

*Encontro*  
**Computadores no Ensino  
da Física e da Química**

---

**Manual do Encontro**  
e  
**Livro de Resumos**

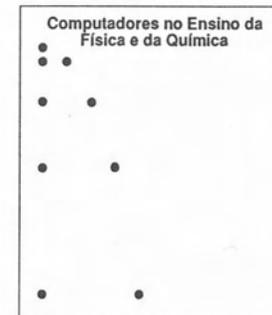
---

**22, 23 e 24 de Fevereiro de 1990**  
**Universidade de Coimbra**



*Organização de*  
Sociedade Portuguesa de Química  
Sociedade Portuguesa de Física  
Projecto MINERVA

Esta publicação é patrocinada pela Didáctica Editora



*Encontro*  
**Computadores no Ensino  
da Física e da Química**

---

**Manual do Encontro**  
e  
**Livro de Resumos**

---

**22, 23 e 24 de Fevereiro de 1990**  
**Universidade de Coimbra**



*Organização de*  
**Sociedade Portuguesa de Química**  
**Sociedade Portuguesa de Física**  
**Projecto MINERVA**

Esta publicação é patrocinada pela Didáctica Editora

edição	SOCIEDADE PORTUGUESA DE QUÍMICA SOCIEDADE PORTUGUESA DE FÍSICA PROJECTO MINERVA
tiragem	450 exemplares - Fevereiro de 1990
patrocínio de edição	DIDÁCTICA EDITORA
composição	PROJECTO MINERVA Universidade Nova de Lisboa
montagem	GABINETE TECNICO DA PLÁTANO EDITORA
impressão	PERES · ARTES GRÁFICAS Venda Nova - Amadora Dep. Legal N.º 30454/90

## Índice

---

### Manual do Encontro

---

Objectivos do Encontro	13
O que é o Projecto MINERVA. Responsáveis pelos vários pólos	15
Informações para os participantes	
Apoio aos participantes	19
Locais das actividades	20
Acomodação	20
Acidentes e emergências	20
Refeições e bares	20
Telefones	21
Lugares de interesse em Coimbra	21
Lazer e tempos livres	22
Planta da zona da Universidade	23
Lista de participantes (por ordem alfabética) e colocação nos <i>workshops</i>	25
Dados sobre os participantes	33
<u>Síntese do programa do Encontro</u>	34
<u>Programa do Encontro</u>	35
Regulamento do concurso de software para jovens	40
Comunicações	41

---

### Livro de Resumos

---

Resumos das conferências plenárias	49
Resumos dos <i>workshops</i>	61
Resumos das comunicações	81
Resumos das demonstrações	179

---

**Sociedade Portuguesa de Química**  
Av. da República, 37, 4º, 1000 LISBOA

**Sociedade Portuguesa de Física**  
Av. da República, 37, 4º, 1000 LISBOA

**Coordenação Nacional do Projecto MINERVA**  
Gabinete de Estudos e Planeamento do Ministério da Educação  
Av. Miguel Bombarda, 20, 1000 LISBOA

#### Comissão Científica do Encontro

Prof. Doutor António Dias de Figueiredo, *Universidade de Coimbra*  
Prof. Doutor António Ferreira Gomes, *Universidade do Porto*  
Prof. Doutor António Ferrer Correia, *Universidade de Aveiro*  
Prof. Doutor António Melo, *Universidade de Lisboa*  
Prof. Doutor António Varandas, *Universidade de Coimbra*  
Prof. Doutor Benedito Costa Cabral, *Universidade de Lisboa*  
Prof. Doutor Cândido Marciano da Silva, *Universidade Nova de Lisboa*  
Prof. Doutor Cuiça Sequeira, *Universidade do Minho*  
Prof. Doutor José J. Teixeira Dias, *Universidade de Coimbra*  
Prof. Doutor Manuel Barros, *Universidade do Porto*  
Prof. Doutor Nuno Ayres de Campos, *Universidade de Coimbra*  
Profª Doutora Teresa Mendes, *Universidade de Coimbra*

#### Comissão Organizadora do Encontro

Presidente: Prof. Doutor Victor Gil, *Universidade de Coimbra*  
Prof. Doutor António Moreira Gonçalves, *Universidade de Lisboa*  
Prof. Doutor Carlos Fiolhais, *Universidade de Coimbra*  
Prof. Doutor Duarte Costa Pereira, *Universidade do Porto*  
Prof. Doutor Fernando Fernandes, *Universidade de Lisboa*  
Dr. Vitor Duarte Teodoro, *Universidade Nova de Lisboa*

#### O Encontro é promovido por:

- Sociedade Portuguesa de Química
- Sociedade Portuguesa de Física
- Projecto MINERVA

#### Apoiaram a realização do Encontro:

- Reitoria da Universidade de Coimbra
- Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra
- Junta Nacional de Investigação Científica
- Instituto Nacional de Investigação Científica
- Ministério da Educação (Secretaria de Estado do Ensino Superior)
- Fundação Calouste Gulbenkian

#### Patrocínios comerciais

- Digital Equipment Portuguesa
- Unisys
- Banco Comercial Português
- Didáctica Editora
- Apple Center "Soluções de Futuro"

**Colaborações**

(por ordem alfabética)

- Câmara Municipal de Coimbra
- Centro de Física de Radiação e dos Materiais (INIC) da Universidade de Coimbra
- Centro de Física Teórica (INIC) da Universidade de Coimbra
- Centro de Informática da Universidade de Coimbra
- Centro de Matemática da Universidade de Coimbra
- Consiste, Coimbra
- Delegação Regional do Centro da Sociedade Portuguesa de Física
- Delegação Regional do Centro da Sociedade Portuguesa de Química
- Departamento de Física da Universidade de Coimbra
- Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra
- Departamento de Química da Universidade de Coimbra
- Faculdade de Farmácia da Universidade de Coimbra
- Grupo "Computação no Ensino da Matemática" e boletim "Nonius", Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra.
- Interlog s.a.
- Intervisa, Coimbra
- Laboratório de Instrumentação e Partículas, Coimbra
- Livraria 115, Coimbra
- Livraria Escolar Editora, Lisboa
- Pólo do Projecto MINERVA da Universidade de Coimbra
- Pólo do Projecto MINERVA da Universidade Nova de Lisboa
- Publicações Gradiva, Lisboa
- Secção Autónoma de Engenharia Civil da Universidade de Coimbra
- Seprin, Coimbra
- Softrol, Lisboa
- Texto Editora, Lisboa

**Agradecimentos**

Às entidades que apoiaram financeiramente esta iniciativa, às empresas que lhe deram o seu patrocínio comercial e a todos aqueles que de algum modo colaboraram na sua organização são devidos os melhores agradecimentos.

Agradecimentos especiais são devidos aos conferencistas convidados, aos orientadores de "workshops", aos autores de comunicações e aos apresentadores de demonstrações.

**Sobre a Universidade de Coimbra**

[Este Encontro realiza-se na Universidade de Coimbra no ano em que esta comemora os sete séculos da sua fundação].

A Universidade que hoje existe em Coimbra foi fundada, ou ratificada, em 1290 pelo rei D. Dinis, começando a funcionar em Lisboa. É de 1 de Março desse ano o diploma régio que anuncia a criação desta primeira escola universitária portuguesa, que é, por outro lado, uma das mais antigas da Península Ibérica. A confirmação papal é ainda de 1290, de 9 de Agosto, sendo Sumo Pontífice Nicolau IV. Segundo essa bula, poderiam ser ensinadas todas as faculdades «lícitas», com excepção da Teologia. As primeiras a constituírem-se foram, pois, as faculdades de Artes, de Leis, de Cânones e de Medicina.

A fundação do «Estudo Geral» resulta de um condicionalismo específico do país nos finais do século XIII. As novas tarefas administrativas do Poder Político e da Igreja, bem como a acção pastoral desta, requeriam uma formação adequada, cada vez mais exigente. Essa formação não era, porém, compatível com a frequência de escolas distantes (Paris, Bolonha e outras), nem convinha que se fizesse na vizinha Salamanca, dado que Portugal lutava ainda pela definição e estabilização da sua identidade nacional. A criação da Universidade em Lisboa deu, assim, à burguesia e ao clero a possibilidade de obterem de maneira mais adequada a preparação indispensável ao desempenho das suas funções. Constituída no âmbito da consolidação política de Portugal, contribuiu, nomeadamente, para a formação do importante grupo dos «letrados», que tanta influência teve nesse processo.

Mas a Universidade não se manteve por muito tempo em Lisboa. Em 1308 transfere-se para Coimbra, cidade já com velhas tradições escolares, pois aí funcionava desde há muito a brilhante escola do mosteiro de Santa Cruz. Vai instalar-se então no lugar designado por «estudos velhos», que ficava sensivelmente onde se encontra agora a Biblioteca Geral. Só então, por carta régia de 1309, a Universidade passou a gozar do estatuto de verdadeira corporação, com autonomia e privilégios especiais. Todavia, embora mantendo sempre a sua autonomia, foi perdendo alguns dos seus privilégios e, à medida que a centralização do poder ia avançando, o Estado ia interferindo nela cada vez mais.

O «Estudo Geral» não devia, porém, permanecer em Coimbra por muito tempo. Em 1338, no reinado de D. Afonso IV, transferiu-se outra vez para Lisboa. Mas logo em 1354 voltou de novo para Coimbra, instalando-se desta vez na parte baixa da cidade por onde o burgo se começava a estender. Em 1377, no reinado de D. Fernando, muda-se mais uma vez para Lisboa, onde agora vai permanecer por mais de um século e meio. Deve andar sensivelmente por esta altura — à roda de 1380 — a autorização para a formação da Faculdade de Teologia.

Durante os largos anos em que se manteve em Lisboa, a Universidade não alterou essencialmente a sua estrutura escolar, interessando-se particularmente pela Teologia, pelo Direito Canónico e pelo Direito Civil e só muito superficialmente se sentindo nela os resultados do progresso científico, para o qual contribuíram os Descobrimientos em que Portugal teve um papel importante, e do desenvolvimento humanístico do Renascimento. Há, no entanto, que destacar a acção desempenhada pelo Infante D. Henrique (1394-1460), enquanto «protector» da Universidade, e a reforma operada em 1503, quando reinava D. Manuel, ambas no sentido de uma certa actualização do seu ensino.

Em 1537, no reinado de D. João III, dá-se a transferência definitiva para Coimbra e para o velho Paço da Alcáçova, acompanhada da reforma dos estudos e do ingresso de novos docentes, não só portugueses como estrangeiros. Data também desta altura a fundação de uma rede de colégios, muitos deles ligados às ordens religiosas, que tinham funções de pensionato, assistência e ensino, dos quais se encontram ainda alguns vestígios arquitectónicos na «Alta» e na Rua da Sofia. O mais importante destes colégios — com uma estrutura diferente de todos os outros — é o Colégio das Artes, que começou a funcionar em princípios de 1548. Em termos de orgânica pedagógica, ele significava um centro de ensino preparatório para a entrada nas faculdades, com funcionamento independente da Universidade, embora a ela acabasse por se ligar; e significava também que Portugal se colocava ao lado de outros países da Europa no campo do ensino das humanidades, pois o Colégio das Artes, delineado segundo os princípios do Humanismo Cristão, adquiriu algum relevo. André de Gouveia, que orientou colégios em Paris e Bordéus e que Montaigne haveria de elogiar, foi quem primeiro o dirigiu e nele leccionaram então mestres ilustres.

Mas foi efêmero o sentido renovador que a Universidade e o Colégio das Artes chegaram a alcançar. A Contra-Reforma, sentida em Portugal com particular ressonância, acabou por determinar uma viragem em direcção à defesa dos valores considerados «ortodoxos», atacando assim as tentativas de inovação. Desta forma, após ainda um momento brilhante no âmbito dos estudos teológico-filosóficos de sentido tomista, assinalado pela formação de um escol conhecido pelo nome de «conimbricenses» e, depois, durante o domínio filipino, pelo magistério de alguns espanhóis famosos, entre os quais se destaca o nome de Francisco Suárez, que aqui publicou alguns dos seus escritos mais notáveis, a Universidade de Coimbra, esgotadas as potencialidades escolásticas, vai entrar numa longa crise cultural.

Só no século XVIII, no reinado de D. José, é que se dá nova reforma profunda da Universidade. Certos sectores mais cultos da burguesia, que ia adquirindo consciência da sua importância, e da aristocracia mais evoluída, iam contactando com os novos métodos e as novas matérias científicas. E esse conhecimento era mais vivo nos «estrangeirados», portugueses que, por virtude das suas viagens, contactaram directamente com a cultura europeia. Eles não podiam deixar de sentir o atraso do nosso ensino universitário, como se pode provar através das reflexões e críticas de Luís António Verney ou António Ribeiro Sanches. Mas, se no tempo de D. João V (1707-1750) — a quem se deve a fundação da primitiva Biblioteca da Universidade — já se sentia a necessidade de reformas, também é verdade que elas só poderiam ser feitas por uma elite de poder, representante dos estratos sociais culturalmente mais evoluídos, que se impusesse à reacção conservadora e que fosse capaz de controlar uma instituição com a força da Universidade. Essa situação surgiu, pois, no tempo de D. José — corporiza-a o ministério do Marquês de Pombal.

A reforma do ensino começou pelos «estudos menores» para os quais foi criado um corpo de «professores régios», em substituição dos mestres predominantemente eclesiásticos e em muitos casos jesuítas (expulsos do país em 1759). Mais tarde passou-se à reforma do «Estudo Geral» de Coimbra. Os novos Estatutos, corroborados pelo rei em 28 de Agosto de 1772 e elaborados com base no parecer da Junta de Providência Literária, que havia sido nomeada para estudar a situação da Universidade e propor soluções de reforma, foram entregues solenemente em Coimbra pelo próprio Marquês em 29 de Setembro. Mas só as vontades inabaláveis de Pombal, nomeado «Visitador» da Universidade, e do Reitor-Reformador, D. Francisco de Lemos, puderam superar as dificuldades que surgiram e, assim, pôr em prática, e não totalmente, os Estatutos.

A reforma pombalina manifestava sobretudo interesse pelas ciências da natureza e pelas ciências de rigor, que tão afastadas se encontravam do ensino universitário, embora incidisse também sobre as faculdades jurídicas e de Teologia. Assim, salientou-se a reforma da Faculdade de Medicina, que procurou seguir as sugestões feitas por Ribeiro Sanches sobre a necessidade de uma investigação experimental, e a criação de duas novas faculdades, a de Matemática e a de Filosofia. Esta última concedia um lugar particular (que depois se tornou exclusivo) à Filosofia Natural.

Com o reinado de D. Maria I não se destruiu a reforma de 1772, mas houve, ao princípio, pelo menos uma certa reacção contra os seus mentores. Além disso, não se tomaram medidas eficazes de molde a provocar a revivificação do espírito da reforma do Marquês, adaptando-a ao renovado condicionamento cultural.

No entanto, a Rainha e D. João VI, que lhe sucedeu como regente e depois como rei, procediam à criação, em Lisboa e no Porto, de novas escolas «médio-superiores» à margem da Universidade, na continuação de uma política de ensino já iniciada com o Marquês de Pombal e que será, de resto, continuada com o liberalismo, ao mesmo tempo que a única instituição universitária existente no país, apesar de não se renovar estruturalmente, ia ganhando força. Inclusivamente coube-lhe, a partir de 1794, através da Directoria Geral dos Estudos e Escolas do Reino, então criada, a incumbência de fiscalizar a instrução pública. Esse reforço de poder veio mesmo a dificultar a introdução de novas reformas que se lhe procuraram inocular, após o advento do liberalismo, a partir dos órgãos centrais do Estado.

Assim, pode dizer-se que a Universidade, onde obviamente se fizeram sentir os conflitos que atravessaram o País, manteve durante o período liberal a sua estrutura pombalina e quaisquer projectos de reforma profunda não passaram por isso da intenção. Das poucas alterações que sofreu destaque-se, todavia, pelo seu significado, a fusão das Faculdades de Leis e de Cânones na Faculdade de Direito, levada a efeito, em 1837, pelo governo setembrista de Passos Manuel. Porém, se institucionalmente a

Universidade não sofreu modificações essenciais — o Estado preferiu, como se disse, criar à sua margem novas escolas, apontadas para outras concepções pedagógicas, técnicas e científicas (Escolas Politécnicas, Escolas Médico-Cirúrgicas, Curso Superior de Letras, etc.) — também é certo que foi teatro das grandes polémicas político-culturais do tempo.

No decorrer dos últimos anos do século XIX e dos primeiros do século XX, ia crescendo a consciência dos ideais republicanos e da necessidade de reestruturar a Universidade e o ensino em geral. Para tal apontavam mesmo alguns mestres, fazendo críticas ao ensino vigente e acentuando a necessidade da sua reforma segundo novos métodos. Foi isso que se procurou levar a efeito após a proclamação da República em Outubro de 1910 e, assim, legislação diversa foi surgindo com o objectivo de reestruturar o ensino. Nesta situação a Universidade de Coimbra, com a criação das Universidades de Lisboa e do Porto, deixou de ser a única do país, e certos privilégios tão contestados que de certa forma sobreviviam, como o foro académico, foram abolidos. Quanto à sua estrutura escolar, para além das já existentes Faculdades de Direito e Medicina, e da anexa Escola de Farmácia, foi criada a Faculdade de Letras, que herdou as instalações da extinta Faculdade de Teologia, ao passo que as Faculdades de Filosofia e de Matemática eram convertidas na Faculdade de Ciências, sendo ainda instituída a Escola Normal Superior, anexa às Faculdades de Letras e de Ciências, que procurava dar aos futuros professores uma formação pedagógico-didáctica.

À medida que a República se ia desmoronando, iam morrendo os sonhos de revolução cultural e em breve o regime democrático fundado em 1910 dava lugar à ditadura, que surgiu após o movimento de 28 de Maio de 1926, e depois ao «Estado Novo». No Governo de Salazar, que fora catedrático em Coimbra, procurou-se criar condições para transformar, até certo ponto, a Universidade num aparelho do regime. Mas não era fácil que tal se verificasse, devido às dificuldades criadas por uma instituição ciosa da sua autonomia. Por outro lado, foram surgindo nos meios académicos, designadamente estudantes, focos antigovernamentais. A Associação Académica de Coimbra, antiga instituição escolar fundada em 1887 e que possuía uma orgânica democrática, foi um dos principais meios de difusão de tais ideias, e daí a repressão que sofreu. Os movimentos académicos de 1962 e 1969 — este já durante o governo de Marcello Caetano — são símbolos da luta dos estudantes contra o regime.

Outro aspecto que interessa destacar durante o governo salazarista é a alteração arquitectónica da cidade universitária, que terá sido, ao nível das obras públicas, uma das suas medidas mais discutíveis. Foi destruída grande parte da «alta» coimbrã com as suas antigas ruas e edifícios de valor histórico e artístico, entre os quais se destacavam vários colégios universitários, para aí se traçarem novas artérias e se erguerem novos prédios de gosto duvidoso e alguns até sem funcionalidade. Surgiram, desta forma, as actuais instalações da Faculdade de Letras, da Biblioteca Geral e Arquivo, da Faculdade de Medicina e da Faculdade de Ciências.

Com o 25 de Abril de 1974 inicia-se um novo período da vida portuguesa e, portanto, também da Universidade, que tem sido alvo de várias reformas que acompanharam as fases da nova dinâmica política e pedagógico-cultural e as contradições do processo histórico português dos últimos anos. Hoje a Universidade de Coimbra, com as suas sete Faculdades (Letras, Direito, Medicina, Ciências e Tecnologia, Farmácia, Economia, e Psicologia e Ciências da Educação), com os seus 12.500 alunos, com uma organização democrática, em que os Conselhos Directivos e Pedagógicos das Escolas e o próprio Reitor são eleitos, tem já uma estrutura bem diferente da tradicional instituição de ensino, embora se mantenham ainda vivas algumas das suas tradições académicas.

\* Texto extraído da brochura *Universidade de Coimbra* (a publicar, em nova edição, pela Reitoria da Universidade), elaborado pelo Prof. Luís Reis Torgal.

# Manual do Encontro



## Manual do Encontro



### As Novas Tecnologias no Ensino...

«Repete lá! Se tiveres 5 calculadoras e tirares 3, com quantas ficas?»

in WILLE, F (1982), *Humor in der Mathematik*, Göttingen: Vandenhoeck & Ruprecht

### Objectivos do Encontro:

- Reunir docentes do ensino básico, secundário e superior interessados na utilização de computadores em Física e Química e na troca das respectivas experiências.
- Divulgar «software» desenvolvido ou existente em Portugal para o ensino da Física e da Química.
- Discutir as várias modalidades de exploração do computador no ensino e sua integração curricular.

## O que é o Projecto MINERVA

A introdução sistemática, gradual, dos computadores nas escolas portuguesas teve lugar a partir de Outubro de 1985, com a criação do Projecto MINERVA (Meios Informáticos na Educação: Racionalização, Valorização, Actualização), dirigido para os objectivos de introduzir as tecnologias de informação na prática educativa e nos planos curriculares, e de promover a formação de professores e de formadores para levarem a cabo essa tarefa. (...)

Durante a fase piloto do projecto, que durou três anos, a sua infra-estrutura de planeamento e execução foi constituída por uma rede de universidades e escolas superiores de educação — os «pólos» e «núcleos» do projecto. (...) As equipas envolvidas cobriam um largo espectro de especialidades, desde as ciências exactas e naturais até à psicologia, ciências da educação e sociologia, passando pela informática e engenharia de sistemas.

No que respeita à sua organização e funcionamento, o projecto MINERVA desenvolveu-se, durante a sua fase piloto, de acordo com as seguintes grandes opções:

- descentralização, quer geográfica, quer funcional, aos diversos níveis de organização, e consequente atribuição de elevada relevância à iniciativa dos seus grupos constituintes;
- crescimento gradual, centrado numa dinâmica de experimentação e de reflexão sobre os resultados alcançados, orientada para uma assimilação crescente pela classe docente e pelos diversos níveis de ensino;
- atribuição de particular importância à componente de investigação e desenvolvimento, materializada no papel central atribuído às universidades e escolas superiores de educação;
- estruturação orientada para a garantia de que, pela combinação das entidades intervenientes, o processo, sendo apoiado em elevada competência tecnológica, se mantivesse, no entanto, permanentemente animado e controlado pelos objectivos educacionais.

A formação de professores em serviço foi uma das áreas que mobilizou maiores esforços. Esta área foi entendida pelo projecto num sentido que abrangeu a realização de actividades de animação pedagógica e um apoio continuado às escolas ao longo de cada ano lectivo. O objectivo fundamental desta abordagem foi o de assegurar, em todas as escolas abrangidas, uma utilização pedagógica qualificada dos computadores e de criar um ambiente estimulante de auto-aperfeiçoamento no qual fosse possível aos professores desenvolverem, e adaptarem à sua experiência e intuições, um sentido projectivo da utilização das tecnologias da informação na educação.

As actividades de investigação e desenvolvimento actualmente em curso nas equipas do projecto MINERVA têm lugar fundamentalmente nas universidades e em algumas das escolas superiores de educação. Cerca de quatro dezenas de doutorados (nô País e no estrangeiro) e três dezenas de possuidores de graus de Mestre, para além de mais de duas centenas de licenciados numa larga gama de áreas, integram actualmente as equipas do Projecto MINERVA, e várias dessas equipas estão profundamente empenhadas em projectos de envergadura no domínio da utilização das tecnologias de informação na educação, alguns no âmbito de programas da Comissão das Comunidades Europeias.

Com a entrada recente do projecto na fase operacional, que corresponde à sua integração

gradual no sistema normal de planeamento do sector da educação, inicia-se uma fase de consolidação de infra-estruturas de formação e de investigação nascidas na fase piloto, alargamento da acção do projecto ao todo nacional, e arranque de iniciativas que assegurem um desenvolvimento institucional harmonioso em todas as frentes. Os computadores começam, assim, a ser tranquilamente assimilados pela realidade escolar. Não serão, por certo, uma poção milagrosa para todos os males da educação, mas a sua presença no dia-a-dia escolar promete tornar-se útil, familiar e natural, como já o começa a ser, implícita ou explicitamente, na vida diária de praticamente todos nós.

[Texto extraído de um artigo publicado pelo Prof. A. Dias de Figueiredo, coordenador nacional do Projecto MINERVA na sua fase piloto (85-89), no nº 4 da Revista *Colóquio / Ciências*, Janeiro-Abril de 1989]

## Responsáveis pelos Pólos do Projecto MINERVA

**Coordenador Nacional:** Prof. Doutor Luís Valadares Tavares, Director-Geral do Gabinete de Estudos e Planeamento do Ministério da Educação

Projecto MINERVA  
Escola Superior de Educ. de Viana do Castelo  
Prof. Doutor Domingos Manuel Fernandes  
Av. 28 de Setembro  
Apartado 51  
4900 VIANA DO CASTELO  
(058)24714,25251

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade do Minho  
Prof. Dr. Altamiro Barbosa Machado  
Vivenda do Sameiro  
Estrada Nova de Gualtar  
4700 BRAGA  
(053)28247/8 79435 71276 75128

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade do Porto  
Prof. Dr. Duarte da Costa Pereira  
Rua de Ceuta, 118 - sala 44 6º andar  
4000 PORTO  
(02)325713

Projecto MINERVA  
Pólo do Instituto Politécnico do Porto  
Engº António Alberto Silva  
Rua Dr. Roberto Frias  
4000 PORTO  
(02)480438

Projecto MINERVA  
Pólo de Aveiro  
Departamento de Química  
Prof. Dr. António Ferrer Correia  
Universidade de Aveiro  
3800 AVEIRO  
(034)25085/ ext.2826

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade de Évora  
Dra. Mariana Valente  
7000 ÉVORA  
066/25572,3,4

Projecto MINERVA  
Pólo da ESE Portalegre  
Dr. Mário Ceia  
Apartado 125 Praça da República  
7301 PORTALEGRE Codex  
045/24450,23911

Projecto MINERVA  
Pólo do ISEF  
Prof. Dr. David Rodrigues  
Qta da Graça - Estrada da Costa - Cruz Quebrada  
1499 LISBOA Codex  
(01)4198360

Projecto MINERVA  
Pólo da Escola Superior de Educação de Lisboa  
Drª Cecília Monteiro  
Travessa Terras de San'Ana 15 - A 2º andar  
1200 LISBOA  
(01)685068

Projecto MINERVA  
Pólo do GEP  
Dr José Tomás  
Av. Miguel Bombarda, 20, 5º  
1000 LISBOA  
(01)762066/736095

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade de Coimbra  
Laboratório de Informática e Sistemas  
Prof. Drª Maria Teresa Mendes  
Quinta da Boavista Lote 1 - 1º  
3000 COIMBRA  
(039)721391

Projecto MINERVA  
Pólo da ESE de Faro  
Prof. Dr. Joseph Conboy  
Qta da Penha  
8000 FARO  
089/29377,29387

Projecto MINERVA  
Pólo da Escola Superior de Educação de Viseu  
Dr. Fernando Duarte  
Av. Infante D. Henrique, 55 - 3º Esq  
3500 VISEU  
(032)22528

Projecto MINERVA  
Pólo da ESE de Castelo Branco  
Drª Gertrudes Amaro  
Rua Pedro da Fonseca  
6000 CASTELO BRANCO  
(072)25513, 25512

Projecto MINERVA  
Pólo da Fac. de Psicologia e Ciências da Educação  
Prof. Drª Helena d'Orey Marchand  
Av do Brasil, 1, 1º  
1400 LISBOA  
01/734015

Projecto MINERVA  
Pólo da Escola Superior de Educação de Leiria  
Drª Joana Bettencourt de Castro  
Rua Porto Moniz  
2400 LEIRIA  
(044)25093/97

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade de Lisboa - Deptº de Educação  
FCL  
Prof. Dr. João Pedro da Ponte  
Av. 24 de Julho, 134, 4º  
1300 LISBOA  
(01)602501

Projecto MINERVA  
Pólo do Instituto Politécnico da Guarda  
Dr. João Bento Raimundo  
Rua Soeiro Viegas, 6  
6300 GUARDA  
(071)21191 / 21634

Projecto MINERVA  
Pólo da Escola Superior de Educação de Setúbal  
Dr. José António Duarte  
Campo do Instituto Politécnico  
Rua Vale de Chaves, Lugar da Estefanilha  
2900 SETÚBAL  
(065)721452, 7211696

Projecto MINERVA  
Pólo da ESE de Beja  
Escola Superior de Educação de Beja  
Dr Rui Soares  
Rua de Santo António 1, A  
7800 BEJA  
084/24617

Projecto MINERVA  
Pólo da Universidade de Trás-os-Montes e Alto  
Douro  
Prof. Dr. Eugénio Alte da Veiga  
Qta dos Prados  
5000 VILA REAL  
059/22545,24076

Projecto MINERVA  
Pólo da ESE de Bragança  
Drª Ana Leitão Rodrigues  
Bairro da Mãe d'Água  
5300 BRAGANÇA  
073/24815

Projecto MINERVA  
Pólo da Faculdade de Ciências e Tecnologia (UNL)  
Dr João Correia de Freitas  
2825 MONTE DE CAPARICA  
2958464

## Informações para os participantes

O Encontro realiza-se no Auditório da Reitoria da Universidade de Coimbra, localizado no meio do Edifício de Física e Química.

## Apoio aos participantes

No átrio do Auditório (piso superior) encontram-se:

- O secretariado do Encontro que funciona em regime de permanência e onde se efectua o registo dos participantes e a entrega de documentação. Os comprovativos de presença, para entrega nas escolas, são entregues no Secretariado. Pode também ser obtido um diploma de participação no Encontro.
- As bancas das entidades organizadoras (SPF, SPQ, Minerva), onde se pode fazer o pagamento de quotas, adquirir publicações, obter informações sobre actividades, etc.
- As exposições comerciais, com informações sobre hardware e software. Em particular, estão afixadas informações sobre software de interesse educacional em Física e Química.
- As bancas de venda de livros com desconto.
- Uma pequena "sala de leitura" onde poderão ser encontrados e consultados alguns números recentes de revistas sobre educação em Física e Química, informática, etc. Funciona aí também, em horas afixadas, sessões de demonstração de pesquisa bibliográfica de bases de dados em disco óptico (CD-ROM) e de programas educacionais igualmente em disco óptico. Pedidos bibliográficos específicos serão encaminhados para as bibliotecas de Física e de Química da Universidade de Coimbra.

No piso inferior do átrio do Auditório encontram-se:

- A exposição de posters, que devem ser afixados ao fim da manhã do dia 22 (das 13 as 14h 30m). Junto aos expositores de posters existirão alguns computadores para demonstrações informais pelos participantes, referentes ou não às comunicações apresentadas. Solicita-se aos autores para estarem junto aos posters nos dias 23 e 24 das 10.30 as 11 horas, a fim de possibilitarem aos interessados a discussão e eventual demonstração. Durante o Encontro não se poderá proceder à cópia de programas de computador. Serão divulgados todos os contactos necessários para obter os programas apresentados.
- No piso inferior funciona também a projecção de filmes vídeo de interesse didáctico em Física e Química (selecção a cargo do Dr. Alexandre Ramires, Escola Secundária de Portimão). Pode também ser visionado um filme sobre trabalhos experimentais realizado

por estagiários da escola Avelar Brotero, de Coimbra.

- Os lavabos (homens e senhoras) encontram-se também no piso inferior.

## Localização das actividades

- Todas as sessões plenárias e comunicações orais realizam-se no Auditório da Reitoria.
- O Debate 2 e a Workshop 2 realizam-se no mesmo Auditório.
- As sessões de posters e demonstrações (informais) pelos participantes realizam-se no átrio do Auditório (piso inferior).
- Todas as restantes actividades (workshops, Debate 1, demonstrações) realizam-se em salas dos departamentos de Física, Química e Matemática, de acordo com a informação constante em folha anexa.

## Acomodação

Qualquer assunto referente a alojamento em Coimbra deve ser tratado directamente com a Agência Intervisa (Av. Fernão de Magalhães, 11, 3000 COIMBRA, tel 039/23873/28904). A agência pode fornecer também informação sobre transportes.

## Acidentes e emergências

Marque (ou peça para marcar) 115. O Hospital da Universidade situa-se na zona de Celas.

## Refeições e bares

Existe um serviço de almoços a preço económico durante os 3 dias do Encontro na chamada "Cantina das Químicas", por cima do Auditório da Reitoria. Os participantes que o desejarem podem igualmente utilizar para o almoço o self-service do Instituto Justiça e Paz, na Couraça de Lisboa e, perto do Auditório, o Bar das Letras na Faculdade de Letras, o Bar dos Direitos na Faculdade de Direito, a casa do Pessoal da Universidade de Coimbra, no Palácio dos Grilos, etc., ou ainda qualquer um dos restaurantes da zona (lista afixada no secretariado).

O jantar do Encontro realiza-se na sexta-feira 23, pelas 20h, no Palácio de S. Marcos, situado nos arredores de Coimbra. Existirá um serviço de transporte para ida e para volta.

Pode jantar em Coimbra num dos numerosos restaurantes existentes. Dão-se algumas

sugestões. Se pretende comer bem (mas "caro") procure o "Trovador", junto à Sé Velha, ou as "Piscinas", junto ao Estádio Municipal. Se pretende comer bem mas mais barato, tem à disposição a "Taberna", na Rua dos Combatentes ou o "Verde Moinho", em Vale de Canas (fora da cidade). Típicos são o "Zé Manel" (atrás do Hotel Astória, na Baixa) e a "Toca do Velhaco" (em Fornos, fora da cidade). Há, evidentemente, outras escolhas: o "D. Pedro", na Av. Navarro, o "Real das Canas", em Santa Clara, o "Joaquim dos Leitões", perto da Auto-Industrial (Av. Fernão de Magalhães), e os vários restaurantes do outro lado da ponte, perto do Portugal dos Pequeninos.

Funciona no piso superior do átrio do Auditório da Reitoria um serviço de café no bar devidamente assinalado. Serão distribuídas senhas de café. Perto do auditório e além do Instituto Justiça e Paz, Bares das Letras e do Direito, existe ainda o Bar das Matemáticas. Na Praça da República existem numerosos cafés.

## Telefones

Departamento de Física: 23675  
 Departamento de Química: 22826  
 Pólo de Coimbra do Projecto Minerva: 721391  
 Posto de Turismo: 23886  
 Informações CP: 34998 e 34976

O telefone do Auditório servirá para uso do secretariado, não podendo ser utilizado pelos participantes. É favor utilizar as cabines públicas (com moedas ou cartão) que se situam entre os Departamentos de Química e de Matemática, ou o posto público dos Correios, atrás do Departamento de Matemática.

## Lugares de interesse em Coimbra

Todos os lugares de Coimbra têm interesse! Aproveite para voltar a ver a Universidade, agora que ela comemora os sete séculos. Visite a Biblioteca Joanina, a Capela, a sala dos Capelos, o Sala dos Actos Privados e o miradouro sobre a Universidade. Perto da Universidade pode visitar o Museu Machado de Castro, com o criptopórtico romano no piso inferior. Não esqueça a Sé Velha e a Igreja de Santa Cruz com os respectivos claustros. Fora da cidade, vale a pena ir a Conimbriga e ao seu moderno museu. Pode fazer compras nas ruas Ferreira Borges, Visconde da Luz e Sofia, na Baixa. Centros Comerciais (abertos fora de horas) são o GiraSolum (perto do Estádio Municipal), o Primavera (em Celas) e o Sofia (na rua do mesmo nome). O maior supermercado é o INÓ, ao Largo do Arnado, na Baixa. Coimbra é conhecida pelas suas livrarias: veja a Bertrand, na Portagem, a Finisterra, perto da Praça da República, a 115, nas Escadas do Quebra-Costas, ou a Novalmedina, na Rua Ferreira Borges. Se tiver tempo perca-se nas vielas do que resta da Alta de Coimbra ou nos recantos mais estreitos da "Baixinha". À noite pode encontrar os estudantes na Praça da República ou na Associação Académica.



## Lista de Participantes (por ordem alfabética)

(Os números referem-se aos "workshops" em que estão colocados nos dias 22 e 24)

Abílio de Jesus Monteiro Almeida	Universidade do Porto		
Adelaide Idalina Vaz de Carvalho	ES Lousã		
Adília da P. Ribeiro Alves da Cunha	ES de Penacova		
Adriano Pedroso de Lima	Universidade de Coimbra		
Aida Maria Miranda Ferreira Monderico	ES Eça de Queirós	02	08
Alberto Ferreira da Silva	E C+S de Couto Cucujães		
Albino Carvalho Faria da Silva	ES D. Maria II Braga		
Alda Cristina Maneca N. F. Franco	ES Alves Martins		
Alda Maria Simões Pereira	ES de Odivelas	14	05
Alexandre Lopes Magalhães	Universidade do Porto	09	10
Alexandre Manuel Severino Afonso Ramires	ES Manuel Teixeira Gomes, Portimão	14	07
Alexandrina Maria Martins de Carvalho	ES de Fafe	13	01
Almerinda Henriques Barrocas Morgado	ES nº 1 de Torres Novas		
Amância Maria Coutinho Sobral	ES da Cidade Universitária		
Ana Arcília Martins Laranjeira da Silva	UTAD		
Ana Maria Beato Covas Ramos	ES da Maia	13	08
Ana Maria de Almeida Feliciano	ES D. Luísa de Gusmão	07	02
Ana Maria Henriques Macieira	ES Dr Joaquim de Carvalho		
Ana Maria Patricio Gomes	ES Odivelas	04	08
Ana Maria Reis Henriques	ES de Alcanena	01	02
Ana Paula Camelo Garcia	ES de Gouveia		
Ana Paula Furtado Lopes	ES de Odivelas	07	02
Ana Paula Marta Mendes	ES nº 2 da Marinha Grande	09	02
Ana Paula Moreira dos Santos Bernardino	ES de Vila Viçosa	02	03
Ana Paula Peres Figueiredo	Universidade de Coimbra	10	05
Angelo Carlos Lucas Vaz	Instituto Politécnico da Guarda	05	07
António Alberto Garcia Portugal	Universidade de Coimbra	03	
António Alberto Silva	ESE do Porto	08	06
António Dias de Figueiredo	Universidade de Coimbra		
António Faustino Pesqueira de Oliveira	ES de Cantanhede	08	02
António Ferrer Correia	Universidade de Aveiro		
António Ferreira Gomes	Universidade do Porto		
António José Almeida Rocha	EP Castelo de Paiva		
António José Baptista	ES de Pombal		
António José dos Santos Neto	Universidade de Évora	02	07
António José Lopes F. Costa			
António Manuel Andrade F. de Almeida	ES de D. Duarte	08	
António Manuel Bandeira Rodrigues	ES de S. Pedro do Sul	02	08
António Manuel Simões C A Baptista	Universidade de Lisboa	09	10
António Melo	Universidade de Lisboa		
António Moreira Gonçalves	Universidade de Lisboa		
António Varandas	Universidade de Coimbra		
Armando Henrique Batista Gomes de Sá	Universidade do Porto		
Arnaldo Francisco Febra	ESE de Leiria	14	03
Augusto Luís Jorge Marcelino			
Benedito Costa Cabral	Universidade de Lisboa		
Bento Caldeira	Universidade de Évora		
Benvinda de Jesus Vila Boa Lourenço Marta	E C+S de Armamar	02	08
Bernardete Martins Ribeiro	Inst. Sup. de Eng. de Coimbra	14	03
Branca Maria Braga Teixeira Mocho H. Santos	ES da Parede	11	02
Camila Deolinda de Azevedo Tavares	Projecto Minerva - Pólo da U. P.		

Cândida Teresa P. Pinto Lima	ES de Ermesinde	03	
Carlos Alberto Baptista Leite	ES José Estevão - Aveiro	06	08
Carlos Alberto Freitas Portela	ES Avelar Brotero	02	08
Carlos Alberto Teixeira Pires	ES Raul Proença	08	02
Carlos Fiolhais	Universidade de Coimbra		
Carlos Manuel Ferreira Teixeira Monteiro	Univ. do Porto - Proj. MINERVA		
Carlos Manuel Gomes Pinto Ferreira	Universidade de Lisboa	04	15
Carlos Pedro da Silva Cardoso dos Santos	Universidade de Coimbra	09	10
Célia Maria Reis Henriques	Universidade Coimbra	10	03
Cesário José Simões Martinho	ES de Queluz	06	08
Concepción Saa Delgado	Universidade de Vigo	04	01
Conceição Maria das Dores Lopes	ES de Ferreira Dias	04	
Correia Cardoso	Universidade de Coimbra		
Cremilde Ribeiro	Projecto MINERVA (FCTUNL)		
Cristina Maria Ferrão Fernandes	Universidade de Coimbra	03	06
Cristina Maria Ferreira Martinho	ES nº 1 Torres Novas	07	03
Dália Maria Godinho Guerreiro	Universidade de Lisboa	08	02
Daniel Cabrol	Université de Nice		
Décio Rui Martins	Universidade de Coimbra	05	08
Domingos Fernando Barbosa Pinto	ES Poeta António Aleixo		
Duarte Costa Pereira	Universidade do Porto		
Edward Redish	Maryland University		
Elisa Maria Pereira da Silva Prata Pina	DREC Projecto Minerva	05	02
Elisabete Gouveia B Faim Pessoa	ES José Falcão		
Emília Fernandes de Oliveira Soares Abrantes	ES Ilhavo		
Emília Malhado Cabrita de Cruz Paiva	ES da Falagueira	10	03
Emília Margarida da Costa Martins Vaz	ES Emídio Navarro	07	
Emília Rosa de A. Pereira da Costa Caldas	ES de Santa Maria Maior		
Estrela de Deus Ferreira	ES Dr. Ginestal Malhado		
Eugénia Alcina de Macedo Timoteo	ES de Amarante	01	15
Eugénia Maria Ferreira Marques Dias			
Eugénia S. S. R. T. de Melo Correia Nogueira	ES de Avelar Brotero	11	02
Eugénia Sofia Woodhouse Ferreira	Universidade do Porto		
Eugénio Alte da Veiga	UTAD		
Eugénio Ferreira	LNETI	03	15
Eusila Maria Gomes de Lacerda Pereira	ES Viriato	11	08
Eva Flora Ferreira Pedrosa	ES de Paredes	02	
Fátima Ferreira Marques	ISE Coimbra		
Fátima Isabel Caria Canelas Pais	Universidade de Coimbra	14	03
Fernanda da Felicidade Pinto Barbosa	Universidade da Beira Interior	07	02
Fernando Alvaro Pires Basto	ES Infante D. Henrique	03	05
Fernando David de Sousa Sampaio	Universidade de Coimbra		
Fernando Fernandes	Universidade de Lisboa		
Fernando Manuel da Silva Nogueira	Universidade Coimbra	13	06
Fernando Secundino Nogueira da Silva	E Profis. de Inf. Júlio de Matos Porto		
Filomena de Fátima Martins Freitas	Universidade de Lisboa		
Filomena Elisabete Lopes M. Elvas Leitão	Universidade de Lisboa	06	15
Florisia Maria Trota Neves	ES da Lousã		
Francisco F. Gonçalves Reis	LNETI		
Francisco Maria dos Santos Henriques	ES de Alenquer	02	08
Francisco Fraga	Universidade de Coimbra		
Gracia Maria Biosa Neves	ES José Falcão		
Helena Margarida Luís Ramos Tomás	ESE de Castelo Branco	06	03
Helena Maria S. Reis	ES da Falagueira	05	08
Helena Simões Baptista Cabral	ES Avelar Brotero	07	08
Hermenegildo H. Vilaverde Rocha Ribeiro	ES Monserrate	13	08
Hilda Maria Leal de Oliveira	ES de Sá da Bandeira	02	11

Idalino José Franco	Universidade Nova de Lisboa	08	15
Inês Portugal	Universidade Nova de Lisboa		
Isabel Maria Corte Real Rodrigues Sarmento	ES Garcia da Horta	02	03
Isabel Sofia Godinho S Rebelo	Universidade de Coimbra	13	08
Isilda Maria Reis Galiza Carneiro Mariz	ES Eça de Queirós		
Isilda Rodrigues Robalo Correia	ES nº 1 de Marinha Grande	10	02
J. Salcedo	Universidade do Porto		
Jaime Alberto dos Santos Cardoso	ES Camilo Castelo Branco (Vila Real)	13	
Jaime Carvalho Silva	Universidade de Coimbra		
João Adalberto Lourenço	LNETI		
João Carlos de Matos Paiva	ES de Anadia		
João Fernando O Paneiro	ES de Peniche	06	11
João José Amorim dos Santos	ESE de Beja		
João Paulo C A Prates Ramalho	Universidade de Lisboa	09	10
João Paulo Martins Neta	ES Avelar Brotero	13	08
João Paulo Rodrigues Fernandes André	Universidade de Évora		
Joaquim Bernardino de Oliveira Lopes	ES nº 2 Torres Novas	08	02
Joaquim José Sainhas de Oliveira	Universidade Técnica de Lisboa	08	15
Joaquim Marques da Silva	E C + S de Pataias	05	02
Joaquim Marques dos Santos	ES D. Duarte	08	
Joaquim Norberto Cardoso Pires da Silva	Universidade de Coimbra	08	01
Jorge Alberoto Pereira da Fonseca e Trindade	ES nº 3 da Figueira da Foz		
Jorge Alexandre Monteiro de Carvalho e Silva	Universidade Nova de Lisboa	03	04
Jorge Alexandre Neves Moreira Maia	ES da Maia	05	
Jorge António de Carvalho Sousa Valadares	Univ. Aberta / Colégio Militar	13	06
Jorge Eduardo P R Garcia	ES Vale de Cambra		
Jorge Manuel da Silva Sena	E C+S da Guia	02	08
José Alberto Loureiro Costa	ES Monserrate (Viana do Cast.)		
José António Chibeles Figueira	Univ. de Évora - Projecto Minerva		
José António Costa Pereira	ES Monte de Caparica	02	08
José António de Carvalho Paixão	Universidade de Coimbra	13	05
José Cardoso Duarte	LNETI	10	15
José Carlos de Faria Guedes Vaz	Univ. do Porto - Projecto MINERVA		
José Carlos Tavares de Brito dos Santos Patrício	Universidade de Coimbra	09	
José Carlos Teixeira Dias	Universidade de Coimbra		
José Crispim Porto Ramos Medeiros	ES Francisco Rodrigues Lobo	06	
José Féria Seita	UTAD		
José Fernando Branco Martins	ES José Falcão		
José Manuel da Silva Nunes	Universidade de Coimbra	08	03
José Manuel da Silva Morgado	ES Maria Lamas (Torres Novas)		
José Manuel Lopes	ES Oliveira de Azeméis		
José Manuel Ramos Henriques da Conceição	ES de Camões	06	02
José Pedro Horta e Vale Teixeira Dias	Universidade de Coimbra		
José Rogério dos Prazeres Nogueira	ES nº 1 da Marinha Grande	02	10
Judah Schwartz	Harvard University		
Judite Fernanda Alves de Rocha	Projecto Minerva - Pólo U. Porto		
Júlia Maria das Neves	ES Reguengos de Monsaraz		
Júlia Maria T Chaves Jorge			
Júlia Rosélia de Oliveira A. Viana Moço	ESE de Leiria	02	08
Júlio Manuel Mariano Ferreira dos Santos	ES de Pombal	02	07
Leonel Álvaro Torres Pereira Neves	Faculdade de Ciências de Lisboa		
Lina Maria Leal da Silva	E C + S de Miranda do Corvo	08	
Lourdes da Conceição Rodrigues Andrade	Universidade de Coimbra	03	08
Lucília Pires de Brito	Universidade de Coimbra	06	07
Lucinda Guerra Ferreira Antunes Domingues	ES Cidade Universitária		
Luís António Oliveira Pereira dos Santos	ES Alberto Sampaio	02	04
Luís Cadillon Costa	Universidade de Aveiro		

Luís Carballeira Ocana	Colégio Universitário de Vigo	04	01
Luís Carlos Conceição Perna	ES de Raul Proença		
Luís Carlos Serra Cerdeira Guerra	ES Rodrigues Lobo	07	05
Luís Filipe Correia Marques	Universidade de Coimbra	01	04
Luís Sousa Lobo	Universidade Nova de Lisboa		
Luís Teodoro			
Luís Valadares Tavares	GEP (ME) e Instituto Superior Técnico		
Luísa Antónia de Vila Fernandes Orvalho	ES de Marco de Canaveses		
Luísa Maria Ramos de F. Soares F. Mendes	ES da Batalha - Penacova		
Luísa Maria Traça Gomes Carvalho	E C + S de Condeixa - a - Nova	02	07
Álvaro Henrique da Costa Pinto	ES de Pombal	11	02
Álvaro Henrique da Costa Pinto	ES de Pombal		
Manuel António Ferreira do Lago Cruz	ES D. Maria II	02	08
Manuel Barros	Universidade do Porto		
Manuel Cuiça Sequeira	Universidade do Minho		
Manuel Joaquim Baptista Fiolhais	Universidade Coimbra	02	07
Manuel José Matos	ISE Lisboa		
Manuel Matos e Sá	LNETI		
Manuela Paula Ruas de Matos Coelho Veloso	ES de Odivelas	06	11
Marciano da Silva	Universidade Nova de Lisboa		
Margarida Maria Q. Chaves Andrade Afonso	ES de Carnaxide	01	04
Margarida Maria Rodrigues P. Moreira e Silva	ES de Macedo de Cavaleiros		
Maria Adelaide Gonçalves Machado	ES de Camilo Castelo Branco	09	05
Maria Adelina da Silva Gomes	ES de Pevidem	13	01
Maria Adelina da Silva Machado	ES da Amadora	08	05
Maria Adriana Teixeira Soares	E C+S de Santa Marta Penaguião		
Maria Albertina Bastos Reis de Melo	ES Infanta D. Maria	11	05
Maria Alcina Félix B. Gonçalves Catarino	ES de Seias		
Maria Aldina Duarte Ferreira Gonçalves	ES Adolfo Portela	11	02
Maria Alegria Feio	Universidade do Porto	08	
Maria Alice Lourenço Henriques	Universidade de Coimbra		
Maria Alice Valente T. de Almeida Machado	ES Sebastião e Silva	05	02
Maria Alice Veloso Alves Ribeiro	ES da Anadia		
Maria Alzira de A. M. C. Diniz Roldão	ES de Oliveira de Azemeis		
Maria Amália Fernandes Maia Rodrigues	ES de Adolfo Portela	11	02
Maria Amália Puga Lobo	ES da Cidade Universitária	13	04
Maria Amélia de Almeida Nunes Canelas Pais	E C+S de Vila Nova de Poiares	08	07
Maria Amélia F. Franco Machado	ES João de Deus	13	02
Maria Amélia Oliveira Correia	ES de Oliveira do Hospital	05	06
Maria Antónia de A. Azevedo Borges de Sousa	ES da Parede	05	07
Maria Antónia H C Costa	ES Camões	09	01
Maria Antónia R. Henriques Simões	ES nº1 de Abrantes		
Maria Armada Cabela Gonçalves M. da Silva	ES de Porto de Mós	02	11
Maria Armada Ferreira da Cunha Martins	ES do Cerco	05	06
Maria Arminda Pedrosa	Universidade de Coimbra		
Maria Augusta de Azevedo M. Sarmento Jorge	ES Infante D. Maria		
Maria Augusta Domingues A. Mateus Patrício	ES Infanta D. Maria	08	02
Maria Beatriz Cachim Cardoso Pereira	ES de Campos Melo Covilhã	07	05
Maria Benedita de Meneses Côrte-Real	Projecto Minerva	04	
Maria Cândida Serôdio Rosa	ES Camões	02	02
Maria Celeste Carvalho M Caetano	ES Estarreja		
Maria Celeste Gonçalves Santareno	ES Quinta das Flores		
Maria Cesaltina Marques Duarte Borges	ES de Odivelas	07	03
Maria Clara San-Bento de S. A. dos Santos	ES Montemor-o-Velho	08	11
Maria Cristina Albuquerque Fernandes	ES Infanta D. Maria		
Maria Cristina Azevedo Gomes Santos Silva	ESE de Viseu	09	01
Maria Cristina dos Santos Ribeiro Martins	ES Carlos Amarante	03	06

Maria da Conceição Azevedo Rua	ES Rainha D. Amélia	02	08
Maria da Conceição Bento Alves	ES do Morgado Mateus		
Maria da Conceição Côncio da F. A. Catalão	E C+S de Calouste Gulbenkian	02	07
Maria da Conceição dos Santos Vilela	ES de Odivelas	07	
Maria da Conceição Espadinha Ruivo	Universidade de Coimbra		
Maria da Conceição G. Condeço de Carvalho	ES de Mortágua	08	02
Maria da Conceição Madeira Gonçalves	ES de Odivelas	01	02
Maria da Conceição Miranda da Costa Barreto	ES de Peniche	09	10
Maria da Conceição Santos N. Esteves Cameirão	ES da Moita	02	08
Maria da Conceição Carmo Martins da Costa	ES da Maia	10	01
Maria da Glória Corte Real	ES Anadia		
Maria da Glória Lobo Vaz Pato	ES de Oliveira do Hospital		
Maria da Graça D. Machado S. Pereira	ES Peniche	11	02
Maria da Graça Lemos Pinto	ES de Queluz	08	05
Maria da Graça Pereira Ventura	Universidade da Beira Interior	13	11
Maria da Graça Pimentel Monteiro Ferreira	ES do Padrão da Légua Matosinhos		
Maria da Luz do Espírito Santo Pinto Baptista	ES de Carcavelos	10	07
Maria da Natividade Casamiro A. G. Almeida	ES Santa Maria - Sintra	07	01
Maria da Natividade Leal	ES de Rio de Mouro	02	08
Maria da Saudade Ferreira Pinto Vasco	ES nº 1 de Abrantes	03	02
Maria das Mercês Carvalho C Sousa Ramos	ESE Lisboa	02	03
Maria de Fátima A. Silva Domingues	E C+S de Pedrógão Grande		
Maria de Fátima Carmona Simões da Paixão	ESE Castelo Branco	08	05
Maria de Fátima dos Santos Ferreira Coelho Sá	Colégio de Gaia		
Maria de Fátima Lemos de Oliveira Sousa	IPP - Projecto Minerva	03	06
Maria de Fátima Nunes de Carvalho	E C+S do Teixoso Covilhã	11	05
Maria de La Salette Seara Paixão	ES da Sé - Guarda	10	02
Maria de Lourdes Miranda Colaço	Instituto Militar Pupilos do Exército		
Maria de Lurdes M. G. Azevedo de Matos Faia	ES de Bocage	07	03
Maria de Lurdes Rocha	ES Fernão Mendes Pinto		
Maria de Lurdes Vaz Ribeiro	ES de Queluz	06	03
Maria do Carmo Pinto Dias	ES de Santa Maria	06	03
Maria do Céu Ramos Torres Brandão Correia	ES D. Maria	05	08
Maria do Céu Romão Eusébio de Freitas	ES de Vendas Novas		
Maria do Rosário Godinho Teixeira	ES de Reguengos de Monsaraz		
Maria do Rosário Torres Carona de Magalhães	IPP-Projecto MINERVA		
Maria do Sameiro Gonçalves da Silva Correia	ES de Valença		
Maria Domitila Marques da Costa	ES da Lousã	02	08
Maria Edite Carvalho dos Santos	ES Nº 1 da Marinha Grande	01	03
Maria Edmeia Esteves C. Antonione Sereno	ES de Gil Vicente	03	10
Maria Ema Ferreira Teixeira Monteiro	ES de Ermesinde	02	07
Maria Emília Barros Almeida	ES de Carnide	02	08
Maria Emília C N P David Pereira	ES Alves Martins		
Maria Emília Ventura S L Oliveira	ES Vale de Cãmbra		
Maria Esmeralda Bandeira Cardoso da Costa	ES Montemor-o-Velho		
Maria Esmeralda de Oliveira Pinto da Silva		01	07
Maria Estela de Loureiro Rebelo	ES de Mangualde		
Maria Eugénia da Conceição Santos	ES José Estevão	03	11
Maria Felicidade Galhardas Cardoso	E C+ S Silva Gaio	14	06
Maria Fernanda B R J Marcelino			
Maria Fernanda Bessa de Oliveira			
Maria Fernanda dos Santos F. Mendes Marques	ES Domingos Sequeira	11	02
Maria Fernanda Oliveira Ramos	ES da Maia	06	11
Maria Fernanda R. Duarte da Rocha Pereira	ES de Reguengos de Monsaraz		
Maria Filipa Pitta da Cunha	ES da Parede	07	05
Maria Filomena C. Garcia Sardinha	ES de Mafra	11	03
Maria Filomena da Costa B. Araújo	ES S. Pedro		

Maria Filomena de Jesus F. Baptista Cardoso	ES de Soure		
Maria Goreti Gonçalves Santareno	ES Joaquim de Carvalho		
Maria Graça Almeida Seabra e Frade Ruivo	ES de Ilhavo	02	11
Maria Guilhermina A. Leitão Marcos Rita	ES D. Filipa de Lencastre		
Maria Helena Bouquet Rosas de Carvalho	ES de S. Pedro (Vila Real)		
Maria Helena Caldeira	Universidade de Coimbra	13	06
Maria Helena de Azevedo Maia C. de Araújo	ES Luís de Camões	02	11
Maria Helena de Jesus Pereira	Instituto de Inovação Educacional	02	08
Maria Helena F Nunes Vicente	ES Anadia		
Maria Helena Jesus de Sousa Santos Fino	E C+ S de Montelavar- Sintra		
Maria Helena Pimentel Rodrigues	UTAD		
Maria Helena Rodrigues Duarte	ES nº 1 de Torres Novas	11	08
Maria Inês Castro Jardim	ES de Avelar Brotero	11	02
Maria Irene Almeida Santos	ES Infanta D. Maria		
Maria Isabel A. Vargas Pinto	Colégio Mira Rio		
Maria Isabel Andrade G. M. Borges de Castro	ES Infanta D. Maria	08	11
Maria Isabel da Costa Cerqueira	ES José Estevão	02	08
Maria Isabel da Costa Gonçalves Cabido Mota	ES Afonso Domingues	02	11
Maria Isabel G A S Nunes	ES Quinta das Flores		
Maria Isabel Garcia da Cruz	ES José Falcão	05	02
Maria Isabel Gonçalves David Reis	ES Infanta D. Maria		
Maria Isete L. Correia Albuquerque V. Melo	ES Francisco Rodrigues		
Maria João Calçada Santos	ES da Falagueira	01	08
Maria João Loureiro	Universidade de Aveiro		
Maria Joaquina Leal Monteiro	ES de José Falcão	11	
Maria José Almeida de Brito e Cunha	ES de Benfica	02	06
Maria José da Silva de Vasconcelos C. R. Pais	ES D. Pedro V	02	05
Maria José Duffner Pimenta	Colégio Mira Rio		
Maria Josefina Costa Dias	ES de Amarante	01	15
Maria Josefina da Silva Sousa	ES Cidade Universitária		
Maria Judite C. Nascimento	ES de Odemira	05	11
Maria Judite Cardoso	ES do Restelo	02	05
Maria Judite Peneda Serra Martins	ES Dr. Bernadino Machado		
Maria Júlia Dom do Vale Henriques	ES Sebastião e Silva		
Maria Júlia Neto Gaspar	ES de Camões	02	06
Maria La - Salette dos Santos Ferreira Ribas	ES Ferreira de Castro Oliv. de Az.	10	08
Maria Laura Guimarães Castro Nunes	ES de Cantanhede	02	08
Maria Lídia Pinto Coelho Homem da Costa	ES Jaime Moniz		
Maria Lucília Castanheiro Ferreira Loureiro	ES da Falagueira	03	11
Maria Luísa Azinheira G. Pereira Galdes	ES Nº 2 do Lumiar		
Maria Luísa Brochado Branco	ES D. Duarte	02	05
Maria Luísa Cardoso Ribeiro	ES Afonso Domingues	13	07
Maria Luísa Carqueja	Inspeção Geral do Ensino	02	11
Maria Luísa Faria e Silva Ferreira	ES de Sta. Maria do Olival		
Maria Luísa Pestana de Azevedo M. Dias Silva	Projecto Minerva	04	06
Maria Luísa Pinto da Cunha Monteiro Terra	ES do Cerco	05	06
Maria Luísa V G Pinto	ES Pedro V	06	02
Maria Madalena Cucena Carvalho Teles	ES nº 2 de Ovar	06	11
Maria Madalena Leal da Silva Lambéria	Universidade de Coimbra		
Maria Madalena Moutinho Silva	ES de Cerco do Porto	05	06
Maria Manuela Fernandes Valente	ES de Belém-Algés	03	01
Maria Manuela Figueiredo da Silva	ES de Fonseca Benevides	14	05
Maria Manuela Guimarães Magalhães	ES de Valença		
Maria Manuela Lopes Dias	ES Vila Nova de Ourém		
Maria Manuela Matos Oliveira	Universidade do Porto	02	08
Maria Manuela Nunes	ES da Falagueira	05	11
Maria Manuela S C F Leitão	ES Alves Martins		

Maria Manuela Silva Coelho	E C + S de Condeixa -à-Nova	02	07
Maria Margarida Campino Pombinho de Araújo	ES de Reguengos de Monsaras		
Maria Margarida Ramalho da Costa	Universidade Coimbra	08	02
Maria Margarida Rico	ES de Reguengos de Monsaraz		
Maria Margarida Teles Marques S. Lameiras	ES Avelar Brotero	02	07
Maria Margarida V G A R Garcia	ES Vale de Cambra	05	
Maria Natália Botelho Marques da Silva	ES de Pedro Nunes	02	08
Maria Natália Cruz	ESE de Coimbra		
Maria Noémia A. Sousa Nobre Félix	ES de Odivelas	03	06
Maria Nubélia Silvestre Bravo	ES de Santa Maria	01	02
Maria Odete de Macedo T. Canelas de Castro	ES Infanta D. Maria		
Maria Odete de Oliveira Monteiro Araújo	E S de Lousada	05	11
Maria Odete Geirinhas Coelho Xavier Gomes	ES Amato Lusitano	11	06
Maria Olga Cordeiro da Silva A. Martins	ES do Restelo	02	05
Maria Palmira Pires Ferreira	ES Cantanhede		
Maria Paulina Estorninho N. da Maia Pereira	Universidade Nova de Lisboa	04	
Maria Purificação Paiva Lopes de Vasconcelos	E C + S Gueifães	14	02
Maria Raquel S R Silva	E C+S de Palmeira		
Maria Regina Morato dos Santos	ES de Gil Vicente	03	10
Maria Rosa Costa Alves	ES Afonso de Albuquerque	10	11
Maria Rosa Martins Lousada	E C + S de Custóias	06	05
Maria Salette Leite	Universidade de Coimbra		
Maria Suzete de Amorim Sousa Alves Correia	ES de Coelho e Castro		
Maria Teresa de Albuquerque Santos Leitão	ES Infanta D. Maria	08	02
Maria Teresa de Araújo Santos Andrade	ES de Sá de Bandeira Santarém	10	01
Maria Teresa de Matos Paiva	ES Prof. Reynaldo dos Santos		
Maria Teresa Figueiredo Marques Soares	ES Infanta D. Maria		
Maria Teresa Gomes Santos	ES Belém-Algés	08	07
Maria Teresa Henriques de Almeida S. Lobo	ES de Mortágua		
Maria Teresa Martha Pinto Aragão	ES Vitorino Nemésio		
Maria Teresa Mendes	Universidade de Coimbra		
Maria Teresa Monteiro Soares	Universidade de Lisboa	07	02
Maria Teresa Raposo de Almeida e Sousa	ES Infanta D. Maria		
Maria Teresa Rebelo Seixas Horta	ES de Seia		
Maria Teresa Santos Faria	ES de Santo António Cavaleiros	02	11
Maria Vera Valido Craveiro Reis	ES de Alvide	03	07
Maria Vitória dos Santos Conceição	ES Infanta D. Maria		
Mariana de Jesus Valente	Universidade de Évora		
Mariana Justa S T Alface	ES José Falcão	02	08
Marília do Céu Dourado Telo Ferraz Pereira	ES de Francisco Franco Funchal		
Mário Dionísio Cunha	ES de Jaime Moniz	08	15
Ángelo José Ribeiro Tomé	Universidade de Coimbra		
Nulita Maria Martins Gonçalves	ES de Queluz	02	06
Nuno Ayres de Campos	Universidade de Coimbra		
Nuno Martins Rodrigues	E C+S de Martim de Freitas	11	08
Olga Maria Almada de Carvalho B. Gil Mata	ES Garcia da Orta		
Olga Maria Paço Sousa	Universidade de Coimbra	05	08
Olga Maria Rodrigues dos Santos	ES de Eça de Queirós	06	02
Orlinda Afonso Nabais de Almeida Tomé	ES Quinta das Flores	11	07
Orlando M N D Teodoro	Universidade Nova de Lisboa	08	10
Orlando Oliveira	Universidade de Coimbra		
Paula Cristina Amaro da Cunha	ES de Regengos de Monsaraz		
Paula Cristina de Sousa Pereira Ornelas	ES Ferreira de Castro	11	07
Paula Cristina E. D. Rodrigues da Silva	ES Alberto Sampaio		
Paula Cristina Pereira Gonçalves	ES nº 2 de Beja	11	02
Paula Maria Leal Rodrigues Miguel	ES António Nobre		
Paulo Alexandre Lourenço Santos Agostinho	ES de Camões	14	08

Paulo Mendes	Universidade de Coimbra		
Pedro Alberto	Universidade de Coimbra		
Pedro Manuel Cravino Serra	Universidade de Coimbra		
Pedro Miguel Gomes Quintão Lages	ES Carcavelos	06	04
Regina Maria Nogueira de Sousa	ES da Sertã	05	
Renato Lacerda Campos Santos	Axial - Engenharia Informática Lda.	06	04
Ribeiro Claro	Universidade de Coimbra		
Ricardo Mosquera Castro	Universidade de Sant. de Compostela	10	
Rosa Maria A. Figueiredo Simões	ES Campos de Melo	02	08
Ruben Anacoreta de Seabra Elvas Leitão	Cecul - ISEL - ISE de Lisboa	04	03
Rui Fausto	Universidade de Coimbra		
Rui Ferreira Marques	Universidade d Coimbra	08	
Rui Gaspar	Inst. Sup. Técnico		
Suzel Maria N S Glória	ES Manuel Teixeira Gomes		
Teresa Elisa de Almeida Pereira Novais	ES Infanta D. Maria		
Valentina Vassilenko	Universidade Nova de Lisboa	01	08
Victor Gil	Universidade de Coimbra		
Vitor Duarte Teodoro	Universidade Nova de Lisboa		
Vitor José Babau Torres	Universidade de Aveiro	01	08
Vitor Verdelho Vieira	Escola Prof. de Inform. de Júlio Matos	04	01
Vladimira da Conceição Pessanha de Sousa	ES de Vila Real de Santo António	02	05
Zilda Ribeiro Xavier de Basto	ES Avelar Brotero	11	02

## Dados sobre os participantes

### Instituições de origem dos participantes (N = 416)

Escolas Secundárias	(70,8%)	
Universidades	(24,3%)	
Esc. Sup. de Educação	(3,0%)	
Outras	(1,9%)	

### É utilizador regular de computadores? (N = 416)

Sim	(50,1%)	
Não	(42,3%)	
s. r.	(7,6%)	

### Caso afirmativo, indique qual ou quais das seguintes afirmações melhor traduz o contexto em que utiliza computadores:

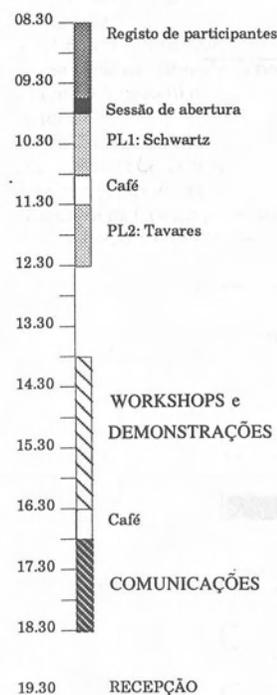
como instrumento de ensino nas aulas	(38,8%)	
como ferramenta de trabalho pessoal (e.g., processamento de texto)	(94,4%)	
como instrumento de controlo e/ou aquisição de dados	(24,4%)	
em actividades extra-lectivas com alunos	(15,0%)	
outro	(11,3%)	

### Qual ou quais os sistemas com que está familiarizado?

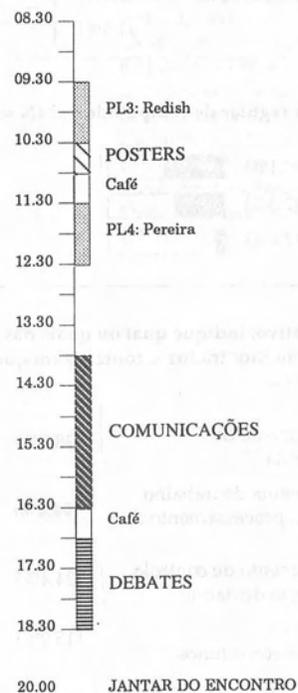
PC compatível	(87,5%)	
Macintosh	(26,3%)	
VAX com VMS	(11,9%)	
Sistemas correndo Unix	(6,9%)	
Outro	(5,0%)	

## Síntese do programa do Encontro

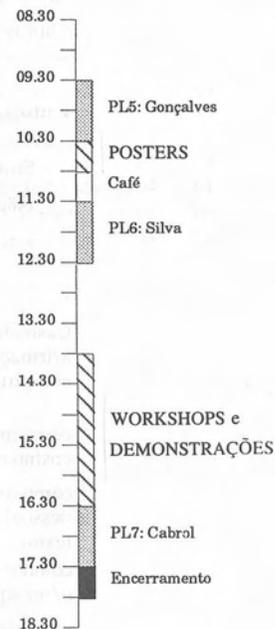
### 22 de Fevereiro, Quinta



### 23 de Fevereiro, Sexta



### 24 de Fevereiro, Sábado



## Programa do Encontro

1º dia: quinta-feira, 22 de Fevereiro de 1990

- 08.30-09.45 Registo dos participantes
- 09.45-10.00 Sessão de Abertura
- 10.00-11.00 PL1: «From percept to concept: software to think with», Judah Schwartz, Harvard University (EUA) [Presidente da mesa: Teresa Mendes]
- 11.00-11.30 Café
- 11.30-12.30 PL2: «O futuro das novas tecnologias na educação em Portugal», Luís Valadares Tavares, Coordenador Nacional do Projecto MINERVA [Presidente da mesa: António Varandas]
- 14.00-16.30 WORKSHOPS e DEMONSTRAÇÕES em sessões paralelas:

### WORKSHOPS

- 01 «Simulação molecular», Fernando M. S. Silva Fernandes
- 02 «Física qualitativa, computadores e ensino da mecânica», Vitor Duarte Teodoro
- 03 «Laboratório assistido por computador», António Melo e António Moreira Gonçalves
- 04 «Hipertexto e Hypercard», Duarte Costa Pereira e José Carlos Guedes Vaz
- 05 «Aquisição de dados no ensino secundário (utilização do computador como componente de um dispositivo experimental)», Mariana Valente, Bento Caldeira e José António Figueira
- 06 «Folhas de cálculo em Física e Química», Francisco Fraga
- 07 «A lei de Arquimedes e o computador», Maria Amália Lobo
- 08 «Simulações computacionais em Física», Carlos Fiolhais
- 09 «Modelos e aplicações em espectroscopia molecular», Paulo Ribeiro Claro
- 10 «Variação de Energia e estrutura das moléculas», Rui Fausto

- 11 «Cinemática em computador», Lurdes Rocha  
 13 «A relatividade no computador», Paulo Mendes  
 14 «TEX — um processador de texto científico», Pedro Alberto

## DEMONSTRAÇÕES (informais) DEM 01 a DEM 17

16.30-17.00 Café

17.00-18.30 COMUNICAÇÕES ORAIS [Presidente da mesa: Jorge Valadares]

*Tema 1: o computador no ensino e na aprendizagem*

- COM 101 **Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário**  
 Ramos, Ana Maria Covas, Clavel, Maria da Conceição, Ramos, Maria Fernanda,  
*Escola Secundária da Maia*
- COM 103 **TETRAHEDRON, um programa de ensino assistido por computador para química orgânica — estereoquímica**  
 Maia, Paulina, Lobo, Ana M., *Universidade Nova de Lisboa*, BARONE, René, ROGER, Meyer, *Université d'Aix-Marseille*
- COM 106 **Jogo das substâncias (jogo de computador)**  
 PAIVA, João C., GIL, Victor M. S., *Universidade de Coimbra*
- COM 107 **Projécteis, programa de simulação**  
 Sousa, Maria de Fátima, *Projecto MINERVA - Pólo do Instituto Politécnico do Porto*
- COM 109 **Uma base de conhecimento de um sistema tutorial inteligente no domínio do equilíbrio químico**  
 Orvalho, Luísa, *GETAP*, Pereira, Duarte C., *Universidade do Porto*
- COM 112 **O contributo do computador para a superação de dificuldades de aprendizagem em mecânica**  
 NETO, António, VALENTE, Mariana, *Universidade de Évora*
- COM 113 **Computadores no ensino da Física e da Química: análise multidimensional**  
 LOUREIRO, Maria João, VASCONCELOS, Nilza, *Universidade de Aveiro*

19.30 Recepção

2º dia: sexta-feira, 23 de Fevereiro de 1990

- 09.30-10.30 PL3: «The MUPPET Project: Teaching Physics with Computers», Edward Redish, Maryland University (EUA) [Presidente da mesa: António Melo]
- 10.30-11.00 Discussão de POSTERS
- 11.00-11.30 Café
- 11.30-12.30 PL4: «Hipermedia no Ensino da Química», Duarte Costa Pereira, Univ. do Porto [Presidente da mesa: Cuiça Sequeira]
- 14.00-16.30 COMUNICAÇÕES ORAIS [Presidentes da mesa: Maria Margarida Ramalho da Costa e A. Correia Cardoso]

*Tema 2: o computador como complemento do laboratório*

- COM 201 **ACRUN — programa de aquisição de dados e controlo**  
 REIS, Francisco, LOURENÇO, J., *Departamento de Tecnologia de Indústrias Químicas do LNETI*

*Tema 3: o computador como instrumento de cálculo e simulação*

- COM 309 **Uma abordagem computacional ao problema da complexidade na natureza**  
 SAINHAS, J., CORREIA DA SILVA, K. M., *Faculdade de Motricidade Humana da Universidade Técnica de Lisboa*
- COM 306 **Cálculo da estrutura de bandas em sistemas unidimensionais: super-redes e "poços quânticos"**  
 PAIXÃO, José António de C., *Universidade de Coimbra*
- COM 303 **DINTER: um simulador de processos de destilação**  
 RIBEIRO, Bernardete M., PORTUGAL, António A. T. G., *Instituto Superior Técnico*
- COM 310 **Simulação de um fluido perfeito**  
 MARQUES, Luís Filipe Correia, FIOLEAIS, Carlos, *Universidade de Coimbra*

- COM 312 **Simulação de uma curva de titulação ácido fraco - base forte**  
FERNANDES, Fernando M. S. Silva, NEVES, Leonel A. T. P., *Universidade de Lisboa*
- COM 319 **Simulação em Física fundamental**  
ALMEIDA, Abílio, *Universidade do Porto*
- COM 326 **Simulador de lentes electrostáticas**  
TEODORO, Orlando M. N. D., SANTOS, Adelino M. M., FRASER MONTEIRO, Luís, *Universidade Nova de Lisboa*
- COM 320 **Introdução aos sistemas não lineares**  
FRANCO, Idalino J. A., *Universidade Nova de Lisboa*
- Tema 4: o computador como apoio a actividades não lectivas*
- COM 404 **Um programa para análise de resultados de testes: um contributo para uma melhor avaliação no ensino**  
VALADARES, Jorge António, *Universidade Aberta*, TEODORO, Vitor Duarte, *Universidade Nova de Lisboa*

- 16.30-17.00 Café
- 17.00-18.30 DEB1: «Física e Química computacional no ensino superior», Benedito Costa Cabral, António J. C. Varandas, Nuno Ayres de Campos e António Ferreira Gomes. Moderador: Carlos Fiolhais.
- DEB2: «Novas tecnologias e mudanças curriculares no ensino secundário», António Dias Figueiredo, Jorge Valadares e António Ferrer Correia. Moderador: Vitor Duarte Teodoro.
- 20.00 Jantar do Encontro no Palácio de São Marcos

3º dia: sábado, 24 de Fevereiro de 1990

- 09.30-10.30 PL5: «Laboratório Didáctico Assistido por Computador», António Moreira Gonçalves, Universidade de Lisboa [Presidente da mesa: Manuel Barros]
- 10.30-11.00 Discussão de POSTERS
- 11.00-11.30 Café
- 11.30-12.30 PL6: «A modelação matemática nas Ciências Naturais», Jaime Carvalho Silva, Universidade de Coimbra [Presidente da mesa: António Dias de Figueiredo]
- 14.00-16.30 WORKSHOPS e DEMONSTRAÇÕES em sessões paralelas:

#### WORKSHOPS

- 01 «Simulação molecular», Fernando M. S. Silva Fernandes
- 02 «Física qualitativa, computadores e ensino da mecânica», Vitor Duarte Teodoro
- 03 «Laboratório assistido por computador», António Melo e António Moreira Gonçalves
- 04 «Hipertexto e Hypercard», Duarte Costa Pereira e José Carlos Guedes Vaz
- 05 «Aquisição de dados no ensino secundário (utilização do computador como componente de um dispositivo experimental)», Mariana Valente, Bento Caldeira e José António Figueira
- 06 «Folhas de cálculo em Física e Química», Francisco Fraga
- 07 «A lei de Arquimedes e o computador», Maria Amália Lobo
- 08 «Simulações computacionais em Física», Carlos Fiolhais
- 10 «Variação de Energia e estrutura das moléculas», Rui Fausto
- 11 «Cinemática em computador», Lurdes Rocha
- 15 «Simulação e modelação em cinética química», Miguel S. Lobo, Luís S. Lobo, Joaquim Vital, Inês Portugal

#### DEMONSTRAÇÕES DE SOFTWARE PELOS CONVIDADOS ESTRANGEIROS

- 16.30-17.30 PL7: «Le Role de l'Intelligence Artificielle dans l'Enseignement — l'Exemple de la Chimie», Daniel Cabrol, Univ. de Nice [Presidente da mesa: Victor Gil]
- 17.30-18.00 Encerramento e entrega dos prémios do concurso de software para jovens.

### Regulamento do concurso de software para jovens

- 1 O presente concurso tem como objectivo fomentar entre os jovens o gosto pela Física e pela Química, através do desenvolvimento de um projecto de programa de computador.
- 2 Podem concorrer alunos (individualmente ou em grupo) de escolas secundárias e superiores, cuja idade não exceda 25 anos em 28 de Fevereiro de 1990.
- 3 Cada aluno ou grupo de alunos poderá submeter mais do que um programa.
- 4 Apenas serão considerados programas originais, excepto se se tratar de desenvolvimentos significativos de ideias de outros autores, o que deve ser mencionado explicitamente no programa.
- 5 Os programas devem correr em qualquer dos microcomputadores correntemente utilizados nas escolas e universidades.
- 6 Juntamente com o programa deverá ser apresentado a documentação considerada necessária à sua utilização.
- 7 O Júri atribuirá um primeiro prémio e o número de menções honrosas que considerar adequado.
- 8 Os programas serão avaliados quanto à sua originalidade, fiabilidade, utilidade pedagógica e correcção científica.
- 9 Não haverá recurso da decisão do Júri.
- 10 Ao primeiro prémio será atribuído um prémio monetário no valor mínimo de cem mil escudos. Às menções honrosas poderão igualmente ser atribuídos prémios.
- 11 O Júri reserva-se o direito de não atribuir prémio(s) se os programas apresentados a concurso não apresentarem qualidade adequada.
- 12 Os concorrentes devem enviar até ao dia 31 de Janeiro de 1990 para a Comissão Organizadora do Encontro o seguinte: disquete com o programa, listagem do programa e documentação referente ao programa.
- 13 Os aspectos omissos no presente regulamento serão resolvidos pela Comissão Organizadora do Encontro.

## Comunicações

### Tema 1: O computador no ensino e na aprendizagem (101 a 114)

- Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário**
- COM 101 RAMOS, Ana Maria Covas, CLAVEL, Maria da Conceição, RAMOS, Maria Fernanda, *Escola Secundária da Maia*
- A folha de cálculo e a Física no 10º ano e no 11º ano de escolaridade do ensino secundário**
- COM 102 LOBO, Maria Amália P., *Escola Secundária da Cidade Universitária*
- "TETRAHEDRON", um programa de ensino assistido por computador para química orgânica — estereoquímica**
- COM 103 MAIA, Paulina, LOBO, Ana M., *Universidade Nova de Lisboa*, BARONE, René, ROGER, Meyer, *Université d'Aix-Marseille*
- Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade**
- COM 104 PEREIRA, Alda, GOMES, Ana, BORGES, Cesaltina, GONÇALVES, Conceição; VELOSO, Manuela Paula, *Escola Secundária de Odivelas*
- Adivinhas em Química (para o oitavo ano de escolaridade)**
- COM 105 PAIVA, João C., *Escola Secundária de Anadia*
- Jogo das substâncias (jogo de computador)**
- COM 106 PAIVA, João C., GIL, Victor M.S., *Universidade de Coimbra*
- Projecteis, programa de simulação**
- COM 107 SOUSA, Maria de Fátima, *Projecto MINERVA - Pólo do Instituto Politécnico do Porto*
- Modelos atómicos e configurações electrónicas. Programa de computador para o décimo ano**
- COM 108 PAIVA, João C., *Escola Secundária de Anadia*

- Uma base de conhecimento de um sistema tutorial inteligente no domínio do equilíbrio químico**  
COM 109 ORVALHO, Luísa, GETAP, PEREIRA, Duarte C., *Universidade do Porto*
- Sistema de tutorias por ordenador**  
COM 110 SÁA, Concepción, *Universidad de Vigo*
- Software para o ensino da Física e da Química: títulos desenvolvidos no Pólo do Projecto MINERVA da Universidade Nova de Lisboa**  
COM 111 TEODORO, Vitor Duarte, RIBEIRO, Cremilde, *Universidade Nova de Lisboa*
- O computador e o seu contributo para a superação de dificuldades de aprendizagem em mecânica**  
COM 112 NETO, António, VALENTE, Mariana, *Universidade de Évora*
- Computadores no ensino da Física e da Química: análise multidimensional**  
COM 113 LOUREIRO, Maria João, VASCONCELOS, Nilza, *Universidade de Aveiro*
- O computador na sala de aula**  
COM 114 ARAÚJO, Margarida, BARRULAS, Júlia, CUNHA, Paula C., ÍNDIAS, Margarida, PEREIRA, Fernanda, TEIXEIRA, Rosário  
*Escola Secundária de Reguengos de Monsaraz*

---

*Tema 2: O computador como complemento do laboratório (201 a 206)*

---

- ACRUN — programa de aquisição de dados e controlo**  
COM 201 REIS, Francisco, LOURENÇO, J., *Departamento de Tecnologia de Indústrias Químicas do LNETI*
- Os microcomputadores na aquisição de dados e controlo em processos bioquímicos**  
COM 202 FERREIRA, Eugénio C., DUARTE, José Cardoso, *Laboratório Nacional de Engenharia e Tecnologia Industrial*, FEYO DE AZEVEDO, S., *Universidade do Porto*
- Processos laboratoriais de Química em múltiplos idiomas**  
COM 203 SILVA, Ana A., SEITA, J. Féria., *Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro*

- Utilização do computador para visualização de ondas sonoras**  
COM 204 PINTO, Álvaro, *Escola Secundária de Pombal*
- Contribuição para o estudo da poluição do rio Este**  
COM 205 Alunos das turmas 9º H e 9º I da ES Carlos Amarante, GUIMARÃES, Leonor, MARTINS, Cristina
- Electrónica digital**  
COM 206 GASPAR, Rui F., *Projecto MINERVA, Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNL*

---

*Tema 3: O computador como instrumento de cálculo e simulação (301 a 327)*

---

- Integração de equações cinéticas e ajuste de dados**  
COM 301 FREITAS, Filomena F. M., FERNANDES, Fernando M.S.S., Albuquerque, Lídia M.P.C. *Universidade de Lisboa*
- Conjunto significativo de experiencias con el metodo OM Huckel para el "currículum" de Quimica-Fisica General**  
COM 302 CARBALLEIRA, L., *Universidade de Santiago de Compostela*
- DINTER: um simulador de processos de destilação**  
COM 303 RIBEIRO, Bernardete M., PORTUGAL, António A. T. G., *Instituto Superior Técnico*
- Utilização de pseudo-potenciais em cálculos aproximados de estruturas de bandas para fins didácticos**  
COM 304 PAIXÃO, José António de C., *Universidade de Coimbra*
- Praticas de Quimica Fisica con ordenador. I. Simulacion elemental de espectros de microondas**  
COM 305 MOSQUERA, Ricardo A., FÁBREGUES, Salvador E., CAMESELLE, José, *Universidade de Santiago de Compostela*
- Cálculo da estrutura de bandas em sistemas unidimensionais: super-redes e "poços quânticos"**  
COM 306 PAIXÃO, José António de C., *Universidade de Coimbra*

- Resolução de equações diferenciais stiff**  
COM 307 PAIS, Fátima I. C. C., PORTUGAL, António A. T. G., *Universidade de Coimbra*
- Simulação de fenómenos de transporte: coeficiente de difusão**  
COM 308 VASSILENKO, Valentina B., LARANJEIRA, Manuel F., *Universidade Nova de Lisboa*
- Uma abordagem computacional ao problema da complexidade na natureza**  
COM 309 SAINHAS, J., CORREIA DA SILVA, K. M., *Faculdade de Motricidade Humana da Universidade Técnica de Lisboa*
- Simulação de um fluido perfeito**  
COM 310 MARQUES, Luís Filipe Correia, FIOLHAIS, Carlos, *Universidade de Coimbra*
- A simulação computacional de descargas eléctricas em meios dieléctricos**  
COM 311 SILVA, Jorge Alexandre Carvalho, *Universidade Nova de Lisboa*
- Simulação de uma curva de titulação ácido fraco - base forte**  
COM 312 FERNANDES, Fernando M. S. Silva, NEVES, Leonel A. T. P., *Universidade de Lisboa*
- Método de Job para equilíbrios simultâneos — simulações por computador**  
COM 313 GIL, Victor M. S., OLIVEIRA, Nuno, *Universidade de Coimbra*
- Estado fundamental do átomo de hélio**  
COM 314 OLIVEIRA, Orlando, *Universidade de Coimbra*
- Simulação de Monte-Carlo de um gás perfeito clássico**  
COM 315 HENRIQUES, Célia, *Universidade Nova de Lisboa*
- Oscilador harmónico de dois centros**  
COM 316 NAIA, Marco, FIOLHAIS, Carlos, *Universidade de Coimbra*
- Osciladores não lineares**  
COM 317 SAMPAIO, Maria José, FIOLHAIS, Carlos, *Universidade de Coimbra*

- Simulação simples de dinâmica molecular**  
COM 318 GORDO, Paulo, *Universidade de Coimbra*
- Simulação em Física fundamental**  
COM 319 ALMEIDA, Abílio, *Universidade do Porto*
- Introdução aos sistemas não lineares**  
COM 320 FRANCO, Idalino J. A., *Universidade Nova de Lisboa*
- Demonstração do programa *Partícula na caixa***  
COM 321 MAGALHÃES, Alexandre L., *Universidade do Porto*
- Matriz de transferência discreta para o cálculo de funções de partição, valores próprios e vectores próprios**  
COM 322 RAMALHO, João Paulo, FERNANDES, Fernando, *Universidade de Lisboa*
- Simulação molecular de átomos confinados em poros**  
COM 323 BAPTISTA, António Manuel, FERNANDES, Fernando, *Universidade de Lisboa*
- Física computacional: uma experiência pedagógica no quarto ano dos cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra**  
COM 324 FIOLHAIS, Carlos, *Universidade de Coimbra*
- O jogo da incerteza**  
COM 325 NOGUEIRA, F., CALDEIRA, M. H., *Universidade de Coimbra*
- Simulador de lentes electrostáticas**  
COM 326 TEODORO, Orlando M. N. D., SANTOS, Adelino M. M., FRASER MONTEIRO, Luís, *Universidade Nova de Lisboa*
- Evolução temporal de um pacote de ondas num potencial unidimensional**  
COM 327 DIAS, José Pedro Teixeira, *Universidade de Coimbra*

Tema 4: O computador como apoio a actividades não lectivas (401 a 405)

**Apoio informático para a gestão de turmas no ensino secundário**

COM 401 PAIVA, João C., *Escola Secundária de Anadía*

**B.A.S.E. (Base de artigos e software no ensino) da Física e da Química**

COM 402 FIOLHAIS, Carlos M., PAIVA, João C., *Universidade de Coimbra*

**Dicionário técnico e representação de gráficos**

COM 403 VEIGA, E. Alte da, *Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro*

**Um programa para análise de resultados de testes: um contributo para uma melhor avaliação no ensino**

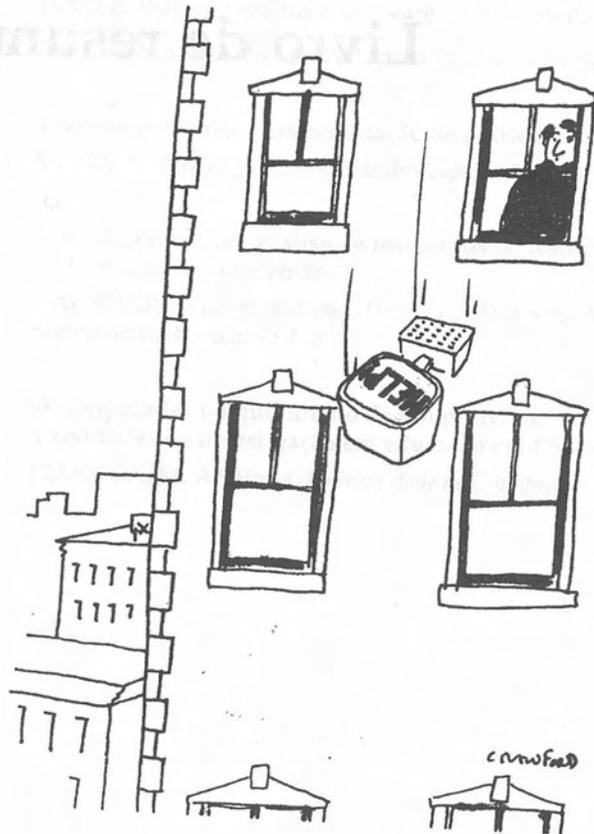
COM 404 VALADARES, Jorge António, *Universidade Aberta*, TEODORO, Vitor Duarte, *Universidade Nova de Lisboa*

**O computador no quotidiano de um professor e no desenvolvimento de actividades de investigação em educação em Física e Química**

COM 405 PEDROSA, M. Arminda, *Universidade de Coimbra*

## Livro de resumos





*As Novas Tecnologias no Ensino...*

«Utilização do computador no ensino da mecânica  
(determinação da aceleração da gravidade)»

*in* Scientific American, Janeiro de 1990

## Resumos das Conferências Plenárias

## From Percept to Concept: Software to Think with

Judah L. Schwartz  
*Educational Technology Center, Harvard Graduate School of Education*  
Harvard University, EUA

Science education can be thought of as a process of helping people to move with some agility between their perceptions of natural phenomena and the abstract and idealized conceptions we have developed that serve as the building blocks of our theories of the world around us.

Properly crafted microcomputer environments allow students to manipulate and control these abstractions while displaying output that can be made to resemble the perceived behavior of nature.

## O futuro das Novas Tecnologias na Educação em Portugal

Luís Valadares Tavares

Coordenador Nacional do Projecto MINERVA

Gabinete de Estudos e Planeamento do Ministério da Educação

Av. Miguel Bombarda, 20

1000 LISBOA

## The M.U.P.P.E.T. Project: Teaching Physics With Computers

Edward F. Redish

Department of Physics and Astronomy, University of Maryland

College Park

MD 20742

EUA

Three factors are conspiring to make a revolution inevitable in the way science and math is taught: an explosion of new knowledge, new insights into the process of learning, and the immense power and accessibility of computer technology. In the physics department at College Park, members of the Maryland University Project in Physics and Educational Technology have been investigating the implications of these factors for the teaching of introductory physics. Some of this group's work will be discussed and some of their software demonstrated.

## Hipermedia no Ensino da Química

Duarte Costa Pereira

*Pólo da Universidade do Porto do Projecto MINERVA*

Rua de Ceuta, 118, 6º

4000 PORTO

Os objectivos de ensino da Química, devem ser escalonados, por uma Sociologia da Educação adequada, numa primeira fase, de Educação pela Química ou de Química para Cidadãos e, numa outra, de Educação para a Química ou de Química para Químicos. Concentrando-nos nesta última fase, que terá como objectivos essenciais dotar o aprendiz de pensamento teórico e de criatividade no ramo para além de desenvolver atitudes de curiosidade e investigação, constata-se que muitos dos instrumentos fornecidos pelas Novas Tecnologias de Informação são extremamente adequados, quer à complexa estrutura da Química, quer ao também complexo processo da sua aprendizagem. Com efeito os progressos conseguidos em anos recentes relativamente à compreensão do fenómeno ensino/aprendizagem, bem como os avanços espectaculares em instrumentos informáticos (particularmente aqueles em que o seu uso se torna transparente), vêm abrir as portas à utilização de estratégias relativamente ambiciosas no ensino da complexa disciplina (tanto de um ponto de vista epistemológico como metodológico) que é a Química, estratégias essas ao alcance de professores com uma formação informática mínima.

Para se conseguir uma abordagem, se bem que sintética, desta problemática, segue-se uma estratégia simples em essencialmente quatro passos: em primeiro lugar (ponto 1) examinaremos a intervenção do computador no esclarecimento das complexidades epistemológicas e metodológicas da Química e a relação existente entre a Química e a Informática, seguir-se-á (ponto 2) uma caracterização da problemática da representação do conhecimento e da aprendizagem através do computador, sendo subsequentemente (ponto 3) analisado o computador como interface de aprendizagem da Química, muito especialmente três tipos de aplicações que acredito com grande potencial (que não se limita ao ensino da Química): o hipertexto, os programas de modelagem e os sistemas tutoriais inteligentes. Finalmente (ponto 4) caracterizam-se as aplicações hipermedia como congregando os melhores aspectos das anteriormente referidas e os resultados da investigação fundamental em Ciência Cognitiva e na investigação aplicada relativa à interface homem/computador.

## Laboratório didáctico assistido por computador

António Moreira Gonçalves

*Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa*

Rua Ernesto de Vasconcelos, Edifício C1, 4º

1700 LISBOA

O desenvolvimento da Física nas últimas décadas tem-se apoiado na utilização em larga escala de computadores independentemente da natureza teórica ou experimental dos estudos realizados. As novas descobertas em Física têm proporcionado o desenvolvimento de sucessivas gerações de computadores, cada vez mais pequenos, mais velozes e com maior capacidade. Esta dialectica entre Física e Ciência dos Computadores tem sido dominante nas últimas décadas. A conjugação dos conhecimentos das duas ciências tem possibilitado abrir novas áreas de desenvolvimento em instrumentação. Estes conhecimentos, e o desenvolvimento da tecnologia, não podem deixar de ter reflexos quer no modo como se ensina a Física [1,2,3], quer na natureza do que se ensina em Física [3].

A utilização do computador no instrumento de observação torna-se evidente quando é necessário:

- a) registar acontecimentos em função do tempo, sendo esta grandeza crítica para a precisão final dos resultados;
- b) representar gráfica e imediatamente os dados adquiridos;
- c) interpretar um grande volume de dados.

A aplicação didáctica mais simples do computador em laboratório consiste na observação de trajectórias com registo dos instantes em que ocorre a passagem do objecto em determinados pontos [4]. Esta pode ser detectada através da interrupção de um feixe de luz. Um detector apropriado, sensível à radiação (fotodetector), produzirá um sinal eléctrico por cada passagem de um objecto na sua frente (evento). Conhecendo a dimensão do objecto, o tempo durante o qual se verificou a interrupção do feixe luminoso permite derivar a velocidade de deslocamento no ponto da trajectória em que aquele cruzou o feixe luminoso. Utilizando vários detectores, podemos determinar em função do tempo (e para diversos pontos da trajectória) o espaço percorrido e a velocidade instantânea. Se o objecto tiver uma forma que interrompa o feixe de luz duas vezes em cada passagem, então a aceleração instantânea poderá igualmente ser derivada.

Os intervalos de tempo envolvidos poderão ser da ordem, ou mesmo inferiores, ao milissegundo. Qualquer erro de estimativa quanto ao instante em que ocorre cada evento, e quanto à duração do mesmo, produzirá erros finais que poderão impedir a interpretação dos resultados. Nestas circunstâncias torna-se conveniente a introdução de um computador dotado de interfaces de comunicação com o meio exterior que permitam detectar a ocorrência de sinais eléctricos gerados pelos fotodetectores, e que assinalam a presença ou ausência de feixe de luz.

Utilizando o relógio interno do computador, e através de um programa apropriado, podemos registar o instante e a natureza da transição de sinal ocorrida. Estes dados primários são facilmente traduzidos nos dados secundários: tempo decorrido, velocidade e aceleração. Introduzindo os espaços percorridos para cada instante (posição dos detectores) poder-se-ão apresentar os gráficos de variação das grandezas cinemáticas.

Este método experimental permite uma grande diversidade de experiências de mecânica com meios elementares, mas conduzindo à determinação de grandezas físicas com apreciável precisão. A título de exemplo consideremos o pêndulo simples [4], a máquina de Atwood [5] e a utilização de calhas e de mesas de ar [6,7]. Além disso possibilita a concepção de instrumentos novos, para estudo do movimento de rotação e do efeito da ressonância mecânica [7].

As potencialidades de utilização dos fotodetectores são diversas, possibilitando múltiplas configurações de montagem [8]. Para se proceder à interpretação dos resultados não é indispensável o conhecimento dos detalhes do processo de aquisição dos dados. É apenas necessário apreender a natureza dos fenómenos envolvidos. Por outro lado, a associação do computador torna possível a aquisição de dados durante uma aula de exposição, ou directamente pelos alunos.

A utilização dos fotodetectores obriga a que a trajectória do objecto em estudo seja conhecida previamente. Se tal não ocorrer, é necessário utilizar um sensor de posição idêntico aos utilizados nas câmaras fotográficas de focagem automática (radar ultra-sónico) [8]. O método consiste em enviar um sinal de ultrasons, e detectar o respectivo eco. Uma vez conhecida a velocidade do som, é possível determinar a distância do objecto ao detector. Realizando diversas medições em intervalos de tempo idênticos, podemos derivar as grandezas cinemáticas inerentes.

A utilização dos dois detectores referidos apenas exige do computador uma interface de comunicação com linhas de entrada do tipo digital. Se o fenómeno a estudar tiver uma variação contínua (grandeza analógica), a interface é necessariamente diferente. Suponhamos que estamos interessados na medição de uma temperatura. Os sensores a utilizar baseiam-se em grandezas físicas que variam de modo conhecido com a temperatura, como por exemplo o valor de uma resistência [5]. A queda de tensão aos terminais desta, quando ligada a uma fonte de corrente constante, varia com a temperatura. Esta tensão é lida pelo computador depois de convertida num valor numérico inteiro, através de um Conversor Analógico/Digital (ADC). Programando adequadamente o computador é possível o registo do valor da temperatura em sucessivos instantes, e a consequente representação gráfica da variação obtida. Do mesmo modo se medem outras grandezas analógicas através da mesma interface, desde que usando sensores apropriados [9].

Até aqui considerámos medidas de tempos, determinadas por sinais digitais, ou de grandezas analógicas que variam lentamente no tempo. No entanto, existe outro tipo de grandezas, de duração eventualmente curta, normalmente repetitivas, mas não necessariamente periódicas, que não pode ser registado pelos instrumentos descritos. Para registar tais

grandezas é necessário: determinar o início da análise (detectar o sinal de "trigger"); efectuar um conjunto de leituras (conversões) em intervalos de tempo igualmente espaçados e eventualmente curtos (base de tempo); e repetir a amostragem sempre que um novo "trigger" é detectado. O instrumento convencional usado para este tipo de registo é o osciloscópio. Contudo, este não permite o registo quantitativo da(s) amostragem(ns) efectuada(s), e por conseguinte, a análise posterior dos dados. Tal só é possível com um instrumento dotado de memória própria designado muito justamente "storage oscilloscope". Este pode ser emulado através de um computador, dotando-o de uma interface adequada [10]. Com este dispositivo, poderão ser analisadas, por exemplo, as ondas acústicas originadas por qualquer fonte sonora, e muito especialmente as originadas por um instrumento musical. A onda registada pode ser decomposta por análise de Fourier na componente básica e respectivos harmónicos, e os resultados imediatamente apresentados de forma gráfica.

O computador tornou-se parte integrante nos aparelhos de medida, assistindo o processo de aquisição de dados, a sua interpretação e análise posterior. A miniaturização das componentes básicas dos computadores faz com que na vida diária utilizemos os mais vulgares instrumentos assistidos por microcomputadores dedicados, sem que tal se nos torne evidente. As situações experimentais referidas têm ainda utilização em aplicações correntes na indústria, quer nos laboratórios em que se procede ao controlo de qualidade, quer directamente regulando ou executando os próprios processos repetitivos de fabrico (ou seja em robots). Nestas circunstâncias não podemos deixar de considerar, pelo menos como normal, que a mesma metodologia seja utilizada nos instrumentos de ensino. O computador é o veículo privilegiado para a observação e compreensão de muitos dos fenómenos físicos do nosso universo, o que permite repensar o processo de ensino. A utilização orientada do computador no laboratório reforçará de modo natural a componente tecnológica durante o período de formação, proporcionando aos mesmos alunos qualificação profissional obtida por via escolar, com o consequente alargamento das potencialidades de emprego.

- [1] A.M.Gonçalves, *Gazeta de Física*, 8, 65 (1985)
- [2] R.K.Thornton, *Phys. Educ.* 22, 230 (1987)
- [3] Wilson e Redish, *Phys. Today* 42, 34 (1989)
- [4] A.A.Melo, A.M.Gonçalves e M.M.Martins, *Gazeta de Física*, 10,10 (1987)
- [5] P.J.Collings e T.N.Greenslade, *Phys.Teach.* 27, 76 (1989)
- [6] N.Pereira e S.M.Quick, *Phys.Teach.* 26,172 (1988)
- [7] A.A.Melo, *Trabalhos Práticos de Mecânica*, Dep.Física, FCUL (1986)
- [8] J.M.Pearce, *Phys.Educ.* 23, 291 (1988)
- [9] J.Priest e J.Snider, *Phys.Teach.* 25, 303 (1987)
- [10] A.A.Melo, A.M.Gonçalves e M.Gonçalves, em preparação

## A modelação matemática nas Ciências Naturais

Jaime M. Carvalho Silva  
 Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra  
 Apartado 3008  
 3000 COIMBRA

Em Portugal, o ensino da Matemática encontra-se totalmente divorciado do ensino das outras ciências (Física, Química, Biologia e Geologia, etc.). Já tem sido afirmado que essa situação é gravosa e incompreensível. Do que é conhecido da proposta de novos programas de Matemática para os Ensinos Básico e Secundário, conclui-se que as aplicações da Matemática não são minimamente contempladas. Noutros países a situação não é tão drástica, embora esteja ainda longe do desejável. Por exemplo, a interdisciplinaridade é uma das palavras de ordem da reforma do ensino em França.

Discutem-se brevemente as principais razões que fundamentam a necessidade da ligação do ensino da Matemática com o das outras ciências: por um lado, a Matemática proporciona ferramentas para o desenvolvimento dessas ciências e, por outro, os problemas suscitados pelas várias Ciências originam novos desenvolvimentos em Matemática.

Apresentam-se alguns exemplos de modelos matemáticos simples que evidenciam a relação íntima entre a Matemática e as outras ciências. Esses modelos permitem reconhecer a utilidade do computador no ensino e mostram como esse novo instrumento pode oferecer plataformas de interdisciplinaridade.

## Le rôle de l'Intelligence Artificielle dans l'enseignement: l'exemple de la Chimie

Daniel Cabrol  
 Centre de Recherches Pédagogiques et de Renovation Didactique en Chimie, Université de Nice Sophia Antipolis  
 28 Avenue Valrose  
 F 06034 Nice Cedex

La manière d'envisager l'utilisation de l'informatique dans le processus d'apprentissage a considérablement évolué au cours des vingt cinq années de l'existence de l'EAO (Enseignement Assisté par Ordinateur). Après une première phase de développement rapide, l'EAO a connu une période de désillusion et suscite à nouveau de grandes espérances.

Le vocable EAO s'est imposé par analogie avec d'autres champs d'usage de l'ordinateur (Dessin DAO, Conception CAO, Publication PAO) mais il se révèle de plus en plus inadapté aux nouvelles possibilités technologiques. En effet, la communication entre l'homme et la machine n'est plus nécessairement restreinte au seul usage du clavier et de l'écran, mais devient de plus en plus multimédia. Les réseaux locaux permettent de rompre l'isolement de l'élève utilisant l'ordinateur, la télématique offre de nouveaux modes de transmission des informations et de communication.

Sur le plan logiciel on assiste aussi à des évolutions significatives. Les applications tutorielles, trop imprégnées des théories béhavioristes ne sont presque plus utilisées que pour des types d'apprentissages où elles sont efficaces, et délaissées dans les autres cas. Les techniques du génie logiciel commencent à pénétrer de domaine du logiciel éducatif, laissant espérer une plus grande productivité et une amélioration de la robustesse des didacticiels. Enfin, il devient possible d'intégrer les résultats de certaines recherches en intelligence artificielle. La tendance est à la construction de "systèmes tutoriels intelligents" qui associent deux systèmes experts, l'un spécialiste du domaine enseigné, l'autre didactique, une interface de communication et un modèle représentant l'apprenant. Suivant ce schéma, un tel système devrait être capable de dialoguer tout en adaptant sa stratégie pédagogique en fonction des connaissances de l'apprenant, de ses acquis et de ses besoins, voire de ses désirs. Le succès médiatique de cette tendance est tel qu'on peut la considérer comme une mode. En pratique on rencontre d'énormes difficultés. Dans l'état actuel des recherches, l'obstacle majeur dans la construction du modèle de l'élève qui doit être élaboré au fur et à mesure de l'interaction de celui-ci avec le système et dans l'explicitation de l'expertise pédagogique.

Nous avons choisi d'explorer un autre mode d'approche qui permet d'impliquer l'apprenant dans des activités de résolution de problèmes sans nécessiter l'élaboration préalable d'un modèle de l'élève très détaillé. On définit ainsi un nouveau type de logiciel pour la formation appelé "environnement d'apprentissage non directif" ou "partenaire de résolution de problèmes". Ce type de programme se présente comme un système informatique (éventuellement couplé à d'autres médias, vidéolecteur, magnéscope, ...) susceptible d'aider l'utili-

sateur dans la phase de résolution d'un problème. Ce problème peut être imposé par le système ou non, être choisi ou être entièrement défini par l'apprenant.

Le partenaire de résolution n'est pas destiné à résoudre le problème à la place de l'apprenant mais doit pouvoir le guider à tout moment en fonction de ses acquis et de ce qu'il a ou ce qu'il n'a pas fait à un moment donné. En fonction du contenu abordé, un tel système peut comporter:

- une base de données interactive capable de répondre aux besoins de documentation;
- un système capable de prendre en charge certaines phases de la résolution du problème;
- des moyens de visualisation et de traitement;
- des modules de simulation;
- un module de conseil didactique capable de guider l'apprenant dans sa démarche en fonction de ses acquis;
- un superviseur qui contrôle en permanence le travail de l'apprenant.

Dans cette conférence on dressera le tableau des possibilités nouvelles offertes par les évolutions technologiques, on analysera les difficultés auxquelles on se heurte lorsqu'on cherche à construire des "systèmes tutoriels intelligents" en Chimie, puis on présentera le mode d'approche que nous avons adopté dans plusieurs projets en cours de développement.

## Resumos dos workshops

## Simulação molecular

Fernando M. S. Silva Fernandes  
Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
Rua Ernesto de Vasconcelos, Edifício C1, 3º  
1700 LISBOA

O objectivo desta workshop é introduzir os métodos da Dinâmica Molecular e de Monte Carlo aplicados ao estudo de sistemas sólidos e fluídos.

Ambos os métodos são, actualmente, de importância fundamental no ensino e na investigação em Química e Física, bem como em áreas industriais afins.

Após uma breve introdução teórica, com o suporte de textos de apoio, os participantes terão oportunidade de praticar com :

1. Programas simples que apenas requerem a utilização de microcomputadores.

Estes programas são aplicados a modelos ideais e, através da visualização no ecrã, estudam :

- a) A fusão dum microagregado molecular bidimensional.
- b) A reversibilidade das equações de Newton.
- c) A evolução da estrutura dum sistema bidimensional de discos rígidos, através das suas configurações e da função de distribuição radial.

2. Programas mais complicados que requerem a utilização de computadores mais poderosos.

Estes programas são aplicados a modelos realistas e :

- a) Ilustram como, através da simulação computacional, se podem calcular as propriedades termodinâmicas dum sistema : energias, temperatura, pressão, capacidade calorífica,

coeficiente de compressibilidade, etc.

- b) Analisam a estrutura estática e dinâmica dos sistemas através do cálculo, e visualização no ecran, das funções de distribuição radial, desvios quadráticos médios e funções de autocorrelação da velocidade.

**NOTA :** É importante que os participantes nesta workshop tenham conhecimentos numa linguagem de programação ( BASIC, FORTRAN ou Pascal ) e que leiam os textos de apoio.

## Física qualitativa, computadores e ensino da mecânica

Vitor Duarte Teodoro  
Faculdade de Ciências e Tecnologia (UNL)  
2825 MONTE DE CAPARICA

Todos os professores conhecem as dificuldades que os alunos do ensino secundário e do ensino superior manifestam na compreensão de conceitos fundamentais de Física, em particular dos conceitos da mecânica. Estas dificuldades têm sido investigadas nos últimos anos, tendo sido propostas diversas estratégias alternativas que as procuram ter em conta. Nesta sessão serão apresentadas algumas dessas estratégias que têm como base a utilização de programas de computador desenvolvidos pelo autor (CINEMÁTICA, ESPAÇO E POSIÇÃO, PROJECTEIS e NEWTON). Essas estratégias reflectem a necessidade de ensinar Física para *simples mortais* (Joanne Striley)... em lugar de ensinar uma Física formal e algorítmica.

## Laboratório assistido por computador

António Almeida Melo e António Moreira Gonçalves  
 Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
 Rua Ernesto de Vasconcelos, Edifício C1, 4º  
 1700 LISBOA

Um instrumento de aquisição e análise de dados, constituído por um computador IBM-PC compatível dotado de uma interface digital, ao qual se ligam diversos fotodetectores, permite estudar a cinemática do movimento. Os fotodetectores assinalam a passagem do objecto em estudo por diversos pontos de uma trajectória, previamente definida. O registo dos instantes em que a passagem ocorre, assim como do tempo que a mesma demora em função da dimensão e forma do objecto, permite caracterizar o movimento, e deduzir as grandezas cinemáticas. Conforme a montagem utilizada, outras grandezas mecânicas poderão ainda ser determinadas. A precisão do relógio é inferior ao milissegundo, o que garante a precisão das medidas efectuadas.

O dispositivo experimental utilizado permite grande diversidade de experiência. Aplicado ao estudo do pêndulo simples permite verificar a variação do período de oscilação, a diminuição da velocidade máxima com o tempo, o isocronismo das pequenas oscilações e mesmo deduzir experimentalmente a lei do pêndulo. Do mesmo modo, com uma máquina de Atwood construída com tubos, nozes de ligação e uma roldana, é possível determinar a aceleração da gravidade. Utilizando uma calha de ar pode verificar-se a cinemática da colisão, a conservação do momento linear, e simultaneamente a diminuição de energia cinética dos corpos em movimento. Utilizando montagens originais permite o estudo do movimento de rotação ou do efeito da ressonância mecânica.

O programa de exploração (interface de utilização) permite a modificação das condições de aquisição dos dados, e deste modo o projecto de novas experiências.

Usando o mesmo computador IBM-PC compatível dotado de uma interface com um conversor analógico/digital, ao qual se encontra ligado um sensor apropriado, pode estudar-se com a variação da temperatura de um líquido com o tempo. Programando adequadamente o computador é possível o registo do valor da temperatura em sucessivos instantes, e a consequente representação gráfica da variação obtida, permitindo a discussão e análise dos resultados.

## Hipertexto e Hypercard

Duarte Costa Pereira e José Carlos Guedes Vaz  
 Pólo da Universidade do Porto do Projecto MINERVA  
 Rua de Ceuta, 118, 6º  
 4000 PORTO

Em hipertexto, forma não-linear de apresentação da informação, que se caracteriza por atribuir ao utente, e não mais ao criador, a escolha da informação a explorar e da ordem do seu processamento, um documento deixa de ser encarado como uma sequência rígida de pequenas unidades (frases, parágrafos e imagens) que por sua vez formam grandes esquemas, caracterizadores da estrutura global, passando a ser tratado como uma complexa rede de "blocos", autónomos mas ligados. Nesta rede as ligações não se fazem só, e como tradicionalmente, do texto para as imagens, mas também no sentido inverso, dando origem a uma linguagem com sintaxe própria.

Quanto à apresentação, muitas soluções existem, podendo, no entanto, apresentar-se dois tipos principais: o interface em que é apresentada ao utente uma combinação de textos e gráficos, a que chamaremos interface gráfica, com "pontos quentes", geralmente designados por botões e o outro extremo em que são explicitamente representados os nodos conceptuais e as relações entre eles devidamente caracterizadas, a que chamaremos interface de rede. Optando pela interface gráfica, haverá que decidir entre uma apresentação contínua (em scrolling) do texto com imagens caso da aplicação Guide da Owl, ou uma apresentação discreta em quadros ou "cartões", caso da aplicação Hypercard da Apple ou Supercard da Silicon. No primeiro caso, terá excepcional importância o uso das técnicas de relevo tipográfico enquanto que no segundo terá de se evoluir no sentido da definição de uma linguagem audio-visual para a imagem ecrã, que poderá seguir a habitual metáfora do topo de secretária usada nos computadores ou outras mais adequadas à função da informação, como por exemplo a metáfora da viagem.

Há sistemas de hipertexto bastante sofisticados que prevêm a ligação a uma grande variedade de media tais como documentos, gráficos, audiovisuais e até mesmo a outras aplicações.

Até ao momento, as atenções têm-se centrado no design e desenvolvimento de sistemas de hipertexto, não existindo quase nenhuma investigação, sobre o efeito que este novo tipo de sistemas produz nos processos de leitura e compreensão de textos. Poderiam no entanto levantar-se inúmeras questões dignas de investigação, quer no que se refere ao design, quer aos efeitos cognitivos da utilização deste tipo de sistemas.

Este workshop, debruça-se sobre questões levantadas no processo de construção de um documento usando as aplicações atrás referidas de hipertextos com interfaces gráficas.

## Aquisição de dados no ensino secundário (Utilização do computador como componente de um dispositivo experimental)

Bento Caldeira, José António Figueira, Mariana Valente  
Projecto MINERVA, Universidade de Évora  
7000 ÉVORA

R. Driver (1988) refere-se à importância da experimentação na construção de «pontes» para novas concepções. É nesta perspectiva que as nossas actividades têm sido desenvolvidas.

A nossa abordagem pretende dar ênfase aos aspectos do trabalho prático que promovam 1) o desenvolvimento da compreensão conceptual e da habilidade intelectual e 2) o desenvolvimento do pensamento criativo e da capacidade de resolver problemas (Hofstein, 1988).

O computador é integrado como componente nos dispositivos experimentais facilitando assim algumas tarefas e permitindo mais facilmente, uma vez que não estamos muito preocupados com a recolha e o registo de dados (embora estas sejam tarefas importantes no trabalho experimental), a exploração de relações e o estabelecimento de «pontes» para novas abordagens.

Durante o *workshop* serão propostas actividades, a serem desenvolvidas em grupo, no âmbito da mecânica, termodinâmica e óptica.

DRIVER, R. (1988). Theory into practice II: a constructivist approach to curriculum development [in FENSHAM, P. (ed). Development and Dilemmas in Science Education], London: The Falmer Press

HOFSTEIN, A. (1988). Practical work and science education II [in FENSHAM, P. (ed). Development and Dilemmas in Science Education], London: The Falmer Press

## Folhas de cálculo em Física e Química

Francisco Fraga  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

As folhas de cálculo ("spreadsheets") são dos programas genéricos mais populares e úteis para computadores pessoais no ensino. Vocacionadas para análise económica e utilizações essencialmente comerciais, muito cedo o seu grande potencial de utilização ultrapassou estes campos, sendo hoje uma ferramenta muito utilizada em aplicações diversas no ensino e na investigação.

A popularidade da utilização de folhas de cálculo no ensino deve-se ao facto de estas permitirem fazer simulações e resolver problemas com o auxílio do computador sem necessidade de utilizar uma linguagem de programação, portanto com um investimento reduzido de esforço de aprendizagem, e às extensões gráficas pré-definidas existentes nas folhas de cálculo mais divulgadas. É também de realçar a sua utilidade como ferramenta de apresentação de resultados.

Com o auxílio de uma folha de cálculo, imediatamente após uma curta introdução ao programa ou uma leitura do capítulo de introdução do manual, o utilizador pode realizar trabalho útil e ver graficamente os resultados. A facilidade de utilização da folha de cálculo é muito auxiliada pelo ambiente de uso "amigável" do programa, particularmente os menus de selecção e a tecla de ajuda sempre disponível.

Nesta sessão vai ser utilizada a folha de cálculo LOTUS 123 para computadores pessoais IBM compatíveis, que é indicada como o programa de maiores vendas para computadores pessoais nos USA.

Na primeira parte será feita uma introdução genérica às folhas de cálculo e explicado o modo de edição e algumas funções do LOTUS 123, assim como a utilização do modo gráfico. Após esta curta apresentação realiza-se uma sessão prática em que será criada uma folha de cálculo para simulação de uma experiência e comparação com dados "laboratoriais". Vão igualmente ser apresentados alguns exemplos de folhas de cálculo já desenvolvidas para aplicações no ensino da Física e da Química.

## A lei de Arquimedes e o computador

Maria Amália Puga Lobo  
Escola Secundária da Cidade Universitária  
Av. Prof. Aníbal Bettencourt  
1600 LISBOA

Com base num artigo publicado por investigadores belgas da Universidade de Liège, um grupo de alunos e professores ligados ao Pólo do Projecto MINERVA do Departamento de Educação da Faculdade de Ciências de Lisboa desenvolveu um programa para microcomputadores que simula situações experimentais relacionadas com a lei de Arquimedes. Paralelamente ao desenvolvimento desse programa, foi elaborada documentação de apoio à sua exploração, constituída sobretudo por Fichas de Trabalho.

Através da utilização do programa e das Fichas de Trabalho pretende-se que os alunos investiguem quais os factores que influenciam a impulsão e, numa fase posterior, enunciem a lei de Arquimedes.

Para além do valor intrínseco do produto final obtido, esta experiência, realizada na Escola Secundária da Cidade Universitária, constituiu um exemplo de como é possível elaborar "software" educativo.

No presente "workshop" pretende-se que os participantes explorem o programa e a documentação de apoio por forma a permitir a análise e crítica dos mesmos. Pretende-se ainda aproveitar estes espaços para uma breve reflexão sobre o valor deste tipo de "software" educativo bem como sobre as questões que se prendem com a sua elaboração.

## Simulações computacionais em Física

Carlos Fiolhais  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

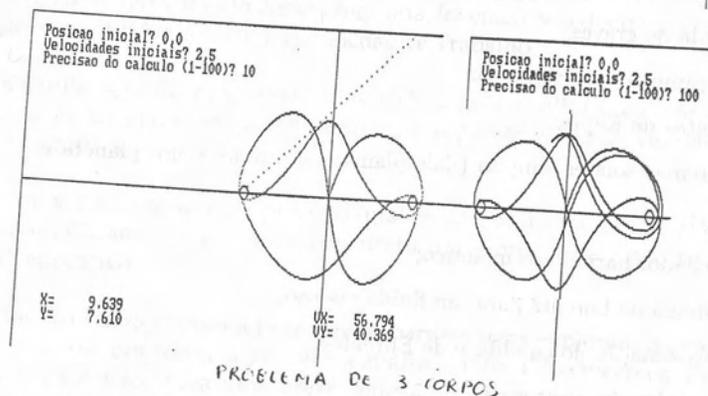
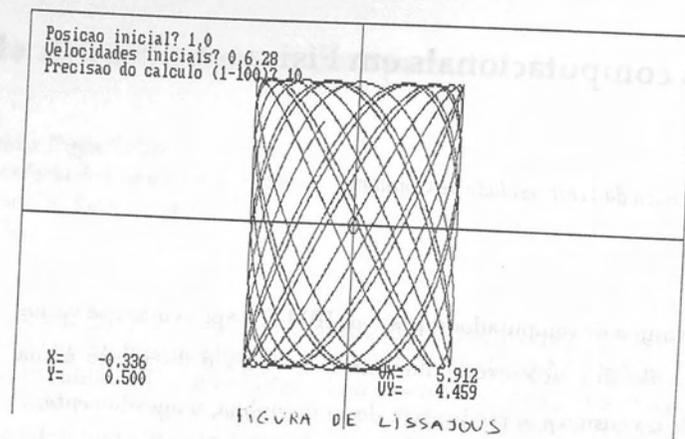
Com ajuda de computadores pessoais IBM-PC apresentam-se vários exemplos de simulações computacionais em física e discute-se a sua utilidade no ensino e aprendizagem dessa disciplina, nomeadamente:

- queda de graves;
- lançamento de projecteis;
- órbitas de Kepler;
- sistemas solares simples (dois planetas e um sol e um planeta e dois sois);
- oscilador harmónico quântico;
- sistema de Lorentz para um fluido viscoso;
- aproximação do equilíbrio de Ehrenfest;
- caminhantes aleatórios.

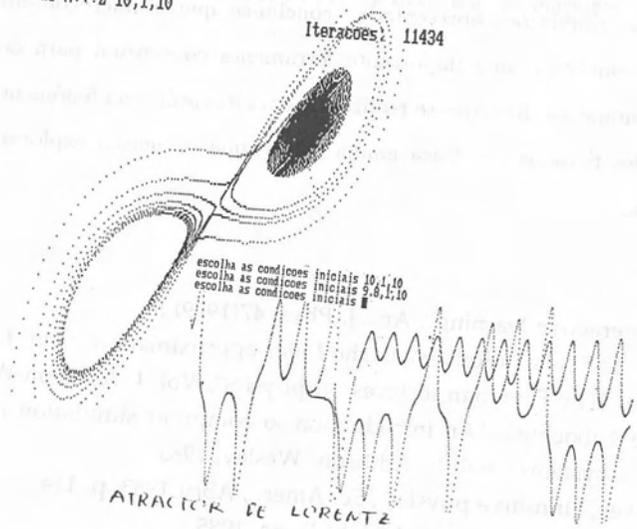
Das simulações apresentadas conclui-se que o microcomputador pode constituir uma importante ferramenta conceptual para descrever fenómenos dificilmente realizáveis em laboratório ou fenómenos em mundos fictícios. A física ganha assim uma dimensão explorativa e lúdica.

### Bibliografia:

- A. Bork, "Interactive learning", Am. J. Phys. 47(1979) 5  
A. Cromer, "Stable solutions using the Euler approximation", Am. J. Phys. 49 (1981) 455  
R. Feynman, "The Feynman lectures on physics", Vol. I, Addison-Wesley, 1963  
H. Gould e Tobochnik, "An introduction to computer simulation methods-application to physical systems", vol. 1, Addison-Wesley, 1988  
M. McCloskey, "Intuitive physics", Sc. Amer., Abril 1983, p. 114  
L. Epstein, "Thinking Physics", Insight Press, 1985



Valores iniciais de X,Y,Z 10,1,10



## Modelos e aplicações em espectroscopia molecular

P. J. A. Ribeiro Claro  
 Departamento de Química da Universidade de Coimbra  
 3000 COIMBRA

A utilização do computador como auxiliar no ensino de conceitos fundamentais em espectroscopia molecular é ilustrada com dois programas de utilização simples.

O programa ANIMAIS<sup>1</sup> é, na sua origem, um jogo interativo de perguntas e respostas, durante o qual o computador "aprende" com o utilizador, aumentando progressivamente a sua capacidade de resposta. O programa utiliza variáveis dinâmicas de tipo ponteiro, disponíveis na linguagem Pascal, para construir diagramas dicotómicos. A sua estrutura extremamente acessível permite a fácil adaptação do programa a variados temas que admitam opções dicotómicas, como, por exemplo, a simetria molecular.

O programa MODELO<sup>2</sup> estabelece uma relação elucidativa entre a estrutura das moléculas e a observação experimental, recorrendo a modelos interpretativos simples da espectroscopia rotacional, vibracional e electrónica. Através do programa, o utilizador pode observar a relação entre os parâmetros estruturais de uma molécula - como um comprimento de ligação - e o seu espectro nas regiões de microondas, infravermelho e ultravioleta. Deste modo é ilustrada a importância do modelo interpretativo como ponte entre os resultados espectroscópicos e a estrutura molecular e, simultaneamente, a necessidade de proceder a uma selecção da técnica experimental mais adequada para a obtenção da informação experimental pretendida.

- 1- Teixeira Dias, J.J.C., Ribeiro Claro, P.J.A., Fausto, R., e Batista de Carvalho, L.A.E. "Pascal: programação e aplicações", Livraria Minerva, Coimbra, 1988.
- 2- Ribeiro Claro, P.J.A., Departamento de Química, P-3049 COIMBRA

## Variação de energia e estrutura das moléculas

Rui Fausto

Departamento de Química da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

As diferentes interações interatómicas numa molécula determinam a geometria e a energia correspondente às suas várias conformações possíveis. Por sua vez, a reactividade e as propriedades macroscópicas das substâncias dependem, em última análise, da proporção relativa das diferentes conformações das suas moléculas individuais. Assim, a determinação da geometria molecular, dos diversos tipos de interações interatómicas e das energias correspondentes às várias conformações assume uma importância fundamental no domínio da Química.

De entre os métodos disponíveis para a realização de estudos estruturais e conformacionais, o método mecânico-molecular assume especial relevo pela sua simplicidade e versatilidade. Tratando-se de um método clássico, de características essencialmente empíricas, é facilmente compreensível e generalizável a sistemas moleculares progressivamente complexos, sem necessidade de reformulação dos seus princípios fundamentais. Por outro lado, a sua grande eficiência computacional torna-o um método vocacionado para o estudo de sistemas de dimensão apreciável.

Apesar das suas consideráveis vantagens relativamente aos métodos que recorrem aos princípios da mecânica quântica, particularmente as relacionados com a sua facilidade de implementação em pequenos computadores pessoais e a sua inerente simplicidade conceitual, o método mecânico-molecular não se encontra ainda suficientemente divulgado junto dos que têm a seu cargo o ensino da Química a nível médio.

Nesta demonstração serão apresentados dois programas destinados à realização de cálculos de mecânica molecular (NBI e CFF), de complexidade consideravelmente distinta. O programa NBI [1] adopta um modelo simplificado, recorrendo à utilização de uma função de energia potencial molecular simples, e à aproximação do rotor-rígido para pesquisar as conformações mais estáveis das moléculas em estudo; o seu uso permitirá estabelecer um primeiro contacto com o método de estudo considerado. Por seu lado, o programa CFF [2] corresponde a um nível de desenvolvimento do método muito mais elaborado, tratando-se, de facto, de um dos programas mais completos para este tipo de estudos disponíveis no mercado internacional; a sua utilização permitirá demonstrar algumas das potencialidades mais relevantes da mecânica molecular.

A utilização de um terceiro programa (ARFF [3]) permitirá ainda considerar uma técnica particular de análise de resultados de estudos conformacionais (energia vs. estrutura molecular), efectuando a decomposição de perfis de energia potencial associados a rotações internas numa molécula em termos das suas componentes de Fourier. É possível, por este meio, separar a contribuição das diferentes interações para a variação da energia molecular que acompanha uma dada rotação interna. Por seu turno, esta separação possibilita uma análise mais detalhada das várias interações presentes e o estabelecimento de importantes correlações energia/ estrutura molecular.

### Referências

- [1] R.Fausto e J.J.C.Teixeira-Dias, Dep. Química F.C.T.U.C., P-3049 Coimbra.
- [2] S. R. Niketic and Kj. Rasmussen, Chem. Dep. Technical Univ. of Denmark, DK-2800 Lyngby.
- [3] L.A.E.Batista de Carvalho, R.Fausto e J.J.C.Teixeira-Dias, Dep. Química F.C.T.U.C., P-3049 Coimbra.

## Cinemática em computador

Maria de Lurdes Rocha

Escola Secundária Fernão Mendes Pinto  
2800 ALMADA

Pretende-se com este *workshop* mostrar a utilização do computador como instrumento de trabalho nas aulas de Físico-Químicas. Apresentam-se novas estratégias utilizadas no ensino da cinemática das partículas com uso do computador. Os programas utilizados permitem a simulação de movimentos, a representação gráfica de diversas variáveis, e o estudo qualitativo dos movimentos.

Os participantes explorarão ainda, com uso de um programa específico, uma nova abordagem dos conceitos fundamentais da mecânica das partículas.

## A relatividade no computador

Paulo J. B. Mendes

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Quando Einstein publicou, em 1905, o artigo onde expôs a teoria da relatividade restrita, o veículo mais rápido acessível à maioria das pessoas era o comboio. Hoje em dia, os aviões comerciais movem-se a velocidades dez vezes maiores e os veículos mais rápidos feitos pelo homem (os foguetões espaciais) movem-se a velocidades cem vezes maiores. No entanto estas velocidades são apenas cerca de um milhão de vezes menores que a velocidade da luz. Embora a relatividade restrita tenha consequências no nosso dia a dia, não podemos experimentar directamente os fenómenos por ela descritos.

Nesta "Workshop" pretende-se mostrar o funcionamento de programas para computadores pessoais (Macintosh ou IBM) que simulam o mundo do muito rápido, programas que, de um certo modo, compensam a nossa impossibilidade de ter experiências directas neste mundo. Para a aprendizagem eficiente deste assunto é importante que os estudantes manipulem os modelos sem se perderem em pormenores técnicos da simulação. Isto é assegurado nestes programas apresentando-os como utilidades gráficas interactivas, de simples utilização, com os quais os estudantes efectuem trabalho de casa e projectos pessoais. Estes programas foram desenvolvidos por Edwin F. Taylor e colaboradores do M.I.T.<sup>1</sup> e têm sido utilizados no M.I.T. e noutras universidades como apoio a cursos introdutórios à relatividade.

### OS PROGRAMAS

VISUAL APPEARANCE (só existe ainda em versão para IBM ou compatíveis) é um programa de demonstração que mostra uma paisagem rudimentar do ponto de vista de um passageiro de um foguete que se pode mover a qualquer velocidade até à velocidade da luz. A paisagem é formada por quatro figuras geométricas coloridas: um cubo grande, um cubo pequeno, uma pirâmide e um paralelepípedo. A velocidades relativas elevadas estes objectos aparecem distorcidos e rodados. Em monitores EGA pode-se ver as mudanças de cor por efeito Doppler.

SPACETIME é um programa que combina quatro janelas que partilham os mesmos dados. A primeira janela—"posição versus velocidade"—tem uma auto-estrada de pistas múltiplas ("Highway") na qual se podem mover relógios, réguas, fotões de luz e um Vai-Vem que pode mudar de pista em qualquer instante. A segunda janela—"posição versus tempo"—mostra um diagrama

espaço-tempo convencional, mostrando os acontecimentos e as linhas de mundo dos objectos que se movem na auto-estrada. O utilizador pode colocar objectos e acontecimentos na auto-estrada e colocar acontecimentos, cones de luz e hipérbolas invariantes no diagrama espaço-tempo, pode avançar o tempo por intervalos para a frente ou para trás, viajar em qualquer objecto na auto-estrada (excepto fotões), e transformar o diagrama espaço-tempo de um sistema de referência para outro. A terceira janela divide o ecrã de modo a mostrar simultaneamente a auto-estrada e o diagrama espaço-tempo à medida que o tempo é mudado. A janela final é uma tabela com dados numéricos para cada acontecimento e objecto.

COLLISION é um programa que permite simular colisões relativistas, transformações, decaimentos e aniquilação de partículas que se movem em uma ou duas dimensões. O programa mostra três janelas interligadas. A primeira é uma tabela na qual o operador entra os valores conhecidos das massas, energia e quantidade de movimento de cada partícula incidente e emergente (todas as grandezas estão nas mesmas unidades). O operador pode dar números ou relações algébricas simples entre os valores (por exemplo,  $3x$  para a energia de uma partícula e  $x$  para a energia de outra partícula). Quando solicitado o programa tenta completar a tabela fornecendo mensagens acerca das leis e equações que tiver utilizado em cada passo. A colisão completa pode então ser observada como um filme, quer continuamente, quer avançada para a frente ou para trás passo a passo. Diagramas tridimensionais mostram a energia versus quantidade de movimento  $x$  e  $y$  de cada partícula, bem como os valores totais, antes e depois da interacção. O operador pode rodar estes diagramas para uma melhor visualização. Qualquer das três janelas pode ser transformada para o sistema de referência de repouso de qualquer das partículas (excepto fotões), para o sistema de referência de quantidade de movimento total zero ou para um sistema de referência que se mova a uma velocidade arbitrária (menor que a da luz) no plano da colisão.

<sup>1</sup>Edwin F. Taylor, "Space-time software: Computer graphics utilities in special relativity", Am. J. Phys. 57 (6), June 1989.

## T<sub>E</sub>X — um processador de texto científico

Pedro Almeida Vieira Alberto  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

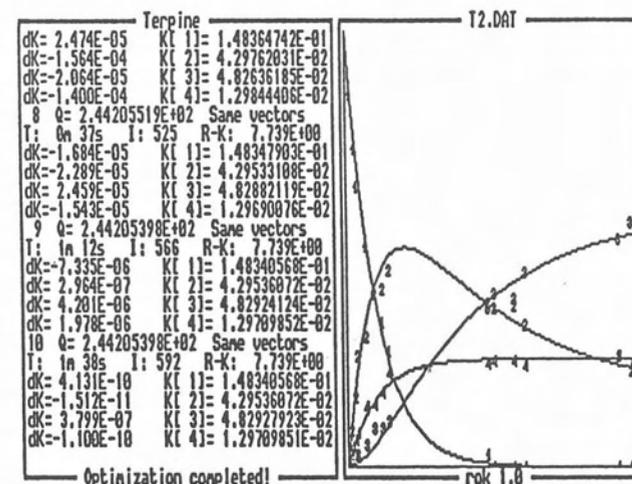
É apresentado o programa T<sub>E</sub>X, que se tem vindo ultimamente a tornar no formata-  
dor de texto mais utilizado para produzir texto científico. Descreve-se sumariamente a sua  
filosofia de funcionamento e dão-se exemplos de como se podem obter expressões matemáticas  
complexas. É exemplificada a utilização de “macros” como meio de desenvolver um ambi-  
ente à medida do utilizador, referindo-se a este propósito os “pacotes” de macros L<sub>A</sub>T<sub>E</sub>X e  
A<sub>M</sub>S-T<sub>E</sub>X.

## Simulação e modelação em Cinética Química

Miguel S. Lobo, Inês Portugal, Joaquim Vital e Luís S. Lobo  
Departamento de Química da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

O programa ROK escrito em Pascal para computadores PC faz o ajustamento de modelos  
cinéticos a dados experimentais. Está baseado num algoritmo robusto que combina inte-  
gração numérica por Runge-Kutte e o método de Powel para optimização dos parâmetros. A  
interacção com o utilizador está facilitada pela utilização de menus e apresentação dos  
resultados (numérica e graficamente) em janelas simétricas. Dada a sua facilidade de utili-  
zação e robustez, o programa está já a ser usado por vários grupos universitários, podendo ser  
obtido através do Quantum Chemistry Program Exchange, QCGMPO68, Indiana University  
(EUA).

Os programas CINETICA N e REACCIONES M permitem o estudo do comportamento de  
modelos cinéticos num microcomputador Spectrum. Exista a possibilidade de introduzir  
dados experimentais e efectuar o ajustamento visual. Têm sido largamente utilizados no  
ensino da cinética e engenharia das reacções químicas.



## Resumos das comunicações

### Tema 1: O computador no ensino e na aprendizagem (101 a 114)

## Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário

RAMOS, Ana Maria Covas, CLAVEL, Maria da Conceição, RAMOS, Maria Fernanda  
Escola Secundária da Maia  
4470 MAIA

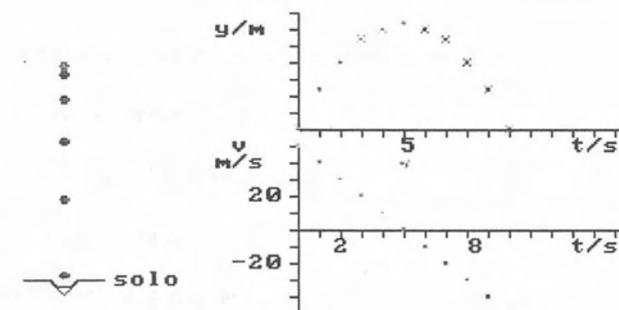
A existência do Centro Escolar Minerva nalgumas Escolas, o uso cada vez mais generalizado do computador, a facilidade de adaptação dos jovens a esta "nova" máquina e as carências de material didáctico nos laboratórios de outras Escolas, foram as principais motivações para o trabalho que nos propusemos realizar.

Começamos o nosso trabalho pela Cinemática tentando que ele servisse de apoio aos programas curriculares do 10º Ano; foi utilizada a nova versão do Logowriter, como linguagem de programação, por nos parecer uma linguagem acessível ao ponto de permitir aos alunos mais interessados a elaboração dos seus próprios programas, em actividades extra-lectivas.

Elaboramos, assim, um conjunto de 12 programas simples, em computador, acompanhado das respectivas fichas de trabalho. O principal objectivo destes programas é criar, nos alunos, hábitos de reflexão sobre conceitos fundamentais de Física, contribuir para o desenvolvimento do seu raciocínio e tentar despertar, através desta via, que ainda os atrai, o seu gosto por esta disciplina.

Também foi nosso objectivo fazer, sempre que possível, o estudo gráfico das diferentes situações.

Por exemplo, na simulação correspondente ao movimento vertical dos graves, quando a bola é lançada de baixo para cima, à medida que a sua posição e a sua velocidade vão variando, também vão sendo assinalados nos gráficos  $(t, y)$  e  $(t, v)$ , com intervalos de tempo de 1s, os pontos correspondentes às posições e às velocidades da bola.



Verificou-se que os alunos relacionaram mais facilmente as variáveis posição e velocidade com a variável tempo, o que lhes permitiu uma melhor interpretação de gráficos.

Os programas e as fichas de trabalho podem ser utilizados como apoio às aulas, na compreensão dos conceitos programáticos ou em revisão dos mesmos conceitos, em grupos de 2 ou 3 alunos por computador.

À excepção da ficha nº 12, todas as outras fichas foram testadas, tanto em aulas do 10º Ano e do 1º Ano Complementar Nocturno, como em revisões no 2º Ano Complementar Nocturno.

A opinião dos alunos do 2º Ano Complementar Nocturno, relativamente às revisões, foi extremamente favorável à utilização do computador para este fim.

Como complemento à utilização destes programas em ambiente de aula, estamos a trabalhar com um grupo de alunos do 10º Ano, em actividades extra-lectivas, tendo-lhe sido apresentadas algumas propostas de trabalho, no sentido de serem os próprios alunos a elaborarem programas semelhantes aos que utilizaram na aula.

Citamos, como exemplo, uma destas propostas : " construa um programa em que a tartaruga se mova em movimento uniforme numa trajectória rectilínea e horizontal, aplicando a equação horária correspondente".

Temos verificado que os alunos envolvidos neste trabalho compreendem melhor o significado físico das equações aplicadas.



## A folha de cálculo e a Física no 10º ano e no 11º ano de escolaridade do ensino secundário

LOBO, Maria Amália P.  
Escola Secundária da Cidade Universitária  
Av. Prof. Aníbal Bettencourt  
1600 LISBOA

Descrevem-se três experiências sobre a utilização da folha de cálculo, do Supercalc 4 neste caso, no estudo da Física, nos 10º e 11º anos de escolaridade do ensino secundário, realizadas na Escola Secundária da Cidade Universitária:

- 1ª - A folha de cálculo no estudo das primeira e segunda leis da dinâmica, no 10º ano de escolaridade.
- 2ª - A folha de cálculo no estudo da lei do trabalho e energia, no 10º ano de escolaridade.
- 3ª - A folha de cálculo no estudo do potencial eléctrico, no 11º ano de escolaridade.
- 4ª - A folha de cálculo na resolução de problemas de Física.

Em relação a cada uma destas experiências referem-se:

- 1 - os objectivos da experiência.
- 2 - as condições em que a experiência decorreu.
- 3 - as actividades propostas.
- 4 - o balanço/reflexão da experiência.

## "TETRAHEDRON", um programa de ensino assistido por computador para Química Orgânica — estereoquímica

MAIA, Paulina, LOBO, Ana M.

Universidade Nova de Lisboa

2825 MONTE DE CAPARICA

BARONE, René, ROGER, Meyer

Laboratoire de Chimie Inorganique Moléculaire, Faculté des Sciences de St. Jérôme, Université d' Aix-Marseille

As dificuldades dos estudantes na aprendizagem da estereoquímica têm sido detectadas e verificam-se em particular nas tarefas que exigem visualização no espaço. No entanto, verifica-se uma escassez de programas de EAC para este domínio, e sobretudo de programas que aliem exercícios de pergunta resposta com ilustrações dinâmicas do movimento a visualizar pelo estudante.

O desenvolvimento do programa TETRAHEDRON teve como objectivo a criação de um meio de facilitar o processo de ensino/aprendizagem da estereoquímica que permitisse criar situações de trabalho inovadoras.

Este programa, que corre em computadores AppleII, destina-se a alunos com conhecimentos básicos de estereoquímica. Permite-lhes desenvolver e testar os seus conhecimentos no que diz respeito à interpretação dos diagramas bidimensionais mais comuns em química (representações em perspectiva e projecções de Newman e Fischer) e à metodologia da especificação de centros quirais e ligações duplas.

Dado que os exercícios são gerados ao acaso, partindo de conjuntos de substituintes e orientações das representações previamente estabelecidos, o aluno pode usar o programa por tanto tempo quanto necessário e ao seu próprio ritmo. É ainda possível utilizar o programa nas aulas, ou fora delas para trabalho individual.

As respostas dadas pelos estudantes são imediatamente comentadas pelo programa com uma explicação sobre o raciocínio correcto a efectuar. Estes comentários são ilustrados com uma representação dinâmica do movimento que o aluno deveria visualizar sempre que isso contribua para a sua clareza.

O facto de aliar exercícios de pergunta resposta a uma ilustração dinâmica do movimento constitui a característica principal e mais inovadora deste programa que tem sido utilizado por alunos tendo as respectivas reacções sido globalmente positivas.

## Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10<sup>o</sup> ano de escolaridade

PEREIRA, Alda, GOMES, Ana, BORGES, Cesaltina, GONÇALVES, Conceição; VELOSO, Manuela Paula  
Escola Secundária de Odívetas  
Av. Abreu Lopes  
2675 ODIVELAS

São conhecidas as dificuldades que os professores enfrentam no ensino da Cinemática ao nível do 10<sup>o</sup> ano de escolaridade. Para os alunos, muitas vezes com insuficiente preparação matemática, é difícil corresponder às propostas programáticas que têm em vista descrever, de um ponto de vista científico, situações do real pela decomposição analítica das mesmas e introdução simultânea dos parâmetros descritores.

Um pequeno grupo de professores, reflectindo sobre a sua própria experiência de ensino sobre o tema, procurou delinear uma proposta de trabalho a apresentar aos alunos, tomando como base a exploração de software existente.

Esta comunicação tem como objectivo relatar essa experiência. A exploração dos programas escolhidos foi realizada em tempo lectivo, por pequenos grupos de alunos, com a ajuda de fichas semi-estruturadas. Posteriormente, cada aluno, de acordo com os seus interesses, pôde trabalhar de forma livre os mesmos programas, imaginando e criando as situações.

## Adivinhas em Química (para o oitavo ano de escolaridade)

PAIVA, João C.  
Escola Secundária de Anadia  
3780 ANADIA

O computador (IBM-PC compatível) serve de base à apresentação de um conjunto de cerca de vinte e cinco "adivinhas" introduzidas na disciplina de Físico-Químicas, no oitavo ano de escolaridade.

Algumas das referidas "adivinhas", assinaladas com um asterisco, foram elaboradas por alunos.

Tenho protões e neutrões  
No global sou carregado.  
Rodeiam-me electrões,  
O que me dá certo gozo.  
P'ra energia sou usado  
Mas aí sou bem perigoso!...

Resposta:...? Núcleo

O.K., acertaste! Parabéns!...

PONTUAÇÃO: 5

Uma das "adivinhas" apresentada no programa

## Jogo das substâncias (jogo de computador)

PAIVA, João C., GIL, Victor M. S.  
Departamento de Química da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

O computador "pensa" numa substância de entre um conjunto de quinze que figuram no écran (água, cloreto de sódio, sacarose, oxigénio, ferro etc.).

O jogador faz o menor número possível de perguntas ao computador (de entre um conjunto que lhe é apresentado) relacionadas com as características dessa substâncias ("é sólido?"; "tem cheiro?"; "conduz a corrente eléctrica?"; etc.).

Tendo ao seu dispor no écran as perguntas e as respectivas respostas, bem como as substâncias possíveis, o aluno tenta adivinhar a substância em que computador "pensou".

O "jogo" tem ainda um "livro de reclamações", que pode ser chamado a todo o momento, e que possibilita ao aluno ser esclarecido sobre algumas questões mais polémicas do seu ponto de vista ("o butano não tem cheiro?"; "o cloreto de sódio, que tem iões, não conduz a corrente eléctrica?"; etc.).

O programa existe em duas versões, uma para Macintosh e outra para IBM-PC compatível.

O computador já pensou numa substância...		PONTUAÇÃO:-2
A-É sólido a 25 ° C?-	sim	1-água
B-É líquido(a) a 25 ° C?-		2-cloreto de sódio
C-É gasoso(a) a 25 ° C?-		3-álcool etílico
D-É muito solúvel em água?-		4-sacarose
E-Existe habitualmente em nossas casas?-	sim	5-ferro
F-É bom condutor da corrente eléctrica?-		6-grafite
G-É combustível no ar?-		7-oxigénio
H-É um composto formado por iões?-		8-enxofre
I-Tem cheiro?-		9-dióxido de carbono
J-É um sólido de elevada dureza?-		10-sulfato de cobre
K-É uma substância elementar?-		11-mercúrio
L-Tem cor(sem ser branco ou preto)?-		12-butano
M-Tem brilho metálico?-		13-cloro gasoso
		14-óxido de ferro
		15-ozono

Escolhe a letra que corresponde à pergunta que queres fazer? E  
Para arriscar indica o nº da substância  
Tecla 'U' para reclamar, 'T' para terminar, 'X' para continuar e 'R' para recomeçar

Uma fase do jogo...

## Projécteis, programa de simulação

SOUSA, Maria de Fátima  
Projecto MINERVA - Pólo do Instituto Politécnico do Porto  
Rua da Alegria, 503  
4000 PORTO

O poster a apresentar será constituído por algumas imagens de um programa de simulação, por excertos da documentação que o acompanha e algumas considerações sobre a forma como foi utilizado no 10º e 12º anos de escolaridade.

O programa foi construído em linguagem Logowr. Proporciona representações estroboscópicas de trajectórias do movimento vertical ascendente de um grave e de trajectórias de projécteis lançados horizontal e obliquamente, em situações ideais de ausência de resistência do ar. Com vista a ultrapassar a dificuldade habitualmente manifestada pelos alunos, que chegam a confundir a trajectória com os gráficos das funções  $(x,t)$  e  $(y,t)$ , estes podem ser visualizados no écran para cada simulação. A construção dos mesmos gráficos não decorre em simultâneo com a simulação de movimentos pois isso poderia levar o aluno a associar aos referidos gráficos a ideia de partícula em movimento, contribuindo para a confusão atrás referida.

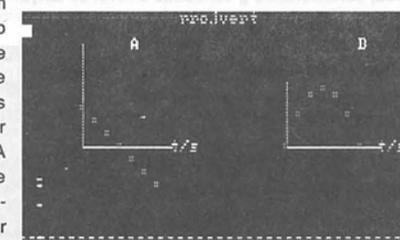


fig.1

Na documentação que acompanha o programa é feita uma proposta de trabalho não dirigido. O professor poderá optar por um trabalho mais dirigido fornecendo as folhas de sugestões com tabelas para registos, ou utilizar a placa de cristais fazendo demonstrações para toda a classe e proporcionando depois um trabalho fora de aula em que seja o aluno a manipular o programa. A proposta de trabalho que é apresentada destina-se a trabalho de grupo tendo em vista que o aluno deve:

- 1- fazer previsões sobre o lançamento horizontal e oblíquo de projécteis e em seguida testá-los através de simulações.
- 2- elaborar um plano de trabalho com vista a estabelecer o caminho que o leve a encontrar as relações entre as diferentes variáveis em jogo, praticando o adequado controlo de variáveis.
- 3- estabelecer as leis do movimento composto dos dois movimentos já estudados, aplicando conhecimentos previamente adquiridos.

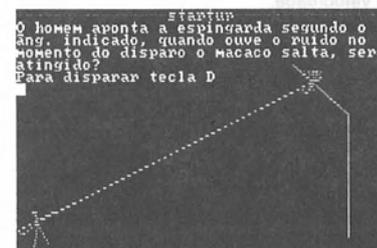


fig 2

A utilização deste programa supõe como condição prévia que o aluno tenha estudado os movimentos rectilíneos uniforme e uniformemente variado. O aluno é colocado inicialmente perante a situação problema ilustrada na fig.2. Dada a dificuldade de estudo desta situação é sugerido um estudo por fases de acordo com o seu grau de conhecimentos e com as opções possíveis do menu do programa.

- Um aluno do 10º ano poderá fazer a opção1 - movimento vertical ascensional.  
 Um aluno do 12º ano poderá fazer a opção2 - projectil lançado com velocidade horizontal  
 ou opção3 - projectil lançado obliquamente.

Qualquer que seja a opção feita pelo aluno, este é convidado a fazer previsões e a testá-las através das simulações proporcionadas nas diferentes fases do programa. Assim, depois de ter estudado o movimento de queda e ascensão de um grave é posto perante as seguintes situações:  
**A - Um projectil é abandonado de uma certa altura  $h$  num local onde a aceleração gravítica é  $g$ .**  
**B - No mesmo local um grave desloca-se sobre uma superfície horizontal com velocidade constante  $v_0$  e cai da mesma altura  $h$  quando atinge a extremidade da superfície.**

Pede-se ao aluno que faça previsões sobre: a trajectória dos dois móveis  
o tempo que levam a atingir o solo

A opção 2 do menu- (projectil lançado horizontalmente) permitirá que o aluno teste as suas previsões. Em seguida, considerando  $g$  constante e nível de lançamento constante, é desafiado a procurar as seguintes relações:

- Como varia o Alcance em função do valor da velocidade horizontal inicial
- Como varia o Tempo de queda se fizermos variar a aceleração gravítica?

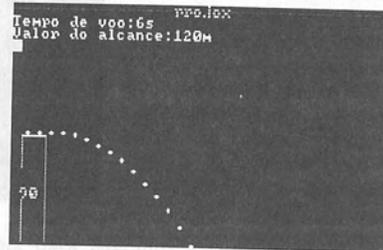


fig.3

Com vista a encontrar estas relações, o aluno deve elaborar um plano de trabalho onde:

- Indique o adequado controlo de variáveis.
- Construa tabelas para registo dos valores das variáveis em jogo, indicando quais as grandezas que se mantêm constante
- Analise o conjunto de resultados registados nas tabelas.

Depois de encontradas estas relações e de serem estabelecidas as leis deste movimento composto, o aluno passará a debruçar-se sobre o lançamento oblíquo de um projectil.

Com um certo carácter lúdico, são proporcionadas situações como a que está ilustrada na fig.4,

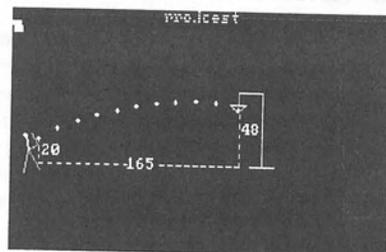


fig.4

- em que a influência do ângulo de lançamento pode ser estudada do ponto de vista qualitativo. Só depois deste estudo do ponto de vista qualitativo o aluno é convidado a procurar as relações:
- A-entre o alcance, a componente horizontal da velocidade e o tempo de subida.
  - B-entre o tempo de subida e a componente vertical da velocidade.
  - C-entre o valor da altura máxima e a componente vertical da velocidade.

A procura destas relações deve ser feita escolhendo a ficha2 do submenu do lançamento oblíquo.

Nesta parte do programa, o aluno pode escolher os valores da velocidade inicial, aceleração gravítica e ângulo de lançamento, praticando um adequado controlo de variáveis.



fig.5

As simulações proporcionadas, para cada conjunto de valores escolhidos, são acompanhadas do registo no ecrã dos valores da altura máxima, tempo de subida e alcance. Estes valores são guardados em tabelas para posterior análise com vista a encontrar as relações referidas e as leis do movimento.

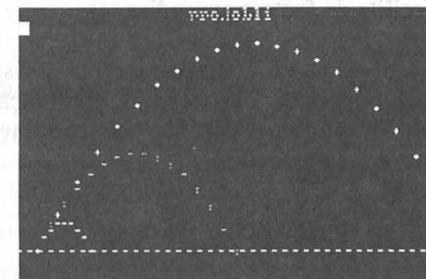


fig.6

Este programa pode ser usado, como atrás foi dito, no 10º e 12º anos.

No 10º ano já foi usado, em sala de aula, pode contudo servir para apoiar, fora da sala de aula, um trabalho de aplicação de conhecimentos curriculares previamente adquiridos.

No 12º ano tem sido usado em sala de aula, em trabalho de grupo, sendo este estudo obviamente mais moroso do que o habitualmente feito.

A experiência realizada está a ser prolongada em trabalho fora de sala de aula, proporcionando aos alunos que trabalharam com o programa uma abordagem da linguagem de programação Logowr, com vista a estabelecer uma ligação entre a actividade de programação, para a qual os alunos se encontram altamente motivados e o estudo da Física. Os resultados da experiência ainda em curso serão posteriormente analisados por professores e alunos nela envolvidos.

## Modelos atômicos e configurações electrónicas. Programa de computador para o décimo ano

PAIVA, João C.  
Escola Secundária de Anadia  
3780 ANADIA

Apresenta-se um programa de computador (para IBM-PC compatível) que serve para ensinar a alunos do décimo ano modelos atômicos e configurações electrónicas. O programa foi experimentado, tendo sido obtidos resultados animadores.

No tópico de configurações electrónicas, por exemplo, verifica-se que a repetição de exercícios no computador facilita de facto a aprendizagem.

Embora a exploração do computador não seja demasiadamente sofisticada, o programa apresenta vantagens evidentes no que toca a aspectos de motivação para o aluno (todo o programa é acompanhado por um sistema de pontuação) e a desenvolvimentos gráficos (esboço de nuvens electrónicas).

## Uma base de conhecimento de um sistema tutorial inteligente no domínio do equilíbrio químico

ORVALHO, Luísa  
GETAP  
PEREIRA, Duarte C.  
Pólo do Projecto MINERVA da Universidade do Porto  
Rua de Ceuta, 118, 6º  
4000 PORTO

A revisão da literatura sobre equilíbrio químico revela a existência de dificuldades de ensino-aprendizagem quando se faz uma abordagem do conceito equilíbrio químico em termos simplesmente cinéticos.

Desenvolvem-se uma unidade experimental de ensino-aprendizagem, seguindo uma abordagem termodinâmica simultaneamente clássica e estática do equilíbrio químico.

Utilizaram-se os resultados obtidos num ensaio empírico com uma turma de alunos do 11º ano de escolaridade, via de ensino, área A, para construir a Base de Conhecimento de um Sistema Tutorial Inteligente no domínio do Equilíbrio Químico, utilizando técnicas da Inteligência Artificial.

## Sistema de tutorías por ordenador

SÁA, Concepción  
EUITI, Universidad de Vigo  
c/ Conde de Torrecedira, 110  
E-36208 VIGO Espanha

Se presenta un programa de educación asistida por ordenador, escrito en Turbo Basic. Su objetivo es facilitar la tarea del profesor-tutor cuando ha de atender a un número muy elevado de alumnos y está diseñado para permitir un seguimiento de los conocimientos de cada estudiante y servir de medio de comunicación individualizada entre tutor y alumno.

El programa comprende varias secciones. La sección I es el núcleo central que dirige el diálogo profesor/alumno y administra la conexión con las otras secciones del programa. La sección II comprende el material didáctico propiamente dicho. Este material puede ser añadido o cambiado por el profesor según las necesidades docentes. En la versión que se presentará en este Encontro el material consiste en algunos problemas de Química General y de Química Orgánica (enunciados, sugerencias, soluciones) y un módulo con preguntas sobre esos problemas.

Las secciones I y II han de ser de acceso general a todos los alumnos. La sección III constituye la parte individualizada del programa. Contiene los mensajes personales al alumno y registra las respuestas que él da al recorrer la sección II, para su posterior análisis por el profesor.

## Software para o ensino da Física e da Química: títulos desenvolvidos no Pólo do Projecto MINERVA da Universidade Nova de Lisboa

TEODORO, Vitor Duarte, RIBEIRO, Cremilde  
Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

Neste *poster* apresentam-se os programas desenvolvidos no âmbito das actividades do Pólo do Projecto MINERVA da Universidade Nova de Lisboa. Os programas vão desde simulações de movimentos a bases de dados gráficas e foram concebidos tendo em conta quer as características dos currículos de Física e Química quer as dificuldades conceptuais dos alunos.

Além da apresentação dos programas, serão exemplificadas algumas das suas modalidades de utilização.

## O computador e o seu contributo para a superação de dificuldades de aprendizagem em mecânica

NETO, António, VALENTE, Mariana  
Departamento de Física, Universidade de Évora  
7000 ÉVORA

Faz-se a análise das variáveis que mais contribuem para as dificuldades sentidas pelos alunos na aprendizagem da Mecânica. Confere-se especial atenção às que se relacionam com a existência de concepções alternativas em conflito com concepções formais; com a proliferação excessiva de conceitos de natureza abstracta; abusos de linguagem provenientes da existência de campos de acção nem sempre claramente delimitados. Faz-se o enquadramento da proposta de estratégia tendente a minimizar essas condicionantes. Relatam-se alguns aspectos concretos relacionados com a implementação dessa estratégia numa Escola Secundária. Refere-se o contributo dos suportes lógicos *Posição* e *Cinemática* (Pólo do Projecto MINERVA da Universidade Nova de Lisboa), quer na determinação e despiste de concepções alternativas quer na diferenciação de conceitos por vezes confundidos.

## Computadores no ensino da Física e da Química: análise multidimensional

LOUREIRO, Maria João, VASCONCELOS, Nilza  
Departamento de Didáctica e Tecnologia Educativa da Universidade de Aveiro  
3800 AVEIRO

Nesta comunicação faz-se uma análise pluridimensional das modalidades de utilização dos computadores no ensino da Física e da Química (os exemplos a apresentar serão sobretudo no domínio da Física). Esta análise permitirá descrever alguns trabalhos feitos no país, neste campo, e um projecto de investigação em curso na Universidade de Aveiro.

## O computador na sala de aula

ARAÚJO, Margarida, BARRULAS, Júlia, CUNHA, Paula C., ÍNDIAS, Margarida, PEREIRA, Fernanda, TEIXEIRA, Rosário  
Escola Secundária de Reguengos de Monsaraz  
7200 REGUENGOS DE MONSARAZ

Utilização dos suportes lógicos POSIÇÃO e CIN, elaborado pelo Pólo do Projecto MINERVA da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova, num contexto de aprendizagem em sala de aula numa turma do 10º ano de escolaridade.

No poster apresenta-se a estratégia de exploração dos referidos suportes lógicos e sua avaliação.

## Resumos das comunicações

### Tema 2:

## O computador como complemento do laboratório (201 a 206)

## ACRUN — programa de aquisição de dados e controlo

REIS, Francisco, LOURENÇO, J.

*Departamento de Tecnologia de Indústrias Químicas do LNETI*

Estrada das Palmeiras, Queluz de Baixo

2745 QUELUZ

O programa ACRUN realiza aquisição de dados e controlo de processos a partir de placas inseridas no "bus" de computadores pessoais compatíveis IBM.

A noção fundamental na configuração de aplicações é a de Bloco. A cada Bloco corresponde uma dada operação que pode ser uma conversão A/D, uma conversão D/A, uma entrada ou saída digital, ou uma operação sobre Blocos (operações aritméticas, trigonométricas, estatísticas, de cálculo diferencial, algoritmos de controlo).

De notar que o tempo é igualmente considerado um Bloco. Por exemplo podemos configurar um gerador da função seno utilizando o Bloco TEMPO como entrada do Bloco SENO e associando a saída deste a um Bloco D/A.

O algoritmo de controlo implementado é um PID.

O programa possibilita a configuração de ligações entre blocos em esquemas complexos de modo rápido e intuitivo. As configurações implementadas são visualizáveis em qualquer instante, facilitando o estabelecimento dos fluxos lógicos da informação.

Os dados recolhidos podem ser armazenados em ficheiros ASCII e/ou representados no monitor, numericamente ou através de janelas de gráficos. Estas são totalmente configuráveis (posição, dimensão, escalas e Blocos representados), inclusive enquanto decorre o processo de aquisição de dados e controlo.

A visualização do processo pode ser ainda facilitada por outras representações auxiliares, nomeadamente mostradores de barras, horizontais ou verticais.

O programa suporta portos série de comunicações RS232C o que permite a sua integração num sistema distribuído.

A interface com o utilizador é feita através de menus em janelas podendo fazer-se uso do "rato".

As características do programa permitem a sua utilização em aplicações laboratoriais e industriais de pequeno ou médio porte.

A sua utilização, sendo intuitiva, torna o ACRUN uma ferramenta igualmente útil em formação específica sobre aquisição de dados e controlo, ou no apoio a trabalhos práticos no ensino da Química e da Física.

## Os microcomputadores na aquisição de dados e controlo em processos bioquímicos

FERREIRA, Eugénio C., DUARTE, José Cardoso  
 Departamento de Tecnologia de Indústrias Químicas do LNETI  
 Estrada das Palmeiras, Queluz de Baixo  
 2745 QUELUZ  
 FEYO DE AZEVEDO, S.  
 Centro de Engenharia Química da Universidade do Porto  
 Rua dos Bragas  
 4099 PORTO Codex

Os processos bioquímicos têm actualmente uma grande aplicação em numerosos sectores (agro-alimentar, química-fina, energia, ambiente). Um bioprocessamento pode ser definido como aquele em que há uma utilização industrial de microorganismos, enzimas ou outros agentes biológicos tendo como objectivo a produção de biomassa, a produção de compostos químicos, alimentos, energia ou ainda a despoluição biológica. A automatização dos bioprocessos visa a maximização da produtividade ou o melhoramento da qualidade dos produtos. O objectivo final consiste no aumento da sua eficácia através de um controlo óptimo do bioreactor, isto é, das variáveis operacionais do processo.

Para o controlo de um processo biotecnológico, seja um fermentador ou um reactor enzimático, é necessário haver a capacidade de efectuar várias medições em linha, isto é, o algoritmo de controlo deve dispôr periodicamente de determinados valores de variáveis do processo. É neste processo que os microcomputadores adquirem um papel de relevo dada a sua capacidade de aquisição rápida de dados e seu tratamento, o que conjugado com o seu preço, faz desta tecnologia um campo de grande aplicação no ensino, investigação e indústria.

Um sistema de controlo e monitorização por computador deverá comportar os seguintes elementos:

- placas de interface permitindo a aquisição de dados provenientes dos sensores do processo e o accionamento dos chamados 'elementos finais de controlo';
- aparelhos de condicionamento de sinais eléctricos (filtros, conversores, amplificadores, 'buffers', etc.)
- algoritmos de estimativa em linha de variáveis de estado não medidas (observadores);
- algoritmos de identificação de parâmetros em linha;
- sistema de visualização gráfica de dados (em linha ou históricos).

O 'hardware' utilizado num dos projectos em curso no departamento (1) está esquematizado na Fig. 1 sendo constituído, no essencial, pelos seguintes elementos: computador IBM PC compatível; interface de aquisição de dados com as placas de conversão analógico-digital (8 canais com ganho programável, precisão de 12 bits), conversão digital-analógico (4 canais), accionamento de relés (8 canais) e relógio em tempo real; unidade de controlo analógico de variáveis ditas ambientais (temperatura, pH, velocidade de agitação e potencial redox); diversos aparelhos de condicionamento de sinal (conversores corrente-tensão, ...).

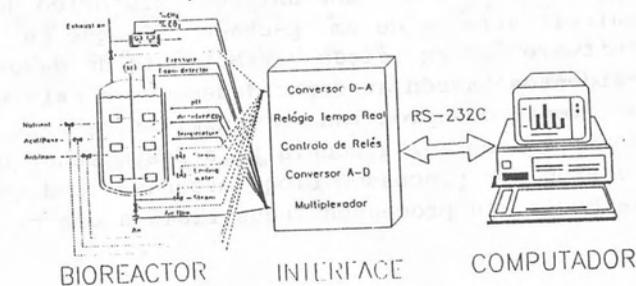


Fig.1 : Configuração de Aquisição de Dados e Controlo de um Fermentador

Uma vez que não é possível a medição de todas as variáveis de estado (biomassa, substratos e produtos) de um bioprocessamento devido à falta (ou custo proibitivo) de sensores apropriados, o recurso a algoritmos (observadores) que efectuam a reconstrução da evolução no tempo das variáveis de estado não medidas através das variáveis de estado medidas é a solução adoptada (2). Tal procedimento é ilustrado na Figura 2. Estes algoritmos são de primordial importância para o controlo de bio(reactores). Estão neste momento em desenvolvimento estratégias de controlo adaptativo que utilizam os algoritmos de estimativa em simultâneo com a etapa de controlo (3).

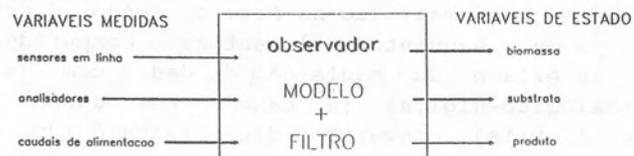


Fig. 2 : Utilização de observadores na estimativa de estado em bioprocessos

Um outro aspecto importante em direcção a um sistema completo para o controlo de um bioprocessos é a visualização gráfica em linha das variáveis medidas, do estado estimado assim como de parâmetros calculados. Esta particularidade, assim como a possibilidade de visualizar resultados antigos (histórico do processo) estão disponíveis através de um 'package' (4) que se integra no restante 'software' de aquisição e tratamento de dados. A partir daqui são evidentes também as capacidades que o sistema oferece para a modelização dos processos bioquímicos, e sua simulação. Este conjunto de metodologias poderá pois desempenhar processo de realce no ensino dos processos bioquímicos em condições de uma rápida equivalência aos processos industriais a que se referem.

Este trabalho foi suportado pela JNICT no âmbito do Programa Mobilizador de Ciência e Tecnologia e pela Comissão das Comunidades Europeias no âmbito do "Biotechnology Action Programme".

#### REFERENCIAS

- (1) Ferreira, E.C.; Duarte, J.C. e S. Fejo de Azevedo "Fermentation Data Acquisition and Control with microcomputers" *Ciência Biológica* 12:5A, 234, Nov. 1987
- (2) Ferreira, E.C. e José C. Duarte "Aplicação de Técnicas de Estimativa em linha em Engenharia de Bioprocessos." in CONGRESSO 89 da Ordem dos Engenheiros, Tema 5: Problemas Actuais e Avanços em Processos Químicos, p.59-63, 1989, Coimbra.
- (3) Ferreira, E.C.; Renard, P.; Van Breusegem, V.; Dochain, D.; Duarte, J.C. Nyns, E.-J. and G. Bastin "Adaptive State and Parameter Estimation in Ethanollic Fermentation" in Final Sectoral Meeting on BIOREACTORS and BIOTRANSFORMATIONS Biotechnology Action Programme (CCE), Troia Portugal, 1989.
- (4) Cardoso, E.L. e E.C. Ferreira "Software Gráfico para Computadores de Controlo de Processos", Relatório Interno do LNET1, em preparação (1989).

## Processos laboratoriais de Química em múltiplos idiomas

SILVA, Ana A., SEITA, J. Féria.  
 Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro  
 Qta de Prados  
 5000 VILA REAL

Com o programa pretende-se demonstrar a facilidade de apresentar processos laboratoriais de Química a alunos de diferentes idiomas, dado basear-se fundamentalmente na imagem, com texto reduzido e de simples tradução.

Esta demonstração vem já com exemplos em Português, Espanhol, Francês, Italiano e Inglês; a extensão a outras línguas é possível ser feita por qualquer docente mesmo que não tenha conhecimento dos idiomas já introduzidos, dado que as imagens são bastante explicativas.

## Utilização do computador para visualização de ondas sonoras

PINTO, Álvaro  
Escola Secundária de Pombal  
3100 POMBAL

Construiu-se um dispositivo experimental para observar ondas sonoras emitidas por várias fontes, por exemplo, um diapasão, uma corda de viola e a voz humana.

A onda sonora foi recolhida num microfone e o correspondente sinal eléctrico visualizado num osciloscópio. Uma câmara digitalizadora DCS ("Digitizing Camera System"), fixa ao écran do osciloscópio, permitiu obter instantâneos das diversas imagens no écran de um IBM-PC, usando software adequado.

Este trabalho ilustra as possibilidades de utilização do computador como instrumento auxiliar de laboratório em experiências de interesse didáctico.

## Contribuição para o estudo da poluição do rio Este

Alunos das turmas 9º H e 9º I  
GUIMARÃES, Leonor, MARTINS, Cristina  
Escola Secundária Carlos Amarante  
4700 BRAGA

Este trabalho tem como objectivo sensibilizar os alunos para os problemas do meio ambiente, bem como levá-los a exercitarem técnicas laboratoriais no âmbito da disciplina de Quimicotecnia. Tem, por este motivo, um âmbito assás reduzido, que, no entanto nos parece suficiente para cobrir os objectivos propostos.

O trabalho iniciou-se com a recolha da água do rio em 4 locais diferentes, á entrada, á saída e dentro do perímetro urbano da Cidade de Braga. No local da recolha foram determinadas algumas constantes físicas tais como temperatura, pH, cõr, aspecto, cheiro, e também uma estimativa de caudal, aumentado pelas recentes chuvas. Ai também se iniciou o doseamento do  $O_2$  dissolvido.

Transportada a água para o laboratório da Escola, foram realizados os ensaios de doseamento de cloretos, dureza total e cálcica, oxidabilidade ao  $KMnO_4$  e as pesquisas de amoníaco, nitritos e nitratos. Não foram analisados outros parâmetros como metais pesados, cuja quantidade é significativa neste rio, por as respectivas técnicas estarem muito fora do âmbito da disciplina.

## Electrónica digital

GASPAR, Rui F.

Projecto MINERVA, Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNL  
2825 MONTE DE CAPARICA

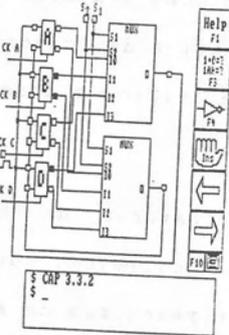
Electrónica Digital (ELDIG) é um simulador-analisador de circuitos digitais especialmente orientado para a aprendizagem e exploração de circuitos lógicos e da teoria que lhes está associada.

Para além de um módulo de PROJECTO, onde é possível explorar o comportamento de circuitos digitais simples ou relativamente complexos, ELDIG inclui um módulo de CALCULOS, onde se podem realizar várias operações auxiliares ao desenho de circuitos e um módulo de TEXTO DE REFERENCIA, onde se pode navegar num livro electrónico utilizando algumas funções típicas das aplicações de hipertexto que permitem o estudo ou consulta duma vasta gama de tópicos de electrónica digital.

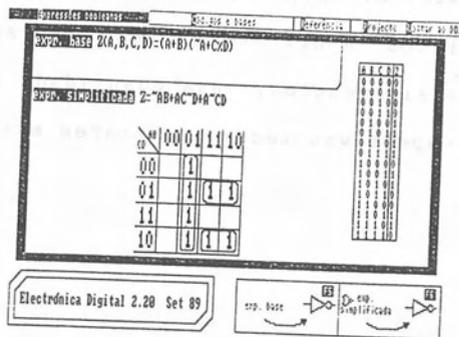
Vamos atribuir valores aos registos para vermos um ex. de funcionamento. Iremos agora copiar o valor do registo A para o registo C. Como a fonte é o registo A devemos fazer S2-S1=0, pois os bits de A estão nas entradas 10 dos multiplexers. Na saída dos multiplexers teremos naturalmente a entrada seleccionada (10) que consta dos bits de A. O resultado aparecerá agora nas entradas de todos os registos. Para seleccionarmos qual o registo que vai receber, os dados damos um impulso no clock desse registo, que é o C neste caso.

-- fim de página --

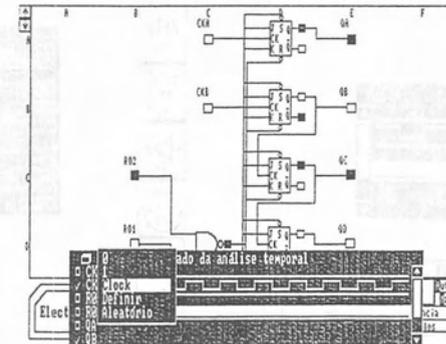
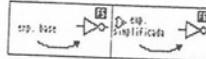
Electrónica Digital 2.20 Set 89



O módulo de CALCULOS permite a exploração da lógica booleana e o manuseamento de alguns aspectos práticos da implementação de circuitos digitais.



Electrónica Digital 2.20 Set 89



O módulo de PROJECTO permite o desenho e teste de circuitos utilizando várias ferramentas de análise.

ELDIG destina-se a alunos do 10º ano até aos primeiros anos dum curso superior, facilitando a aprendizagem dos conceitos numa fase inicial (o TEXTO DE REFERENCIA permite aceder imediatamente ao assunto que o aluno pretende, apresentando uma explicação concisa e que lhe prende a atenção pela utilização de simulações com gráficos paralelos ao texto) e a experimentação numa fase mais avançada (o PROJECTO permite a simulação de circuitos mais complexos com o tipo de análise mais indicado para cada situação).

ELDIG permite ainda ao professor preparar exemplos elucidativos que pode guardar em ficheiro para posterior demonstração, incluindo um modo de análise interactiva que permite o estudo localizado do circuito (situações do tipo: "se alterar a entrada X o que se passa com a saída Z?") de grande interesse na explicação do seu funcionamento.

Um dos pontos fundamentais da implementação de ELDIG é o cuidado que foi posto na facilidade de utilização: tendo em conta que o aluno deve dirigir a atenção para o conteúdo e não para o modo de utilização, o programa apresenta as acções possíveis duma forma explícita através da utilização de zonas de ecrã, pop-up menus, páginas de diálogo, helps curtos onde apropriado e teclas de selecção visíveis ou invisíveis. As teclas invisíveis não são necessárias, servindo apenas de short-cut ao utilizador mais experiente. O vulgar modelo Macintoshiano foi preterido em favor de um interface nele baseado, mas mais flexível e directo.



## Integração de equações cinéticas e ajuste de dados

FREITAS, Filomena F. M., FERNANDES, Fernando M.S.S., ALBUQUERQUE, Lúcia M.P.C.  
Departamento de Química da Faculdade de Ciências de Lisboa  
Rua Ernesto de Vasconcelos, Edifício C1  
1700 LISBOA

O conceito de experiência química já ultrapassou, actualmente, o sentido tradicional do âmbito da química descritiva e laboratorial passando a englobar um outro tipo importante de experiências - as que se efectuam com recurso às novas técnicas computacionais - para além das realizadas sobre bancada de laboratório.

Embora a complexidade das experiências computacionais não seja, geralmente, inferior à das laboratoriais, aquelas tornam-se, por vezes, preferíveis na medida em que são menos dispendiosas ou, eventualmente, mais rápidas e acessíveis. É, no entanto, de salientar que a relação mais importante entre elas é, inequivocamente, a da complementaridade.

As demonstrações que nos propomos apresentar, recorrendo a dois exemplos concretos, têm como objectivo mostrar como, com computadores pessoais, se pode complementar uma experiência laboratorial.

→ Integração numérica de equações cinéticas, pelo método das Cadeias de Markov, evidenciando a sua importância no estabelecimento de um mecanismo de reacção e na determinação dos limites de aplicação das equações integradas analiticamente.

→ Determinação das funções termodinâmicas de activação, a partir da equação de Everett e Wynne-Jones, aplicando a teoria de ajuste linear múltiplo de valores experimentais.

## Conjunto significativo de experiencias con el metodo OM Hückel para el "currículum" de Química-Física General

CARBALLEIRA, L.

Dept de Química-Física, Colégio Universitario de Vigo, Universidade de Santiago de Compostela

Apartado 874 VIGO

Espanha

El método OM Hückel (1) se incluye en muchos programas de la disciplina "Química-Física General", correspondiente a los primeros años de la Licenciatura de Química de la mayoría de las universidades del mundo. Su sencillez permite al estudiante entender, por extrapolación, la utilidad y el funcionamiento de métodos más rigurosos de la Química Cuántica. Sin embargo, hasta hace unos años las experiencias del alumno con este método estaban limitadas en su labor manual de seminario por la necesidad de que el determinante secular a resolver no fuese grande. Por ello, estaba limitada también la extensión cualitativa y cuantitativa del tipo de experiencias posibles. Hoy día, varios programas de ordenador personal publicados (2) que desarrollan este método, permiten al alumno realizar prácticas de mayor complejidad y profundidad sin mayor esfuerzo.

Con esta herramienta disponible, es necesario diseñar un conjunto significativo de experiencias que dé una idea real de las posibilidades del método, y que al mismo tiempo muestren su utilidad en otros campos de la Química, tales como la Química Orgánica. Siguiendo las directrices y objetivos marcados por Lipkowitz (3), sobre la necesidad de reforzar los "currícula" de Química-Física y Química-Orgánica con el uso de programas de ordenador fácilmente accesibles, se propone aquí un conjunto de prácticas a desarrollar con el programa HUCKEL, que forma parte del paquete QCMP021 (2) de J.J. Hauser, escrito en BASIC para ordenador compatible. Admite parámetros para heteroátomos según Van Catledge (4), y la entrada de datos puede realizarse cómodamente por medio de consola o con el programa MOUSDRAW del mismo paquete, que permite dibujar con "ratón" una estructura de entrada.

Este conjunto de prácticas, que se ha probado en los dos últimos años con un total de 70 alumnos de 3<sup>er</sup> curso de la Licenciatura de Química, se ha confeccionado a partir de las ideas contenidas en los textos de Lowe (1), Julg (5a) y Jorgensen (5b) y en la actualidad consta de:

**Grupo 1.** - Prácticas acerca de la estabilidad molecular, basadas en la energía de resonancia:

- Estudio de la estabilidad en una serie homóloga.
- Justificación de la regla  $4n + 2$ , con aplicación a radicales libres neutros, cationes y aniones.

- Comparación de la aromaticidad de compuestos isoelectrónicos: benceno y trimetilencilopropano. Repercusión de la variación de la integral  $\beta$  con el tipo de enlace.

**Grupo 2.** - Reactividad química e índices de reactividad.

- Relación entre la cte. de velocidad de adición de radicales libres y el índice de valencia libre.
- Ataques electrofílico, nucleofílico y por radicales libres, analizados por la energía de localización. Butadieno y benceno (normal y excitado).
- Comparación de varios índices de reactividad en el azuleno: cargas netas, autopolarizabilidad atómica, HOMO, LUMO, índices de valencia libre y energías de localización.
- Reactividad en medio ácido de la vinilamina, por ataque electrofílico. Energía de localización.
- Radical  $\text{NO}_2$ : Potencial de ionización y afinidad electrónica. Reactividad del ión  $\text{NO}_2^-$  frente a  $\text{K}^+$  y  $\text{H}^+$ . Disociación del  $\text{NO}_2$  en estados excitados.

**Grupo 3.** - Isomerización.

- Isomería cis-trans del 1,3-butadieno. Variación de la energía  $\pi$  de interconversión con el ángulo de rotación interna. Constante de fuerza de torsión  $\pi$ .

**Grupo 4.** - Hiperconjugación.

- Efecto de la hiperconjugación en propeno y 1,4-dimetil-butadieno. Repercusión en la transición  $\pi \rightarrow \pi^*$

En la comunicación se describirán estos grupos de prácticas y se discutirá su utilidad así como las posibilidades de ampliarlos, por diseño de nuevas experiencias.

- 1.- J.P. Lowe, Quantum Chemistry, N.Y., Academic Press, 1978.
- 2.- a) B.M. Peake, J. Chem. Educ., 59(9), 692, 1981.  
b) QCMP21: J.J. Hauser, QCPE Bulletin, 6(4), 1986.
- 3.- K.B. Lipkowitz, J. Chem. Educ., 59(7), 595, 1982.
- 4.- F.A. Van Catledge, J. Org. Chem., 45, 4802, 1980.
- 5.- a) A. Julg y O. Julg, Exercices de Chimie Quantique, Dunod, 1967.  
b) P. Jorgensen y J. Oddershede, Problems in Quantum Chemistry, Addison-Wesley, 1983.

Esta comunicación forma parte de un proyecto de investigación educativa, financiado por la Consellería de Educación y Ordenación Universitaria de la Xunta de Galicia, España.

## DINTER: um simulador de processos de destilação

RIBEIRO, Bernardete M.

Instituto Superior de Engenharia de Coimbra

Qta da Nora

3000 COIMBRA

PORTUGAL, António A. T. G.

Secção Autónoma de Engenharia Química da Universidade de Coimbra

3000 COIMBRA

### 1. INTRODUÇÃO

O simulador DINTER foi concebido para permitir o estudo do comportamento duma unidade fundamental dum processo químico - uma coluna de destilação - operando, em estado estacionário, na separação de misturas de componentes.

Na sua concepção foram englobadas características de modularidade que permitem uma solução facilmente ampliável a outras unidades dum processo químico. O acesso a uma base de dados de componentes químicos garante uma razoável flexibilidade promovendo a sua utilização generalizada a uma grande variedade de misturas. Foi desenvolvido de forma a permitir uma interacção com o utilizador que viabilize a sua utilização quer no ramo educacional quer na investigação. Os instrumentos de concepção e implementação utilizados permitiram organizar a perspectiva lógica e física da aplicação, contribuindo para a produção de uma ferramenta útil neste domínio específico.

### 2. DESCRIÇÃO DO SIMULADOR

O programa DINTER é constituído pelos seguintes módulos funcionais:



O módulo BASE DE DADOS dos Componentes Químicos permite criar, organizar e manipular a base

de dados. É um programa que pode ser executado independentemente ou em cooperação com outro que permita a simulação duma unidade dum processo de fabrico cujo comportamento se pretenda estudar. No presente trabalho, destina-se a fornecer os meios necessários para permitir a simulação duma coluna de destilação operando em estado estacionário na separação de misturas de componentes não ideais. O volume de informação necessário é bastante elevado pelo que um sistema de gestão de ficheiros impõe-se uma tarefa razoável e adequada para permitir a eficácia e generalização da aplicação. São fornecidas no programa duas interfaces. A primeira permite consultar, actualizar ou anular informação da base de dados; a segunda tem como objectivo permitir que o programa de simulação tenha acesso à informação necessária para o processo.

O módulo TOPOLOGIA do Processo oferece ao utilizador a possibilidade de visualizar graficamente o diagrama da unidade do processo químico.

O módulo GERAÇÃO dos dados de equilíbrio permite gerar os dados de equilíbrio de qualquer sistema de componentes existente na base de dados. O modelo termodinâmico utilizado retrata com generalidade o equilíbrio químico das fases de líquido e vapor para qualquer mistura de componentes, considerando um comportamento não ideal para ambas. Para o comportamento não ideal da fase de vapor é utilizado o modelo de Hayden o'Connell. Utiliza-se o modelo Uniquac para a fase líquida. São calculadas as constantes de equilíbrio das fases de líquido - vapor pelos métodos "bubble-point" e "dew-point" em condições adiabáticas. Os resultados obtidos são apresentados na forma gráfica ou tabular.

O módulo de DESTILAÇÃO trata do processo de simulação propriamente dito. Pode ser estruturado nas seguintes fases: Especificação dos dados, Simulação propriamente dita e Resultados da Simulação. A especificação dos dados corresponde a uma interface crítica entre o utilizador e o programa de simulação. Trata da entrada, armazenamento e verificação dos dados. São fornecidos os dados referentes à unidade do processo químico, nomeadamente características do equipamento e de operação, informação das correntes de entrada, e critérios de convergência. O programa de simulação propriamente dito compreende a implementação do modelo e os mecanismos que permitem a simulação. Integra um conjunto de módulos que introduzem no computador o modelo determinístico utilizado para representar o sistema real e desenvolvem as acções necessárias para a evolução do sistema representado, permitindo a obtenção duma solução razoável num tempo de computação mínimo. O modelo determinístico é desenvolvido em dois níveis: o modelo físico que representa o equilíbrio termodinâmico de fases e o modelo matemático que representa o sistema material e determina de forma bem definida o seu comportamento. A resposta do modelo às solicitações de entrada é possível através de um conjunto de técnicas numéricas e computacionais que envolvem o tratamento de matrizes esparsas e métodos iterativos. Os Resultados da Simulação correspondem à última fase do processo de simulação. Constituem um vasto conjunto de informação relativa às correntes de saída, temperatura, caudal, composição, entalpia e ainda valores calculados dos parâmetros de operação como as cargas térmicas do condensador e vaporizador. Podem ser obtidos resultados intermédios e/ou finais. Estes, são apresentados na forma tabular ou gráfica.

O módulo GRÁFICO permite a saída gráfica dos resultados provenientes dos módulos TOPOLOGIA do Processo, GERAÇÃO dos Dados de Equilíbrio e DESTILAÇÃO. Contém procedimentos desenvolvidos em linguagem simbólica que permitem a utilização das capacidades gráficas do microcomputador utilizado.

### 3. CONDICIONAMENTOS

Os condicionamentos de implementação basearam-se na necessidade de desenvolver um simulador cuja estrutura de implementação permita a sua expansão a uma gama razoável de unidades de um processo químico. Deriva uma estrutura fortemente modular em que os seus componentes executam funções específicas. Caracterizam-se por uma elevada independência no sentido horizontal e vertical da implementação.

### 4. INSTRUMENTOS DE DESENVOLVIMENTO

A realização deste trabalho consistiu nas fases de concepção, desenvolvimento e implementação. Utilizaram-se como áreas de trabalho as Técnicas de Simulação e Modelização de Processos Químicos e, como instrumentos de trabalho, um microcomputador pessoal e linguagens de implementação. As Técnicas de Simulação integram um conjunto de formulações e métodos capazes de interagir com o modelo de forma a que este responda às solicitações de entrada. Permitem clarificar a técnica de implementação adequada ao tipo de sistema em estudo, e compreendem um conjunto de critérios que medem a viabilidade do modelo que representa o sistema real mediante certos factores: natureza do fenómeno a simular, objectivo da simulação e precisão requerida. A aplicação de técnicas de modelização de Processos Químicos permitiu o estabelecimento de um modelo que adequadamente representasse o sistema real. A fase de implementação foi realizada num microcomputador Casio FP-6000s (8086 / 8 MHz, 256Kb de RAM e 32Kb de Video-RAM. O software utilizado foi o sistema TURBO Pascal (versão 3.0) para sistemas operativos MS-DOS, um sistema de gestão de bases de dados "TURBO DataBase Toolbox" e a linguagem "Assembly".

### 5. CONCLUSÕES

O programa desenvolvido DINTER permite simular o comportamento duma coluna de destilação operando em estado estacionário na separação de misturas de componentes não ideais e constitui um veículo ideal para de forma simples e económica apoiar as actividades de ensino e investigação.

### BIBLIOGRAFIA

- Holland, C. D., e Liapis, A., Computer Methods for Solving Separation Problems, McGrawDill Company, New York, 1983.
- Portugal, A.T.G., Computer Control of a Batch Process for Resin, Birmingham:Ed. do Autor, 1984
- Prausnitz, J.M., Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria, Prentice - Hall, 1980.
- Ribeiro, B. M., DINTER: Um simulador de Processos de Destilação, Coimbra :Ed. do Autor, 1986
- Wiederhold, G., Database Design, McGrawHill International, 1983

## Utilização de pseudo-potenciais em cálculos aproximados de estruturas de bandas para fins didácticos

PAIXÃO, José António de C.

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Uma das formas mais simples de parametrização da estrutura de bandas de um sólido cristalino é através dos coeficientes de Fourier dos pseudo-potenciais dos átomos que o constituem<sup>1</sup>.

Um pseudo-potencial é um potencial fictício que se atribui a cada átomo, mais fraco que o potencial atómico real, e que possui o mesmo poder dispersor que este, embora não apresente estados ligados. Assim, o pseudo-potencial dá origem à mesma estrutura de bandas que o potencial real para os estados de valência, convergindo de uma forma mais rápida que este, para cálculos baseados na técnica da expansão em ondas planas.

Os pseudo-potenciais de diversos átomos, obtidos por ajuste a espectros de absorção óptica e outras propriedades, encontram-se publicados<sup>2</sup>, sendo particularmente fácil a sua utilização num cálculo de estrutura de bandas utilizando a técnica acima referida.

Para o efeito, foi elaborado um programa utilizando a linguagem Pascal que implementa o seguinte algoritmo:

- 1- Obtenção dos coeficientes de Fourier do pseudo-potencial a partir dos dados da literatura.
- 2- Construção da matriz do pseudo-hamiltoniano utilizando estes coeficientes de Fourier.
- 3- Diagonalização desta matriz para as direcções principais do espaço  $k$  no interior da 1ª zona de Brillouin da rede em que o composto cristaliza, utilizando para o efeito a técnica diagonalizadora das rotações de Jacobi.

De entre as várias aplicações pedagógicas deste programa ao nível de uma disciplina introdutória de Física do Estado Sólido, incluem-se:

- Determinação rápida da estrutura de bandas de compostos típicos (metais, semicondutores ou isoladores) para serem comentadas com os alunos.

<sup>1</sup> Ashcroft, N.W. e Mermin, N.D. — Solid State Physics  
Holt, Rinehart and Winston (1976)

<sup>2</sup> Sol. Stat. Physics 24 (1970)

- Estudo da variação da estrutura de bandas numa família de compostos isoestruturais (e.g. a família de elementos do IV grupo: C, Si, Ge, Sn que exibem uma transição isolador  $\rightarrow$  semiconductor  $\rightarrow$  semimetal.)
- Estudo do modo como varia a estrutura de bandas com a variação dos parâmetros de rede (e.g. sólidos sujeitos a altas pressões).

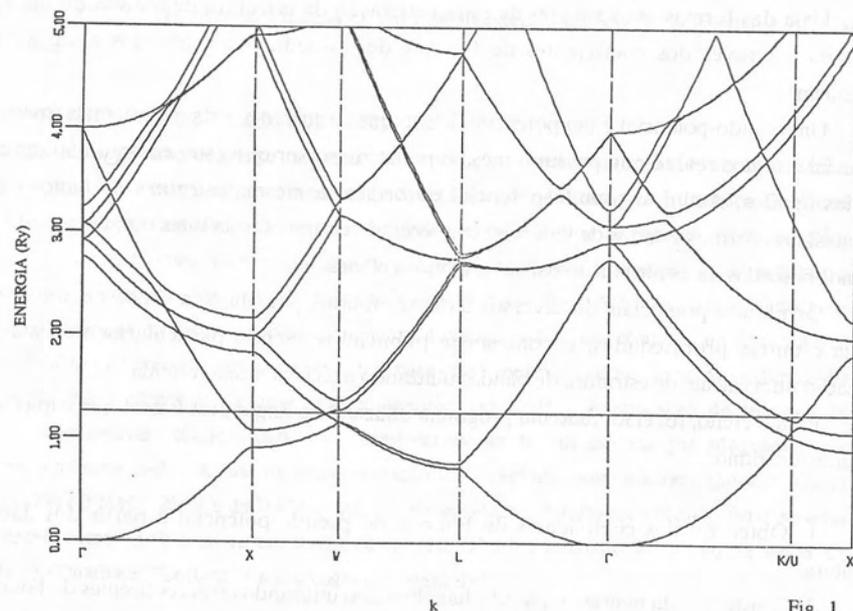


Fig. 1

Fig. 1 - Resultado do cálculo da estrutura de bandas para o alumínio efectuado pelo programa referido.

A linha horizontal representa a posição do nível de Fermi.

## Praticas de Quimica Fisica con ordenador. I. Simulacion elemental de espectros de microondas

MOSQUERA, Ricardo A., FÁBREGUES, Salvador E., CAMESELLE, José  
 Departamento de Química Física da Universidade de Santiago de Compostela  
 Santiago de Compostela  
 E - 15708 GALICIA  
 Espanha

Dentro de un proyecto de aplicación del ordenador para la docencia universitaria de la Química, hemos desarrollado un programa simulador de espectros de microondas (SIESMO). Este programa cubre los aspectos básicos del tema, permitiendo representar espectros teóricos de moléculas lineales y tromposimétricas calculados según el modelo del rotor rígido o incluyendo un término de distorsión centrífuga.

Nuestro objetivo ha sido suministrar una vía de contacto más directo con un tema habitual dentro de los programas de Química Física General. Tema que, por otra parte, no se puede presentar por vía experimental, por razón del alto coste de su instrumentación.

El programa tiene una presentación interactiva a través de pantallas autoexplicativas que permiten seleccionar en cada momento una serie de opciones. Se admite la toma de datos por teclado o por fichero. Los datos de entrada están constituidos por el número de átomos de la molécula y su número de conformeros, un conjunto de coordenadas de valencia y masas atómicas para cada conformero, así como la energía relativa, degeneración y momento dipolar del mismo.

Como opciones de tratamiento, incluye el cálculo a través del modelo del rotor rígido o con un término de distorsión centrífuga, que puede introducirse por teclado o estimarse por el programa. También se incluye la posibilidad de analizar la influencia de campos eléctricos (efecto Stark) o magnéticos (efecto Zeeman).

Asimismo, pueden seleccionarse distintas unidades de trabajo: J., MHz. o  $\text{cm}^{-1}$  e intervalos de representación (en función de la intensidad de las líneas, del número cuántico  $J$  o del valor de las frecuencias).

La saída de resultados puede realizarse por pantalla o impresora, tanto como tablas de datos o como representaciones gráficas. Para una mayor comodidad resulta posible repetir el tratamiento para una misma molécula con distintas opciones cuantas veces se desee. Esto facilita la comparación de los resultados obtenidos con distintos modelos o condiciones experimentales.

El lenguaje utilizado ha sido el BASIC, dada la mayor familiaridad que, normalmente, tienen los alumnos con el mismo. Esto ha permitido que los alumnos puedan aportar en las sesiones de trabajo con el programa nuevas ideas para su perfeccionamiento. El programa está disponible para sistemas PC-compatibles con tarjeta Hercules.

**Agradecimientos:** El proyecto en que se enmarca este programa está subvencionado por la Xunta de Galicia (proyecto XUGA-704016/88).

## Cálculo da estrutura de bandas em sistemas unidimensionais: super-redes e "poços quânticos"

PAIXÃO, José António de C.

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

O grande aumento do poder computacional que se tem verificado nos últimos anos permite, hoje em dia, o cálculo *ab-initio* da estrutura electrónica de sólidos cristalinos com razoável precisão. O resultado destes cálculos — a estrutura de bandas electrónicas — é um dado imprescindível à caracterização do sólido com base nas suas propriedades eléctricas, ópticas e magnéticas.

Uma introdução aos métodos de cálculo da estrutura electrónica dos sólidos cristalinos deverá assim ser parte integrante de um curso moderno, ao nível introdutório, de Física do Estado Sólido. No entanto, os livros de texto clássicos a este nível apresentam geralmente este assunto de uma forma árida, ou apenas o abordam muito superficialmente. Exemplos práticos das várias técnicas de cálculo discutidas raramente são apresentados; quanto muito o modelo de Kronig-Penney para uma rede de funções  $\delta$  é referido, mas este baseia-se num potencial irrealista, sendo a sua utilização justificada unicamente pela simplicidade da sua resolução analítica.

Tentando preencher esta lacuna, foi elaborado um programa de computador que implementa duas técnicas base — o método variacional por expansão em ondas planas e método de Wigner-Seitz — para o cálculo da estrutura de bandas de sistemas unidimensionais. As técnicas numéricas utilizadas são facilmente acessíveis aos alunos: método de Numerov para integração de equações diferenciais de 2ª ordem e técnica diagonalizadora de Jacobi. A linguagem de programação utilizada foi o Pascal, o que permite a sua fácil implementação em vários sistemas microcomputadores.

Como exemplo de aplicação prática deste programa, sugere-se a investigação pelos alunos da estrutura electrónica de sistemas unidimensionais da máxima actualidade: as super-redes semicondutoras de  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ . É possível, com este programa, a determinação das curvas de dispersão  $E(k)$ , bem como da função densidade de probabilidade,  $|\Psi(x)|^2$ , e algumas propriedades baseadas na aproximação semiclássica: massas efectivas, etc. É possível, em particular, estudar a transição das super-redes ao regime de poço quântico em função dos parâmetros estruturais.

Com base nos resultados deste programa, uma primeira interpretação das propriedades extraordinárias destes materiais — condutividade diferencial negativa, acção Laser sintonizável, etc. — poderá ser efectuada.

## Resolução de equações diferenciais *stiff*

PAIS, Fátima I. C. C., PORTUGAL, António A. T. G.

Departamento de Engenharia Química da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

### 1 Introdução

As equações diferenciais *stiff* são uma classe particular de equações diferenciais que necessita, para a sua resolução, de métodos especiais.

A *stiffness* consiste, essencialmente, num problema numérico derivado de parâmetros físicos. Quando existem várias variáveis envolvidas — sistemas de equações diferenciais — diferentes componentes decairão a velocidades diferentes. Para o sistema

$$y' = f(y) = Ay, y(0) = \eta \quad (1)$$

as velocidades de decaimento estão relacionadas localmente com os valores próprios de  $A$ . Num sistema químico, se algumas das reacções forem lentas e as restantes rápidas, temos uma situação em que o maior passo de integração possível é ditado pelo maior valor próprio de  $A$  enquanto o tempo de integração necessário para a evolução total da solução é governado pelo menor valor próprio (menor velocidade de decaimento). Este comportamento é denominado por *stiffness* e pode ser quantificado pela "Razão de Stiffness", SR, definida pela razão entre os módulos das partes reais dos maior e menor valores próprios da matriz  $A$ . Para problemas não lineares, a razão de *stiffness* é baseada nos valores próprios de  $J$  (matriz Jacobiano) sendo portanto função do tempo.

Na prática, e num caso genérico,  $h$  pode ter de ser intoleravelmente pequeno para que uma exactidão aceitável seja atingida; tão pequeno que os erros de arredondamento e o tempo de computação se tornam críticos. Para a resolução de problemas *stiff* é portanto necessária a utilização de métodos que não restrinjam o passo devido a razões de estabilidade. Geralmente, métodos implícitos funcionam melhor do que métodos explícitos em problemas *stiff* devido ao seu critério de estabilidade menos rígido. Métodos explícitos são mais adequados a problemas não *stiff*.

### 2 Os métodos numéricos

Os métodos numéricos mais adequados à resolução de equações diferenciais *stiff* são os métodos de Runge-Kutta semi-implícitos e métodos multipasso, tendo por isso já sido implementados em subrotinas computacionais.

Os métodos de Runge-Kutta são métodos de passo-único — ou seja, apenas é necessário conhecer o valor de  $y_n$  para calcular o valor de  $y_{n+1}$ . De entre estes métodos, podem destacar-se os métodos explícitos, implícitos e semi-implícitos. A fórmula geral para os métodos de Runge-Kutta *explícitos* é do tipo

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^{\nu} w_j k_j \text{ com } \begin{cases} k_j = hf(t_n + c_j h, y_n + \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} k_i) \\ c_1 = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Um exemplo deste método é o algoritmo implementado na subrotina DRKMXX, disponível no Departamento de Engenharia Química.

No entanto, devido às melhores propriedades de estabilidade, apenas são utilizados na resolução de equações diferenciais *stiff* os métodos de Runge-Kutta *semi-implícitos*, os quais fazem uso de  $\frac{\partial f}{\partial y}$ . Um certo número destes métodos foi proposto para a resolução de problemas que necessitam de grandes regiões de estabilidade[1]. A formulação geral para um sistema de  $m$  equações diferenciais simultâneas é

$$\begin{cases} k_j = (I - a_j h J)^{-1} h f(y_n + \sum_{i=1}^{j-1} b_{ji} k_i), & j = 1, 2, \dots, \nu \\ y_{n+1} = y_n + \sum_{j=1}^{\nu} w_j k_j \end{cases} \quad (3)$$

A determinação das constantes de Runge-Kutta é sequencial pois com  $a_i$ 's idênticos e uma decomposição LU da matriz  $I - ahJ$  apenas é necessária a resolução de  $m$  equações diferenciais com  $\nu$  lados direitos diferentes.

Outra família de métodos amplamente utilizada na resolução deste tipo de problemas é a dos métodos *multipasso*[2]. Para a aplicação destes métodos é necessário o conhecimento de valores da variável dependente  $y$  e da sua derivada em  $k$  pontos diferentes da rede,  $t_{n-1}, t_{n-2}, \dots, t_{n-k}$ , de forma a calcular a informação correspondente em  $t = t_n$ .

A expressão geral que caracteriza um método multipasso adequado a este tipo de problemas é

$$\sum_{i=0}^k (\alpha_i y_{n-i}) + h \beta_0 f_n = 0 \quad (4)$$

Uma vez que num problema do tipo valor inicial apenas  $y_0$  é dado como uma valor inicial, os outros valores necessários de  $y$ , que chamaremos os valores de partida, devem ser calculados.

### 3 O exemplo

Pretende-se conhecer a evolução das espécies intermediárias formadas ao longo do tempo no sistema químico bromato-cério-ácido malónico[3].

O modelo matemático a integrar é

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{d\tau} = 77.27(y_2 - y_2 y_1 + y_1 - 8.375 \times 10^{-6} y_1^2) \\ \frac{dy_2}{d\tau} = (-y_2 - y_1 y_2 + y_3) \\ \frac{dy_3}{d\tau} = 0.161(y_1 - y_3) \\ y_1 = 4, y_2 = 1.1, y_3 = 4 \quad \text{para } \tau = 0 \end{cases} \quad (5)$$

em que

$$\begin{aligned} y_1 &= [HBrO_2]/5.025 \times 10^{-11}, y_2 = [Br^-]/3.000 \times 10^{-7}, \\ y_3 &= [Ce(IV)]/2.412 \times 10^{-8} \text{ e } \tau = \text{tempo}/0.161 \end{aligned} \quad (6)$$

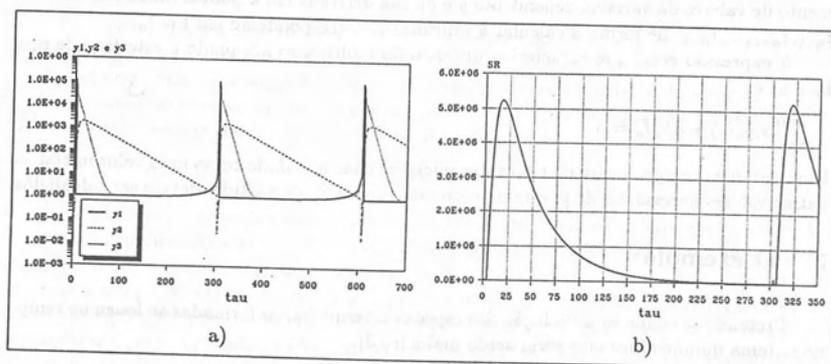
Pretende-se assim integrar este sistema de EDO's de forma a conhecer a evolução das concentrações dos intermediários  $HBrO_2$ ,  $Br^-$  e  $Ce(IV)$  ao longo do tempo.

Implementou-se a título experimental a resolução deste sistema de equações diferenciais com utilização de três algoritmos diferentes: Runge-Kutta explícito de quarta ordem (subrotina de integração DRKMXX), Runge-Kutta semi-implícito de terceira ordem (subrotina STIFF3[1]) e método multipasso de ordem e passo variáveis (subrotina LSODI[4]) disponíveis ao aluno no Departamento de Engenharia Química (ver Tab.1). Os valores de CPU referem-se à execução dos programas correspondentes num computador "SUN WORKSTATION 3/60".

A Fig.1.a mostra a evolução das concentrações dos intermediários ao longo de um espaço de tempo bastante longo, o que põe em evidência a natureza oscilatória da solução. A Fig.1.b representa a evolução da razão de *stiffness* ao longo do tempo.

Passo de integração inicial	Gama de integração ( $\tau$ )	Possibilidade de integração	CPU gasto na execução (s)
DRKMXX			
0.01	0→0	Não	14.7
0.002	0→6	Não	122.1
0.001	0→8.2	Não	429.9
0.0002	0→9	Sim	594.3
STIFF3			
0.01	0→9	Sim	2661.0
0.0002	0→9	Sim	2403.2
LSODI			
—	0→9	Sim	6.5
—	0→1218.8	Sim	97.4

Tabela 1: Valores de CPU utilizados pelas subrotinas DRKMXX, STIFF3 e LSODI.

Figura 1: Evolução ao longo do tempo de: a)  $y_1$ ,  $y_2$  e  $y_3$ ; b) razão de stiffness, SR.

#### 4 Conclusões

1. A LSODI é a subrotina mais eficiente. A DRKMXX e a STIFF3 são inadequadas para o problema em questão.
2. Mesmo que uma subrotina inadequada forneça resultados numéricos, estes podem ser destituídos de significado devido à acumulação de erros de arredondamento.
3. É fundamental um integrador de passo variável e estrito controlo do erro para a obtenção de resultados fiáveis em sistemas de equações diferenciais stiff.

#### Bibliografia

- [1] J. Villadsen and M. L. Michelsen, *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation* (Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.Y. 1978)
- [2] C. W. Gear, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations* (Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.Y. 1971)
- [3] R. J. Field, E. Koros e R. M. Noyes, *J. Am. Chem. Soc.* **94**, 8649 (1972)
- [4] A. C. Hindmarsh, *ACM Signum Newsletters* **15**, 10 (1980)

## Simulação de fenómenos de transporte: coeficiente de difusão

VASSILENKO, Valentina B., LARANJEIRA, Manuel F.

Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

Descreve-se a simulação em computador de fenómenos de transporte em gases e em líquidos que consistem no desenvolvimento dum transferência ordenada e orientada de massa (difusão), de impulso (viscosidade) e de energia interna (termocondutividade). No decorrer deste processo em gases alteram-se o carácter totalmente caótico do movimento das moléculas e, também, a distribuição de Maxwell da velocidade das moléculas. Nos casos mais simples de fenómenos de transferência unidimensionais, as grandezas físicas que os caracterizam dependem apenas dum coordenada cartesiana.

Para simulação das propriedades dinâmicas dum fluido em equilíbrio considerou-se que se segue a trajectória dum única partícula identificada (partícula  $i$ ) e que num dado instante de tempo escolhido arbitrariamente a sua posição é  $\vec{r}_i(t_1)$ . Num instante posterior  $t_2$ , pode-se determinar o seu deslocamento  $\vec{r}_i(t_2) - \vec{r}_i(t_1)$ . Sabemos que se a partícula  $i$  estiver submetida a uma força total igual a zero, então o seu deslocamento aumenta linearmente com o tempo. Contudo uma partícula num fluido sofre muitas colisões e em media o seu deslocamento total seria zero. Por isso mais importante é o deslocamento médio quadrático  $R(t)^2$  definido por

$$R(t)^2 = \langle |\vec{r}_i(t_2) - \vec{r}_i(t_1)|^2 \rangle$$

onde  $t = t_2 - t_1$ . A média foi feita sobre todas as partículas e depende somente da diferença de tempo. Esta variação de  $R(t)$  com o tempo é consistente com a relação de Einstein

$$R(t)^2 = 2Dt \quad (t \rightarrow \infty)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão. Esta relação permite obter o coeficiente de difusão  $D$  para diferentes temperaturas a partir do gráfico  $R(t)^2$  versus  $t$ .

Do ponto de vista didático consideramos importante estudar uma outra propriedade de uma partícula chamada função de autocorrelação de velocidade  $Z(t)$ . Se a partícula  $i$  estiver sujeita a uma força nula, a sua velocidade será constante e portanto num instante de tempo posterior permanecerá "em correlação" com a sua velocidade anterior. Devido as interações com outras partículas no fluido espera-se que após várias colisões a velocidade da partícula não estará em correlação muito forte com a sua velocidade anterior e deste modo definimos

$$Z(t) = \langle \vec{v}_i(t_2) \cdot \vec{v}_i(t_1) \rangle$$

onde  $t = t_2 - t_1$  e  $\vec{v}_i(t_2)$ ,  $\vec{v}_i(t_1)$  são as velocidades da partícula no instante  $t_1$  e  $t_2$  respectivamente. Para estimar o coeficiente de difusão  $D$  podemos estabelecer a relação

$$D = \frac{1}{d} \int_0^{\infty} Z(t) dt$$

Esta expressão que relaciona o coeficiente de difusão com o integral de tempo duma função de autocorrelação é um exemplo duma relação geral entre coeficientes de transporte tais como a viscosidade, conductividade térmica e funções de autocorrelação.

## Uma abordagem computacional ao problema da complexidade na natureza

SAINHAS, J., CORREIA DA SILVA, K. M.

Faculdade de Motricidade Humana da Universidade Técnica de Lisboa

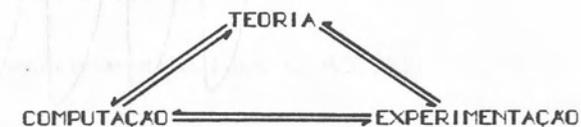
Estrada da Costa - Cruz Quebrada

1499 LISBOA Codex

A sofisticação dos meios técnicos utilizados no ensino não é condição suficiente para a sua melhoria qualitativa, mas será indubitavelmente uma condição necessária à prossecução desse objectivo. No entanto, será recomendável que se adoptem alguns cuidados metodológicos e científicos de forma que essa sofisticação técnica não seja um fim em si, mas sim um meio que contribua para a actualização e enriquecimento conceptual dos currículos. Só assim a utilização generalizada dos computadores em ambientes pedagógicos poderá ter importantes efeitos multiplicadores no ensino das ciências.

Mais importante do que ensinar os aspectos técnicos intrínsecos à utilização dos computadores, o que aliás é facilmente assimilável pelas populações jovens, aquilo que é crucial ensinar são alguns aspectos técnico-metodológicos que potenciem a utilização dos computadores no estudo de problemas científicos concretos. Neste contexto metodológico os alunos habituam-se a encarar os computadores como simples meios auxiliares de estudo.

Independentemente do nível de escolaridade, o ambiente metodológico ideal à formação científica, deverá obedecer genericamente ao seguinte esquema:



Como exemplo de uma aplicação concreta dentro do esquema metodológico previamente definido, nesta comunicação faz-se uma abordagem integrada ao problema da complexidade na natureza, estudando-se concretamente algumas dinâmicas oscilantes (periódicas e aperiódicas), as quais tem vindo a ser correlacionadas com processos de auto-organização [1, 2].

Em sistemas não-lineares, por exemplo com reacções autocatalíticas ( $A + X \rightarrow 2X$ ), e em condições termodinâmicas de longe do equilíbrio, o que pode ser atingido em sistemas abertos, podem ocorrer espontaneamente processos de auto-organização estrutural

e funcional. Estes estados de ordem são caracterizados por padrões e dinâmicas periódicas [3,4].

O mais enigmático de tudo isto é o facto deste tipo de fenomenologia se manifestar nos mais diversos sistemas (físicos, químicos, biológicos e mesmo em sistemas económicos e sociais).

Nesta comunicação é utilizado como modelo experimental a reacção de Belousov-Zhabotinsky [5], apresentando-se alguns resultados experimentais potenciométricos e espectrofotométricos, adquiridos e analisados em computador, os quais revelam as propriedades de ciclo limite deste sistema químico. Esta reacção química constitui um bom exemplo de um sistema homeostático.

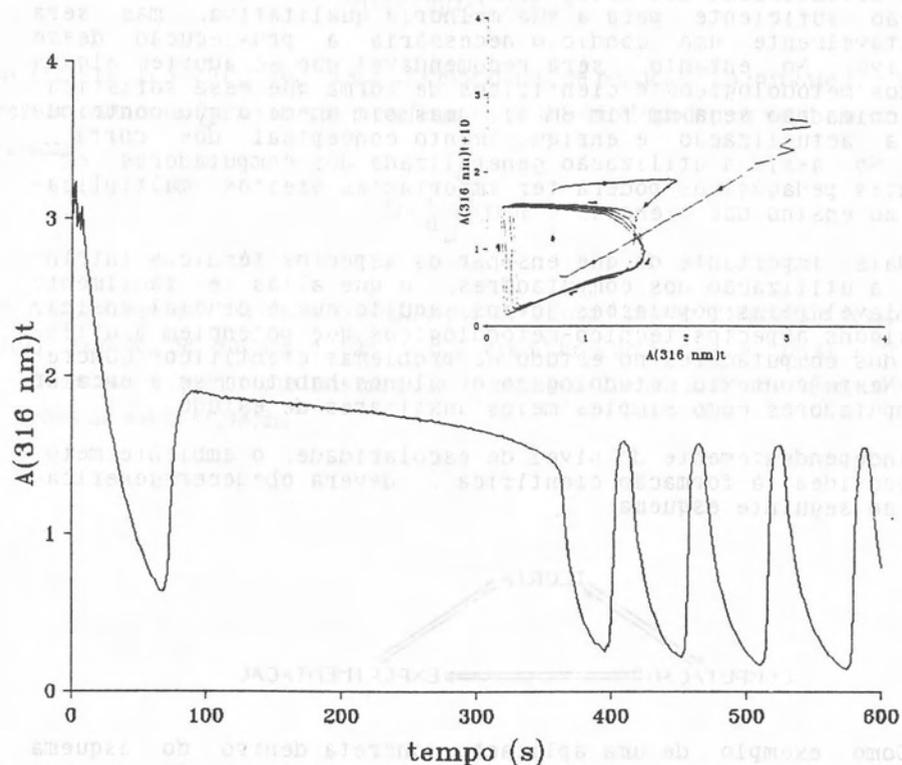


Fig. 1 - Evolução da reacção de Belousov-Zhabotinsky para um ciclo limite. Observação espectrofotométrica (HP 8451A): evolução temporal ( $t, A_t$ ) e no espaço das fases ( $A_t, A_{t+10}$ ).

Condições de experiência:

$[H_2SO_4]_0 = 1.5 M$ ,  $[CH_2(COOH)_2]_0 = 0.1000 M$ ,  $[KBrO_3]_0 = 0.0300 M$  e  $[Ce(SO_4)_2 \cdot H_2O]_0 = 0.0015 M$ ;  $T = 25 C$ ;  $\lambda = 316 nm$ .

São ainda apresentados alguns resultados de simulações com modelos fenomenológicos que desenvolvem dinâmicas oscilantes (ciclos limite e atratores estranhos). E dada especial atenção à seguinte equação às diferenças [6]:

$$X_{t+1} = 4r X_t (1 - X_t)$$

Equações deste tipo, não obstante a sua simplicidade algébrica, são capazes de desenvolverem dinâmicas muito complexas, nomeadamente estados de caos. São facilmente simuláveis numa simples máquina de calcular programável, o que faz destas equações às diferenças uns bons modelos fenomenológicos para um estudo introdutório dos fenómenos não-lineares, nomeadamente na caracterização de estados de ordem e caos.

AGRADECIMENTOS

A parte experimental deste trabalho foi realizada no Centro de Estudos de Bioquímica e Fisiologia Animal (INIC), Instituto Bento da Rocha Cabral.

REFERÊNCIAS

- 1 - Haken, H. (1978), Synergetics - an introduction, Second enlarged edition, Springer-Verlag, Berlin.
- 2 - Peacocke, A.R. (1983), An introduction to the Physical Chemistry of Biological Organization, Clarendon Press, Oxford.
- 3 - Field, R.J. & Schneider, F.W. (1989), Oscillating chemical reactions and nonlinear dynamics, J. Chem. Educ. 66(3): 195-204.
- 4 - Vidal, C. (1989), Les ondes chimiques, La Recherche 20:1476-1485.
- 5 - Field, R. J. (1972), A reaction periodic in time and space, J. Chem. Educ. 49(5): 308-311.
- 6 - May, R. M. (1976), Simple mathematical models with very complicated dynamics, Nature 261: 459-467.

## Simulação de um fluido perfeito

MARQUES, Luís Filipe Correia, FIOLHAIS, Carlos  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Este programa (escrito em Turbo-Pascal para um computador IBM-PC compatível com placa gráfica) destina-se a simular um fluido perfeito através da resolução numérica da equação de Laplace a duas dimensões. O resultado final apresentado pelo programa consiste na representação das linhas de corrente do fluido perfeito em volta de um ou mais obstáculos (ver figuras):

Os obstáculos utilizados podem ser de três tipos:

- Um cilindro centrado no meio da rede.
- Uma elipse centrada no meio da rede.
- Dois cilindros a uma certa distância um do outro (problema que não é solúvel analiticamente).

Utiliza-se um método iterativo (relaxação) baseado numa rede de pontos. São fornecidos à partida os valores do potencial nos seguintes pontos de fronteira:

- No "infinito" (pontos exteriores da rede), onde o potencial é igual ao produto da velocidade do fluido pela ordenada.

- Na superfície dos obstáculos onde o potencial é igual a zero.

A todos os outros pontos da rede são atribuídos de início valores plausíveis.

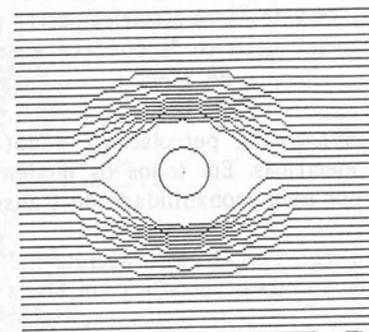
Em cada ciclo iterativo o valor do potencial é alterado. O programa termina quando se atingir uma determinada convergência, definida pelo utilizador no início do programa. Esta convergência é a diferença dos valores do potencial num dado ponto da rede em duas iterações consecutivas.

O resultado é tanto melhor quanto maior for o número de pontos da rede, uma vez que a realidade física macroscópica é contínua. No entanto, o tempo de cálculo para cada iteração é proporcional ao número de pontos da rede, sendo o processo moroso quando esse número é demasiado grande. Poder-se-ia reduzir o número de iterações necessárias introduzindo um parâmetro de convergência maior mas isso diminui obviamente a precisão dos resultados.

Os cálculos para um número elevado de pontos da rede (por exemplo 125 x 125) e um valor pequeno do parâmetro de convergência (0,001) demoram várias horas num IBM-PC.

Este trabalho foi iniciado no ano de 1988-1989 no âmbito da cadeira de Física Computacional.

### ALGUNS EXEMPLOS DOS RESULTADOS OBTIDOS PARA CONVERGENCIA 0.1



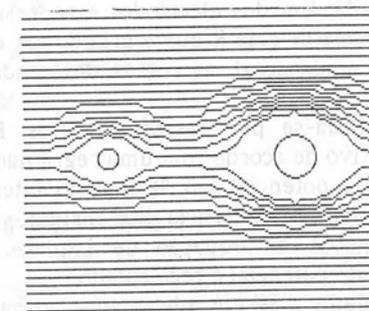
OPCAO  
1 CILINDRO

N. de pontos  
da rede = 91

Convergencia  
minima = .1

Numero de  
iteracoes = 147

Convergencia  
atingida =  
9.989166E-02



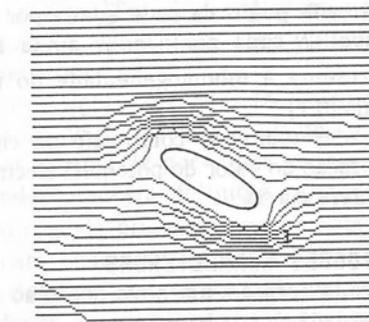
OPCAO  
2 CILINDROS

N. de pontos  
da rede = 91

Convergencia  
minima = .1

Numero de  
iteracoes = 127

Convergencia  
atingida =  
9.941864E-02



OPCAO  
ELIPSE

N. de pontos  
da rede = 91

Convergencia  
minima = .1

Numero de  
iteracoes = 111

Convergencia  
atingida =  
9.977722E-02

## Simulação computacional de descargas eléctricas em meios dieléctricos

SILVA, Jorge Alexandre Carvalho

Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

### INTRODUÇÃO

O crescimento de estruturas fractais em meios físicos deve-se à inhomogeneidade do meio ou a um campo local. Quando uma descarga eléctrica ocorre num meio isolador não homogéneo, por um lado o potencial eléctrico  $\mathcal{U}$  obedece a equação de Laplace  $\nabla^2 \mathcal{U} = 0$ , e, por outro lado, a anisotropia do meio é responsável pela natureza aleatória dos padrões produzidos.

Neste trabalho, o modelo da invasão por percolação é adaptado e aplicado ao estudo dos padrões das descargas eléctricas. Em todos os modelos considerados, o crescimento da descarga é regulado por uma probabilidade de transição, que é função do potencial eléctrico.

O programa foi realizado em Turbo Pascal num Macintosh Plus, no âmbito da cadeira de Física Computacional, do 4º ano da licenciatura em Física da FCTUC, no ano lectivo de 1988/89.

### SIMULAÇÃO DE MODELOS DE DESCARGAS ELÉCTRICAS

Considere-se uma rede quadrada. Um dos eléctrodos é representado pelo ponto central e o outro por uma circunferência de raio  $R$  que é grande em comparação com o tamanho do motivo a gerar. De um modo geral, as regras dos modelos de descargas eléctricas são as seguintes:

- 1) O crescimento da descarga dá-se por passos discretos. Em cada passo é adicionado um ou mais pontos ao motivo de acordo com uma regra não determinista;
- 2) As condições fronteira para o potencial são  $\mathcal{U} = 0$  no interior da região de descarga e  $\mathcal{U} = 1$  sobre o perímetro da circunferência. Nos restantes pontos da rede o potencial é determinado pela resolução da equação de Laplace pelo método da relaxação. Após cada iteração o valor do potencial é recalculado;
- 3) Em cada iteração são candidatos a serem adicionados ao padrão da descarga todos os pontos da rede vizinhos da descarga já formada;
- 4) A probabilidade associada a cada ponto da rede é dada por uma potência do potencial, cujo expoente,  $p$ , é ajustável. A cada ponto pode ainda ser associado um coeficiente de descarga,  $B$ , que representa a inhomogeneidade do meio, e que está aleatoriamente distribuído no intervalo  $[0,1]$ .

Em todas as simulações efectuadas tomou-se como raio da circunferência 100 unidades (pontos do ecrã) e a actualização do valor do potencial eléctrico foi feita até a variação relativa em cada passo ser inferior a 5%.

#### 1) O MODELO DAS PROBABILIDADES NORMALIZADAS

Neste modelo é adicionado, em cada iteração, um novo ponto ao motivo já gerado. A fórmula que dá a probabilidade associada a cada ponto é:

$$P = \mathcal{U}^p / \sum (\mathcal{U}^p).$$

Não se leva em conta a inhomogeneidade do meio. Dada esta distribuição de probabilidades, é adicionado ao motivo um novo ponto escolhido aleatoriamente.

A Fig. 1 mostra dois motivos gerados por este modelo para  $p = 1$ . A sua dimensão foi calculada tendo-se obtido  $D_f = 1.715 \pm 0.001$  para 926 pontos e  $D_f = 1.695 \pm 0.001$  para 1905 pontos. Os autores deste modelo (Ref. 1) indicam  $D_f = 1.75 \pm 0.02$  para estas figuras. Na Fig. 2 mostra-se o gráfico da variação do logaritmo do número de pontos contidos dentro de uma circunferência em função do raio desta. Note-se que a inclinação desta recta é, por definição, a dimensão fractal:  $D_f = \ln(N(r)) / \ln(R)$ .

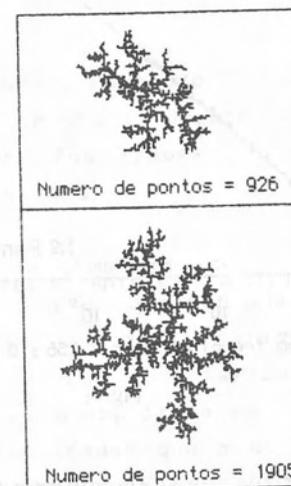


Fig. 1

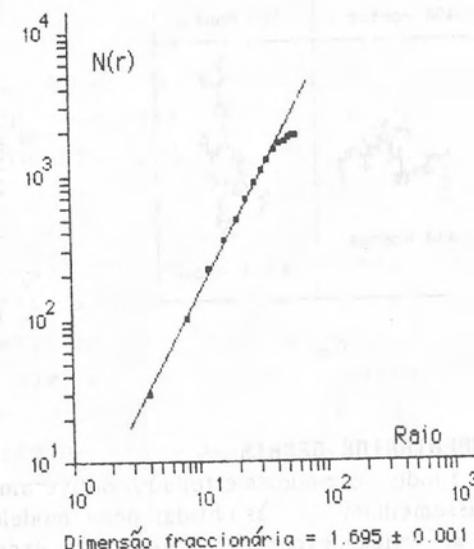


Fig. 2

#### 2) O MODELO DA PROBABILIDADE MÁXIMA

A probabilidade associada a cada um dos pontos da rede é determinada através da regra  $P = B * \mathcal{U}^p$ . O ponto escolhido em cada passo é aquele que tiver o maior valor de  $P$ . Nas simulações efectuadas fez-se o parâmetro  $p = 0.25$ , tendo sido obtidos os motivos representados na Fig. 3. Verifica-se uma grande anisotropia nos motivos gerados, a tal ponto que apenas uma das ramificações iniciais continua a crescer após umas dezenas de iterações.

A dimensão das figuras geradas foi calculada pelo método do raio de giração. Recordar-se que o raio de giração é o raio de um anel cujo momento de inércia é o mesmo que o de um sistema de partículas, e cuja massa é igual à soma das massas das partículas. De acordo com esta definição, a medida que o número de pontos,  $N$ , do motivo aumenta, o raio de giração aumenta com  $N$  de acordo com  $R_g = N^{-1/D_f}$ . Os valores obtidos foram  $D_f = 1.143 \pm 0.001$ ,  $D_f = 1.667 \pm 0.001$ ,  $D_f = 1.256 \pm 0.001$ , e  $D_f = 1.341 \pm 0.001$ , para os motivos de 404, 380, 414 e 471 pontos, respectivamente. A dimensão obtida pelos autores (Ref. 2) para uma geometria de electrodos planos é

paralelos foi  $D_f = 1.25$ . Na Fig. 4 encontra-se esta representação grafica para o agregado de 414 pontos.

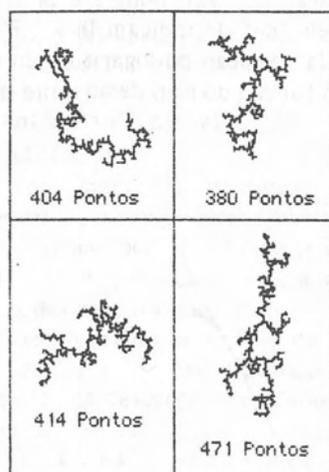


Fig. 3

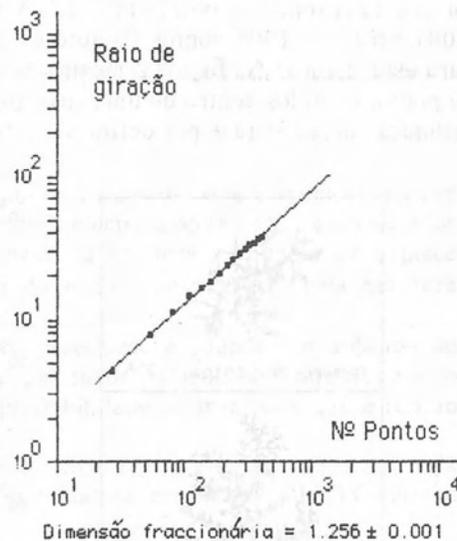


Fig. 4

**COMENTÁRIOS GERAIS**

Para todos os modelos estudados obtiveram-se estruturas altamente ramificadas, que se assemelham às obtidas pelos modelos da agregação limitada por difusão (DLA) e as obtidas experimentalmente em experiências de descargas eléctricas em meios isoladores. Nestas ultimas, obtiveram-se motivos cuja dimensão de Hausdorff e  $D_f \approx 1.7$ . Contudo, a comparação com os resultados experimentais deve ser feita com algumas reservas, devido a diferente simetria.

Um outro ponto que merece atenção é o pequeno tamanho dos sistemas considerados. O calculo da dimensão fractal através dos processos referidos pode pois vir afectado de um erro apreciavel.

Uma característica comum a todos os modelos é a dependência da probabilidade de transição relativamente a um parametro  $p$  arbitrario. Isto implica que é possível variar a dimensão das simulações por alteração do valor deste parametro. Não existe uma classe de universalidade para varios valores de  $p$ .

**Referências :**

1) L Niemeyer, L Pietronero, H J Wiesmann. Fractal Dimension of Dielectric Breakdown, Physical Review Letter: . 52 (1984) 1033.  
 2) F Family, Y C Zhang, T Vicsek. Invasion Percolation in an external field: dielectric breakdown in random media, Journal of Physics A: Mathematics and General. 19 (1986) L733.

**Simulação de uma curva de titulação ácido fraco - base forte**

FERNANDES, Fernando M. S. Silva, NEVES, Leonel A. T. P.  
 Departamento de Química da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
 Rua Ernesto de Vasconcelos, C1, 5º  
 1700 LISBOA

Fernandes, Fernando M.S.Silva, Neves, Leonel A.T.P.  
 Departamento de Química e CECUL, Faculdade de Ciências de Lisboa, Rua Ernesto de Vasconcelos, Bloco C1, 5º piso, 1700 Lisboa.

A simulação de reacções de titulação ácido fraco-base forte apresentada, utiliza métodos de cálculo simples e está implementada numa gama de microcomputadores caracterizados pela acessibilidade e baixo preço; exemplifica-se deste modo o amplo leque de possibilidades que a utilização de microcomputadores vem oferecendo ao Ensino da Química.

O programa é construido de forma a que seja possível seguir passo a passo a reacção estudada. Os resultados finais são apresentados nas formas gráfica e alfa-numérica; adicionalmente o programa permite a selecção (a partir dos dados pertencentes a uma lista previamente introduzida) do indicador mais apropriado à titulação estudada.

## Método de Job para equilíbrios simultâneos — simulações por computador

GIL, Victor M. S.

Departamento de Química da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

OLIVEIRA, Nuno

Departamento de Engenharia Química da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

O chamado método de Job, ou método das variações contínuas, é uma das técnicas experimentais utilizáveis no estudo da estequiometria e extensão de reacções, designadamente na determinação da composição e constante de formação de complexos. Uma das limitações atribuídas ao método decorre da eventual existência de equilíbrios concorrentes com a reacção  $aA + bB \rightleftharpoons A_aB_b$  em que se está interessado. Este problema é agora clarificado por simulação computacional.

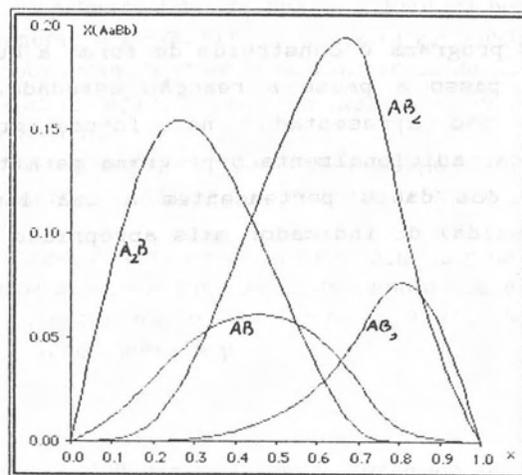
Considerados  $n$  equilíbrios  $a_iA + b_iB \rightleftharpoons A_{a_i}B_{b_i}$  com constantes  $K_i$ , sendo as concentrações iniciais de A e B respectivamente  $|A|_0 = (1-x)M$  e  $|B|_0 = xM$  e definindo  $X_A = |A|/M$ , etc. tem-se para  $K'_i = K_iM^{(a_i+b_i-1)}$  um sistema de  $n$  equações não lineares que podem ser resolvidas numericamente pelo método de Newton-Raphson após o rearranjo

$$f_j(X_{A_{a_1}B_{b_1}}, X_{A_{a_2}B_{b_2}}, \dots) = 0 \quad (j=1, \dots, n)$$

permitindo obter as concentrações  $X_{A_{a_i}B_{b_i}}$  por iteração.

O programa de computador (SIMULJOB) foi escrito em linguagem BASIC (Microsoft) para um microcomputador Macintosh Plus. Para a apresentação gráfica foi preparado um outro programa (GRAJOB).

Apresentam-se as curvas de Job para vários complexos concorrentes (e.g. Figura) e apuram-se e racionalizam-se os desvios  $\Delta x$  nos valores  $x$  correspondentes a máxima concentração dos complexos ( $x'_{\max.}$ ) em relação aos valores teóricos  $x_{\max} = b/(a+b)$ ,  $\Delta x = x'_{\max.} - b/(a+b)$ . Estes e outros resultados estão aceites para publicação em J. Chemical Education.



Curvas de Job para quatro complexos simultâneos:  $A_2B$  ( $K'_1 = 10^2$ ),  $AB$  ( $K'_2 = 10$ ),  $AB_2$  ( $K'_3 = 5 \times 10^2$ ), e  $AB_3$  ( $K'_4 = 10^3$ ).

## Estado fundamental do átomo de hélio

OLIVEIRA, Orlando

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

É calculado o estado fundamental de átomos com dois electrões (configuração  $1s^2$ ), incluindo correlações electrónicas determinadas pelo método de Hartree-Fock. O potencial efectivo para cada electrão é comparado com o potencial coulombiano devido apenas ao núcleo.

## Simulação de Monte-Carlo de um gás perfeito clássico

HENRIQUES, Célia

Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

Apresenta-se um programa, escrito em Quick-Basic 4.0 para um computador IBM PC compatível (com placa gráfica Hercules), que simula o comportamento de um gás perfeito clássico no espaço tridimensional, recorrendo ao método de Monte-Carlo. Usa-se o algoritmo de Metropolis para calcular médias canónicas.

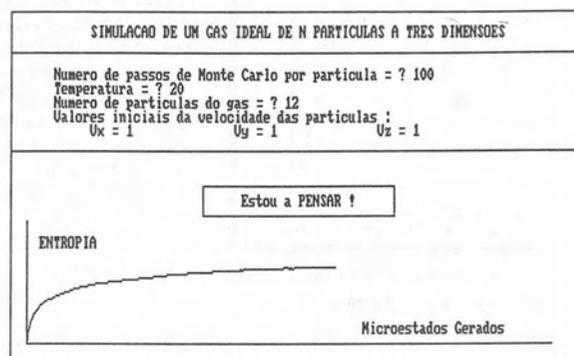
O resultado apresenta-se na forma de valores médios de velocidades e de gráficos da entropia e da energia.

Verifica-se que o método de Metropolis conduz de facto à distribuição de Boltzmann.

Este programa foi elaborado no âmbito da cadeira de Física Computacional do curso de Física da Universidade de Coimbra, no ano lectivo de 1988/1989.

### Bibliografia:

- H. Gould e J. Tobochnik, "An introduction to computer simulation methods- Application to physical systems", Vol. 2, Addison-Wesley, 1988.



## Oscilador harmónico de dois centros

NAIA, Marco, FIOLHAIS, Carlos

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

O oscilador harmónico de dois centros é um modelo simples para descrever fenómenos de física molecular (vibrações de uma molécula diatómica) ou de física nuclear (cisão).

Apresenta-se um programa, escrito em Quick-Basic 4.0 para um computador IBM PC compatível (placa gráfica Hercules), que permite obter os valores próprios mais baixos da seguinte equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k(|x| - a)^2 \phi_n(x) = E_n \phi_n(x)$$

para vários valores da distância  $a$  entre os dois centros, utilizando um método de Euler modificado e condições fronteiras adequadas. Os resultados para  $a = 0$  e  $a \gg 1$  concordam com os resultados triviais para um e dois osciladores respectivamente.

O programa permite visualizar para cada valor de  $a$  o potencial, o espectro de energias mais baixas, as funções de onda correspondentes e as densidades de probabilidade totais para núcleos leves sujeitos a um processo de cisão simétrico descrito por este modelo simples. É possível gravar e ler ficheiros de dados.

Embora o problema considerado tenha solução analítica, a solução computacional apresentada permite ilustrar a utilidade dos microcomputadores na aprendizagem da mecânica quântica. Um potencial de dois centros mais realista pode ser facilmente tratado.

Este programa foi elaborado no âmbito da cadeira de Física Computacional do curso de Física da Universidade de Coimbra, no ano lectivo de 1988/1989.

#### Bibliografia:

- Merzbacher, E. , "Quantum Mechanics", J. Wiley, New York, 1961, p.66.
- Scharnweber, D. e Greiner,W., "Nuclear Physics" A164 (1971) 257

## FISICA COMPUTACIONAL

### PROJECTO

#### DUPLO OSCILADOR QUANTICO

Marco Naia - 1989

prima qualquer tecla para continuar

### MENU PRINCIPAL

- A) POTENCIAL
- B) FUNCAO DE ONDA - CALCULO
- C)FUNCAO DE ONDA - LEITURA DE FICHEIROS
- D) ESPECTRO - CALCULO
- E) ESPECTRO - LEITURA DE FICHEIROS
- F) DENSIDADES NUCLEARES - CALCULO
- G)DENSIDADES NUCLEARES - LEITURA DE FICHEIROS
- H) ACABAR

tecle a sua opcao e faça ENTER ■

## Osciladores não lineares

SAMPAIO, Maria José, FIOLEAIS, Carlos  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Apresenta-se um programa (escrito em QuickBasic 4.0 para IBM-PC com placa gráfica CGA ou Hércules) que permite resolver várias equações diferenciais relativas ao movimento clássico de alguns osciladores não lineares, nomeadamente:

- 1) Oscilador de van der Pol, com um forçamento periódico

$$x'' - a(1 - x^2)x' + x = b.\cos(ct)$$

- 2) Oscilador de Duffing, com um forçamento periódico,

$$x'' - (a - x^2)x - bx' = c.\cos(dt)$$

- 3) Oscilador de Toda com massa desigual

$$x'' = \frac{1}{m}(exp(y - x) - exp(x - y))$$

$$y'' = \frac{1}{m^*}(exp(x - y) - exp(y - x))$$

Estes osciladores podem mostrar "atractores estranhos" no espaço de fase. Os resultados aparecem na forma de gráficos no espaço de fase ou de diagramas (x,t) e (y,t). Utiliza-se para a integração o método de Runge-Kutte de segunda ordem. Embora o programa tenha definidas

condições iniciais "por defeito", o utilizador pode fornecer as condições iniciais que desejar.

Este programa foi elaborado no âmbito da cadeira de Física Computacional do curso de Física da Universidade de Coimbra, no ano lectivo de 1987/1988.

### OSCILADOR DE DUFFING, PERIODICAMENTE FORCADO

Equação diferencial :

$$x'' - (a - x^2) * x - bx' = c * \cos(d * t)$$

( c = 0 -- oscilador nao forçado )

INTRODUZA I

\* os valores dos parametros :

a = 1  
b = .2  
c = .3  
d = 1

\* no. de iteracoes ( <= 2500 ) : 2400

\* incremento dt : .05

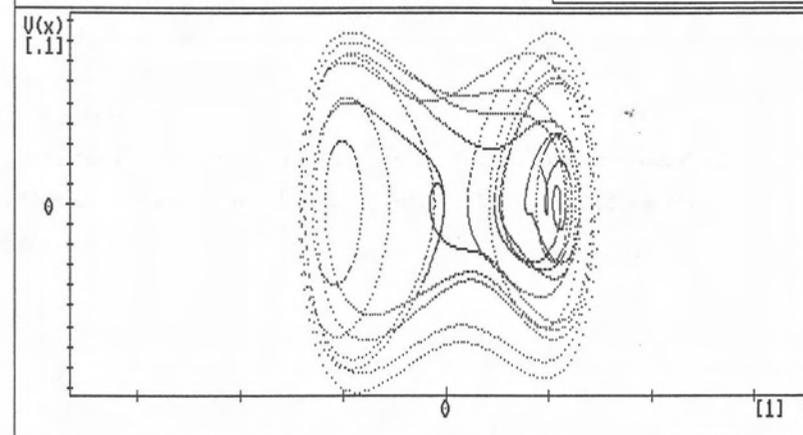
\* condicoes iniciais :

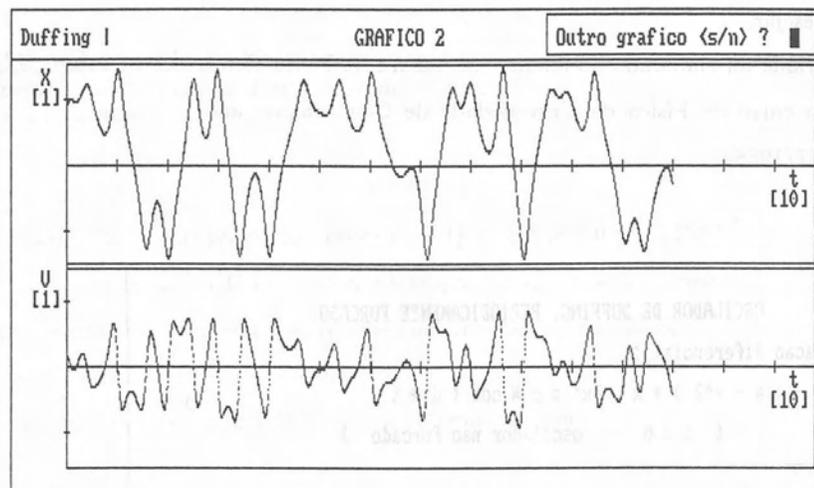
posicao X(0) = .9  
velocidade U(0) = 0

Duffing I

GRAFICO 1

Outro grafico (s/n) ? █





## Simulação simples de dinâmica molecular

GORDO, Paulo  
 Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
 3000 COIMBRA

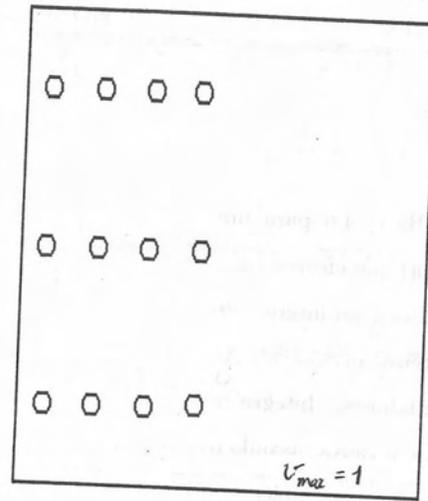
Apresenta-se um programa escrito em Quick-Basic 4.0 para um computador IBM-PC compatível (com placa gráfica) que efectua uma simulação da dinâmica de 12 moléculas monoatómicas, no interior de uma caixa bidimensional, sujeitas a condições fronteiras periódicas. As moléculas interagem por um potencial de Lennard-Jones. Integra-se numericamente o conjunto de equações de Newton em causa, usando o método de Verlet, considerando condições iniciais em que as moléculas estão distribuídas com velocidades aleatórias numa das metades da caixa.

O programa permite visualizar o movimento molecular, evidenciando a segunda lei da termodinâmica. Permite ainda averiguar qual é a distribuição de velocidades depois de atingido o equilíbrio.

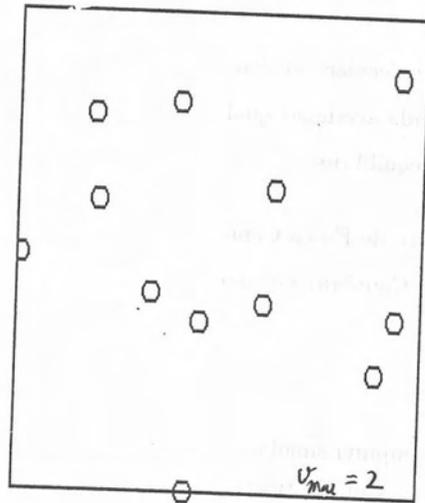
Este programa foi elaborado no âmbito da cadeira de Física Computacional do curso de Física da Universidade de Coimbra, no ano lectivo de 1987/1988.

### Bibliografia:

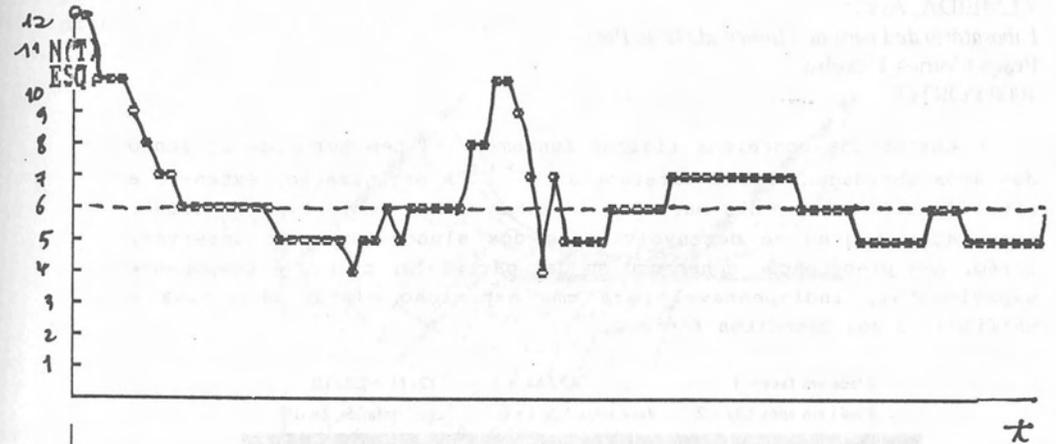
- H. Gould e J. Tobochnik, "An introduction to computer simulation methods- application to physical systems", Vol. 1, Addison-Wesley, 1988.



ENERGIA/PART.= -0.3759191  
 EN.CINETICA= 3.911031  
 EN.POTENCIAL=-8.422061  
 TEMPO (EM UNIDADES DE DT)= 5



ENERGIA/PART.= 2.725918  
 EN.CINETICA= 34.96081  
 EN.POTENCIAL=-2.249792  
 TEMPO (EM UNIDADES DE DT)= 150



$N(U)DU$

DIST. MAXWELL-BOLTZMANN

Press any key to continue

VELOCIDADE

## Simulação em Física fundamental

ALMEIDA, Abílio

Laboratório de Física da Universidade do Porto

Praça Gomes Teixeira

4000 PORTO

O ensino dos conceitos físicos fundamentais tem merecido ao longo dos anos abordagens muito diferentes.<sup>1,2,3,4,5</sup> A organização, extensão e nível de dificuldade das matérias expostas varia com o tipo de curso, preparação e grau de desenvolvimento dos alunos. Pode-se observar, porém, uma preocupação constante em dar particular relevo à componente experimental, indispensável para uma exposição clara, objectiva e unificadora dos conceitos físicos.

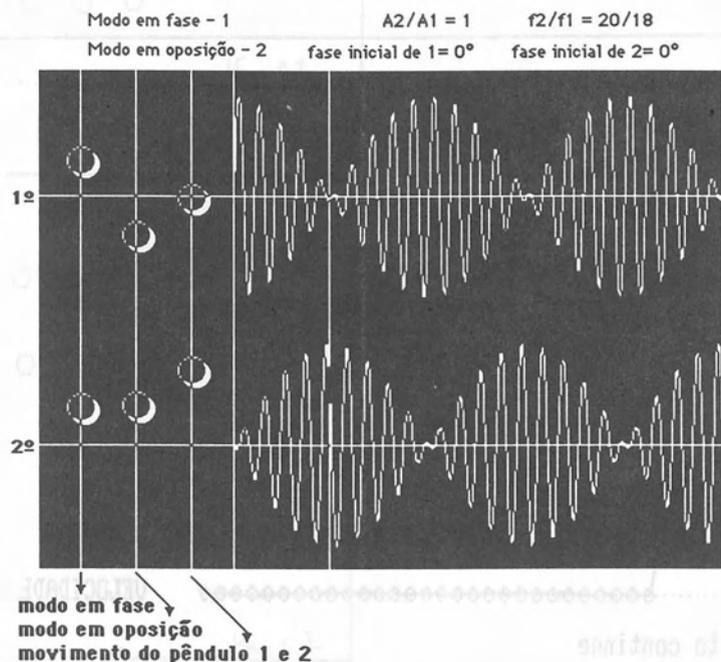


Figura 1: Movimento de dois pêndulos acoplados.

Se bem que possível, a apresentação de cursos teóricos com alguma componente experimental encontra dificuldades de origens diversas, tendo conduzido ao seu progressivo apagamento. Este aspecto menos positivo pode contudo encontrar na simulação por computadores uma solução prática e eficiente. A capacidade de aplicação dos

computadores actuais nas situações mais diversas permite o acesso fácil à simulação como complemento na apresentação de cursos teóricos. A flexibilidade dos ambientes que podem ser criados por simulação possibilita uma compreensão mais viva e um domínio mais completo dos diferentes temas expostos.

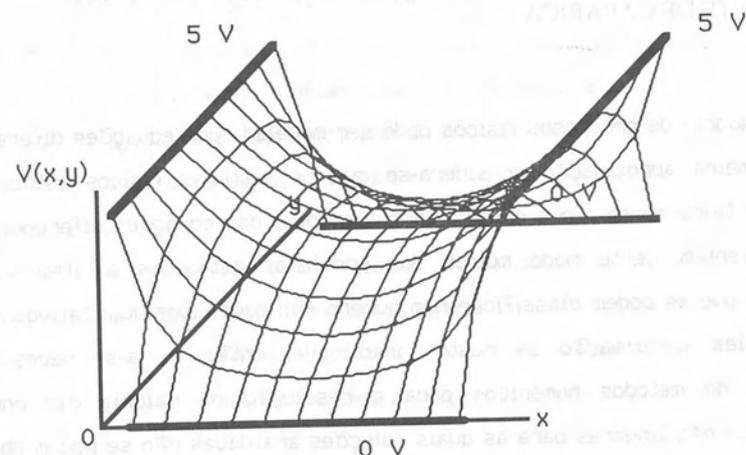


Figura 2: Solução da equação de Laplace para 4 condutores.

Os programas apresentados neste trabalho foram concebidos para um curso de Física Fundamental e pretendem mostrar o uso da simulação em Mecânica Clássica e Electromagnetismo. O tratamento de movimentos vibratórios harmónicos (figura 1) e da equação de Laplace (figura 2) são apenas dois exemplos de aplicação. Os programas foram escritos para o Apple Macintosh, para utilizadores sem qualquer conhecimentos de informática e podem ser apresentados complementarmente, de forma simples, na exposição da matéria teórica. A introdução destas simulações num curso de Física Fundamental leccionado nos dois últimos anos constituiu um atractivo novo para os alunos e contribuiu para uma compreensão mais fácil e global das correspondentes matérias.

### BIBLIOGRAFIA

1. The Feynman, Lectures on Physics, Addison-Wesley P. Company.
2. Berkley Physics Course, Mcgraw-Hill Book Company.
3. Fundamental University Physics, M. Alonso, E. Finn, Addison-Wesley P. Company.
4. Classical and Modern Physics, K. Ford, Xerox College Publishing.
5. Physics, D. Roller, R. Blum, Holden Day.

## Introdução aos sistemas não lineares

FRANCO, Idalino J. A.

SGAAF da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

A vasta maioria de processos físicos pode ser modelada por equações diferenciais. Numa primeira aproximação considera-se que os sistemas físicos estudados se comportam linearmente o que origina formas simples das equações diferenciais que os representam. Deste modo muitos dos problemas estudados admitem soluções analíticas que se podem classificar num número finito de tipos qualitativos. Quando esta simples aproximação se mostra inaplicável então torna-se necessária a utilização de métodos numéricos para a resolução da maioria das equações diferenciais não lineares para as quais soluções analíticas não se podem obter.

O computador além de permitir a sua resolução numérica fornece o meio ideal para a ilustração visual da complexidade de trajetórias possíveis das equações diferenciais não lineares.

A introdução de parâmetros controláveis nessas equações permite o estudo e observação directa de bifurcações e aparecimento de caos em sistemas físicos quando se atribuem a esses parâmetros valores possíveis e fisicamente interessantes.

Utilizamos as equações que modelam alguns fenómenos físicos correntes para exibir estes comportamentos não lineares.

São inúmeros os sistemas físicos conhecidos que apresentam caos. Uma das equações diferenciais não lineares mais simples que apresenta soluções caóticas é a de Rössler que pode ser escrita como o sistema de equações diferenciais de primeira ordem seguinte

$$dx/dt = -y - z$$

$$dy/dt = x + ay$$

$$dz/dt = b + xz - cz$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  são parâmetros. A fig.1 mostra uma solução desta equação para os valores dos parâmetros  $a=0,2$ ,  $b=0,2$ ,  $c=5,7$ . Variando estes parâmetros de modo

sistemático permite-nos percorrer o espaço de soluções desta equação não linear.

Muitos circuitos electrónicos exibem soluções complicadas e a fig.2 mostra-nos uma solução possível para um desses circuitos obtida por integração numérica da equação que representa a variação da corrente no circuito e que é uma forma da conhecida equação de van der Pol para certos valores dos parâmetros que nela aparecem. Mais uma vez podemos variar estes parâmetros e obter para cada conjunto de valores dos parâmetros a solução da equação. Consegue-se deste modo observar os pontos onde as soluções alteram o seu comportamento qualitativo, ou seja, as suas bifurcações.

Outro sistema onde aparece caos é por exemplo o tubo de descarga luminosa onde as correntes eléctricas aí geradas apresentam comportamento complicados. Podemos escrever as equações que modelam os fenómenos físicos que dão origem às correntes no tubo e por integração numérica exibi-las como se pode observar na fig.3.

O computador permite-nos também facilmente alterar as condições iniciais e estudar a sensibilidade das soluções a estas condições. As soluções caóticas são caracterizadas pela sua sensibilidade às condições iniciais.

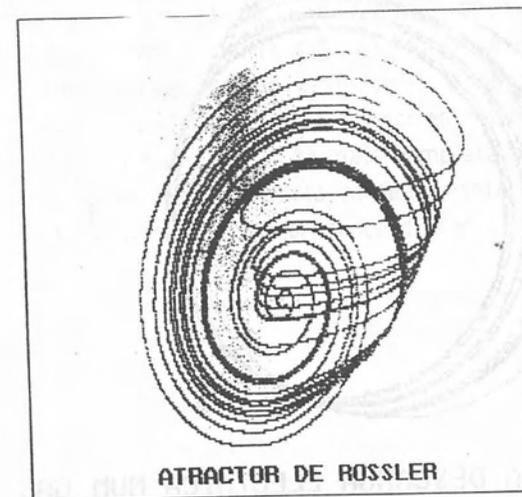


Figura 1

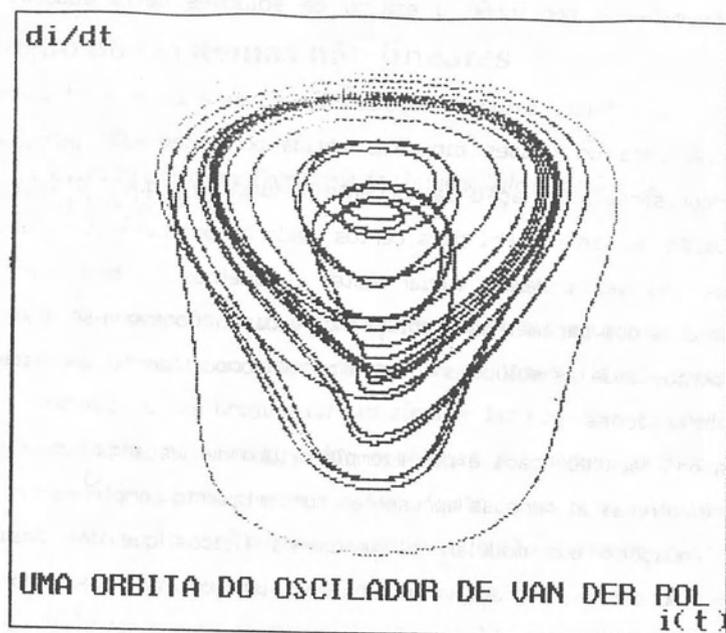


Figura 2

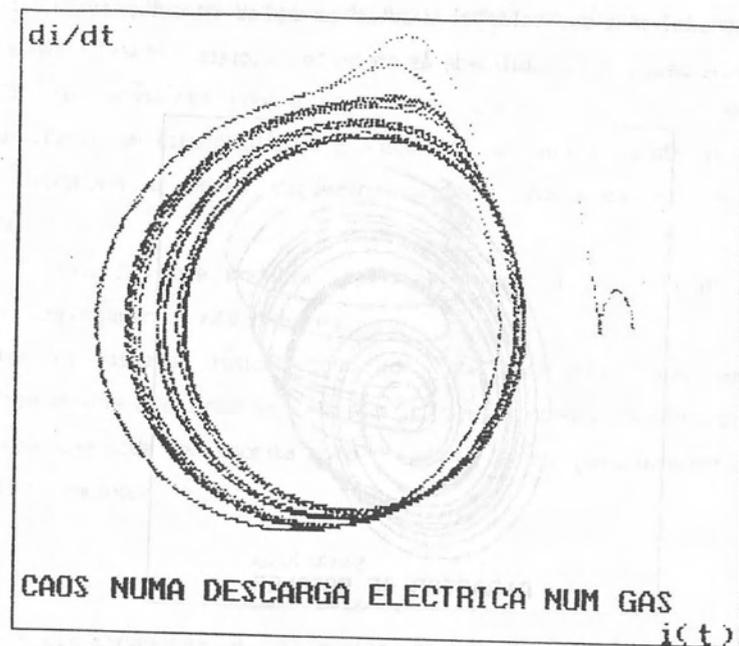


Figura 3

## Demonstração do programa "Partícula na caixa"

MAGALHÃES, Alexandre L.

Laboratório de Química da Universidade do Porto

Praça Gomes Teixeira

4000 PORTO

A resolução exacta da equação Schrödinger só é possível para sistemas materiais muito simples, como o átomo de hidrogénio e iões hidrogenóides, ou para certos modelos bastante utilizados em mecânica quântica, como é o caso do oscilador harmónico e da partícula num poço de potencial.

Com base neste último modelo, o autor elaborou, em linguagem Applesoft BASIC, um programa de muito fácil utilização, a que decidiu chamar PARTÍCULA NA CAIXA. Este trata o problema unidimensional da partícula de massa  $m$ , sujeita a dois tipos diferentes de função de potencial: poço de potencial infinito e poço de potencial com uma das paredes finita.

O programa PARTÍCULA NA CAIXA constitui um apoio didáctico à apresentação teórica do modelo da partícula em poço de potencial, permitindo o controlo de parâmetros como o número quântico, comprimento da caixa e valor do potencial de uma das paredes do poço, assim como a rápida visualização dos seus efeitos, nas soluções analíticas fornecidas por este modelo. Este programa proporciona, deste modo, uma assimilação mais completa de certos conceitos quânticos importantes inerentes ao modelo, nomeadamente, a quantificação da energia, densidade de probabilidade de presença da partícula, pontos nodais e efeito de túnel.

## Matriz de transferência discreta para o cálculo de funções de partição, valores próprios e vectores próprios

RAMALHO, João Paulo C. A. Prates, FERNANDES, Fernando M. S. Silva  
Departamento de Química e CECUL (INIC) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
Rua Ernesto de Vasconcelos, C1, 5º  
1700 LISBOA

Neste trabalho apresenta-se e ilustra-se a aplicação de um método, Método da Matriz de Transferência Discreta (Transfer Matrix Grid Method - TMG), que permite o cálculo da função de partição e de vectores e valores próprios do Hamiltoniano de um sistema quântico de pequena dimensionalidade.

O método, de muito fácil implementação e de grande rapidez de execução, permite obter resultados com grande precisão.

O TMG parte da representação da função de partição como integral de caminho de Feynman no tempo imaginário. Fazendo a sua discretização espacial, pode escrever-se como o traço de uma matriz de transferência de um sistema "tipo Potts". A subsequente diagonalização desta matriz permite obter os resultados pretendidos.

## Simulação molecular de átomos confinados em poros

BAPTISTA, António Manuel S. C. A., FERNANDES, Fernando M. S. Silva  
Departamento de Química e CECUL (INIC) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa  
Rua Ernesto de Vasconcelos, C1, 5º  
1700 LISBOA

Neste trabalho ilustra-se a aplicação da simulação molecular computacional ao estudo de átomos confinados em poros. São apresentados resultados obtidos pelos métodos da Dinâmica Molecular e de Monte Carlo em vários "ensembles" termodinâmicos.

Estes métodos de simulação permitem realizar o cálculo de propriedades termodinâmicas várias, bem como de propriedades de transporte.

Este tipo de abordagem contribui para a compreensão de processos de difusão através de poros de reduzido diâmetro (como os que ocorrem em certas membranas biológicas), cuja descrição teórica se depara com algumas dificuldades.

## Física computacional: uma experiência pedagógica no quarto ano dos cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra

FIOLHAIS, Carlos

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Pretende-se com esta cadeira familiarizar os alunos do quarto ano dos Cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra com a utilização de computadores em Física, nomeadamente com a simulação computacional de leis físicas. Atendendo aos recursos disponíveis, utilizam-se microcomputadores de 16 bits compatíveis IBM (sistema operativo MS-DOS), sendo as aulas exclusivamente práticas. Recorrem-se a exemplos da mecânica clássica, mecânica quântica e física estatística. É o seguinte o programa da cadeira:

### 0) Introdução:

Breve explicação da estrutura e funções de um computador. Evolução do cálculo automático, incluindo os principais desenvolvimentos do hardware e do software.

Principais aplicações dos computadores em física:

- utilizações gerais e indiferenciadas (processamento de texto, etc.);
- cálculo simbólico;
- análise numérica e gráfica;
- regulação de experiências em tempo real;
- ensino interactivo;
- simulação.

Os computadores pessoais compatíveis com a norma IBM. Introdução ao sistema operativo MS-DOS. Utilização de programas comerciais de utilidade em física como editores, programas de manipulação algébrica (**MuMath** e **Derive**) e programas de resolução de equações e representação gráfica de funções (**Eureka**).

O estudante é estimulado logo de início a interagir criativamente com o computador, aproveitando as possibilidades deste para resolver problemas usuais em física (por exemplo, solução numérica da equação de van der Waals e representação de curvas isotérmicas usando **Eureka** e simplificação de equações, integração e diferenciação algébricas, expansões em série de Taylor, etc., usando **Mumath** e **Derive**).

### 1) Linguagens de programação e algoritmos:

Linguagens mais comuns em aplicações científicas (Basic, Pascal, Fortran77). Programação estruturada e semelhanças entre as várias linguagens ( a linguagem adoptada na cadeira foi o **Turbo Pascal 5.5** da Borland). Algoritmos elementares e a sua transcrição computacional.

Problemas simples em análise numérica:

- Integração (métodos do trapézio, Simpson, Newton-Cotes e Gauss, com a comparação dos respectivos erros). Extrapolação de Richardson e método de Romberg. Integração com pontos extremos singulares.

- Diferenciação numérica (de 1.a e 2.a ordem);

- solução de equações diferenciais ordinárias de 1.a ordem (métodos de Euler e de Euler modificado, método de meio passo, método de Runge-Kutte de 2.a ordem).

### 2) Simulação de fenómenos determinísticos em mecânica clássica e quântica:

Soluções das equações de Newton nos seguintes casos:

- Queda dos graves com e sem resistência do ar ( a 1 e 2 dimensões): o problema do paraquedista e do lançador do dardo.
- Oscilador harmónico linear, livre e com atrito. Oscilador forçado (batimentos e ressonâncias). Retratos de fase.
- O problema de Kepler; verificação numérica e gráfica das leis de Kepler; outras forças centrais e análise da estabilidade de órbitas. O problema de um sistema solar com 2 planetas.

Solução da equação de Schrödinger independente do tempo para:

- o oscilador harmónico simples a 1 dimensão; precisão dos métodos aproximativos (perturbativo e variacional) em relação a soluções numéricas "exactas";
- átomo de hidrogénio a 1 e 2 dimensões (problema de Kepler quântico).

### 3) Simulação de fenómenos não lineares em dinâmica de partículas e de fluidos:

- O problema dos 3 corpos em mecânica celeste. O movimento de um planeta no campo de uma estrela dupla.
- Estudo de mapeamentos não lineares a 1 e 2 dimensões: a equação logística (caminho periódico para o caos por bifurcações sucessivas e relevância da constante de Feigenbaum), sistema de Henon , conjuntos Julia e de Mandelbrot.
- Atractores estranhos (sistemas de Lorentz e de Rössler). Fractais e dimensão fractal (ou de Hausdorff).
- Exemplos de atractores estranhos em física: o pêndulo amortecido e forçado. Secção de Poincaré e sua utilidade na análise de sistemas dinâmicos.

### 4) Simulações estocásticas:

- Números aleatórios. Definições operacionais de números pseudo-aleatórios. Determinação do período de um gerador de números aleatórios.
- Simulação de Ehrenfest da aproximação de equilíbrio. Tempo de relaxação e flutuações em termodinâmica do não-equilíbrio.

- Introdução a técnicas de Monte-Carlo: cálculo de integrais (aplicação à avaliação de momentos de inércia, volumes e hipervolumes). Algoritmo de Metropolis.

- Teoria da probabilidade: distribuições binomial, de Gauss e de Poisson. Passeios aleatórios (livres e com restrições) em 1, 2 e 3 dimensões. Indução da lei da difusão. Uso do método dos mínimos quadrados para análise de dados.

- Problemas de física estatística: caminhos aleatórios que se auto-evitam (polímeros), percolação (transição de fase geométrica) e modelo de Ising de um sólido magnético.

#### 5) Métodos computacionais em física experimental:

Ajustes lineares e não lineares de curvas. Transformadas de Fourier rápidas.

O aproveitamento dos alunos é efectuado por meio de um trabalho de projecto, que consiste na elaboração de um ou mais programas para resolver problemas físicos específicos. A seguinte lista indica alguns dos trabalhos efectuados nos anos de 1987/1988 e 1988/1989.

#### Projectos desenvolvidos pelos estudantes:

1- Análise da dinâmica de um sistema de várias moléculas que interagem por um potencial de Lennard-Jones.

2- Estudo dos osciladores anarmónicos de Toda, Duffing e van der Pols em mecânica clássica.

3- Simulação do fluxo de um fluido perfeito em torno de um obstáculo esférico ou cilíndrico.

4- Estudo do átomo de hidrogénio perturbado por um campo externo (efeito Stark).

5- Estudo do potencial de Woods-Saxon da física nuclear, incluindo interacção spin-órbita, e construção de densidades nucleares.

6- Estudo da formação de fractais usando o método de D.L.A. ("Diffusion limited aggregation") e suas variantes, incluindo a descrição de descargas eléctricas em meios dieléctricos.

7- Método de simulação de Monte-Carlo para o "ensemble canónico" (exemplo do gás perfeito clássico).

8- Estudo do choque de um pacote de ondas gaussiano numa barreira de potencial.

9- Estudo de um plasma electroestático a 1 dimensão (equação de Poisson).

10- Estudo de um campo electroestático a 2 dimensões, com condições fronteiras dadas.

11- Estudo da cisão nuclear num modelo simples: potencial de oscilador harmónico com 2 centros.

## O jogo da incerteza

NOGUEIRA, F., CALDEIRA, M. H.  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Este programa pretende consolidar os conhecimentos adquiridos pelo utilizador sobre a interpretação física das relações de incerteza de Heisenberg com relevância para a análise e significado dos conceitos subjacentes.

O trabalho desenvolve-se essencialmente em três fases:

1. Preparação de um estado e medida propriamente dita.

Obtenção de um espectro de valores característico de uma grandeza, num processo de medida dessa grandeza em estados identicamente preparados.

2. Distinguição entre incerteza e erros de observação experimental em medidas individuais.

3. Definição formal de incerteza em Mecânica Quântica.

Interpretação física da função de onda numa dada representação.

Estabelecimento das relações de incerteza e sua verificação através da análise da função de onda e respectiva transformada de Fourier.

Com este objectivo, foram estabelecidas, em primeiro lugar, diversas sequências de questões de escolha múltipla e acção de marcação de valores de incerteza em gráficos simuladores de resultados de experiências de determinação de posição e quantidade de movimento de partículas quânticas. Os gráficos são introduzidos pelo utilizador ou definidos no programa, consoante as circunstâncias.

Em seguida, é feito o traçado do módulo ao quadrado de funções de onda e transformadas de Fourier, de modo a realçar o seu significado físico e, explorando a definição de incerteza em Mecânica Quântica, pôr em evidência as relações de incerteza.

A estratégia seguida para o encadeamento das séries de questões baseia-se na tentativa de detecção da deficiência de interpretação ou desconhecimento dos conceitos revelado pelo utilizador através das sucessivas respostas seleccionadas, de modo a atingir o objectivo visado.

Pretende-se que este programa seja um utensílio que, usado individualmente, possa servir de complemento a aulas de uma disciplina introdutória de Mecânica Quântica (nível universitário), onde o assunto tenha sido abordado com alguma profundidade.

O "Jogo da Incerteza" corre em qualquer IBM compatível com qualquer placa gráfica instalada. No entanto, a sua execução numa placa que suporte cor (CGA, EGA, VGA) torna-se mais agradável e estimulante.

## Simulador de lentes electrostáticas

TEODORO, Orlando M. N. D., SANTOS, Adelino M. M., FRASER MONTEIRO, Luís  
Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

As lentes electrostáticas são largamente usadas em espectroscopia de iões e de electrões e em dispositivos como microscópios electrónicos, cinescópios e fontes de iões. Diferentemente das lentes ópticas, a acção destas lentes sobre as partículas carregadas não pode ser observada directamente.

Neste domínio, desenvolveu-se o programa para simulação de lentes electrostáticas ELS<sup>1</sup> (*Electrostatic Lenses Simulator*). O programa corre num computador *Data General MV 15000* e encontra-se, na sua quase totalidade, construído em Pascal AOS/VS. Ao conceber o ELS teve-se a intenção de produzir simultaneamente uma ferramenta de projecto e de ensino em óptica electrónica. Houve o cuidado de construir um programa de aplicação geral, mas de fácil utilização; um programa em que se pudesse desenhar qualquer geometria de eléctrodos, em que fosse possível trabalhar grandes quantidades de dados, cujo cálculo pudesse ter a precisão estabelecida pelo utilizador e que fornecesse os resultados do cálculo, não só sob a forma de dados impressos mas também de visualizações gráficas imediatas.

O cálculo é efectuado a partir dos dados introduzidos pelo utilizador. Para este fim, existe uma opção em que se pode descrever o sistema a calcular, parâmetros de cálculo e o tipo de resultados que se pretende (equipotenciais e/ou trajectórias). Os dados introduzidos constituirão um ficheiro que servirá de base para todas as operações seguintes. Este ficheiro poderá também ser alterado em qualquer altura ou duplicado para servir de base para outro sistema.

O primeiro procedimento após a introdução de dados é o cálculo da distribuição de potencial em todo o volume do sistema de lentes. O resultado é guardado noutro ficheiro que servirá de base para os procedimentos seguintes. Poderá seguir-se a procura das equipotenciais indicadas no ficheiro com os dados introduzidos. Estas equipotenciais podem dizer respeito a todo o sistema ou só a parte pré-definida. A sequência de pontos que constituem as equipotenciais procuradas é guardada num terceiro ficheiro. No caso de não se pretender ver as equipotenciais, após o cálculo do potencial, pode passar-se directamente para o cálculo das trajectórias. O resultado do cálculo, *i.e.*, a sequência de pontos que define cada trajectória, também é guardado num ficheiro.

À medida que estes vários ficheiros com os resultados forem sendo construídos, pode-se proceder à visualização gráfica. No monitor do terminal (semi-) gráfico podem observar-se directamente os resultados ou, caso se pretenda uma saída impressa, pode usar-se uma impressora laser. À medida que cada cálculo se efectuar, é construído um ficheiro com os resultados de interesse para o utilizador. Este inclui os dados de entrada e os resultados do processo de cálculo do potencial e das trajectórias. A Figura 1 representa esquematicamente a estrutura que se descreveu.

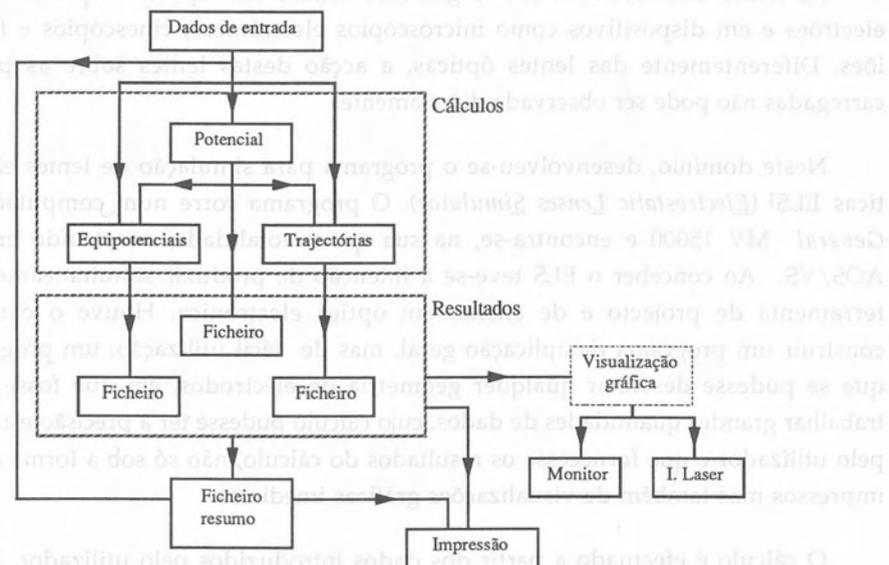


Figura 1- Representação esquemática da estrutura do programa.

Na Figura 2 mostra-se-se o efeito das aberrações em lentes electrostáticas. Em a) temos as trajectórias vindas de um objecto pontual O, colocado sobre o eixo. As trajectórias saem todas com uma energia de 100 eV e com ângulos de 2, 6 e 10°. Na ausência de aberrações, a imagem de um objecto assim seria também um ponto, *i.e.*, todas as trajectórias deveriam passar pelo mesmo ponto. No entanto, a presença de aberrações esféricas faz com que as trajectórias intersectem o eixo em posições diferentes. Em b) representa-se o efeito das aberrações cromáticas. Estas aberrações são devidas à diferença de energia entre as partículas. Na situação representada, as três partículas são lançadas do mesmo ponto mas com pequenas diferenças de energia: 90, 100 e 110 eV. O efeito da aberração cromática faz com que o ponto focal seja ligeiramente diferente para cada partícula e no lado da imagem as partículas tenham trajectórias separadas. Como pode ser observado, tanto para um caso como para o outro, o resultado da simulação fornece directamente o efeito das aberrações.

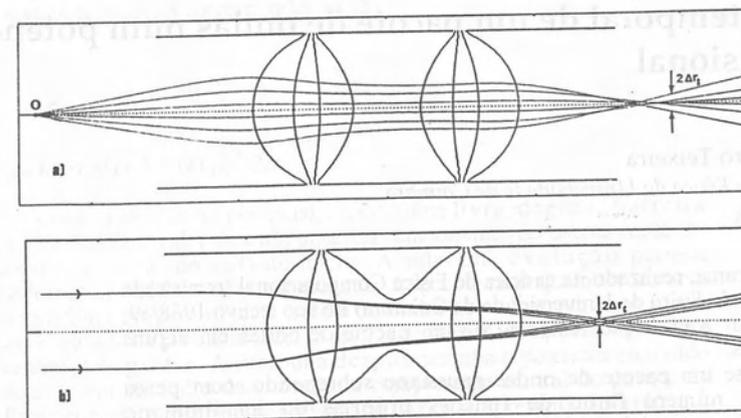


Figura 2 - Representação do efeito da aberrações em lentes electrostáticas:  
 a) aberração esférica; as partículas que saem todas do mesmo ponto com ângulos de 2, 6 e 10° não atravessam o eixo no mesmo ponto imagem.  
 b) aberração cromática; as partículas que saem todas do mesmo ponto mas com energias de 90, 100 e 110 eV, não atravessam o eixo no mesmo ponto imagem.

O programa apresenta características excelentes quanto à precisão dos cálculos e em relação a um vasto campo de aplicações. É possível trabalhar com matrizes de grandes dimensões (da ordem de 500 × 500 em representação de reais de dupla precisão) e pôr o programa a trabalhar em *batch*, tornando possível resolver sistemas muito grandes sem necessidade da intervenção do utilizador.

A interface com o utilizador foi especialmente cuidada, de modo a permitir uma fácil utilização, mesmo por utilizadores pouco experientes. Nomeadamente, a introdução dos dados permite a descrição de quase qualquer sistema de forma acessível. Como o ELS arquiva os resultados é possível criar bibliotecas com sistemas apropriados para demonstrações e para o ensino da óptica electrónica.

Embora este simulador seja nesta fase, um trabalho concluído, não se considera um projecto terminado. Há alguns aspectos em que as suas potencialidades podem ser alargadas e o desempenho melhorado. No entanto, é já uma ferramenta poderosa ao serviço do ensino e do projecto e desenvolvimento de sistemas de transporte de partículas carregadas.

<sup>1</sup> O M N D Teodoro, *Prova de Aptidão Pedagógica*, FCT/UNL, Lisboa (1990).

## Evolução temporal de um pacote de ondas num potencial unidimensional

DIAS, José Pedro Teixeira

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Este programa, realizado na cadeira de Física Computacional (ministrada no Departamento de Física da Universidade de Coimbra) no ano lectivo 1988/89, permite visualizar a evolução temporal de um pacote de ondas em alguns potenciais simples.

Constrói-se um pacote de ondas gaussiano sobrepondo, com pesos adequados, um número finito de funções próprias do hamiltoniano correspondente ao potencial escolhido. Em vez de se resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, efectua-se a evolução temporal de cada componente do pacote de ondas independentemente de todas as outras, multiplicando cada função própria pelo factor  $\exp(-i.E.t/\hbar)$ , sendo  $E$  o valor próprio respectivo. O pacote de ondas num instante  $t$  qualquer é então obtido adicionando todas estas componentes (ver Gould & Tobochnik, Sec. 17.4).

### 2. O Programa

O programa, intitulado "pacotes" e escrito em Quick-Basic 4.0, encontra-se dividido em várias subrotinas algumas das quais foram adaptadas da literatura (Gould & Tobochnik, op. cit.). Por uma questão de simplicidade no programa utilizam-se unidades  $\hbar=m=1$ . Para não tornar tédia a utilização do programa, a maior parte dos parâmetros iniciais encontra-se já estabelecida. Podem, no entanto, ser alterados na subrotina **parâmetros**. Esses parâmetros são: o vector de onda da componente central do pacote, o número de componentes a incluir no pacote, a largura do pacote no espaço- $x$ , a posição inicial do pacote, etc.. No caso do potencial escolhido ser a caixa de paredes rígidas a alguns destes parâmetros são dados novos valores na subrotina **selecciona**. Na subrotina **pacote** é calculado o peso de cada componente do pacote na sobreposição.

Podem-se escolher quatro potenciais:

(1) Constante (partícula livre):  
 $V(x)=0$ , para todo o  $x$

(2) Degrau:  
 $V(x)=0$ ,  $x<0$   
 $V(x)=V_0$ ,  $x>0$

(3) Barreira:  
 $V(x)=0$ ,  $x<0$  e  $x>a$   
 $V(x)=V_0$ ,  $0<x<a$

(4) Caixa de paredes rígidas:  
 $V(x)=0$ ,  $0<x<a$   
 $V(x)=\infty$ ,  $x<0$  e  $x>a$ .

As funções próprias do hamiltoniano e os valores próprios de energia correspondentes aos 3 primeiros potenciais são  $\Phi(x)=\exp(ikx)$  e  $E=(\hbar k)^2/2m$

sem quaisquer restrições aos valores de  $k$ . Para o potencial (4) as funções próprias e valores próprios correspondentes são

$$\Phi_n(x)=\sqrt{2/a} \sin(k_n x), \quad n=1,2,3, \dots$$

$$\text{com } k_n=n\pi/a \text{ e } E=(\hbar k_n)^2/2m.$$

Consoante a escolha do potencial, na subrotina **livre**, **degrau**, **barreira** ou **caixa** é calculado o valor de cada uma das componentes do pacote em todos os pontos do espaço- $x$ , no instante inicial. A subrotina **evolução** permite calcular a forma de cada uma das componentes do pacote num qualquer instante posterior, adicioná-las para obter o pacote de ondas nesse instante e calcular a respectiva densidade de probabilidade. O gráfico da densidade de probabilidade é feito pela subrotina **grafix**. A subrotina **despot** desenha o potencial escolhido pelo utilizador em unidades da energia da componente central do pacote de ondas. Esta energia é também representada. Após a apresentação gráfica o utilizador é colocado perante algumas opções (subrotina **opcoes**). Entre estas, deve referir-se a possibilidade de redefinir o instante  $t$  e o passo  $dt$ .

### 3. Alguns exemplos de utilização do programa

A utilização de pacotes de ondas como meio de representar partículas quânticas é extremamente elucidativa da relação existente entre a largura do pacote de ondas no espaço- $k$  e no espaço- $x$  (relação de incerteza de Heisenberg). Por exemplo, pode-se experimentar construir um pacote de ondas com apenas uma ou duas componentes.

Escolhendo o potencial (1) é possível verificar o espalhamento do pacote de ondas no tempo (Merzbacher, págs. 24 ss.) como se pode ver na figura 1.

Escolhendo o potencial em degrau (com  $dt=0.5$  e  $V_0=3.75$ , por exemplo), verifica-se que só as componentes do pacote de ondas com energia suficiente ( $E>V_0$ ) conseguem transpor o degrau. O pacote divide-se então em duas partes que viajam em sentidos opostos com velocidades diferentes, de acordo com o princípio de conservação de energia (fig. 2). Pode-se ainda ver, escolhendo para  $V_0$  um valor mais elevado ( $V_0=10$ , por exemplo), que o pacote de ondas penetra ligeiramente no degrau (fig. 3).

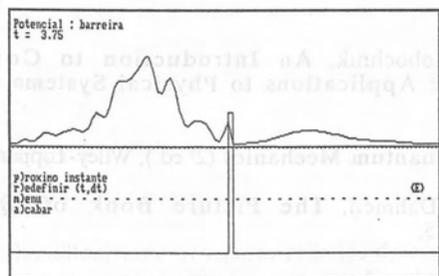
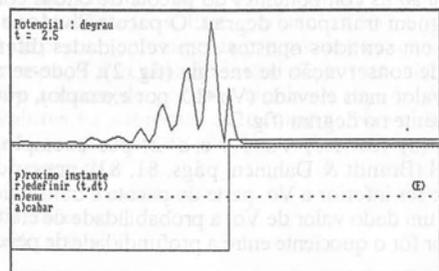
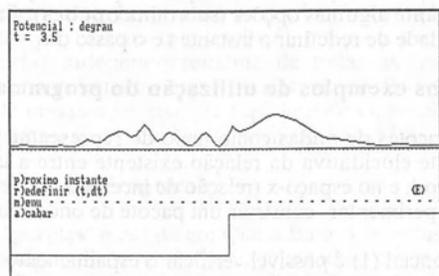
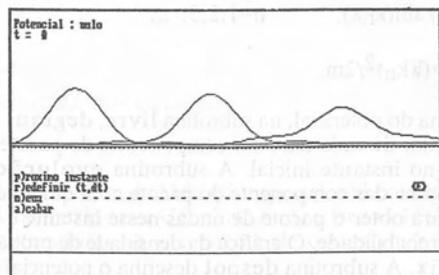
Com o potencial (3) ( $dt=0.5$ ,  $V_0=5.0$  e  $a=2$ , por exemplo) pode-se observar o efeito de túnel (Brandt & Dahmen, págs. 81, 82): apesar da energia média do pacote incidente ser inferior a  $V_0$ , parte do pacote é transmitido através da barreira (fig. 4). Para um dado valor de  $V_0$ , a probabilidade de efeito de túnel é tanto maior quanto maior for o quociente entre a profundidade de penetração e a espessura da barreira.

### Bibliografia:

H. Gould, J. Tobochnik, **An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems**, Addison-Wesley., 2 vols., 1987.

E. Merzbacher, **Quantum Mechanics** (2ª ed.), Wiley-Toppan, 1970.

S. Brandt, H. Dahmen, **The Picture Book of Quantum Mechanics**, Wiley, 1985.



## Resumos das comunicações

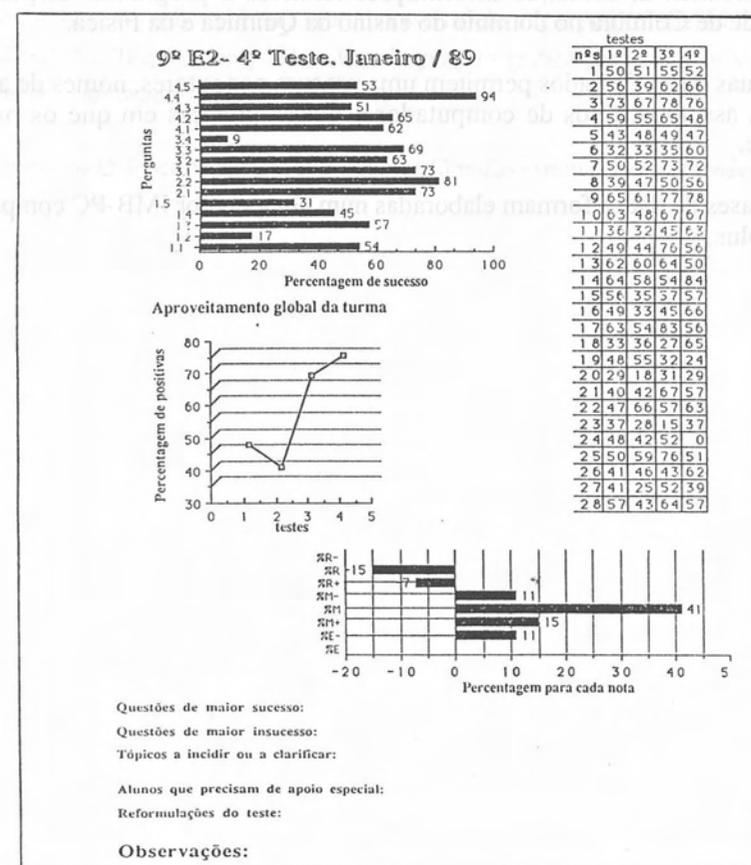
### Tema 4: O computador como apoio a actividades não lectivas (401 a 405)

## Apoio informático para a gestão de turmas no ensino secundário

PAIVA, João C.  
Escola Secundária de Anadia  
3780 ANADIA

São apresentados programas utilizados para apoio do professor, na correcção de testes, avaliação e tratamento estatístico, gráficos e elaboração de testes.

Todos os programas correm num computador "Macintosh-Plus".



Gráficos elaborados a partir dos resultados de um teste do 9º ano

## B.A.S.E. (Base de artigos e software no ensino) da Física e da Química

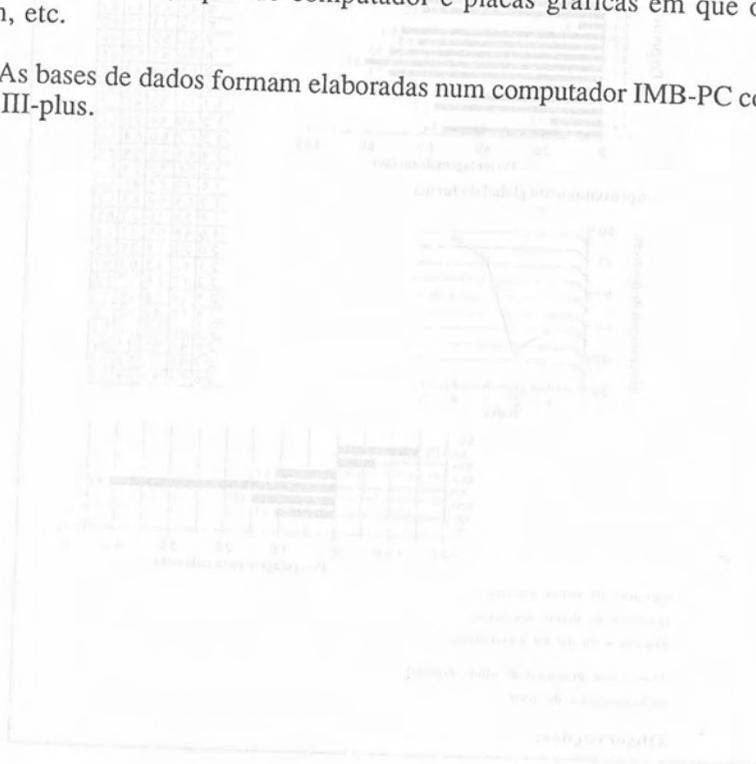
FIOLHAIS, Carlos M., PAIVA, João C.  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Apresentam-se duas bases de dados:

- 1) B.A.S.E. 1, contendo informações bibliográficas sobre computadores no ensino da Química e da Física.
- 2) B.A.S.E. 2, contendo informações relativas a programas disponíveis na Universidade de Coimbra no domínio do ensino da Química e da Física.

As duas bases de dados permitem uma procura por autores, nomes de artigos ou programas, assuntos, tipos de computador e placas gráficas em que os programas correm, etc.

As bases de dados foram elaboradas num computador IBM-PC compatível em Dbase III-plus.



## Dicionário técnico e representação de gráficos

VEIGA, E. Alte da  
Departamento de Engenharia da Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro  
Qta de Prados  
5000 VILA REAL

O programa contém um pequeno dicionário técnico, que se baseia numa base de dados, o que torna fácil a inclusão de novos termos por parte do utilizador.

A cada termo técnico corresponde uma tradução e um gráfico que são facilmente modificáveis.

Os gráficos são executados por uma subrotina escrita em linguagem C; esta subrotina interpreta uma sequência ASCII que corresponde a uma linguagem gráfica proposta pelo autor e também modificável pelo utilizador.

Por exemplo na Química os gráficos podem ser as fórmulas estruturais correspondentes.

## Um programa para análise de resultados de testes: um contributo para uma melhor avaliação no ensino

VALADARES, Jorge António

*Universidade Aberta*

Palácio Ceia, Rua da Escola Politécnica

1200 LISBOA

TEODORO, Vitor Duarte

*Universidade Nova de Lisboa*

2825 MONTE DE CAPARICA

O processo de avaliação no ensino adquiriu recentemente uma importância maior, como consequência do facto de se atribuir novas funções à avaliação, além da função administrativa clássica. Com efeito, o processo de avaliação — em contexto escolar — não pode ter como única finalidade a atribuição de classificações ou a seriação dos alunos. A avaliação, entendida como um processo de formulação de juízos de valor, deve servir, fundamentalmente, para auxiliar o professor, cada aluno e o conjunto dos alunos a tomarem decisões fundamentadas para melhorar a eficácia do ensino.

O programa de computador (para compatíveis IBM) que se apresenta nesta comunicação pretende ser um instrumento para o professor conhecer com mais pormenor os resultados dos seus alunos em testes escritos. Assim, o programa, além de fornecer um sumário estatístico de um teste (sumário que inclui a fidelidade do teste e todos os parâmetros usualmente considerados para descrever um conjunto de resultados), fornece uma análise de itens e os resultados de cada aluno, quer resultados globais, quer resultados em partes do teste, identificadas pelo professor, como sejam, por exemplo, grupos de questões referentes a determinados tópicos ou a determinadas capacidades.

## O computador no quotidiano de um professor e no desenvolvimento de actividades de investigação em educação em Física e Química

PEDROSA, M. Arminda

*Departamento de Química da Universidade de Coimbra*

3000 COIMBRA

Nesta comunicação pretende fazer-se uma alusão breve à utilidade dos computadores, enquanto meios que facilitam actividade dos professores de Física e Química, quer na elaboração de textos de apoio aos alunos e de provas de avaliação, quer no registo e arquivo dos respectivos resultados e de outros dados eventualmente considerados na classificação dos estudantes. Indicam-se também alguns dos métodos de estatística descritiva adequados à apresentação dos resultados da avaliação, assim como o papel desempenhado pelo computador na aplicação daqueles métodos. Por outro lado, faz-se referência à utilidade, e mesmo à indispensabilidade, dos computadores no tratamento dos dados de investigação educacional na área em questão. Esta necessidade é particularmente evidente no desenvolvimento de projectos de investigação, cujos "designs" experimentais requerem que aquele tratamento se processe segundo métodos adequados de inferência estatística. Finalmente, fornecem-se exemplos de desenvolvimento de investigação em Educação em Química, e faz-se referência ao "software" utilizado.



**Demonstração de software educacional para Macintosh DEM 01**

Jorge Alexandre Carvalho Silva

Departamento de Física da Faculdade de Ciências e Tecnologia (UNL)

2825 MONTE DE CAPARICA

**Física:**

*Ballistic* — Programa de mecânica; desenha trajectórias de projecteis;

*Einstein* — Demonstração de conceitos e efeitos da teoria da relatividade;

*Potencial* — Ilustração do conceito de poço de potencial;

*Isingraf* — física estatística, simulação bidimensional do modelo de Ising;

*DigSim* — construção e simulação de circuitos digitais;

*Orbit* — ilustra a trajectória de partículas e o espaço de fase de osciladores a uma dimensão e de mapeamentos a duas dimensões;

*Circuits* — ilustra a lei de Ohm e as leis de Kirchoff com diversos circuitos. Ponte de Wheatstone (stack Hypercard);

*WaveMaker* — gera ondas a partir dos seus primeiros sete harmónicos.

**Química:**

*3DMoles* — desenha moléculas a 3D. Movimento de rotação e de translação;

*Spin Echo* — um simulador de ressonância magnética nuclear que mostra as propriedades de visualização de tecidos da tecnologia NMR;

*MacFormula* — elementar, calcula massas moleculares e número de moles de amostras;

*Molecular Editor* — programa para construção e visualização de moléculas ou estruturas cristalinas a 3D. Permite rodar a molécula em torno de qualquer eixo, medir distâncias entre átomos, etc.;

*Elements* — tabela periódica dos elementos, com muitas informações acerca de diversas propriedades dos elementos (stack Hypercard);

*Amino Acids* — lista de aminoácidos e suas estruturas (stack Hypercard);

*Vitamin Structures* — lista de vitaminas e suas estruturas (stack Hypercard).

**Fractais:**

*Fractal* — gerador de diversas figuras fractais;

*Julia* — gerador de conjuntos de Julia;

*MacFractal* — gerador de paisagens fractais;

*SuperMandelZoom* — programa para gerar o conjunto de Mandelbrot;

*Fractals!* — gerador de agregados fractais segundo o modelo do DLA (Diffusion-limited aggregation);

*Fractais* — Programa destinado a gerar ao conjunto de Mandelbrot, conjuntos de Julia e agregados de DLA;

*Descargas Eléctricas* — simulador de descargas eléctricas segundo diversos modelos;

*Mandelzot* — programa excelente destinado a gerar o conjunto de Mandelbrot.

**A rede ETHERNET da Universidade de Coimbra** DEM 02

Joaquim de Jesus

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 Coimbra

Demonstram-se as facilidades oferecidas pela rede Ethernet da Universidade de Coimbra de ligação de vários computadores VAX em rede. Exemplifica-se o funcionamento do MAIL e PHONE do sistema operativo VMS, utilizando o "Local Area Vax Cluster" do Centro de Física Teórica da Universidade de Coimbra (INIC), que tem por centro um Vax Server 3600. Efectuam-se ligações remotas via X-25, no CIUC (Centro de Cálculo da Universidade de Coimbra), a outros computadores da rede de cálculo científica nacional, incluindo o super-computador CONVEX instalado no LNEC. Mostra-se o funcionamento da rede EARN-Bitnet (X-Mail), com o exemplo da lista PHYS-L, de discussão entre professores de Física.

**Óptica — difracção, interferência e refração** DEM 03

Francisco Gil

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 Coimbra

Demonstram-se alguns programas de óptica do disco "Optics Demonstrations" de U. E. Kruse, Department of Physics, Univ. of Illinois, Chicago, EUA incluído no conjunto de software "Computers in Physics Instruction", North Carolina State University, 1988. Estes programas correm em IBM- PC com placa EGA.

**Electromagnetismo e análise de dados** DEM 04

Jose Pinto da Cunha

Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 Coimbra

Demonstram-se os seguintes programas:

- "Simulation from field and electrodynamics", de P. B. Visscher, Department of Physics, University of Alabama, Tuscaloova, EUA (sobre os assuntos tratados nestes programas ver o livro "P. Visscher, "Field and electrodynamics: a computer compatible approach", J. Wiley, 1988);
- "Analysis and Graphics Package", de J. D. Kimel, Department of Physics, Florida State University, Tallahassee, EUA do conjunto de software de "Computers in Physics Instruction", North Carolina State University, 1988.

Os programas correm em IBM PC com placa CGA.

**Óptica e electroestática** DEM 05

Nuno Martins Rodrigues

Escola de Martim de Freitas  
3000 Coimbra

Demonstra-se o programa "ÓPTICA", elaborado pelo próprio, destinado ao 9º ano de escolaridade e já aplicado em aulas. O programa versa a reflexão e refração da luz, tendo como estrutura fundamental a apresentação gráfica, acompanhada de uma base teórica que se refere a todo o programa curricular. O programa corre num PC compatível com monitor policromático EGA.

Demonstra-se ainda o programa "ELECTROESTÁTICA", também elaborado pelo próprio e destinado ao 8º ano de escolaridade. Os assuntos são apresentados com movimento e som, acompanhados do texto necessário. O programa corre num computador MSX (Philips).

**Trabalhos recentes de física computacional** DEM 06

Joaquim Norberto Silva

e outros estudantes dos cursos de Física e Engenharia Física da Universidade de Coimbra  
3000 Coimbra

Seleção de programas desenvolvidos na cadeira de "Física Computacional" no ano lectivo de 1989-1990, que é regida pelo Prof. Carlos Fiolhais. Entre outros, demonstram-se os programas

- "Osciladores, Difracção e Interferência", escrito em Turbo-Pascal 5.5 para IBM compatível com VGA a cores.
- "A Sonda Galileu", idem.

**Phaser — programa de equações diferenciais** DEM 07

Jaime Carvalho Silva

Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra  
3000 Coimbra

Demonstra-se o programa PHASER, de H. Kocak, para IBM- PC com placa grafica, que é distribuído com o livro "Differential and difference equations through computer experiments", 2. ed., 1989, Springer.

**DERIVE — a Mathematical Assistant**

DEM 08

Amílcar Branquinho

Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra

3000 Coimbra

Demonstra-se o programa "DERIVE", "A Mathematical Assistant", da Soft Warehouse, (3615 Harding Avenue, Suite 305, Honolulu, HI 96816, EUA) que é um programa de manipulação simbólica e representação gráfica (incluindo gráficos a 3 dimensões), para IBM-PC, que apenas ocupa cerca de 220K! O "DERIVE" é o sucessor do famoso "MUMATH", e inclui as seguintes possibilidades:

- aritmética exacta e aproximada com milhares de dígitos
- equações, números complexos, trigonometria, cálculo, vectores, matrizes
- representação de funções a 2 e 3 D com zoom
- menus de escolha e *help* facilmente acessível

**Programas de Química do projecto SERAPHIM**

DEM 09

A. Correia Cardoso

Departamento de Química da Universidade de Coimbra

3000 Coimbra

Apresentam-se vários programas de Química do projecto SERAPHIM, para Apple II. Os programas foram seleccionados e testados pelos estudantes de um grupo de estágio.

O contacto do projecto SERAPHIM é:

Project Seraphim

Department of Chemistry Eastern Michigan University

Ypsilanti, MI 48197

EUA

**Sistemas dinâmicos**

DEM 10

Joaquim Sainhas

Faculdade de Motricidade Humana da Universidade Técnica de Lisboa

1499 LISBOA Codex

Apresentam-se os seguintes programas, desenvolvidos pelo próprio:

- análise de ficheiros de resultados experimentais da reacção química de Belousov-Zhabotinsky;
- autómatos celulares;
- equação logística;
- sistemas de Lorentz e de Roessler.

Estes programas correm num IBM compatível com placa gráfica VGA.

**Programas de Física e Química para ZX Spectrum**

DEM 11

Jaime Cardoso

Escola Secundária Camilo Castelo Branco

Vila Real

Demonstram-se os seguintes programas para ZX Spectrum de 48 K:

- Espectros H e Na
- Orbitais 1s, 2s e 2p
- Tamanho de átomos e iões (todos estes do "Manual de Química" para o 10º ano, da Didáctica Editora).
- Ondas I, II e III
- Tabela Periódica
- Titulações
- Precipitações
- Chem 1, 3 e 4
- Quantidade de matéria e grandezas químicas
- MOM-L (problemas de cinemática a partir de gráficos)

**Simulações em Física**

DEM 12

Abílio Monteiro de Almeida

Laboratório de Física da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto

4000 Porto

Demonstram-se vários programas sobre "SIMULAÇÕES EM FÍSICA", elaborados pelo próprio, para Macintosh.

**Aplicações gráficas**

DEM 13

Daniel Braga, José Miranda, Luís Santos e Paula Silva

Escola Secundária de Alberto Sampaio

Quinta de Santo Adrião

4719 Braga Codex

Este programa, elaborado pelos dois primeiros autores (alunos) com orientação dos segundos, destina-se ao estudo de algumas leis da Física e da Química, no âmbito do ensino secundário, e a resolução de problemas. O programa permite efectuar gráficos de serras e barras tridimensionais.

Seleccionaram-se, para demonstração, os seguintes exemplos:

- Lei de Ohm
- Lei de Hooke
- Lei fundamental da Dinâmica

## DEM 14

- Lei de Beer-Lamert
- Abundâncias relativas (isótopos e compostos orgânicos)

O programa corre em computadores IBM PC compatível com 512 K de RAM, com placa EGA ou CGA.

## Uma pilha de Hypercard — energia

DEM 14

Armando Silva, Luísa Orvalho e Maria Rui Vilar Correia  
Escola Secundária de Marco de Canaveses e GETAP, Porto

Trata-se de um programa, de interesse interdisciplinar (Química, Física e Biologia), destinado ao 3º ciclo do ensino básico e que corre em Mac Plus/SE/II (linguagem Hypertalk). A "pilha", que consta de 180 cartões, pode ser modificada, corrigida e alargada em cada nova situação pedagógica. Embora a aplicação em causa não esteja terminada, tal como qualquer base de dados, achou-se oportuno divulgá-la, a fim de partilhar o entusiasmo de trabalhar com a nova ferramenta — Hypercard — à disposição dos utilizadores de Macintosh. Alguns refinamentos podem ser introduzidos à medida que se avance na exploração das possibilidades do Hypertalk, linguagem integrada do Hypercard. Entre as actividades permitidas, destacam-se as seguintes:

- motivação para o estudo do tema Energia;
- exploração desse tema sob os seus vários aspectos nomeadamente manifestações e formas de energia, transformações, recursos energéticos, unidades de energia, etc.;
- consolidação da aprendizagem;
- estratégia de remediação ou de enriquecimento.

Este projecto foi elaborado no âmbito da cadeira "Ensino das Ciências assistido por computador" do Curso de Mestrado em Ciências de Educação, área de especialização Informática no Ensino.

## Química Orgânica

DEM 15

Maria Paula Estorninho Pereira  
Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa  
2825 MONTE DE CAPARICA

Demonstram-se vários programas sobre "QUÍMICA ORGÂNICA", que correm em computadores Apple II e IBM-PC compatível.

## DEM 16

## STELLA: um sistema para modelação de sistemas dinâmicos

DEM 16

José António Paixão  
Departamento de Física da Universidade de Coimbra  
3000 COIMBRA

Demonstra-se o programa "STELLA", da High performance Systems (13 Dartmouth College Highway, Lyme, New Hampshire 03768, EUA), que é um simulador de sistemas dinâmicos com muito interesse para Física e Química (corre em Macintosh).

## Química no Computador : Orbital 1s do átomo de hidrogénio

DEM 17

Medeiros, José  
Escola Secundária Francisco Rodrigues Lobo  
Porto Moniz  
2400 Leiria

Demonstra-se um programa, para Spectrum 48K, que mostra a orbital 1s do átomo de hidrogénio.

<u>Orlando Oliveira</u>	Estado fundamental do átomo de hélio (COM 314)
<u>Paula Cristina Amaro da Cunha</u>	O computador na sala de aula (COM 114)
<u>Paulo Gordo</u>	Simulação simples de dinâmica molecular (COM 318)
<u>Paulo Mendes</u>	A relatividade no computador (WORK 13)
<u>Pedro Alberto</u>	TEX — um processador de texto científico (WORK 14)
<u>Ribeiro Claro</u>	Modelos e aplicações em espectroscopia molecular (WORK 09)
<u>Ricardo Mosquera Castro</u>	Práticas de Química Física con ordenador. I. Simulación elemental de espectros de microondas (COM 305)
<u>Rui Fausto</u>	Varição de energia e estrutura das moléculas (WORK 10)
<u>Rui Gaspar</u>	Electrónica Digital (COM 206)
<u>Vale Teixeira Dias</u>	Evolução temporal de um pacote de ondas num potencial unidimensional
<u>Valentina Vassilenko</u>	Simulação dos fenómenos de transporte: coeficiente de difusão (COM 308)
<u>Victor Gil</u>	Jogo das substâncias (jogo de computador) (COM 106) Método de Job para equilíbrios simultâneos-simulações por computador (COM 313)
<u>Vitor Duarte Teodoro</u>	Software para o ensino da Física e da Química: títulos desenvolvidos no Pólo do Projecto MINERVA da FCTUNL (COM 111) Um programa para análise de resultados de testes: um contributo para uma melhor avaliação no ensino (COM 404) Física qualitativa, computadores e ensino da mecânica (WORK 02)

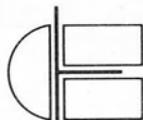
## Autores e respectivas Conferências Plenárias, Comunicações e Workshops

<u>Abílio de Jesus Monteiro Almeida</u>	Simulação em Física fundamental (COM 319)
<u>Alda Maria Simões Pereira</u>	Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade (COM 104)
<u>Alexandre Lopes Magalhães</u>	Demonstração do programa partícula na caixa (COM 321)
<u>Ana Arcília Martins Laranjeira da Silva</u>	Processos laboratoriais de Química em múltiplos idiomas (COM 203)
<u>Ana Maria Beato Covas Ramos</u>	Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário (COM 101)
<u>Ana Maria Patrício Gomes</u>	Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade (COM 104)
<u>António Alberto Garcia Portugal</u>	Resolução de equações diferenciais STIFF (COM 307)
<u>António José dos Santos Neto</u>	O computador e o seu contributo para a superação de dificuldades de aprendizagem em mecânica (COM 112)
<u>António Manuel Simões C A Baptista</u>	Simulação molecular de átomos confinados em poros (COM 323)
<u>António Melo</u>	Laboratório Assistido por computador (WORK 03)
<u>António Moreira Gonçalves</u>	Laboratório Assistido por computador (WORK 03) Laboratório Didáctico Assistido por computador (PL 5)
<u>Bento Caldeira</u>	Aquisição de dados no ensino secundário (o computador como componente de um dispositivo experimental) (WORK 05)
<u>Bernardete Martins Ribeiro</u>	DINTER: um simulador de processos de destilação (COM 303)
<u>Carlos Fiolhais</u>	Simulação de um fluido perfeito (COM 310) B.A.S.E. (base de artigos e software no ensino) da Física e da Química (COM 402) Física computacional (COM 324) Oscilador harmónico de dois centros (COM 316) Simulações computacionais em Física (WORK 08) Osciladores não lineares (COM 317)
<u>Célia Maria Reis Henriques</u>	Simulação de Monte-Carlo de um gás perfeito clássico
<u>Cincción Saa Delgado</u>	Sistema de tutorias por ordenador (COM 110)
<u>Cremilde Ribeiro</u>	Software para o ensino da Física e da Química: títulos desenvolvidos no Pólo do Projecto MINERVA da FCTUNL (COM 111) Cinemática em computador (WORK 11)
<u>Daniel Cabrol</u>	Le Rôle de l'Intelligence Artificielle dans l'Enseignement — l'Exemple de la Chimie (PL 7)
<u>Duarte Costa Pereira</u>	Uma base de conhecimento de um sistema tutorial inteligente no domínio do equilíbrio químico (COM 109) Hipertexto e Hypercard (WORK 04) Hipermedia no ensino da Química (PL 4)
<u>Edward Redish</u>	The MUPPET Project: teaching Physics with computers (PL 3)
<u>Eugénio Alte da Veiga</u>	Dicionário técnico e representação de gráficos (COM 403)
<u>Eugénio Ferreira</u>	Os microcomputadores na aquisição de dados e controlo em processos bioquímicos (COM 202)
<u>Fátima Isabel Caria Canelas Pais</u>	Resolução de equações diferenciais STIFF (COM 307)

Fernando Fernandes	Integração de equações cinéticas e ajuste de dados (COM 301) Simulação de uma curva de titulação ácido fraco-base forte (COM 312) Matriz de transferência discreta para o cálculo de funções de partição, valores próprios e vectores próprios (COM 322) Simulação molecular de átomos confinados em poros (COM 323) Simulação molecular (WORK 01)	Júlia Maria das Neves Leonel Álvaro Torres Pereira Neves	O computador na sala de aula (COM 114) Simulação de uma curva de titulação ácido fraco-base forte (COM 312) Conjunto significativo de experiências com el método OM Huckel para el "currículum" de Química-Física general (COM 302)
Fernando Manuel da Silva Nogueira	O jogo da incerteza (COM 325)	Luís Filipe Correia Marques	Simulação de um fluido perfeito (COM 310)
Filomena de Fátima Martins Freitas	Integração de equações cinéticas e ajuste de dados (COM 301)	Luís Sousa Lobo	Simulação e modelação em Cinética Química (WORK 15)
Francisco F. Gonçalves Reis	ACRUN — programa de aquisição de dados e controlo (COM 201)	Luís Valadares Tavares	O futuro das novas tecnologias na educação em Portugal (PL 1)
Francisco Fraga	Folhas de cálculo em Física e Química (WORK 06)	Luísa Antónia de Vila Fernandes Orvalho	Uma base de conhecimento de um sistema tutorial inteligente no domínio do equilíbrio químico (COM 109)
Idalino José Franco	Introdução aos sistemas não lineares (COM 320)	Álvaro Henrique da Costa Pinto	Utilização do computador para visualização de ondas sonoras (COM 204)
Inês Portugal	Simulação e modelação em Cinética Química (WORK 15)	Manuela Paula Ruas de Matos Coelho Veloso	Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade (COM 104)
Jaime Carvalho Silva	A modelação matemática nas Ciências Naturais (PL 2)	Maria Amália Puga Lobo	A folha de cálculo e a física no 10º e no 11º ano de escolaridade do ensino secundário (COM 102) A lei de Arquimedes e o computador (WORK 07)
João Adalberto Lourenço	ACRUN — programa de aquisição de dados e controlo (COM 201)	Maria Amália Puga Lobo	A folha de cálculo e a física no 10º e no 11º ano de escolaridade do ensino secundário (COM 102) A lei de Arquimedes e o computador (WORK 07)
João Carlos de Matos Paiva	Adivinhas em Química (para o oitavo ano de escolaridade) (COM 105) Jogo das substâncias (jogo de computador) (COM 106) Modelos atómicos e configurações electrónicas. Programa de computador para o 10º ano (COM 108) Apoio informático para a gestão de turmas no ensino secundário (COM 401) B.A.S.E. (base de artigos e software no ensino) da Física e da Química (COM 402)	Maria Arminda Pedrosa	O computador no quotidiano de um professor e no desenvolvimento de actividades de investigação em educação em Física e Química (COM 405)
João Paulo C A Prates Ramalho	Matriz de transferência discreta para o cálculo de funções de partição, valores próprios e vectores próprios (COM 322)	Maria Cesaltina Marques Duarte Borges	Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade (COM 104)
Joaquim José Sainhas de Oliveira	Uma abordagem computacional ao problema da complexidade na Natureza (COM 309)	Maria Cristina dos Santos Ribeiro Martins	Contribuição para o estudo da poluição do rio Este (COM 205)
Jorge Alexandre Monteiro de Carvalho e Silva	A simulação computacional de descargas eléctricas em meios dieléctricos (COM 311)	Maria da Conceição Madeira Gonçalves	Estudar movimentos com o auxílio do computador: uma experiência ao nível do 10º ano de escolaridade (COM 104)
Jorge António de Carvalho Sousa Valadares	Um programa para análise de resultados de testes: um contributo para uma melhor avaliação no ensino (COM 404)	Maria da Conceição Sardinha Clavel do Carmo Martins da Costa	Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário (COM 101)
José António Chibeles Figueira	Aquisição de dados no ensino secundário (o computador como componente de um dispositivo experimental) (WORK 05)	Maria de Fátima Lemos de Oliveira Sousa	Projecteis — programa de simulação (COM 107)
José António de Carvalho Paixão	Utilização de pseudo-potenciais em cálculos aproximados de estruturas de bandas para fins didácticos (COM 304) Cálculo da estrutura de bandas em sistemas unidimensionais: super-redes e "poços quânticos" (COM 306)	Maria de Lurdes Rocha	Cinemática em computador (WORK 11)
José António de Carvalho Paixão	Utilização de pseudo-potenciais em cálculos aproximados de estruturas de bandas para fins didácticos (COM 304) Cálculo da estrutura de bandas em sistemas unidimensionais: super-redes e "poços quânticos" (COM 306)	Maria do Rosário Godinho Teixeira	O computador na sala de aula (COM 114)
José Cardoso Duarte	Os microcomputadores na aquisição de dados e controlo em processos bioquímicos (COM 202)	Maria Fernanda Oliveira Ramos	Tratamento computacional da cinemática no ensino secundário (COM 101)
José Carlos de Faria Guedes Vaz	Hipertexto e Hypercard (WORK 04)	Maria Fernanda R. Duarte da Rocha Pereira	O computador na sala de aula (COM 114)
José Féria Seita	Processos laboratoriais de Química em múltiplos idiomas (COM 203)	Maria Helena Caldeira	O jogo da incerteza (COM 325)
José Pedro Horta Teixeira Dias	Evolução temporal de um pacote de ondas num potencial unidimensional (COM 327)	Maria João Loureiro	Computadores no ensino da Física e da Química: análise multidimensional (COM 113)
Judah Schwartz	From percept to concept: software to think with (PL 6)	Maria Margarida Campino Pombinho de Araújo	O computador na sala de aula (COM 114)
		Maria Margarida Rico	O computador na sala de aula (COM 114)
		Maria Paulina Estorninho Neves da Maia Pereira	TETRAHEDRON, um programa de ensino assistido por computador para Química Orgânica — estereoquímica (COM 102)
		Mariana de Jesus Valente	O computador e o seu contributo para a superação de dificuldades de aprendizagem em mecânica (COM 112) Aquisição de dados no ensino secundário (o computador como componente de um dispositivo experimental) (WORK 05)
		Orlando M N D Teodoro	Simulador de lentes electrostáticas (COM 326)

---

Patrocínio



**DIDÁCTICA EDITORA**

46 ANOS AO SERVIÇO DO LIVRO ESCOLAR

---