

O CONHECIMENTO MATEMÁTICO e o uso de softwares gráficos

MARIA HELENA S. S. BIZELLI • MARCELO DE CARVALHO BORBA
PÓS-GRADUAÇÃO EM EDUCAÇÃO MATEMÁTICA - UNESP - RIO CLARO

INTRODUÇÃO

É inegável a existência de uma excessiva preocupação, por parte de alunos e docentes, com a finalidade da Matemática – principalmente em cursos onde a Matemática não é tida como a principal disciplina do currículo. Aumentam ainda mais essa preocupação as enormes dificuldades apresentadas pelos alunos na aprendizagem de conceitos relacionados a esta disciplina. As preocupações iniciais estão relacionadas com o Ensino de Matemática em um curso de Química em nível de 3º grau, no sentido de saber que a Matemática é necessária para a formação de um químico e, conseqüentemente, para o desenvolvimento de suas diversas atividades profissionais.

Em várias instituições de ensino em nível de 3º grau podemos notar a presença do computador nas secretarias, nos laboratórios didáticos, acoplados ou não a sofisticadas aparelhagens, nas salas de administração e nas salas dos docentes. Podemos notar que a grande maioria dos alunos e docentes utilizam o computador na elaboração de seus trabalhos acadêmicos, quer seja apenas como simples máquina de escrever, quer seja como uma ferramenta indispensável para o desen-

volvimento de projetos de pesquisas avançadas, nas mais diversas áreas.

Observando mais de perto um aluno usuário do computador em suas atividades, notamos que ele consegue manipular os programas e obter resultados sem grandes problemas. Particularmente em relação a programas que pressupõem a compreensão de conceitos matemáticos para sua utilização, como por exemplo os programas gráficos, observamos que mesmo aqueles com deficiência na aprendizagem desses conceitos conseguem manipular tais programas com uma destreza que chega muitas vezes a surpreender. Tal fato causa estranheza, no mínimo, uma vez que até mesmo a compreensão e a utilização correta dos recursos fornecidos pelo programa pressupõem a compreensão de conceitos matemáticos.

Cabe então perguntar: é necessário um conhecimento matemático para trabalhar com programas deste tipo? Se a resposta for afirmativa, que conhecimento é esse? Quais os problemas (se é que existem) que a falta desse conhecimento pode acarretar para o usuário? De que maneira o conhecimento matemático pode melhorar o desempenho do usuá-

rio na elaboração de seu trabalho com o auxílio do computador? E se a resposta para a primeira questão for negativa, como podemos entendê-la?

Este estudo busca fornecer pontos de reflexão sobre alguns aspectos das questões levantadas, como parte de um projeto de pesquisa intitulado “Que Matemática o químico utiliza em suas diversas atribuições?”¹.

A QUÍMICA, A MATEMÁTICA E O COMPUTADOR

A Química

“A Química é o estudo das propriedades dos materiais e das mudanças que ocorrem com esses materiais” (Brown et al, 1994). A Química é uma ciência experimental. Nos dias de hoje, usar experiências para entender a natureza parece ser consenso geral, mas isso não acontecia antes do século XVII, quando raramente eram usadas experiências. Os gregos antigos, por exemplo, não confiavam em experiências para testar suas idéias.

Ao observarmos o gelo derreter, a

água evaporar, a cor das folhas mudar no outono, o ferro enferrujar quando exposto à chuva, uma bateria gerar eletricidade, o resfriamento retardar a deterioração dos alimentos, estamos lidando com o mundo macroscópico, o mundo dos nossos sentidos cotidianos. A perspectiva da Química, ao procurar entender as propriedades da matéria, envolve o mundo microscópico, o mundo dos átomos e moléculas. Assim, pode-se dizer que os químicos fazem suas observações no mundo macroscópico mas pensam em termos do mundo microscópico.

A interação do homem com o mundo levanta questões básicas sobre os materiais ao nosso redor. Quais são as composições e propriedades desses materiais? Como podem interagir conosco e com o meio ambiente? Como, por que e quando esses materiais sofrem mudanças? Podemos ver a importância de questões como estas imaginando-se que o material seja, por exemplo, um moderno polímero envolvido na fabricação de chips de computador, um pigmento antigo utilizado por pintores renascentistas ou um material extraterrestre coletado durante uma missão espacial. A Química fornece respostas a essas questões e a uma infinidade de outras mais.

De acordo com Brown et al (1994), embora dois cientistas diferentes raramente vejam o mesmo problema exatamente da mesma maneira, existem diretrizes para a prática da ciência que são conhecidas como método científico. Essas diretrizes são as seguintes: começa mos coletando informações ou dados pela observação e experiência, levando em conta que este não é o principal objetivo. O objetivo é encontrar um padrão

ou sentido de ordem em nossas observações e entender a origem dessa ordem. O método científico é um conjunto de regras gerais para resolver problemas que envolvem fazer observações, buscar padrões nas observações, formular hipóteses para explicar as observações e testar estas hipóteses por meio de experiências adicionais.

Ao executar as experiências, podem surgir modelos que irão conduzir a explicações ou hipóteses que servirão de guias no planejamento de outras experiências. Eventualmente, podemos ser capazes de juntar um grande número de observações em termos de uma única declaração ou equação chamada de lei científica. Uma lei científica é uma declaração verbal concisa ou uma equação matemática que resume uma variedade ampla de observações e experiências. Há uma tendência natural em pensar nas leis da natureza como regras básicas sobre as quais a natureza opera. Contudo, não é a matéria que obedece as leis de natureza, mas sim as leis da natureza que descrevem o comportamento da matéria.

Se uma hipótese é suficientemente geral e é continuamente efetiva na predição de fatos ainda não observados, ela é chamada de teoria ou modelo. Uma teoria é uma explicação dos princípios gerais de certo fenômeno com evidência ou fatos consideráveis para apoiar isto.

Neste artigo não usaremos o ponto de vista da Sociologia e da Filosofia da Ciência para discutir a noção de Química aqui explicitada. Apenas a usaremos em nossa discussão para debatermos sobre que Matemática o químico utiliza em suas atribuições. Em estudos futuros discutiremos a relevância para o nosso trabalho

dessa “definição” do que é Química.

A Matemática, a Química e o computador

Coulson (1973), quando revisou as reações dos envolvidos no desenvolvimento de idéias químicas dos séculos passados, observou que em 1878 Frankland escreveu: “Estou convencido que o progresso da Química como uma ciência exata depende muito da sua aliança com a Matemática”. Esta visão não foi compartilhada por muitos químicos da época. Foi a partir do desenvolvimento da teoria quântica, no ano de 1920, e o conseqüente impacto sobre a compreensão da espectroscopia e da estrutura eletrônica, que os químicos começaram a desenvolver as ferramentas matemáticas relevantes para as necessidades da Química. Auguste Comte (1798-1857) in *Philosophie Positive* (1830), por exemplo, dizia que: “Toda tentativa de usar métodos matemáticos no estudo da Química deve ser considerada profundamente irracional e contrária ao espírito da Química. Se a análise matemática sempre deve ocupar um lugar proeminente na Química – uma aberração que felizmente é quase impossível – isso poderia ocasionar uma rápida e difundida degeneração desta ciência”.

Nos dias de hoje, parece que existe uma maior consciência da importância da Matemática para a compreensão de muitos aspectos importantes da Química. O Dr. Warren S. Warren (1994), professor de Química da Universidade de Princeton, Califórnia, afirma que [...] “muitos aspectos importantes da Química podem apenas ser memorizados, não entendidos, sem uma simpatia pela Ma-

temática. Por exemplo, a mecânica quântica permite-nos prever a estrutura dos átomos e moléculas de uma maneira bastante condizente com as evidências experimentais, mas sua lógica intrínseca não pode ser entendida sem as equações”. Ou seja, a mecânica quântica explica muito bem os resultados experimentais, mas essa explicação só pode ser entendida através de equações.

O Dr. Grahan Doggett (1997), pesquisador em Química teórica e inorgânica no Departamento de Química da Universidade de York, considera que, apesar de haver diferenças nas opiniões a respeito da importância da Matemática, é necessário que o estudante de Química tenha um bom conhecimento de aritmética e álgebra, funções de uma ou mais variáveis, cálculo, números complexos, álgebra linear e manipulação de dados, levando em conta que estes tópicos fornecem uma base para a compreensão de termodinâmica, espectroscopia e cinética. Além disso, ele afirma que, como muito da Química se reduz a algumas fórmulas, o desenvolvimento das habilidades matemáticas provê os estudantes de Química com: a) habilidade de transferência muito importante; b) formalismo para unificar fatos isolados; c) modelos quantitativos de previsão.

Doggett & Sutcliffe (1995), afirmam que o estudo da Química, intimamente envolvido com as sínteses e reações de um sempre crescente número de combinações, está relacionado basicamente com a descoberta de modelos em que as propriedades químicas de tais combinações estão inter-relacionadas. A Matemática fornece as ferramentas necessárias para construir modelos quantitativos que são

necessários para a predição, elucidação e racionalização do fenômeno químico. Além disso, “sem a urdidura subjacente da Matemática, e a trama da Física e Biologia, a Química seria reduzida a um vasto catálogo de fatos e observações aparentemente sem conexão!”. É por causa desta forte inter-relação entre a Matemática e a Química (e Física) que somos capazes de entender a estrutura molecular de biomoléculas, tais como a insulina, através da interpretação dos resultados obtidos por difração de raio-X. Para compreender o comportamento químico de átomos e moléculas é necessário compreender a estrutura das moléculas.

Existem outros ramos da Química, menos relacionados com a determinação de estruturas moleculares e mais com a coleta de dados por observação de espécies químicas reagindo, em que o tempo é a variável chave, nos quais os resultados podem apenas ser interpretados e entendidos com a ajuda de um conhecimento da forma e solução de tipos especiais de equação diferencial. O objetivo químico, aqui, é interpretar os resultados observados em termos de um mecanismo para a reação² e, para isso, é necessário colocar num gráfico os dados na forma sugerida pela teoria para reconhecer a função que relaciona a concentração de espécies e o tempo. A existência de erros presentes nos dados coletados acarreta problemas associados com a manipulação desses erros quando se tenta estabelecer uma relação quantitativa entre a concentração e o tempo. O próprio tratamento dos problemas experimentados neste tipo de situação envolve compreender as idéias de propagação de erro e estatística – que implicam em usar as fer-

ramentas do Cálculo Diferencial e Integral. Toda ciência experimental busca, de uma forma ou de outra, estimar e avaliar as conseqüências da propagação do erro. De acordo com Warren S. Warren (1994) a estatística representa um papel central na Química, porque essencialmente nunca vemos uma molécula se decompor, ou duas moléculas colidirem. Na combustão de 1 g de gás hidrogênio para formar a água, 6×10^{23} átomos de hidrogênio sofrem uma mudança fundamental em sua energia e estrutura eletrônica, sendo que as propriedades da mistura reativa podem apenas ser entendidas em termos de médias.

Nos dias de hoje, os cientistas necessitam cada vez mais usar computadores para propósitos tais como: representar graficamente, processar e transformar dados experimentais, investigar modelos matemáticos, preparar relatórios, documentos e apresentações para comunicações orais e/ou escritas. De acordo com Levy, G. C. (1988), o uso do computador na ciência experimental inclui aquisição de dados, controle das experiências, redução de dados primários e apoio computacional aos resultados experimentais. Para os cientistas teóricos, o computador é o veículo de aquisição, processamento e análise de dados. Eles utilizam o computador para desenvolver novas idéias fundamentais. Levy afirma ainda que o impacto do computador na Química moderna é profundo e afeta virtualmente todos os aspectos dos estudos experimentais e teóricos.

Breneman, G. L. (1991) afirma que os computadores são importantes para todas as áreas da Química, incluindo físico-química, inorgânica, orgânica, analí-

tica e bioquímica, e lista várias áreas que justapõem essas áreas da Química de uma perspectiva do computador:

- (1) Análise numérica – vários tipos de tratamentos de dados, solução de equações, integração, etc.
- (2) Simulação e modelagem – vários sistemas químicos envolvendo cinética, equilíbrio, dinâmica molecular, etc.
- (3) Automação de laboratório e quimiometria – real controle de tempo de aquisição de dados, análise e apresentação.
- (4) Gráficos – moléculas, orbitais, outras funções, gráficos de apresentação.
- (5) Sistemas de informação – telecomunicações, extração e apresentação de informação química de bancos de dados.
- (6) Programação de computadores – modificar e desenvolver todos os acima.

Quando o químico trabalha com coleta de dados por observação de espécies reagindo, basicamente ele utiliza um programa gráfico de computador para colocar esses dados em um gráfico com o objetivo de poder interpretar os resultados observados e, a partir dessa análise, tirar algumas conclusões a respeito da situação que está sendo apresentada através desses dados.

Podemos ver, a partir dos autores analisados, em particular quando as novas tecnologias informáticas são utilizadas, que existe uma interação da Química com a Matemática. Apesar disso, permanece ainda a seguinte pergunta: Como o químico, uma vez formado, utiliza a Matemática no seu dia-a-dia? Neste artigo tentaremos determinar qual é a importância de se ter um conhecimento matemático

para utilizar um software gráfico e como o estudante de Química utiliza esse conhecimento para resolver problemas químicos, mesmo dispondo de softwares educacionais.

A QUESTÃO A SER PROBLEMATIZADA

Na pesquisa bibliográfica, encontramos poucos trabalhos que lidam com este problema sob a ótica do estudo proposto. Além disso, o que encontramos não esclarece o que de fato se deve saber antes de utilizar um programa gráfico.

Sendo assim, optamos por elaborar um estudo exploratório junto a docentes, alunos de graduação e de pós-graduação do curso de Bacharelado em Química e Química Tecnológica da UNESP de Araraquara, com o objetivo de adquirir subsídios para tentar responder as questões propostas. Num primeiro momento foram feitas algumas observações junto a usuários que utilizavam, em suas atividades acadêmicas, programas que pressupunham um conhecimento matemático para sua manipulação. A grande maioria dos alunos observados trabalhava com um programa gráfico (Origin³ em suas várias versões) de caráter mais geral, e os demais com programas mais específicos da sua área de atuação. Restringimos nosso estudo ao programa gráfico, por ser o mais utilizado em todas as áreas que compõem o referido curso. Paralelamente, foram entrevistados alguns docentes de diversas áreas para que pudéssemos contrastar os resultados das observações iniciais, elaboradas de forma não sistemática.

O estudo foi conduzido durante o

segundo semestre de 1997 e o primeiro semestre de 1998. Inicialmente, procuramos levantar junto à literatura específica, aos docentes, aos alunos de graduação e de pós, situações em que o computador pudesse ser utilizado como ferramenta de apoio. Foram selecionados dois exemplos. O primeiro, extraído da literatura pesquisada, ilustra as dificuldades que um usuário com carência de conhecimento matemático pode ter em relação à compreensão e utilização correta dos recursos do programa. O segundo exemplo, um problema selecionado junto à disciplina de Físico-Química, descreve os erros a que um usuário de um programa gráfico está sujeito por falta de um conhecimento matemático adequado.

O estudo relacionado ao segundo exemplo envolveu aproximadamente 107 alunos. Num primeiro momento, foi pedido aos alunos que resolvessem o problema proposto utilizando papel milimetrado e lápis; depois, numa segunda atividade, deveriam resolver o problema com a ajuda do computador. Para essas atividades os alunos foram divididos em pares.

Os dados coletados incluem observações escritas, anotações de entrevistas feitas com os docentes das diversas áreas da Química e as soluções dos problemas, feitas pelos alunos, com e sem a ajuda do computador.

OS EXEMPLOS

Nesta seção são apresentados os dois exemplos citados anteriormente. O primeiro exemplo, extraído da literatura⁴, analisa o caso das funções sigmoidais que aparecem com relativa frequência na

Química. Tais funções descrevem o crescimento, ou variação, de certas respostas y em relação ao tempo t , ou em relação à outra variável independente x . Essas funções se originaram, em geral, de equações diferenciais relacionadas com fenômenos biológicos ou químicos.

Uma função sigmoideal tem como característica principal o fato de ser crescente em todo intervalo de variação de t (ou x), seu gráfico não possui pontos extremos, mas apenas um ponto de inflexão, e sempre existe uma assíntota horizontal representando um valor que limita o crescimento da resposta y . Portanto, a forma do gráfico das funções sigmoideais é de S alongado, mas é necessário que os parâmetros satisfaçam certas condições para que isso ocorra. A derivada de uma função sigmoideal é crescente até o ponto de inflexão, onde atinge um máximo, isto é, a taxa de crescimento aumenta neste intervalo e, a partir daí, a derivada é decrescente e, portanto, a taxa de crescimento diminui, aproximando-se assintoticamente de zero.

Observando uma situação concreta, onde um programa gráfico é utilizado, procuramos analisar as diversas etapas desse procedimento, do ponto de vista prático e teórico do desenvolvimento, levando em conta o fato de termos à disposição um programa que ajusta facilmente uma curva sigmoideal a um conjunto de dados qualquer. O programa gráfico utilizado foi o Origin 5.0.

Inicialmente, o usuário do programa parte de um conjunto de dados coletados em laboratório, que neste exemplo são medidas de variação da dureza (D) da liga Cu-Al-Ag com o tempo (t), aquecida a uma temperatura de 455°C .

TEMPO (MINUTOS)	DUREZA (HV)
2	249,1
4	256
8	255,6
15	256
25	255,1
40	257
60	259,8
90	265
130	275,5
200	293,1
300	299,9
500	299,4
800	301

A partir daí utiliza-se a opção "Plot" do menu principal do programa Origin para colocar esses dados em um sistema de coordenadas cartesianas e obter uma representação gráfica para o conjunto de dados

Obtemos assim a seguinte representação gráfica para o conjunto de dados iniciais: Figura 1.S

Nesta etapa, observa-se que a imagem apresentada pelo computador (ver figura 2), não nos possibilita uma boa visualização sobre que tipo de curva melhor se ajustaria a esses dados. Não podemos ver, por exemplo, o ponto de inflexão, porque neste caso o ponto de inflexão ocorre em um tempo muito baixo. Assim, torna-se necessário utilizar uma escala logarítmica para visualizar melhor o comportamento dos dados e poder escolher melhor uma curva de ajuste. Para tomar essa decisão, parece necessário que se tenha um co-

nhecimento matemático a respeito – no caso, sobre escala logarítmica. Está implícito nesse conhecimento a escolha da escala. Na figura 3 foi escolhida uma escala log, isto é, de logaritmos na base 10.

A partir dessa imagem gráfica já se pode ver a existência de um ponto de inflexão, e que os dados se ajustam a uma curva em forma de S (sigmoideal). É necessário um certo cuidado com a leitura do gráfico, porque você tem uma "unidade multiplicativa" e não aditiva. Este tipo de unidade tem como característica o fato de, em um segmento do eixo das abscissas, ocorrer uma variação de 1 a 10

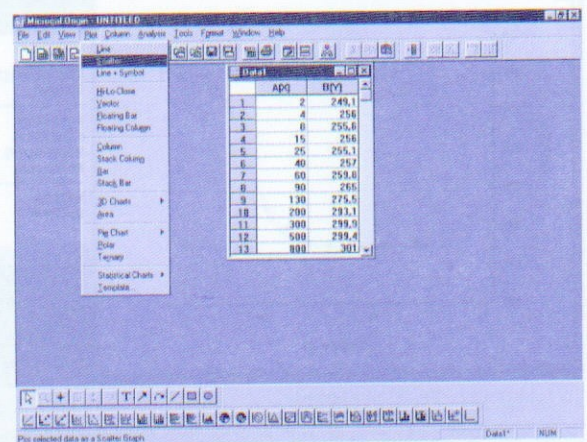


Figura 1 – Janela do programa Origin, mostrando os dados e a opção do menu que é utilizada para representar graficamente esses dados.

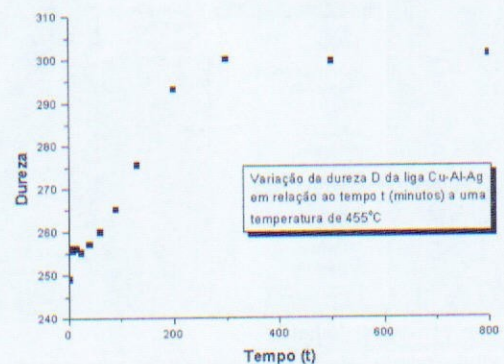


Figura 2 – Representação gráfica dos dados experimentais, obtida através do Origin.

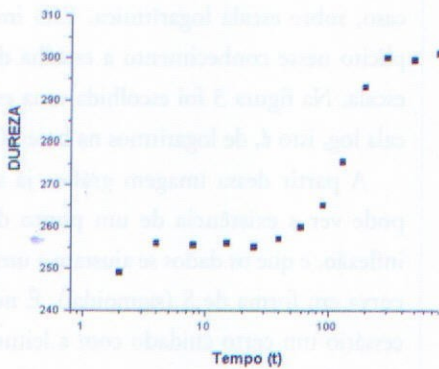


Figura 3 – Representação gráfico dos dados, utilizando uma escala logarítmica.

e, em outro segmento de mesmo comprimento, os valores do tempo serem de 10 a 100. Em outras palavras, uma unidade de escala logarítmica compreende uma variação de duas potências consecutivas de 10.

O Programa Origin 5.0 oferece a alternativa de ajuste de uma curva sigmoidal no menu.

Aqui podemos fazer algumas considerações importantes a respeito

do conhecimento matemático relacionado à utilização de um programa desta natureza. A primeira está relacionada com a própria leitura que se faz dos resultados fornecidos pelo programa. Observe-se que ao lado do gráfico da curva ajustada aparece uma janela onde são mostrados os dados desse ajuste que, para uma pessoa sem conhecimento matemático, não faria o menor sentido.

Outra consideração importante está relacionada ao fato de, nas opções do menu principal, aparecerem conceitos matemáticos (derivação, integração, ajuste linear, polinomial, exponencial, sigmoidal...) que também não teriam o menor significado para um usuário que não tivesse conhecimento de tais conceitos.

É muito comum entre os usuários deste programa ajustarem uma curva a um conjunto de dados com esta natureza, utilizando a curva sigmoidal que aparece numa das opções fornecidas pelo software (ver figura 5), sem saber bem o que estão fazendo. Na sigmoidal que aparece no menu principal do software, não existe flexibilidade do ponto de inflexão, ou seja, ele está fixo a meia altura entre o valor na origem e o valor assintótico que limita o crescimento dos valores de dureza. Assim, deixando os erros de lado, faz-se necessária uma discussão inicial sobre onde está localizado o ponto de inflexão; para isso, a pessoa que estiver usando o programa precisa ter um conhecimento matemático específico. Além disso, dentro do programa, na opção de análise, existem outros ajustes não-lineares onde aparecem curvas sigmoidais nas quais pode existir flexibilidade do ponto de inflexão. O primeiro passo na utilização do programa consiste em saber o que

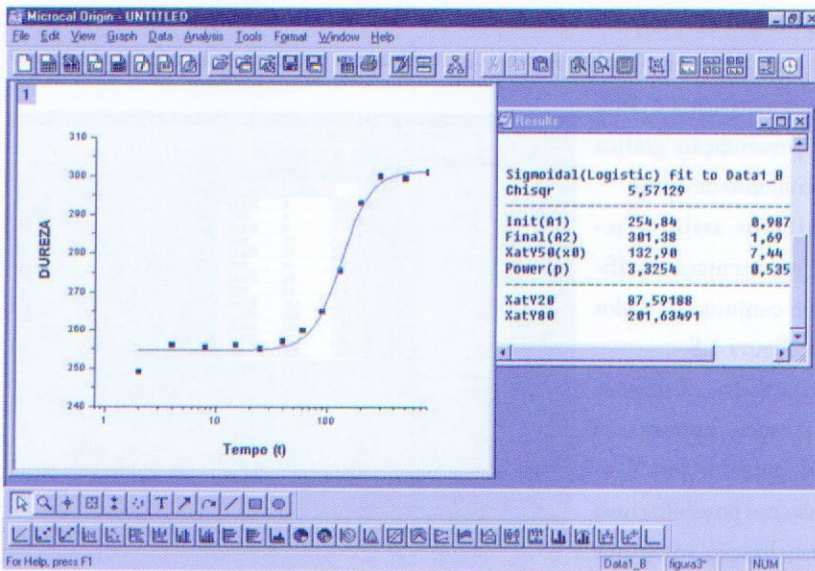


Figura 4 – Ajuste de uma curva sigmoidal ao conjunto de dados experimentais.

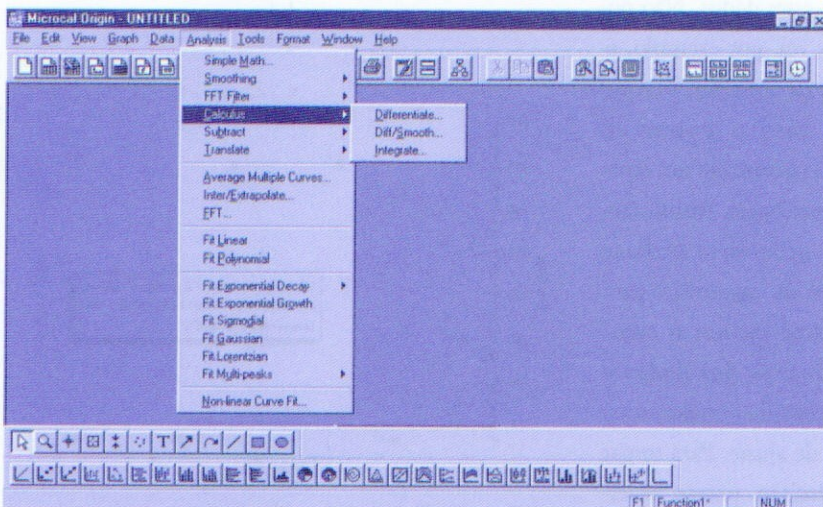


Figura 5 – Uma das opções do menu principal do Origin, onde aparecem conceitos matemáticos.

são essas diferentes sigmóides, ou seja, saber suas propriedades matemáticas. O próximo passo seria escolher uma das curvas sigmóides para ajustar os dados e, para que se possa tomar essa decisão, mais uma vez é preciso um conhecimento matemático.

O segundo exemplo foi selecionado junto à disciplina de Físico-Química, entre aqueles que tiveram o menor número de acertos no decorrer das aulas. Trata-se de um problema de cinética química: a partir dos seguintes dados experimentais, determine a energia de ativação e o fator pré-exponencial de uma reação química.

k(min ⁻¹)	TEMPERATURA (°C)	TEMPERATURA (°C)
16,01	20	293
24,8	30	303
36,9	40	313
53,5	50	323

Para resolver o problema, o aluno deve saber que a constante de velocidade (k) da reação e a temperatura termodinâmica (T) se relacionam através da equação de Arrhenius

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

onde A é o fator pré-exponencial, E_a a energia de ativação, T é a temperatura termodinâmica e R = 8,314 JK⁻¹mol⁻¹ é a constante do gás.

A partir daí, o aluno deve linearizar a curva, aplicando logaritmo em ambos os membros da equação, e obter a equação $\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$. Para fazer isso ele deve relacionar a linearização com o logaritmo, utilizando corretamente as propriedades de logaritmo. As soluções obtidas pelos alunos mostram que a grande

maioria não consegue linearizar a equação por falta de conhecimento matemático adequado.

A partir da equação linearizada, o aluno deve relacioná-la com a equação de uma reta $y = b + ax$ onde $y = \ln k$, o coeficiente angular é $a = -E_a/R$, o coeficiente linear é $b = \ln A$ e $x = 1/T$. Aqui observa-se outro tipo de dificuldade, relacionada com a associação da equação linearizada com a equação de uma reta. De acordo com um dos docentes respon-

sáveis pela disciplina de Físico-Química e os demais docentes entrevistados (e isto foi confirmado quando este exemplo foi trabalhado com os alunos das disciplinas Cálculo Diferencial e Integral 1 e 2), os alunos têm muita dificuldade em compreender esta mudança de sistema de coordenadas.

O aluno deve estar atento para o fato de que E_a será calculado através do coeficiente angular da reta de $\ln k$ contra $1/T$ (temperatura em Kelvin) e que A será

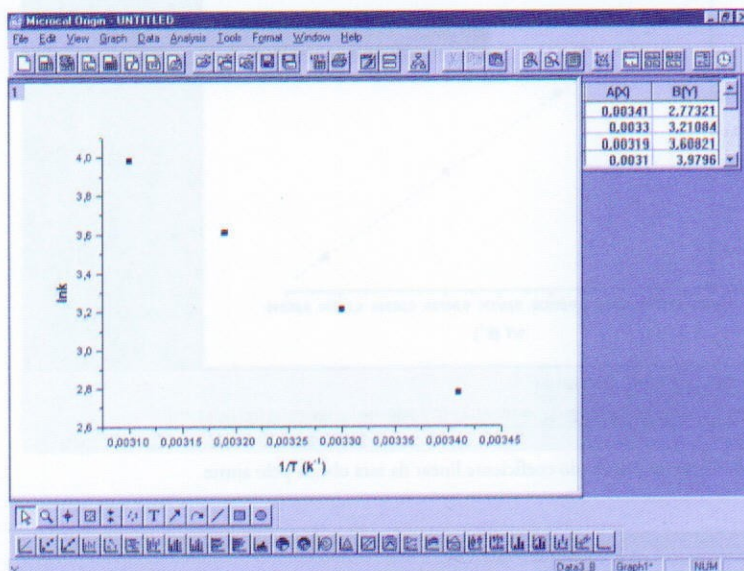


Figura 6 – Representação gráfica dos dados feita pelo programa Origin.

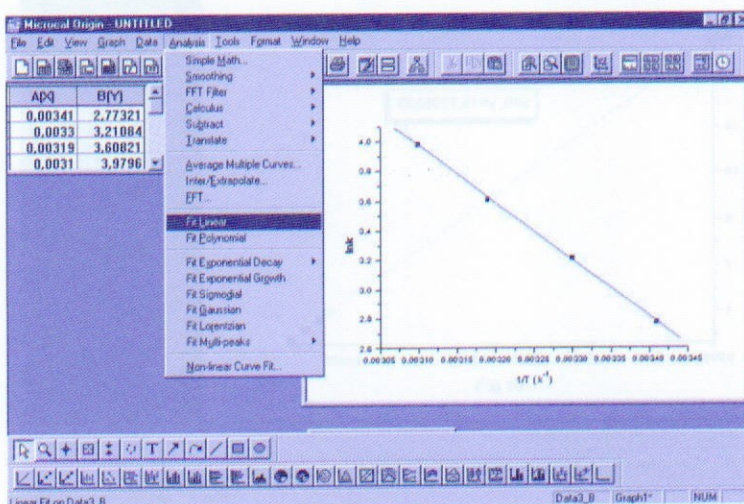


Figura 7 – Ajuste Linear aos dados feito pelo programa Origin.

obtido do coeficiente linear dessa reta.

Ink(min ⁻¹)	1/T (K ⁻¹)
2,7732	0,00341
3,2108	0,00330
3,6082	0,00319
3,9796	0,00309

Através da resolução do problema pelos alunos, observamos que, quando eles utilizam papel e lápis, a maior dificuldade que enfrentam para traçar o gráfico está relacionada com a escala, ou seja, com a colocação dos dados nos eixos coordenados para que haja um melhor aproveitamento do espaço do papel (no caso, pa-

pel milimetrado). Este fato não ocorreu quando o computador foi utilizado para construir o gráfico, pois o programa tem a opção de, automaticamente, colocar a escala correta de acordo com os dados.

A partir desses dados os alunos obtêm, através do programa *Origin*, a seguinte imagem gráfica:

Para resolver o problema proposto, com a ajuda do computador, o aluno ajusta uma reta aos dados, usando a opção de ajuste linear do *Origin*, obtendo a representação gráfica apresentada na figura 7.

Há um erro muito comum observado neste cálculo, tanto com o papel e lápis quanto com o auxílio do computador (e confirmado pelas entrevistas feitas com os docentes). Para determinar o coeficiente linear, os alunos não extrapolam até o $x = 0$, usando o valor de y correspondente ao primeiro valor de x da escala (ver figura 8), o que acarreta um erro no cálculo de A da ordem de aproximadamente 100.000 vezes.

O procedimento utilizado pelos alunos para determinar o valor de A foi o seguinte:

$$m_{\text{linear}} = 4,157 = \ln A \Leftrightarrow A = e^{4,157} = 63,87$$

obtendo então, um valor incorreto para a constante A . É importante ressaltar que este erro ocorreu tanto com o uso de papel e lápis quanto com o uso do computador. Para obter o valor correto de A , é necessário que os alunos saibam que o intercepto (coeficiente linear) corresponde à abscissa zero do sistema de coordenadas (ver figura 9). Prolongando a reta obtida até que ela cruze o eixo das ordenadas, obtém-se o valor correto $m_{\text{linear}} = 15,7$ para o coeficiente linear da reta.

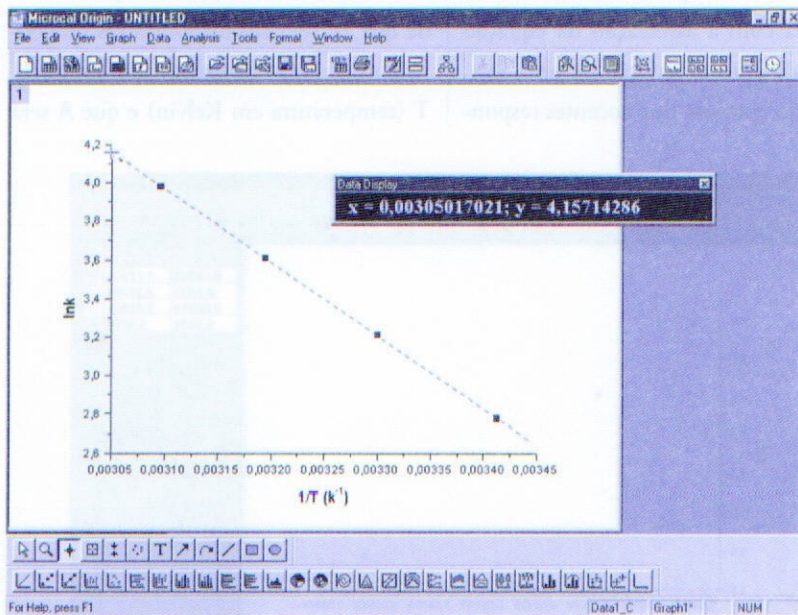


Figura 8 – Erro no cálculo do coeficiente linear da reta obtida pelo ajuste.

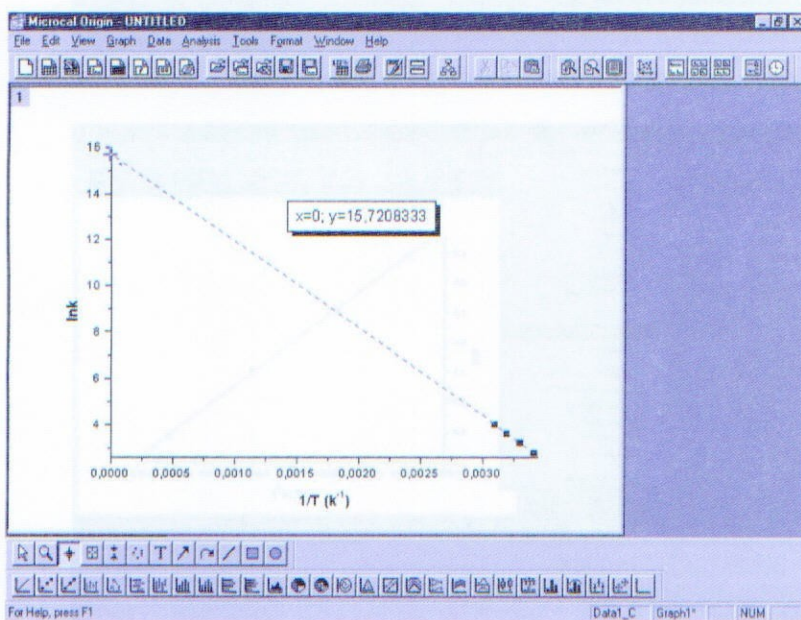


Figura 9 – O valor correto para o coeficiente linear da reta obtida pelo ajuste.

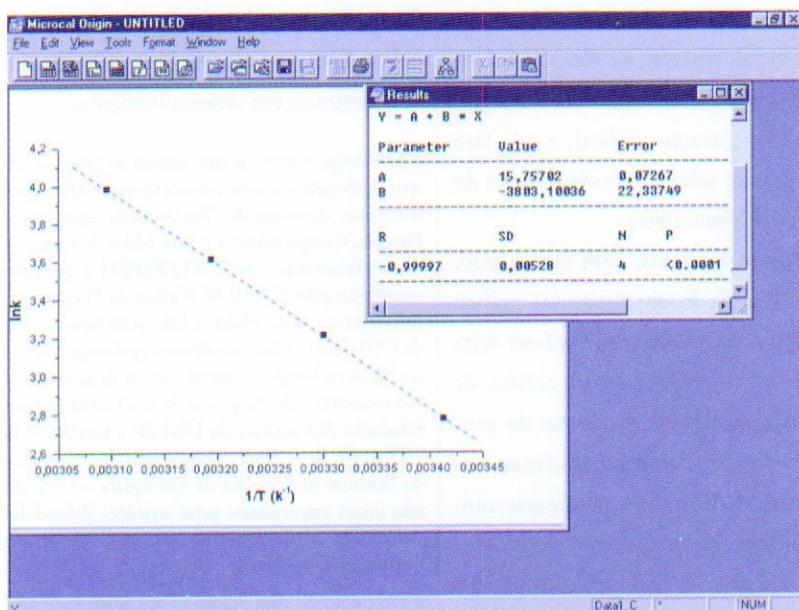


Figura 10 – Janela adicional onde se observa os resultados do ajuste.

E de posse do valor $m_{\text{linear}} = 15,7$, os alunos utilizam a equivalência $y = \ln x \Leftrightarrow x = e^y$, para obter o valor correto do fator pré-exponencial A.

$$m_{\text{linear}} = 15,7 = \ln A \Leftrightarrow A = e^{15,7} = 65,8 \times 10^5 \text{ (aproximadamente)}$$

Para o cálculo da energia de ativação (E_a), que depende do valor do coeficiente angular da reta ajustada, os alunos procedem da seguinte maneira: a partir da reta obtida pelo ajuste (figura 9), eles escolhem dois pontos e calculam o coeficiente angular através da relação $m = \Delta y / \Delta x = -3978,18$. A partir daí, utilizam a relação $-E_a / R = -3978,18$ onde $R = 8,314$ para determinar o valor de $E_a = 3,3 \times 10^4$.

Um aluno com conhecimento melhor de Matemática seria capaz de interpretar os resultados fornecidos pelo *Origin* em uma janela adicional (ver figura 10), onde

poderia observar que o coeficiente linear é 15,757 e não 4,157. Além disso, esta mesma janela fornece também o valor do coeficiente angular da reta, facilitando os cálculos de A e de E_a .

DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

O nosso estudo iniciou-se a partir de observações feitas junto a alunos de graduação e de pós-graduação, que utilizavam programas gráficos na elaboração de seus trabalhos acadêmicos e/ou científicos. As observações sugerem, e as entrevistas com alguns docentes confirmam, que bem orientados tecnicamente, mesmo os alunos com problemas conceituais conseguem manipular um programa gráfico como o *Origin* (que pressupõe um conhecimento matemático) sem grandes problemas, dando a impressão de que um conhecimento matemático para sua utilização não é necessário.

Os exemplos estudados parecem mostrar exatamente o contrário. O primeiro exemplo, onde trabalhamos com as funções sigmoidais, mostra que, para tomar decisões acertadas, o usuário de um programa da natureza do *Origin* deverá ter compreensão dos conceitos matemáticos envolvidos, caso contrário poderá incorrer em erros que prejudicarão toda a análise dos dados, uma vez que não estaria levando em consideração os erros do ajuste e, conseqüentemente, não poderia obter precisão nos seus resultados e conclusões. Assim, o conhecimento matemático ajuda a compreender e utilizar de maneira correta as opções que o programa oferece, minimizando os erros na tomada de decisões, e com isto permite tirar o máximo de proveito de toda a potencialidade de um programa desta natureza. Resumindo, tem-se um programa poderoso à disposição e, por falta de conhecimento matemático adequado, não se tira proveito de toda a sua potencialidade.

O segundo exemplo ilustra a importância de se ter conhecimento matemático para resolver um problema químico, desde a fase inicial, relacionada à tomada de decisões sobre a estratégia a ser empregada para resolver o problema, passando pela utilização do computador na obtenção dos resultados, até a análise, compreensão, interpretação e possível correção dos resultados obtidos. Ou seja, a simples utilização do programa não é suficiente para que o aluno consiga resolver o problema de maneira correta. É necessário que ele tenha conhecimento dos conceitos matemáticos envolvidos na resolução do problema.

Ainda em relação ao segundo proble-

ma, um outro aspecto observado é o fato de que, quando o aluno resolve o problema usando o computador, ele transfere os mesmos procedimentos utilizados com o papel e lápis, deixando de lado os recursos que o programa oferece. Isto se deve, talvez, ao desconhecimento desses recursos, fato que não será discutido neste artigo.

As dificuldades apresentadas pelos alunos na resolução do problema de Cinética Química apresentado (ver exemplo 2), estão relacionadas com a compreensão dos seguintes conceitos:

- Escalas (escolha, leitura)
- Equação de Reta
- coeficiente linear (interpretação geométrica)
- coeficiente angular (interpretação geométrica)
- Linearização de uma curva
- Logaritmo

Com a elaboração deste estudo, conseguimos obter subsídios iniciais para desenvolver as disciplinas de Cálculo Diferencial e Integral do curso de Bacharelado em Química e Química Tecnológica da UNESP de Araraquara. Em relação ao conteúdo programático, o estudo mostrou que uma ênfase muito maior deve ser dada ao aprendizado de conceitos relacionados

com escalas, gráfico de funções, logaritmo e exponencial, equação de reta, coeficiente angular e linear de uma reta (compreensão e interpretação gráfica), e este fato será de grande valia na reestruturação do currículo de Matemática.

Pudemos ver ainda, com este estudo, que a utilização de um programa gráfico como apoio tecnológico poderá ser feita com maior eficiência e com a certeza de melhores resultados se o usuário do programa possuir um conhecimento matemático adequado. Além disso, parece que muitos problemas que atualmente são resolvidos pelos alunos de Química com papel e lápis poderiam ser feitos com a utilização do computador, de maneira mais eficiente e com menor chance de erros.

Os estudos realizados até agora indicam que a resposta inicial a nossa pergunta – *É necessário um conhecimento matemático para utilizar um software gráfico?* – necessita ser expandida. Se por um lado, os exemplos aqui apresentados (um extraído de um trabalho de monografia e o outro de nosso estudo exploratório) indicam que é necessário certo conhecimento matemático para utilizar um programa gráfico, não é possível ainda precisar o escopo desta Matemática e nem o uso que de

fato se faz no cotidiano do mundo do trabalho. Este é o tema de pesquisas que ora se encontram em desenvolvimento.

1 Este artigo é fruto de um projeto de pesquisa desenvolvido pela primeira autora e faz parte de um projeto maior denominado "Pensamento Matemático, Funções, Computadores e outros Meios de Comunicação", financiado pelo CNPQ/FAPESP e que é desenvolvido pelo GPIMEM (Grupo de Pesquisa em Informática, outras Mídias e Educação Matemática) da UNESP-Rio Claro, coordenado pelo segundo autor. Embora Mônica Vilarreal, Jussara de Lioila Araújo (estudantes do Programa de Pós-Graduação em Educação Matemática da UNESP e membros do GPIMEM, Rio Claro) e Romeu Magnani (professor do Instituto de Química de Araraquara – UNESP) não sejam responsáveis pelas opiniões defendidas neste artigo, agradecemos os comentários em versões preliminares do mesmo.

2 Do ponto de vista prático, o mecanismo de uma reação está relacionado a descrever as etapas pelas quais os reagentes passam a produto, reconhecer a etapa mais lenta do processo – que é a que determina a velocidade global do processo, conhecer as etapas intermediárias (possibilidade de interferir na reação, se necessário).

3 O Origin é um programa que permite ao usuário fazer análise de dados e elaborar gráficos em duas ou três dimensões, a partir de uma planilha ou da expressão analítica da função.

4 Trabalho de monografia intitulado "Estudo de Funções Sigmoidais de Crescimento Aplicadas à Cinética de Formação e Transformação de Fase em Ligas à Base de Cobre", 1993, apresentado por Marco Roberto Guerreiro, sob orientação do Prof. Dr. Romeu Magnani.

5 O nome "constante de velocidade" para k , surge do fato de k ser a constante de proporcionalidade na equação $v = k[A][B]$ onde v é a velocidade de uma reação $A + B \rightarrow C + D$, $[A]$ e $[B]$ são as concentrações de A e B, respectivamente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Breneman, G. L. *A Chemistry Degree Program with Computer Science Emphasis*. *Journal of Chemical Education*, v.68, n.10, 832-834, 1991.
- Brown, T. L., Le May, H. E., Bursten, B. E. *Chemistry – The Central Science*, sixth edition. Prentice-Hall International, Inc. 1994
- Chassot, A. I. *A Educação no Ensino da Química*. Livraria Unijuí Editora, RS, 1990.
- _____. *A Ciência Através dos Tempos*. Ed. Moderna Ltda, 4 ed., 1995.
- _____. *Catalisando Transformações na Educação*. 3 ed., Editora Unijuí, RS, 1995.
- Demana, F. & Waits, B. K. *Why a single graph isn't enough*. *The College Mathematics Journal*, 19, 177-183, 1988.
- Doggett, G. and Sutcliffe, B. T. *Mathematics for Chemistry*. Longman Scientific & Technical, 1995.

Figueiredo, D. G. *Problemas Resolvidos de Físico-Química*. Livros Técnicos e Científicos Ed. S.A., 1982

Goldenberg, E. P.; Harvey, W.; Lewis, P.; West, J.; Zodhiates, P. *Mathematical, Technical and Pedagogical Challenges in the Graphical Representation of Functions*. Technical Report, Cambridge, MA, USA: Educational Technology Center, 1988.

Goldenberg, E. P. and Kliman, M. *What You See Is What You See*. Unpublished Manuscript, Newton, MA, USA: Educational Technology Center: 1990.

Levy, G. C. *How Changes in Computer Technology are Revolutionizing the Practice of Chemistry*. *Journal Chem. Inf. Comput. Sci.* 1988, 28, 167-174.

Ponte, J. P. *O Computador na Educação Matemática*. Cadernos de Educação Matemática, junho/1991

Warren, Warren S. *The Physical Basis of Chemistry* Academic Press, Inc. 1994.