La importancia de la visualización en la resolución de problemas de Cálculo Numérico

Víctor Martínez Luaces y Fernando Martínez Luaces
Universidad de la República. Montevideo. Uruguay.
victorml@fing.edu.uy f.martnez@lycos.com

Resumen

El Cálculo Numérico, en las carreras químicas tiene diversos usos; en particular en el presente trabajo nos concentraremos en la resolución de ecuaciones algebraicas. Esta elección se fundamenta en la gran aplicabilidad del tema a la determinación del pH en ciertas soluciones de ácidos débiles y sus respectivas sales. De hecho, cuando los estudiantes intentan aplicar los métodos numéricos para la determinación de un pH en el laboratorio de Química Analítica, lo que obtienen, en general, no es correcto, y frecuentemente ni siquiera tiene sentido químico.

En este tipo de problemas, la visualización y experimentación tiene un papel fundamental en la comprensión, la resolución y principalmente, en el logro de aprendizajes significativos. Esta forma de trabajo requiere de cierto equipamiento informático y de un software apropiado.

En este artículo se analiza el problema mencionado, se presentan algunos resultados y se formulan conclusiones.

Introducción

La mayoría de los trabajos de Matemática Educativa en el nivel superior, están dirigidos a los cursos de Análisis Matemático, Álgebra, Estadística o Ecuaciones Diferenciales. Otras áreas de la Matemática, como es el caso del Cálculo Numérico, no son tan frecuentadas por los investigadores. Por ejemplo, en RELIME según el informe presentado en Julio de 2001 (Farfán, R. M., 2001), se han publicado ya 39 artículos, de los cuales ninguno trata específicamente temas de Cálculo Numérico. No obstante, se trata de una materia fundamental en diversas ramas de la Ingeniería y su aplicabilidad se ha ido incrementando a causa del desarrollo tecnológico durante las últimas décadas. En efecto, el uso generalizado de computadoras y calculadoras programables ha propiciado una utilización mucho más amplia de dicha rama de la Matemática.

El problema mencionado (la determinación del pH en ciertas soluciones) tiene interés educativo, ya que proporciona una motivación intrínseca para el dictado de ciertos temas de Cálculo Numérico (Martínez Luaces, V., 2001). En efecto, el mismo permite analizar varios temas: (a) problemas de convergencia, (b) existencia de varias raíces de las cuales sólo una es químicamente correcta, (c) problemas de redondeo, y (d) la elección de él o los puntos iniciales del proceso iterativo (Martínez Luaces, V. & Guineo, G., 2002).

En principio, la parte química no presenta mayores dificultades. En efecto: Química Analítica es una de las primeras materias de las carreras involucradas y las ecuaciones para hallar el pH son relativamente fáciles de deducir y entender para un estudiante de Química.

Los pre-requisitos matemáticos tampoco deberían ser un obstáculo grave, ya que son muy pocos, son sencillos y además conocidos por el estudiante. Por ejemplo: el método de bisección no es más que una aplicación obvia del Teorema de Bolzano (Burden, R. L. & Faire, J. D., 1985). Análogamente, el Método de la Secante y Regula Falsi, simplemente recurren a la fórmula de la ecuación de la recta que pasa por dos puntos del plano (Burden, R. L. & Faire, J. D., 1985). Como último ejemplo, el Método de Newton-Raphson sólo requiere conocer como hallar la tangente a una curva por determinado punto (Burden, R. L. & Faire, J. D., 1985).

No debería haber, entonces, mayores dificultades químicas ni matemáticas, sin embargo, cuando el estudiante intenta resolver solo el problema, en general no lo logra.

Para resolver esta dificultad resultan particularmente adecuadas las ideas de Vigotsky. Este autor menciona dos niveles de desarrollo: el nivel de desarrollo actual y el nivel de desarrollo potencial. Más aún, define la "Zona de Desarrollo Próximo" (ZDP) como "la distancia entre el nivel de desarrollo actual determinado por la capacidad para resolver independientemente un problema, y el nivel de desarrollo potencial, determinado a través de la resolución de un problema bajo la guía de un adulto o en colaboración con compañeros más capaces" (Vygotsky, L.S., 1978). Pues bien, esta es la situación en este caso, ya que en principio los estudiantes tienen los conocimientos necesarios (químicos y matemáticos), pero por sí solos no logran el objetivo propuesto. Por tanto, para crear la ZDP, el docente debe actuar como un facilitador. Es decir, en lugar de dar instrucciones directas, debe guiar a los estudiantes en la exploración y experimentación.

En el presente trabajo, hemos escogido SCILAB (Gómez, C. et al, 1999), que permite no sólo experimentar numéricamente, sino además visualizar dentro del mismo entorno, donde están y cuáles son las dificultades.

Desarrollo

En los cursos pre-universitarios de Química se enseña a realizar cálculos de pH en base a fórmulas sencillas, pero solamente aproximadas (Day Jr. R. & Underwood, A.,1980) Más aún, en ciertos casos, esas fórmulas dan resultados muy pobres (Labandera, F. & Martínez Luaces, V, 1994) y es necesario sustituirlas por otras mejores, basadas en la regla de electroneutralidad (Day Jr. R. & Underwood, A.,1980). Por ejemplo, para un ácido débil monoprótico, la electroneutralidad se traduce en la siguiente fórmula:

$$\frac{V_b C_b}{V_a + V_b} + \left[H^+\right] = \frac{K_w}{\left[H^+\right]} + \frac{C_a V_a}{(V_a + V_b)\left(1 + \frac{\left[H^+\right]}{K_a}\right)}$$

(Labandera, F., Martínez Luaces, V, 1994)

donde la incógnita es $[H^+]$ (recuérdese que el pH es $-\log [H^+]$). Realizando operaciones sencillas (común denominador, pasaje de términos; etc), esta ecuación se lleva a la forma $f([H^+]) = 0$, siendo f un polinomio de grado 3.

Como es sabido, la ecuación polinómica de 3º grado admite una solución exacta, por radicales (Rey Pastor, J. Pi Calleja, P., Trejo, 1952). Sin embargo, esa posibilidad -de resolver el problema en forma algebraica- no es generalizable. Por ejemplo, si se disuelven algunas sales (como es el caso del Na_2HPO_4, fosfato ácido disódico) en agua, la ecuación pasa a ser de mayor grado. Concretamente, para el Na_2HPO_4, la electroneutralidad conduce a la fórmula (Martínez Luaces, V. y Guineo, G., en prensa):

$$\left[H^+\right]+2.C_s=\frac{K_w}{\left[H^+\right]}+\frac{C_s.\left(3+\frac{2.\left[H^+\right]}{K_3}+\frac{\left[H^+\right]}{K_2.K_3}\right)}{1+\frac{\left[H^+\right]}{K_3}+\frac{\left[H^+\right]^2}{K_2.K_3}+\frac{\left[H^+\right]^3}{K_1.K_2.K_3}}$$

Mediante operaciones sencillas, también se lleva a la forma f([H^+]) = 0 , siendo f un polinomio de grado 5. Se sabe que este tipo de ecuación no es soluble mediante radicales, resultado muy conocido, debido a N.H. Abel (Rey Pastor, J. Pi Calleja, P., Trejo, 1952)

Todo lo anterior, sugiere la búsqueda de soluciones numéricas, al menos mediante los métodos más comunes: iteración funcional, método de Newton-Raphson, bisección, secante y Regula Falsi (Burden, R. L., Faire, J. D., 1985). Desde el punto de vista educativo, las fórmulas químicas anteriormente mencionadas sólo utilizan dos conceptos muy elementales (electroneutralidad y constantes de equilibrio), que son conocidos por los estudiantes y fáciles de entender, aunque no tan fáciles de aplicar en la práctica. En cuanto a la parte matemática, el método de iteración funcional solo requiere saber despejar [H+], Newton-Raphson sólo utiliza el concepto de derivada y tangente a una curva, para bisección basta conocer el Teorema de Bolzano y para los dos últimos (secante y Regula Falsi), sólo se necesita la ecuación de la recta que pasa por dos puntos del plano (Burden, R. L., Faire, J. D., 1985). En el Uruguay, todos esos temas -tanto los de Química como los de Matemáticas- se ven en los cursos pre-universitarios de Enseñanza Media y se puede considerar que son parte del "nivel de desarrollo actual" del estudiante en los primeros años de las carreras químicas.

A pesar de que todos estos temas son bien conocidos por los estudiantes, cuando éstos intentan aplicarlos (y calcular un pH en el laboratorio), obtienen resultados erróneos. Más aún, muchas veces obtienen resultados que ni siquiera tienen sentido químico.

Estos cálculos del pH están en el nivel de desarrollo potencial, al que los alumnos pueden llegar con la ayuda de un experto y con el equipamiento adecuado (computadora o calculadora, software apropiado; etc).

Veremos entonces como crear esa ZDP que les permita llegar a resolver satisfactoriamente los problemas antes mencionados.

a) Iteración Funcional y Newton-Raphson

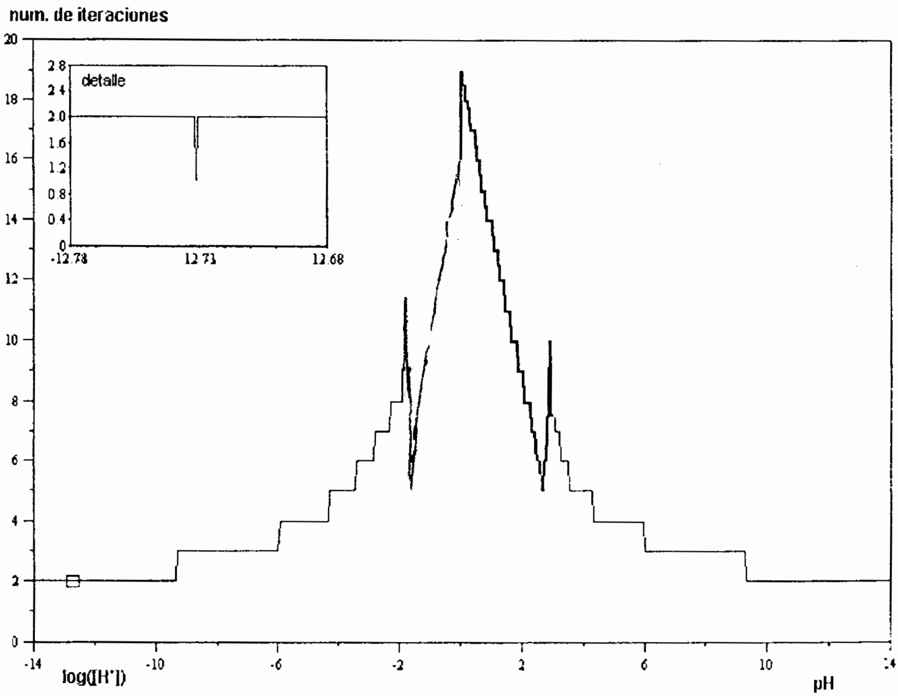
Por ejemplo, en el caso del ácido débil monoprótico, es muy fácil despejar $[H^+]$ del primer término, siendo entonces:

$$[H^+] = \frac{K_w}{[H^+]} + \frac{C_a \cdot V_a}{(V_a + V_b)\cdot\left(1 + \frac{[H^+]}{K_a}\right)} - \frac{V_b \cdot C_b}{V_a + V_b}$$

que es de la forma $[H^+] = g([H^+])$ y que es todo lo que se necesita para utilizar los métodos de punto fijo, o iteración funcional (Burden, R. L. & Faire, J. D., 1985). Cabe observar que esta operación es igualmente sencilla en el otro caso presentado (el de la ecuación de quinto grado).

Para el método de Newton-Raphson (Burden, R. L., Faire, J. D., 1985), basta trabajar con la forma polinómica de las ecuaciones, i.e . $f([H+]) = 0$ donde el grado de f dependerá de cuál es el problema. En cualquiera de los dos métodos se parte de una aproximación inicial $[H+]$, que da origen a una proceso iterativo, que puede converger en principio a distintas raíces y con distintas velocidades de convergencia (Martínez Luaces, V. & Guineo Cobs, G., 2002).

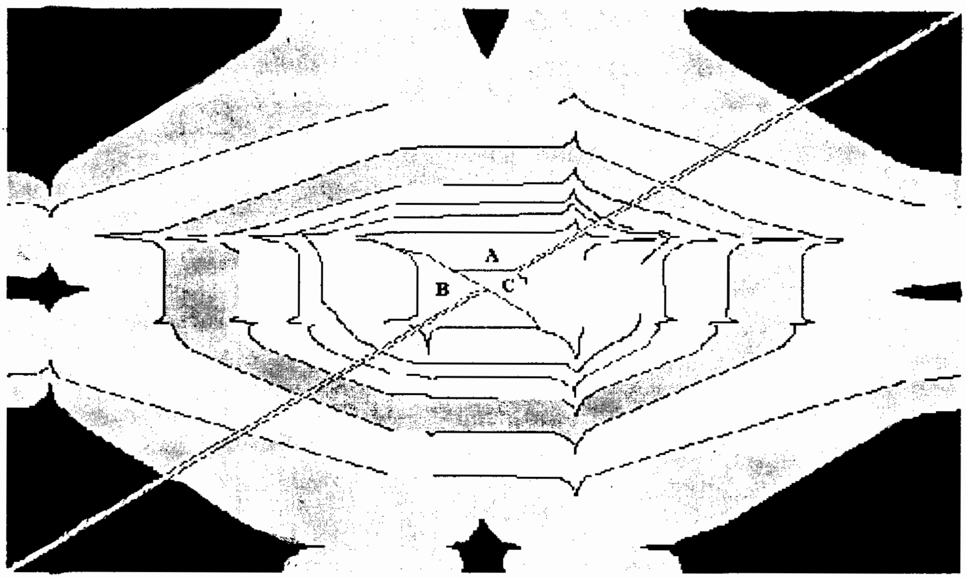
Una forma de visualizar lo anterior es mediante el gráfico siguiente:



En este gráfico pueden verse los distintos trazos correspondientes a distintas raíces (la que tiene sentido químico es la línea de mayor espesor) y n es el número de iteraciones hasta parar el proceso. Como criterio para parar el proceso se tomó el que dos iteraciones sucesivas difieran en 0.01 o menos, ya que eso mismo es lo que hacen en general los estudiantes (el hecho de tomar 0.01 como tolerancia en el pH es un tema químico (Kolthoff, I.; Sandell, E., 1943), no matemático).

b) Bisección, Secante y Regula Falsi

En los tres métodos se parte no de una, sino de dos aproximaciones iniciales: $[H^+]_1$ y $[H^+]_2$, a partir de los cuales se obtienen los demás iterandos (Burden, R. L. & Faire, J. D., 1985). Por lo tanto, el valor de n depende del par ($[H^+]_1$ y $[H^+]_2$), por lo que la visualización en este caso la realizamos con un gráfico donde se representa n en función de $[H^+]_1$ y $[H^+]_2$, como el siguiente:



La zona marcada con "A" corresponde a la única raíz con sentido químico, la zona "B" corresponde a otra raíz, la "C" a valores para los que no hay convergencia, y el resto del mapa converge a la tercera raíz, correspondiendo los tonos más claros a mayor cantidad de iteraciones.

Tanto el gráfico que se presentó como ejemplo (Newton – Raphson) como los gráficos correspondientes a los otros métodos se realizaron mediante programas sencillos en SCILAB (Gómez, C. et al, 1999) que realizan los cálculos y luego los grafican en el mismo entorno, por lo cual resultó muy apropiado para este fin.

Desde el punto de vista educativo, creemos que si bien es muy importante que los docentes dispongan y conozcan estos gráficos, conviene que no los presenten a priori a los estudiantes como un asunto resuelto. Por el contrario, la idea es que los propios estudiantes exploren diversos valores, prueben con los diferentes métodos propuestos, vean por sí mismos cuáles son los problemas de redondeo; etc. Toda esta exploración deberá contar con la ayuda del docente (o un compañero más avanzado) y programas sencillos para automatizar la aplicación de los algoritmos y acelerar el cálculo.

Como etapa final, se puede considerar conveniente que observen gráficos como los mencionados anteriormente, que les den una visión global del problema y las dificultades de la convergencia para ciertos valores, o la obtención de otros sin sentido químico. Esto en principio, confirmaría los resultados parciales obtenidos por los estudiantes. En efecto, para obtener una visión global, es necesario construir un programa que admita el ingreso de datos, realice los cálculos para todos los valores posibles de acuerdo al método de aproximación elegido y luego los grafique (con diferentes colores y tonalidades) y todo esto está fuera del alcance de un estudiante común de Química cuyos conocimientos de computación son más bien elementales.

Lo importante, entonces, es crear la ZDP a través de problemas reales, que conlleven una motivación intrínseca en el estudiantado.

Resultados

Estas actividades, basadas en la resolución de problemas provenientes de otras asignaturas, fueron instrumentadas en primera instancia para los cursos de segundo año: "Computación y Cálculo Numérico", "Estadística" y "Ecuaciones Diferenciales".

Los cursos de primer año ("Análisis Matemático I", "Álgebra" y "Análisis Matemático II") quedaron para una segunda etapa, que todavía no se ha empezando a implementar, por problemas internos del departamento.

Esta situación de transición nos permite obtener algunos resultados, como veremos a continuación. En efecto, las evaluaciones docentes muestran diferencias interesantes entre los docentes de primer y segundo año, en las cuales inciden notablemente las diferencias entre unos cursos y otros.

Antes de analizar las diferencias observadas, conviene describir brevemente como se realizan las mencionadas evaluaciones docentes. En primer lugar, cabe aclarar que los formularios que se utilizan contienen 25 preguntas y que los mismos se responden en forma anónima y se procesan utilizando un escáner, por funcionarios no docentes, asegurando el anonimato.

Los resultados se le comunican al docente (y al responsable del servicio) por medio de un librillo con las respuestas de la clase a cada pregunta. A su vez, esas respuestas son promediadas sobre todas la clase y de esto resulta un puntaje de cero a diez para cada una de las 25 preguntas.

En un trabajo anterior (Gómez A. & Martínez Luaces, V., 2002) se procesó toda esta información utilizando técnicas de Análisis Multivariado. En particular, se definió una variable denominada "Aplicaciones", que consistía en un vector de R^2, con los guarismos obtenidos por cada docente (en la escala mencionada de cero a diez), a dos preguntas concretas, a saber:

Pregunta 11: *Establece conexiones con los contenidos de otras asignaturas.*

Pregunta 12: *Da a la asignatura un enfoque aplicado, ofreciendo ejemplos y aplicaciones a la vida real y profesional.*

Con esa variable "Aplicaciones" y con los 12 docentes involucrados se hizo un Análisis de Clusters (Gómez A. & Martínez Luaces, V., 2002), resultando un grupo de 5 docentes claramente distanciado del resto por sus mejores resultados. De ellos, sólo uno trabaja en los cursos de primer año; los otros cuatro, son los responsables de los cursos de Ecuaciones Diferenciales, Estadística y de los módulos de Computación y de Cálculo Numérico.

Más aún, se hicieron clusters con las 25 preguntas ("cluster general") y otro con 23 preguntas, omitiendo especialmente la 11 y la 12 ("cluster sin aplicaciones"). Es interesante comprobar que los docentes que ocupan el 2º y 3º lugar en el "cluster sin aplicaciones", aparecen varios puestos más abajo en el "cluster general" e inversamente, el docente que ocupa el 2º lugar en el "cluster general" aparece varios puestos más abajo cuando no se tienen en cuenta las aplicaciones.

En otras palabras, pese a ser solamente dos preguntas en 25, su incidencia es enorme, a tal punto que docentes muy buenos pasan a un nivel medio y viceversa, por efecto de dichas preguntas (Gómez A. y Martínez Luaces, V., 2002).

Como si esto no bastara, se vio en otro trabajo la importancia que tienen los problemas de otras asignaturas y de la vida real en algo tan fundamental en el estudiante como lo es la motivación (Martínez Luaces, V., 1998).

Las motivaciones pueden ser extrínsecas o intrínsecas, es decir que pueden provenir del exterior (ej.: aprobar un examen) o del interior (el propio interés por resolver un problema). En un buen curso se debe procurar que los factores intrínsecos estén en mayoría (González, B. E., 2001) y en este sentido la modelación y resolución de los problemas reales es un elemento fundamental. Esto último ha sido comprobado y analizado in extenso en el trabajo ya mencionado (Martínez Luaces, V., 1998).

Conclusiones

El ejemplo analizado proviene de un problema real que los alumnos deben enfrentar en otra asignatura. Este hecho por si solo, ya genera una actitud favorable y provoca motivaciones intrínsecas, al no tratarse de un problema matemático, sino de un problema de sus propias carreras.

El problema anterior tiene realmente muy pocos pre-requisitos, tanto químicos como matemáticos, ya que los conocimientos requeridos están en el "nivel de desarrollo actual" de los estudiantes. Sin embargo, la imposibilidad de resolver solos el problema, lo sitúa en el "nivel de desarrollo potencial", al cual pueden acceder con la ayuda de un experto. Se crea entonces una ZDP, en la cual el experto no actúa a través de clases magistrales, sino como orientador. En todo ello, la visualización y la experimentación con la computadora juegan un papel esencial.

El estudiante no se limita a tomar apuntes, sino que él mismo va explorando y visualizando sobre la marcha las limitaciones y ventajas de los distintos algoritmos y su posible aplicación al problema químico propuesto. Como resultado final, todo esto conduce a las motivaciones intrínsecas de los estudiantes y al logro de aprendizajes significativos.

Referencias bibliográficas

Burden, R. & Faire, J. (1985). *Análisis Numérico.* México: Grupo Editorial Iberoamerica, S. A ISBN 968 - 7270 - 09 - 8.

Day , R. & Underwood, A. (1980). *Quantitative Analysis.* New Jeresey: Prentice Hall

Farfán, R. (2001). *Informe de RELIME.*

Gómez, A. & Martínez, V.(2002). *Evaluación docente utilizando Análisis Multivariado,* Acta Latinoamericana de Matemática Educativa. 15.2

Gómez, C. (1999). *Engineering and Scientific computing with SCILAB*, USA: Birkhäuser. SCILAB 2.6 © INRIA.

González, B. (2001). *La preparación del profesor para la utilización de la modelación matemática en el proceso de enseñanza – aprendizaje* Tesis para optar por el grado científico de doctor en Ciencias Pedagógicas. Santa Clara – Cuba.

Kolthoff, I. & Sandell, E. (1943), *Textbook of Quantitative Inorganic Analysis*, New York: Mac Millan.

Labandera, F. & Martínez, V. (1994), *pH de ácidos débiles monopróticos como función de la concentración y del pKa: Un modelo simple y de bajo costo.* Anuario Latinoamericano de Química 7, 241 – 245. ISSN 0328 – 087X

Martínez, V. & Guineo, G.(2002). *Numerical Calculus and Analytical Chemistry: An example of interdisciplinary teaching.* CD: Proceedings ICTM2. Wiley and Sons Ed.

Martínez, V.(1998), *Matemática como asignatura de servicio: algunas conclusiones basadas en una evaluación docente*, Números. Revista de didáctica de matemáticas 36. 65 – 67.

Martínez, V.(2001), *Enseñanza de matemáticas en carreras químicas desde un enfoque aplicado y motivador.* Números. Revista de didáctica de las matemáticas 45.43-52.

Pastor, J. & Pi Calleja, P. & Trejo, (1952). *Análisis Matemático,* volumen I, Buenos Aires: Kapelusz.

Vigotsky, L. (1978). *Mind in society. The Development of Higher Psychological Processes*, USA: Harvard University Press.