

## **Estatística para Químicos**

Num mundo incerto, inseguro, estocástico não podemos deixar de usar este manual como permanente *vade mecum*. De facto, a Estatística é uma disciplina relativamente recente. Só depois de um grande progresso na descrição rigorosa e quantitativa do nosso mundo nos demos conta das limitações dessa descrição determinística. Esta é uma das grandes aquisições do Século XX! Quando, em 1905, Albert Einstein publicou um pequeno artigo sobre um tema aparentemente menor qual seja o do movimento browniano, estava sepultado o optimismo grandiloquente do cientismo do século anterior. Não mais se podia acompanhar o grande Laplace na afirmação de que, conhecidas rigorosamente as condições actuais de posição e velocidade do universo, seríamos capazes de prever o futuro, todo o futuro. Dramaticamente, poucos meses depois, Ludwig Boltzmann suicidava-se doente e deprimido pelo “insucesso” da sua teoria Mecânica Estatística. Como é cruel esta realidade: O grande criador do tratamento estatístico do mundo físico abandona a cena sem notar que as suas ideias eram já triunfantes. A partir daqui, os pontos de vista de Boltzmann foram sendo generalizados até se tornarem num ingrediente indispensável para a compreensão do nosso mundo. Numa linha autónoma desta o mesmo Einstein publica ainda no mesmo ano outro pequeno artigo sobre o efeito fotoeléctrico que viria a originar passados 20 anos a Mecânica Quântica. Também aqui uma interpretação estatística da Física se mostrou necessária, embora o seja de uma forma tão estranha que o próprio Einstein nunca a quis abraçar completamente como definitiva.

Vemos como a Estatística tem um papel central em toda a física do século XX. Contudo as suas origens são bem diferentes. Temos de as encontrar no ócio do *Ancien Régime*. A enorme popularidade dos jogos de salão levaram à busca de técnicas de batota baseadas no que hoje chamaríamos de interpretação científica do jogo. Assim, grandes matemáticos da época tiveram honras de convidados em alguns salões parisienses para ajudar as anfitriãs a impressionar os convivas com uma brilhante vitória no jogo! Aqui nasceu a Teoria das Probabilidades e a Estatística, de uma necessidade real da sociedade. Daquela sociedade algo especial.

Interessa lembrar estes factos para melhor situar o lugar e a função de um breve manual de Estatística, de Estatística para Químicos. As aplicações da Estatística em Química são tão diversas como acima se deixa supor. Se por um lado uma sólida interpretação estatística do mundo é necessária para bem compreender muitos fenómenos químicos, quer por invocação da Mecânica Quântica quer por apelo à Mecânica Estatística, por outro lado também a Química lida normalmente com resultados experimentais imprecisos ou com grandes quantidades de resultados que carecem de um sentido interpretativo simples. Para tudo isto é necessário usar alguma forma de Estatística. Elegante nos seus princípios, a Estatística tem-se desenvolvido ao longo de caminhos muito diversos e, por vezes, difíceis de reconciliar com a boa teoria básica. Ao Químico leitor interessa compreender esses princípios básicos sem perder de vista alguma motivação de aplicação. Aqui a escolha é tão difícil quanto amplo tem sido o sucesso da aplicação da Estatística nos mais diversos aspectos do conhecimento Químico. Não será preciso ir mais longe para compreender que a apresentação de um manual breve de Estatística para Químicos exige escolhas difíceis.

O compromisso proposto pelos Professores Natália Cordeiro e Alexandre Magalhães parece equilibrado e poderá ser muito útil a um Químico que pretenda uma introdução pragmática da Estatística. Evitam uma apresentação matemática formal que seria impossível ligar à realidade de algumas aplicações mais frequentes em Química num formato compacto como o que aqui é pretendido. Em alternativa, seguem uma estratégia heurística que é certamente mais conveniente. Adquirida uma certa familiaridade com as propostas aqui apresentadas, estará o leitor em condições de trabalhar com a Estatística como técnica de análise de resultados e de interpretação em diversas áreas da Química. Para a mente mais inclinada ao rigor matemático também este pequeno manual poderá servir de útil introdução e de forte motivação para outros terrenos bem mais áridos.

Tão ubíqua é a Estatística no nosso mundo de hoje que não poderá nenhum Químico nem, mais genericamente, nenhum aspirante a uma cultura científica básica dispensar-se de fazer uma sólida iniciação a esta disciplina. Este livrinho poderá abrir esse caminho de uma forma suave mas segura. Assim o ache também o leitor.

José Ferreira Gomes  
Porto, Natal de 2001