



USANDO O CÁLCULO NUMÉRICO PARA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS EM QUÍMICA

Jackson Kenede Jorge da Silva¹ e José Almeida da Silva Júnior²

1- Instituto Federal do Sertão Pernambucano - E-mail para contato: kennidylopes@hotmail.com; 2- Instituto Federal do Sertão Pernambucano - E-mail para contato: jose.almeida@ifsertao-pe.edu.br

RESUMO

Introdução: O Cálculo numérico antecede às máquinas de calcular e a invenção do computador. Registros históricos indicam que, há mais de 2000 anos, os métodos numéricos já eram utilizados na resolução de problemáticas cotidianas. Entretanto, por se apresentarem como soluções de aplicação prática, não despertava o interesse dos matemáticos da época, e por diversos séculos, foram encaradas como soluções contestáveis. **Objetivo:** Não obstante, áreas como Astronomia, Física e Engenharia retratavam problemas que tinha como requisito principal soluções aproximadas, como pode ser evidenciado nas contribuições científicas de alguns matemáticos como, por exemplo, Euler, Lagrange, Jacobi, Fourier, entre outros. Muitos dos métodos propostos são utilizados até o presente momento, em especial, no cálculo de áreas, raízes de polinômios e na resolução de equações diferenciais. **Materiais e Métodos:** Na Química, a análise numérica é, comumente, utilizada no estudo da estequiometria de reações químicas, visando o balanceamento das equações químicas, nas curvas de titulações de ácidos e bases e na integralização numérica de leis de velocidade, cujo método empregado tem por finalidade determinar a concentração de reagentes em função do tempo. Dentre os métodos mais empregados, destaca-se o método de Newton-Raphson (N-R), em referência aos idealizadores, Isaac Newton e Joseph Raphson, cuja proposta era direcionada na estimação das raízes de uma função, por meio da derivada. **Resultados:** Diante disso, esta pesquisa propôs analisar a aplicação do método de N-R na resolução de problemas de Físico-Química, envolvendo a determinação do volume molar de um gás de Van der Waals, o qual admite que a contribuição das forças intermoleculares no estudo da Teoria Cinética dos Gases. Para tal, foi realizado um estudo teórico da teoria dos gases e suas limitações. **Considerações Finais:** Posteriormente, a equação de Van der Waals foi analisada e evidenciou-se que a solução do volume molar não era trivial, requerendo um método matemática para a sua resolução. Diante disso, optou-se por utilizar o método N-R, considerando que o volume molar corresponde à raiz de um polinômio de terceiro grau. A aplicação deste permitiu compreender que a análise do mundo real, apresenta uma séria complexidades, impossibilitando a obtenção de soluções analíticas.

Palavras-chave: Newton-Raphson; Van der Waals; Análise Numérica;

AGRADECIMENTOS: Ao IF Sertão Pernambucano pelo fomento com a bolsa PIBIC.

Modalidade: PIBIC/IF Sertão - PE
Campus: Floresta