

UN ACERCAMIENTO DIDÁCTICO ENTRE QUÍMICA ORGÁNICA Y ÁLGEBRA LINEAL

A DIDACTIC APPROACH BETWEEN ORGANIC CHEMISTRY AND LINEAR ALGEBRA

Marcela Rodríguez, Ana María Narvaez

Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Mendoza. Universidad Nacional de Cuyo, Facultad de Ingeniería (Argentina)

marcela.rodriguez.aghem@gmail.com, ana.narvaez@frm.utn.edu.ar

Resumen

Este trabajo interdisciplinario entre Álgebra Lineal y Química Orgánica, específicamente, entre la teoría de grafos y la topología molecular, tiene como propósito optimizar la calidad de los conocimientos impartidos en Ingeniería, pues la articulación consciente potencia el conocimiento científico propio del nivel universitario. Se están investigando los objetos matemáticos del Álgebra Lineal cuya aplicación permita obtener la caracterización estructural de moléculas. El marco teórico privilegiado es la Transposición Didáctica y la metodología es Ingeniería Didáctica. Los resultados obtenidos se refieren a los conocimientos adquiridos sobre los fundamentos epistemológicos necesarios para el diseño y la implementación de material didáctico que integra las matrices relacionadas a la teoría de grafos con la topología molecular. La singularidad de la topología molecular es que es una vía matemática de descripción de la estructura molecular y un método para descubrir nuevas moléculas.

Palabras clave: teoría de grafos, grafo molecular

Abstract

This interdisciplinary work between Linear Algebra and Organic Chemistry, more specifically between Graph Theory and Molecular Topology, is intended to optimize the quality of the knowledge taught in Engineering courses, since conscious articulation fosters scientific knowledge at university level. We are researching on mathematical objects of Linear Algebra whose application allows us to get the structural characterization of molecules. The theoretical framework used is Didactic Transposition, and the methodology is Didactic Engineering. The results show the acquired knowledge about the epistemological foundations necessary for the design and the implementation of didactic material that integrate the matrices related to the Graph Theory with Molecular Topology. The peculiarity of Molecular Topology is that it is a mathematical means to the description of molecular structure and a method for discovering new active molecules.

Key words: graph theory, molecular graph

■ Introducción

En los últimos años se ha desarrollado una corriente científica, apta para la enseñanza universitaria, que integra la química con la matemática, tal disciplina es actualmente conocida como química matemática. Uno de sus ejes es abordado desde la teoría de grafos, desarrollada en el siglo XIX por A. Cayley y J. J. Sylvester, si bien existen resultados dados por Leonard Euler desde un siglo antes. Recordemos que la teoría de grafos es un exponente de la matemática pura que ha encontrado con el tiempo diversas aplicaciones; es una herramienta imprescindible en áreas en las que estructura y conectividad juegan un papel preponderante (Amigo, Falcó, Galves y Villa, 2007).

Es bien conocido el hecho que ejemplos sencillos de la teoría de grafos aparecen en la literatura de Álgebra Lineal para cursos básicos de ingeniería: redes de comunicación y transporte, diseño de circuitos eléctricos, optimización de líneas de suministro, epidemiología, etc., en relación con el estudio de matrices (Grossman, 1992).

Por otro lado, la representación de compuestos químicos mediante grafos es cada vez más frecuente, dada la utilidad de estos para predecir las propiedades de una molécula antes de sintetizarla.

■ Propósitos y descripción

Los propósitos de la presente propuesta se refieren a que los aprendizajes logrados por los estudiantes sean de la mejor calidad posible; para ello, una estrategia es anclar los nuevos conocimientos a los anteriores. En esta dirección se está trabajando para dar en Álgebra Lineal (materia del primer semestre de primer año) ejemplos de grafos que podrán ser puestos en acto en el curso de Química Orgánica (segundo semestre de segundo año). Además, se pretende que los contenidos de Álgebra Lineal y Geometría Analítica tengan aplicaciones interesantes, no estándares en la bibliografía básica para estos cursos. Por ejemplo, Grossman (1995), Kolman y Hill (2006) y Larson (2010), entre otros.

La investigación consiste en realizar el estudio de las definiciones, ejemplos, propiedades y teoremas necesarios de la teoría de grafos para ser incluidas en el curso de Álgebra Lineal y Geometría Analítica, no alterando el cronograma planificado para los contenidos obligatorios de la asignatura y, también estudiar conceptos de topología molecular para realizar la transposición didáctica que se adecue a los alumnos a quienes va dirigida. De esta forma, los conceptos de la mencionada teoría de grafos estarán disponibles para realizar la caracterización estructural de moléculas, tema central de Química Orgánica.

La caracterización de moléculas se puede realizar mediante unos invariantes sencillos, llamados *índices topológicos*. Estos índices, una vez procesados estadísticamente juegan un papel decisivo en el descubrimiento de nuevas aplicaciones de moléculas conocidas y en el diseño de moléculas con propiedades químicas específicas. Esto es lo que actualmente se llama *topología molecular*.

Esencialmente la topología molecular sirve para encontrar correlaciones entre una propiedad física, química o biológica y las estructuras moleculares, basándose en los índices topológicos (Villar, Falcó, Casanova, Moreno, Antón, García, 2015). Dichos índices se pueden obtener a partir del tratamiento matemático de matrices asociadas a la teoría de grafos.

La aplicación de la teoría de grafos en la química es la topología molecular; ésta se basa en la aplicación de dicha teoría de grafos a la descripción de las estructuras moleculares, siendo un *grafo* un conjunto de puntos (llamados *nodos* o *vértices*) con algunos pares de ellos conectados mediante uniones llamadas *aristas* o *ejes*. Los nodos del grafo G los numeraremos arbitrariamente y denotaremos por $e_{i,j}$ al eje que une los nodos i y j . Utilizaremos n para denotar el número de nodos de un grafo, mientras que $E(G)$ representa el conjunto de ejes y $|E(G)|$ su cardinalidad,

es decir el número de ejes de G . Si dos nodos están conectados por un eje, se llaman *adyacentes*. El número de ejes que salen de un nodo se llama *grado* del nodo. Un *camino* o *trayectoria* p en G es el subgrafo obtenido al conectar consecutivamente varios nodos adyacentes; si, además, conectamos el primer nodo al último nodo de p , obtenemos un *ciclo*. La *longitud* de un camino o ciclo es el número de ejes que lo componen (Bollobas, 1998).

Cuando la teoría de grafos se aplica a moléculas, los nodos representan átomos y las aristas, enlaces químicos, normalmente enlaces covalentes puesto que es en la química orgánica donde la topología molecular ha encontrado su mayor campo de aplicación. El grafo resultante que nos dice como están ligados los átomos y el camino (o caminos) que une (n) un átomo a otro en una misma molécula, se llama *grafo molecular*.

Supongamos que queremos caracterizar estructuralmente un compuesto orgánico, si es posible, se eliminan los átomos de hidrógeno de la molécula, en segundo lugar, los átomos restantes (los vértices del grafo molecular) se numeran de forma conveniente. Por último, la caracterización estructural contenida en el grafo molecular puede ser encapsulada de muy diversas maneras como, por ejemplo, mediante matrices, índices numéricos, polinomios, espectros, grupos u operadores; en este trabajo sólo veremos las herramientas más sencillas utilizadas en la topología molecular.

■ Matrices asociadas a grafos moleculares

Entre las diferentes matrices asociadas a los grafos moleculares, cabe destacar las siguientes por su sencillez de cálculo: matriz de adyacencia y matriz de distancia.

La matriz de adyacencia se puede utilizar como instrumento algebraico, para indicar qué pares de nodos están unidos por aristas; si la molécula consta de N átomos, la matriz de adyacencia del grafo molecular G , $A = A(G)$ es una matriz $N \times N$ simétrica cuyas componentes son

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si los átomos } i \text{ y } j \text{ están ligado} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

La matriz de distancia $D = D(G)$, es una matriz $N \times N$ simétrica cuyas componentes son las distancias topológicas. Se define:

$$D_{ij} = \begin{cases} \text{longitud mínima de los caminos que unen } i \text{ y } j, \text{ si } i \neq j, \\ 0, \text{ si } i = j. \end{cases}$$

Así, D proporciona una imagen cualitativa de las relaciones de proximidad o lejanía entre los átomos de la molécula. La suma de las distancias topológicas entre el vértice i y todos los demás vértices del grafo molecular, se llama *suma de las distancias* del vértice i

$$DS_i = \sum_{j=1}^N D_{ij} = \sum_{j=1}^N D_{ji} \quad (1)$$

Obsérvese, finalmente, que la matriz de distancia puede obtenerse a partir de la matriz de adyacencia (Amigo *et al*, 2007).

■ Índices de conectividad

Una vez construida la matriz de adyacencia, se obtiene la valencia δ_i de cada vértice. La valencia de cada vértice es el número de ejes que convergen en él, lo que es igual a la suma de los términos que hay en la fila o columna correspondiente a dicho vértice. Como se aprecia, es una expresión matemática que relaciona la estructura con una descripción numérica. Su importancia en los estudios estructura – actividad radica en que a partir de ella se calculan la mayoría de los índices topológicos.

La figura 1 ilustra la construcción de la matriz topológica de adyacencia para el isopentano y el ciclohexano, junto con los valores obtenidos para las valencias de los diferentes átomos.

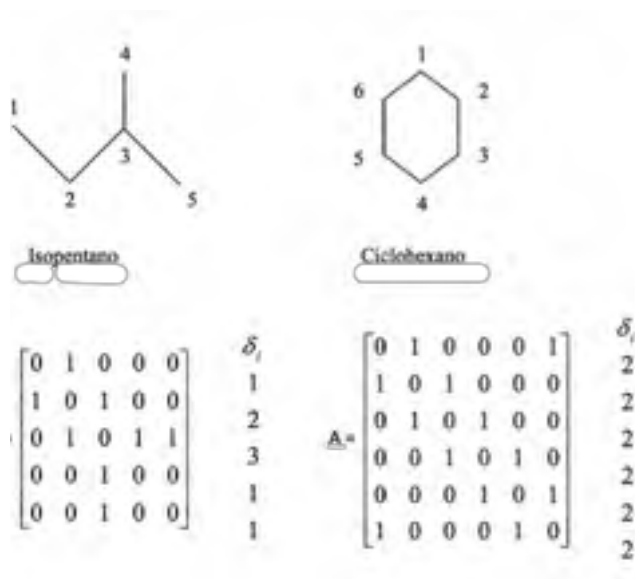


Figura N° 1: representación como grafos y matrices

Una vez obtenido un índice (o varios), se establecen correlaciones entre ellos y diferentes propiedades moleculares para grupos de compuestos más o menos homogéneos; así se pueden enunciar ecuaciones que relacionan tales propiedades con la estructura molecular, caracterizada a través de sus índices.

Estas ecuaciones se conocen como “funciones de conectividad” (la conectividad representaría el “ensamblaje” topológico entre los elementos). Si se calculan entonces los valores de los índices de nuevas moléculas, es decir de moléculas no utilizadas en la correlación, y se sustituyen en la ecuación, se podrá predecir el valor de la propiedad correlacionada para ese nuevo compuesto, el cual puede incluso no tener aún una existencia física.

■ Marco teórico

Para lograr el objetivo propuesto, en este trabajo del área de la Didáctica de la Matemática y de la Química como disciplinas experimentales, se privilegia la Teoría de Transposición Didáctica de Ives Chevallard. Ahora bien ¿por qué utilizar esta teoría? Chevallard (1991) expresa que “permite la articulación del análisis didáctico con el epistemológico y se convierte en guía del buen uso de la epistemología para la didáctica” (p.23).

Esta teoría es la adecuada para sustentar la presente investigación que pretende darle respuesta a la pregunta ¿las innovaciones ayudan a una mejor aprehensión del tema matrices?, pues en este marco se le da respuesta al interrogante ¿qué se entiende por mejor...?

Mejor significa que la nueva contextualización que se le otorgue al objeto de estudio sea adecuada para los alumnos hacia los cuales va dirigida, eligiendo para ello una red de problemáticas y de problemas que pudiendo coincidir o no con la génesis histórico – epistemológica del concepto, encuentre su uso, su empleo, es decir su significado. Chevallard (1991) afirma “Todo saber está vinculado a sus productos y se encarna en él” (p. 24).

Más aún, se pretende que los alumnos logren mejor comprensión e interpretación y competencias adecuadas para la solución de problemas específicos del área ingenieril.

La teoría de la Transposición Didáctica se inserta en el sistema didáctico, que es ternario, formado por el docente, alumnos y saber matemático. La misma designa el conjunto de las transformaciones que sufre un saber con el fin de ser enseñado. Este fenómeno de transposición queda a veces oculto en la enseñanza.

En un sentido restringido, la transposición didáctica designa el paso del saber sabio o disciplinar o matemático al saber enseñado.

■ Metodología de la investigación

Las deficiencias detectadas en el aprendizaje de los alumnos manifestadas en exámenes finales son consideradas como resultados a priori para el diseño de la presente metodología que privilegia no sólo *qué enseñar* sino *cómo mejorar* la enseñanza y aprendizaje de los contenidos disciplinares.

La metodología requiere de una participación activa del estudiante y del docente, quien tiene como tarea fundamental generar la aparición de competencias en el alumno, por lo que se deben diseñar secuencias didácticas que den lugar a los objetivos previstos, esto lleva al docente a planificar los contenidos vinculándolos a situaciones que resulten de interés para el estudiante.

En el presente trabajo se emplea la metodología de investigación llamada micro ingeniería didáctica. La ingeniería didáctica se caracteriza por un esquema experimental basado en “realizaciones didácticas” en clase, esto es sobre la concepción, realización, observación y análisis de secuencias de enseñanza.

La expresión ingeniería didáctica se utiliza para denominar una forma de trabajo didáctico comparable al trabajo del ingeniero, término que proviene de la palabra “ingenio”. Este último, apoyándose en los conocimientos científicos de su dominio y aceptando el control de la teoría, está obligado a trabajar con objetos más complejos que los objetos puros de la ciencia y debe gestionar problemas específicos sobre los que la ciencia no se hace cargo (Artigue, 1995).

■ Experiencia áulica

En el primer semestre de 2018 se incorporó a la Guía de Trabajos Prácticos de la cátedra de Álgebra y Geometría Analítica, en el primer trabajo práctico que se refiere a matrices (concepto, operaciones matriciales, propiedades, clasificación de matrices, inversas de matrices) una actividad integradora entre el Álgebra y la Química.

En el diseño de la misma se tuvieron en cuenta distintos aspectos, a saber: a) el objetivo de la innovación; b) que las actividades a ser desarrolladas por el alumno deben ser construidas en distintos contextos (Duval, 1991) con el control de variables didácticas que permitan la aparición de obstáculos para su tratamiento (Sierpinka, 1985); c) el interés de los estudiantes a quienes iba dirigida la actividad y d) se encaró la enseñanza y aprendizaje con actividades de dificultad creciente para que los alumnos fueran construyendo los distintos niveles cognitivos indicados en la Teoría APOE (Dubinsky, 1991) y profundizando en los mismos para lograr alcanzar el nivel de *esquema*, siendo esta una construcción óptima para el entendimiento del tema, según nuestra experiencia docente anterior en el diseño de actividades sobre límite (Narvaez, Berman, Rodriguez, 2011).

■ Actividad propiamente dicha: Matrices asociadas a grafos moleculares

La siguiente actividad les fue dada a los estudiantes.

Actividad: Se puede utilizar como instrumento algebraico la matriz de adyacencia de un grafo, que indica qué pares de nodos están unidos por aristas; si la molécula consta de N átomos, la matriz de adyacencia del grafo molecular G , $A = A(G)$ es una matriz $N \times N$ simétrica cuyas componentes son

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si los átomos } i \text{ y } j \text{ están ligados,} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

A continuación, la figura 1 muestra la molécula de 2-bromopropanol y su grafo molecular, propuesto por Rozas (2011).

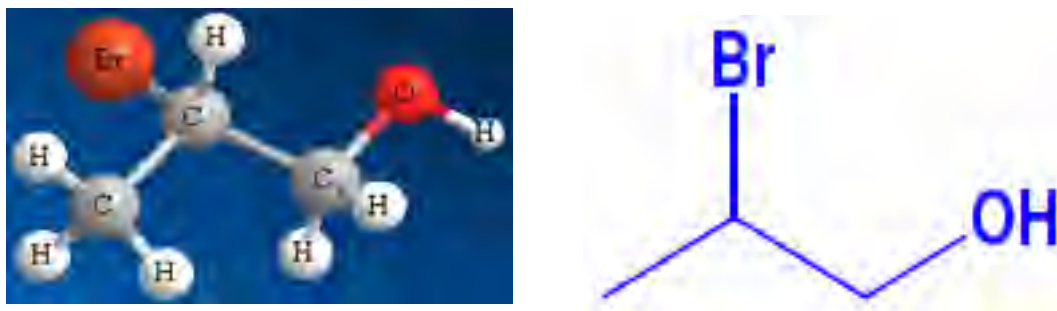


Figura N°2: molécula 2- bromopropanol. Gráfico de barras y esferas y grafo molecular.

La representación del grafo matemático puede ser la siguiente:

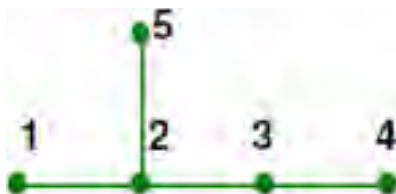


Figura N° 3: grafo matemático de la molécula 2- bromopropanol

- i) Entonces, la matriz de adyacencia $A = (A_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ es $A = \dots\dots\dots$
- ii) Verificar que la matriz de adyacencia es simétrica.
- iii) Verificar que, en la molécula dada, que sólo tiene enlaces simples, la suma de todos los elementos de la fila i de A , $\sum_{j=1}^N A_{ij}$ así como la suma de todos los elementos de la columna i , $\sum_{j=1}^N A_{ji}$, dan indistintamente el número total de ejes que confluyen en el átomo i .
- iv) La matriz de distancia $D = (D_{ij})$, es una matriz $N \times N$ cuyas componentes son las distancias topológicas. Se define:

$$D_{ij} = \begin{cases} \text{longitud mínima de los caminos que unen } i \text{ y } j, \text{ si } i \neq j, \\ 0, \text{ si } i = j. \end{cases}$$

Entonces la matriz de distancia es $D = \dots\dots\dots$

- v) Verificar que la matriz de distancia D es simétrica.

■ **Notas sobre la Actividad**

- a) Las respuestas de las matrices de adyacencia y distancia solicitadas en el ejercicio son

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 \end{bmatrix}$$

- b) Se observa la relevancia de la imagen del compuesto dado en la actividad, pues permite observar la relación de adyacencia entre los átomos y su posterior representación mediante el grafo molecular y el algebraico.

- c) Con respecto a esta actividad, se ha realizado la validación de la misma en una oportunidad y se vio que el enunciado era entendido por docentes y estudiantes.
- d) En este momento, sólo se registran evaluaciones cualitativas de impacto positivo en docentes y estudiantes.
- e) Se espera que en el cursado intensivo de la asignatura, correspondiente al segundo semestre del año en curso, se puedan obtener nuevas evaluaciones con un protocolo que se está diseñando para realizar mediciones cuantitativas que valoren el impacto de dicha actividad.
- f) A partir de la actividad dada, se diseñarán otras que permitan obtener matrices adicionales, como, por ejemplo, la matriz laplaciana, que es igual a la diferencia entre la matriz identidad y la de adyacencia, para calcular su espectro, es decir, el conjunto de autovalores; dicho tema es uno de los ejes centrales en Álgebra Lineal. En topología molecular sólo se utilizan el mínimo y el máximo autovalor (el máximo autovalor representa el número de ramificaciones o *branching* del compuesto químico). Este ejercicio se agregará en la guía de trabajos prácticos 2019; específicamente en el trabajo correspondiente a autovalores y autovectores.

■ Conclusiones y trabajos futuros

En esta etapa de la investigación se continúan estudiando las definiciones, propiedades y teoremas necesarios, sobre grafos, para dar en el curso de Álgebra Lineal y Geometría Analítica, teniendo en cuenta que no se altere significativamente el tiempo planificado para impartir dicho programa y que, a su vez permita, dar ejemplos de matrices que destaquen, entre otros aspectos, su funcionalidad como lenguaje compacto de amplia utilización en ciencias.

Asimismo, es interesante mostrar que la introducción de innovaciones que articulan conceptos de distintos espacios curriculares es enriquecedor tanto para los docentes como para los alumnos, quienes reciben de manera directa la actualización científica de sus profesores, quienes, en este camino de investigación, no perderían de vista los conceptos que se van desarrollando en ciencia.

La incorporación en la guía de trabajos prácticos del ejemplo mencionado ha sido bien recibido por los docentes, a quienes se les preguntó previamente si deseaban incorporarlo a la mencionada guía; según transmitieron, también impactó positivamente en los estudiantes; por lo tanto, el siguiente paso será la obtención del espectro de las matrices asociadas a grafos moleculares.

La articulación consciente entre distintos espacios disciplinares favorece la capacitación y la actualización de docentes y, en consecuencia, la calidad de los aprendizajes de los estudiantes.

Según Amigo Amigó *et al*, (2007), las características singulares de la topología molecular pueden resumirse de la siguiente manera: es una vía puramente matemática de describir la estructura molecular y un método muy eficaz para descubrir nuevas moléculas activas barriendo bases de datos, dado que todo el proceso es fácilmente computarizable.

■ Referencias bibliográficas

- Amigó, J., Falcó, A., Gálvez, J. y Villar, V. (2007) *Topología Molecular*. Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. n° 39 (2007), pp. 135-149.
- Artigue, M. (1995) Ingeniería Didáctica. En P. Gómez (ed.). *Ingeniería Didáctica en Educación matemática. Un esquema para la investigación y la innovación en la enseñanza y el aprendizaje de las matemáticas*. Grupo Editorial Iberoamericano. México.
- Bollobas, B. (1998) *Modern Graph Theory*. Springer Verlag. New York.
- Chevallard, I. (1991) *La Transposición Didáctica. Del saber sabio al saber enseñado*. Aique Grupo Editor S. A. Buenos Aires. Argentina.
- Contreras de la Fuente, A. (2002) *¿Se aprende por medio de los cambios entre sistemas de representación semiótica?* XVIII JORNADAS DEL SI- IDM, Castellón.
- Dubinsky, E. (1991). The Constructive Aspects of Reflective Abstraction in Advanced Mathematics, en L. P. Steffe (ed.), *Epistemological Foundation of Mathematical Experience*. Nueva York: Springer-Verlag.
- Duval, R. (2002). *Semiosis y pensamiento humano. Registros semióticos y aprendizajes intelectuales*. Universidad del Valle. Instituto de Educación y Pedagogía, Grupo de Educación Matemática. Peter Lang S. A. Editions scientifiques européennes, 1995. (1991).
- Grossman, S. (1992). *Álgebra Lineal con Aplicaciones*. McGraw W-Hill Interamericana de México. México.
- Kolman, B., Hill, D. (2006). *Álgebra Lineal*. Pearson Educación. México.
- Larson, R., Falvo, D. (2010). *Fundamentos de Álgebra Lineal*. Cengage Learning. México.
- Narvaez, A., Berman, C., Rodriguez, M. (2011). *¿Problemas con el límite o el límite de los problemas enseñados?* Publicado en: *Acta Latinoamericana de Matemática Educativa*. ALME 24. Volumen: 24 Año 2011. Editores: Patricia Lestón. Editorial: Comité Latinoamericano de Matemática Educativa A.C. Páginas: 585 a 595. Guatemala. Universidad Galileo. ISBN: 978-607-95306-4-8.
- Rozas, I. (2011) *Web*. <http://www.imus.us.es/ACT/RSME-RSEQ-2011/php/rozas.pdf>
- Sierpinka, A. (1985). La notion d'obstacle épistémologique dans l'enseignement des mathématiques. *Actes de la 37e Rencontre CIEAEM*, 73-95. Leiden.
- Villar, V., Falcó, A., Casanova, C., Moreno, M., Antón, G., García, R. (2015) *La topología molecular en el descubrimiento de nuevas terapias*. <http://elfarmacologico.es/index.php/la-revista/secciones-de-la-revista-elfarmacologico/item/6622-la-topologia-molecular-en-el-descubrimiento-de-nuevas-terapias#.W1oZc7ivHIW>