

**CAMILA COLTRO DA SILVA  
RICHARD RAFAEL MATTOZO**

**MODELAGEM MATEMÁTICA NA QUÍMICA**

Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado ao Curso de Licenciatura em  
Química do Instituto Federal do Paraná,  
Campus Irati.

Orientador: Prof. Dr. Diego Dutra Zontini

**IRATI  
2022**

## MODELAGEM MATEMÁTICA NA QUÍMICA

Autores: Camila Coltro da Silva, Richard Rafael  
Mattozo

Orientador: Prof. Dr. Diego Dutra Zontini

### RESUMO:

A proposta deste trabalho é estudar processos químicos para serem modelados e explorados matematicamente, permitindo a construção de modelos com ferramentas do Cálculo Diferencial e Integral e de Álgebra Linear. Para esse processo, utilizamos da modelagem matemática na perspectiva de Bassanezi como a construção de modelos matemáticos para obter compreensões aprofundadas de situações das mais diversas áreas do conhecimento, porém a química é o tema central de investigação, buscando uma nova estratégia de ensino com o uso da interdisciplinaridade para melhor compreensão dos conteúdos. Para tanto, fizemos um estudo teórico de equações diferenciais e modelamos experimentos químicos realizados no laboratório com uma abordagem mais profunda de cada situação. No entanto, o trabalho foi possível aliar a teoria matemática na perspectiva de Bassanezi para analisar problemas químicos, obtendo funções que permitem ter visão mais detalhada de todos os processos realizados nos experimentos.

**Palavras-chave:** modelagem; processos químicos; ensino; equações diferenciais.

### 1 INTRODUÇÃO

O uso da interdisciplinaridade no ensino de química faz-se necessário para aprimorar os conhecimentos e a aprendizagem dos alunos. Partindo deste pressuposto, utilizamos de ferramentas matemáticas para modelar experimentos químicos que realizamos, como a análise da temperatura e a queima da vela em função do tempo, permitindo a utilização da Modelagem Matemática na perspectiva de Bassanezi com uso de equações diferenciais ordinárias (EDO) para a resolução desses problemas reais.

As equações diferenciais ordinárias se constituem em uma ferramenta de grande importância no âmbito matemático e principalmente na modelagem matemática, como em alguns problemas naturais encontrados no cotidiano. Inúmeros problemas químicos, físicos, biológicos e econômicos podem ser descritos por meio das equações diferenciais. Para podermos nos aprofundar, é necessário a compreensão de algumas técnicas e resultados da análise matemática como a convergência de sequências de funções. Segundo Sotomayor:

Muitas leis da Física, Biologia e da Economia encontram sua expressão natural nessas equações. Por outro lado, inúmeras questões da própria Matemática, por exemplo, em Topologia, Geometria Diferenciais e no Cálculo de Variações são formuladas por Equações Diferenciais Ordinárias ou se reduzem a elas (SOTOMAYOR, 1979).

No final do século XVII, são notórios os avanços do cálculo pelo empenho de grandes matemáticos da época, na qual problemas em quaisquer áreas puderam ser modelados matematicamente por meio de equações diferenciais. Com isso, surgiu a necessidade do desenvolvimento de técnicas para a resolução desses problemas.

Ao longo dos anos, percebeu-se que não seria possível obter procedimentos gerais de resolução explícita para as equações diferenciais, então, pesquisadores do período começaram procurar outros métodos de estudo das equações diferenciais que não a sua solução explícita. Logo após, novos estudos demonstraram a existência de soluções para uma grande parte dessas equações.

No final do século XIX, Henry Poincaré (1854-1912) e Alexander Liapunov (1857- 1918) desenvolvem a teoria qualitativa geométrica e logo em seguida surge a teoria de aproximação analítica e de aproximação numérica. Vale ressaltar a relevância de entendermos a importância de pesquisas desenvolvidas em diversas áreas com relação à modelagem, pois ela faz com que a matemática se aproxime mais da realidade do que o caminho inverso.

Para Bassanezi (2011, p. 16), a Modelagem Matemática: “consiste na arte de transformar problemas da realidade em problemas matemáticos e resolvê-los interpretando suas soluções na linguagem do mundo real”.

## **2 METODOLOGIA**

Há constantes modificações na evolução do mundo envolvendo o homem e a natureza. O ensino não é diferente, ocorrendo uma série de mudanças nas quais dependem da velocidade de informações vivenciadas por crianças e jovens. Na química, o ensino tem como função contribuir no processo de como o aluno irá compreender o seu papel na sociedade, estando ativo para resolver problemas do cotidiano.

A busca de estratégias no ensino e aprendizagem como meio para facilitar a compreensão é fundamental. Com esse propósito, utilizamos nesse trabalho uma nova estratégia para o ensino da química, fazendo o uso da interdisciplinaridade ao estudar processos químicos para serem modelados e explorados matematicamente, permitindo a construção de modelos com ferramentas do Cálculo Diferencial e Integral e de Álgebra Linear.

Devido a necessidade de observação, análise e articulação de ideias empregando fundamentos matemáticos e formalizando modelos para moldar

situações problemas, surgiu a modelagem matemática como ferramenta alternativa de ensino-aprendizagem. Segundo Bassanezi (2002, p.19) é possível entender sobre o modelo objeto:

Modelo Objeto é a representação de um objeto ou fato concreto; suas características predominantes são a estabilidade e a homogeneidade das variáveis. Tal representação pode ser pictórica (um desenho, um esquema compartimental, um mapa, etc.), conceitual (fórmula matemática), ou simbólica. A representação por estes modelos é sempre parcial deixando escapar variações individuais e pormenores do fenômeno ou do objeto modelado. Um modelo epidemiológico (sistema de equações diferenciais) que considera o grupo de infectados como sendo homogêneo onde todos os seus elementos têm as mesmas propriedades é um exemplo de um modelo objeto. Um desenho para representar um alvéolo usado pelas abelhas é também um modelo deste tipo.

Atualmente, sabe-se que a modelagem matemática tem utilização em diversas ciências, contribuindo para o avanço no conhecimento da humanidade e buscando solucionar problemas do cotidiano, bem como experimentos químicos.

Diversos pesquisadores da área discutem sobre a modelagem para o ensino da matemática, dentre eles Bassanezi (2004), em que o objetivo da modelagem é transformar problemas reais em problemas matemáticos, isto é, um instrumento alternativo para o ensino e aprendizagem, na qual estuda uma determinada situação-problema, sem o uso explícito da matemática buscando um modelo matemático para solucioná-lo.

Mesmo sabendo das existências de diferentes perspectivas de modelagem, neste trabalho utilizamos da perspectiva de Bassanezi, por considerá-la adequada aos experimentos e aos conteúdos matemáticos envolvidos, para modelar dois experimentos de química: a análise da temperatura em função do tempo e a modelagem da vela, sendo possível observar neles aspectos do processo de aprendizagem e aplicar métodos matemáticos para a resolução de problemas que ali surgiram. Além disso fizemos um estudo sobre a COVID 19 com dados obtidos em janeiro de 2021 na cidade de Irati/Pr, na qual utilizou-se do modelo SIR representado por três grupos de indivíduos, sendo eles, Suscetíveis (S), Infectados (I) e Removidos (R), comum para modelar epidemias e pandemias. Podendo observar por meio dos cálculos matemáticos como funcionaria a transmissão do

vírus e fazendo previsões futuras da propagação da doença, incluindo o número de mortes e o pico da pandemia.

Na perspectiva trabalhada o modelo tem grande importância, pois é um elo que permite a passagem da situação real para o problema matemático, possibilitando o levantamento de hipóteses e reflexões sobre determinado fenômeno.

De acordo com Bassanezi (2004), o modelo matemático é um conjunto de símbolos e relações matemáticas que representam, de alguma forma, o objeto estudado.

Para Bassanezi (2002, p. 15), o principal meio para estimular o gosto pela matemática é a Matemática Aplicada, pois busca estímulos vindos do “mundo real”. Para o autor, a modelagem matemática, além de se aproximar da matemática aplicada, “é um processo dinâmico utilizado para obtenção e validação de modelos matemáticos. Sendo uma forma de abstração e generalização com a finalidade de previsão de tendências.” (BASSANEZI, 2002, p. 24)

Ainda na ideia, na matemática, as equações diferenciais podem ser abordadas de diversas maneiras, conforme o objetivo proposto. Em um caso mais específico, o trabalho teve o foco principal nas equações diferenciais como modelos formulados para descrever situações reais envolvendo processos químicos, preocupando-se com técnicas de resoluções sem abrir mão do processo da modelagem.

A modelagem para Bassanezi é uma sequência dinâmica para se obter modelos, podendo ser caracterizada por etapas que se complementam:

- a) Experimentação – obtenção de dados experimentais ou empíricos que ajudam na compreensão do problema, na modificação do modelo e na decisão de sua validade. É um processo essencialmente laboratorial e/ou estatístico;
- b) Abstração – Identificação do problema e seleção das variáveis essenciais da situação; formulação do problema real em linguagem “natural” e formulação das “leis empíricas” que serão testadas a partir dos dados experimentais;
- c) Resolução – o modelo matemático é montado quando se substitui a linguagem “natural” por uma linguagem matemática. O estudo do modelo depende de sua complexidade e pode ser um processo numérico. Quando os argumentos conhecidos não são eficientes, novos métodos podem ser criados, ou então o modelo deve ser modificado;
- d) Validação – Comparação entre a solução obtida via resolução do modelo matemático e os dados reais. É um processo de decisão de aceitação ou não do modelo inicial. O grau de aproximação desejado será o fator preponderante na decisão;
- e) Modificação – Caso o grau de aproximação entre os dados reais e a solução do modelo não seja aceito, deve-se modificar as variáveis ou a lei de formação e com isso o próprio modelo original é modificado e o processo se inicia novamente;

f) Aplicação – A modelagem eficiente permite fazer previsões, tomar decisões, explicar e entender; enfim, participar do mundo real com capacidade de influenciar em suas mudanças (BASSANEZI, 2002, p.27).

No entanto, para a modelagem dos experimentos químicos que realizamos, utilizamos de ferramentas matemáticas como as equações diferenciais ordinárias (EDO), em que as funções denominadas incógnita na equação dependem de uma única variável.

### **3 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS**

Algo que pode ser dito em relação de como surgiu ou a motivação mais especificamente do surgimento das equações diferenciais, está relacionado à mecânica. A movimentação dos planetas e o estudo sobre a oscilação do pêndulo era um dos grandes problemas da época devido a limitação por falta de ferramentas. Sendo assim, as equações diferenciais contribuíram para compreensão desses fenômenos naturais. Todos esses fenômenos anteriormente já tinham sido estudados por Johannes Kepler, Leonardo da Vinci, Galileu Galilei e Christiaan Huygens, porém a eles faltavam conhecimento matemático que fosse possível modelar os fenômenos, pois todos seus experimentos anteriores foram de cunho empírico, nos quais limitava uma maior evolução sobre os temas abordados anteriormente.

Quando houve o surgimento do cálculo por conta de um dos maiores ou talvez o maior matemático de todos os tempos, Isaac Newton, em conjunto ao G.W. Leibnitz, diversos problemas mecânicos puderam ser resolvidos por meio do cálculo. Por conta disso, inúmeros problemas puderam ser matematicamente modelados em forma de equações diferenciais. Desse modo, vários desses problemas foram elegantemente modelados e resolvidos por grandes matemáticos que possuíam extraordinária habilidade operacional. Segundo Kline (1972, p.468):

Os matemáticos procuraram usar o cálculo para resolver mais e mais problemas físicos e logo se encontraram obrigados a manipular uma nova classe de problemas. Eles fizeram muito mais do que tinham conscientemente procurado. Os problemas mais simples conduziram às quadraturas que poderiam ser avaliadas em termos de funções elementares. Algumas um tanto mais difíceis conduziram às quadraturas que não poderiam ser assim expressadas, como foi o caso para integrais elípticas. Ambos os tipos recaem ao alcance do cálculo. Entretanto, a solução do problema mais complicado exigiu técnicas especializadas; assim surgiu o assunto de equações diferenciais.

O estudo das Equações Diferenciais inicia-se com o estudo do Cálculo Diferencial e Integral, primeiramente, associado a problemas de mecânica e

geometria. O destaque nesta época está para as três leis de Newton e a lei da gravitação universal que possibilitaram obter equações diferenciais ordinárias. Através do conhecimento que obteve em exprimir funções em termos de séries infinitas ao longo dos seus estudos, Isaac Newton (1642 - 1727) conseguiu desenvolver um método de resolução utilizando dessas séries para solucionar uma equação do tipo  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ , em que  $f(x, y)$  é um polinômio em  $x$  e  $y$ .

O termo “equações diferenciais” refere-se a uma equação envolvendo uma função incógnita  $y(x)$ , sua(s) derivada (s) e a variável independente  $x$ . Como afirma Machado (1988, p. 153):

De maneira geral, uma equação diferencial é uma pergunta do tipo: “Qual a função cuja derivada satisfaz a seguinte relação?” Ou seja, uma equação diferencial é uma equação (no sentido de igualdade envolvendo uma incógnita) onde a incógnita é uma função, sendo que as informações disponíveis para a determinação da função desconhecida envolvem sua derivada.

Nesse trabalho serão utilizadas as equações que envolvem apenas uma variável independente. Uma equação diferencial ordinária (EDO) é definida como uma equação que envolve uma função e as suas derivadas em relação a uma variável independente, conforme o seguinte formato:

$$F(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n)}(x)) = 0$$

contendo uma função incógnita  $y = y(x)$  e suas derivadas ou suas diferenciais. Na qual,  $x$  é representado como uma variável independente e  $y^{(i)}(x)$ , com  $i$  entre 1 e  $n$ , como uma variável dependente.

A ordem de uma equação diferencial refere-se a maior ordem de derivada que aparece na equação, por exemplo:

$$\frac{dy}{dx} + 5x^3 y = 7 : \text{ordem } 1;$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 4x \frac{dy}{dx} - 5x^7 y = 8 : \text{ordem } 2.$$

Classificação quanto à homogeneidade:

Uma EDO é dita ser homogênea se o termo independente  $g(x)$  é igual a 0, e não homogênea caso contrário. Vejamos, por exemplo, que a EDO  $\frac{dy}{dx} + 7xy = 0$  é

homogênea, enquanto que a equação diferencial ordinária  $\frac{d^2y}{dx^2} + x^2 \frac{dy}{dx} - 5x^7y = 8e^x$  é não homogênea, pois neste caso note que o seu termo independente é dado pela função  $g(x) = 8e^x$ .

Equações lineares e não lineares:

Uma equação diferencial ordinária de ordem  $n$  é dita linear se pode ser escrita da forma:

$$f_n(x) \cdot \frac{d^n y}{dx^n} + f_{n-1}(x) \cdot \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + f_2(x) \cdot \frac{d^2 y}{dx^2} + f_1(x) \cdot \frac{dy}{dx} = g(x),$$

sendo  $f_i(x)$  e  $g(x)$  funções, caso contrário é dita não linear.

### 3.1 Equações Diferenciais Ordinárias de Primeira Ordem:

#### 3.1.1 Existência e unicidade;

Pensando na resolução de uma equação de primeira ordem  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  sujeita à condição inicial  $y(x_0) = y_0$ , na qual  $x_0$  é um número no intervalo  $[a, b]$  e  $y_0$  um número real arbitrário. Sendo assim, temos:  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  como um problema a resolver sujeito à uma condição inicial  $y(x_0) = y_0$  denominado problema de valor inicial.

##### 3.1.1.1 Teorema de existência e unicidade

**Teorema:** Seja  $R$  uma região retangular no plano  $xy$  definida por  $a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$ , que contém o ponto  $(x_0, y_0)$  em seu interior. Se  $f(x, y)$  e  $\partial f / \partial y$  são contínuas em  $R$ , então existe um intervalo  $[a, b]$  centrado em  $x_0$  e uma única função  $y(x)$  definida em  $[a, b]$  que satisfaz o problema de valor inicial:  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$  sujeita à condição inicial  $y(x_0) = y_0$  (ZILL E CULLEN, 2012, p. 40).

### 3.1.2 Algumas técnicas de solução:

#### 3.1.2.1 Equações Separáveis;

Considere uma equação diferencial ordinária (EDO) que pode ser escrita do seguinte formato:

$$h(y) \frac{dy}{dx} = f(x)$$

Seja:

$$g(y) = \int h(y) dy.$$



Então,  $\frac{dg}{dy} = h(y)$ .

Ao substituir o  $h(y)$  por  $\frac{dg}{dy}$  dada na primeira equação, obtém-se:

$$\frac{dg}{dy} \frac{dy}{dx} = f(x)$$

Seguindo a regra da cadeia:

$$\frac{d}{dx} g(y(x)) = \frac{dg}{dy} \frac{dy}{dx},$$

podendo ser escrita como:

$$\frac{d}{dx} g(y(x)) = f(x).$$

Integrando dos dois lados obtém-se que a solução geral é dada por:

$$g(y) = \int f(x) dx + C.$$

Pode-se também obter a solução integrando-se em relação a  $x$  em ambos os lados:

$$\int h(y) \frac{dy}{dx} dx = \int f(x) dx + C.$$

Sendo reescrita na forma:

$$\int h(y)y' dx = \int f(x) dx + C.$$

Substituindo  $y' dx = dy$  obtém-se:

$$\int h(y) dy = \int f(x) dx + C.$$

A fórmula obtida acima não significa que deve ser memorizada, e sim, mostrar apenas o caminho para a resolução de uma equação separável.

Para a resolução de equação diferencial será necessário o uso de integração por partes, frações parciais ou possivelmente uma substituição, essa escolha dependerá somente do problema apresentado.

### 3.1.2.2 Equações lineares - fator integrante.

O fator integrante relaciona-se a uma função usada para facilitar e resolver a equação ou encontrar um meio de melhorar visivelmente essa equação baseada na regra do produto para derivação.

No método dos fatores integrantes, procuramos uma função  $\mu(t)$  sendo diferente de 0 (fator integrante) tal que:

$$\mu(t) \frac{dy}{dt} + \mu(t)p(t)y = \frac{d[\mu(t)y]}{dt} = \mu(t) \frac{dy}{dt} + \frac{d\mu(t)}{dt} y.$$

Devemos ter para que isto ocorra a condição seguinte:

$$\frac{d\mu(t)}{dt} = \mu(t)p(t).$$

Em que  $\frac{1}{\mu(t)} \frac{d\mu(t)}{dt} = p(t)$ .

Admitindo que  $\mu(t) > 0$ , concluímos por meio da regra da cadeia que:

$$\frac{d[\ln(\mu(t))]}{dt} = p(t).$$

Pelo teorema fundamental do cálculo, temos

$$\ln(\mu(t)) = \int p(t)dt,$$

em que  $\mu(t) = \exp \left\{ \int p(t)dt \right\}$ .

Multiplicando ambos os lados de  $\frac{dy}{dt} + p(t)y = g(t)$  por  $\mu(t)$ , temos à seguinte

conclusão:  $\frac{d[\mu(t)y]}{dt} = \mu(t)g(t)$ .

Ao integrar em relação a  $t$  e depois dividir por  $\mu(t)$ , segue que a solução geral da EDO é:

$$y = \frac{1}{\mu(t)} \left[ \int \mu(t)g(t) dt + C \right].$$

Na qual  $C$  é constante.

#### 4 EXPERIMENTOS

A modelagem matemática nos remete a formulação de um modelo matemático capaz de descrever um fenômeno. Neste capítulo descrevemos os resultados da modelagem de experimentos que realizamos na área da química, tendo as equações diferenciais como ferramenta para a obtenção de modelos que nos permitam visualizar de forma ampla e completa o comportamento de cada situação.

**1** – O experimento consiste em analisar o tamanho da vela no decorrer tempo, com medições em intervalos de 4 minutos, com o objetivo de modelar o comportamento da altura da vela em função do tempo. Desse modo, consideramos que a temperatura medida no momento se manteria constante em 27°C para todo o processo do experimento.

Tabela 1 - Dados medidos durante a queima de uma vela retificada com 10 cm de altura.

Medição	Tempo (min)	Altura (cm)
1	0	10
2	4	9,9
3	8	9,5
4	12	9,4
5	16	9,0
6	20	8,9
7	24	8,6

Fonte: autores

Nesse caso da vela é possível observar que a diferença de altura é proporcional à diferença de tempo. Sendo assim, obtemos:

$$A_{K+1} - A_K = C (t_{K+1} - t_K);$$

$$\frac{A_{K+1} - A_K}{t_{K+1} - t_K} = C.$$

Onde k é a ordem da medição, t é o tempo, A é a altura em cada tempo e C é uma constante. Conforme os valores obtidos na medição das velas temos:

$$k = 1 \rightarrow \frac{9,9-10}{4-0} = \frac{-0,1}{4} = -0,025;$$

$$k = 2 \rightarrow \frac{9,5-9,9}{8-4} = \frac{-0,4}{4} = -0,1;$$

$$k = 3 \rightarrow \frac{9,4-9,5}{12-8} = \frac{-0,1}{4} = -0,025;$$

$$k = 4 \rightarrow \frac{9,0-9,4}{16-12} = \frac{-0,4}{4} = -0,1;$$

$$k = 5 \rightarrow \frac{8,9-9,0}{20-16} = \frac{-0,1}{4} = -0,025;$$

$$k = 6 \rightarrow \frac{8,6-8,9}{24-20} = \frac{-0,3}{4} = -0,075.$$

Para obter uma boa aproximação da constante C usaremos a média dos valores

$\frac{A_{K+1} - A_K}{t_{K+1} - t_K}$  obtidos em cada medição:

$$C \text{ média} = \frac{-0,025 - 0,1 - 0,025 - 0,1 - 0,025 - 0,075}{6},$$

$$C \text{ média} = -0,058333$$

no entanto:

$$\frac{A_{K+1} - A_K}{t_{K+1} - t_K} = -0,058333.$$

Observando essa situação na qual o  $\lim_{tk+1 \rightarrow tk}$ , temos:

$$\lim_{tk+1 \rightarrow tk} \frac{A_{K+1} - A_K}{t_{K+1} - t_K} = -0,058333.$$

$\frac{dA}{dt} = -0,058333$ , obtendo uma equação diferencial.

Temos a função:

$$dA = -0,058333 dt$$

Integrando os dois lados da igualdade:

$$\int dA = \int -0,058333 dt,$$

$$A(t) = -0,058333 t + D.$$

Aplicando em um ponto específico, obtemos o valor da constante D:

$$(8; 9,5) \rightarrow 9,5 = -0,058333 * 8 + D$$

$$9,5 = -0,46667 + D$$

$$9,5 + 0,46667 = D$$

$$9,96667 = D$$

$$A(t) = -0,058333 t + 9,96667.$$

Para a validação comparamos os valores medidos com os valores estimados pela função A (t):

Tabela 2 – Comparação dos dados medidos e estimados.

Tempo (min)	0	4	8	12	16	20	24
Altura medida (cm)	10	9,9	9,5	9,4	9,0	8,9	8,6
Altura estimada por A (t) (cm)	9,96667	9,73334	9,50001	9,26667	9,03334	8,80001	8,56668

Fonte: autores

Por meio da utilização dos cálculos realizados acima é possível determinar qual o tempo de duração da vela acesa:

$$0 = -0,058333 t + 9,96667$$

$$t = \frac{-9,96667}{-0,058333}$$

$$t = 170,9 \text{ minutos.}$$

Realizamos os cálculos para determinar o tempo de duração da vela por meio da equação obtida, porém não deixamos a vela acesa até o final para conferir o tempo.

## 2 - Análise da temperatura em função do tempo

O experimento realizado consiste em inserir um corpo de prova com temperatura  $T(0) = T_0$  em um ambiente com temperatura constante  $T_A$  conforme a mudança de tempo haverá troca de calor entre o corpo e o ambiente, possibilitando analisar o comportamento da temperatura T em função do tempo t.

Para realizar o experimento utilizamos a água e o óleo como corpos de prova, com temperatura inicial de  $T_0 = 70^\circ \text{C}$  para ambos. Foram realizadas algumas medições de temperatura, em diferentes tempos, conforme as tabelas 3 e 4 abaixo:

Tabela 3 - Temperaturas medidas do corpo de prova: água

Tempo (min)	Temperatura ( $^\circ\text{C}$ )
-------------	----------------------------------

0	70
2	65
4	57
6	51
8	46
10	44

Fonte: autores.

Tabela 4 - Temperaturas medidas do corpo de prova: óleo.

Tempo (min)	Temperatura (°C)
0	70
2	57
4	49
6	42
8	38
10	36

Fonte: autores.

Newton, em 1711, formulou a lei de resfriamento de Newton, contribuindo com as equações diferenciais:

A lei de resfriamento de Newton, igualmente aplicável ao aquecimento, determina a taxa de variação temporal da temperatura de um corpo é proporcional à diferença de temperatura entre o corpo e o meio circundante. Seja  $T$  a temperatura do corpo e  $T_m$  a temperatura do meio circundante. Então, a taxa de variação da temperatura do corpo em relação ao tempo é  $dT/dt$ , e a lei de resfriamento de Newton pode ser formulada como  $dT/dt = k(T - T_m)$ . Onde  $K$  é uma constante positiva de proporcionalidade.

No experimento realizado a temperatura ambiente foi mantida constante, sendo  $T_A = 27^\circ\text{C}$ . Sendo assim, obtemos o seguinte problema de valor inicial:

$$\frac{dT}{dt} = -k(T - T_A)$$

$$T(0) = T_0.$$

Substituindo os valores de  $T_A$  e  $T_0$ , temos:

$$\frac{dT}{dt} = -k(T - 27^\circ)$$

$$T(0) = 70^\circ.$$

A constante de proporcionalidade  $k$  é diferente para cada corpo de prova e depende da composição do mesmo. Note que a EDO obtida é separável, portanto, podemos reescrevê-la da forma:  $\frac{dT}{T-27^\circ} = -k dt$

Integrando em ambos os lados da equação temos que:

$$\int \frac{dT}{T-27^\circ} = \int -k dt$$

$$\int \frac{1}{T-27^\circ} dT = \int -k dt$$

$$\ln(T - 27^\circ) = -kt + C$$

$$T - 27^\circ = e^{-kt+C}$$

$$T(t) = e^{-kt+C} + 27.$$

Com base na condição inicial  $T(0) = 70^\circ$  podemos obter a constante  $C$ :

$$T(t) = e^{-kt+C} + 27$$

$$T(0) = 70^\circ.$$

Então:

$$T(0) = e^{-k \cdot 0 + C} + 27$$

$$70 - 27 = e^C$$

$$43 = e^C$$

$$C = \ln(43) = 3,76.$$

Para obtenção da constante  $k$  é necessário analisar cada corpo de prova, utilizando a temperatura obtida no experimento no tempo  $t$  positivo.

Para o corpo de prova água, sabendo que  $T(4) = 57^\circ$  temos que:

$$T(t) = e^{-kt+3,76} + 27$$

$$57 = e^{-k \cdot 4 + 3,76} + 27$$

$$57 - 27 = e^{-4k+3,76}$$

$$30 = e^{-4k+3,76}$$

$$\ln(30) = -4k + 3,76$$

$$3,4 = -4k + 3,76$$

$$3,4 - 3,76 = -4k$$

$$-0,36 = -4k$$

$$\frac{-0,36}{-4} = k$$

$$k = 0,09.$$

Obtendo, assim, a função  $T(t)$  que descreve o comportamento da temperatura da água em função do tempo:

$$T(t) = e^{-0,09t+3,76} + 27.$$

Apenas para validação, comparamos alguns valores medidos com os valores calculados pela função  $T(t)$  acima, os resultados são mostrados na tabela 5.

Tabela 5 - resultados das medições realizadas em função do tempo.

Tempo (min)	2	4	6	8	10
Temperaturas medidas ( $^\circ\text{C}$ )	65	57	51	46	44
Temperaturas estimadas por $T(t)$ ( $^\circ\text{C}$ )	62,87	56,96	52,02	47,90	44,46

Fonte: autores

Para o corpo de prova óleo, temos o mesmo problema de valor inicial. Sendo assim, o valor da constante  $C = 3,76$  é conhecido. Sabendo que  $T(4) = 49^\circ$  temos que:



$$T(t) = e^{-kt+3,76} + 27$$

$$49 = e^{-k \cdot 4 + 3,76} + 27$$

$$49 - 27 = e^{-4k+3,76}$$

$$22 = e^{-4k+3,76}$$

$$\ln(22) = -4k + 3,76$$

$$3,09 = -4k + 3,76$$

$$3,09 - 3,76 = -4k$$

$$-0,66 = -4k$$

$$\frac{-0,66}{-4} = k$$

$$k = 0,16.$$

Obtendo, assim, a seguinte função da temperatura  $T$  do óleo em função do tempo  $t$ :

$$T(t) = e^{-0,16t+3,76} + 27.$$

Os valores medidos e os valores calculados pela função  $T(t)$  acima são comparados na tabela 6.

Tabela 6 - resultados das medições realizadas em função do tempo.

Tempo (min)	2	4	6	8	10
Temperaturas medidas (°C)	57	49	42	38	36
Temperaturas estimadas por $T(t)$ (°C)	58,18	49,64	43,44	38,94	35,67

Fonte: autores

Note que a constante de proporcionalidade  $k$  regula a velocidade do decaimento, neste experimento podemos notar que a temperatura do óleo decai mais rápido que a temperatura da água.

### 3 - COVID-19 em Irati

A doença de COVID-19 (Coronavirus Disease 2019) é uma infecção respiratória provocada pelo Coronavírus da Síndrome Respiratória Aguda Grave 2 (SARS-CoV-2) (Schuchmann et al., 2020). A doença foi identificada em dezembro de 2019, depois de surto de pneumonia de causa desconhecida, envolvendo casos de pessoas que tinham em comum o Mercado Atacadista de Frutos do Mar de

Wuhan, e definida, até então, como uma epidemia (Sifuentes-Rodríguez & Palacios-Reyes, 2020).

O modelo epidemiológico SIR (Kermack e McKendrick, 1927) é um dos modelos mais utilizados para representação de doenças infecciosas, nesse caso a COVID 19. Através deste modelo são retirados os princípios básicos para a construção conceitual dos demais modelos.

O modelo SIR, como podemos observar, é representado pelas letras S, I e R, sendo representados por três grupos de indivíduos:

- Suscetíveis: pessoas que podem, em algum momento, ser infectadas;
- Infectados: pessoas que estão, no momento, infectadas;
- Removidos: pessoas que já não transmitem mais o vírus, apesar do nome, consideramos os curados somados com os óbitos.



Note que as pessoas Suscetíveis passam a ser infectadas proporcional tanto à quantidade de Suscetíveis quanto à quantidade de Infectados. Além disso, as pessoas infectadas passam a ser Removidas proporcional à quantidade de Infectados:



Com base nesses dados, é possível escrever o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -aSI; \\ \frac{dI}{dt} = aSI - bI; \\ \frac{dR}{dt} = bI; \\ S(t_0) = S_0, I(t_0) = I_0, R(t_0) = R_0. \end{cases}$$

## DADOS IRATI/PR

Neste modelo, consideramos:

$$S(t) + I(t) + R(t) = N,$$

em que o “N” é a população que se mantém constante, no caso de Irati  $N = 60.000$ .

Para essa modelagem, consideramos os dados do boletim epidemiológico do município de Irati:

<http://ecovid19.irati.pr.gov.br:8022/ecovid19/boletim/boletim.php>

Tomando como ponto inicial  $t_0$  o início de 2021 (neste caso  $t_0 = 04/01/2021$ , devido a disponibilidade de dados), nessas condições temos:

- $S_0 = 57.380$ ;
- $I_0 = 111$ ;
- $R_0 = 2.509$ .

## ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS

Os parâmetros  $a$  e  $b$  estão relacionados com a taxa e o período de transmissão, respectivamente, sendo:

$1/b$  é o período de transmissão, o qual usamos 10 dias, conforme estudos recentes apresentados sobre a COVID-19, sendo assim obtemos  $b = 0,1$ .

A taxa de transmissão é definida como  $T = a/b$  e representa a quantidade de pessoas infectadas por um paciente no período de transmissão. Para Irati, a partir dos dados do boletim epidemiológico, estimamos a taxa de transmissão média nesse período (início de 2021 até o momento) de 1,075, o que implica em  $a = 0,1075$ .

## FUNÇÃO DOS INFECTADOS $I(t)$

Da segunda EDO, temos que:

$$\frac{dI}{dt} = aSI - bI = (aS - b)I.$$

a qual possui solução:

$$I(t) = I_0 e^{(aS-b)t} = 111 e^{0,1075 S(t) - 0,1t}$$

sendo  $t$  a quantidade de dias após 04/01/2021. Note que para suprimir a propagação temos que buscar meios para que  $(0,1075 S(t) - 0,1)$  seja o menor possível, isso

ocorre baixando a taxa de transmissão ou reduzindo o conjunto de pessoas Suscetíveis.

### FUNÇÃO DE SUSCETÍVEIS $S(t)$

Dividindo a primeira EDO pela terceira, obtemos:

$$\frac{dS}{dR} = -\frac{a}{b} S$$

cuja solução é:

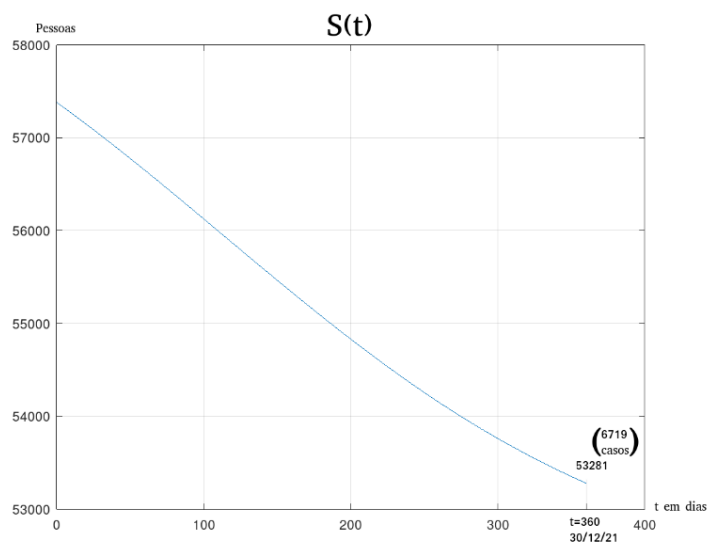
$$S(t) = S_0 e^{\left(-\frac{a}{b} R(t)\right)} = 57.380 e^{-1,075 R(t)}.$$

Note que as soluções obtidas até o momento estão relacionadas, sendo que  $S(t)$  foi obtida em função de  $R(t)$  e  $I(t)$  em função de  $S(t)$ .

Para obtermos uma solução numérica para o caso de Irati, utilizamos métodos numéricos para aproximar EDOs (Runge-Kutta), o qual foi implementado em linguagem R com o pacote “SIR” para os próximos 360 dias.

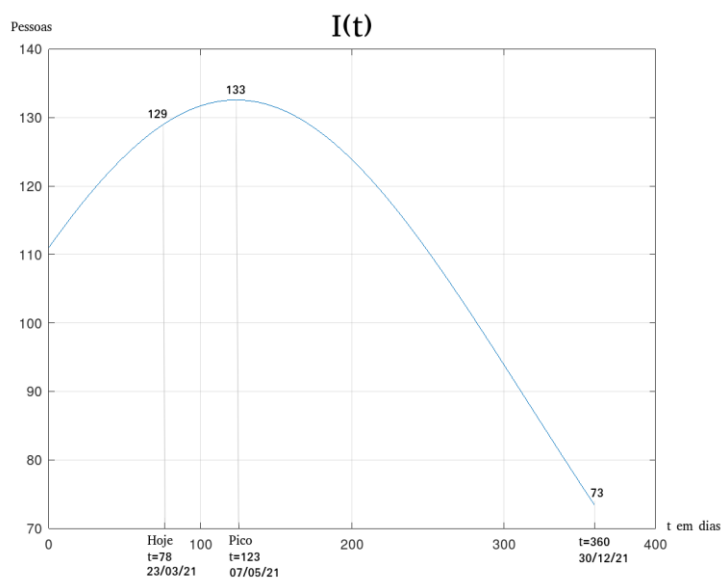
### Gráficos das funções $S(t)$ , $I(t)$ e $R(t)$

Gráfico 1 – Função de Suscetíveis.



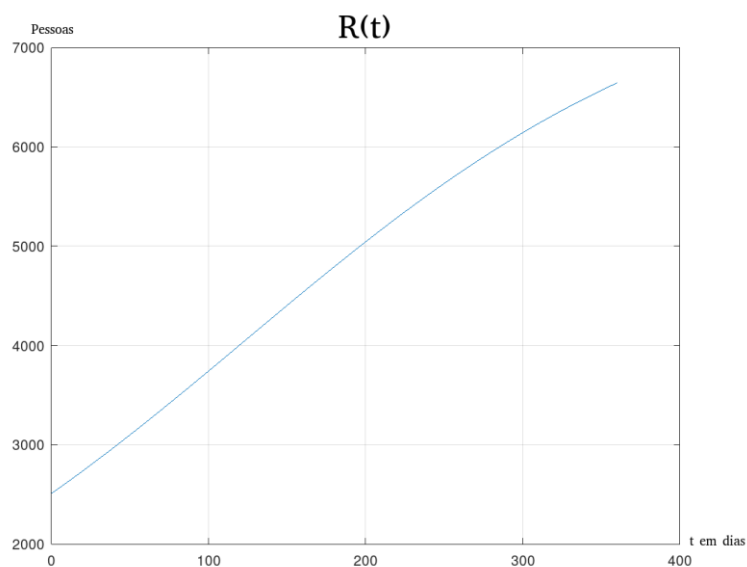
Fonte: Autores

Gráfico 2 – Função de Infectados.



Fonte: Autores

Gráfico 3 – Função de Removidos.



Fonte: Autores

ALGUMAS PREVISÕES IMPORTANTES:

O pico nessa projeção é atingido em  $t = 123$  (07/05/2021), com  $I(123) = 133$ , ou seja, o gráfico mostra uma alta de casos em maio de 2021.

Em dezembro de 2021 o número de casos por meio da projeção conforme os dados obtidos é de 6.719 casos no município, e se mantivesse a taxa de mortalidade (aproximadamente 1, 28% no município) deveria ter aproximadamente 87 óbitos, obviamente considerando o cenário desse início do ano de 2021, um colapso no sistema de saúde pode piorar esses dados.

Poderíamos melhorar essa projeção e entrar em uma descendente imediatamente reduzindo a taxa de transmissão (melhorando o isolamento).

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Dentre as ferramentas matemáticas de resolução de problemas reais, as equações diferenciais é uma alternativa para a modelagem de fenômenos naturais como os experimentos realizados nesse trabalho, na qual encontramos a taxa de variação com o tempo das grandezas diferenciais que caracterizavam o problema proposto. Desse modo, a modelagem de um conjunto de equações diferenciais possibilita um resultado aproximado do problema real, obtendo um resultado geral de diversos tipos de problemas.

A modelagem matemática no ensino da química é uma ferramenta que pode auxiliar na resolução de processos químicos. Nesse trabalho utilizamos de termos mais complexos para equacionar os problemas, porém tem possibilidade de adequar para os alunos do ensino médio, fazendo a interdisciplinaridade e aprimorando os conhecimentos tanto da química quanto da matemática.

A modelagem da COVID 19 realizada em 2021 nos permitiu fazer uma projeção, por meio de dados obtidos, de como possivelmente seria a propagação do vírus durante o período de 12 meses, podendo assim, prever a alta de casos. Essa experiência nos permitiu identificar a importância de aplicações reais em pandemias, principalmente por ser uma situação atual que ocorreu no momento em que estávamos realizando o trabalho de modelagem matemática, permitindo auxiliar em futuros casos iguais ou semelhantes e possibilitando a tomada de decisões mais assertivas.

Desse modo, o trabalho que realizamos permite unir as disciplinas como uma nova estratégia de ensino na química, com a utilização de ferramentas matemáticas que possam resolver problemas reais, possibilitando a análise de futuros problemas que podem surgir ao longo da carreira, além de servir como modelo para estudos mais aprofundados nessa área de ensino.

## 6 REFERÊNCIAS

BASSANEZI, R. C. **Ensino-Aprendizagem com Modelagem Matemática: uma nova estratégia**. São Paulo: Contexto, 2002.

BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com Modelagem Matemática: uma nova estratégia**. 3ª ed. São Paulo, Contexto, p. 16, 2011.

- KERMACK, W. E MCKENDRICK, A. **A contribution to the mathematical theory of epidemics**. Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences, A115:700–721, 1927.
- KLINE, M. **Mathematical Thought Ancient to Modern Times**. New York: Oxford University Press, 1972.
- MACHADO, N.J. **Matemática por assunto: noções de cálculo**. São Paulo: Scipione, 1988.
- SCHUCHMANN, A. Z., SCHNORRENBERGER, B. L., CHIQUETTI, M. E., GAIKI, R. S., RAIMANN, B. W., & MAEYAMA, M. A. **Isolamento social vertical X Isolamento social horizontal: os dilemas sanitários e sociais no enfrentamento da pandemia de COVID-19**. Brazilian Journal of Health Review, 3(2), 3556–3576, 2020. doi: <https://doi.org/10.34119/bjhrv3n2-185>
- SIFUENTES-RODRÍGUEZ, E., & PALACIOS-REYES, D. Covid-19: **The outbreak caused by a new coronavirus**. Bol Med Hosp Infant Mex, 77(2), 47–53, 2020. <https://doi.org/10.24875/BMHIM.20000039>
- SOTOMAYOR, J., **Lições de Equações Diferenciais Ordinárias**, Projeto Euclides, IMPA, 1979.
- ZILL, DENNIS G.; CULLEN, MICHAEL R. **Equações diferenciais**. vol.1. 3 ed. São Paulo: Pearson, 2012, p.40.