# Inferência Abdutiva Computacional para o Ensino de Química: uma Nova Perspectiva para Construção de Conceitos por Analogia

Marcio Yuji Matsumoto<sup>1,2</sup>, Osvaldo Luiz de Oliveira<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculdade Campo Limpo Paulista (FACCAMP) Rua Guatemala, 167, Jd. América – 13.231-230 – Campo Limpo Paulista – SP – Brasil

<sup>2</sup>Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo (IFSP) Rua Pedro Vicente, 625, Canindé – 01.109-010 – São Paulo – SP – Brasil

matsumoto@ifsp.edu.br, osvaldo@faccamp.br

**Abstract.** This paper describes the initial ideas of a research project in Computer Science. The project encompasses the development of a computational model and the implementation of a system for students to learn via the creation of theories by analogy with other theories. The Chemistry is used as a source for reflection on the computational challenges of the project.

Resumo. Este artigo descreve as idéias iniciais de um projeto de pesquisa em Ciência da Computação. O projeto envolve o desenvolvimento de um modelo computacional e a implementação de um sistema, para que os estudantes aprendam por meio da criação de teorias por analogia com outras teorias. A Química é empregada como fonte para reflexão sobre os desafios computacionais do projeto.

#### Introdução

A analogia pode ser entendida como uma comparação baseada na semelhança de estruturas de conhecimento diferentes, um conhecido e outro desconhecido, entre atributos presentes nos domínios considerados. A utilização das analogias no ensino das ciências promove a ativação do raciocínio analógico, organizando a percepção, desenvolve capacidades cognitivas como a criatividade e a tomada de decisões, e tornam o conhecimento científico mais inteligível e plausível, facilitando a compreensão e visualização de conceitos abstratos, promovendo o interesse dos alunos. Uma analogia pode, ainda, constituir um instrumento eficaz no processo de facilitar a evolução conceitual e permitir a percepção de eventuais concepções alternativas nos estudantes. [Duarte 2005]

Para [Cagnin 2008], a transferência analógica é a generalização e a adaptação de conhecimentos de uma situação anterior (fonte) para uma nova situação posterior (alvo), a partir de similaridades compartilhadas. Assim, uma resolução de problema por analogia partiria de um processamento inicial, onde o problema seria representado e haveria a recuperação de conhecimentos prévios sobre a fonte. Em seguida, ocorreria um processamento no qual haveria uma comparação ou um mapeamento de características comuns entre o problema fonte e o alvo. Após esses estágios iniciais, seria necessária uma adaptação da fonte ao alvo, por se tratarem de problemas de diferentes domínios, o que requer uma adequação daquilo que é recuperado na memória (fonte) às condições do problema alvo.

Mas, para que ocorra esta aplicação do conhecimento prévio, são necessários processos de generalização e de inferência, levando a abstrações.

Segundo [Magnani 2013], a analogia é uma forma composta de raciocínio que integra a indução e abdução, sendo que a última trata-se uma inferência com a qual as hipóteses são formuladas para explicar fatos observados, utilizando uma teoria como base de fundamentação. Neste trabalho, introduzimos as abduções e analogias como raciocínios de descoberta, por meio de um hipotético sistema computacional a ser implementado, com a finalidade de apresentar as possibilidades e limitações do raciocínio analógico abdutivo para gerar novas hipóteses.

O conteúdo deste artigo está organizado da seguinte maneira. A Seção 2 mostra a importância do raciocínio abdutivo em Química e apresenta alguns exemplos de seu uso. A Seção 3 expõe os elementos iniciais da proposta de pesquisa e, em particular, exemplifica a analogia entre duas teorias. Por fim, a Seção 4 pondera sobre os desafios do projeto de pesquisa cujas ideias iniciais são expostas neste artigo.

## Raciocínio Abdutivo no Ensino de Química

O ensino de Química é influenciado e organizado, normalmente, pelo raciocício dedutivo. A teoria atômica costuma ser trabalhada na parte inicial dos cursos de química, para que seus modelos sejam testados, dedutivamente, nos mais diversos conceitos e situações práticas da disciplina. Por outro lado, a construção científica é feita por descobertas e, portanto, o ensino das ciências poderia ser considerado a partir do pensamento abdutivo e analógico, estimulando-se os testes e a formulação de hipóteses, para que a aprendizagem dos estudantes seja inspirada na atividade do cientista. [Kavalek 2016]

Ao longo dos séculos, a construção científica requeria a transposição das características de objetos observáveis para as concepções dos entes não observáveis. Os modelos atômicos, desse modo, foram tentativas para descrever a matéria em termos de partículas discretas chamadas de átomos. Com a teoria de Dalton, os átomos seriam indivisíveis, idênticos em massa e propriedades se fossem do mesmo elemento químico, e poderiam ser combinados entre si na razão de números inteiros. O progresso da ciência, para [Magnani 2013], depende da observação dos fatos certos e do julgamento feito a partir de ideias apropriadas. E isto foi o que Dalton fez ao propor a existência dos átomos, mesmo antes da invenção de instrumentação necessária para interagir diretamente com esses entes microscópicos.

Outro exemplo de um raciocínio abdutivo que fundamenta a disciplina de química é a postulação do modelo atômico planetário de Rutherford, baseada na dispersão de partículas alfa por uma fina placa de ouro, observada nos experimentos de Geiger e Marsden, em 1910. As potenciais informações sobre o mundo podem ser, em parte, reveladas com a ajuda de instrumentação científica e com o desenvolvimento de novos dispositivos. A computação e a informação são, dessa forma, a base de sustentação das ciências, sendo elas inseparáveis, conforme a teoria das categorias para formalização da abordagem info-computacional. [Woods 2010]

Na história do desenvolvimento das ciências, muitas vezes, ocorreram confirmações experimentais de uma teoria proposta por raciocínio abdutivo. A inferência abdutiva permite o entendimento de que uma teoria T tem boa chance de ser verdadeira, se

as previsões experimentais E são verdadeiras. Esse raciocínio abdutivo assemelha-se ao dedutivo com a introdução de um fator probabilístico, uma vez que dado E, então provavelmente T. Assim, embora a abdução não acarrete na certeza de dedução, existem certas restrições para o que podem ser consideradas boas hipóteses. Os sistemas de abdução podem ser analisados em termos dessas restrições, as quais permitem a comparação das diferentes hipóteses. A ordem de preferência das hipóteses pode ser decorrente de tais comparações, ao ponderar as diversas restrições. A formação de analogia é uma das possíveis restrições que contribuem para o raciocínio abdutivo, ao encontrar conjuntos de relações em um domínio de origem (fonte) que pode ser aplicado a um domínio alvo. Um exemplo para a química é a analogia entre o sistema solar e um átomo, sendo o Sol o núcleo de um átomo e, os planetas, os elétrons. Uma vez que uma analogia seja estabelecida com base em relações conhecidas, as características do domínio de origem podem virar hipóteses no domínio alvo. [Gama 2016]

### Analogia e Abdução: uma Proposta de Pesquisa para o Ensino de Química

[Ellis 1993] descreveu o funcionamento e comportamento dos semicondutores a partir de analogias com o equilíbrio ácido-base em soluções aquosas. Por exemplo, a dopagem de alumínio no silício é análoga ao processo de dissolução de ácido clorídrico (HCl) em água, enquanto que o diodo emissor de luz (LED) é análogo à célula eletroquímica de concentração.

Assim como ocorre em solução aquosa, a recombinação entre H<sup>+</sup> e OH<sup>-</sup>, formando a água e estabelecendo o equilíbrio químico, um processo similar ocorre com o par elétron-buraco (ou lacuna) no sólido. Nos semicondutores, as espécies químicas análogas aos ácidos e bases são os dopantes, como o Ga e As. No primeiro exemplo, ocorre a transferência dos elétrons da banda de valência do Si para os orbitais aceptores do Ga, produzindo buracos naquela banda, ou portadores móveis positivos de carga. No segundo caso, os elétrons dos orbitais doadores do As são excitados para a banda de condução do Si, gerando portadores móveis negativos de carga. Assim, é possível fazer analogias entre a força dos ácidos e bases, na água, e o caráter aceptor e doador dos dopantes nos semicondutores. A Tabela 1 resume as relações analógicas entre os dois sistemas químicos.

Tabela 1. Paralelos entre a química em solução aquosa e em semicondutores

Reação Química	Exemplo na Água	Exemplo no Silício
Autoionização do solvente	$H_2O \longrightarrow H^+ + OH^-$	$ \begin{array}{c} \operatorname{Si}_{(cristal)} \longrightarrow h^{+} + e^{-} \\ K = [h^{+}][e^{-}] = p \times n \end{array} $
	$K_w = [H^+][OH^-]$	
	$[\mathrm{H^+}] \approx 10^{14} \mathrm{\ ions/cm^3}$	$[{ m h}^+] pprox 1,5  imes 10^{10}~{ m cm}^{-3}$
Ácido forte (aceptor forte)	$HCl \longrightarrow H^+ + Cl^-$	$Ga \longrightarrow h^+ + Ga^-$
Base forte (doador forte)	$NaOH \longrightarrow Na^+ + OH^-$	$As \longrightarrow As^+ + e^-$
Ácido fraco (doador fraco)	$CH_3COOH \rightleftharpoons H^+ + CH_3COO^-$	$Cu \rightleftharpoons h^+ + Cu^-$
Base fraca (doador fraco)	$NH_3 + H_2O \rightleftharpoons NH_4^+ + OH^-$	$Mn \rightleftharpoons Mn^+ + e^-$
Efeito do íon comum	adição de base (ácido) reduz a	adição de um doador (aceptor) reduz a
	concentração de H <sup>+</sup> (OH <sup>-</sup> )	concentração de h <sup>+</sup> (e <sup>-</sup> )
Célula de concentração	$H_2$   NaOH    HCl   $H_2$	tipo-n   tipo-p
	$E = \frac{-2,3RT}{F} \log \frac{[H^+]_{base}}{[H^+]_{acido}}$	$E = \frac{-2,3RT}{F} \log \frac{[h^+]_n}{[h^+]_p}$

Pode-se notar uma grande correspondência entre o problema fonte e o problema

alvo. São sete reações que podem ser descritas no sistema semicondutor que são análogas às que ocorrem em solução aquosa. Isso deve possibilitar a recuperação na Memória de Longo Prazo (MLP) por ativar os conceitos prévios relativos aos dispositivos semicondutores, temas de interesse dos estudantes nos cursos de formação técnica profissionalizante. No pensamento analógico, os processos de recuperação de informação e do mapeamento são considerados fundamentais. Além disso, o mapeamento também pode ser bem sucedido por haver diversas relações mutuamente conectadas entre o problema fonte e o alvo.

Feitas tais considerações, este projeto de pesquisa pretende desenvolver um sistema de aprendizagem por meio de computador, que permita o trabalho quantitativo com conceitos de equilíbrio químico, os quais devem ser fornecidos por uma definição e exemplos. Sua funcionalidade pode ser baseada na regra de que um conceito conhecido seja necessário para a geração de outro conceito. Para cada caso, o sistema deve calcular um conjunto de exemplos que possuam uma determinada propriedade, descrita na definição do conceito de equilíbrio químico. Com esses exemplos, o sistema deve procurar por relações empíricas entre eles e formular conjecturas sempre que tal relacionamento for encontrado. Assim, espera-se buscar as possíveis analogias com a linguagem e conceitos envolvidos no estudo do equilíbrio químico, que possam ser utilizadas como base argumentativa para o ensino dos materiais semicondutores.

## Considerações Finais e Perspectivas Futuras

No ensino de ciências, as analogias costumam ser pouco utilizadas ou são feitas de forma inadequada, dado que o processo de seleção de situações análogas é pouco crítico, surgindo, em situações da aula, de uma forma improvisada. Ainda, as analogias utilizadas podem ser confusas e tão complexas, ou mais, do que o alvo e raramente se exploram as semelhanças mais relevantes entre o alvo e o análogo. A abdução por analogia é fundamental para o desenvolvimento da percepção científica do estudante. Uma das consequências da execução deste projeto será a produção de um sistema de aprendizagem por meio de computador, que permita o estabelecimento das relações entre os conceitos de equilíbrio químico em solução aquosa, com os conhecimentos específicos de semicondutores abordados na modalidade de educação profissionalizante. O programa deve interagir com o usuário permitindo que este escolha e controle as variáveis como temperatura, reagentes e dopantes, de tal modo que possa compreender seus efeitos sobre a fenomenologia de equilíbrio dinâmico das cargas elétricas, em nível submicroscópico. Uma vez fortalecidos os conceitos abordados, estes poderão constituir uma base sólida para novas construções vinculadas a diferentes subáreas do conhecimento, e dar sustentação para um aprendizado autônomo e eficiente.

## Referências

Cagnin, S. (2008). Afeto e cognição: efeitos de similaridades afetivas na transferência analógica em resolução de problemas. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Instituto de Psicologia, Programa de Pós-Graduação em Psicologia Escolar e do Desenvolvimento Humano, São Paulo.

- Duarte, M. C. (2005). Analogias na Educação em Ciências: Contribuições e Desafios. *Investigações em Ensino de Ciências*, 10:7–29.
- Ellis, A. B. (1993). *Teaching General Chemistry: A Materials Science Companion*. American Chemical Society.
- Gama, L. D. (2016). Regras de inferência e teorias científicas: duas propostas de soluções lógico-probabilísticas para a afirmação do consequente na verificação de teorias e algumas aplicações no ensino de ciências. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ensino de Ciências, São Paulo.
- Kavalek, D. S. (2016). Átomo, representação e filosofia da química: caminhos para a transiçõ da linguagem diagramática para a discursiva em aulas da educação básica. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Ciências Básicas da Saúde, Programa de Pós-Graduação em Educação em Ciências: Química da Vida e Saúde, Porto Alegre.
- Magnani, L. (2013). *Model-based reasoning in science and technology: theoretical and cognitive issues*. Studies in applied philosophy epistemology and rational ethics 8. Springer.
- Woods, J. (2010). *Model-Based Reasoning in Science and Technology: Abduction, Logic, and Computational Discovery*. Studies in Computational Intelligence 314. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.