

Representação da solubilidade de sais inorgânicos em água por modelos matemáticos

Marilaine de Fraga Sant'Ana
Vitor Coronel Aquino
Denise Lenz

RESUMO

Neste trabalho apresentamos modelos matemáticos para descrever a solubilidade de sais inorgânicos em água pura a partir de dados obtidos experimentalmente. A solubilidade dos sais brometo de potássio, clorato de potássio e sulfato de sódio em água pura em função da temperatura é abordada. A partir desses dados, criamos modelos através de ajuste de curvas para representar os fenômenos observados.

Em um primeiro momento, introduzimos o conceito de solubilidade e apresentamos os dados obtidos experimentalmente. Logo após, abordamos modelos matemáticos e ajustes de curvas. Finalmente, desenvolvemos os modelos matemáticos para a solubilidade dos referidos sais.

Palavras-chave: modelo matemático, solubilidade, ajuste de curvas.

ABSTRACT

In this work, mathematical models obtained from experimental data are shown in order to describe the solubility of inorganic salts in pure water. The water solubility of salts like potassium bromide, potassium chlorate and sodium sulphate as function of the temperature were investigated. From these data, mathematical models were developed using curves adjustment.

First, the solubility concept is introduced and the experimental data are shown. After that, mathematical models and curves adjustment are discussed. Finally, mathematical models for the reported salts are developed.

Key words: mathematical models, solubility, curves adjustment.

1 Introdução

Este trabalho se originou da curiosidade de um professor de Matemática ao

ser indagado pelo seu filho adolescente sobre a solubilidade de sais. Este professor então buscou a interpretação desse fenômeno do ponto de vista matemático, o que

Marilaine de Fraga Sant'Ana é Doutora em Matemática (UNICAMP, 2000), Professora do Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática e dos Cursos de Matemática e Engenharia Elétrica da ULBRA, Professora do Curso de Matemática da FACOS (Faculdade Cenecista de Osório). E-mail: marilaine.fraga@ulbra.br

Vitor Coronel Aquino é Mestre em Matemática (UFRGS, 1995), Professor do Curso de Matemática da ULBRA. E-mail: aquino@mozart.ulbra.tche.br

Denise Lenz é Doutora em Engenharia (UFRGS/Universidade de Paris IV, 1999), Professora do Mestrado em Engenharia: Energia, Ambiente e Materiais e do Curso de Química da ULBRA. E-mail: denise.lenz@gmail.com

despertou curiosidade sobre o assunto, e compartilhou essa curiosidade com seus colegas. Reunimos então três professores, dois matemáticos e uma química, a fim de investigar o assunto. Decidimos por selecionar alguns sais e obter dados de solubilidade em função da temperatura destes a partir de experimentos.

Apesar da motivação inicial para a realização do trabalho ser particular, percebemos que a abordagem do assunto, a princípio exclusivamente químico, por um viés matemático, poderia originar uma interessante integração entre essas duas disciplinas e uma motivação para trabalhos futuros com o intuito de promover a interdisciplinaridade. Nesse sentido, nos apoiamos em Pires (2000) quando afirma que a abordagem interdisciplinar traz possibilidades de enriquecimento por meio de novos enfoques e perspectivas diferentes, buscando caminhos alternativos. Também, segundo Fazenda (2001), para que haja interdisciplinaridade é necessário troca, intercâmbio entre os saberes, em que cada um traz para o grupo seu conhecimento, interagindo com os demais.

O objetivo central deste trabalho é investigar a solubilidade de três sais inorgânicos em água pura, através da representação por modelos matemáticos. Para atingir este objetivo, foram realizados experimentos a fim de observar a saturação destas soluções com a variação da temperatura e posteriormente, a busca de modelos matemáticos através de ajuste de curvas.

Inicialmente apresentamos em linhas gerais o que é solubilidade, bem como os dados obtidos experimentalmente. Logo após, definimos e classificamos modelos matemáticos e apresentamos uma breve explanação sobre ajuste de curvas. Finalmente, desenvolvemos os modelos matemáticos para a solubilidade em função da temperatura do brometo de potássio (KBr), do clorato de potássio (KClO_3) e do sulfato de sódio (Na_2SO_4) em água pura.

2 Solubilidade

Segundo Brown, Le May Jr, Bursten e Burdge (2005), solução é uma mistura uniforme de átomos, íons ou moléculas de duas ou mais substâncias. Uma solução é composta de soluto e solvente. O solvente geralmente encontra-se em maior quantidade.

A saturação de uma solução ocorre quando, a uma determinada temperatura e sob agitação contínua, observa-se que em determinado momento o soluto não se dissolve mais. O excesso de soluto vai se depositando no fundo do recipiente e a solução é dita saturada com corpo de fundo. Assim, a quantidade de soluto necessária para formar uma solução saturada em certa quantidade de solvente é conhecida como solubilidade daquele soluto.

A solubilidade da maioria dos solutos sólidos na água aumenta à medida em que a temperatura da solução aumenta. Entretanto existem exceções à regra, como no caso do $\text{Ce}_2(\text{SO}_4)_3$. Também o Na_2SO_4 diminui sua solubilidade a partir de determinada temperatura.

Na Tabela 1, apresentamos valores de solubilidade, obtidos experimentalmente, para alguns sais inorgânicos em 100 ml de água pura.

Tabela1: Solubilidade de sais dados em gramas por 100 ml de água pura.

TEMPERATURA (°C)	KBr	KClO ₃	Na ₂ SO ₄
0	56	4	9
10	60,5	5	11
20	64,3	8,3	19
30	70	10	38
40	74,5	14,5	47
50	80	19	45
60	84,3	22	44
70	90,5	30,2	43
80	94,2	38,3	42,3
90	101	47,5	41,6
100	105,3	59	41

3 Modelos matemáticos

Bassanezi (2002) define como modelo matemático um conjunto de símbolos e relações matemáticas que representam de alguma forma um objeto estudado. O autor salienta a importância da utilização de uma linguagem concisa na formulação do modelo, expressando as idéias de maneira clara e sem ambigüidades. Já Bender (2000) define modelo matemático como uma construção matemática abstrata e simplificada relacionada a uma parte da realidade e criada para um propósito particular.

Segundo Bassanezi (2002), os modelos podem ser formulados de acordo com a natureza dos fenômenos analisados e classificados de acordo com o tipo de matemática utilizada. O autor apresenta as seguintes classificações:

- a) Modelo linear ou não linear: conforme as características de suas equações básicas;
- b) Modelo estático ou dinâmico: o modelo é dito estático se representa a forma ou descrição de um objeto e dinâmico se representa as variações de estágio de um fenômeno;
- c) Modelo educacional ou aplicativo: o primeiro caso ocorre quando o modelo é baseado em um número pequeno de suposições simples não representando, em geral, a realidade com o grau de fidelidade adequada para fazer previsões, entretanto sua grande utilidade é no fornecimento de idéias e aquisição de experiência; já o modelo aplicativo é aquele que envolve um grande número de interrelações de variáveis, fornecendo em geral sistemas de equações com numerosos parâmetros. Tais modelos são tratados, via de regra, por estratégias computacionais.

4 Regressão ou ajuste de curvas

Segundo Bassanezi (2002), o termo regressão surgiu no século XIX, utilizado por Sir Francis Galton que estudou a relação entre altura de pais e filhos, observando um decréscimo nos valores de altura encontrados para as duas gerações. Ele considerou esta tendência como sendo uma regressão genética e, por isso, chamou este fato de “regressão”.

Uma regressão ou ajuste de curvas é um recurso utilizado para representar a tendência de uma variável y em função de outra variável x . Tal curva de tendência pode ser útil em diversas situações, contribuindo inclusive para se fazer previsões quando aliada a outros conhecimentos, como é o caso do Método de Ford-Walford.

Existem diversos tipos de ajustes, dentre estes os mais conhecidos são: ajuste linear, ajuste polinomial, ajuste linear dos modelos hiperbólico, exponencial, geométrico, Michaelis-Menten e logístico. O software Microsoft Excel é bastante popular e pode ser um aliado na determinação destas curvas de regressão, embora seja necessária cautela na sua utilização pois, Rilho e Sant’Ana (2005) constataram que este software apresenta falhas na determinação de curvas de tendência decorrentes de ajustes polinomiais.

Um ajuste linear tem a forma $y(x) = ax + b$, onde os coeficientes a e b são calculados a partir do sistema gerado pelo Método dos Mínimos Quadrados. Um modelo exponencial tem a forma $y(x) = be^{ax}$, onde os coeficientes a e b são calculados aplicando-se a mudança de variável $z = \ln y$ e um ajuste linear. O modelo logístico parte do pressuposto de um valor assintótico conhecido e tem sua expressão dada por

$$y(x) = \frac{a}{be^{-\lambda x} + 1} \text{ em caso crescente e}$$

$y(x) = be^{-\lambda x} + a$, no caso decrescente, onde os coeficientes a, b e λ , e são calculados após a mudança de variável

$z = \ln\left(\frac{y/a}{1 - y/a}\right)$ e posterior ajuste linear, no

caso crescente e $z = \ln(y - y^*)$, no caso decrescente.

Uma questão importante para os ajustes é a correlação, de acordo com Milone (2004) uma medida do grau de ajustamento entre as variáveis. O coeficiente de correlação é calculado da seguinte forma:

$$r = \pm \sqrt{\frac{\sum (y_{est} - \bar{y})^2}{\sum (y - \bar{y})^2}}, \text{ sendo } y, \text{ os valo-}$$

res observados experimentalmente e \bar{y} sua média, e y_{est} os valores estimados pela regressão. Observamos que quanto mais próximo dos valores 1 ou -1 estiver o coeficiente de correlação, melhor será a regressão obtida e, quanto mais próximo de zero for este índice, pior é a regressão.

5 Modelos matemáticos para a solubilidade

Neste trabalho, apresentamos modelos que representam matematicamente a solubilidade dos sais brometo de potássio (KBr), clorato de potássio (KClO₃) e sulfato de sódio (Na₂SO₄) em água.

Os modelos apresentados se caracterizam, de acordo com Bassanezi (2002), como dinâmicos pois apresentam as variações da solubilidade dos referidos sais de acordo com a temperatura da solução. Dois dos modelos são não lineares, os que representam a solubilidade do clorato de potássio e do sulfato de sódio, já a solubilidade do brometo de potássio é representada por um modelo linear. Tais modelos também podem ser incluídos na categoria

de modelos educacionais pois são baseados em suposições simples, embora apresentem um grau de fidelidade satisfatório. Além disso são propícios ao desenvolvimento de projetos interdisciplinares, congregando Matemática e Química.

5.1 Solubilidade do brometo de potássio

Iniciamos com a investigação de um modelo para a solubilidade do brometo de potássio. Os dados de observação nos fornecem a tabela 2 de solubilidade por temperatura:

Tabela 2: Solubilidade de KBr dados em gramas por 100 ml de água pura.

TEMPERATURA (°C)	Solubilidade KBr
0	56
10	60,5
20	64,3
30	70
40	74,5
50	80
60	84,3
70	90,5
80	94,2
90	101
100	105,3

Observamos que a solubilidade parece variar linearmente com a temperatura, o que pode ser melhor visualizado representando estes dados por um gráfico, figura 1.

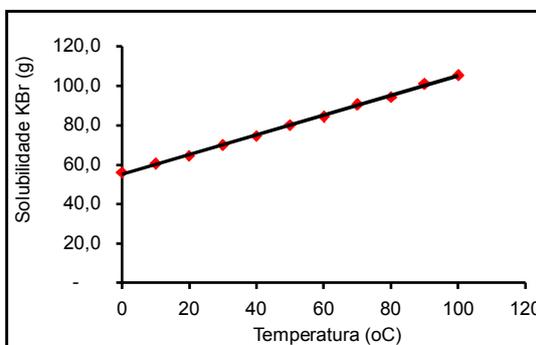


Figura 1: Representação gráfica da solubilidade de KBr.

Claramente a regressão linear é a mais indicada para esta situação. Através deste ajuste, obtemos a equação da reta $y = 0,4991x + 55,1$ para a representação desta solubilidade, com índice de correlação igual a 0,9992, o que indica um excelente resultado no ajuste.

5.2 Solubilidade do clorato de potássio

Passamos agora, à busca de um modelo que represente a solubilidade do clorato de potássio em 100 ml de água a partir dos dados experimentais representados na tabela 3.

Tabela 3: Solubilidade de $KClO_3$ dados em gramas por 100 ml de água pura.

Temperatura (°C)	Solubilidade $KClO_3$
0	4,0
10	5,0
20	8,3
30	10,0
40	14,5
50	19,0
60	22,0
70	30,2
80	38,3
90	47,5
100	59,0

Representamos os dados acima em um gráfico, figura 2.

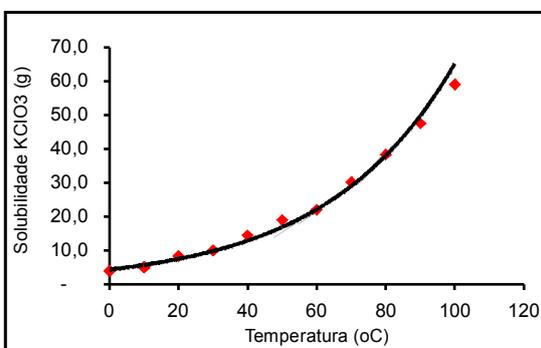


Figura 2: Gráfico representando a solubilidade de $KClO_3$.

Observamos que a curva acima tem o formato assemelhado a uma exponencial, o que sugere que tal ajuste seja o mais indicado para esta situação. De fato, realizando o ajuste linear do modelo exponencial obtemos a representação desta solubilidade através da função $y = 4,392e^{0,027x}$, com x representando a temperatura e y , a solubilidade. Ao calcularmos o índice de correlação deste ajuste, obtemos 0,9951, novamente bastante satisfatório.

5.3 Solubilidade do sulfato de sódio

Finalmente, consideramos o sulfato de sódio cujos dados experimentais estão representados na tabela 4.

Tabela 4: Solubilidade de Na_2SO_4 dados em gramas por 100 ml de água pura.

Temperatura (°C)	Solubilidade Na_2SO_4
0	9
10	11
20	19
30	38
40	47
50	45
60	44
70	43
80	42,3
90	41,6
100	41

Representamos graficamente aos dados acima, obtemos a figura 3.

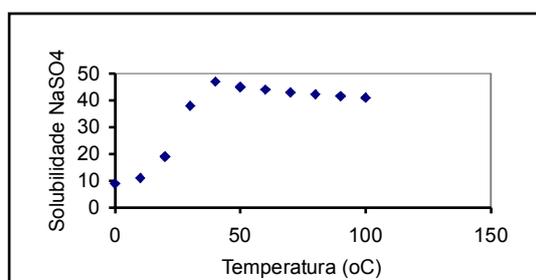


Figura 3: Gráfico da solubilidade de Na_2SO_4 .

Observando a representação gráfica destes dados, conforme a figura 3, é possível supor que a melhor forma de ajustar tais dados é dividindo em duas partes, obtendo um modelo logístico crescente para a temperatura até 40 °C e um modelo logístico decrescente para temperatura maior que 40 °C.

Fazemos então o ajuste linear do modelo logístico crescente, isto é,

$$y(x) = \frac{a}{be^{-\lambda x} + 1}, \text{ com as variáveis } x \text{ para}$$

a temperatura e y para a solubilidade, considerando que a inflexão ocorre em um ponto de solubilidade igual a 45,8 g, ou seja, $y^*/2 = 45,8$, assim, $y^* = 91,6$. Utilizamos os dados representados na tabela 5.

Tabela 5: Dados da solubilidade de Na_2SO_4 com temperatura até 30 °C.

Temperatura (°C)	Solubilidade Na_2SO_4
0	9
10	11
20	19
30	38

Considerando, de acordo com o modelo adotado, $a = y^* = 91,6$, fazemos a mudança de variável $z = \ln\left(\frac{y/a}{1 - y/a}\right)$, obtendo então uma variável auxiliar z e transformando $y(x) = \frac{a}{be^{-\lambda x} + 1}$ em uma equação de primeiro grau em x e z , $z = \lambda x - \ln b$. Anexamos os valores calculados para esta variável auxiliar nos dados experimentais, obtendo a tabela 6.

Tabela 6: Solubilidade de Na_2SO_4 com temperatura até 30 °C, anexando a variável auxiliar.

x	y	z
0	9	-2,16785103
10	11	-1,99160338
20	19	-1,34052594
30	38	-0,34396291

Através de um ajuste linear, obtemos que $z = 0,0612x - 2,3794$, isto é, $\lambda = 0,0612$ e $b = e^{2,3794} = 10,7984$, ou seja, a curva de solubilidade para temperatura menor que 40 °C é representada por

$$y = \frac{91,6}{10,7984e^{-0,0612x} + 1}. \text{ O índice de cor-}$$

relação deste ajuste é 0,9577, ou seja, um valor satisfatório.

Obtemos agora o modelo decrescente para temperatura a partir de 40 °C, utilizando os dados da tabela 7.

Tabela 7: Dados da solubilidade de Na_2SO_4 com temperatura de 40 °C até 90 °C.

Temperatura (°C)	Solubilidade Na_2SO_4
40	47
50	45
60	44
70	43
80	42,3
90	41,6

Neste caso, partimos da hipótese $y(x) = be^{-\lambda x} + a$, novamente com as variáveis x para a temperatura e y para a solubilidade, pressupondo a existência de um valor assintótico $y^* = 41$ e fazendo a mudança de variável $z = \ln(y - y^*)$. Assim, transformamos $y(x) = be^{-\lambda x} + a$ em $z = -\lambda x + \ln b$. Anexamos os valores calculados para esta variável auxiliar nos dados experimentais, obtendo a tabela 8.

Tabela 8: Solubilidade de Na_2SO_4 com temperatura de 30 °C a 90 °C, anexando a variável auxiliar.

x	y	z
40	47	1,791759469
50	45	1,386294364
60	44	1,098612289
70	43	0,693147181
80	42,3	0,262364265
90	41,6	-0,51082562

Através de um ajuste linear, obtemos que $z = -0,0437x + 3,6265$, isto é $\lambda = 0,0437$ e $b = e^{3,6265} = 37,5810$. Assim, $y = 41 + 37,5810e^{-0,0437x}$. O índice de correlação deste ajuste é igual a $-0,9862$, considerado satisfatório.

Desta forma, representamos a solubilidade do sulfato de sódio em função da temperatura como:

$$y(x) = \begin{cases} \frac{91,6}{10,7984e^{-0,0612x} + 1}, & 0 \leq x < 40 \\ 41 + 37,5810e^{-0,0437x}, & 40 \leq x \end{cases}$$

Representamos esta função no gráfico mostrado na figura 4.

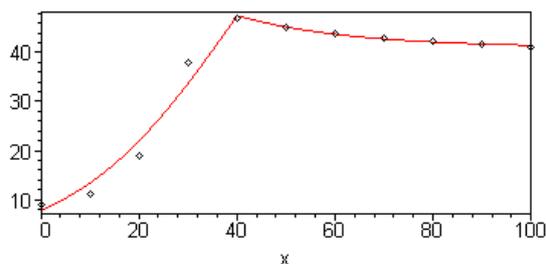


Figura 4: Gráfico da curva de solubilidade de Na_2SO_4 obtida por ajuste.

Para finalizar, representamos as curvas de solubilidade dos três sais em um mesmo sistema de eixos, a fim de enfatizar a diferença de comportamento destas, como mostra a figura 5.

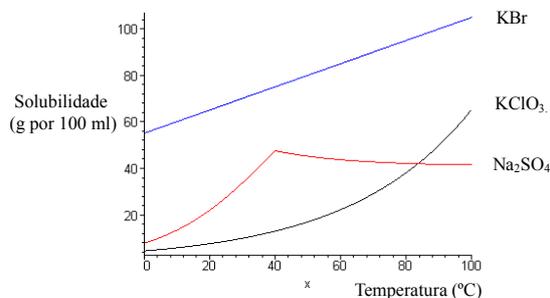


Figura 5: Gráfico das curvas de solubilidade

6 Considerações finais

Modelos educacionais como os apresentados neste trabalho podem ser empregados tanto em Matemática quanto Química, ou ainda podem ser construídos com os alunos em sala de aula, a fim de favorecer a comunicação entre estas duas disciplinas. Com certeza, o aluno que tenha um interesse pela área de Química se motivará pelo estudo da Matemática a partir de fenômenos químicos e vice-versa. Além disso a matemática é fundamental no entendimento dos modelos físicos e químicos, bem como na determinação e delineamento destes modelos.

Ainda convém observar que o raciocínio empregado para a construção destes modelos se presta para outras situações de origens diversas, podendo ser empregado em situações de cooperação com outras disciplinas.

Referências

- BASSANEZI, Rodney Carlos. *Ensino-Aprendizagem com Modelagem Matemática*. São Paulo, Contexto, 2002.
- BENDER, Edward A. *Na Introduction to Mathematical Modeling*. Mineola, New York: Dover, 2000.
- BROWN, Theodore L., LE MAY Jr, H. Eugene, BURSTEN, Bruce E, BURDGE, Julia R., *Química, a Ciência Central*, Pearson-Prentice Hall, 9ª Edição, São Paulo, 2005.
- FAZENDA, Ivani. *Prática Interdisciplinares na Escola*. 8 ed. São Paulo: Cortez, 2001.
- MILONE, Giuseppe. *Estatística Geral e Aplicada*. São Paulo, Thomson, 2004.
- PIRES, Célia Maria Carolino. *Currículos de Matemática: da organização linear à idéia de rede*. São Paulo: FTD, 2000.
- RILHO, Bênia, SANT'ANA, Marilaine de Fraga. *Uma experiência em Ensino-Aprendizagem: Modelos de Fundos de Investimento e as Derivadas*. Canoas, ULBRA, 2005.