UMA PROPOSTA DE MODELAGEM MATEMÁTICA: Prática de diluição contínua monitorada por espectrofotometria visível na motivação do ensino de equações diferenciais para alunos de química

A PROPOSAL OF MATHEMATICAL MODELING: A practice of continuous dilution monitored by visible spectrophotometric as differential equations learning motivation for chemistry students

Marcelo Sierpe Predosa[1]
João Carlos Martins Mafra[2]
Angelo Santos Siqueira[3]

Resumo

Este artigo apresenta uma proposta de modelagem matemática através de uma prática de diluição contínua monitorada por espectrofotometria visível com objetivo de motivar o ensino de equações diferenciais para alunos de química. Inicialmente fazemos uma introdução justificando a escolha do tema, em seguida apresentamos o modelo matemático escolhido, que são as equações diferenciais ordinárias de primeira ordem lineares, descrevemos as etapas para a modelagem e finalizamos o trabalho com as conclusões.

Palavras-chave: Diluição contínua; Equações diferenciais; Espectrofotometria; Ensino de Química.

Abstract

This paper presents a proposal of mathematical modelling through a practice of continuous dilution monitored by visible spectrophotometric in order to motivate the teaching of differential equations for students of chemistry. Initially we do an introduction justifying the choice of theme, then introducing the mathematical model chosen, which are the ordinary differential equations of first order linear, describe the steps for modelling and finish the work with the conclusions.

Keywords: Continuous dilution; Differential equations; Spectrophotometry; Chemistry Education.

---

[1] Doutor em Química pela UFRJ, Professor do Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ)
[2] Mestre em Química pela UFRJ, Professor do Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ), Pesquisador da Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz)
[3] Doutor em Engenharia de Produção pela UFRJ. Professor do Programa de Pós-Graduação em Letras e Ciências Humanas da Universidade do Grande Rio (UNIGRANRIO).

Introdução

Muitos problemas do nosso cotidiano podem ser propostos como problemas de modelagem matemática, isto é, tentar entender o comportamento da natureza por meio de teorias adequadas, com o objetivo principal de tomar decisões. A modelagem matemática, arte de expressar por intermédio de linguagem matemática situações-problema de nosso meio, é tão antiga quanto a própria Matemática. Essa expressão, em seu conceito moderno, surgiu durante o Renascimento, quando se construíram as primeiras ideias da Física apresentadas segundo um ponto de vista matemático. Hoje, a modelagem matemática constitui um ramo próprio da Matemática, com aplicações em várias áreas do conhecimento.

Quando se procura fazer inferências a partir de uma porção da realidade, na tentativa de explicar, de entender, ou de agir sobre ela, o procedimento usual é selecionar a ferramenta, isto é, o modelo ideal através do qual o sistema será representado. Bassanezi (2010), rassalta que quando analisamos um fato ou uma situação real cientificamente, isto é, com o propósito de substituir a visão ingênua desta realidade por uma postura crítica e mais abrangente, deve-se procurar uma linguagem adequada que facilite e racionalize o pensamento. Desta forma, o modelo escolhido para o desenvolvimento da presente proposta são as equações diferenciais ordinárias.Ele ressalta ainda que:

> O objetivo fundamental do uso de matemática é de fato extrair a parte essencial da situação-problema e formalizá-la em um contexto abstrato onde o pensamento possa ser absorvido com uma extraordinária economia de linguagem. Desta forma, a matemática pode ser vista como um instrumento intelectual capaz de sintetizar ideias concebidas em situações empíricas que estão quase sempre camufladas num emaranhado de variáveis de menor importância. (p.18).

Modelos matemáticos, em termos de equações diferenciais são adequados quando as situações modeladas envolvem variáveis contínuas[4] evoluindo em relação a outras variáveis contínuas. Essas equações permitem, muitas vezes, que se façam previsões sobre o comportamento do processo em circunstâncias diversas, principalmente quando o processo for de contexto experimental.

A partir dessas colocações acerca de modelos matemáticos, entendemos ser de fundamental importância sua aplicação em outras áreas de conhecimento. Como enfatizam os Parâmetros Curriculares Nacionais, a matemática, que ocupa uma posição singular devido à sua

[4] Varável é a característica de interesse que é medida em cada elemento da amostra, e será contínua se puder assumir (teoricamente) qualquer valor dentro de um intervalo real.

universalidade de quantificação e expressão, atua de maneira insubistituível em todas as atividades da vida contemporânea.

Nesse sentido, pretendemos entrelaçar conceitos de química e matemática com a aplicação de equações diferenciais ordinárias, a partir da seguinte inquietação: Ao nos depararmos com um exemplo resolvido em um livro didático, em alguns casos, nos perguntamos se isso realmente funciona na "vida real", isto é, se modelarmos exatamente como feito no livro, os resultados obitidos serão os mesmos?

É com base nessa situação, que se pretende propor um modelo, baseado em equações diferenciais lineares de 1ª ordem, que nos auxilie na avaliação da variação da concentração de uma dada substância em solução (soluto), através de um processo contínuo de diluição relacionando vazões de entrada e saída em função do tempo, como elemento motivador para o ensino de equações diferenciais para alunos de química.

Ressaltamos ainda que, segundo as Diretrizes Curriculares Nacionais para os Cursos de Química, no item Competências e Habilidades relacionadas à formação pessoal, um egresso deve possuir habilidades suficientes em Matemática para coompreender conceitos de Química e desenvolver modelos quantitativos de previsão. Tais habilidades envolvem ainda articulações entre diversos saberes de forma interdisciplinar, possibilitando uma visão mais holística do mundo na qual as áreas de conhecimento estão interrelacionadas e se complementam.

O Modelo Matemático Utilizado

Apresentaremos agora o modelo matemático utilizado e, posteriormente, as etapas propostas para a aplicação deste modelo no ensino de química. Inicialmente é preciso enfatizar que entendemos que o elemento motivador principal está no fato do aluno sair de sala de aula e ser levado ao laboratório para realizar o experimento. Segundo Guimarães (2009), as críticas feitas ao ensino tradicional estão ligadas a postura passiva do aluno, tratado como ouvinte pelo professor que apenas expõe informações descontextualizadas. Um dos caminhos possíveis para mudar esse quadro é privilegiar, além da conceituação teórica, a experimentação, parte fundamental da educação científica: "No ensino de ciências, a experimentação pode ser uma estratégia eficiente para a criação de problemas reais que permitam a contextualização e o estímulo de questionamentos de investigação" (p. 198).

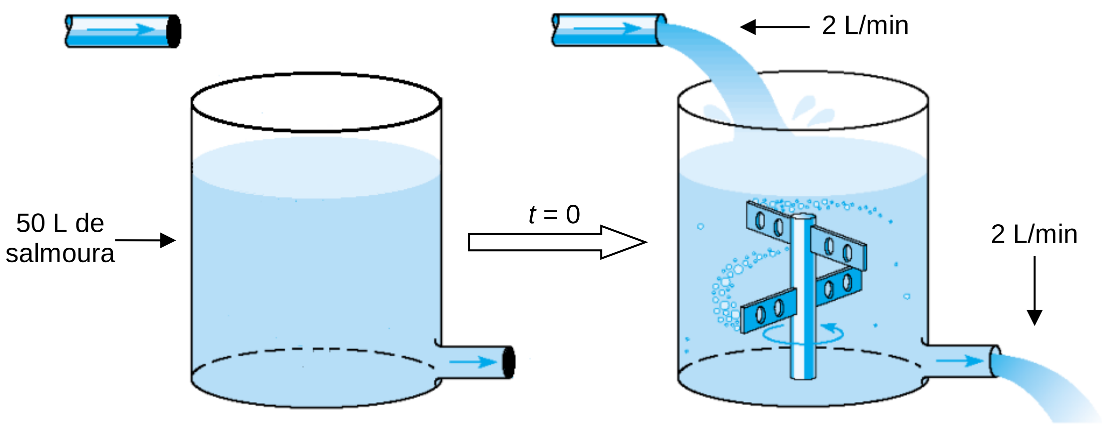
Nossa proposta se enquadra assim em levar o aluno de graduação a criar uma postura ativa e crítica para resolver situações-problema, como apresentado abaixo.

Segundo Boyce e DiPrima (2010), as equações diferenciais são muito interessantes para os não matemáticos devido à possibilidade de serem usadas para investigar uma gama de problemas reais. Afirmam ainda que essas equações permitem, muitas vezes, que se façam previsões sobre o comportamento do processo em circunstâncias diversas, inclusive quando o processo for muito longo ou caro, mas é fundamental que o modelo seja validado, comparando-se suas previsões com os resultados experimentais. Desta forma, pode-se resumir todo o processo de modelagem matemática em três importantes etapas: a construção, a análise e a validação do modelo.

A construção do modelo tem como objetivo expressar por meio de uma linguagem matemática os princípios que governam o processo. Neste momento é importante identificar claramente as variáveis, escolher as unidades de medida de forma correta e utilizar, se possível, alguns resultados teóricos já conhecidos. Para ilustrar didaticamente esta etapa, considere o seguinte exemplo[5], adaptado de Bronson (2008):

Consideremos um tanque que contém inicialmente 50 litros de salmoura (mistura de sal com água) com 0,5 kg de sal. Em t = 0, outra solução de salmoura, com 0,2 kg de sal por litro, começa a entrar no tanque à razão de 2 L/min, enquanto, simultaneamente, a mistura, bem agitada e homogeneizada, deixa o tanque na mesma vazão da entrada de água (Figura 1). O problema consiste em determinar a quantidade de sal no tanque em função do tempo, após iniciado o processo.

Figura 1. Diluição contínua de uma solução salina. (Adaptado de Boyce e DiPrima (2010), p.27)



[5] É importante enfatizar que nossa opção por trabalhar esse exemplo em nível superior não invalida que essa situação problema possa ser apresentada para alunos de outros níveis de ensino com intuito de trabalhar os conceitos envolvidos e discutir possíveis soluções.

Seja *Q* a quantidade (em kg) de sal no instante arbitrário *t*. A taxa de variação de *Q*, $\frac{dQ}{dt}$, é igual a taxa à qual o sal entra no tanque menos a taxa à qual o sal sai do tanque. Em símbolos, $\frac{dQ}{dt}$ =taxa de entrada – taxa de saída

O sal entra no tanque à taxa de 0,2 kg/L ×2 L/min = 0,4 kg/min. Para determinar a taxa à qual o sal sai do tanque, devemos primeiro calcular o volume de salmoura no tanque no instante arbitrário *t*, que é o volume inicial 50 L, mais o volume acrescentado 2*t* L, menos o volume retirado 2*t* L. Assim, o volume de salmoura no instante *t* é 50 L + 2*t* L – 2*t* L = 50 L. Note que neste exemplo, as vazões de entrada e saída são iguais, mas este fato não afeta em nada a construção do modelo.

A concentração de sal no tanque no instante *t* é $\frac{Q}{50}$ kg/L, donde decorre que o sal sai do tanque à taxa de 2 L/min $\times\frac{Q}{50}$ kg/L = $0,04Q$ kg/min. Assim a equação diferencial que modela o problema, pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{dQ}{dt}=0,4-0,04Q \text{ ou } \frac{dQ}{dt}+0,04Q=0,4 .$$

O próximo passo consiste em analisar a equação obtida, isto é, verificar se existe alguma lei de formação para o modelo que esteja descrita na literatura. Como nosso público alvo são alunos de graduação, em geral, as equações que surgem na etapa anterior são conhecidas. O que se procura numa modelagem é estabelecer um ponto de partida com modelos simples, não comprometedores e que possam ser modificados conforme os objetivos vão sendo ampliados.

É o caso da equação $\frac{dQ}{dt}+0,04Q=0,4$ que é uma equaçãodiferencial ordinária linear de primeira ordem com função incógnita *Q*(*t*) e variável independente *t*, isto é, a solução será uma função *Q*, que depende apenas de *t*. Generalizando, temos:

Dada uma equação diferencial $\frac{dy}{dx}=f(x,y)$. Se $f(x,y)$ puder ser reescrita como $f(x,y)=-p(x)y+q(x)$ a equação diferencial é chamada de linear. As equações diferenciais lineares de primeira ordem podem sempre se expressar como $y'+p(x)y=q(x)$, com *p*(*x*) e *q*(*x*) funções de *x*, na sua forma mais reduzida.Um bom método para se resolver equações desse tipo é o método do fator integrante[6], que consiste em multiplicar todos os membros da equação por um fator integrante *I*(*x*), isto é:

$$I(x)y'(x)+I(x)p(x)y(x)=I(x)q(x)$$

de tal modo que o termo da esquerda da nova equação seja exatamente da derivada da função $I(x)y(x)$, ou seja:

$$\frac{d}{dx}\left[I(x)y(x)\right]=I(x)y'(x)+I(x)p(x)y(x).$$

Mas para que isso ocorra, devemos exigir que $I'(x)=I(x)p(x)$. Desse modo, devemos primeiramente resolver esta última equação diferencial, que por ser separável e bem simples, possui uma solução da forma $I(x)=e^{\int p(x)dx}$.

Assim, $\frac{d}{dx}\left[y(x)e^{\int p(x)dx}\right]=q(x)e^{\int p(x)dx}\Rightarrow y(x)e^{\int p(x)dx}=\int q(x)e^{\int p(x)dx}dx\Rightarrow$

$y(x)=e^{-\int p(x)dx}\int q(x)e^{\int p(x)dx}dx$, que é a solução geral de uma equação diferencial ordinária liner linear de 1ª ordem.

Com isso, a solução geral da equação $\frac{dQ}{dt}+0,04Q=0,4$ é $Q(t)=e^{-0,04t}\int 0,4e^{0,04t}dt\Rightarrow$ $Q(t)=10+ce^{-0,04t}$, onde *c* é uma constante arbitrária. Como em *t* = 0, *Q* = 0,5, obtém-se a seguintesolução particular $Q(t)=10-9,5e^{-0,04t}$. Pode-se, por exemplo, determinar o tempo necessário para se atingir uma massa de 5 kg de sal no tanque, resolvendo-se a equação da seguinte forma: $10-9,5e^{-0,04t}=5$. Desta forma, encontra-se em t = 16 min, ou seja, 16 minutos após o início do processo, haverá cerca de 5 kg de sal no tanque.

A terceira e última etapa é a validação do modelo, em outras palavras, precisamos comparar os resultados teóricos com os experimentais, se possível. Nem sempre é viável transformar um simples exemplo num experimento real, pois o processo pode ser longo e/ou dispendioso.

A abordagem dessa questão presente na maioria dos livros de matemática utiliza basicamente a diluição de salmoura, que para efeito de entendimento do modelo matemático é

[6] Fator integrante é uma função utilizada para facilitar uma integração e resolver uma equação diferencial.

satisfatório, no entanto, fica a falsa impressão de que o acompanhamento desta diluição em termos práticos seja simples. Segundo Vogel (1992) e Skoog *et al.* (2006), a dosagem de soluções salinas normalmante é realizada através de técnicas gravimétricas ou titulométricas, que além de trabalhosas, demandam bastante tempo de execução. Como nosso objetivo principal é buscar um experimento simples que possa motivar o aluno de química a entender o comportamento de um modelo matemático baseado em equações diferenciais, essas técnicas gravimétricas ou titulométricas aumentariam sobremaneira o tempo de prática, e tiraria o foco da discussão desejada.

Uma alternativa a diluição da salmoura, seria utilizar uma solução aquosa de uma substância que apresente um espectro com um comprimento de onda de máximo de absorção na região de 400 a 700 nm, como, por exemplo, corantes ou sais inorgânicos coloridos. Isto viabilizaria o acompanhamento da diluição por espectofotometria na região do visível, favorecendo a execussão do experimento de forma relativamente rápida, uma vez que essas leituras são comparativamente muito mais simples que as técnicas gravimétricas e titulométricas citadas acima. Dessa forma, poderia-se, durante o período de uma aula prática de aproximadamente 1h, realizar a diluição e as medidas espectrofotométricas necessárias para posterior análise de dados e comparação com os resultados esperados pelo modelo teórico.

Etapas da Proposta

Nesta seção descrevemos as etapas para a realização de um experimento de diluição contínua de uma substância colorida, que pode ser desenvolvido durante um curso regular de equações diferenciais para alunos de graduação em química ou engenharia química. Biembengut e Hein (2003) destacam que:

> Dessa forma, a modelagem matemática no ensino pode ser um caminho para despertar no aluno o interesse por tópicos matemáticos que ele ainda desconhece, ao mesmo tempo que aprende a arte de modelar, matematicamente. Isso porque é dada ao aluno a oportunidade de estudar situações-problema por meio de pesquisa, desenvolvendo seu interesse e aguçando seu senso crítico. (p. 18).

Como metodologia de trabalho, optamos em trabalhar com uma metodologia própria, mas sustentados cientificamente por Biembengut e Hein (2003), Bassanezi (2010) e Boyce e DiPrima (2010). Os primeiros autores ressaltam que uma atividade de modelagem matemática compreende três grandes momentos fundamentais (Interação, Matematização e Modelo Matemático), e que podem ser subdivididos em seis subetapas: Reconhecimento da situação-problema;

Levantamento do referencial teórico; Formulação do problema; Resolução do problema em termos do modelo; Interpretação da solução e Validação do modelo. Bassanezi (2010) diz que as técnicas do processo de modelagem se dividem em cinco etapas: Escolha do tema e objetos de estudo; Levantamento de dados; Ajuste de curvas; Construção de modelos e Discussão e críticas. Enquanto que os últimos autores, como já mencionado anteriormente, resumem todo o processo de modelagem matemática em três etapas: Construção; Análise e Validação do modelo.

Desta forma, dividimos nossa proposta em sete etapas:

1ª Etapa: Escolha da substância colorida para o experimento de diluição contínua. Dentre os potenciais sais inorgânicos coloridos podemos citar o cloreto de cobalto hexaidratado (cor de malva), cloreto de níquel (verde), o cromato de sódio (amarelo), dicromato de potássio (laranja), ferricianeto de potássio (vermelho), sulfato de cobre (azul) e o permanganato de potássio. Destes destaca-se o dicromato de potássio por ser frequentemente empregado como padrão para verificação da acurácia de absorbância na região do UV-visível em concentrações menores que 0,9 g/L[5,6].Outra possibilidade seria a utilização de corantes orgânicossintéticos hidrossolúveis, taiscomo o Vermelho do Congo, Cristal Violeta, Safranina O, Laranja de Acridina, Azul de Anilina, Castanho de Bismarck Y, Azul de metileno, Rubin S[7]ou naturais como Curcumina, Carmim da Cochonilha e o Vermelho de Beterraba (Betalaínas).[8]Os corantes orgânicos, no entanto, são geralmente mais caros que os inorgânicos, porém pode ser uma boa alternativa para a realização de aulas práticas, devido à menor toxidez de alguns destes, o que permite que possam ser, frequentemente, usados na indústria alimentícia;

2ª Etapa: Realização da espectrofotometria na região do visível de uma substância colorida escolhida, que para a nossa proposta sugerimos dicromato de potássio;

3ª Etapa: Obtenção de uma curva de calibração dentro da região de linearidade esperada pela Lei de Lambert-Beer e em concentrações menores ou iguais às concentrações empregadas no experimento de diluição contínua;

4ª Etapa: Realização do experimento de diluição contínua, conforme proposto por Bronson (2008) e que possa ser modelado por uma equação diferencial ordinária linear de 1ª ordem;

5ª Etapa: Interpretação dos resultados obtidos após a realização do experimento de diluição contínua e da construção do modelo;

6ª Etapa: Aplicação de testes estatísticos, como, por exemplo, o Teste t de Student, para verificar se existem diferenças significativas entre os resultados teóricos e experimentais.

7ª Etapa: Validação ou verificação de ajustes do modelo matemático proposto.

Conclusões

É importante citar que além da proposta de se estudar a modelagem matemática utilizando um experimento de diluição contínua como motivador para o processo ensino-aprendizagem, os alunos durante o procedimento estariam consolidando o conhecimento de estatística em função da elaboração de gráficos e tabelas, do cálculo de medidas de posição e dispersão e da aplicação de testes de hipótesespertinentes ao experimento.

A integração da prática de diluição contínua com o tema de equações diferenciais deverá se constituir num importante instrumento motivador no processo de ensino-aprendizagem não só sobre o tema equações diferenciais, mas também de todos os outros conceitos necessários para a realização da aula prática, comoestatística e espectrofotometria, através de um experimento simples e de baixo custo.

Referências

BASSANEZI, R. C. *Equações Diferenciais: com aplicações*. São Paulo, Harbra, 1988.

BASSANEZI, R. C. *Ensino-aprendizagem com Modelagem Matemática*. São Paulo, Contexto, 2010.

BIEMBENGUT, M. S. e HEIN, N. *Modelagem Matemática no Ensino*. São Paulo, Contexto, 2003.

BOYCE, W. E. E DI PRIMA, R. C. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno*. Rio de Janeiro, LTC, 2010.

BRANT, C. F.; BURAK, D. e KLÜBER, T. E. *Modelagem Matemática: uma perspectiva para a educação básica*. Ponta Grossa, UEPG, 2010.

BRASIL / Ministério da Educação. Conselho Nacional de Educação. *Diretrizes Curriculares nacionais para os Cursos de Química*; Parecer CNE/CES 1.303/2001, de 06/11/2001. Brasília, MEC, 2001.

BRASIL / Ministério da Educação. Conselho Nacional de Educação. *Parâmetros Curriculares Nacionais – Ensino Médio*. Brasília, MEC/SEF, 2000.

BRONSON, R. *Equações diferenciais*. Porto Alegre, Bookman, 2008.

GUIMARÃES, C. C. Experimentação no ensino de química: caminhos e descaminhos rumo à aprendizagem significativa. *Química Nova na Escola*. v. 31, n. 3, 2009.

VOGEL, A. I. *Análise Química Quantitativa*. Rio de Janeiro, Guanabara Koogan, 1992.

SKOOG, D. A.;WEST, D. M.; HOLLER, F. J. e CROUCH, S. R. *Fundamentos de Química Analítica*. São Paulo, Thomson, 2006.