

Ciencia computacional de la ciencia^{*}

Filosofía del descubrimiento automático

Andrés Rivadulla

Universidad Complutense de Madrid
arivadulla@filos.ucm.es

25.1. Introducción

Echemos un vistazo a la física computacional tal y como se practica y enseña en las universidades: se trata básicamente de un recurso instrumental de ayuda para la resolución de problemas difícilmente resolubles “a mano” o engorrosos. No es en este sentido que se entiende el estudio computacional de la ciencia. Ciencia computacional es ciencia creada por medio de ordenadores y es una actividad de la ciencia cognitiva y la inteligencia artificial.

En un revelador artículo, los sociólogos norteamericanos James Evans y Andrey Rzhetsky (2010) defienden que pronto las computadoras podrían generar hipótesis con escasa intervención humana. En dos citas concreto esta hipótesis:

“Las computadoras juegan un papel importante como ayuda para los científicos en el almacenamiento, manipulación y análisis de datos. Nuevas capacidades están extendiendo empero las posibilidades de las computadoras del análisis a la hipótesis. Inspirándose en enfoques de la inteligencia artificial los programas de computadoras son cada vez más capaces de conjuntar conocimiento publicado con datos experimentales, buscar patrones y relaciones lógicas y posibilitar la emergencia de hipótesis nuevas con escasa intervención humana.”

^{*} Grupo de investigación complutense de Filosofía del Lenguaje, de la Naturaleza y de la Ciencia, Ref.: 930174-603, y Proyecto de Investigación FFI2009-10249 “Modelos teóricos en ciencia y racionalidad pragmática” y Acción Integrada AIB2010PT-00106 “Knowledge Dynamics in the Field of Social Sciences: Abduction, Intuition and Invention”, financiados por el MICINN del Reino de España.

“Nuevas herramientas computacionales pueden ampliar el fondo de conceptos y relaciones usadas para generar hipótesis automáticamente (i) extrayendo más del vasto corpus de ciencia publicada y (ii) sintetizando nuevos conceptos y relaciones de nivel superior e inferior a partir del fondo de conocimiento existente.” (Evans & Rzhetsky 2010: 399)

Esta posibilidad deja en evidencia la falta de imaginación de los filósofos oficiales de la ciencia quienes, capitaneados desde los años 30 por Popper y Reichenbach, descuidaron la atención por lo que ellos mismos llamaron el *contexto de descubrimiento científico*. Con este descuido los filósofos de la ciencia menospreciaron una parte sustancial de la actividad científica, como es la creatividad y el descubrimiento científicos, dejando el campo libre a los investigadores en ciencia cognitiva e inteligencia artificial, quienes desarrollaron a partir de los años setenta *computational research on scientific discovery*.

La ignorancia del contexto de descubrimiento científico supuso para la filosofía oficial de la ciencia perder la gran oportunidad de convertirse en aquello que constituía el motivo aparente del positivismo lógico: la filosofía científica. En su lugar, los miembros del Círculo de Viena, sus allegados y sucesores, desarrollaron una filosofía de la ciencia con productos que supuestamente constituían reconstrucciones racionales de la ciencia misma, pero que reflejaban una ciencia ahistórica y ficticia. Incluso sus antagonistas principales, en su afán por despreciar el contexto de descubrimiento, no sólo ignoraron el importante papel que las inferencias ampliativas, como la inducción y la abducción¹, juegan en la metodología de la ciencia, sino que todos en su conjunto fueron incapaces de ver que también el razonamiento deductivo tiene un papel crucial en la creatividad científica. *La producción teórica*, una estrategia anticipativa que implementa el razonamiento deductivo en el contexto de descubrimiento científico, reclama su reconocimiento como práctica metodológica por parte de la filosofía académica, antes de que suceda lo que vemos que ocurre actualmente con las prácticas ampliativas, a saber: que se ha apropiado de ellas la ciencia computacional como formas de descubrimiento científico.

Entre los objetivos de las páginas que siguen está el de acentuar y justificar que el abandono por el contexto de descubrimiento fue uno de los errores más graves cometidos por los filósofos oficiales de la ciencia.

¹ Ya Peirce (CP, 2.680) usaba el término ‘inferencia ampliativa’, aunque él de hecho empleaba la expresión “ampliative”. En todo caso este término se venía usando ya en el mismo sentido desde mediados del XIX.

25.2. De la filosofía de la ciencia a la ciencia computacional de la ciencia

La distinción entre *contexto de descubrimiento* y *contexto de justificación* suele atribuirse a Hans Reichenbach en su libro de 1938, *Experience and Prediction*, donde en relación al concepto de reconstrucción racional de la ciencia precisa “that it corresponds to the form in which thinking processes are communicated to other persons instead of the form in which they are subjectively performed. The way, for instance, in which a mathematician publishes a new demonstration, or a physicist his logical reasoning in the foundation of a new theory, would almost correspond to our concept of rational reconstruction; and the well-known difference between the thinker’s way of finding this theorem and his way of presenting it before a public may illustrate the difference in question. I shall introduce the terms *context of discovery* and *context of justification* to mark this distinction. Then we have to say that epistemology is only occupied in constructing the context of justification” (Reichenbach 1938: §1).

No obstante esta distinción ya había sido anticipada por Karl Popper en el §2, *Eliminación del Psicologismo*, de su *Logik der Forschung* (1935) donde afirma:

“I shall distinguish sharply between the process of conceiving a new idea, and the methods and results of examining it logically. As to the task of the logic of knowledge—in contradistinction to the psychology of knowledge—I shall proceed on the assumption that it consists solely in investigating the methods employed in those systematic tests to which every new idea must be subjected if it is to be seriously entertained.” (Popper 1959: 31, *mis cursivas*)

Al tiempo que confiesa su desinterés por el contexto de descubrimiento:

“The initial stage, the act of conceiving or inventing a theory, seems to me neither to call for logical analysis nor to be susceptible of it. The question how it happens that a new idea occurs to a man—whether it is a musical theme, a dramatic conflict, or a scientific theory— may be of great interest to empirical psychology; but it is irrelevant to the logical analysis of scientific knowledge. This latter is concerned [...] only with questions of justification or validity.”

Posición que corrobora posteriormente:

“The question ‘How did you first *find* your theory?’ relates, as it were, to an entirely private matter, as opposed to the question ‘How did you *test* your theory?’ which alone is scientifically relevant.” (Popper 1960: §29)

Pues bien, mientras la filosofía académica de la ciencia asumió con la mayor naturalidad este desinterés por el contexto de descubrimiento científico, los científicos computacionales vieron en él un filón abierto para el desarrollo de su actividad. Si bien, eso sí, hubieron de transcurrir al menos cuarenta años hasta que la ciencia cognitiva y la inteligencia artificial (IA) empezaran a fijar sus ojos en él. A partir de ese momento se desencadena un vendaval en apoyo del contexto de descubrimiento que tampoco esta vez los filósofos de la ciencia lo notaron ni siquiera como una ligera brisa. El objeto de la mayor parte de las críticas fue Karl Popper, en alguna ocasión también Hans Reichenbach. Los científicos computacionales acabaron enmendando la plana a los filósofos de la ciencia: el descubrimiento científico está tan sometido a la racionalidad como lo está la verificación (la contrastación empírica).

La reacción se observa ya a partir de la publicación de la obra de Hanson *Patrones de descubrimiento*: “my concern is not with the testing of hypotheses, but with their discovery” (Hanson 1958: 3). Téngase en cuenta que en esta obra Hanson rehabilita el papel del razonamiento abductivo Peirceano para la lógica del descubrimiento. Pero es a partir de Simon *et al.* (1962), donde se postula que el descubrimiento puede ser modelado por medio de procesos de solución de problemas, que el interés por el contexto de descubrimiento empieza a calar en campos ajenos a la filosofía oficial de la ciencia. La hipótesis de trabajo de Herbert A. Simon (1962: 145–146) y (1966b: 22) es la de que “creative thinking is simply a special kind of problem solving behavior”. O sea: “that scientific discovery is a form of problem solving, and that the processes whereby science is carried on can be explained in the terms that have been used to explain the processes of problem solving”. Antonio Benítez (2011: Cap. 8) ejemplifica el planteamiento de Simon en diversos campos, que incluye incluso la resolución de problemas en la vida cotidiana.

Para Simon *et al.* (1962: 146) la resolución de problemas se vincula con la existencia de programas informáticos: “the theory of problem solving we are putting forth derives from mechanisms that solve problems in the same manner as humans —mechanisms whose behavior can be observed, modified, and analyzed. The only available technique for constructing problem solvers is to write programs for digital computers; no other physical mechanisms are complex enough”. Los programas diseñados para computadores digitales, insisten Simon *et al.* (1962: 172,

145), “simulate human problem solving behavior”. O como resalta Robert Colodny (1966: Introduction) “The quasi mechanistic procedures employed by man in searching for solutions to well-formulated problems may be duplicated by computers”. Ahora bien, Simon (1966a: 15–16) reconoce que “human problem solvers and the computer programs that simulate them do not search for the ‘best’ solution, but for a solution that is ‘good enough’ by some criterion. Heuristics that proceed on this basis are sometimes called ‘satisficing’ heuristics”. La razón es que “Thinking is activity directed towards goals, and . . . involves considerations of whether a proposed solution is the best, or is good enough, in terms of a criterion” (Simon 1966a: 16–17).

El primer reproche verdaderamente serio sobre la actitud de la filosofía oficial de la ciencia en relación al contexto de descubrimiento lo presenta Simon (1966b: 23, mis cursivas) en los términos siguientes: “*The literature on the topic produced by philosophers of science is [. . .] less useful [. . .]* The reason is that philosophers of science tend to address themselves to the normative more than to the descriptive aspects of scientific methodology. They are more concerned with how scientists *ought to* proceed, in order to conform with certain conceptions of logic, than with how the *do* proceed”. De hecho este reproche toca directamente a la filosofía popperiana de la ciencia. En efecto Popper (1983: Introduction, p. XXV) mismo reconoce que su teoría de la ciencia es una teoría filosófica —metafísica— antes que empírica, una teoría normativa que no se vería afectada por los hechos de la historia de la ciencia: “It has been alleged by some people [. . .] that my theory of science is refuted by the facts of the history of science. This is a mistake: it is a mistake about the facts of the history of science, and it is also a mistake concerning the claims of my methodology”. Y añade “As I tried to make clear in 1934 (*L.Sc.D.*, p. 37; and sections 10 and 11), I do not regard methodology as an empirical discipline, to be tested, perhaps, by the facts of the history of science. It is, rather, a philosophical —a metaphysical— discipline, perhaps partly even a normative proposal. It is largely based on metaphysical realism, and on the logic of the situation: the situation of a scientist probing into the unknown reality behind the appearances, and anxious to learn from mistakes”.

El caso es que la actitud crítica de los científicos computacionales por la ignorancia del contexto de descubrimiento por parte de los filósofos de la ciencia es una constante. Así, por ejemplo Langley *et al.* (1987: 3, mis cursivas) reconocen que “In the philosophy of science, all the emphasis is on verification [. . .] In fact, *it is still the majority view among philosophers of science that only verification is a proper subset of inquiry, that nothing of philosophical interest can be said about the process of disco-*

very”. Más adelante (*op. cit.*, p. 23, mis cursivas) insisten en que “In the contemporary literature of the philosophy of science, with its mistaken emphasis on theory testing as the quintessential scientific activity, the tale usually begins with a theory. The theory, emanating from the brain of Zeus or some other unexamined source, calls for testing, which demands, in turn, that appropriate data be obtained through observation and experiment”. Y la misma idea aparece expresada también páginas más adelante (*op. cit.*, pp. 37–38, mis cursivas): “until very recently, twentieth-century philosophy of science was focused almost exclusively on the context of confirmation; almost no attention was paid to the context of discovery. In fact, it was frequently claimed that there could be no logical method or theory of scientific discovery; that discovery was a matter of ‘creativity’ —the free play of the human creative spirit. The task of building a theory of discovery was passed on to psychologists”. Y Paul Thagard (1988: 64) también se hace eco de esta situación: “Critics of the idea of a Logic of Discovery maintain that there can be no mechanical methods for generating successful discoveries”.

En oposición explícita a Popper se manifiestan Langley *et al.* (1987: 13–14) “Since the 1930s it has often been denied that the process of discovery is a proper topic for philosophy. Karl Popper (1961), and others, banished it from the philosophy of science. Only since the mid 1970s has there been a renewal of interest in the nature of the discovery process and the logic underlying it. [...] here we will simply assume that the discovery process is describable and that there are ways of talking about better and worse methods of discovery”. Y también Jeff Shrager y Pat Langley (1990: 1, mis cursivas): “Whereas early work in the philosophical tradition emphasized the evaluation of laws and theories (e.g. Popper 1965), recent research in the paradigm of cognitive science has emphasized scientific discovery, including the activities of theory formation, law induction, and experimentation”. Afirmación que completan en la conclusión de su trabajo (*op. cit.*, p. 20, mis cursivas) donde afirman que “the computational modeling of scientific behavior has already made significant progress on issues that philosophers of science have traditionally ignored. In particular, the field has emphasized the nature of discovery rather than evaluation, and it has dealt with the processes that underlie science as well as the representation of knowledge”. Lo que Shrager y Langley están afirmando es que los científicos computacionales vienen a llenar el hueco descuidadamente dejado libre por los filósofos de la ciencia. También Herbert Simon, más recientemente (1992: 3, mis cursivas) vuelve a arremeter contra Popper: “Scientific discovery is a central topic both for the philosophy of science and for the history of science [...] Philosophers of science have been concer-

ned mainly with the verification (or falsification) of scientific theories rather than with the origins of theories or the processes by means of which they were derived. In fact, *until very recently, most philosophers of science denied that a theory of discovery processes was possible, and that is probably still the majority view in the discipline* (Popper 1961)". Esta misma actitud la manifiesta Simon (1995: 173, *mis cursivas*), cuando, tras preguntarse si existen leyes de descubrimiento, identifica al que él mismo denomina *Popperian view* con lo siguiente: "*Until quite recently most philosophers of science denied that there could be a theory of scientific discovery, or were deeply sceptical about its possibility. (Some still are.)* [...] there could be a logic of confirmation, but no logic of discovery (Popper, 1959)". Y ya en fechas muy recientes Saso Dzeroski *et al.* (2007: 3, *mis cursivas*) siguen responsabilizando a Karl Popper por el abandono del contexto de descubrimiento por la filosofía oficial de la ciencia, al tiempo que reconocen que el espacio dejado libre por la gran mayoría de los filósofos de la ciencia acabaron ocupándolo la IA y la ciencia cognitiva:

"Most analyses of the scientific method come from philosophers of science, who have focused mainly on the evaluation of hypotheses and largely ignored their generation and revision. Unfortunately, what we refer to as discovery resides in just these activities. Thus, although there is a large literature on normative methods for making predictions from hypotheses, checking their consistency, and determining whether they are valid, there are remarkably few treatments of their production. Some (e.g., Popper (1959)) have even suggested that rational accounts of the discovery process are impossible. A few philosophers (e.g., Darden (2006); Hanson (1958); Lakatos (1976)) have gone against this trend and made important contributions to the topic, but most efforts have come from artificial intelligence and cognitive science."

Los objetivos que Langley *et al.* (1987: 4) persiguen con su libro son "to give an account of some methods of scientific discovery and to demonstrate the efficacy of these methods by using them to make a number of discoveries (more accurate, rediscoveries). The methods we propose are embedded in a set of computer programs, and they are tested by providing the programs with data that they can explore in search of regularities".

El desprecio de los filósofos de la ciencia por el contexto de descubrimiento llevó, pues, a los científicos computacionales no sólo a considerar que tal abandono está injustificado, pues el descubrimiento científico constituye de hecho un caso especial de la tarea de solución de pro-

blemas —que, por cierto, es considerada también fundamental por la filosofía de la ciencia— sino que, para dejar en evidencia el alejamiento de los filósofos de la ciencia respecto de la ciencia real, insistieron en que, además de ser una tarea importante, el descubrimiento científico es tratable computacionalmente de modo exitoso. De hecho desarrollaron una teoría computacional del descubrimiento científico, una *ciencia del descubrimiento científico*, cuya existencia invalida el rechazo del contexto de descubrimiento por Popper y demás filósofos oficiales de la ciencia.

25.3. Descubrimiento computacional. La automatización de la creatividad científica

En la sección anterior aludimos a la idea, proclamada por Herbert Simon, de que la creatividad científica constituye un caso especial de la actividad de resolución de problemas. Pues bien, hace ya medio siglo que Herbert Simon (1962: 145–146) reconocía: “If we are willing to regard all human complex problem solving as creative, then [...] successful programs for problem solving mechanisms that simulate human problem solvers already exist, and a number of their general characteristics are known”. Las tesis de Simon: que el descubrimiento científico es una forma de resolución de problemas y que esta tarea puede ser implementada computacionalmente, son asumidas plenamente por los científicos competentes. Así, Robert G. Colodny (1966: Introduction) reconoce que “modern computers [...] in combination with modern programming languages, provide [...] possibilities of accounting for some of the principal information processing mechanisms involved in human problem solving. The quasi mechanistic procedures employed by man in searching for solutions to well-formulated problems may be duplicated by computers”. Y el propio Herbert Simon (1995: 171–172) proclama la existencia de una teoría computacional del descubrimiento científico (*a computational theory of the processes of scientific discovery*), la cual “provides a basis for understanding both how human scientists make discoveries and how to build discovery systems that can aid scientists in making discoveries, either in interactive or fully automated mode”. Antonio Benítez (2011: caps. 6 y 7) aplica la idea de la automatización del razonamiento a la lógica de conectivas y a la lógica de primer orden, así como a la silogística en *op. cit.*, cap. 10.

La paternidad de Simon en la idea de la automatización del descubrimiento científico es explícitamente reconocida por Saso Dzeroski *et al.* (2007: 8): “The idea that one might automate the Discovery of

scientific knowledge has a long history, going back to the writings of Francis Bacon (1620) and John Stuart Mill (1900). However, the modern treatment of this task came from Herbert Simon, who proposed viewing scientific discovery as an instance of heuristic problem solving”.

Pat Langley *et al.* (1987: Preface) mantienen también que la teoría aceptada en ciencia cognitiva es que los programas de ordenadores “simulate human thought processes to make scientific discoveries”. Por eso, apuntan que “Our method of inquiry will be to build a computer program (actually a succession of programs) that is capable of making non-trivial scientific discoveries and whose method of operation is based on our knowledge of human methods of solving problems—in particular, the method of heuristic selective search” (*op. cit.*, p. 5). Lo que enlaza directamente con el hecho de que “Our starting point and ‘paradigm’ is contemporary information-processing psychology, or cognitive science. Currently accepted theory in this domain suggests that the processes of scientific discovery may be describable and explainable simply as special classes of problem-solving processes, closely akin to the processes that have been identified in other domains of problem solving” (Langley *et al.* 1987: Preface). Así, la *hipótesis central de sus investigaciones* es que “the mechanisms of scientific discovery [...] can be subsumed as special cases of the general mechanisms of problem solving” (*op. cit.*, p.5). O “scientific discovery is a species of normal problem solving”. Y, reiterando sus ideas: “The thesis that scientific discovery is problem solving [...] and that it can be simulated by computer, is not completely novel” (Langley *et al. op. cit.*, p. 6).

Una aceptación de la tesis citada tiene que llevar forzosamente a rechazar la preeminencia del contexto de justificación respecto del de descubrimiento. Así Langley *et al.* (*op. cit.*, pp. 38–39) afirman que su posición es la de que “the scientist has reasons for what he does when he is generating new theories as well as when he is testing those already found. The efficacy (‘rationality’, ‘logicality’) of the discovery or generation process is as susceptible to evaluation and criticism as is the process of verification”. Y se sitúan del lado de quienes asumen que también hay implícita una lógica, y por tanto una racionalidad, en el descubrimiento científico: “In 1958 (the year in which Hanson’s book *Patterns of Discovery* appeared), Newell, Shaw, and Simon, in ‘The processes of creative thinking’ (published in 1962) argued that discovery could be modelled by garden-variety problem-solving processes, such as means-ends analysis. Simon elaborated this argument in ‘Scientific discovery and the psychology of problem solving’ (1966), and in 1973 he undertook to give an affirmative answer to the question ‘Does scientific

discovery have a logic?”² (Langley *et al. op. cit.*, p. 44). E insistiendo en la racionalidad intrínseca a los procesos de descubrimiento científico Langley *et al. (op. cit.*, p. 47, mis cursivas) mantienen: “Scientific discoveries seldom, if ever, emerge from random, trial-and-error search; the spaces to be searched are far too large for that. Rationality for a scientist consists in using the best means he has available—the best heuristics—for narrowing the search down to manageable proportions [...] This is the concept of rationality that is relevant to the creative process and to problem solving in general, and *it is with this kind of rationality that a normative theory of creativity and scientific discovery is concerned*”. De ahí que la conclusión, contra la filosofía oficial de la ciencia sea: “[This book] re-examines the relations between the processes of discovery and the processes of verification, finding that these two classes of processes are far more intimately connected than is generally suggested in the literature of philosophy of science”. O, como señalan más adelante, “processes of discovery and processes of confirmation are not separate and distinct” (Langley *et al. op. cit.*, p. 5 y p. 57). Opinión a la que se adhiere Simon (1995: 174): “The [second new] idea supporting the possibility of a theory of discovery comes from the empirical observation that discovery and verification are not separate activities—the former completed before the latter begins—but are closely intermingled from the beginning of the quest”.

En línea con Simon and Langley *et al.*, se encuentra el programa de inteligencia artificial de Paul Thagard, para quien (1988: 2) “I shall argue that richer philosophical accounts of scientific problem solving, discovery, and justification can be developed using the resources of artificial intelligence than are possible with the traditional techniques of logic and set theory [...] I do hope to show that a computational approach offers ideas and techniques for representing and using knowledge that surpass ones usually employed by philosophers”. Pues bien, el programa que presenta Thagard (1988: 15), bautizado como PI—abreviatura de ‘processes of induction’— “implements in the programming language LISP a general model of problem solving and inductive inference [...] I present it as an illustration of how representation and process interact and of how an integrated general account of scientific discovery and

² Por cierto que resulta curioso, que Karl Popper, que protagoniza el rechazo de la existencia de una lógica de la investigación científica, escogiese como título para la edición inglesa de 1959 de su libro de 1934 *Logik de Forschung* (*Lógica de la Investigación Científica*) el de *Logic of Scientific Discovery*, lo que llevó a Larry Laudan (1980: 173) a la sarcástica afirmación de que “Karl Popper wrote a book called the *Logic of Scientific Discovery*, which denies the existence of any referent for this title”.

justification can begin to be developed within a computational framework”, cuya actividad central es, cómo no, “problem solving” (p. 19). Pues bien, para (Thagard, *op. cit.*, 51) “A description of PI’s simulation of both the discovery and the justification of theories will show how discovery and justification blend together, requiring a rejection of Reichenbach’s sharp distinction between a *logic* of justification and a *psychology* of discovery”. Por cierto, una de las pocas veces en la literatura de la ciencia computacional que el reproche no se dirige contra Popper sino contra Reichenbach. Y en plena consonancia con el desarrollo histórico del enfoque computacional del descubrimiento científico Paul Thagard (*op. cit.*, p. 63), mantiene rotundo que “A major goal of computational philosophy of science must be the development of AI models³ sophisticated enough to replicate [...] the thought processes underlying major discoveries in science”.

Contra los críticos de la idea de la lógica del descubrimiento, que mantienen “that there can be no mechanical methods for generating successful discoveries”, Thagard (*op. cit.*, p. 64) sostiene que “PI’s discovery techniques are mechanical in a weaker sense —they are implemented in a running computer program”. Si bien “We have to agree with the critics of the idea of a logic of discovery that there is no algorithm for making discoveries that guarantees solutions to explanation problems. But we can maintain nevertheless that the process of discovery is algorithmic, employ many algorithms, such as those implemented in PI, which foster but do not guarantee the generation of solutions”. Este es obviamente un planteamiento, contra la presunción de que los programas automáticos de descubrimiento científico pudieran garantizar la validez de las soluciones, admitido por la generalidad de los científicos computacionales.

La idea, instalada en el contexto de la ciencia computacional, inteligencia artificial o ciencia cognitiva es, como señala Raúl Valdés Pérez (1995: 220) que “Scientific discovery by machine exists, hence it is possible. There are a number of cases of computer programs that have made or enabled novel findings on a playing field in which scientists are the main players”. Y Jan M. Zytkow (1996: 300) sentencia que “One of the main research directions in machine discovery has been the automation of scientific discovery”, donde “Machine discoverers can be defined as computer systems that autonomously pursue knowledge” (Zytkow 1996: 299). Y, en definitiva, apostilla Saso Dzeroski (2007, Preface): “Computational scientific discovery focuses on applying computational methods to automate scientific activities, such as finding laws from observational data”. La máxima a que se deben ajustar es la de que “Computational

³ Es decir, programas de computación.

methods for scientific discovery should be able to infer knowledge from small data sets” (Dzeroski 2007: 10).

Un número importante de descripciones han sido acuñadas para referirnos al campo del descubrimiento científico computacional: *machine discovery*, *automated discovery*, *computer-made discovery*, *computational discovery*, *computer-aided discovery*, etc. Sin embargo muy importante a tener en cuenta es la opinión de Pat Langley (2000), reiterada en las páginas 3, 4 y 14 de que “Although the term *computational discovery* suggests an automated process, close inspection of the literature reveals that the human developer or user plays an important role in any successful project”. Así, insiste: “the more common perspective is that discovery systems should aid scientists rather than replace them”, y en la página 14 en dos ocasiones Langley (2000) reitera: “the breadth of successful computer-aided discoveries provides convincing evidence that these methods have great potential for aiding the scientific process” y “We do not intend our computational tools to replace scientists but rather to aid them”.

Si, pues, su existencia es patente, señala Valdés Pérez (1995: 223), entonces “it can and does lead to a systematic body of knowledge and hence has all the elements of a scientific field in its own right”. Jeff Shragger and Pat Langley (1990: Preface) ya habían anunciado que “We are witnessing the birth of a new field: the computacional study of science”, actividad a la que en otro momento (*op. cit.*, p. 20) mencionan como “the developing computational ‘science of science’”. Finalmente Jan Zytkow (1999: Abstract, *mis cursivas*) asume: “After two decades of research on automated discovery, many principles are shaping up as a foundation of discovery science. In this paper *we view discovery science as automation of discovery by systems who autonomously discover knowledge and a theory of such systems*. [...] a set of principles shall become a theory of discovery which can explain discovery systems and guide their construction”.

Las razones que guían el estudio del descubrimiento científico desde una perspectiva computacional son, en opinión de Saso Dzeroski *et al.* (2007: 2) las siguientes: “to understand how humans perform this intriguing activity, which belongs to the realm of cognitive science; and to automate or assist in facets of the scientific process, which belongs to the realm of artificial intelligence”.

Tenemos pues una nueva ciencia: la ciencia o teoría del descubrimiento científico, que es la teoría de los sistemas de descubrimiento científico automático, que los explica y guía en su construcción. Como esta nueva ciencia se relaciona estrechamente con la filosofía de la ciencia y la teoría del conocimiento, podemos afirmar que el descubri-

miento científico es el lugar de encuentro entre la filosofía de la ciencia y la ciencia computacional, lo que posibilita que los filósofos de la ciencia recuperen el terreno perdido ante los científicos computacionales en el tratamiento del descubrimiento científico, al reconocer la existencia de formas o sistemas automáticos de descubrimiento.

25.4. El sueño del descubrimiento científico computacional: el robot científico

La idea de un robot descubridor capaz de crear autónomamente conocimiento científico es el objetivo final de la teoría de la automatización del razonamiento. Como dice Jan Zytkow (1995: Abstract): “Construction of a robot discoverer can be treated as the ultimate success of automated discovery”. Su visión del robot descubridor es la siguiente: “We can imagine an automated discovery system as a robot, similar in capabilities to human discoverers. It would make experiments, sense their results and build theories from empirical data. It would revise theories in view of new experiments, and continue this process indefinitely”. Aunque reconoce que “The grand vision of a robot as capable as human discoverers is still in the domain of science fiction, and many question its feasibility. [...] The grand vision certainly stimulates imagination and serves as a master plan for much of research on discovery” (Zytkow 1995: 254).

No obstante, esta visión no está tan lejana ni es utópica. Ross D. King *et al.* (2009) con su robot científico Adam en el campo de la biología experimental han dado pasos agigantados en la realización del gran proyecto del descubrimiento científico computacional. El uso que King *et al.* (2009: 85) dieron a Adam fue aplicarlo “to the identification of genes encoding orphan enzymes in *Saccharomyces cerevisiae*: enzymes catalyzing biochemical reactions thought to occur in yeast, but for which the encoding gene(s) are not known”. El logro de Adam (King *et al.* 2009: Abstract) fue: “Adam has automatically generated functional genomics hypotheses about the yeast (levadura) *Saccharomyces cerevisiae* and experimentally tested these hypotheses by using laboratory automation. We have confirmed Adam’s conclusions through manual experiments”.

Qué es un robot científico y qué tareas lleva a cabo lo expresan King *et al.* (2009: 85, mis cursivas) de la siguiente manera: “A natural extension of the trend to ever-greater computer involvement in science is the concept of a robot scientist. This is a physically implemented laboratory automation system that exploits techniques from the field of

artificial intelligence to execute cycles of scientific experimentation. *A robot scientist automatically originates hypotheses to explain observations, devises experiments to test these hypotheses, physically runs the experiments by using laboratory robotics, interprets the results, and then repeats the cycle*". Pues bien, un robot científico, siguiendo la visión de Zytkow, es tan capaz y completo como un científico humano: "Because the experiments are conceived and executed automatically by computer, it is possible to completely capture and digitally curate all aspects of the scientific process". Pero, siguiendo la línea de pensamiento generalmente admitida en la teoría de descubrimiento automático, la idea no es que el robot acabe sustituyendo al científico, sino que lo que se produzca sea una labor de cooperación: "*The idea is to develop a way of enabling teams of human and robot scientists to work together*" (King *et al.* 2009: 88, mis cursivas).

Una descripción del trabajo de Adam, *que incluye la abducción de hipótesis*, (King *et al.* 2009: 85–86) confirma que la tarea humana consiste en proveer al robot de toda la infraestructura de soft y hardware necesaria para llevar a cabo su tarea; a partir de lo cual no se requeriría ninguna intervención humana: "To set up Adam for this application required (i) a comprehensive logical model encoding knowledge of *S. cerevisiae* metabolism [...] expressed in the logic programming language Prolog; (ii) a general bioinformatic database of genes and proteins involved in metabolism; (iii) software to abduce hypotheses about the genes encoding the orphan enzymes, done by using a combination of standard bioinformatic software and databases; (iv) software to deduce experiments that test the observational consequences of hypotheses (based on the model); (v) software to plan and design the experiments, [...] (vi) laboratory automation software to physically execute the experimental plan and to record the data and metadata in a relational database; (vii) software to analyze the data and metadata (generate growth curves and extract parameters); and (viii) software to relate the analyzed data to the hypotheses; for example, statistical methods are required to decide on significance".

La conclusión de King *et al.* (2009: 88, mis cursivas) es: "*We have shown that a simple form of hypothesis-led discovery can be automated. What remain to be determined are the limits of automation*".

25.5. Conclusión

La teoría del descubrimiento científico automático amplía y enriquece el campo de la filosofía actual de la ciencia. Aprender de nuestros errores es la máxima que el hombre que piensa críticamente se aplica

en todas sus actuaciones. El desprecio por el contexto de descubrimiento ha supuesto un coste muy alto para la filosofía oficial de la ciencia, del que empieza a recuperarse lentamente, por el retraso en que ha incurrido. Un precedente fue ya su ignorancia de la relevancia del razonamiento abductivo en la metodología de las ciencias observacionales de la Naturaleza (cfr. Rivadulla 2008). Muchos problemas tienen que ser repensados y muchos resultados son esperables en un futuro de colaboración entre filosofía de la ciencia y teoría de la computación científica. La fertilidad de la relación entre física y filosofía, biología y filosofía, etc., auguran buenos y bellos frutos en el devenir de esta colaboración.

Bibliografía

1. Benítez, A. (2011): *Fundamentos de Inteligencia Artificial. Libro Segundo: Inteligencia Artificial Clásica*. Madrid: Escolar y Mayo.
2. Colodny, R. G. (ed.) (1966): *Mind and Cosmos. Essays in Contemporary Science and Philosophy*. University of Pittsburgh Press.
3. Dzeroski, S., Langley, P. and Todorovski, L. (2007): “Computational Discovery of Scientific Knowledge”. In Sazo Dzeroski and Ljupco Todorovski (eds.), *Computational Discovery of Scientific Knowledge. Introduction, Techniques, and Applications in Environmental and Life Sciences*. LNAI 4660, Berlin-Heidelberg: Springer.
4. Evans, J. and Rzhetsky, A. (2010): “Machine Science”. *Science*, vol. 329, 23 July 2010, 399–400.
5. Hanson, N. R. (1958): *Patterns of Discovery. An Inquiry into the Conceptual Foundations of Science*. Cambridge: University Press.
6. King, R. D. et al. (2009): “The Automation of Science”. *Science*, vol. 324, 3 April 2009, 85–89.
7. Langley, P., Simon, H., Bradshaw, G. L., and Zytkow, J. M. (1987): *Scientific Discovery. Computational explorations of the Creative Processes*. Cambridge, MA: The MIT Press.
8. Langley, P. (2000): “The Computational Support of Scientific Discovery”. *Int. Journal of Human-Computer Studies*, vol. 53, nº 3: 393–410.
9. Popper, K. (1959): *The Logic of Scientific Discovery*. London: Hutchinson. Primera edición alemana, *Logik der Forschung*. Edición española: *La Lógica de la Investigación Científica*, Madrid: Tecnos.
10. Popper, K. (1960): *The Poverty of Historicism*. London: Routledge.
11. Popper, K. (1983): *Realism and the Aim of Science*. London: Hutchinson. Edición española, *Realismo y el objetivo de la ciencia*, Madrid: Tecnos 1985.
12. Reichenbach, H. (1938): *Experience and Prediction: An analysis of the foundation and the structure of knowledge*. Chicago: University of Chicago Press.

13. Rivadulla, A (2008): “Discovery practices in natural sciences: from analogy to production”. *Revista de Filosofía* Vol. 33, Núm 1: 117–137.
14. Shrager, J. and Langley, P. (1990): “Computational Approaches to Scientific Discovery”. In Jeff Shrager and Pat Langley, *Computational Models of Scientific Discovery and Theory Decision*, San Mateo, California: Morgan Kaufmann Publishers.
15. Simon, H. A., Newell, A. and Shaw J. C. (1962): “The Process of Creative Thinking”. In Herbert Simon, *Models of Thought*, New Haven and London: Yale University Press 1979.
16. Simon, H. A. (1966a): “Thinking by Computers”. In Robert G. Colodny (ed.), *Mind and Cosmos. Essays in Contemporary Science and Philosophy*, University of Pittsburgh Press.
17. Simon, H. A. (1966b): “Scientific Discovery and the Psychology of Problem Solving”. In Robert G. Colodny (ed.), *Mind and Cosmos. Essays in Contemporary Science and Philosophy*, University of Pittsburgh Press.
18. Simon, H. A. (1992): “Scientific Discovery as Problem Solving”. *International Studies in the Philosophy of Science* 6, No. 1, 1992: 3–14.
19. Simon, H. A. (1995): “Machine Discovery”, *Foundations of Science* 2, 171–200. Reprinted in Jan Zytkow (ed.), *Machine Discovery*, Dordrecht: Kluwer Academic Press 1997.
20. Thagard, P. (1988): *Computational Philosophy of Science*, Cambridge, MA: The MIT Press.
21. Valdés-Pérez, R. E. (1995): “Machine Discovery Praxis. Comments on Herbert Simon’s Paper”. *Foundations of Science* 2, 219–224. Reprinted in Jan Zytkow (ed.), *Machine Discovery*, Dordrecht: Kluwer Academic Press 1997.
22. Zytkow, J. M., (1995): “Creating a Discoverer: Autonomous Knowledge Seeking Agent”. *Foundations of Science* 2, 253–283. Reprinted in Jan Zytkow (ed.), *Machine Discovery*, Dordrecht: Kluwer Academic Press 1997.
23. Zytkow, J. M., (1996): “Automated Discovery of Empirical Laws”. *Fundamenta Informaticae* 27: 299–318.
24. Zytkow, J. M., (1999): “The Melting Pot of Automated Discovery: Principles of a New Science”. In Setsuo Arikawa and Koichi Furukawa (eds.), *Proceedings of Discovery Science 1999. Lecture Notes in Computer Science*, vol. 1721, Springer 1999: 1–12.