

EDITAL CAPES/Inovação 03/2015

## Laboratório Virtual de Química

### Introduzindo o Professor no Processo

André Fernando de Oliveira

GPEQA – LAQUA/DEQ/UFV

[andref.oliveira@ufv.br](mailto:andref.oliveira@ufv.br)

(Convênio CAPES/Inovação 3927/2016)

## Equipe:

### Briefing/Definição do MVP

Andre Fernando Oliveira/DEQ-UFV  
Sergio Olivo  
Pedro de Almeida Sacramento/CEAD-UFV  
Thaynara Rocha Mendonça/DEQ-UFV

### Equipe de desenvolvimento

Bruno de Lima Santos/DEQ-UFV  
Carolina Castro Freitas Prado/DEQ-UFV  
Cesar Ruben Francisco Gennaro Campos/DPI-UFV  
Gustavo Freire da Silva/DEQ-UFV  
Maria Eduarda Oliveira Miranda/DPI-UFV  
Pedro de Almeida Sacramento/CEAD-UFV  
Thaynara Rocha Mendonça/DEQ-UFV

### Equipe de testes

Angélica Lorena dos Santos Oliveira/DEQ-UFV  
Laísa Bullerjahn/DEQ-UFV  
Stefania Mora Güezguán/DEQ-UFV

### Estudo ISO17025

Anna Luísa Ribeiro Miguel/DEQ-UFV  
Carolina Castro Freitas Prado/DEQ-UFV  
Thaynara Rocha Mendonça/DEQ-UFV  
Andre Fernando Oliveira/DEQ-UFV

### Comportamento Experimental dos Instrumentos

Alessandra Zinatto Rodrigues/DEQ-UFV  
Stefania Mora Güezguán/DEQ-UFV

### Práticas realizadas experimentalmente

Carolina Teixeira Costa Alpino/DEQ-UFV  
Felipe Santana/DEQ-UFV

## Ilustração e design

Cristian de Aguiar Silva/CEAD-UFV

Edson Ney Duarte Nogueira/CEAD-UFV

Wildson Lima Paiva Osório/CEAD-UFV

## Introdução

O Laboratório Virtual de Química Cead-UFV surge como uma mudança de paradigmas na Química, pois postula que o ambiente virtual pode ser uma ferramenta poderosa para o desenvolvimento do aluno quando associado fortemente aos laboratórios presenciais.

Diferentemente ao senso comum, o Laboratório Virtual de Química não foi proposto para substituir o laboratório presencial, mas exatamente o contrário: potencializar a experiência presencial.

A potencialização da experiência presencial ocorrerá uma vez que o aluno pode se familiarizar com uma dada situação experimental (por exemplo uma prática experimental) no ambiente virtual, se acostumando com as etapas necessárias, revendo o roteiro, pensando nos resultados obtidos, errando e corrigindo-se ou mesmo testando várias possibilidades. Ao ir ao laboratório presencial, já terá mais convivência com o problema a ser estudado e estará se restringindo a uma situação particular e poderá se preocupar com aspectos não apresentados no ambiente virtual (ou mesmo com a transposição eventualmente ocorrida), com o desenvolvimento das habilidades mecânicas necessárias à prática experimental, etc.

O Laboratório Virtual de Química Cead-UFV também surge como uma mudança de paradigmas em relação a outras ferramentas virtuais, onde as práticas ou demonstrações de fenômenos não consideram a variabilidade natural, a incertezas das medidas e o próprio ruído, fortemente dependente do tempo. Essa posição é muito diferente de práticas/jogos virtuais que atuam meramente como uma calculadora animada, onde a um conjunto de parâmetros de entrada fornecem necessariamente sempre o mesmo resultado, embora isso não represente a realidade experimental, onde incontáveis detalhes (parâmetros de entrada não conhecidos) podem alterar os valores obtidos, que são estimados a partir de recursos estatísticos.

A experiência que o grupo do CEAD/UFV e DEQ (Depto Química) /UFV com a construção da primeira versão desse projeto foi muito importante para identificar os vários problemas existentes na sua construção

Desta maneira, baseado em uma análise crítica realizada pelo grupo atual em relação à experiência anterior, elencou-se os principais problemas e definiu-se maneiras para suas resoluções

Tabela 1 - Problemas Identificados em uma tentativa anterior de criar o laboratório virtual

Problemas Identificados	Observação
Estrutura computacional pouco robusta	As práticas foram desenvolvidas a partir de modelos simples, de maneira que, para cada fase de implementação de recursos, era necessária a reprogramação da prática
Projetos individualizados por prática	Embora o laboratório Virtual seja formado por diversos módulos que se comunicam entre si, essa característica não foi aproveitada, de maneira que, para cada prática, um novo conjunto de programação era construído, com um pequeno uso de módulos já construídos.
Várias linguagens computacionais	No primeiro projeto optou-se por permitir que cada programador desenvolvesse cada prática usando conceitos de programação diferentes, dificultando a comunicação e o desenvolvimento
Dificuldade de comunicação entre o grupo de programação, grupo de química e grupo de recursos visuais	Aliados aos problemas na parte de programação, também houveram muitos problemas com a obtenção de dados e redação e testes das práticas propostas. A comunicação entre as duas equipes foi muito deficitária, causando o uso de um tempo enorme para reprogramação.
A inclusão do professor sem a presença de um programador não ocorreria de maneira simples.	A rigidez da programação tornou difícil a alteração das condições do laboratório e assim, as práticas propostas não permitem alteração simples pelo professor que optasse por utilizá-las, diminuindo de maneira acentuada sua utilidade com ferramenta de apoio ao professor

## NeoAlice 1.0

O laboratório virtual de Química NeoAlice 1.0 foi desenvolvido para o ensino superior (licenciatura, bacharelado em química e afins) para apoio aos laboratórios presenciais de química.

### Metodologia

O laboratório foi construído com linguagem Java Script e Bootstrap e depositado na base de desenvolvimento Git-Hub (<https://github.com/ceadufv/laboratoriovirtual>). Todo o conteúdo artístico do laboratório está licenciado sob licença creative commons "Attribution-Noncommercial-Share Alike 3.0 Unported (CC BY-NC-SA 3.0)". A fim de contribuir para a melhor utilização do código produzido software, todo o código foi licenciado sob a licença "GNU Affero General Public License v3.00 “

Os desenvolvedores aprenderam as linguagens e procedimento computacionais adequados diretamente no CEAD.

Foi desenvolvido um Roteiro de Programação para auxílio a todos envolvidos no processo de produção do laboratório Virtual de Química, principalmente para os programadores. As principais ações desejadas são apresentadas, assim como algumas rotinas a serem implementadas (descritas em VBA). Ao longo do projeto esse roteiro poderá ser alterado conforme o desenvolvimento dos conceitos e dos problemas a serem detectados. Na parte final do projeto, observou-se a necessidade do uso de uma ferramenta de gestão de desenvolvimento de projeto de TI, tendo sido utilizadas ferramentas tipo Agile.

### Ideias Iniciais da Conceituação de laboratórios Virtuais de Química (VCL)

Não é possível falar de Laboratório Virtuais de Química (VCL) sem dizer explicita e categoricamente que os mesmos não podem substituir a experiência presencial do universitário em um Laboratório de Química.

Há alguns laboratórios virtuais disponíveis, com interfaces gráficas em diferentes níveis de refinamento, com diferentes estratégias para seu uso, sendo o formato de jogo o mais recorrente.

Pode-se dividir os VCL (i) para alunos do ensino médio ou fundamental e (ii) graduandos e profissionais. Para os primeiros, o comportamento químico ou um procedimento podem não ser rigorosos, para que alguns conceitos ou ideias sejam transmitidas (devido à necessidade de transposição de conhecimentos). Entretanto, para VCL para o ensino superior de Química Analítica (U-VCL), o nível de “realidade” aceitável deve ser bastante elevado.

Para a criação do NeoAlice v1.0, um U-VCL, desenvolvemos a ideia de um ambiente virtual formado por cinco partes:

- (i) interface de liberdade limitada com o usuário;
- (ii) uma realidade construída (BR, *Builded-Reality*);

- (iii) estrutura de funcionamento dos instrumentos e vidrarias virtuais;
- (iv) acesso pelo professor sobre as condições BR;
- (v) acesso simples pelos programadores sobre a estrutura da BR.

A realidade construída (BR) é o conjunto de algoritmos que mimetizam a natureza tanto quanto possível, ou seja, dentro das condições de contorno, utilizando, para tanto, modelos químicos e físicos *ab-initio*, semi-empíricos ou mesmo empíricos.

Do ponto de vista computacional realidade construída pode ser interpretada como uma Inteligência Artificial disponível no ambiente, capaz de responder ao estímulos e interações do aluno de acordo com um conjunto de parâmetros previamente estabelecidos que definem o comportamento do ambiente. Esse conjunto de parâmetros pode ainda ser adaptado às circunstâncias de cada experimento, permitindo ao professor flexibilidade nas condições dos experimentos. A arquitetura geral do projeto deve permitir que os diversos módulos da IA/BR possam compartilhar informações de características e estados entre si, simulando assim possíveis interações entre os elementos do ambiente.

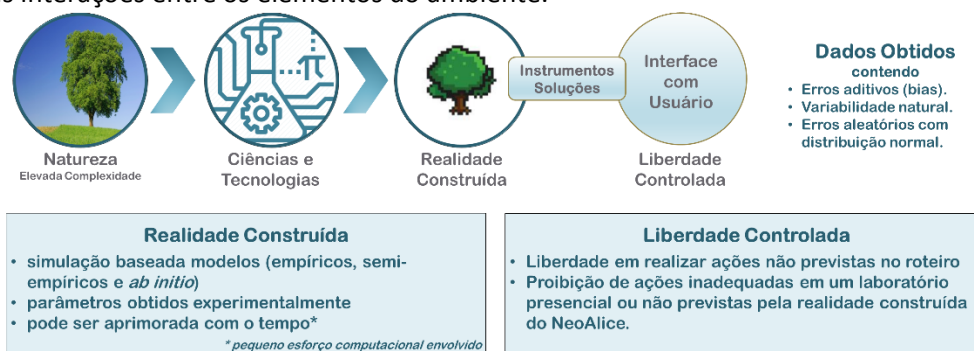
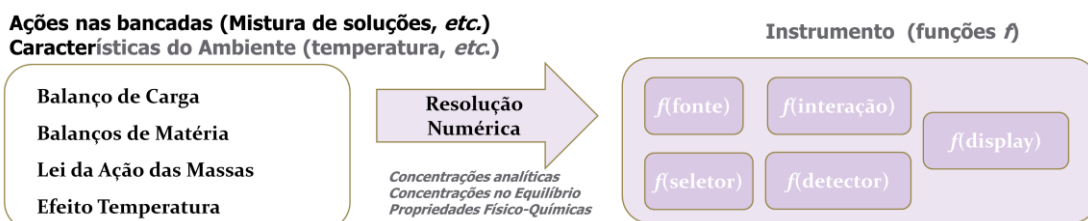


Figura 2 – Representação das ideias associadas ao conceito de Realidade Construída e Liberdade Controlada.

Por exemplo, para o valor de pH de uma solução formada por uma mistura de sistemas ácido-base de Bronsted, na BR (Figura 2), e que não será apresentado ao usuário, está vinculado ao algoritmo para esse cálculo, considerando o balanço de carga, temperatura, coeficientes de atividade, etc., além de incertezas nas concentrações, nas constantes termodinâmicas, etc. As incertezas são obtidas com a geração de números aleatórios com distribuição de frequência definida. O pHmetro, por outro lado, fará uma medida do pH da solução, interagindo com a BR, mas considerando suas limitações (condições de contorno), tais curvas analíticas (função de dois ou três pontos), modelo de comportamento do eletrodo combinado de vidro (baseado no modelo semi-empírico de Nikolskyi), potencial de junção, cinética de resposta do eletrodo de vidro obtida empiricamente, além dos ruídos obtidos também com números aleatórios com distribuição de frequência definida.



#### Nível da Realidade Construída

- Complexidade na Descrição do fenômeno

Exemplos

- Cálculo dos coeficientes de atividade
  - Equações Debye-Hückel
  - Equações Davies
  - SIT (Pitzer, etc.)
- Número de tipos de equilíbrios considerados simultaneamente

Figura 1 – Diagrama esquemático do sistema de construção da realidade construída

A ideia de liberdade limitada envolve a possibilidade do usuário realizar ações não previstas em um roteiro prévio (podendo assim errar, ou mesmo alterar alguma condição no experimento), desde que estejam dentro do limite possível da realidade construída, como por exemplo, em uma realidade onde apenas os equilíbrios ácidos-base de Bronsted simultâneos são permitidos, uma mistura de soluções em que a formação de precipitado pode ocorrer não é permitida por controle interno. O ambiente contém uma área de acesso ao professor para que, de acordo com a proposta pedagógica, possa limitar ações, automatizar algumas, definir as soluções e vidrarias disponíveis dentre outras opções.

#### Detalhes do Produto

O laboratório virtual está disponível em:

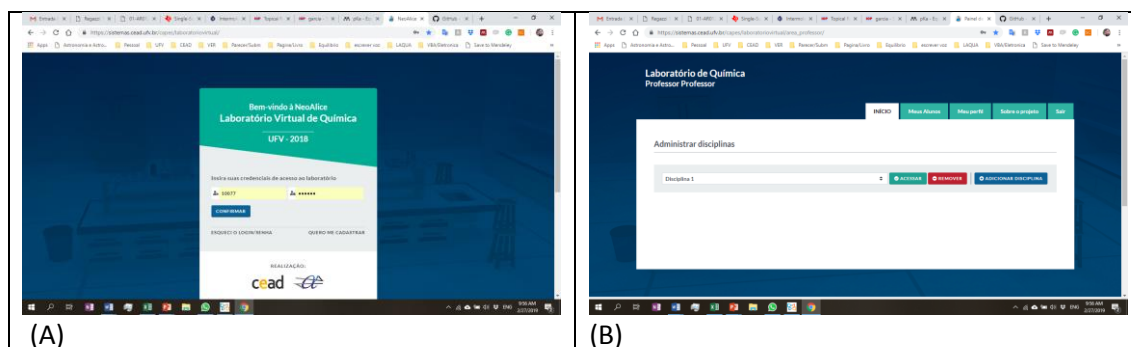
Link para o código fonte e arquivos do Laboratório

<https://github.com/ceadufv/laboratoriovirtual>

Link para acesso ao Laboratório

<HTTPS://SISTEMAS.CEAD.UFV.BR/CAPES/LABORATORIOVIRTUAL/>

O acesso ao laboratório é controlado por senha, permitindo o acesso dos alunos cadastrados acessarem diferentes disciplinas e perfis de laboratórios distintos e o professor cadastrado, tanto aos laboratórios, quanto a uma área de gerenciamento das atividades dos alunos em cada disciplina e perfil de laboratório. Além disso, o professor também tem acesso à edição e criação de novas práticas. Na Figura 3 é apresentada uma série de telas para o acesso do professor à edição de um perfil de laboratório.





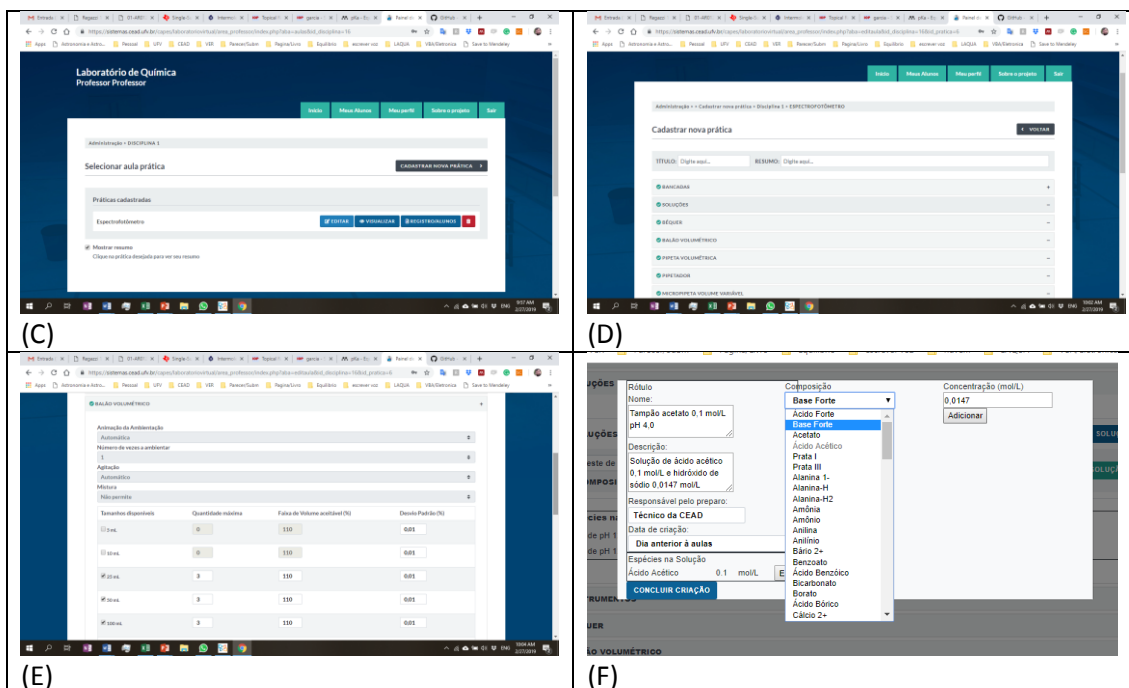


Figura 3 – Sequência de telas para acesso à edição de uma prática. Na imagem F há um detalhe do menu para o preparo das soluções que estarão à disposição dos alunos em um perfil de laboratório.

Cada perfil de laboratório permite que várias práticas distintas sejam realizadas. Para tanto, apenas o roteiro da prática é alterado. Por exemplo, várias práticas sobre distintos efeitos tampão podem ser realizados apenas com a mudança das soluções e procedimento realizado. O pHmetro, vidrarias, soluções etc. disponíveis para acesso pelo aluno podem ser os mesmos.

Nesta versão 1.0 foram desenvolvidas as bancadas para práticas envolvendo o uso de pHmetro, diluições e espectrofotômetro. Na Figura 1 é apresentado o layout da bancada do pHmetro

Na Figura 1 é apresentado o layout da banca do pHmetro

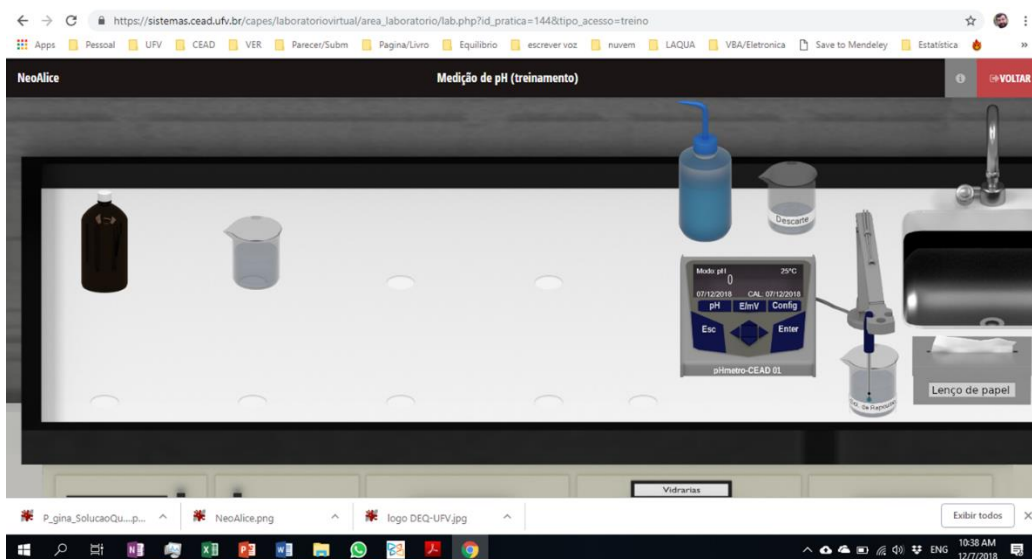


Figura 4 – Tela da bancada do pHmetro, com um frasco e um béquer retirados dos armários.

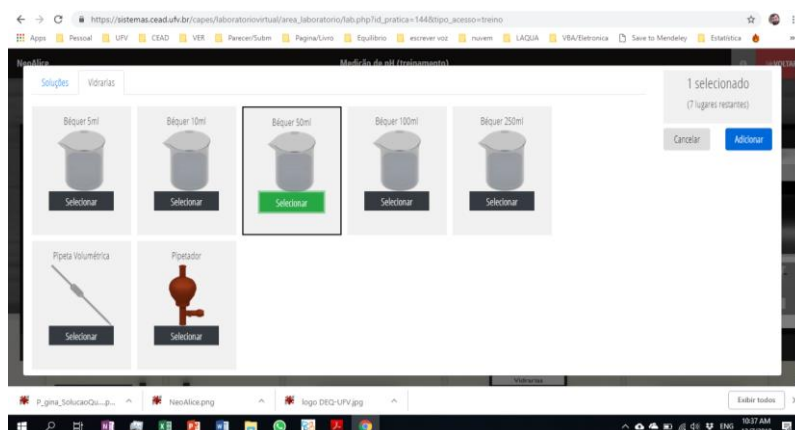


Figura 6 – Tela do Armário de vidrarias com aquelas disponibilizadas pelo professor para um perfil de laboratório em partícula.

Os algoritmos internos das vidrarias, pHmetro, e espectrofotômetro são desenvolvidos para a melhor realidade construída possível no momento. Entretanto, o professor pode diminuir essa realidade alterando os parâmetros desses algoritmos. Apenas como ilustração, os parâmetros para cada etapa de cálculo do sinal analítico no pHmetro é apresentado na Figura 5

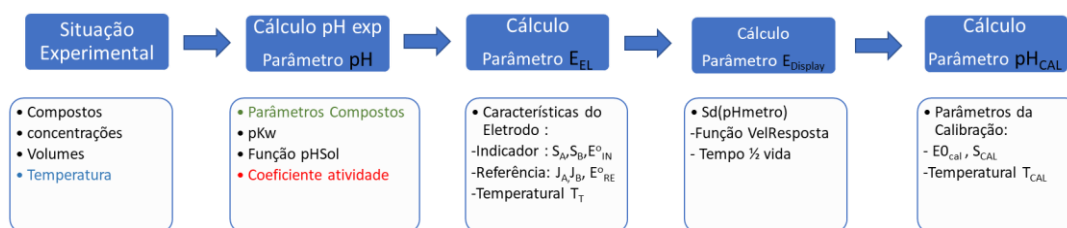


Figura 5 – Parâmetros utilizados em cada etapa do pHmetro.

Pequenas alterações e eliminação de bugs estão sendo realizados. O laboratório irá ser testado com turmas de alunos da UFV assim que forem finalizadas essas alterações.

## Conclusão

O projeto proposto é considerado por nós de enorme relevância à sociedade, no sentido em que, a partir de um conceito construído esse projeto e instrumentalizado por ele permitirá um avanço real no ensino prático de química, assim como a integração de TICs com o ensino presencial.

## Etapas Futuras

Em futuros projetos, o NeoAlice 2.0 deverá ter implementado

- melhorias do ponto de vista de acesso, permitindo um número elevado de usuários simultaneamente
- implementação da realidade construída
- implementação de algoritmo mais robusto para cálculos químicos, ampliando a liberdade controlada ao aluno e assim permitindo um número maior de tipos de experimentos e conceitos químicos envolvidos.
- Implementação de novos instrumentos analíticos no laboratório, tais como HPLC, cromatógrafo de gás, etc.
- Ampliar a programação para permitir a contribuição mundial ao projeto, de maneira a haver uma melhoria contínua, assim outros projetos abertos (Linux, R, etc.)