdenum- and tungsten-containing enzymes. First, the enzymes catalytic features will be described (section 2), followed by an outline of selected biotechnological applications, related to environmental -nitrogen and carbon footprints- and energy issues (section 3), and an account on human health implications, several of which related with cardiovascular diseases and metabolic syndromes, which are main concerns of our western society (section 4).

SUMÁRIO

O ano de 2019 foi declarado pela UNESCO como o "Ano Internacional da Tabela Periódica dos Elementos Químicos", celebrando os 150 anos da sua criação pelo cientista russo Dmitry Mendeleev. Esta comunicação celebra dois elementos químicos cujo envolvimento em sistemas biológicos é pouco conhecido e, por isso, pouco valorizado: molibdénio e tungsténio. De modo a reconhecer o potencial biotecnológico e as implicações para a saúde humana destes dois elementos metálicos, esta comunicação apresentará uma visão geral sobre os enzimas contendo molibdénio e tungsténio. Primeiramente, serão apresentadas as propriedades catalíticas dos enzimas (secção 2), seguidas da descrição de algumas aplicações biotecnológicas relacionadas com problemas ambientais -pegada de azoto e de carbono- e de energia (secção 3) e implicações para a saúde humana, muitas das quais relacionadas com problemas cardiovasculares e síndromes metabólicos (secção 4).

[1] LAQV, REQUIMTE, FCT NOVA, 2829-516 Caparica, Portugal. Authors e-mail: luisa.maia@fct.unl.pt; jose.moura@fct.unl.pt

TABLE OF CONTENTS

1. Introduction
2. Molybdenum and Tungsten-Containing Enzymes Families
   2.1. Sulfite Oxidase Family
   2.2. Xanthine Oxidase Family
   2.3. Dimethylsulfoxide Reductase Family
   2.4. Tungstoenzymes Family
   2.5. Nitrogenase Family
3. Biotechnological Applications
   3.1. Carbon Footprint and Atmospheric Carbon Dioxide Utilization – Formate dehydrogenases
   3.2. Environment and Food: A World Wide Problem
      3.2.1. Nitrate Bioremediation – Nitrate Reductases
      3.2.2. Nitrogen Fixation – Nitrogenase
4. Human Health Implications
5. Concluding Remarks

ABBREVIATIONS

AO, aldehyde oxidase; DMSOR, dimethylsulfoxide reductase; FDH, formate dehydrogenases; mARC, mitochondrial amidoxime reducing component; NaR, nitrate reductase; SO, sulfite oxidase; ROS, reactive oxygen species; XO, xanthine oxidase.

1. INTRODUCTION

Molybdenum and tungsten are heavy metallic elements, with atomic numbers 42 and 74 (Figure 1). They are present in the Universe and in Earth crustal rocks and oceans in very small amounts (Table 1). Yet, regardless of the environmental scarcity, molybdenum is essential to most organisms [1-3] from archaea and bacteria to higher plants and mammals, being found in the active site of enzymes that catalyse oxidation-reduction reactions involving carbon, nitrogen and sulfur atoms of key metabolites [4-11]. Presently, more than 50 molybdenum-containing enzymes are known, the great majority of which

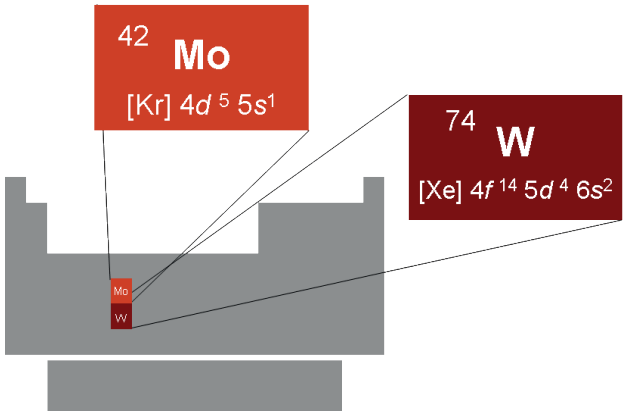


Figure 1. Molybdenum and tungsten in the Periodic Table of the Chemical Elements.

are prokaryotic, with eukaryotes holding only a restricted number of molybdoenzymes (mammals, for example, have only four). Tungsten, probably because of its limited bioavailability (Table 1), is far less used, being present only in prokaryotic organisms, most of which are thermopilic anaerobes [4,12-15]. As molybdenum, tungsten is involved in oxidation-reduction reactions, several of which constitute key steps in the global biogeochemical cycles of carbon, nitrogen and sulfur.

Table 1. Abundances of molybdenum, tungsten and some other elements with biological relevance in different environments [16]

Location	Abundance (ppb by atoms)						
	Mo	W	Fe	H	C	N	O
Universe	0.1	0.003	$20x10^3$	$930x10^6$	$500x10^3$	$90x10^3$	$800x10^3$
Crustal rocks	230	120	$23x10^6$	$31x10^6$	$3.1x10^3$	$29x10^3$	$600x10^6$
Oceans	0.64	0.004	0.33	$662x10^6$	$14.4x10^3$	220	$331x10^6$
Human body	7	—	$6.7x10^3$	$620x10^6$	$120x10^6$	$12x10^6$	$240x10^6$

In biological systems, molybdenum and tungsten are mainly found associated with pyranopterin molecules (Figure 2), moieties that act as a metal scaffold in the same way as the haem ring coordinates the iron in haem proteins [4,5,9-11,15]. Noteworthy, molybdenum can also be found in a heteronuclear molybdenum/iron centre, present only in the nitrogenase enzyme (Figure 2) [17-26]. Keeping on with the comparison with haem proteins, in which different modifications of the basic haem ring (haem *b*, *c* and several other) and of the substrate binding pocket are combined to achieve different metabolic purposes using a single metal (iron), also in molybdo- and tungstoenzymes, different active site structures have evolved to create diverse chemical reactivities using the same metal. These different active site architectures are the basis for the classification of these metalloenzymes into five large families (parallel to haem types), denominated after one benchmark enzyme (Figure 2) [5,10]: sulfite oxidase (SO), xanthine oxidase (XO), dimethylsulfoxide reductase (DMSOR), nitrogenase (these four containing molybdenum) and tungstoenzymes families.

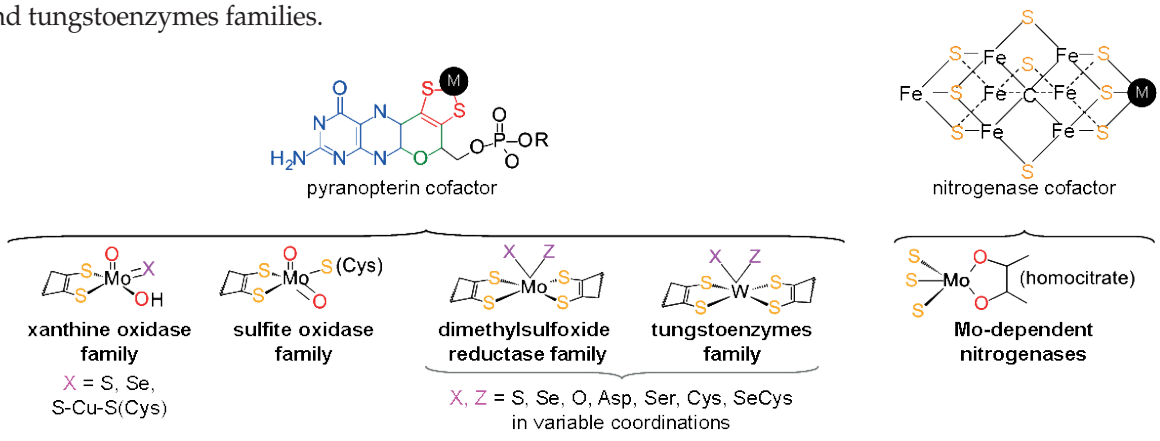


Figure 2. Schematic representation of the structures of the active site of the molybdenum- and tungsten-containing enzymes. On top, structure of pyranopterin and nitrogen cofactors (M, stands for metal, molybdenum or tungsten). The pyranopterin cofactor molecule is formed by pyrano(green)-pterin(blue)-dithiolene(red)-methylphosphate(black) moieties. The dithiolene (–S–C=C–S–) group forms a five--membered ene-1,2-dithiolate chelate ring with the molybdenum/tungsten atom. On bottom, structures of the molybdenum and tungsten centres of the five families of molybdo- and tungstoenzymes in the oxidized form. For simplicity, only the cis-dithiolene group of the pyranopterin cofactor is represented in the xanthine oxidase, sulfite oxidase, dimethylsulfoxide reductase and tungstoenzymes families; likewise, only the coordinating sulfur atoms of the nitrogenase cofactor are represented in the molybdenum-dependent nitrogenases.

2. MOLYBDENUM AND TUNGSTEN-CONTAINING ENZYMES FAMILIES

2.1. Sulfite Oxidase Family

The SO family enzymes are characterised by having an active site that holds a molybdenum ion coordinated, in a distorted square-pyramidal geometry, by an apical oxo group (Mo=O) and, in the equatorial plane, by the two sulfur atoms of the *cis*-dithiolene group (–S–C=C–S–) of one pyranopterin cofactor molecule, one oxo group (Mo=O) and one cysteine sulfur atom (Mo-S(Cys)) (Figure 2) [9-11,27,28]. This family comprises the prototype vertebrate liver SO (eq. 1) [29-33], diverse prokaryotic sulfite dehydrogenases [34-39], the eukaryotic assimilatory nitrate reductase (NaR; an enzyme involved in nitrate assimilation in plants, algae and fungi; eq. 2) [40-49], among several other enzymes [50-62].

vertebrate sulfite oxidase (sulfite oxidation to sulfate):

$$SO_2^{2-} + H_2O + 2\ \text{cytochrome}\ c\,(Fe^{3+}) \longrightarrow OSO_2^{2-} + 2\ \text{cytochrome}\ c\,(Fe^{2+}) + 2H^+ \quad (1)$$

plant nitrate reductase (nitrate reduction to nitrite):

$$ONO_2^- + NAD(P)H + H^+ \longrightarrow NO_2^- + H_2O.. + NAD(P)^+ \quad (2)$$

The enzymes from this family typically catalyse oxo-transfer reactions, both the insertion and the abstraction of an oxygen atom, as is clearly exemplified by the SO-catalysed sulfite oxidation to sulfate (eq. 1) and by the NaR-catalysed nitrate reduction to nitrite (eq. 2), respectively. During the oxygen atom insertion catalysis -as exemplified by the SO catalysis [30,52,59,63-72]- is the oxidised $Mo^{6+}{=}O_{equatorial}$ centre that acts as the direct oxygen donor and oxidant (Figure 3-a). Conversely, during the oxygen atom abstraction catalysis -NaR catalysis [43,45,46,73-77]- is the reduced Mo^{4+} centre, whose equatorial oxo group was eliminated in the form of a water molecule, that acts as the direct oxygen acceptor and reducer (Figure 3-b). In both cases, the ultimate oxygen atom donor or acceptor is a water molecule (follow the red oxygen atoms in eq. 1 and 2 and in Figure 3-a,b) and the molybdenum ion is re-oxidised or re--reduced (respectively) via electron transfer from the physiological partner.

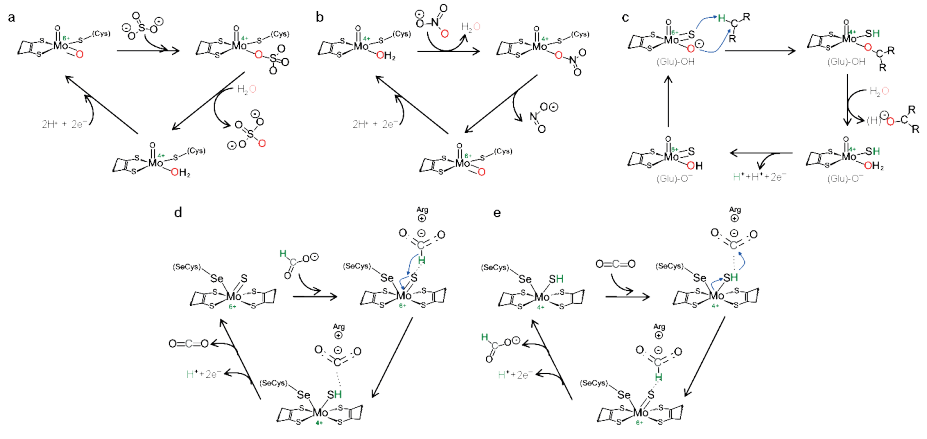
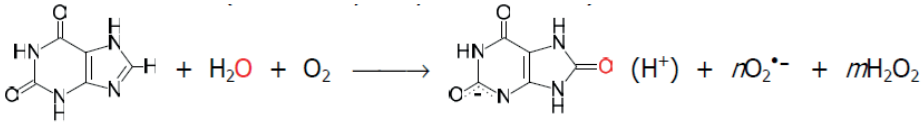


Figure 3. Simplified mechanistic proposals for the reactions catalysed by selected enzymes. Reactions were chosen to highlight the key mechanistic features of these enzymes. (a) Reaction of sulfite oxidase-catalysed sulfite oxidation to sulfate (sulfite oxidase family – oxygen atom insertion). (b) Reaction of eukaryotic nitrate reductase-catalysed nitrate reduction to nitrite (sulfite oxidase family – oxygen atom abstraction). (c) Reaction of xanthine oxidase-catalysed xanthine hydroxylation to urate (xanthine oxidase family – oxygen atom insertion with hydrogen atom abstraction). (d) and (e) Reaction of formate dehydrogenase-catalysed formate oxidation and carbon dioxide reduction, respectively (dimethylsulfoxide reductase oxidase family – hydrogen atom abstraction and insertion respectively; note: the active site of these enzymes can harbour a selenocysteine or a cysteine residue – for simplicity, only the former case is represented). See text for details.

2.2. Xanthine Oxidase Family

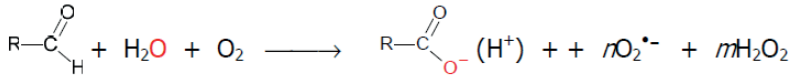
The XO family enzymes hold a molybdenum-containing active site that is closely related with the one of the SO family, but with the distinctive feature of not having the molybdenum directly coordinated to the protein (Figure 2) [9-11,78]. These enzymes, instead, harbour one equatorial, catalytically labile, -OH group plus one terminal sulfo (Mo=S) or seleno (Mo=Se) group. This family comprises the prototype mammalian XO (eq. 3) [47,78-94], mammalian aldehyde oxidase (AO) (eq. 4) [94-117], bacterial aldehyde oxidoreductase (eq. 5) [118-124] or hydroxybenzoyl-CoA reductase (eq. 6) [125-128].

mammalian xanthine oxidase (xanthine hydroxylation to urate):



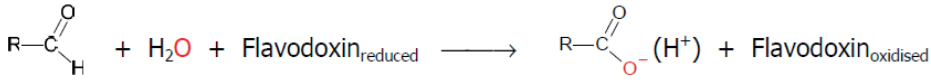
(3)

mammalian aldehyde oxidase (aldehyde hydroxylation to carboxylate):



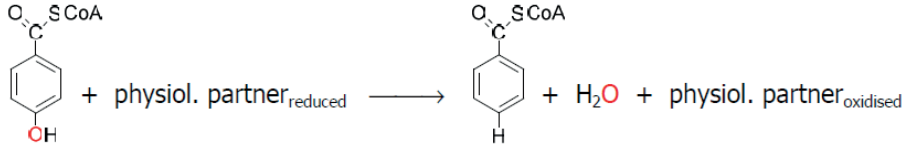
(4)

bacterial aldehyde oxidoreductase (aldehyde hydroxylation to carboxylate):



(5)

bacterial hydroxybenzoyl-CoA reductase (hydroxybenzoyl-CoA dehydroxylation to benzoyl-CoA):



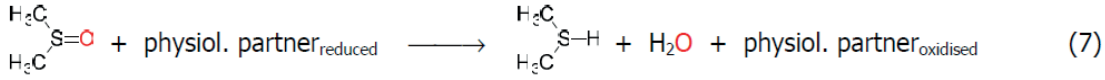
(6)

The enzymes from this family typically catalyse the hydroxylation of a C-H bond in aromatic heterocyclic compounds (eq. 3) and aldehydes (eq. 4, 5), as well as, the reverse reaction of dehydroxylation (eq. 6). During the hydroxylation catalysis -as exemplified by the XO catalysis [47,79,80,82,83,86,88,91,129--136]- the terminal sulfo (or seleno) group of the oxidised molybdenum centre, $Mo^{6+}=S_{equatorial}$ (or $Mo^{6+}=Se_{equatorial}$) is key to activate the C-H bond to be cleaved, acting as a hydride acceptor, while the equatorial labile oxygen acts as the direct oxygen donor (Figure 3-c). In the reverse dehydroxylation reaction (eq. 6), it is the reduced Mo^{4+}-$SH_{equatorial}$ that acts as the direct hydride donor [127,128]. As described for the SO family, water is the ultimate source of the oxygen atom incorporated into the hydroxylated product (follow the red oxygen atoms in eq. 3 to 6 and in Figure 3-c) and the molybdenum ion is re-oxidised via electron transfer from the physiological partner.

2.3. Dimethylsulfoxide Reductase Family

The DMSOR family enzymes are characterised by having an active site that holds a molybdenum ion coordinated by four sulfur atoms of two pyranopterin cofactor molecules; the molybdenum coordination sphere is completed by oxygen and/or sulfur and/or selenium atoms in a diversity of combinations, in a trigonal prismatic geometry (Figure 2) [9-11,137]. Most often, the molybdenum ion is directly coordinated to the polypeptide chain, as the SO family enzymes. Yet, the DMSOR family enzymes display a remarkable diversity of coordinating residue side chains, including not only cysteine, but also selenocysteine, aspartate and serine residues. In addition, and similar to the enzymes of the XO and SO families, the active site of these enzymes can also have terminal sulfo and oxo groups. This family is the most diverse one of the molybdoenzymes, comprising only prokaryotic enzymes, such as the prototype DMSOR (eq. 7) [137-147], three different types of NaR enzymes (dissimilatory membrane-bound enzymes, dissimilatory periplasmatic enzymes and assimilatory cytoplasmatic enzymes) [148-160], arsenite oxidase (eq. 8) [161-164], formate dehydrogenases (FDH; eq. 9)) [165-192], polysulfide reductase (eq. 10) [193-197] and many other diverse enzymes [137,182,198-201].

bacterial dimethylsulfoxide reductase (dimethylsulfoxide reduction to dimethylsulfide):



(7)

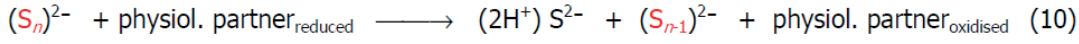
bacterial arsenite oxidase (arsenite oxidation to arsenate):

(8)

bacterial formate dehydrogenase (reversible formate oxidation to carbon dioxide):

(9)

bacterial polysulfide reductase (polysulfide reduction to sulfide):



(10)

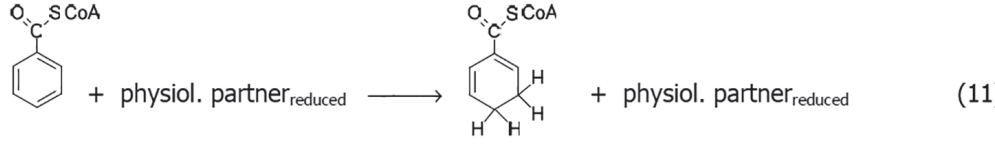
The enzymes from this family catalyse remarkably different reactions, including oxygen atom transfer, hydrogen atom transfer and sulfur atom transfer, as can be exemplified by the DMSOR-catalysed dimethylsulfoxide reduction to dimethylsulfide (eq. 7) or the NaR-catalysed nitrate reduction to nitrite and the arsenite oxidase (eq. 8) (for oxygen transfer), the FDH-catalysed reversible formate oxidation to carbon dioxide (eq. 9) (for hydrogen transfer) and the polysulfide reductase-catalysed polysulfide reduction to sulfide (eq. 10) (for sulfur transfer). This extraordinary diverse chemical reactivity is, as can be anticipated, matched by the diverse active site architecture displayed by these enzymes. Hence, both arsenite oxidase and DMSOR reductase, enzymes that catalyse oxygen atom insertion (eq. 8) and abstraction (eq. 7), respectively, hold one terminal oxo group. During arsenite oxidase-catalysed oxygen insertion, it is the labile oxo group of the oxidised centre, Mo^{6+}=O, that acts as the direct oxygen donor [161-164] -similarly to the SO catalysis (Figure 3-a). Conversely, during DMSOR-catalysed oxygen

abstraction, it is the reduced Mo^{4+} centre, whose catalytically labile oxo group was eliminated in the form of a water molecule, that acts as the direct oxygen acceptor [202-205] -in parallel to the NaR catalysis (Figure 3-b). As in SO and XO family enzymes, the ultimate oxygen atom donor or acceptor in these two DMSOR family enzymes is a water molecule and the molybdenum ion is re-oxidised or re-reduced (respectively) via electron transfer from the physiological partner. The mechanistic strategy proposed for the sulfur atom abstraction catalysed by the polysulfide reductase, an enzyme holding also a terminal oxo group, is comparable to the DMSOR one, with the reduced Mo^{4+} centre, whose catalytically labile oxo group was eliminated in the form of a water molecule, acting as the sulfur atom acceptor [193,194,197]. In contrast, FDH, that catalyses the reversible hydrogen atom transfer (eq. 9), holds one terminal sulfo group. During catalysis, it is the terminal sulfo group of the FDH oxidised molybdenum centre, Mo^{6+}=S, that acts as hydride acceptor, while the reduced centre, Mo^{4+}-SH, acts as hydride donor (Figures 3-d and 3-e) [185-192] -comparable to the XO family enzymes catalysis (Figure 3-c).

2.4. Tungstoenzymes Family

The active site of this enzymes family is similar to the one of the DMSOR family of molybdoenzymes. The tungstoenzymes harbour one tungsten ion, in the place of the molybdenum, coordinated by four sulfur atoms of two pyranopterin cofactor molecules, plus oxygen and/or sulfur and/or selenium atoms, in a diversity of arrangements, in a trigonal prismatic geometry or in a distorted octahedral coordination geometry (Figure 2) [4,10,206]. This family comprises prokaryotic enzymes of diverse functions, including benzoyl-CoA reductase (eq. 11) [207-211], aldehyde oxidoreductase (enzyme homologous to the one from the XO family (eq. 5)) [212-216], FDH (enzyme homologous to the one from the DMSOR family (eq. 9)) [14,217-233], among several other enzymes. Matching the active site structural similarity with the DMSOR family enzymes, the reaction mechanism of tungstoenzymes is, in general, believed to be similar to the ones of DMSOR family enzymes [207,210,234-239].

bacterial benzoyl-CoA reductase (benzoyl-CoA reduction to cyclohexa-1,5-diene-1-carboxyl-CoA)



(11)

2.5. Nitrogenase Family

This family only comprises the molybdenum/iron-dependent nitrogenase. (*It should be noted that, besides the molybdenum/iron-dependent enzyme, there are also other similar nitrogenases that depend on vanadium/iron and only on iron; those enzymes, however, exhibit lower catalytic efficiencies and products stoichiometry [240--257]. The molybdenum-independent nitrogenases will not be herein discussed and the term "nitrogenase" will be used to refer only to the molybdenum/iron-dependent enzyme.*)The nitrogenase active site holds a complex, high-nuclearity centre, comprising one molybdenum and seven iron ions (Figure 2) [10,17-26,258-269]. This unique centre, present only in the nitrogenase, can be viewed as two cubes, with a common corner made of a carbide ion (C^{4-}) ([$Fe_4S_3C_{common}$] and [$MoFe_3S_3C_{common}$]) and bridged by three additional sulfur

ions; besides the three sulfur ions from the "cube", the molybdenum ion is further coordinated by one homocitrate ion (Figure 2).The nitrogenase enzymes are known for long, with the first mention to the biological dinitrogen fixation occurring in the middle of the nineteenth century [270]. These bacterial enzymes catalyse the remarkable reaction of dinitrogen reduction (fixation) to ammonium, with the cleavage of the exceptionally stable N≡N triple bond (eq. 12), a key step in the global biogeochemical cycle of nitrogen (Figure 4).

bacterial nitrogenase (dinitrogen reduction to ammonium):

$$N{\equiv}N + 8H^+ + 8e^- + 16MgATP \longrightarrow 2NH_3 + H_2 + 16MgADP + 16P_i \qquad (12)$$

Unravelling the mechanism by which the triple bond of dinitrogen is cleaved by nitrogenase has been a highly challenging task. While the structure of the nitrogenase proteins and of their metal centres is presently well known, there are still many uncertainties regarding the reaction mechanism. The most recent mechanistic proposals suggest that the activation and reduction of dinitrogen depends on the prior reductive elimination of iron-based hydrides, in the form of dihydrogen [256,271-275]. This proposal is based on the fact that the formation of dihydrogen is obligatory for the dinitrogen reduction to occur (eq. 12) and this mechanistic strategy would allow the enzyme to store the necessary high reducing power to cleave the dinitrogen bond. The molybdenum ion, suggested to be present in an unprecedented 3+ oxidation state (Mo^{3+}) [276,277], is thought to be essential to tune the centre electronic structure to modulate its reduction potential and/or to facilitate the substrate binding or protonation [278-280].

3. BIOTECHNOLOGICAL APPLICATIONS AND HUMAN HEALTH IMPLICATIONS

3.1. Carbon Footprint and Atmospheric Carbon Dioxide Utilization – Formate dehydrogenases

The global energy demand and the present high dependence on fossil fuels have caused the increase in the atmospheric carbon dioxide concentration for the highest values since records began [281]. Due to its significant green-house effect, carbon dioxide rise is responsible for large and unpredictable impacts on the world climate, besides being responsible for ocean warming and acidification (its major sink) [282,283]. While some authors defend that these alterations are no longer reversible, the carbon dioxide emissions must be greatly decelerate. Future energy sources should be carbon-neutral and based on solar, wind and geothermal energy and new methods to store, transport and use "on demand" the energy from these sources must be developed.

One solution to control the actual "carbon dioxide crisis" (alongside all other efforts to reduce emissions) would be the use of a renewable, low (or zero) carbon-dependent energy, to scavenge the atmospheric carbon dioxide and convert it back into fuels [284]. Certainly, the carbon dioxide abundance makes it an attractive source for the production of fuels and other synthetic added-value chemicals and there is a huge interest in the development of strategies to efficiently scavenge and activate the atmospheric carbon dioxide [281,285-288]. One of the major challenges is the thermodynamic and kinetic stability of the carbon dioxide molecule that makes its laboratory/industrial activation a very difficult task. Living organisms, on the contrary, have found several different strategies to activate and use carbon dioxide [289-292], applying different chemical approaches, with specific enzymes, to cleave the C-O bond

(reduction to carbon monoxide) and form C-C (*e.g.*, addition to ribulose 1,5-bisphosphate) and C-H bonds (reduction to formate) [288-294].

Understanding the chemical strategies already tested and proved by Nature would certainly contribute to the development of new efficient biocatalysts for the atmospheric carbon dioxide utilization [281,288,295-301]. In this respect, the utilization of molybdenum- and tungsten-containing FDH enzymes (eq. 9; sections 2.3. and 2.4.) is most promising. FDH confers to the future biocatalyst specificity, selectivity and efficiency: only carbon dioxide is consumed, only one product, formate, is formed (no need for further purification procedures) and the reaction proceeds at actually mild conditions of temperature, pressure and pH (ambient temperature and pressure and neutral pH). The carbon dioxide reaction product, formate, is an interesting compound for several reasons: it is the first (and stable) intermediate in the reduction of carbon dioxide to methanol or methane; it is used as a chemical building block in industry; it is a viable energy source, easier to store and transport than dihydrogen (formate and dihydrogen are oxidised at similar potentials) and fuel cells that use formate are already being developed. All these positive outcomes make worthwhile the actual investigation aiming to develop more efficient (bio) catalysts to convert carbon dioxide into formate using FDH enzymes.

3.2. Environment and Food: A World Wide Problem

3.2.1. Nitrate Bioremediation – Nitrate Reductases

The exponential rise of the human population and the consequent demand of food have lead to a global increase in intensive agricultural practices, with the use of massive amounts of nitrogen-based fertilisers [302]. The overload of soils with nitrate and ammonium contaminates not only the land, but also the fresh surface, ground waters and marine waters, causing a cascade of environmental and human health problems. The highly soluble nitrate, *e.g.*, can pollute the aquifers that supply drinking water and contaminate fish and shellfish cultures; together with phosphorous-containing fertilisers, can lead to the eutrophication of aquatic ecosystems, with its concomitant destruction [303,304]. Moreover, the long--range transport of these highly soluble nitrogen-based fertilisers expands the environmental and human health problems far from the original local borders.

One solution to mitigate the actual nitrate contamination would be the introduction of key removal steps in waste water treatment plants. Regarding the nitrate removal, the utilisation of molybdenum--dependent NaR enzymes (eq. 2), with their inherent specificity, selectivity and efficiency, would be ideal. The subsequent reduction of nitrite, that is toxic as nitrate, would be achieved by other specific enzymes.

3.2.2. Nitrogen Fixation – Nitrogenase

As highlighted above, the ever growing demand of food have lead to a global increase in intensive agricultural practices, with the use of massive amounts of nitrogen-based fertilisers. In our modern society, the factor that most frequently limits agricultural production is the nitrogen availability and nearly half of the existing human population could not be fed without the use of industrially produced nitrogen fertilisers [305].

The ammonium production is achieved by the well known Haber-Bosch process, a heterogeneous catalytic process that operates at high temperatures and pressures to reduce dinitrogen to ammonium

[306-308]. This industrial process, with its harsh conditions, is neither energetically efficient nor environmentally responsible. Understanding the biological dinitrogen reduction to ammonium (Figure 4, eq. 12, section 2.5) [48,309-312] could, thus, help us in the development of improved, "greener", environmentally friend, synthetic catalysts or of genetically modified organisms with the capacity to fix their own nitrogen. Undoubtedly, the dinitrogen abundance in the atmosphere (where it accounts for 78.1% of the entire volume) makes it an attractive source for the production of ammonium. In fact, prior to the invention of the Haber–Bosch process, the organisms that fixate dinitrogen (some free-living archea and bacteria, *e.g.*, *Azotobacter*, and symbiotic bacteria, *e.g.*, *Rhizobium*) were responsible for 95% of fixed bioavailable nitrogen [17,267,268,313-322].

The nitrogenase enzymes are known for long, with the first mention to the biological dinitrogen fixation occurring in the middle of the nineteenth century [270]. Presently, due to the increasing awareness of the environmental issues behind the need to "feed the world", there is an intense research around nitrogenases and new developments are foreseen -and much needed- for the near future.

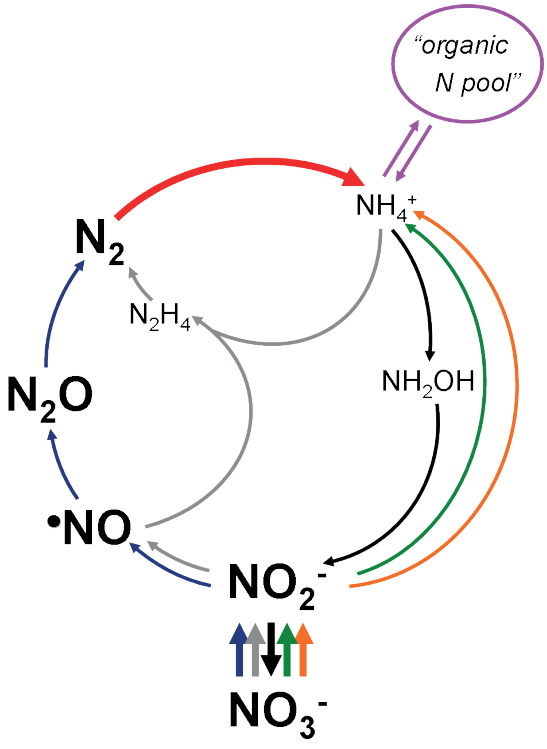


Figure 4. Biogeochemical cycle of nitrogen. Dinitrogen fixation, red arrow; dissimilatory nitrate reduction to ammonium, green arrows; assimilatory ammonification, orange arrows; denitrification, blue arrows; nitrification, black arrows; anaerobic ammonium oxidation, grey arrows; "organic nitrogen pool", pink arrows. The molybdenum-dependent steps are highlighted with thicker lines.

4. HUMAN HEALTH IMPLICATIONS

Molybdenum plays several key roles in humans, even though we only hold four molybdenum-containing enzymes, XO, AO (XO family), SO and the newly identified mitochondrial amidoxime reducing component (mARC) (SO family).

One striking molybdenum role occurs in the purine metabolism, whose dependence on molybdenum is common to almost all forms of life, with only a very small number of organisms use other mechanisms to oxidise xanthine, *e.g.*, some yeasts [1-3,323-326]). In humans, XO is involved in the sequential hydroxylation of hypoxanthine and xanthine into urate (section 2.2.) and due to this activity, XO is one of the targets for therapy of hyperuricaemia and gout [327,328]. In humans, urate is the end-product of purine catabolism (*in some other animals, urate is further oxidised to allantoin, by uricase [329-331]*) and a high blood urate concentration is a risk factor for gout [332], kidney diseases [333], endothelial dysfunction [334-337] and other diseases related to metabolic syndromes [338]. To control the urate concentration, clinicians use XO inhibitors (and/or drugs to increase urate secretion) [339]. The efficacy of XO inhibition as a strategy for prevention of gout attack is well established and the XO inhibitor allopurinol (an isomer of hypoxanthine) has been used to treat gout for more than 40 years.

The human AO is key to handle aldehydes/carboxylates and heterocyclic compounds and has been suggested to participate in the metabolism of neurotransmitters and in the formation of retinoic acid, a metabolite of retinol (vitamin A) that is involved in growth and development [96-99,106,108-110,114].

Furthermore, due to the XO and AO ability to generate reactive oxygen species (ROS) under normoxia (eq. 3 and 4), these enzymes have been implicated in signalling pathways and, most significantly, in some ROS-mediated diseases, when their ROS production becomes imbalanced; these include the well known ischaemia-reperfusion injury [340-345] and other cardiovascular and related diseases [84,87,112,113,116,117, 346-363], which are major health concerns of our western society. The recently identified ability to generate signalling nitric oxide under hypoxia, from nitrite (eq. 13), establishes further links between the XO and AO and human diseases, such as hypertension, endothelial dysfunction and other conditions associated with a reduced nitric oxide bioactivity [92,94,364-375].

$$NO_2^- + \text{physiol. partner}_{\text{reduced}} \longrightarrow 2\,{}^{\bullet}NO + \text{physiol. partner}_{\text{oxidised}} \qquad (13)$$

In addition, both XO and AO, together with mARC, are key players in the metabolism of xenobiotic compounds. Besides the mentioned "classic" substrates (above and section 2.2), XO and AO catalyse the oxidation (mostly hydroxylation) of a wide variety of carbon centres of heterocyclic aromatic compounds, namely substituted pyrimidines, purines, pteridines, and related compounds, and of compounds containing aldehyde groups; XO and AO have also a broad range of reducing substrates, being able to catalyze the reduction of several *S*-oxides, *N*-oxides and other unrelated compounds [84,87,91,96-99,100,102,104,106-111,114,113,117,351,376-386]. The mARC enzyme, in its turn, is also able to catalyse the reduction of a wide variety of *N*-hydroxylated compounds [375,387-404]. This unusual substrate promiscuity makes these three enzymes relevant players in the metabolism of xenobiotic compounds, in parallel with the well known cytochrome P_{450}-containing isoenzymes system [405-410]. Some examples of their toxicological and pharmacological importance can be found in the deleterious activation of azo

dyes (used as colorants in food and cosmetics [411,412]), the beneficial activation of anti-neoplasic [413,414] and anti-hypertensive drugs [415] or the redundant drug deactivation [99,116,416-422]. The XO, AO and mARC promiscuity has, in fact, been a serious problem for drug development, since many drugs designed to resist other liver metabolising enzymes (namely the cytochrome P_{450}-containing isoenzymes system) are often oxidised/reduced by one of these enzymes. The resulting reduced active drug bioavailability (consequence of the drug metabolism/inactivation by these enzymes) and consequent decreased/abolished therapeutic efficacy is, actually, causing many clinical trials to fail.

The high impact of molybdoenzymes in human metabolism and in a wide range of human pathological conditions is clearly evident from the above discussion on the XO, AO and mARC roles. Yet, the most striking role of molybdenum in humans is certainly provided by SO, whose deficiency is an actual life threat [423-430]. Sulfite (derived not only from the catabolism of sulfur-containing amino acids, but also from sulfur-containing xenobiotic compounds) is toxic and its controlled oxidation to sulfate, by SO (eq. 1), is critical for survival. Confirming this vital role are the severe neonatal neurological problems, including attenuated brain growth, mental retardation, seizures and early death, caused by human SO deficiency. The SO deficiency, when caused by the inability to synthesise the pyranopterin cofactor that holds the molybdenum ion (Figure 2; and not by protein mutation (*e.g.* [431])), can be treated with the continuous administration of the cofactor produced synthetically [429,430].

5. CONCLUDING REMARKS

In living organisms, molybdenum and tungsten are found in the active site of enzymes that catalyse redox reactions. Some of these reactions constitute key steps of the global biogeochemical cycles of nitrogen, carbon and sulfur. The molybdenum participation in the nitrogen cycle is of particular relevance: nitrogen fixation and photosynthesis are two of the most important processes for Life on Earth and the dinitrogen reduction is highly dependent on molybdenum. Remarkably, molybdenum has also a high impact in human metabolism, being involved in a wide range of human pathological conditions. Moreover, the utilisation of molybdenum- and tungsten-containing enzymes is highly promising for solving some of the present humankind's problems in the fields of environment, agriculture and energy.

ACKNOWLEDGEMENT

This work was supported by the Associate Laboratory for Green Chemistry- LAQV, which is financed by national funds from Fundacão para a Ciência e a Tecnologia, MCTES (FCT/MCTES; UID/QUI/50006/2019). LBM thanks to FCT/MCTES, for the CEEC-Individual 2017 Program Contract.

(Comunicação apresentada à Classe de Ciências
na sessão de 6 de dezembro de 2018)

REFERENCES

(1) Zhang, Y., Gladyshev, V.N., J. Mol. Biol. 2008, 379, 881.
(2) Zhang, Y., Rump, S., Gladyshev, V. N., Coord. Chem. Rev. 2011, 255, 1206.
(3) Gladyshev, V.N., Zhang, Y., Abundance, Ubiquity and Evolution of Molybdoenzymes. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 2, 81-99.
(4) Johnson, M.K., Rees, D.C., Adams, M.W.W., Chem. Rev. 1996, 96, 2817.
(5) Hille, R., Chem. Rev. 1996, 96, 2757.
(6) Hille, R., Trends Biochem. Sci. 2002, 27, 360.
(7) Hille, R., Mendel, R., Coord. Chem. Rev. 2011, 255, 991.
(8) Hille, R., Dalton Trans. 2013, 42, 3029.
(9) Hille, R., Hall, J., Basu, P., Chem. Rev. 2014, 114, 3963.
(10) Maia, L., Moura, I., Moura, J.J.G., Molybdenum and Tungsten-Containing Enzymes: An Overview. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 1, 1-80.
(11) Maia, L., Moura, J.J.G., Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, Elsevier, 2018, 1-19.
(12) Kletzin, A., Adams, M.W., FEMS Microbiol. Rev. 1996, 18, 5.
(13) Anbar, A.D., Science 2008, 322, 1481.
(14) Andreesen, J.R., Makdessi. M., Ann. N. Y. Acad. Sci., 2008, 1125, 215.
(15) Hagen, W.R., Tungsten-Containing Enzymes. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 10, 313-342.
(16) Source: http://www.webelements.com.
(17) Wiig, J. A., Hu, Y., Lee, C. C., Ribbe, M. W., Science 2012, 337, 1672.
(18) Hoffman, B. M., Lukoyanov, D., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Acc. Chem. Res. 2013, 46, 587.
(19) Bjornsson, R., Lima, F.A., Spatzal, T., Weyhermueller, T., Glatzel, P., Einsle, O., Neese, F., DeBeer, S., Chem. Sci. 2014, 5, 3096.
(20) Spatzal, T., Perez, K.A., Einsle, O., Howard, J.B., Rees, D.C., Science 2014, 345, 1620.
(21) Bjornsson, R., Neese, F., Schrock, R.R., Einsle, O., DeBeer, S., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 447.
(22) Hu, Y., Ribbe, M.W., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 435.
(23) Hu, Y., Ribbe, M.W., Angew Chem. Int. Ed. Engl. 2016, 55, 8216.
(24) Sickerman, N.S., Rettberg, L.A., Lee, C.C., Hu, Y., Ribbe, M.W., Essays Biochem. 2017, 61, 271.
(25) Seefeldt, L.C., Dean, D.R., Hoffman, B.M., Nitrogenase Mechanism. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 8, 274-296.
(26) Seefeldt, L.C., Peters, J.W., Beratan, D.N., Bothner, B., Minteer, S.D., Raugei, S., Hoffman, B.M., Curr. Opin. Chem. Biol. 2018, 47, 54.
(27) Kuypers, M.M.M., Marchant, H.K., Kartal, B., Nat. Rev. Microbiol. 2018, 16, 263.
(28) Kappler, U., Schwarz, G., The sulfite Oxidase Family of Molybdenum Enzymes. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 7, 240-273.
(29) Griffith, O.W., Methods Enzymol. 1987, 143, 366.
(30) Kisker, C., Schindelin, H., Pacheco, A., Wehbi, W. A., Garrett, R. M., Rajagopalan, K. V., Enemark, J. H., Rees, D. C., Cell 1997, 91, 973.
(31) Pacheco, A., Hazzard, J.T., Tollin, G., Enemark, J.H., J. Biol. Inorg. Chem. 1999, 4, 390.
(32) Feng, C.J., Kedia, R.V., Hazzard, J.T., Hurley, J.K., Tollin, G., Enemark, J.H., Biochemistry 2002, 41, 5816.
(33) Johnson-Winters, K., Nordstrom, A.R., Emesh, S., Astashkin, A.V., Rajapakshe, A., Berry, R.E., Tollin, G., Enemark, J.H., Biochemistry 2010, 49, 1290.
(34) Myers, J.D., Kelly, D.J., Microbiology 2005, 151, 233.
(35) Kappler, U., Bailey, S., J. Biol. Chem. 2005, 280, 24999.
(36) D'Errico, G., Di Salle, A., La Cara, F., Rossi, M., Cannio, R., J. Bacteriol. 2006, 188, 694.
(37) Denger, K., Weinitschke, S., Smits, T.H.M., Schleheck, D., Cook, A.M., Microbiology 2008, 154, 256.
(38) Utesch, T., Mroginski, M.A., J. Phys. Chem. Lett. 2010, 1, 2159.
(39) Kappler, U., Biochim. Biophys. Acta 2011, 1807, 1.
(40) Lu, G. G., Campbell, W. H., Schneider, G., Lindqvist, Y., Structure 1994, 2, 809.

(41) Crawford, N. M., Plant Cell 1995, 7, 859.
(42) Huber, S. C., Bachmann, M., Huber, J. L., Trends Plant Sci. 1996, 1, 432.
(43) Campbell, E. H., Annu. Rev. Plant Mol. Biol. 1999, 50, 277.
(44) Stitt, M., Curr. Opin. Plant Biol. 1999, 2, 178.
(45) Fischer, K., Barbier, G. G., Hecht, H. J., Mendel, R. R., Campbell, W. H., Schwarz, G., Plant Cell 2005, 17, 1167.
(46) Solomonson, L. P., Barber, M. J., Annu. Rev. Plant Mol. Biol. 1990, 41, 225.
(47) Hille, R., Nishino, T., Bittner, F., Coord. Chem. Rev. 2011, 255, 1179.
(48) Maia, L.B., Moura, J.J.G., Chem. Rev. 2014, 114, 5273.
(49) Moura, I., Maia, L., Pauleta, S. R., Moura, J.J.G., A Bird's-Eye View of Denitrification in Relation to the Nitrogen Cycle. In Metalloenzymes in Denitrification: Applications and Environmental Impacts, Moura, I., Moura, J.J.G., Pauleta, S.R. and Maia, L., The Royal Society of Chemistry: Camb, 2017, Chapter 17, pp 1-10.
(50) Loschi, L., Brokx, S.J., Hills, T.L., Zhang, G., Bertero, M.G., Lovering, A.L., Weiner, J.H., Strynadka, N.C.J., J. Biol. Chem. 2004, 279, 50391.
(51) Havemeyer, A., Bittner, F., Wollers, S., Mendel, R., Kunze, T., Clement, B., J. Biol. Chem. 2006, 281, 34796.
(52) Feng, C., Tollin, G., Enemark, J.H., Biochim. Biophys. Acta 2007, 1774, 527.
(53) Havemeyer, A., Grünewald, S., Wahl, B., Bittner, F., Mendel, R., Erdélyi, P., Fischer, J., Clement, B., Drug Metab. Dispos. 2010, 38, 1917.
(54) Havemeyer, A., Lang, J., Clement, B., Drug Metab. Rev. 2011, 43, 524.
(55) Krompholz, N., Krischkowski, C., Reichmann, D., Garbe-Schönberg, D., Mendel, R. R., Bittner, F., Clement, B., Havemeyer, A., Chem. Res. Toxicol. 2012, 25, 2443.
(56) Giles, L.J., Ruppelt, C., Yang, J., Mendel, R.R., Bittner, F., Kirk, M.L., Inorg. Chem. 2014, 53, 9460.
(57) Jakobs, H.H., Danilo Froriep, D., Havemeyer, A., Mendel, R.R., Bittner, F., Clement, B., ChemMedChem 2014, 9, 2381.
(58) Sparacino-Watkins, C.E., Tejero, J., Sun, B., Gauthier, M.C., Thomas, J., Ragireddy, V., Merchant, B.A., Wang, J., Azarov, I., Basu, P., Gladwin, M.T., J. Biol. Chem. 2014, 289, 10345.
(59) Kappler, U., Enemark, J.H., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 253.
(60) Ott, G., Havemeyer, A., Clement, B., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 265.
(61) Tejada-Jimenez, M., Chamizo-Ampudia, A., Calatrava, V., Galvan, A., Fernandez, E., Llamas, A., Molecules 2018, 23-3287.
(62) Kubitza, C., Bittner, F., Ginsel, C., Havemeyer, A., Clement, B., Scheidig, A.J., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2018, 115, 11958.
(63) Hille, R., Biochim. Biophys. Acta 1994, 1184, 143.
(64) Brody, M. S., Hille, R., Biochim. Biophys. Acta 1995, 1253, 133.
(65) Pietsch, M. A., Hall, M. B., Inorg. Chem. 1996, 35, 1273.
(66) McNaughton, R.L., Helton, M.E., Rubie, N., Kirk, M.L., Inorg. Chem. 2000, 39, 4386.
(67) Thomson, L. M., Hall, M. B., J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 3995.
(68) Peariso, K., McNaughton, R.L., Kirk, M.L., J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 9006.
(69) Wilson, H.L., Rajagopalan, K.V., J. Biol. Chem. 2004, 279, 15105.
(70) Kail, B. W., Perez, L. M., Zaric, S. D., Millar, A. J., Young, C. G., Hall, M. B., Basu, P., Chem. Eur. J. 2006, 12, 7501.
(71) Peariso, K., Helton, M.E., Duesler, E.N., Shadle, S.E., Kirk, M.L., Inorg. Chem. 2007, 46, 1259.
(72) Bailey, S., Rapson, T., Winters-Johnson, K., Astashkin, A.V., Enemark, J.H., Kappler, U., J. Biol. Chem. 2009, 284, 2053
(73) Gutteridge, S., Bray, R. C., Notton, B. A., Fido, R. J., Hewitt, E. J., Biochem. J. 1983, 213, 137.
(74) Cramer, S. P., Solomonson, L. P., Adams, M. W. W., Mortenson, L. E., J. Am. Chem. Soc. 1984, 106, 1467.
(75) Solomonson, L. P., Barber, M. J., Howard, W. D., Johnson, J. L., Rajagopalan, K. V., J. Biol. Chem. 1984, 259, 849.
(76) George, G. N., Mertens, J. A., Campbell, W. H., J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 9730.
(77) Campbell, W. H., Cell. Mol. Life Sci. 2001, 58, 194.
(78) Nishino, T., Okamoto, K., Leimkuhler, S., Enzymes of the Xanthino Oxidase Family. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 6, 192-239.
(79) Hille, R., Nishino, T., FASEB J. 1995, 9, 995.
(80) Enroth, C., Eger, B.T., Okamoto, K., Nishino, T., Nishino, T., Pai, E.F., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2000, 97, 10723.
(81) Kuwabara, Y. Nishino, T., Okamoto, K., Matsumura, T., Eger, B.T., Pai, E.F., Nishino, T., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2003 100, 8170.
(82) Okamoto, K., Matsumoto, K., Hille, R., Eger, B.T., Pai, E.F., Nishino, T., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2004, 101, 7931.
(83) Hille, R., Arch. Biochem. Biophys. 2005, 433, 107.

(84) Maia, L., Vala, A., Mira, L., Free Rad. Res. 2005, 39, 979.
(85) Nishino, T., Okamoto, K., Kawaguchi, Y., Hori, H., Matsumura, T., Eger, B.T., Pai, E.F., Nishino, T., J. Biol. Chem. 2005, 280, 24888.
(86) Hille, R., Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 1913.
(87) Maia, L., Duarte, R.O., Ponces-Freire, A., Moura, J.J.G., Mira, L., J. Biol. Inorg. Chem. 2007, 12, 777.
(88) Nishino, T., Okamoto, K., Eger, B. T., Pai, E. F., Nishino, T., FEBS J. 2008, 275, 3278.
(89) Tsujii, A., Nishino, T., Nucleosides Nucleotides Nucleic Acids 2008, 27, 881.
(90) Ishikita, H., Eger, B.T., Okamoto, K., Nishino, T., Pai, E.F., J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 999.
(91) Okamoto, K., Kusano, T., Nishino, T., Curr. Pharm. Des. 2013, 19, 2606.
(92) Maia, L., Pereira, V., Mira, L., Moura, J.J.G., Biochemistry 2015, 54, 685.
(93) Nishino, T., Okamoto, K., Kawaguchi, Y., Matsumura, T., Eger, B.T., Pai, E.F., Nishino, T., FEBS J. 2015, 282, 3075.
(94) Maia, L., Moura, J.J.G, Redox Biol. 2018, 19, 274.
(95) Turner, N. A., Doyle, W. A., Ventom, A. M., Bray, R. C., Eur. J. Biochem., 1995, 232, 646.
(96) Garattini, E., Fratelli, M., Terao, M., Cell Mol. Life Sci. 2008, 65, 1019.
(97) Pryde, D.C., Dalvie, D., Hu, Q., Jones, P., Obach, R.S., Tran, T.D., J. Med. Chem. 2010, 53, 8441.
(98) Swenson, T.L., Casida, J.E., Toxicol. Sci. 2013, 133, 22.
(99) Garattini, E., Terao, M., Drug Metab. Rev. 2011, 43, 374.
(100) Mahro, M., Coelho, C., Trincão, J., Rodrigues, D., Terao, M., Garattini, E., Saggu, M., Lendzian, F., Hildebrandt, P., Romão, M.J., Leimkühler, S., Drug Metab. Dispos. 2011, 39, 1939.
(101) Coelho, C., Mahro, M., Trincão, J., Carvalho, A.T.P., Ramos, M.J., Terao, M., Garattini, E., Leimkühler, S., Romão, M.J., J. Biol. Chem. 2012, 287, 40690.
(102) Garattini, E., Terao, M., Expert. Opin. Drug Metab. Toxicol. 2012, 8, 487.
(103) Hartmann, T., Terao, M., Garattini, E., Teutloff, C., Alfaro, J.F., Jones, J.P., Leimkühler, S., Drug. Metab. Dispos. 2012, 40, 856.
(104) Garattini, E., Terao, M., Expert. Opin. Drug. Discov. 2013, 8, 641.
(105) Kurosaki, M., Bolis, M., Fratelli, M., Barzago, M.M., Pattini, L., Perretta, G., Terao, M., Garattini, E., Cell. Mol. Life Sci. 2013, 70, 1807.
(106) Mu, P., Zheng, M., Xu, M., Zheng, Y., Tang, X., Wang, Y., Wu, K., Chen, Q., Wang, L., Deng, Y., Drug. Metab. Dispos. 2014, 42, 511.
(107) Cerqueira, N.M., Coelho, C., Brás, N.F., Fernandes, P.A., Garattini, E., Terao, M., Romão, M.J., Ramos, M.J.., J Biol Inorg Chem. 2015, 20, 209.
(108) Coelho, C., Foti, A., Hartmann, T., Santos-Silva, T., Leimkühler, S., Romão, M.J.., Nat Chem Biol. 2015, 11, 779.
(109) Terao, M., Barzago, M.M., Kurosaki, M., Fratelli, M., Bolis, M., Borsotti, A., Bigini, P., Micotti, E., Carli, M., Invernizzi, R.W., Bagnati, R., Passoni, A., Pastorelli, R., Brunelli, L., Toschi, I., Cesari, V., Sanoh, S., Garattini, E., Sci Rep. 2016, 26,30343.
(110) Terao, M., Romão, M.J., Leimkühler, S., Bolis, M., Fratelli, M., Coelho, C., Santos-Silva, T., Garattini E., Arch Toxicol. 2016, 90, 753.
(111) Paragas, E.M., Humphreys, S.C., Min, J., Joswig-Jones, C.A., Jones, J.P., Biochem. Pharmacol. 2017, 145, 210.
(112) Foti, A., Dorendorf, F., Leimkühler, S., PLoS One. 2017, 12, e0182061.
(113) Kücükgöze, G., Terao, M., Garattini, E., Leimkühler, S., Drug Metab. Dispos. 2017, 45, 947.
(114) Romão, M.J., Coelho, C., Santos-Silva, T., Foti, A., Terao, M., Garattini, E., Leimkühler, S., Curr. Opin. Chem. Biol. 2017, 37, 39.
(115) Kücükgöze, G., Leimkühler, S., PLoS One 2018, 13, e0191819.
(116) Mota, C., Coelho, C., Leimkühler, S., Garattini, E., Terao, M., Santos-Silva, T., Romão, M.J., Coord. Chem. Rev. 2018, 368, 35.
(117) Takaoka, N., Sanoh, S., Okuda, K., Kotake, Y., Sugahara, G., Yanagi, A., Ishida, Y., Tateno, C., Tayama, Y., Sugihara, K., Kitamura, S., Kurosaki, M., Terao, M., Garattini, E., Ohta, S., Biochem. Pharmacol. 2018, 154, 28.
(118) Romão, M. J., Archer, M., Moura, I., Moura, J. J. G., LeGall, J., Engh, R., Schneider, M., Hof, P., Huber, R., Science 1995, 270, 1170.
(119) Huber, R., Hof, P., Duarte, R.O., Moura, J.J.G., Moura, I., Liu, M-Y., Legall, J., Hille, R., Archer, M., Romão, M.J., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1996, 93, 8846.
(120) Rebelo, J., Macieira, S., Dias, J.M., Huber, R., Ascenso, C.S., Rusnak, F., Moura, J.J.G., Moura, I., Romão, M.J., J. Mol. Biol.

2000, 297, 135.
(121) Rebelo, J.M., Dias, J.M., Huber, R., Moura, J.J.G., Romão, M.J., J. Biol. Inorg. Chem. 2001, 6, 791.
(122) Krippahl, L., Palma, N., Moura, I., Moura, J.J.G., Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 19, 3835.
(123) Correia, H.D., Marangon, J., Brondino, C.D., Moura, J.J., Romão, M.J., González, P.J., Santos-Silva, T., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 219.
(124) Correia, M.A., Otrelo-Cardoso, A.R., Schwuchow, V., Sigfridsson, K.G., Haumann, M., Romão, M.J., Leimkühler, S., Santos--Silva, T., ACS Chem. Biol. 2016, 11, 2923.
(125) Gibson, J., Dispensa, M., Harwood, C. S., J. Bacteriol. 1997, 179, 634.
(126) Unciuleac, M., Warkentin, E., Page, C. C., Boll, M., Ermler, U., Structure 2004, 12, 2249.
(127) Boll, M., Biochim. Biophys. Acta 2005, 1707, 34.
(128) Johannes, J., Unciuleac, M., Friedrich, T., Warkentin, E., Ermler, U., Boll, M., Biochemistry 2008 47, 4964.
(129) Murray, K. N., Watson, J. G., Chaykin, S., J. Biol. Chem. 1966, 241, 4798.
(130) Hille, R., Sprecher, H., J. Biol. Chem. 1987, 262, 10914.
(131) Pauff, J.M., Zhang, J., Bell, C.E., Hille, R., J. Biol. Chem. 2008, 283, 4818.
(132) Cao, H., Hall, J., Hille, R., Biochemistry 2014, 53, 533.
(133) Majumdar, A., Dalton Trans. 2014, 43, 8990.
(134) Basu, P., Burgmayer, S.J.N., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 373.
(135) Hasenaka, Y., Okamura, T., Onitsuka, K., Dalton Trans. 2015, 44, 6260.
(136) Stein, B.W., Kirk, M.L., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 183.
(137) Magalon, A., Ceccaldi, P., Schoepp-Cothenet, B., The Prokaryotic Mo/W-bisPGD Family. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 5, 143-191.
(138) Sambasivarao, D., Scraba, D. G., Trieber, C., Weiner, J. H., J. Bacteriol. 1990, 172, 5938.
(139) Bastian, N. R., Kay, C. J., Barber, M. J., Rajagopalan, K. V., J. Biol. Chem. 1991, 266, 45.
(140) Weiner, J. H., Rothery, R. A., Sambasivarao, D., Trieber, C. A., Biochim. Biophys. Acta 1992, 1102, 1.
(141) Weiner, J. H., Shaw, G., Turner, R. J., Trieber, C. A., J. Biol. Chem. 1993, 268, 3238.
(142) Schindelin, H., Kisker, C., Hilton, J., Rajagopalan, K. V., Rees, D. C., Science 1996, 272, 1615.
(143) Schneider, F., Lowe, J., Huber, R., Schindelin, H., Kisker, C., Knablein, J., J. Mol. Biol. 1996, 263, 53.
(144) Li, H. K., Temple, C., Rajagopalan, K. V., Schindelin, H., J. Am. Chem. Soc. 2000, 122, 7673.
(145) Rothery, R. A., Kalra, N., Turner, R. J., Weiner, J. H., J. Mol. Microbiol. Biotechnol. 2002, 4, 133.
(146) Stanley, N. R., Sargent, F., Buchanan, G., Shi, J. R., Stewart, V., Palmer, T., Berks, B. C., Mol. Microbiol. 2002, 43, 1005.
(147) Pacheco, J., Niks, D., Hille, R., J. Biol. Inorg. Chem. 2018, 23, 295.
(148) Dias, J. M., Than, M. E., Humm, A., Huber, R., Bourenkov, G. P., Bartunik, H. D., Bursakov, S., Calvete, J., Caldeira, J., Carneiro, C., Moura, J. J. G., Moura, I., Romão, M. J., Structure 1999, 7, 65.
(149) Arnoux, P., Sabaty, M., Alric, J., Frangioni, B., Guigliarelli, B., Adriano, J. M., Pignol, D., Nat. Struct. Biol. 2003, 10, 928.
(150) Jormakka, M., Byrne, B., Iwata, S., Curr. Opin. Struct. Biol. 2003, 13, 418.
(151) Jepson, B.J.N., Anderson, L.J., Rubio, L.M., Taylor, C.J., Butler, C.S., Flores, E., Herrero, A., Butt, J.N., Richardson, D.J., J. Biol. Chem. 2004, 279, 32212.
(152) Jormakka, M., Richardson, D., Byrne, B., Iwata, S., Structure 2004, 12, 95.
(153) Bertero, M. G., Rothery, R. A., Boroumand, N., Palak, M., Blasco, F., Ginet, N., Weiner, J. H., Strynadka, N. C. J., J. Biol. Chem. 2005, 280, 14836.
(154) Coelho, C., Gonzalez, P.J., Trincão, J., Carvalho, A.L., Najmudin, S., Hettman, T., Dieckman, S., Moura, J.J.G., Moura, I., Romão, M.J., Acta Cryst. Sect. F 2007, 63, 516.
(155) Jepson, B. J. N., Mohan, S., Clarke, T. A., Gates, A. J., Cole, J. A., Butler, C. S., Butt, J. N., Hemmings, A. M., Richardson, D. J., J. Biol. Chem. 2007, 282, 6425.
(156) Najmudin, S., Gonzalez, P. J., Trincao, J., Coelho, C., Mukhopadhyay, A., Cerqueira, N., Romão, C. C., Moura, I., Moura, J. G., Brondino, C. D., Romão, M. J., J. Biol. Inorg. Chem. 2008, 13, 773.
(157) Coelho, C., Gonzalez, P. J., Moura, J. J. G., Moura, I., Trincao, J., Romão, M. J., J. Mol. Biol. 2011, 408, 932.
(158) Sparacino-Watkins, C., Stolzb, J.F., Basu, P., Chem. Soc. Rev. 2014, 43, 676.
(159) Rendon, J., Biaso, F., Ceccaldi, P., Toci, R., Seduk, F., Magalon, A., Guigliarelli, B., Grimaldi, S., Inorg. Chem. 2017, 56, 4422.
(160) Mintmier, B., McGarry, J.M., Sparacino-Watkins, C., Sallmen, J., Fischer-Schrader, K., Magalon, A., McCormick, J.R., Stolz, J.F., Schwarz, G., Bain, D.J., Basu, P., FEMS Microbiol. Lett. 2018, 365, DOI: 10.1093/femsle/fny151.

(161) Ellis, P.J., Conrads, T., Hille, R., Kuhn, P., Structure 2001, 9, 125.
(162) Conrads, T., Hemann, C., George, G.N., Pickering, I.J., Prince, R.C., Hille, R., J. Am. Chem. Soc. 2002, 124, 11276.
(163) Silver, S., Phung, L.T., Appl. Environ. Microbiol. 2005, 71, 599.
(164) Warelow, T.P., Oke, M., Schoepp-Cothenet, B., Dahl, J.U., Bruselat, N., Sivalingam, G.N., Leimkuhler, S., Thalassinos, K., Kappler, U., Naismith, J.H., Santini, J.M., PLoS One, 2013, 8, e72535.
(165) Zinoni, F., Birkmann, A., Stadtman, T.C., Böck, A., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1986, 83, 4650.
(166) Axley, M.J., Grahame, D.A., Stadtman, T.C., J. Biol. Chem. 1990, 265, 18213.
(167) Friedebold, J., Bowien, B., J. Bacteriol. 1993, 175, 4719.
(168) Friedebold, J., Mayer, F., Bill, E., Trautwein, A.X., Bowien, B., Biol. Chem. Hoppe Seyler 1995, 376, 561.
(169) Berks, B.C., Mol. Microbiol. 1996, 22, 393.
(170) Gladyshev, V.N., Boyington, J.C., Khangulov, S.V., Grahame, D.A., Stadtman, T.C., Sun, P.D., J. Biol. Chem. 1996, 271, 8095.
(171) Boyington, J. C., Gladyshev, V. N., Khangulov, S. V., Stadtman, T. C., Sun, P. D., Science 1997, 275, 1305.
(172) Costa, C., Teixeira, M., LeGall, J., Moura, J.J.G., Moura, I., J. Biol. Inorg. Chem. 1997, 2, 198.
(173) Oh, J. I., Bowien, B., J. Biol. Chem. 1998, 273, 26349.
(174) Sargent, F., Bogsch, E.G., Stanley, N.R., Wexler, M., Robinson, C., Berks, B.C., Palmer, T., EMBO J. 1998, 17, 3640.
(175) Sargent, F., Stanley, N.R., Berks, B.C., Palmer, T., J. Biol. Chem. 1999, 274, 36073.
(176) Blasco, F., Guigliarelli, B., Magalon, A., Asso, M., Giordano, G., Rothery, R. A., Cell. Mol. Life Sci. 2001, 58, 179.
(177) Jormakka, M., Tornroth, S., Abramson, J., Byrne, B., Iwata, S., Acta Crystallogr. D Biol. Crystallogr. 2002, 58, 160.
(178) Jormakka, M., Tornroth, S., Byrne, B., Iwata, S., Science 2002, 295, 1863.
(179) Raaijmakers, H. C. A., Romão, M. J., J. Biol. Inorg. Chem. 2006, 11, 849.
(180) Rivas, M., Gonzalez, P., Brondino, C.D., Moura, J.J.G., Moura, I., J. Inorg. Biol. 2007, 101, 1617.
(181) Thome, R., Gust, A., Toci, R., Mendel, R., Bittner, F., Magalon, A., Walburger, A., J. Biol. Chem. 2012, 287, 4671.
(182) Grimaldi, S., Schoepp-Cothenet, B., Ceccaldi, P., Guigliarelli, B., Magalon, A., Biochim. Biophys. Acta 2013, 1827, 1048.
(183) Hartmann, T., Leimkuhler, S., FEBS J. 2013, 280, 6083.
(184) Hartmann, T., Schwanhold, N., Leimkühler, S., Biochim. Bipohys. Acta 2014, 1854, 1090.
(185) Maia, L.B., Moura, J.J.G., Moura, I., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 287.
(186) Maia, L., Fonseca, L., Moura, I., Moura, J.J.G., J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 8834.
(187) Niks, D., Duvvuru, J., Escalona, M., Hille, R., J. Biol. Chem. 2016, 291, 1162.
(188) Maia, L., Moura, I., Moura, J.J.G., Inorg. Chim. Acta 2017, 455, 350.
(189) Yu, X., Niks, D., Mulchandani, A., Hille, R., J. Biol. Chem. 2017, 292, 16872.
(190) Dong, G., Ryde, U., J. Biol. Inorg. Chem. 2018, 23, 1243.
(191) Niks, D., Hille, R., Methods Enzymol. 2018, 613, 277.
(192) Niks, D., Hille, R., Protein Sci. 2019, 28, 111.
(193) Hedderich, R., Klimmek, O., Kroger, A., Dirmeier, R., Keller, M., Stetter, K. O., FEMS Microbiol. Rev., 1998, 22, 353.
(194) Dietrich, W., Klimmek, O., Eur. J. Biochem. 2002, 269, 1086.
(195) Prisner, T., Lyubenova, S., Atabay, Y., MacMillan, F., Kroger, A., Klimmek, O., J. Biol. Inorg. Chem. 2003, 8, 419.
(196) Nagarajan, K., Joshi, H. K., Chaudhury, P. K., Pal, K., Cooney, J. J. A., Enemark, J. H., Sarkar, S., Inorg. Chem. 2004, 43, 4532.
(197) Jormakka, M., Yokoyama, K., Yano, T., Tamakoshi, M., Akimoto, S., Shimamura, T., Curmi, P., Iwata, S., Nat. Struct. Mol. Biol. 2008, 15, 730.
(198) Schink, B., Arch. Microbiol. 1985, 142, 295.
(199) Messerschmidt, A., Niessen, H., Abt, D., Einsle, O., Schink, B., Kroneck, P.M., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2004, 101, 11571.
(200) Moura, J.J., Brondino, C.D., Trincao, J., Romão, M.J., J. Biol. Inorg. Chem. 2004, 9, 791.
(201) Rothery, R.A., Workun, G.J., Weiner, J.H., Biochim. Biophys. Acta 2008, 1778, 1897.
(202) Schultz, B. E., Hille, R., Holm, R. H., J. Am. Chem. Soc. 1995, 117, 827.
(203) George, G. N., Hilton, J., Rajagopalan, K. V., J. Am. Chem. Soc. 1996, 118, 1113.
(204) Garton, S. D., Hilton, J., Oku, H., Crouse, B. R., Rajagopalan, K. V., Johnson, M. K., J. Am. Chem. Soc. 1997, 119, 12906.
(205) George, G. N., Hilton, J., Temple, C., Prince, R. C., Rajagopalan, K. V., J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 1256.
(206) Hagen, W.R., Tungsten-Containing Enzymes. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 10, 313-342.
(207) Kung, J.W., Löffler, C., Dörner, K., Heintz, D., Gallien, S., Dorsselaer, A.V., Friedrich, T., Boll, M., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2009, 106, 17687.

(208) Kung, J.W., Baumann, S., von Bergen, M., Müller, M., Hagedoorn, P.L., Hagen, W.R., Boll, M., J. Am. Chem. Soc. 2010, 132, 9850.
(209) Boll, M., Löffler, C., Morris, B.E., Kung, J.W., Environ. Microbiol. 2014, 16, 612.
(210) Weinert, T., Huwiler, S.G., Kung, J.W., Weidenweber, S., Hellwig, P., Stärk, H.J., Biskup, T., Weber, S., Cotelesage, J.J.H., George, G.N.m Ermler, U., Boll, M., Nat. Chem. Biol. 2015, 11, 586.
(211) Huwiler, S.G., Löffler, C., Anselmann, S.E.L., Stärk, H.J., von Bergen, M., Flechsler, J., Rachel, R., Boll, M., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2019, doi: 10.1073/pnas.1819636116.
(212) Chan, M. K., Mukund, S., Kletzin, A., Adams, M. W. W., Rees, D. C., Science 1995, 267, 1463.
(213) Hu, Y., Faham, S., Roy, R., Adams, M.W.W., Rees, D.C., J. Mol. Biol. 1999, 286, 899.
(214) Roy, R., Mukund, S., Shut, G.J., Dunn, D.M., Weiss, R., Adams, M.W.W., J. Bacteriol. 1999, 181, 1171.
(215) Bol, E., Bevers, L.E., Hagedoorn, P.L., Hagen, W.R., J. Biol. Inorg. Chem. 2006, 11, 999.
(216) Arndt, F., Schmitt, G., Winiarska, A., Saft, M., Seubert, A., Kahnt, J., Heider, J., Front. Microbiol. 2019, 10, 71.
(217) Andreesen, J.R., Ljungdahl, L.G., J. Bacteriol. 1973, 116, 867.
(218) Andreesen, J.R., Ljungdahl, L.G., J. Bacteriol. 1975, 120, 6.
(219) Leonhardt, U., Andreesen, J.R., Arch. Microbiol. 1977, 115, 277.
(220) Ljungdahl, L. G., Andreesen, J. R., FEBS Lett. 1975, 54, 279.
(221) Deaton, J.C., Solomon, E.I., Watt, G.D., Wetherbee, P.J., Durfor, C.N., Biochem. Biophys. Res. Commun. 1987, 149, 424.
(222) Almendra, M.J., Brondino, C.D., Gavel, O., Pereira, A.S., Tavares, P., Bursakov, S., Duarte, R., Caldeira, J., Moura, J.J.G., Moura, I., Biochemistry 1999, 38, 16366.
(223) Yamamoto, I., Saiki, T., Liu, S.-M., Ljungdahl, L. G., J. Biol. Chem. 1983, 258, 1826.
(224) Raaijmakers, H., Teixeira, S., Dias, J.M., Almendra, M.J., Brondino, C.D., Moura, I., Moura, J.J.G., Romão, M.J., J. Biol. Inorg. Chem. 2001, 6, 398.
(225) Raaijmakers, H., Macieira, S., Dias, J.M., Teixeira, S., Bursakov, S., Huber, R., Moura, J.J.G., Moura, I., Romão, M.J., Structure 2002, 10, 1261.
(226) Laukel, M., Chistoserdova, L., Lidstrom, M.E., Vorholt, J.A., Eur. J. Biochem. 2003, 270, 325.
(227) Brondino, C.D., Passeggi, M.C.G., Caldeira, J., Almendra, M.J., Feio, M.J., Moura, J.J.G., Moura, I., J. Biol. Inorg. Chem. 2004, 9, 154.
(228) Heidelberg, J.F., Seshadri, R., Haveman, S.A., Hemme, C.L., Paulsen, I.T., Kolonay, J.F., Eisen. J.A., Ward, N., Methe, B., Brinkac, L.M., Daugherty, S.C., Deboy, R.T., Dodson, R.J., Durkin. A.S., Madupu, R., Nelson, W.C., Sullivan, S.A., Fouts, D., Haft, D.H., Selengut, J., Peterson, J.D., Davidsen, T.M., Zafar, N., Zhou, L., Radune, D., Dimitrov, G., Hance, M., Tran, K., Khouri, H., Gill, J., Utterback, T.R., Feldblyum, T.V., Wall, J.D., Voordouw, G., Fraser, C.M., Nat. Biotechnol. 2004, 22, 554.
(229) Chistoserdova, L., Crowther, G.J., Vorholt, J.A., Skovran, E., Portais, J.C., Lidstrom, M.E., J. Bacteriol. 2007, 189, 9076.
(230) Mota, C.S., Valette, O., Gonzalez, P.J., Brondino, C.D., Moura, J.J.G., Moura, I., Dolla, A., Rivas, M.G., J. Bacteriol. 2011, 193, 2917.
(231) Silva, S.M., Pimentel, C., Valente, F.M.A., Rodrigues-Pousada, C., Pereira, I.A.C., J. Bacteriol. 2011, 193, 2909.
(232) Alissandratos, A., Kim, H.K., Matthews, H., Hennessy, J.E., Philbrook, A., Easton, C.J., Appl. Environ. Microbiol. 2013, 79, 741.
(233) da Silva, S.M., Voordouw, J., Leita, C., Martins, M., Voordouw, G., Pereira, I.A.C., Microbiology 2013, 159, 1760.
(234) Seiffert, G.N., Ullmann, G.M., Messerschmidt, A., Schink, B., Kroneck, P.M.H., Einsle, O., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2007, 104, 3073.
(235) Bol, E., Broers, N.J., Hagen, W.R., J. Biol. Inorg. Chem. 2008, 13, 75.
(236) Liu, Y.F., Liao, R.Z., Ding,W.J., Yu, J.G., Liu, R.Z., J. Biol. Inorg. Chem. 2011, 16, 745.
(237) Liao, R.Z., J. Biol. Inorg. Chem. 2013, 18, 175.
(238) Brink, F., Met. Ions Life Sci. 2014, 14, 15.
(239) Kroneck, P.M.H., J. Biol. Inorg. Chem. 2016, 21, 29.
(240) Joerger, R. D., Bishop, P. E., Crit. Rev. Microbiol. 1988, 16, 1.
(241) Eady, R. R., Chem. Rev. 1996, 96, 3013.
(242) Kessler, P. S., Mclarnan, J., Leigh, J. A., J. Bacteriol. 1997, 179, 541.
(243) Rehder, D., J. Inorg. Biochem. 2000, 80, 133.
(244) Eady, R. R., Coord. Chem. Rev. 2003, 237, 23.

(245) Rüttimann-Johnson, C., Rubio, L.M., Dean, D.R., Ludden, P.W., J. Bacteriol. 2003, 185, 2383.
(246) Crans, D. C., Smee, J. J., Gaidamauskas, E., Yang, L., Chem. Rev. 2004, 104, 849.
(247) Rees, D.C., Tezcan, A.F., Haynes, C.A., Walton, M.Y., Andrade, S., Einsle, O., Howard, J.B., Philos Trans A 2005, 363, 971.
(248) Fisher, K., Dilworth, M. J., Newton, W. E., Biochemistry 2006, 45, 4190.
(249) Lee, C. C., Hu, Y., Ribbe, M. W., Holm, R. H., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2009, 106, 9209.
(250) Lee, C. C., Hu, Y., Ribbe, M. W., Science 2010, 329, 642.
(251) Dance, I., Dalton Trans. 2011, 40, 5516.
(252) Lee, C. C., Hu, Y., Ribbe, M. W., Angew. Chem., Int. Ed. 2011, 50, 5545.
(253) Hu, Y., Lee, C. C., Ribbe, M. W., Dalton Trans. 2012, 41, 1118.
(254) Boyd, E.S., Peters, W.J., Front. Microbiol. 2013, 4, 201.
(255) McGlynn, S. E., Boyd, E. S., Peters, J. W., Orphan, V. J., Front. Microbiol. 2013, 3, 419.
(256) Hoffman, B.M., Lukoyanov, D., Yang, Z.Y., Dean, D.R., Seefeldt, L.C., Chem. Rev. 2014, 114, 4041.
(257) Hu, Y., Ribbe, M.W., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 435.
(258) Shah, V. K., Brill, W. J., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1977, 74, 3249.
(259) Burgess, B. K., Chem. Rev. 1990, 90, 1377.
(260) Kim, J., Rees, D. C., Nature 1992, 360, 553.
(261) Einsle, O., Tezcan, F. A., Andrade, S. L. A., Schmid, B., Yoshida, M., Howard, J. B., Rees, D. C., Science 2002, 297, 1696.
(262) Lee, H.-I., Benton, P. M. C., Laryukhin, M., Igarashi, R. Y., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Hoffman, B. M., J. Am. Chem. Soc. 2003, 125, 5604.
(263) Yang, T.-C., Maeser, N. K., Laryukhin, M., Lee, H.-I., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Hoffman, B. M., J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 12804.
(264) Lancaster, K. M., Roemelt, M., Ettenhuber, P., Hu, Y., Ribbe, M. W., Neese, F., Bergmann, B., DeBeer, S., Science 2011, 334, 974.
(265) Moret, M. E., Peters, J. C., J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 18118.
(266) Spatzal, T., Aksoyoglu, M., Zhang, L., Andrade, S. L., Schleicher, E., Weber, S., Rees, D. C., Einsle, O., Science 2011, 334, 940.
(267) Lancaster, K.M., Hu, Y., Bergmann, U., Ribbe, M.W., DeBeer, S., J. Am Chem Soc. 2013, 135, 610.
(268) Wiig, J. A., Lee, C. C., Hu, Y., Ribbe, M. W., J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 4982.
(269) Rebelein, J.G., Hu, Y., Ribbe, M.W., Angew Chem Int Ed Engl. 2014, 53, 11543.
(270) Jodin, C. C., R. Acad. Paris 1862, 55, 612.
(271) Burgess, B. K., Chem. Rev. 1996, 96, 2983.
(272) Hoffman, B. M., Lukoyanov, D., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Acc. Chem. Res. 2013, 46, 587.
(273) Yang, Z.-Y., Khadka, N., Lukoyanov, D., Hoffman, B. M., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2013, 110, 16327.
(274) Hu, Y., Ribbe, M.W., J. Biol. Inorg. Chem. 2014, 19, 731.
(275) Lukoyanov, D., Yang, Z.Y., Khadka, N., Dean, D.R., Seefeldt, L.C., Hoffman, B., J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 3610.
(276) Bjornsson, R., Lima, F.A., Spatzal, T., Weyhermueller, T., Glatzel, P., Einsle, O., Neese, F., DeBeer, S., Chem. Sci. 2014, 5, 3096.
(277) Bjornsson, R., Neese, F., Schrock, R.R., Einsle, O., DeBeer, S., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 447.
(278) Siemann, S., Schneider, K., Oley,M., Muller, A., Biochemistry 2003, 42, 3846.
(279) Barney, B.M., Igarashi, R.Y., Dos Santos, P.C., Dean, D.R., Seefeldt, L.C., J. Biol. Chem. 2004, 279, 53621.
(280) Sarma, R., Barney, B. M., Keable, S., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Peters, J. W., J. Inorg. Biochem. 2010, 104, 385.
(281) Appel, A.M., Bercaw, J.E., Bocarsly, A.B., Dobbek, H., DuBois, D.L., Dupuis, M., Ferry, J.G., Fujita, E., Hille, R., Kenis, J.J., Kerfeld, C.A., Morris, R.H., Peden, C.H., Portis, A.R., Ragsdale, S.W., Rauchfuss, T.B., Reek, J.N., Seefeldt, L.C., Thauer, R.K., Waldrop, G.L., Chem. Rev. 2013, 113, 6621.
(282) Doney, S.C., Fabry, V.J., Feely, R.A., Kleypas, J.A., Annu. Rev. Mar. Sci. 2009, 1, 169.
(283) Friedlingstein, P., Andrew, R.M., Rogelj, J., Peters, G.P., Canadell, J.G., Knutti, R., Luderer, G., Raupach, M.R., Schaeffer, M., van Vuuren, D.P., Le Quéré, C., Nat. Geosci. 2014, 7, 709.
(284) Service, R.F., Science 2015, 349, 1158.
(285) D'Alessandro, D.M., Smit, B., Long, J.R., Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 6058.
(286) Langanke, J., Wolf, A., Hofmann, J., Bohm, K., Subhani, M.A., Muller, T.E., Leitner, W., Gurtler, C., Green Chem. 2014, 16, 1865.
(287) Saeidi, S., Amin, N.A.S., Rahimpour, M.R., J. CO2 Util. 2014, 5, 66.

(288) Alissandratos, A., Easton, C.J., Beilstein J. Org. Chem. 2015, 11, 2370.
(289) Berg, I.A., Kockelkorn, D., Ramos-Vera, W.H., Say, R.F., Zarzycki, J., Hugler, M., Alber, B.E., Fuchs, G., Nat. Rev. Microbiol. 2010, 8 447.
(290) Berg, I.A., Appl. Environ. Microbiol. 2011, 77, 1925.
(291) Fuchs, G., Annu. Rev. Microbiol. 2011, 65, 631.
(292) Hugler, M., Sievert, S.M., Annu. Rev. Mar. Sci. 2011, 3, 261.
(293) Glueck, S.M., Gumus, S., Fabian, W.M.F., Faber, K., Chem. Soc. Rev. 2009, 39, 313.
(294) Li, H., Liao, J.C., Energy Environ. Sci. 2013, 6, 2892.
(295) Saveant, J.M., Chem. Rev. 2008, 108, 2348.
(296) Benson, E.E., Kubiak, C.P., Sathrum, A.J., Smieja, J.M., Chem. Soc. Rev. 2009, 38, 89.
(297) Federsel, C., Jackstell, R., Beller, M., Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 6254.
(298) Kumar, B., Llorente, M., Froehlich, J., Dang, T., Sathrum, A., Kubiak, C.P., Annu. Rev. Phys. Chem. 2012, 63, 541.
(299) Costentin, C., Robert, M., Saveant, J.M., Chem. Soc. Rev. 2013, 42, 2423.
(300) Ola, O., Maroto-Valer, M., Mackintosh, S., Energy Proc. 2013, 37, 6704.
(301) Mondal, B., Song, J., Neese, F., Ye, S., Curr. Opin. Chem. Biol. 2015, 25, 103.
(302) Galloway, J.N., Townsend, A.R., Nekunda, M., Cai, Z., Freney, J.R., Martinelli, L.A., Seitzinger, S.P., Sutton, M.A., Science 2008, 320, 889.
(303) Camrgo, J.A., Environ. Int. 2006, 32, 831.
(304) Almeida, M.G., Serra, A.S., Silveira, C., Moura, J.J.G., Sensors 2010, 10, 11530.
(305) Canfield, D.E., Glazer, A.N., Falkowski, P.G., Science 2010, 330, 192.
(306) Haber, F., Naturwissenschaften 1922, 10, 1041.
(307) Haber, F., Naturwissenschaften 1923, 11, 339.
(308) Schlögl, R., Angew. Chem., Int. Ed. 2003, 42, 2004.
(309) Fowler, D., Coyle, M., Skiba, U., Sutton, M.A., Cape, N., Reis, S., Sheppard, L.J., Jenkins, A., Grizzetti, B., Galloway, J.N., Vitousek, P., Leach, A., Bouwman, A.F., Butterbach-Bahl, K., Dentener, F., Stevenson, D., Amann, M., Voss, M., Philos. Trans. R. Soc. Lond. B Biol.Sci. 2013, 368, 20130164.
(310) Moura, I., Maia, L., Pauleta, S. R., Moura, J.J.G., A Bird's-Eye View of Denitrification in Relation to the Nitrogen Cycle. In Metalloenzymes in Denitrification: Applications and Environmental Impacts, Moura, I., Moura, J.J.G., Pauleta, S.R. and Maia, L., The Royal Society of Chemistry: Camb, 2017, Chapter 1, pp 1-10.
(311) Lehnert, N., Dong, H.T., Harland, J.B., Hunt, A.P., White, C.J., Nat. Rev. Chem. 2018, 2, 278.
(312) Kuypers, M.M.M., Marchant, H.K., Kartal, B., Nat. Rev. Microbiol. 2018, 16, 263.
(313) Boal, A. K., Rosenzweig, A. C., Science 2012, 337, 1617.
(314) Lukoyanov, D., Yang, Z. Y., Barney, B. M., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Hoffman, B. M., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2012, 109, 5583.
(315) Scheibel, M. G., Schneider, S., Angew. Chem., Int. Ed. 2012, 51, 4529.
(316) Wiig, J. A., Hu, Y., Lee, C. C., Ribbe, M. W., Science 2012, 337, 1672.
(317) Boyd, E. S., Peters, W. J., Front. Microbiol. 2013, 4, 201.
(318) Hoffman, B. M., Lukoyanov, D., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Acc. Chem. Res. 2013, 46, 587.
(319) Hu, Y., Ribbe, M. W., Biochim. Biophys. Acta 2013, 1827, 1112.
(320) Hu, Y., Ribbe, M. W., J. Biol. Chem. 2013, 288, 13173.
(321) Spatzal, T., Einsle, O., Andrade, S. L. Angew. Chem., Int. Ed. 2013, DOI: 10.1002/anie.201303000.
(322) Zhang, L., Kaiser, J. T., Meloni, G., Yang, K. Y., Spatzal, T., Andrade, S. L., Einsle, O., Howard, J. B., Rees, D. C. Angew. Chem., Int. Ed. 2013, DOI: 10.1002/anie.201303877.
(323) Montero-Moran, G. M., Li, M., Rendon-Huerta, E., Jourdan, F., Lowe, D. J., Stumpff-Kane, A. W., Feig, M., Scazzocchio, C., Hausinger, R. P., Biochemistry 2007, 46, 5293.
(324) Zhang, Y., Gladyshev, V.N., J. Mol. Biol. 2008, 379, 881.
(325) Zhang, Y., Gladyshev, V.N., J. Biol. Chem. 2010, 285, 3393.
(326) Gladyshev, V.N., Zhang, Y., Abundance, Ubiquity and Evolution of Molybdoenzymes. In Molybdenum and Tungsten Enzymes, Hille, R., Schulzke, C. and Kirk, M.L. Eds, Royal Society of Chemistry: Cambridge, 2017, Chapter 2, 81-99.
(327) Ichikawa, M., Nishino, T., Nishino, T., Ichikawa, A. J. Histochem. Cytochem. 1992, 40, 1097.
(328) Nishino, T., Okamoto, K., J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 195.

(329) Moriwaki, Y., Yamamoto, T., Higashino, K., Histol. Histopathol. 1999, 14, 1321.
(330) Tajima, S., Nomura, M., Kouchi, H., Front. Biosci. 2004, 9, 1374
(331) Angermüller, S., Islinger, M., Völkl, A., Histochem. Cell Biol. 2009, 131, 459.
(332) Seegmiller, J.E., Arthritis Rheum. 1965, 8, 714.
(333) Obermayr, R.P., Temml, C., Gutjahr, G., Knechtelsdorfer, M., Oberbauer, R., Klauser-Braun, R., J. Am. Soc. Nephrol. 2008, 19. 2407.
(334) Kanellis, J., Kang, D.H., Semin. Nephrol. 2005, 25, 39.
(335) Grassi, D., Desideri, G., Ferri, C., Curr. Pharm. Des. 2014, 20, 6089.
(336) Perticone, F., Maio, R., Tassone, J.E., Perticone, M., Pascale, A., Sciacqua, A., Sesti, G., Int. J. Cardiol. 2013, 167, 232.
(337) Khosla, U.M., Zharikov, S., Finch, J.L., Nakagawa, T., Roncal, C., Mu, W., Krotova, K., Block, E.R., Prabhakar, S., Johnson, R.J., Kidney Int. 2005, 67, 1739.
(338) Choi, H.K., Ford, E.S., Li, C., Curhan, G., Arthritis Rheum. 2007, 57, 109-
(339) Khanna, D., Fitzgerald, J.D., Khanna, P.P., Bae, S., Singh, M.K., Neogi, T., Pillinger, M.H., Merill, J., Lee, S., Prakash, S., Kaldas, M., Gogia, M., Perez-Ruiz, F., Taylor, W., Lioté, F., Choi, H., Singh, J.A., Dalbeth, N., Kaplan, S., Niyyar, V., Jones, D., Yarows, S.A., Roessler, B., Kerr, G., King, C., Levy, G., Furst, D.E., Edwards, N.L., Mandell, B., Schumacher, H.R–, Robbins, M., Wenger, N., Terkeltaub, R., Rheumatology ACo Arthritis Care Res (Hoboken) 2012, 64, 1431.
(340) Granger, D. N., Rutili, G., McCord, J. M., Gastroenterology 1981, 81, 22.
(341) McCord, J. M., N. Engl. J. Med. 1985, 312, 159.
(342) Zweier, J. L., Kuppusamy, P., Lutty, G. A., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1988, 85, 4046.
(343) Zweier, J. L., Broderick, R., Kuppusamy, P., Thompson-Gorman, S., Lutty, G. A., J. Biol. Chem. 1994, 269, 24156.
(344) Nishino, T., Nakanishi, S., Okamoto, K., Mizushima, J., Hori,H., Iwasaki, T., Nishino, T., Ichimori, K., Nakazawa, H., Biochem. Soc. Trans. 1997, 25, 783.
(345) Berry, C. E., Hare, J. M., J. Physiol. 2004, 555, 589.
(346) Lieber, C. S., N. Engl. J. Med. 1988, 319, 1639.
(347) Cederbaum, A. I., Free Radical Biol. Med. 1989, 7, 537.
(348) Kato, S., Kawase, T., Alderman, J., Inatomi, N., Lieber, C., Gastroenterology 1990, 98, 203.
(349) Omar, B., McCord, J., and Downey, J. (1991) in Oxidative Stress: Oxidants and Antioxidants (Sies, H., Ed.), pp. 493–527, Academic Press.
(350) Nordmann, R., Ribière, C., Rouach, H., Free Radical Biol. Med. 1992, 12, 219.
(351) Mira, L., Maia, L., Barreira, L., Manso, C. F., Arch. Biochem. Biophys. 1995, 318, 53.
(352) Sahinoglu, T., Stevens, C. R., Bhatt, B., Blake, D. R., Methods 1996, 9, 628.
(353) Harrison, R., Biochem. Soc. Trans. 1997, 25, 786.
(354) Wright, R. M., Repine, J. E., Biochem. Soc. Trans. 1997, 25, 799.
(355) Beckman, K. B., Ames, B. N., Physiol. Rev. 1998, 78, 547.
(356) Suzuki, H., Delano, F. A., Parks, D. A., Jamshidi, N., Granger, D. N., Ishii, H., Suematsu, M., Zweifach, B. W., Schmid--Schonbein, G. W., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 1998, 95, 4754.
(357) Wright, R. M., McManaman, J. L., Repine, J. E., Free Radical Biol. Med. 1999, 26, 348.
(358) Harrison, R., Free Radical Biol. Med. 2002, 33, 774.
(359) Stirpe, F., Ravaioli, M., Battelli, M. G., Musiani, S., Grazi, G. L., Am. J. Gastroenterol. 2002, 97, 2079.
(360) Wu, D., Cederbaum, A. I., Alcohol Res. Health 2003, 27, 277.
(361) Small, D. M., Coombes, J. S., Bennett, N., Johnson, D. W., Gobe, G. C., Nephrology 2012, 17, 311.
(362) Bachschmid, M. M., Schildknecht, S., Matsui, R., Zee, R., Haeussler, D., Cohen, R. A., Pimental, D., Loo, B., Ann. Med. 2013, 45, 17.
(363) Madamanchi, N. R., Runge, M. S., Free Radical Biol. Med. 2013, 61, 473.
(364) Maia, L., Moura, J.J.G., J. Biol. Inorg. Chem 2011, 16, 443.
(365) Maia, L., Moura, J.J.G., J. Biol. Inorg. Chem 2015, 20, 403.
(366) Millar, T. M., Stevens, C. R., Benjamin, N., Eisenthal, R., Harrison, R., Blake, D. R., FEBS Lett. 1998, 427, 225.
(367) Zhang, Z., Naughton, D., Winyard, P. G., Benjamin, N., Blake, D. R., Symons, M. C., Biochem. Biophys. Res. Commun. 1998, 249, 767.
(368) Godber, H. L. J., Doel, J. J., Sapkota, G. P., Blake, D. R., Stevens, C. R., Eisenthal, R., Harrison, R., J. Biol. Chem. 2000, 275, 7757.

(369) Li, H., Samouilov, A., Liu, X., Zweier, J. L., J. Biol. Chem. 2001, 276, 24482.
(370) Li, H., Samouilov, A., Liu, X., Zweier, J. L., Biochemistry 2003, 42, 1150.
(371) Li, H., Samouilov, A., Liu, X., Zweier, J. L., J. Biol. Chem. 2004, 279, 16939.
(372) Li, H., Cui, H., Kundu, T. K., Alzawahra, W., Zweier, J. L., J. Biol. Chem. 2008, 283, 17855.
(373) Li, H., Kundu, T. K., Zweier, J. L., J. Biol. Chem. 2009, 284, 33850.
(374) Wang, J., Krizowski, S., Fischer-Schrader, K., Niks, D., Tejero, J., Sparacino-Watkins, C., Wang, L., Ragireddy, V., Frizzell, S., Kelley, E.E., Zhang, Y., Basu, P., Hille, R., Schwarz, G., Gladwin, M.T., Antioxid. Redox Signal. 2015, 23, 283.
(375) Sparacino-Watkins, C.E., Tejero, J., Sun, B., Gauthier, M.C., Thomas, J., Ragireddy, V., Merchant, B.A., Wang, J., Azarov, I., Basu, P., Gladwin, M.T., J. Biol. Chem., 2014, 289, 10345.
(376) Dixon, M., Thurlow, S., Biochem. J. 1924, 18, 989.
(377) Fridovich, I., Handler, P., J. Biol. Chem. 1957, 228, 67.
(378) Fridovich, I., Handler, P., J. Biol. Chem. 1962, 237, 916.
(379) Murray, K. N., Chaykin, S., J. Biol. Chem. 1966, 241, 3468.
(380) Landon, E. J., Myles, M., Biochim. Biophys. Acta 1967, 143, 429.
(381) Massey, V., Brumby, P. E., Komai, H., Palmer, G., J. Biol. Chem. 1969, 244, 1682.
(382) Krenitsky, T. A., Neil, S. M., Elion, G. B., Hitchings, G. H., Arch. Biochem. Biophys. 1972, 150, 585.
(383) Sergeev, N. S., Ananiadi, L. I., L'Vov, N. P., Kretovich, W. L., J. Appl. Biochem. 1985, 86.
(384) Hall, W. W., Krenitsky, T. A., Arch. Biochem. Biophys. 1986, 251, 36.
(385) Huang, D. Y., Furukawa, A., Ichikawa, Y., Arch. Biochem. Biophys. 1999, 364, 264.
(386) Kundu, T. K., Velayutham, M., Zweier, J. L., Biochemistry 2012, 51, 2930.
(387) Havemeyer, A., Bittner, F., Wollers, S., Mendel, R., Kunze, T., Clement, B., J. Biol. Chem. 2006, 281, 34796.
(388) Gruenewald, S., Wahl, B., Bittner, F., Hungeling, H., Kanzow, S., Kotthaus, J., Schwering, U., Mendel, R. R., Clement, B., J. Med. Chem. 2008, 51, 8173.
(389) Havemeyer, A., Grünewald, S., Wahl, B., Bittner, F., Mendel, R., Erdélyi, P., Fischer, J., Clement, B., Drug Metab. Dispos. 2010, 38, 1917.
(390) Wahl, B., Reichmann, D., Niks, D., Krompholz, N., Havemeyer, A., Clement, B., Messerschmidt, T., Rothkegel, M., Biester, H., Hille, R., Mendel, R. R., Bittner, F., J. Biol. Chem. 2010, 285, 37847.
(391) Havemeyer, A., Lang, J., Clement, B., Drug Metab. Rev. 2011, 43, 524.
(392) Kotthaus, J., Wahl, B., Havemeyer, A., Kotthaus, J., Schade, D., Garbe-Schönberg, D., Mendel, R., Bittner, F., Clement, B., Biochem. J. 2011, 433, 383.
(393) Mikula, M., Rubel, T., Karczmarski, J., Goryca, K., Dadlez, M., Ostrowski, J., Funct. Integr. Genomics 2011, 11, 215.
(394) Rajapakshe, A., Astashkin, A. V., Klein, E. L., Reichmann, D.,Mendel, R. R., Bittner, F., Enemark, J. H., Biochemistry 2011, 50, 8813.
(395) Klein, J. M., Busch, J. D., Potting, C., Baker, M. J., Langer, T., Schwarz, G., J. Bio. Chem. 2012, 287, 42795.
(396) Krompholz, N., Krischkowski, C., Reichmann, D., Garbe-Schönberg, D., Mendel, R. R., Bittner, F., Clement, B., Havemeyer, A., Chem. Res. Toxicol. 2012, 25, 2443.
(397) Neve, E. P. A., Nordling, A., Andersson, T. B., Hellman, U., Diczfalusy, U., Johansson, I., Ingelman-Sundberg, M., J. Biol. Chem. 2012, 287, 6307.
(398) Froriep, D., Clement, B., Bittner, F., Mendel, R. R., Reichmann, D., Schmalix, W., Havemeyer, A., Xenobiotica 2013, 43, 780.
(399) Plitzko, B., Ott, G., Reichmann, D., Henderson, C.J., Wolf, E., Mendel, R., Bittner, F., Clement, B., Havemeyer, A., J. Biol. Chem. 2013, 288, 20228.
(400) Jakobs, H.H., Danilo Froriep, D., Havemeyer, A., Mendel, R.R., Bittner, F., Clement, B., ChemMedChem 2014, 9, 2381.
(401) Kalimuthu, P., Havemeyer, A., Clement, B., Kubitza, C., Scheidig, A.J., Bernhardt, P.V., Electrochem. Commun. 2017, 84, 90.
(402) Llamas, A., Chamizo-Ampudia, A., Tejada-Jimenez, M., Galvan, A., Fernandez, E., BioFactors 2017, 43, 486.
(403) Schneider, J., Girreser, U., Havemeyer, A., Bittner, F., Clement, B., Chem. Res. Toxicol. 2018, 31, 447.
(404) Kubitza, C., Bittner, F., Ginsel, C., Havemeyer, A., Clement, B., Scheidig, A.J., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2018, 115, 11958.
(405) Krenitsky, T. A., Biochem. Pharmacol. 1978, 27, 2763.
(406) Duyvis, M. G., Wassink, H., Haaker, H., FEBS Lett. 1996, 380, 233.
(407) Angove, H. C., Yoo, S. J., Münck, E., Burgess, B. K., J. Biol. Chem. 1998, 273, 26330.
(408) Danyal, K., Dean, D. R., Hoffman, B. M., Seefeldt, L. C., Biochemistry 2011, 50, 9255.

(409) Roth, L. E., Tezcan, F. A., ChemCatChem 2011, 3, 1549.
(410) Lukoyanov, D., Yang, Z.Y., Barney, B.M., Dean, D.R., Seefeldt, L.C., Hoffman, B.M., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2012, 109, 5583.
(411) Stoddart, A. M., Levine, W. G., Biochem. Pharmacol. 1992, 43, 2227.
(412) Mayweather, D., Danyal, K., Dean, D. R., Seefeldt, L. C., Hoffman, B. M., Biochemistry 2012, 51, 8391.
(413) Fabre, G., Seither, R., and Goldman, D., Biochem. Pharmacol. 1986, 35, 1325.
(414) Yee, S. B., Pritsos, C. A., Arch. Biochem. Biophys. 1997, 347, 235.
(415) Dambrova, M., Uhlen, S., Welch, C. J., and Wikberg, J. E. S., Eur. J. Biochem. 1998, 257, 178.
(416) Beedham, C., Pharm. World Sci. 1997, 19, 255.
(417) Dittrich, C., Greim, G., Borner, M., Weigang-Köhler, K., Huisman, H., Amelsberg, A., Ehret, A., Wanders, J., Hanauske, A., Fumoleau, P., Eur. J. Cancer 2002, 38, 1072.
(418) Diamond, S., Boer, J., Maduskuie, T.P., Falahatpisheh, N., Li, Y., Yeleswaram, S., Drug Metab. Dispos. 2010, 38 1277– 1285.
(418) Pryde, D.C., Dalvie, D., Hu, Q., Jones, P., Obach, R.S., Tran, T.D., J. Med. Chem. 2010, 53, 8441.
(419) Akabane, T., Tanaka, K., Irie, M., Terashita, S., Teramura, T., Xenobiotica 2011, 41, 372.
(420) Zhang, X., Liu, H.H., Weller, P., Zheng, M., Tao, W., Wang, J., Liao, G., Monshouwer, M., Peltz, G., Pharmacogenomics J. 2011, 11, 15.
(421) Sanoh, S., Tayama, Y. Sugihara, K., Kitamura, S., Ohta, S., Drug Metab. Pharmacokinet. 2015, 30, 52.
(422) Kumar, R., Joshi, G., Kler, H., Kalra, S., Kaur, M., Arya, R., Med. Res. Rev. 2018, 38, 1073.
(423) Vijayakumar, K., Gunny, R., Grunewald, S., Carr, L., Chong, K.W., DeVile, C., Robinson, R., McSweeney, N., Prabhakar, P., Pediatr. Neurol. 2001, 45, 246.
(424) Johnson, J.L., Prenat. Diagn. 2003, 23, 6.
(425) Sass, J.O., Gunduz, A., Funayama, C.A.R., Korkmaz, B., Pinto, K.G.D., Tuysuz, B., Santos, L.Y., Taskiran, E., Turcato, M.F., Lam, C.W., Reiss, J., Walter, M., Yalcinkaya, C., Camelo, J.S., Brain Dev. 2010, 32, 544.
(426) Carmi-Nawi, N., Malinger, G., Mandel, H., Ichida, K., Lerman-Sagie, T., Lev, D., J. Child Neurol. 2011, 26, 460.
(427) Schwarz, G., Belaidi, A., Met. Ions Life Sci. 2013, 13, 415.
(428) Kappler, U., Enemark, J.H, J. Biol. Inorg. Chem. 2015, 20, 253.
(429) Schwahn, B.C., Van Spronsen, F.J., Belaidi, A.A., Bowhay, S., Christodoulou, J., Derks, T.G., Hennermann, J.B., Jameson, E., König, K., McGregor, T.L., Font-Montgomery, E., Santamaria-Araujo, J.A., Santra, S., Vaidya, M., Vierzig, A., Wassmer, E., Weis, I., Wong, F.Y., Veldman, A., Schwarz, G., Lancet 2015, 386, 1955.
(430) Schwarz, G., Curr. Opin. Chem. Biol. 2016, 31, 179.
(431) Hsiao, J.C., McGrath, A.P., Kielmann, L., Kalimuthu, P., Darain, F., Bernhardt, P.V., Harmer, J., Lee, M., Meyers, K., Maher, M.J., Kappler, U., Biochem. Biophys. Acta 2018, 1859, 19.

Índice

4 DÉCADAS *A FALAR* COM COMPUTADORES 7
Isabel Trancoso

O *ENSAIO* DE 1939 DE ANTÓNIO MONTEIRO, O SEU CONTEXTO E A SUA IMPORTÂNCIA 9
José Francisco Rodrigues

ENSAIO SOBRE OS FUNDAMENTOS DA ANÁLISE GERAL 27
António Aniceto Ribeiro Monteiro

O PRIMEIRO COMPUTADOR DIGITAL AUTOMÁTICO EM UNIVERSIDADES PORTUGUESAS (1968): A REALIZAÇÃO PIONEIRA DO PROFESSOR DOUTOR ROGÉRIO SILVA DE SOUSA NUNES 171
José Joaquim Pereira Osório

EXTRAPOLATION IN THEORETICAL CHEMISTRY: APPROXIMATING REALITY FROM MATTERS-OF-FACT 183
A. J. C. Varandas

SELF-AVOIDING RANDOM PATHS AND MACROMOLECULES 199
Ludwig Streit

POST 'OMICS. CONTRIBUTION FOR A SUSTAINABLE VITICULTURE 209
Andreia Figueiredo

O SUDÁRIO DE TURIM – FONTE DE EXTRAORDINÁRIA INFORMAÇÃO CIENTÍFICA 217
Victor Lobo

O DIÁRIO DO SUÍÇO LEONHARD THURNEYSSER E OS AFRICANOS NA LISBOA RENASCENTISTA 225
Bernardo Jerosch Herold

THE CENTRAL ARGUMENT FROM NEWTON'S *PRINCIPIA MATHEMATICA* AND SOME ESSENTIAL PREREQUISITES OF CLASSICAL PHYSICS 243
Josef Bemelmans

AS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES ENQUANTO "MILLENNIUM PROBLEM" 255
H. Beirão da Veiga

NEUROPLASTICIDADE 267
Alexandre Lemos de Castro Caldas

AGENTES DE CONTRASTE PARA IMAGEM MOLECULAR – UMA FERRAMENTA DO SÉCULO XXI VISTA POR UM QUÍMICO 271
Carlos F. Geraldes

DESCOBERTA, INVENÇÃO E ACASO. RÖNTGEN E A ESCOLA PORTUGUESA DE ANGIOGRAFIA 273
Henrique Vilaça Ramos

BACTÉRIAS 'HUMANIZADAS': EXPRESSÃO DE GENES HUMANOS EM PROCARIOTAS NA DETECÇÃO DE AGENTES CANCERÍGENOS 287
José Rueff

HOMEOPATIA, ONTEM E HOJE 295
J. M. Toscano Rico

LATINO COELHO: RELEITURA DE UM TEXTO CIENTÍFICO 303
Luís Aires-Barros

FADIGA DE MATERIAIS E DE ESTRUTURAS – COM ENFOQUE NA AERONÁUTICA 313
Paulo M. S. Tavares de Castro, Sérgio M. O. Tavares

TECTÓNICA DE PLACAS AMOLECIDAS (SOFT): HOMENAGEM AO PROFESSOR PINTO PEIXOTO 325
António Ribeiro, João Duarte, Luís Matias, Filipe Rosas, António Mateus

A VIRTUAL MATHEMATICAL HEART FOR NON-INVASIVE HEART DIAGNOSTICS 327
Alfio Quarteroni

MOLYBDENUM AND TUNGSTEN IN BIOLOGY 329
Luisa B. Maia e José J. G. Moura

Índice Onomástico

A. J. C. VARANDAS
Extrapolation in theoretical chemistry: Approximating reality from matters-of-fact 183

ALEXANDRE LEMOS DE CASTRO CALDAS
Neuroplasticidade 267

ALFIO QUARTERONI
A virtual mathematical heart for non-invasive heart diagnostics 327

ANDREIA FIGUEIREDO
Post 'OMICS. Contribution for a sustainable viticulture 209

ANTÓNIO ANICETO RIBEIRO MONTEIRO
Ensaio sobre os fundamentos da análise geral 27

ANTÓNIO MATEUS
Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto 325

ANTÓNIO RIBEIRO
Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto 325

BERNARDO JEROSCH HEROLD
O diário do suíço Leonhard Thurneysser e os africanos na Lisboa Renascentista 225

CARLOS F. GERALDES
Agentes de contraste para Imagem Molecular – Uma ferramenta do século XXI vista por um químico 271

FILIPE ROSAS
Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto 325

H. BEIRÃO DA VEIGA
As equações de Navier-Stokes enquanto "millennium problem" 255

HENRIQUE VILAÇA RAMOS
Descoberta, invenção e acaso. Röntgen e a escola portuguesa de angiografia 273

ISABEL TRANCOSO
4 décadas a falar *com computadores* 7

J. M. TOSCANO RICO
Homeopatia, ontem e hoje 295

JOÃO DUARTE
Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto 325

JOSÉ FRANCISCO RODRIGUES
O Ensaio *de 1939 de António Monteiro, o seu contexto e a sua importância* 9

JOSÉ J. G. MOURA
Molybdenum and tungsten in biology 329

JOSÉ JOAQUIM PEREIRA OSÓRIO
O primeiro computador digital automático em universidades portuguesas (1968): A realização pioneira do Professor Doutor Rogério Silva de Sousa Nunes 171

JOSÉ RUEFF
Bactérias 'humanizadas': expressão de genes humanos em procariotas na detecção de agentes cancerígenos 287

JOSEF BEMELMANS
The central argument from Newton's Principia Mathematica *and some essential prerequisites of classical physics* 243

LUDWIG STREIT
Self-avoiding random paths and macromolecules 199

LUÍS AIRES-BARROS
Latino Coelho: releitura de um texto científico 303

LUÍS MATIAS
Tectónica de placas amolecidas (soft): Homenagem ao Professor Pinto Peixoto 325

LUISA B. MAIA
Molybdenum and tungsten in biology 329

PAULO M. S. TAVARES DE CASTRO
Fadiga de materiais e de estruturas – com enfoque na aeronáutica 313

SÉRGIO M. O. TAVARES
Fadiga de materiais e de estruturas – com enfoque na aeronáutica 313

VICTOR LOBO
O Sudário de Turim – fonte de extraordinária informação científica 217