

A INFORMÁTICA NO ENSINO: II. REPRESENTAÇÃO DE FUNÇÕES.

Léo Degrève

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP;
Av. Bandeirantes, 3900; 14049 – Ribeirão Preto (SP)

Recebido em 27/4/88

ABSTRACT

The objective of this paper is to present a program for IBM/PC micro-computers which is able to plot many types of functions on the screen. One or more functions are easily introduced in a defined program line. The use of some physical constants and of adjustable parameters is allowed. Some didactic applications in chemistry are also presented.

INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é apresentar um programa BASIC desenvolvido para microcomputadores do tipo IBM-PC, que permite, sem grande conhecimento das técnicas de programação, representar graficamente muitas funções $Y(X)$. Este programa foi elaborado, principalmente para que o docente possa, no decorrer das suas exposições, mostrar graficamente algumas particularidades das equações que estão sendo desenvolvidas assim como a influência de todos os componentes da equação sobre o comportamento geral da propriedade estudada. Muitas outras aplicações podem também ser facilmente relacionadas. A idéia básica é que o objetivo pode ser alcançado alterando somente uma linha do programa-base seguindo algumas convenções. Alguns exemplos de aplicação, de dificuldades crescentes, serão agora desenvolvidos.

A: Exemplo 1. Introdução das funções

Como primeiro exemplo, vamos supor que se deseja mostrar algumas propriedades relacionadas com a equação de estado dos gases ideais dando enfoque à influência do número de moles e da temperatura sobre a pressão total do gás quando o seu volume varia de 1 até 100 l. Os valores do número de moles e da temperatura (K) são, por exemplo, 1 e 300, 5 e 300, 1 e 600 e enfim 1 e 1000. O procedimento a seguir neste caso é:

- * – Introduzir a função desejada na linha que é assinalada pelo próprio programa na seguinte forma: $Y = \dots$
- * – Se a função contiver parâmetros ajustáveis que o observador deseja alterar, eles deverão ser simbolizados por

$P(1)$, $P(2)$, etc. Neste exemplo, os parâmetros $P(1)$ e $P(2)$ seriam o número de moles e a temperatura.

* – Algumas constantes físicas são predefinidas tais como: a velocidade da luz, a carga elementar, as constantes dos gases, de Planck, de Boltzmann e de Faraday, o número de Avogadro, o raio de Bohr e a permissividade do vácuo. Os valores são sempre fornecidos nas unidades do sistema S.I. O valor de π é também predefinido.

* – No exemplo citado a equação a ser representada é:

$$p = n R T / V$$

Simbolicamente a pressão será Y e o volume X . Deste modo tem-se:

$$Y = P(1) * R * P(2) / X \quad (1)$$

* – Na etapa seguinte, o número de parâmetros ajustáveis deve ser especificado, no caso : 2.

* – Introdução do valor de $P(1)$ e $P(2)$: 1 e 300.

* – Definição da faixa de variação de X respondendo às perguntas seguintes:

< NÚMERO DE PONTOS > : 100 (por exemplo)

< X inicial e dX > : .001, .001, visto que o valor inicial escolhido para o volume é 1 l ($\equiv 0.001 \text{ m}^3$) e o final 100 l. O incremento dX é calculado através da relação: (volume final – volume inicial) / (número de pontos – 1).

B: Apresentação e diferenciação das curvas

* – < LIGAR OS PONTOS > : responder < S > se desejar que os pontos representativos sejam ligados por retas ou < N > em caso contrário.

* – Escolha do tipo de representação dos pontos nas coordenadas calculadas X, Y : ponto, círculo, cruz, quadrado ou triângulos: resposta 0, 1, 2, 3 ou 4 respectivamente.

* – Escolha da apresentação na tela e da extensão dos eixos por resposta às perguntas seguintes:

< OS VALORES EXTREMOS DE X SÃO: 1 E 0. VOCÊ QUER MODIFICAR ESTES VALORES (S/N)? >

e

<OS VALORES EXTREMOS DE Y SÃO: 2494290 e 24942. VOCÊ QUER MODIFICAR ESTES VALORES (S/N)? >

Estas perguntas são destinadas a escolher os limites das variáveis X e Y apresentadas na tela de tal modo que o gráfico seja apresentado na sua integridade ou de tal modo que funções com valores extremos diferentes possam ser apresentadas simultaneamente. No exemplo é adequado manter o intervalo X entre 0 0.1 m³ e ampliar o intervalo Y até 0. Portanto as respostas às duas perguntas podem ser <S> e <N> sucessivamente. A indagação seguinte é então: <NOVOS VALORES, MAIOR E MENOR>. Resposta: 250000,0 (por exemplo).

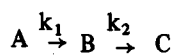
* - <FATOR DIVISÓRIO DE X E Y? >. Esta pergunta é destinada a dividir apropriadamente os eixos X e Y: os valores de X vão de 0 até 0.1 de modo que dividindo este intervalo por 0.01, as marcas no eixo X aparecerão em X = 0, 0.01, 0.02, ..., 0.1. Do mesmo modo se o fator divisório de Y for 1000000 o eixo Y será demarcado nos valores 0, 10⁶ e 2 10⁶. Portanto as respostas podem ser 0.01 e 1000000.

* - A tela mostra então a representação da eq. (1) (figura 1). Apertando-se uma tecla, aparece a pergunta <MAIS DADOS (S/N)>. Respondendo <N>, a sessão será encerrada, respondendo <S>, tem-se a possibilidade de traçar novas curvas. Resposta: <S>. As outras curvas (n = 5,

T = 300, ...) podem então ser representadas seguindo o mesmo procedimento. Tomando-se o cuidado de usar símbolos diferentes para as diversas curvas, o resultado final é mostrado na figura 1.

C: Superposição de funções

O programa pode ser manuseado de maneira bastante flexível para que dados diferentes possam ser representados simultaneamente. Por exemplo, nos cursos de cinética química a influência dos valores das constantes cinéticas é avaliada somente de maneira qualitativa: a aprendizagem será mais eficiente quando diferentes condições podem ser examinadas. Sejam, por exemplo, duas reações consecutivas: como as concentrações do reagente, do intermediário e do produto variam se a primeira ou a segunda reação é a etapa limitante? As equações são:



As concentrações são dadas por¹:

$$[A] = [A]_0 \exp(-k_1 t) \quad (2)$$

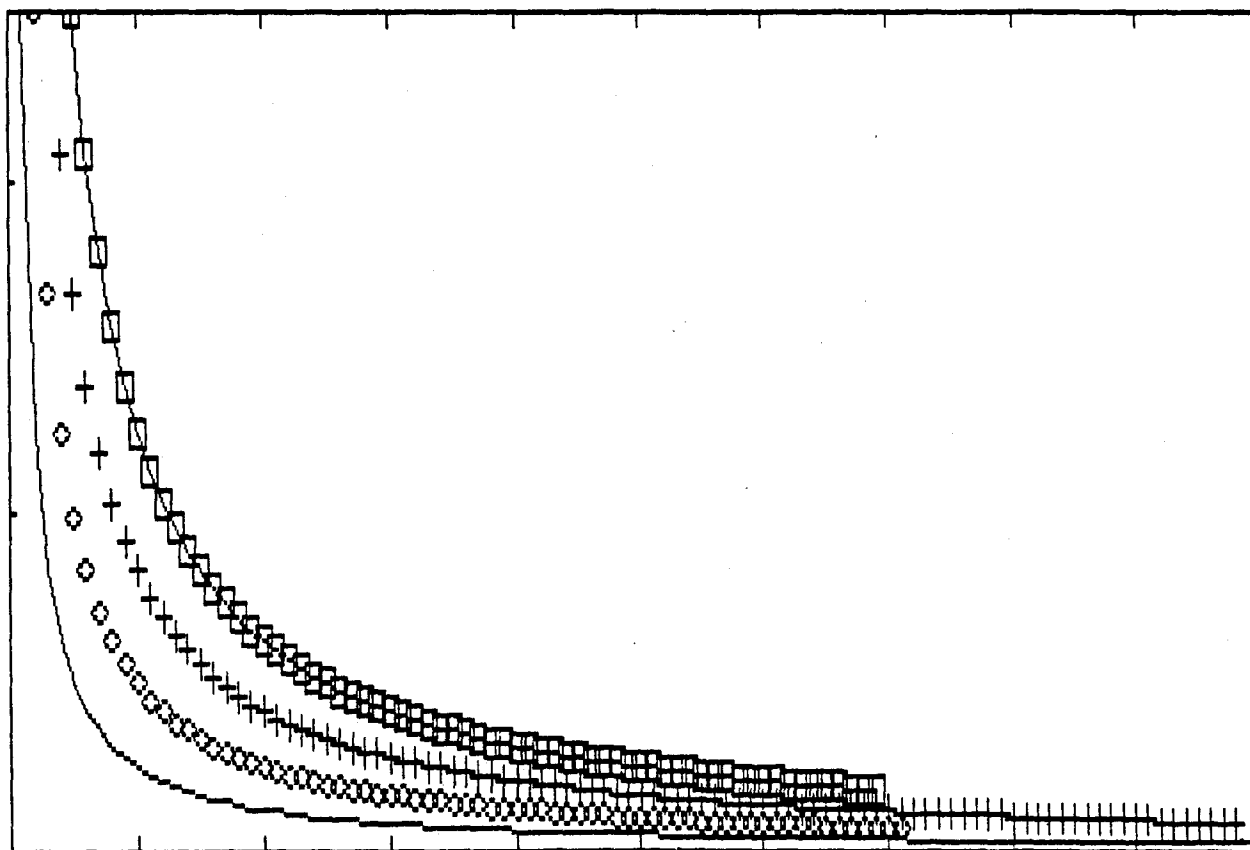


Figura 1. A pressão de um gás ideal (de 0 até 2.5 10⁶ N . m⁻²) em função do volume (de 0 até 0.1 m³) quando n = 1 mol, T = 300 K (—); n = 5, T = 300 (□); n = 1, T = 600 (○) e n = 1, T = 1000 (+).

$$[B] = [A]_0 \frac{k_1}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)] \quad (3)$$

$$[C] = [A]_0 \left(1 - \frac{k_2 \exp(-k_1 t) - k_1 \exp(-k_2 t)}{k_2 - k_1} \right) \quad (4)$$

desde que $k_1 \neq k_2$, $[B]_0 = [C]_0 = 0$ e que $[A]_0$ seja inicialmente a concentração de A.

Pode-se representar separadamente as concentrações de A, B e C em função do tempo se a seguinte instrução for introduzida:

$$Y = P(4) * P(1) * \text{EXP}(-P(2) * X) + P(5) * P(1) * P(2) / \\ / (P(3) - P(2)) * (\text{EXP}(-P(2) * X) - \text{EXP}(-P(3) * X)) + \\ + P(6) * P(1) * (1 - (P(3) * \text{EXP}(-P(2) * X) - \\ - P(2) * \text{EXP}(-P(3) * X)) / (P(3) - P(2))) \quad (5)$$

onde $P(1)$ é a concentração inicial de A; $P(2) = k_1$; $P(3) = k_2$ e os parâmetros $P(4)$, $P(5)$ e $P(6)$ assumirão os conjuntos de valores 1,0,0 ; 0,1,0 e 0,0,1 quando as concentrações de A, B e C são sucessivamente lançadas em gráfico ou seja: eq. (5) \equiv $P(4) * \text{eq. (2)} + P(5) * \text{eq. (3)} + P(6) * \text{eq. (4)}$. A figura 2 mostra a evolução das concentrações quando

a primeira reação é a etapa limitante ($k_1 = 1 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 4 \text{ s}^{-1}$) e quando a segunda reação é limitante ($k_1 = 2 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 1 \text{ s}^{-1}$). Em ambos os casos $[A]_0 = 10 \text{ mol/l}$.

Um outro exemplo é relacionado com as densidades de probabilidade de osciladores harmônicos nos estados quânticos 0, 1 e 2. Esta densidade de probabilidade² é proporcional a:

$$\exp(-X^2) * H_n^2 / (2^n n!)$$

onde n é o número quântico, H_n é o polinômio de Hermite de ordem n e X é uma variável proporcional à distância entre a posição atual do oscilador e a sua posição média. Visto que $H_0 = 1$, $H_1 = 2X$ e $H_2 = 4X^2 - 2$, a instrução que define Y é:

$$Y = \text{EXP}(-X^2) * (P(1) + P(2) * 4 * X^2 + P(3) * \\ (4 * X^2 - 2)^2) \quad (6)$$

O coeficiente $1/(2^n n!)$ é igual a 1, 0,5 e 0,125 quando $n = 0, 1$ e 2 sucessivamente. Neste caso, para se representar a densidade de probabilidade no estado quântico $n = 0$, os parâmetros $P(1)$, $P(2)$ e $P(3)$ assumirão os valores 1,00; no estado $n = 1$ os valores 0,0,5,0 e para $n = 2$: 0,0,0,125. O resultado final é mostrado na figura 3.

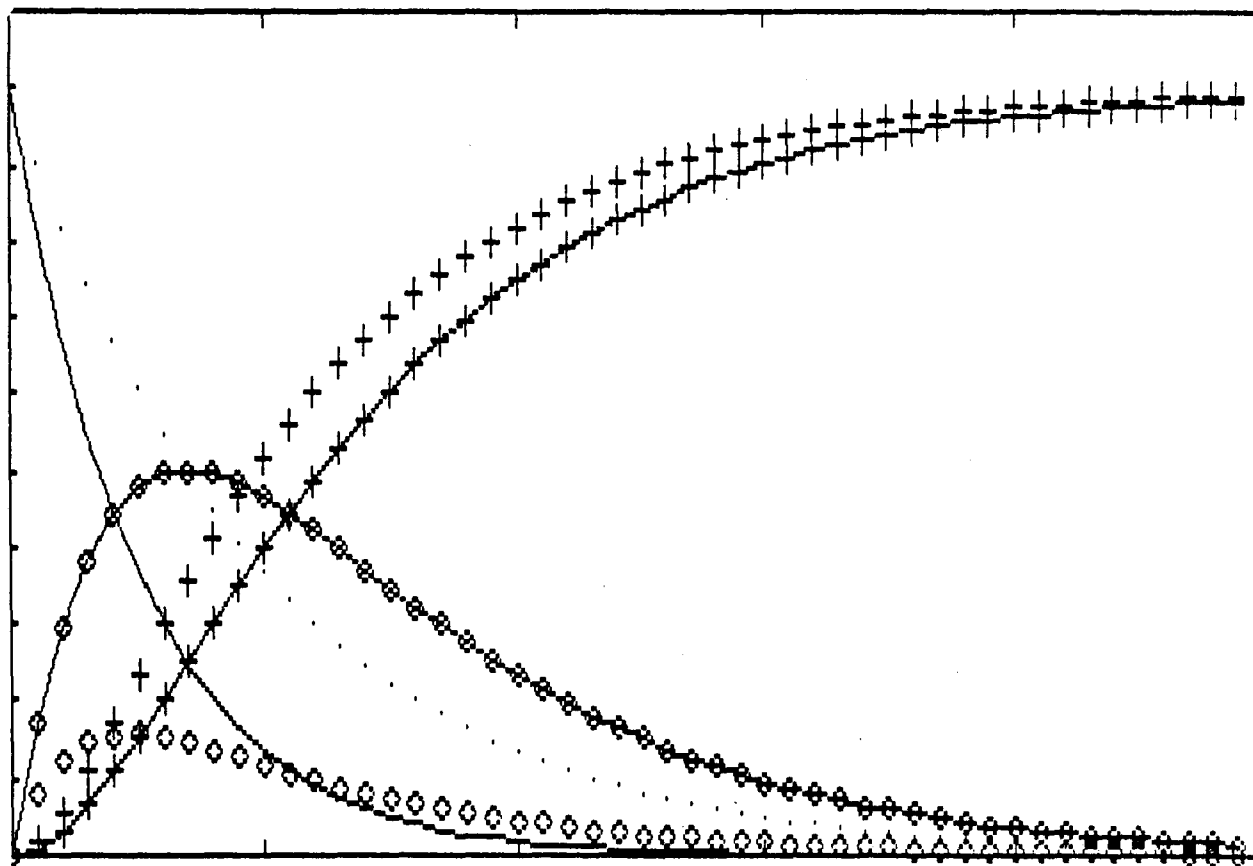


Figura 2. A concentração do reagente (. . .), do intermediário (o) e do produto (+), de 0 até 11 mol/l, para as reações $A \rightarrow B \rightarrow C$ em função do tempo quando $k_1 = 2 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 1 \text{ s}^{-1}$ (traço cheio) e quando $k_1 = 1 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 4 \text{ s}^{-1}$ (pontos isolados).

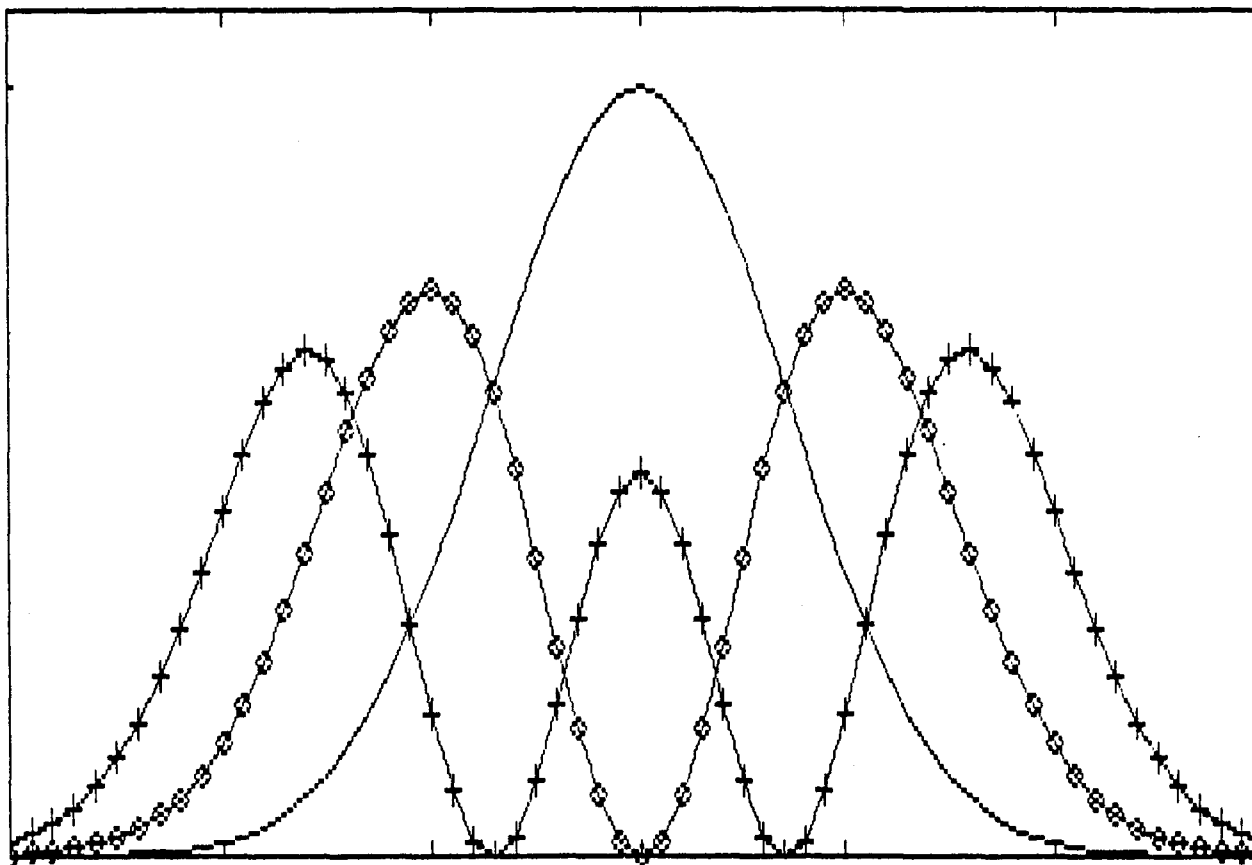


Figura 3. Densidade de probabilidade de um oscilador harmônico no estado quântico $n=0$ (—), $n=1$ (○) e $n=2$ (+) em função da distância (unidades arbitrárias) de afastamento em relação à posição média.

D: Desmembramento gráfico

Como último exemplo, vamos supor que o objetivo agora é representar as curvas, $P(p_x)$, de densidade de probabilidade constante para o orbital p_x do átomo de hidrogênio ($n=2, \ell=1, m=1$) no plano X, Y^3 :

$$P(p_x) = \frac{1}{32\pi} a_0^{-3} X^2 \text{EXP}[-(X^2 + Y^2)^{1/2}] \quad (7)$$

se as distâncias forem expressadas em números de raios de Bohr, a_0 .

A equação (7) pode ser reescrita na forma seguinte:

$$A = X^2 \text{EXP}[-(X^2 + Y^2)^{1/2}] \quad (8)$$

onde A é uma constante que é proporcional à probabilidade. Em função de X , os valores de Y são:

$$Y = \pm [(\text{Ln } X^2 - \text{Ln } A)^2 - X^2]^{1/2} \quad (9)$$

de modo que a curva de probabilidade constante será obtida em duas vezes: $Y = +\sqrt{\dots}$ e $Y = -\sqrt{\dots}$. Os valores limites da variável X devem também ser estabelecidos segundo o valor de $\text{Ln } A$ para que Y calculado pela eq. (9) seja um número real. Para $\text{Ln } A = -5, -4, -3$ e -2 os limites

de X são sucessivamente $\pm 9.503272, \pm 8.210934, \pm 6.847877$ e ± 5.356694 . Um outro fato a considerar é que perto do núcleo não há probabilidade de presença que corresponde aos valores pretendidos: deste modo nenhum valor de Y deve ser calculado na região ao redor de $X = 0$. Assim a curva total será calculada em quatro partes escrevendo-se primeiro:

$$Y = P(1) * \text{SQR}((\text{LOG}(X^2) - P(2)) ^ 2 - X^2) \quad (10)$$

e desmembrando a curva, por meio da eq. (10) no caso de $\text{Ln } A = -5$, do seguinte modo:

- i) $P(1) = 1, P(2) = -5,95$ pontos, X inicial = $-9.503272, dX = 0.1$
- ii) $P(1) = -1, P(2) = -5,95$ pontos, X inicial = $-9.503272, dX = 0.1$
- iii) $P(1) = 1, P(2) = -5,95$ pontos, X inicial = $9.503272, dX = -0.1$
- iv) $P(1) = -1, P(2) = -5,95$ pontos, X inicial = $9.503272, dX = -0.1$

Os resultados são apresentados na figura 4 para as diversas probabilidades que variam de curva para curva de um fator $e = 2.71828$.

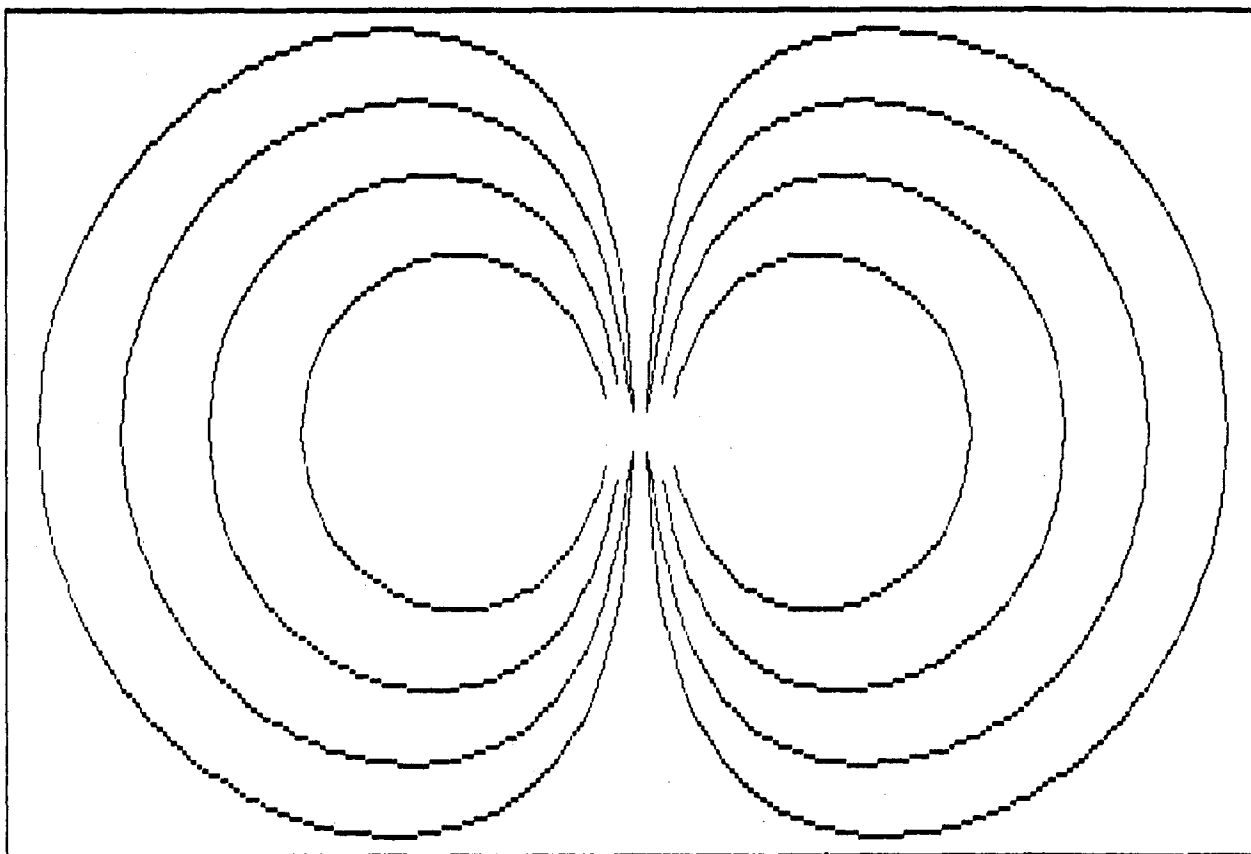


Figura 4. Curvas de densidade de probabilidade constante do orbital p_x ($n = 2$, $l = 1$, $m = 1$) do átomo de hidrogênio no plano X,Y. A curva mais interna corresponde à probabilidade $2.01 \cdot 10^{-3}$ elétron/nm³, as seguintes às probabilidades $7.42 \cdot 10^{-4}$, $2.73 \cdot 10^{-4}$ e $1.00 \cdot 10^{-4}$ sucessivamente.

CONCLUSÃO

O programa apresentado aqui é destinado a empregar recursos visuais para ajudar a compreensão dos detalhes de comportamento de funções da forma genérica $Y = Y(X, \text{parâmetros } 1, 2, \dots)$. A vantagem é que este programa é de uso simples, sendo necessário um mínimo de conhecimento de técnicas e linguagens de programação. No sentido de simplificar o programa ao máximo, vários recursos possíveis não foram incluídos, tais como inclusão do nome das variáveis, dos seus valores numéricos nos eixos, acessos através de arquivos gravados em disco, etc para manter claro que o objetivo é de se obter rapidamente as representações gráficas nas condições pretendidas.

Os interessados poderão solicitar o programa diretamente com o autor.

REFERÊNCIAS

- ¹ Bueno, W.A.; Leone, F. de A.; Degève, L.; Boodts, J.F.C.; "Química Geral", Ed. McGraw-Hill do Brasil, Ltda; São Paulo (1978), p. 466.
- ² Moore, W.J.; "Físico-Química", Ed. E. Blücher Ltda e EDUSP, São Paulo (1976), p. 559.
- ³ Pauling, L.; Wilson, E.B.; "Introduction to Quantum Mechanics", McGraw-Hill Book Cy, Inc.; New-York (1935), p. 138.