

Interdisciplinaridade entre química e programação computacional

Interdisciplinarity between chemistry and computational programming

Danilo Morais Itokagi

Instituto Federal do Mato Grosso campus Olegário Baldo, Avenida Europa, s/n, Vila Real, Cáceres – MT:

danilo.itokagi@ifmt.edu.br

Submetido em 15/10/2021; Versão revisada em 21/04/2023; Aceito em 08/05/2023

Resumo

O presente trabalho tem como principal objetivo relatar as possibilidades de interação entre as áreas de química e programação computacional. Em ambas as áreas os estudantes apresentam dificuldades de aprendizado, pois envolvem raciocínio lógico e exigem habilidades matemáticas para estruturar e propor soluções de problemas. Apenas três sugestões de atividades químicas com abordagem computacionais são apresentadas, porém, a depender da criatividade dos professores, outras podem ser geradas. A primeira envolve a construção de gráficos para mostrar tendências na tabela periódica, a segunda, o estabelecimento de um algoritmo de decisão sobre o tipo de combustível economicamente mais vantajoso e a terceira, de uma função para determinação do número de diluições centesimais necessárias para obtenção de uma solução homeopática. A abordagem computacional pode tornar a aprendizagem em química orientada de forma ativa e pode-se iniciar já na educação básica, visando formação de cidadãos competentes para atuar na sociedade moderna.

Palavras-Chave: linguagem de programação, química computacional, análise de dados

Abstract

The main purpose of this work was to describe the ways of interaction between the chemistry and computational programming fields. Both are fields in which the students present learning difficulties since they imply logical reasoning and require mathematical skills in order to structure and propose solutions to problems. Only three suggestions of chemistry-related activities with computational approach are presented, however, according to teacher's creativity, others might be generated. The first one involves plotting patterns of the periodic table, the second one, the construction of an algorithm to choose the most economical fuel and the third, the writing of a function to calculate the number of dilutions to reach a homeopathic solution. The computational approach might make the chemistry learning active-oriented and might start yet at basic education level aiming at the formation of competent citizens to partake in modern societies.

INTRODUÇÃO

As áreas de conhecimento da química e da tecnologia de informação e comunicação são extremamente importantes para a sociedade moderna. Esforços para o desenvolvimento destas duas áreas são indispensáveis para melhora da qualidade de vida e desenvolvimento econômico sustentável. Afinal, vive-se na era de uma sociedade informacional e a busca por métodos mais eficientes - que minimizem o consumo de energia e evitem o desperdício, ou exaustão, de recursos naturais - de produção de alimentos, medicamentos e diversos materiais úteis na construção civil e na indústria eletrônica, deve ser atualmente uma questão central em termos de progresso econômico. Além disto, visto que decisões atuais serão pautadas em conhecimentos científicos e tecnológicos, a educação básica, não somente a superior, nestas duas áreas de conhecimento será primordial para formação de cidadãos participativos (AFFELDT et al., 2017).

Dentro das competências na área de tecnologia de informação e comunicação, encontra-se a capacidade transmitir para o computador, ou seja, ensiná-lo, através de lógica de programação a tarefa de solucionar um problema. O computador é uma máquina que precisa receber instruções estruturadas, chamadas de algoritmos, para executar tarefas. Este processo não é fácil, pois além da interpretação e reconhecimento do problema, deve-se utilizar uma linguagem de programação específica. Tanto para estudantes da educação básica quanto para os da educação superior, química e lógica de programação são duas disciplinas impopulares devido a dificuldades de aprendizado (LEAL, 2014; STUCKEY e HOFSTEIN, 2013). Em comum exigem raciocínio lógico, capacidade de abstração, interpretação e solução de problemas. Estes parecem estar relacionados somente ao ensino de programação de computadores, porém, na área da química, o planejamento de um novo experimento que envolve a

descrição da ordem das etapas de execução, concepção dos fenômenos possíveis, cálculos de concentrações e quantidades de reagentes necessários, e a previsão de resultados, representa um exercício que envolve todos aqueles requisitos citados.

LÓGICA DE PROGRAMAÇÃO

Devido ao acelerado crescimento tecnológico e computacional, e almejando acompanhar a mesma tendência dos países desenvolvidos, França e Tedesco (2015) comentaram a necessidade da introdução do pensamento computacional no currículo do ensino básico nacional. Estes autores imaginaram dois cenários em que esta proposta poderia ser atendida: inserir o pensamento computacional como uma nova disciplina obrigatória, abordando os fundamentos da computação nas diferentes séries do ensino básico, ou promover o seu ensino dentro das disciplinas tradicionais já existentes. Ainda mencionaram a respeito da necessidade da formação de professores para o desenvolvimento de atividades que construam o pensamento computacional até mesmo na ausência de computadores.

Leal (2014) relata as dificuldades enfrentadas por estudantes iniciantes para aprenderem a utilizar a linguagem de programação na solução de problemas. Entre os motivos citados encontram-se a falta de raciocínio lógico, da capacidade de abstração e ensino básico em matemática deficiente. Em seu trabalho, avaliou a aplicação do ensino por meio de padrões com posterior uso de jogos com materiais concretos, visando melhorar a habilidade dos estudantes em reconhecer qual abordagem computacional é apropriada para solucionar determinado problema. Seu estudo englobou estudantes matriculados na primeira série do curso técnico de informática integrado ao ensino médio, do Instituto Federal do Mato Grosso *campus* Barra do Garças. Os resultados mostraram maior motivação e

realce da capacidade de reconhecer padrões de lógica de programação durante os processos de criação e aplicação dos jogos concretos.

Com objetivo de ensinar lógica matemática através de lógica computacional, e avaliar esta forma de ensino, Pereira et al. (2016) elaboraram uma oficina de programação, com duração de 3 meses, utilizando Scratch, um software livre muito utilizado para ensinar lógica de programação para iniciantes. A oficina foi ministrada paralelamente ao ensino formal de matemática pelo professor da escola. Foi realizado acompanhamento contínuo dos estudantes participantes e verificou-se que estes apresentaram melhor rendimento em matemática em relação ao bimestre anterior ao treinamento, enquanto os estudantes que não participaram obtiveram rendimento similar, não apresentando melhoras notáveis. Os autores inferiram que o treinamento, como ferramenta complementar, pode ter provocado o impacto positivo no ensino de matemática. Diante do exposto, parece que o ensino de programação computacional e o ensino de matemática podem-se entrelaçar positivamente na aprendizagem do aluno.

Como dito anteriormente, não somente a aprendizagem de programação computacional e matemática, requerem capacidade de abstração e raciocínio lógico. A química também inclui todos estes processos. Porém, a literatura nacional ainda carece de trabalhos interdisciplinares entre química e lógica de programação, ou programação computacional.

QUÍMICA E LÓGICA DE PROGRAMAÇÃO

Em trabalhos envolvendo experimentos químicos, há a necessidade de coleta, análise e interpretação de dados numéricos. Para execução destas tarefas os químicos estão acostumados a utilizar planilhas como do Excel, por exemplo. Raramente utilizam algum software de programação orientado a objeto para análise de seus resultados. Os softwares comumente utilizados podem não

apresentar ferramentas adequadas para extração de informações desejadas e, então, surge-se a necessidade de programar para solucionar este problema. Por este motivo, Weiss (2017) descreve um curso de computação científica para estudantes de nível superior em química que aborda soluções de problemas desta área utilizando Python.

Há um tempo, Kantardjieff, Hardinger e Willis (1999) já recomendavam a introdução de computação química no início do currículo do curso de nível superior em química. Os autores alegaram que a prática dos cientistas envolve constante exploração de dados, com criação de novas representações e a busca por novas conexões para melhor entender a ciência, desta maneira, com a disponibilização de ferramentas computacionais, os estudantes poderiam apresentar aprendizagem mais significativas uma vez que executariam suas próprias investigações químicas.

Na décima primeira edição do livro de físico-química, dos autores Atkins, de Paula e Keeler (2018), há vários problemas propostos que requerem a utilização de ferramentas computacionais para a resolução. Há um ramo dentro da área de química, chamado quimiometria, que extensivamente utiliza métodos matemáticos, estatísticos e computacionais para explorar a enorme quantidade de dados gerados pelos instrumentos modernos (FERREIRA, 2015). No artigo *Why should chemistry students learn to code?* (CROPPER, 2017), há menção de várias atividades no ramo da química que envolve programação, dentre elas, elucidações espectroscópicas e predições de estruturas moleculares.

Desta maneira, atualmente, percebe-se a crescente necessidade de promover a inserção de competências ligadas à lógica de programação nos profissionais atrelados à área química. Esta inserção, na visão do autor deste artigo, em que conceitos químicos poderiam ser expandidos e explorados computacionalmente, poderia já ocorrer no nível básico de ensino. Concernente a esta ideia

Loganathan et al. (2019) mencionaram, no trabalho com estudantes da educação básica utilizando o Scratch, que a introdução de programação computacional no ensino de química pode ser capaz de estimular interesse e tornar a aprendizagem significativa.

No contexto em que instituições de ensino oferecem cursos técnicos de informática integrados ao ensino médio, como é o caso do Instituto Federal do Mato Grosso *campus* Olegário Baldo, no município de Cáceres - MT, ou, com a tendência em se inserir lógica de programação na educação básica, em qualquer outra escola, o ensino de química utilizando linguagem computacional, poderia reforçar a aprendizagem nesta disciplina e, como sugerido no trabalho de Pereira et al. (2016), afetaria também o de matemática. Além disto, pode-se imaginar o cenário em que os professores de matemática, química, física e lógica de programação estivessem trabalhando de maneira integrada e interdisciplinar. Neste cenário os estudantes seriam expostos rotineiramente a um amplo espectro de exemplos e situações, com diversas formas de utilização dos padrões de programação, o que aumentaria o repertório de experiências passadas tornando-o capaz de programar autonomamente em face de um novo problema.

Para deixar evidente a existência da interação entre o ensino de química e o de programação computacional, a seguir são descritas três abordagens computacionais relacionadas à área da química, que podem ser realizadas no ensino médio. Para estas atividades, os estudantes deveriam ser previamente instruídos quanto à linguagem de programação utilizada.

A primeira se refere à exploração de uma tabela de dados contendo valores das propriedades dos elementos que constituem a tabela periódica. Esta atividade envolve a construção de representações gráficas das propriedades, raio atômico, energia de ionização e eletronegatividade. A partir destas

representações o estudante pode ser conduzido a construir as tendências das propriedades ao longo das duas dimensões da tabela periódicas e com arrazoamentos provocados pelo professor explicar estes comportamentos com base na variação da carga nuclear efetiva e do número de camadas.

As duas últimas atividades foram pensadas a partir de duas questões, uma sobre consumo de combustíveis, extraída do ENEM - Exame Nacional do Ensino Médio (ENEM, 2018), e outra sobre diluição sequencial, extraída da prova de vestibular da FUVEST - Fundação Universitária para Vestibular (FUVEST, 2020). A questão sobre consumo de combustíveis envolveu conceitos de termoquímica e densidade, ministrados normalmente na segunda série do ensino médio, e foi resolvida analiticamente. Após sua resolução, apresentou-se a criação de um outro problema que foi abordado como uma regra de decisão para compra de combustíveis e este foi explorado computacionalmente, com posterior sugestão de pesquisa para os estudantes. Na terceira atividade, mostrou-se a resolução analítica da questão sobre diluição sequencial com posterior exploração computacional do problema.

Todos os códigos foram gerados no software livre R (THE R PROJECT, 2021), que é uma linguagem de programação estatística e de representação gráfica, utilizando como ambiente de desenvolvimento integrado Rstudio (SHARE, 2023). Para aprendizagem da linguagem R pode-se realizar a leitura de *Guide to Programming and Algorithms Using R* (ERGÜL, 2013).

TABELA PERIÓDICA

No ensino da tabela periódica, as tendências das três propriedades dos elementos são abordadas: raio atômico, energia de ionização e eletronegatividade. Comumente os alunos aprendem sobre este tópico de maneira passiva em que o professor, após desenhar a tabela periódica no

quadro, insere setas indicando o aumento ou a diminuição destas propriedades ao longo dos grupos e períodos. Depois arrazoam sobre estas tendências, buscando conexões entre elas, considerando o aumento da carga nuclear efetiva ao longo de um mesmo período percorrendo os diferentes grupos e o aumento do número de camadas ao longo de um mesmo grupo percorrendo os diferentes períodos.

Porém, buscando uma abordagem ativa, o professor, ao invés de expor daquela maneira o conteúdo, poderia conduzir os estudantes a explorar os dados daquelas propriedades através de manuseio e construção de representações gráficas. Afinal, os cientistas para compreenderem algum conceito estão sempre analisando dados, procurando novas conexões e buscando representar os resultados de diferentes maneiras KANTARDJIEFF, HARDINGER e WILLIS, 1999).

No R há um pacote denominado 'PeriodicTable' que contém dados dos elementos da tabela periódica. Depois de carregar a biblioteca, pode-se utilizar estes dados para construção de representações gráficas que indicarão o comportamento do raio atômico, da energia de ionização e da eletronegatividade ao longo de grupos e períodos da tabela. A sequência de códigos, que gera no final as representações gráficas dos valores médios de cada propriedade em cada grupo, encontra-se na Figura 1.

A Figura 2 mostra qual é o valor médio de cada propriedade em cada grupo. A propriedade raio atômico apresenta tendência geral de diminuir enquanto as outras propriedades tendem a aumentar ao longo dos grupos.

Após a construção e análise das representações gráficas os estudantes podem identificar como varia cada propriedade da esquerda para a direita na tabela periódica. Então, o professor ajuda a interconectar as tendências das três propriedades com o aumento da carga nuclear efetiva que ocorre ao longo de um mesmo período

percorrendo-se os grupos.

A sequência de códigos utilizada para construção das representações gráficas dos valores médios das propriedades em cada período está na Figura 3 e a Figura 4 mostra as representações gráficas obtidas.

```
#Carregamento dos dados da tabela periódica
library("PeriodicTable")
data(periodicTable)
tabela <- periodicTable

#Remoção de dados inconsistentes
tabela <- tabela[-c(1,98:117),]

#Remoção de valores faltantes
tab_raio <- tabela[is.na(tabela$rcov) == FALSE,]
tab_ionizacao <- tabela[is.na(tabela$IP) == FALSE,]
tab_eletr <- tabela[is.na(tabela$Eneg) == FALSE,]

#Cálculo dos valores médios em cada grupo
rm_g <- tapply(tab_raio$rcov, tab_raio$group, mean)
iom_g <- tapply(tab_ionizacao$IP, tab_ionizacao$group, mean)
elm_g <- tapply(tab_eletr$Eneg, tab_eletr$group, mean)

#Remoção dos grupos indicados de 19 a 32, estes se referem aos actíneos e lantanídeos
rm_g <- rm_g[-c(19:32)]
iom_g <- iom_g[-c(19:32)]
elm_g <- elm_g[-c(18:31)] #remoção dos gases nobres também

#Geração dos gráficos
par(mfrow=c(1,3))
plot(1:18, rm_g, xlab = "grupos", ylab = "raio Å", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = "red", cex=3)
plot(1:18, iom_g, xlab = "grupos", ylab = "Energia de Ionização eV", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = "green", cex=3)
plot(1:18, elm_g, xlab = "grupos", ylab = "Eletronegatividade", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = "blue", cex=3)
```

Figura 1. Sequência de códigos em R para produzir representações gráficas dos valores médios das propriedades em cada grupo.

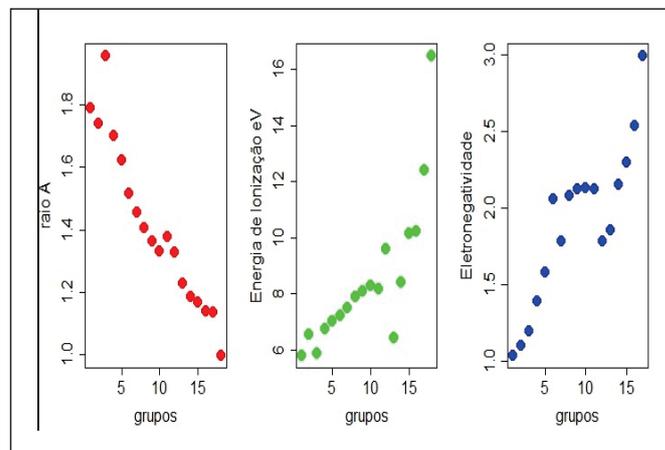


Figura 2. Valores médios das propriedades raio atômico (em angstrom, Å), energia de ionização (em eletrônvolt, eV) e eletronegatividade (sem unidade).

Com estes gráficos, pode-se perguntar aos estudantes como variam cada uma das propriedades ao descer as linhas da tabela periódica. E, então, conduzir os estudantes a considerarem que, embora a carga nuclear dos elementos aumente, o número de camadas também aumenta e isto explica as tendências mostradas na Figura 4.

```

#Cálculo dos valores médios das propriedades em cada período
rm_p <- tapply(tab_raio$rcov, tab_raio$period, mean)
iom_p <- tapply(tab_ionização$IP, tab_ionização$period, mean)
elm_p <- tapply(tab_eletr$Eneg, tab_eletr$period, mean)

#Geração dos gráficos
par(mfrow=c(1,3))
plot(1:7, rm_p, xlab = "períodos", ylab = "raio Å", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = 'red', cex=3)
plot(1:7, iom_p, xlab = "períodos", ylab = "Energia de Ionização eV", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = 'green', cex=3)
plot(1:7, elm_p, xlab = "períodos", ylab = "Eletronegatividade", cex.lab = 1.5, cex.axis = 1.5,
     pch = 20, col = 'blue', cex=3)

```

Figura 3. Sequência de códigos em R para gerar as representações gráficas dos valores médios das propriedades em cada período.

Neste tipo de atividade proposta, os estudantes aprendem sobre as tendências de maneira mais aprofundada, pois não seriam entregues de maneira passiva, antes teriam que investigar através de representações gráficas, cuja construção envolve organização de dados da tabela e cálculos de valores médios, utilizando linguagem de programação.

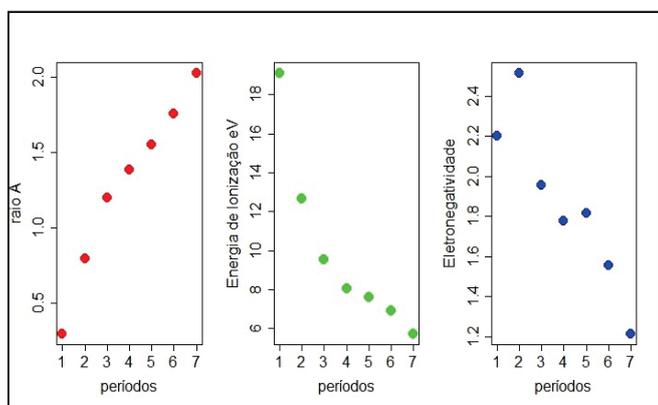


Figura 4. Valores médios das propriedades em cada período.

As representações das Figuras 2 e 4 foram obtidas a partir do cálculo de valores médios para conduzir os estudantes à determinação do comportamento geral das propriedades ao longo das duas dimensões da tabela periódica, porém é possível representar graficamente os valores de cada propriedade considerando os números atômicos no eixo x, ao invés dos grupos e períodos. Esta maneira não foi explorada neste trabalho.

ENEM – 2018 – CONSUMO DE COMBUSTÍVEIS.

O problema de química a seguir é uma questão do Exame Nacional do Ensino Médio de 2018 (ENEM, 2018), figura 5, e envolve a estimativa do consumo de etanol a partir de informações a respeito do consumo de gasolina e dados físico-químicos dos dois tipos de combustíveis. Será apresentado primeiramente sua resolução analítica e, depois, com a exploração mais aprofundada, mostrando a criação de um problema cuja solução apresenta padrão de seleção, utilizando os comandos lógico *If* e *Else*. Sua ideia pode gerar até um projeto de desenvolvimento de um aplicativo de celular para decisão sobre o tipo de combustível comprar no momento do abastecimento.

(ENEM-2018) O carro flex é uma realidade no Brasil. Estes veículos são equipados com motor que tem a capacidade de funcionar com mais de um tipo de combustível. No entanto, as pessoas que têm este tipo de veículo, na hora do abastecimento, têm sempre a dúvida: álcool ou gasolina? Para avaliar o consumo desses combustíveis, realizou-se um percurso com um veículo flex, consumindo 40 litros de gasolina e no percurso de volta utilizou-se etanol. Foi considerado o mesmo consumo de energia tanto no percurso de ida quanto no de volta.

O quadro resume alguns dados aproximados sobre esses combustíveis.

Combustível	Densidade (g mL ⁻¹)	Calor de combustão (kcal g ⁻¹)
Etanol	0,8	-6
Gasolina	0,7	-10

O volume de etanol combustível, em um litro, consumido no percurso de volta é mais próximo de:

A) 27 B) 32 C) 37 D) 58 E) 67

Figura 5. Questão sobre consumo de combustível (ENEM, 2018).

RESOLUÇÃO ANALÍTICA

Esta questão deve ser resolvida seguindo-se a consideração no enunciado de que a quantidade de energia consumida na ida é igual à da volta: $E_{ida} = E_{volta}$. Utilizando os valores das propriedades, densidade (d em g / mL) e calor de combustão (Q em kcalg / g), assim como o volume de combustível (V em L) combustível. Como no caminho de ida utilizou-se gasolina e no de volta seria utilizado etanol, e visto que a mesma quantidade de energia está envolvida

nos dois percursos, tem-se que: $d_g \times V_g \times Q_g = d_e \times V_e \times Q_e$. Deseja-se determinar o volume de etanol no caminho de volta, V_e . Isolando este termo, obtém-se: $V_e = \left(\frac{d_g \times Q_g}{d_e \times Q_e}\right) \times V_g$. Após substituição dos valores de densidade e de calor de combustão dos dois combustíveis (não sendo necessária preocupação com unidades dentro do parêntese, visto que serão canceladas), tem-se: $V_e = 1,46 \times V_g$. Substituindo, o valor de volume de gasolina, 40 L, determina-se o resultado final: $V_e = 58,4 \text{ L}$.

Criação de outro problema para explorar computacionalmente.

Na resolução do problema anterior foi determinada uma relação entre o volume de gasolina consumida e o volume de etanol que seria consumido para percorrer a mesma distância no caminho de volta, $V_e = 1,46 \times V_g$. Esta relação foi estimada a partir de dados físico-químicos (densidades e calores de combustão dos dois tipos de combustíveis) e a partir da medida experimental (de acordo com o relato do enunciado do exercício) do volume de gasolina gasto no percurso de ida. Aquela relação pode ser escrita desta maneira: $\frac{V_e}{V_g} = 1,46$. E sua interpretação pode ser a seguinte: que para uma mesma distância a ser percorrida o consumo de etanol é 1,46 vezes maior em relação ao consumo de gasolina. Porém, esta relação é válida somente para o carro citado no enunciado do problema. Esta razão volumétrica pode variar a depender do tipo de marca, uso e envelhecimento de um veículo. Desta maneira, cada proprietário de veículo deveria esporadicamente determinar experimentalmente esta razão, pois o seu conhecimento, como será descrito adiante, será importante para estabelecer uma regra de decisão para compra de combustíveis ao abastecer um veículo flex.

Para decidir sobre a compra de um combustível deve-se pensar no custo, qual apresenta menor custo por Km rodado. O custo de cada

combustível depende de duas variáveis, do preço na bomba do posto e do consumo volumétrico: $C_c = p_c \times V_c$. Expressando a razão entre os custos dos dois tipos de combustível, gasolina e etanol, tem-se que: $\frac{C_e}{C_g} = \frac{p_e}{p_g} \times \frac{V_e}{V_g}$. Nesta razão de custos, a razão de preços, $\frac{p_e}{p_g}$ refere-se à característica do posto de abastecimento e razão de consumo de combustíveis, $\frac{V_e}{V_g}$, se refere à característica de um determinado veículo.

Com esta razão de custos, pode-se estabelecer uma regra de decisão, com padrão de seleção, para compra de combustível. Se $\frac{C_e}{C_g} < 1$, recomenda-se comprar etanol (pois representa menor custo), caso contrário, com esta razão igual ou maior do que 1, aconselha-se a comprar gasolina. Para avaliar a razão de custos, precisam-se das razões de preço (posto de gasolina) e de consumo (veículo flex) entre os dois tipos de combustíveis. No entanto, o dado comumente encontrado para indicar o consumo de combustíveis é a distância percorrida em quilômetros / litro de combustível. Por exemplo, um automóvel com a performance de 10 Km / L de gasolina. Isto quer dizer que o automóvel consome 1 L daquele combustível para percorrer 10 Km. Portanto, a razão característica do veículo pode ser expressa em termos destes dados, visto que: $\frac{V_e}{V_g} = \frac{S_g}{S_e}$ em que S se refere a distância percorrida por litro de combustível, este podendo ser gasolina ou etanol.

Considerando a razão de custos, a regra de decisão a ser implementada computacionalmente será:

Se $\left[\frac{p_e}{p_g}\right]_{\text{posto}} \times \left[\frac{S_g}{S_e}\right]_{\text{veículo}} < 1$, compre etanol.
caso contrário, compre gasolina.

Na figura 6 está o código que cria uma função para implementação desta regra de decisão no R, considerando que será utilizada em um cenário em que o proprietário já sabe a razão característica de seu automóvel, $\left[\frac{S_g}{S_e}\right]_{\text{veículo}}$, a partir de consulta na internet,

leitura do painel ou medida experimental em que o proprietário determina os valores de S_e ou S_g , seguindo as etapas: completa o tanque, registra a quilometragem inicial (di), percorre uma distância qualquer, volta ao posto para completar o tanque novamente, registra o volume de combustível inserido (Vt), a quilometragem final (df) e determina $S_c = \frac{df-di}{Vt}$ para cada tipo de combustível. A avaliação da regra será efetuada quando da chegada do automóvel no posto.

```

regra <- function(pe, pg, r_veículo){
  r_posto <- pe / pg
  if (r_posto * r_veículo < 1) {
    return (paste("Compre Etanol!"))
  }
  else{
    return (paste("Compre Gasolina!"))
  }
}

```

Figura 6. Código de criação da função “regra”.

Um teste com a função, considerando que em um determinado posto o preço da gasolina seja 6,90 reais / L e do etanol, 4,50 reais / L, e que a razão característica do veículo seja a mesma da encontrada na questão do ENEM, 1,46. A recomendação é:

```

> regra(pe = 4.50, pg = 6.90, r_veículo = 1.46)
[1] "Compre Etanol!"

```

Agora supondo que o etanol esteja mais caro em outro posto, com preço de 5,90 reais, a recomendação muda

```

> regra(pe = 5.90, pg = 6.90, r_veículo = 1.46)
[1] "Compre Gasolina!"

```

Com maior nível de abstração poderia se propor a construção de uma tabela informativa

indicando a recomendação, de etanol ou gasolina, para cada par posto/veículo.

Para a execução desta atividade os estudantes devem realizar pesquisa com levantamento de dados para determinação da característica de diferentes postos (preços de etanol e gasolina) da cidade em que moram e da característica de diferentes veículos (distância percorrida por cada litro de etanol e gasolina), que pode ser encontrada na internet em sites especializados em automóveis. Na Figura 7 estão os códigos empregados para construção da tabela informativa. A função “regra2” é uma modificação da “regra” da Figura 6. Naquela os parâmetros de entrada são os preços dos dois combustíveis (para determinação da razão característica dos postos) e as distâncias que cada veículo percorre por litro etanol e gasolina (para determinação da razão característica dos veículos).

Os objetos de entrada “posto” e “veículo” na função “criar_tabela” são matrizes com duas colunas. No caso do objeto “posto”, cada linha se refere aos diferentes postos e as colunas correspondem aos valores do preço de etanol e gasolina. No objeto “veículo”, cada linha, a uma marca de veículo e as colunas, às distâncias percorridas por litro de etanol e de gasolina.

```

#Regra de decisão
regra2 <- function(pe, pg, se, sg) {
  r_posto <- pe/pg
  r_veiculo <- sg/se
  if (r_posto * r_veiculo < 1) {
    return (paste("Etanol"))
  }
  else {
    return (paste("Gasolina"))
  }
}

#Função para geração da tabela informativa
criar_tabela <- function(posto, veiculo){
  M <- matrix(0, nrow(posto), nrow(veiculo))
  for (i in 1:nrow(posto)){
    for (j in 1:nrow(veiculo)){
      M[i, j] <- regra2(posto[i, 1], posto[i, 2], veiculo[j, 1], veiculo[j, 2])
    }
  }
  colnames(M) <- rownames(veiculo)
  rownames(M) <- rownames(posto)
  return (as.data.frame(M))
}

```

Figura 7. Códigos para criação da função de regra de decisão, “regra2”, e da função que gera a tabela informativa

```

#Geração da matriz posto
posto <- matrix(0, 10, 2)
posto[, 1] <- mnorm(10, 3.50, 1)
posto[, 2] <- mnorm(10, 6.90, 2)
colnames(posto) <- c("pe", "pg")
rownames(posto) <- c(1:10)
posto <- round(posto, 2)

#Geração da matriz veículos
veículos <- matrix(0, 6, 2)
veículos[, 1] <- mnorm(6, 8, 2)
veículos[, 2] <- mnorm(6, 12, 2)
rownames(veículos) <- c("A", "B", "C", "D", "E", "F")
colnames(veículos) <- c("se", "sg")
veículos <- round(veículos, 2)

```

Figura 8. Códigos utilizados para gerar matrizes de com valores característicos de postos de abastecimento e de veículos.

Para testar a função “criar_tabela” foram geradas duas matrizes de entrada, contendo valores para determinação das razões características dos postos e dos veículos.

Os dados não são resultantes de pesquisa, foram gerados aleatoriamente, considerando distribuições normais, somente para aplicação teste da função. Na Figura 8 estão os códigos utilizados para geração das duas matrizes. Foram gerados valores para 10 (1-10) postos diferentes e 6 veículos diferentes (A-F).

```

> posto
  pe  pg
1 4.28 7.14
2 3.24 6.67
3 2.52 2.84
4 3.16 6.29
5 3.49 7.48
6 3.68 8.45
7 4.67 9.34
8 3.25 6.36
9 3.83 8.63
10 3.33 4.90

```

```

> veículos
  se  sg
A 10.61 12.38
B  8.33 12.01
C  7.89 14.47
D  8.44 11.29
E  5.76  9.92
F  7.16 10.78

```

Figura 9. Valores aleatoriamente gerados dos dados característicos de postos de abastecimento e de veículos

Com a aplicação da função “criar_tabela” considerando os dados de entrada da Figura 9, tem-se a recomendação para cada par posto (linhas) / veículo (colunas). Por exemplo, para um carro de marca D

abastecer no posto 7, o combustível recomendado é gasolina. Ver Figura 10. A prática desta atividade proposta visa provocar o desenvolvimento de habilidades que transcende a área da química. A capacidade de construir e analisar tabelas encontra-se em todas as áreas de conhecimento.

```

> criar_tabela(posto, veículos)
  A    B    C    D    E    F
1 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
2 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
3 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
4 gasolina gasolina gasolina gasolina gasolina gasolina
5 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
6 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
7 gasolina etanol gasolina gasolina etanol gasolina
8 gasolina etanol gasolina gasolina etanol etanol
9 etanol etanol etanol etanol etanol etanol
10 etanol etanol etanol etanol etanol etanol

```

Figura 10. Tabela informativa criada com aplicação da função “criar_tabela”.

FUVEST – 2020 – PROBLEMA DE DILUIÇÃO SEQUENCIAL.

O segundo problema é uma questão do vestibular da FUVEST, de 2020 (FUVEST, 2020), e envolve conceitos de mol, concentração molar e diluição, normalmente ensinados no segundo ano do ensino médio.

(FUVEST/2020) Os chamados “remédios homeopáticos” são produzidos seguindo a farmacotécnica homeopática, que se baseia em diluições sequenciais de determinados compostos naturais. A dosagem utilizada desses produtos é da ordem de poucos mL. Uma das técnicas de diluição homeopática é chamada de diluição centesimal (CH), ou seja, uma parte da solução é diluída em 99 partes de solvente e a solução resultante é homogeneizada (ver esquema).

Alguns desses produtos homeopáticos são produzidos com até 200 diluições centesimais sequenciais (200CH). Considerando uma solução de partida de 100 mL com concentração 1 mol/L de princípio ativo, a partir de qual diluição centesimal a solução passa a não ter, em média, nem mesmo uma molécula do princípio ativo?

a) 12ª diluição (12CH) b) 24ª diluição (24CH) c) 51ª diluição (51CH)
d) 99ª diluição (99CH) e) 200ª diluição (200CH)

Figura 11. Questão sobre diluição sequencial centesimal da FUVEST de 2020.

Vídeos no youtube (SUGA, 2020; SANTIAGO, 2020) mostraram a resolução deste problema considerando a alteração na quantidade de soluto, não expressa em mol, após cada etapa de diluição. Porém nenhum deles reconheceram, ou mencionaram, que esta questão tem estrutura de progressão geométrica. A resolução de Santiago (2020) se aproximou desta abordagem, mas sem reconhecimento explícito da conexão com aquele tópico da matemática. Conduzir os estudantes a reconhecerem esta estrutura, aumentaria seu entendimento não só sobre química, mas também sobre matemática.

O reconhecimento de padrões pode favorecer a aprendizagem de assuntos que a priori parecem complexos e desconexos, mas que, na verdade, possuem mesma estrutura.

A captura de um padrão implica na habilidade de reconhecer que aquele pode ser aplicado na solução de um dado problema. Padrões precisam de riquezas de conexões que realçam o seu reuso em contextos diferentes (MULLER, HABERMAN e AVERBUCH, 2004).

É este tipo de ideia que Leal (2014) buscou para melhorar a aprendizagem de lógica de programação: fazer os estudantes reconhecerem os mesmos padrões, existentes em lógica de programação, em jogos com materiais concretos.

Novamente, haverá apresentação da resolução analítica e depois de uma solução computacional, ambas abordando o conceito de progressão geométrica.

RESOLUÇÃO ANALÍTICA

Como é informado a concentração molar e o volume da solução inicial, determina-se nesta a quantidade de soluto, não expressa em mol. Sabendo-se esta quantidade inicial infere-se que esta diminuirá numa razão de 0,01 a cada diluição, visto que a retirara de 1 mL da solução anterior para perfazer

100 mL da próxima implica na formação de soluções 100 vezes diluídas. Logo, deve-se determinar o número de diluição que tornará a quantidade de soluto na solução menor do que 1, ou seja, nenhuma molécula de princípio ativo em solução.

Considerando N_0 a quantidade inicial de soluto, expressa não em mol, e que esta quantidade será reduzida em uma razão de 0,01 a cada diluição, tem-se que a quantidade de soluto após n diluições será dada por: $N = N_0 \times 0,01^n$. A quantidade inicial, N_0 , é dada por $N_0 = C_0 \times V_0 \times N_A$ em que C_0 e V_0 representam a concentração molar (1 mol / L) e o volume (100 mL) da solução inicial, e N_A o número de Avogadro ($6,02 \times 10^{23}$ / mol). Após substituição destes valores e considerando a conversão de unidade do volume inicial de mL para L $N_0 = 6,02 \times 10^{22}$

A quantidade de soluto presente em uma solução após realização de n diluições é, então, dada por: $N = 6,02 \times 10^{22} \times 0,01^n$. Então a tarefa agora é encontrar o valor de n que primeiro torna o valor de N menor do que 1. Este valor será o número de diluições centesimais necessárias para tornar o princípio ativo inexistente no medicamento homeopático.

Fazendo $N = 1$, determina-se o n da equação anterior. O valor de n que torna N menor do que 1 será o número inteiro maior mais próximo. Seguindo estes passos, isola-se o n , e aplica-se log dos dois lados:

$$1 = 6,02 \times 10^{22} \times 0,01^n \rightarrow \frac{1}{6,02 \times 10^{22}} = 0,01^n \rightarrow \log\left(\frac{1}{6,02 \times 10^{22}}\right) = \log(0,01^n) \rightarrow -23,78 = -2 \times n \rightarrow n = 11,88$$

Portanto, o número de diluições que primeiro torna a quantidade de soluto inexistente é 12.

RESOLUÇÃO COMPUTACIONAL

Este problema pode ser resolvido computacionalmente utilizando padrões de seleção e de repetição de meio laço, com uso dos comandos *if*, *else* e *while*.

#Esta função apresenta somente o número de diluições necessárias

```
numdil1<- function(C0, V0, Va){
  Na <- 6.02 * 10^23
  N0 <- Na * C0 * V0 / 1000
  if (N0 < 1){
    return ("princípio ativo já ausente")
  }
  else {
    Nn <- 2
    n <- 0
  }
  while(Nn >= 1){
    Nn <- N0 * (Va / V0)^n
    n <- n + 1
  }
  return (paste("número de diluições:", n-1))
}
```

Figura 12. Criação da função “numdil1” que determina o número de diluições necessária para que a quantidade de soluto seja inexistente na solução

#Esta função cria uma matriz indicando a quantidade de soluto após certo número de diluições

```
numdil2<- function(C0, V0, Va){
  Na <- 6.02 * 10^23
  N0 <- Na * C0 * V0 / 1000
  if (N0 < 1){
    return ("princípio ativo já ausente")
  }
  else {
    Nn <- 2
    M <- c(0, 0)
    n <- 0
  }
  while(Nn >= 1){
    Nn <- N0 * (Va / V0)^n
    M <- rbind(M, c(n, Nn))
    n <- n + 1
  }
  M <- M[-1, ]
  colnames(M) <- c("diluições", "quantidade")
  return (M)
}
```

Figura 13. Criação da função “numdil2” que gera uma matriz indicando a quantidade de soluto após certo número de diluições.

Como parâmetros de entrada, a concentração molar (em mol / L) e o volume da solução inicial (em mL), e a alíquota (em mL também) a ser retirada em cada etapa de diluição. O termo “ $Va/V0$ ” no código representa a razão entre o volume da alíquota e o volume da solução, e é a razão da progressão geométrica. No final, a função criada retorna o valor do número de diluições necessárias para tornar a quantidade de soluto inexistente e pode, ou não exibir, os valores de quantidade de soluto a cada diluição. Para mostrar estas duas possibilidades, duas funções foram criadas: “numdil1” e “numdil2”.

Considerando então uma solução inicial de concentração igual a 1 mol / L, com volume de 100 mL e volume de alíquota retirada a cada processo de diluição igual a 1 mL, como no enunciado do problema, e utilizando as funções “numdil1” e “numdil2” (Figuras 12 e 13) obtém-se os retornos a seguir:

```
> numdil1(C0 = 1, V0 = 100, Va = 1)
"número de diluições: 12"
```

```
> numdil2(C0 = 1, V0 = 100, Va = 1)
diluições quantidade
0 6.02e+22
1 6.02e+20
2 6.02e+18
3 6.02e+16
4 6.02e+14
5 6.02e+12
6 6.02e+10
7 6.02e+08
8 6.02e+06
9 6.02e+04
10 6.02e+02
11 6.02e+00
12 6.02e-02
```

Figura 14. Matriz de dados gerados com aplicação da função “numdil2”.

A primeira mostra a resposta direta, qual o número de diluições necessárias e a segunda, uma tabela de dados mostrando qual é a quantidade de soluto (coluna: quantidade) presente na solução após cada etapa de diluição (coluna: dil).

Observa-se na tabela que só a partir da décima segunda diluição é que a quantidade de princípio ativo se torna menor do que 1, indicando ausência deste em solução.

Estas funções, podem ser exploradas com mudanças no volume de alíquota retirada em cada etapa de diluição.

Com isto, os estudantes perceberão que com o aumento do volume da alíquota acarretará maior número de etapas de diluição e a diminuição resultará em menor número de etapas de diluição. Arrazoamentos sobre este comportamento podem ser provocados.

CONCLUSÃO

Este trabalho teve como finalidade mostrar possibilidades de interação entre as áreas de química e de lógica de programação. Mas o número de atividades pode ser ilimitado, a depender da criatividade do professor. A interação entre esta e a matemática sugeriu impactos positivos na aprendizagem de estudantes do ensino básico no trabalho de Pereira et al. (2016). Será que a inclusão da abordagem computacional de problemas químicos, não poderia trazer mais uma forma de reconhecimento de padrões para melhor compreensão de conceitos de lógica de programação? Ou ainda, a educação em química, por sua vez, não poderia ser impactada, com resultados positivos de melhora de aprendizagem, uma vez que a adição da abordagem computacional poderá tornar os estudantes mais ativos e criativos na busca por soluções de problemas? Habilidades computacionais serão cada vez mais requisitadas no mercado de trabalho e decisões complexas serão pautadas cada vez mais em conhecimentos científicos e tecnológicos, desta maneira, o ensino interdisciplinar destas duas áreas parece ser o caminho para aquisição das competências necessárias para atuação em uma sociedade moderna.

REFERÊNCIAS

- AFFELDT, F.; TOLPPANEM, S.; AKSELA, M.; EIKS I. The potential of non-formal education sector for supporting chemistry learning and sustainability education for all students – a joint perspective from two cases in Finland and Germany. **Chemistry Education Research and Practice**, v. 18, p. 13-25, 2017.
- ATKINS, P.; DE PAULA, J.; KEELER, J. **Physical Chemistry**. 11. ed. Oxford: Oxford University Press, 2018.
- CROPPER, C. Why should chemistry students learn to code? **Education in Chemistry**, 2017. Disponível em: < <https://edu.rsc.org/opinion/why-should-chemistry-students-learn-to-code/3008177.article>>. Acesso em: 14 out. de 2021.
- ENEM – Exame Nacional do Ensino Médio. 2018. 2º dia, caderno azul. Questão 92. Disponível em: https://download.inep.gov.br/educacao_basica/enem/provas/2018/2018_PV_impreso_D2_CD7.pdf. Acesso em: 12 abr. 2023.
- ERGÜL, O. **Guide to Programming and Algorithms Using R**: 1. ed. London: Springer, 2013.
- FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações**. 1. ed. Campinas: Editora da Unicamp, 2015.
- FRANÇA, R. S.; TEDESCO, P. C. A. R. Desafios e oportunidades ao ensino do pensamento computacional na educação básica no Brasil. In: **IV Congresso Brasileiro de Informática na Educação (CBIE) e X Conferência Latino-Americana de Objetos e Tecnologias de Aprendizagem (LACLO)**, 26 a 30 de outubro de 2015, Maceió. Anais dos Workshops do IV Congresso Brasileiro de Informática na Educação (CBIE-2015), Maceió: Sociedade Brasileira de Computação – SBC, p. 1464-1473, 2015.
- FUVEST – Fundação Universitária para Vestibular. Prova de Conhecimentos Gerais. 24/11/2019. Questão 06. Concurso Vestibular FUVEST – 2020. Disponível em:

- https://acervo.fuvest.br/fuvest/2020/fuvest_2020_primeira_fase_prova_V.pdf. Acesso em: 10 abr. 2023.
- KANTARDJIEFF, K. A.; HARDINGER, S. A.; WILLIS, W. V. Introducing Chemical Computation Early in the Undergraduate Chemistry Curriculum. **Journal of Chemical Education**, v. 76, n° 5, p. 694-697, 1999.
- LEAL, A. V. A. **Ensino de Programação no Ensino Médio Integrado: Uma Abordagem Utilizando Padrões e Jogos com Materiais Concretos**. 2014. 108 f. Dissertação (Mestrado em Ciências da Computação) – Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás. Goiânia, 2014.
- LOGANATHAN, P.; ALWI, A. M.; ROMAINOR, N.; TALIB, A.; HANRI, C.; MAIMUN, A.; SIANG, K. H. **Student's Chemistry Learning Process Through Visual Programming Language: A Preliminary Study**, v. 8, n° 1, p. 509-514, 2019.
- MULLER, O.; HABERMAN, B.; AVERBUCH, H. (An Almost) Pedagogical Patterns for Pattern-Based Problem-Solving Instruction. **ACM SIGCSE Bulletin**, v. 36, n° 3, p. 102–106, 2004.
- PEREIRA, M. L.; FERREIRA, R. S.; OLIVEIRA, J. A.; BONIFÁCIO, B. A.; FERNANDES, P. S. Avaliando o Impacto do Uso de Lógica de Programação no Ensino de Lógica Matemática: Um estudo de Caso. **Nuevas Ideas em Informática Educativa**, v. 12, p. 642 – 647, 2016.
- ROQUE, M. M. **Inserção de Lógica de Programação no Ensino Básico usando Linguagem Python e Biblioteca Pygame**. 2017. 124 f. Monografia (Bacharel em Engenharia Elétrica) – Universidade Federal do Ceará. Fortaleza, 2017.
- SANTIAGO, Leo. **FUVEST 2020 Química Diluições Sequenciais - Questão 06 - Os chamados “remédios homeopáticos”**. Youtube, 1 jun. 2020. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=4M8q7N9sluk>. Acesso em: 10 abr. 2023.
- SHARE everything R & Python with Posit Connect. Disponível em: <https://posit.co/>. Acesso em: 12 abr. 2023.
- STUCKEY, M.; HOFSTEIN, A. The meaning of 'relevance' in Science education and its implications for the Science curriculum. **Studies In Science Education**, v. 19, n° 1, p. 1-34, 2013.
- SUGA, Igor Saburo (Prof. Igor Química). **FUVEST 2020, Questão 6 – Prova V**. Youtube, 30 jun. 2020. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=FVToQ349q6l>. Acesso em: 10 abr. 2023.
- THE R PROJECT for Statistical Computing. Disponível em: <https://www.r-project.org/>. Acesso em: 12 abr. 2023.
- WEISS, C. J. Scientific Computing for Chemists: An Undergraduate Course in Simulations, Data Processing, and Visualization. **Journal of Chemical Education**, v. 94, n°5, p. 592 – 597, 2017.