



Diseño y viabilidad de recursos para enseñar la modelización QSAR en ingeniería química

Design and Viability of Resources for Teaching QSAR Modeling in Chemical Engineering

Nahúm Galindo Vargas

Laboratorio de Biomacromoléculas, Instituto Politécnico Nacional, Santa Cruz Xoxocotlán, Oaxaca, México.
nahum.galindo@gmail.com

Avenilde Romo Vázquez

Departamento de Matemática Educativa, Cinvestav, México.
avenilde.romo@cinvestav.mx

Joaquín Barroso Flores

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México.
jbarroso@unam.mx

RESUMEN • La modelización de relaciones cuantitativas estructura-actividad (Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR) es relevante en la ingeniería química, pero aún no figura en la formación. Con el objetivo de diseñar recursos para integrarla, se realizó una investigación enmarcada en la teoría antropológica de lo didáctico y en la metodología de la ingeniería didáctica. Se generó una transposición didáctica de la modelización QSAR. Se analizaron dos currículos universitarios y las rutas didácticas sobre QSAR –clasificación didáctica de saberes por tópico y nivel de complejidad para su estudio–. Con base en ello, se diseñaron dispositivos didácticos: recorridos de estudio e investigación (REI-QSAR) y se mostró su viabilidad para integrarlos en cursos de ingeniería química, por lo que constituye una vía didáctica innovadora para que los futuros ingenieros construyan e interpreten modelos.

PALABRAS CLAVE: Formación de ingenieros químicos; Modelización matemática; QSAR; Recurso didáctico; Teoría antropológica de lo didáctico.

ABSTRACT • The Modeling Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) is relevant to chemical engineering but it is still not part of the training curricula. With the aim to integrate it, an investigation has been developed using elements of the anthropological theory of the didactic and didactic engineering. The didactic transposition on QSAR modeling has been performed. Two university curricula and the didactic routes on QSAR –didactic classification of knowledge by topic and level of complexity for its study– have been analyzed. Based on this, didactical devices were designed: Study and Research Paths (SRP-QSAR). Its viability of implementation in Chemical Engineering courses was evidenced, constituting an innovative didactic way to allow future engineers to build and interpret models.

KEYWORDS: Chemical engineers training; Mathematical modelling; QSAR; Didactic device; Anthropological theory of the didactic.

Recepción: febrero 2022 • Aceptación: marzo 2023 • Publicación: junio 2023

INTRODUCCIÓN

La modelización matemática ha desempeñado una función primordial en el desarrollo de la ciencia, de la tecnología y de las ingenierías (Pollak, 2007). Esto ha motivado la elaboración de propuestas didácticas para su enseñanza en todos los niveles educativos. Sin embargo, tanto el estudio internacional ICMI 14, dedicado a la modelización y a sus aplicaciones matemáticas y conducido por la Comisión Internacional de la Enseñanza de las Matemáticas (ICMI, por sus siglas en inglés), como el decimotercer congreso ICTMA (International Conferences on the Teaching of Mathematical Modelling and Applications), enfocado en las competencias de modelización matemática en los estudiantes, coinciden en que las actividades de modelización constituyen casos aislados en la enseñanza regular (Blum et al., 2007; Lesh et al., 2010). De hecho, la integración de ejemplos de modelización del mundo real en la educación básica (Lesh et al., 2010) y del mundo laboral y científico en la formación universitaria ha sido señalada como una demanda urgente (Frejd y Bergsten, 2016; Romo y Artigue, 2023).

Y aunque la modelización aparece en la mayoría de los temarios de matemáticas para ciencias, suele relegarse al final del proceso educativo (Barquero y Bosch, 2015) bajo una visión aplicacionista (Barquero et al., 2014). En la formación de futuros ingenieros suele enfocarse en el desarrollo de habilidades por competencias, sin definir claramente las competencias para la modelización (Elizalde y Rosas, 2016). Por ejemplo, el Tecnológico Nacional de México incluye el estudio de los modelos a nivel de conceptos, leyes, principios, postulados y teoremas (Dirección General de Educación Superior Tecnológica, 2012), mientras que la modelización está asociada «implícitamente» a los contenidos procedimentales.

Más específicamente, en la educación química universitaria existe escasa implementación de actividades para analizar, desarrollar y evaluar modelos y, aunque más recientemente se han generado propuestas innovadoras (por ejemplo, Amer et al., 2022), siguen predominando las actividades que recurren a una sobresimplificación de los modelos (Erduran y Duschl, 2004) y que no favorecen la comprensión de las representaciones macro, micro y simbólica, ni tampoco las relaciones entre ellas (Gilbert y Treagust, 2009). La representación macro se refiere a las propiedades, cualidades observables o medibles de un sistema, mientras que la representación micro se refiere a su estructura (composición, geometría y conectividad) (Talanquer, 2018). La representación simbólica, por su parte, incluye los símbolos utilizados para representar los átomos o grupos de ellos y diversas propiedades. Las relaciones estructura-propiedad, que unen las representaciones macro y micro, incluyen el comportamiento biológico, el toxicológico, el fisicoquímico, ya que estas también son propiedades de las sustancias químicas (Roy et al., 2015). En particular, las relaciones estructura-propiedad de biomoléculas resultan clave en la ingeniería química, y es por ello por lo que deberían incluirse en el currículo de formación del ingeniero químico (Favre et al., 2008), aunque algunas investigaciones alertan sobre su complejidad (Cooper et al., 2013; Talanquer, 2018).

Todo lo anterior ilustra la necesidad de generar propuestas didácticas de modelización matemática para la formación del ingeniero químico, que integren ejemplos del mundo científico o laboral contemporáneo y las representaciones macro, micro y simbólica y sus relaciones; es decir, las relaciones estructura-actividad entre las moléculas. Para atender dicha necesidad, se exploró un contexto de investigación en ingeniería química y se identificó una actividad de modelización matemática relevante en la investigación *in silico*¹ para la predicción de propiedades o actividad biológica: la metodología QSAR. Dos preguntas de investigación emergieron: ¿La metodología QSAR puede ser transpuesta a la formación de futuros ingenieros químicos mediante un dispositivo didáctico de modelización matemática? ¿Qué características debe tener dicho dispositivo didáctico para permitir a un profesor

1. Simulación realizada en ambientes informáticos en lugar de realizarla *in vivo* o *in vitro*.

universitario, no experto en QSAR, adaptarlo a las condiciones de su enseñanza? Para abordarlas, se consideraron elementos de la teoría antropológica de lo didáctico (TAD) y la metodología de la ingeniería didáctica. El análisis praxeológico de la modelización QSAR, de planes de estudio universitarios y de las normas didácticas de las instituciones de investigación donde se utiliza la modelización QSAR permitieron operar una transposición didáctica y generar un espectro de propuestas didácticas específicas que requieren ser probadas experimentalmente.

MARCO TEÓRICO

Elementos de la TAD

La TAD ofrece un modelo epistemológico para el análisis de la actividad humana en su dimensión institucional (Chevallard, 1999, 2019). Las instituciones son organizaciones sociales estables (por ejemplo, la escuela, el club deportivo) que enmarcan actividades y las hacen posibles gracias a los recursos que ponen a disposición de sus sujetos; dependiendo de su relación con el conocimiento, pueden ser clasificadas en tres categorías: de producción, de enseñanza y usuarias. Las instituciones de producción o académicas producen saberes (como las matemáticas o la química). Las instituciones de enseñanza son las responsables de transmitir los saberes (mediante cursos de matemáticas, de química, etc.) y las instituciones usuarias son aquellas donde los saberes se utilizan (por ejemplo, en laboratorios, en fábricas, etc.).

La modelización matemática está estrechamente relacionada con la actividad matemática, concebida como una actividad humana que consiste en producir, transformar, interpretar y desarrollar modelos matemáticos (Barquero et al., 2019) en diversas instituciones, y que puede ser analizada mediante un modelo único: la praxeología. Sus cuatro componentes son tipo de tarea T (lo que se hace), técnica τ (la forma en que se hace), tecnología θ (discursos que justifican, explican y validan las técnicas) y teoría Θ (discursos más generales que justifican, explican y validan las tecnologías).

Las praxeologías pueden circular de una institución a otra, sufriendo, en efecto, procesos transpositivos. Cuando una praxeología producida en una institución es importada a otra, esta puede contener elementos de ambas instituciones, por lo que se vuelve mixta (Vázquez et al., 2016). Por ejemplo, la ingeniería química ha importado praxeologías de modelización matemática y las ha adaptado para resolver tareas de dicha ingeniería, como modelar una relación de estructura-actividad. Lo que puede representarse de la siguiente manera: $[T^{iq}, \tau^{miq}, \theta^{miq}, \Theta^{miq}] \leftarrow IQ$, donde la m simboliza los elementos matemáticos, iq los elementos de la ingeniería química e IQ la institución de la ingeniería química, en la cual la praxeología ha sido desarrollada y validada.

Gascón y Nicolás (2022, p. 16) ilustran las instituciones y fases de la transposición didáctica, proceso que transforma los conocimientos académicos en escolares (figura 1, traducción propia y similar a la presentada en Gascón y Nicolás, 2022):



Fig. 1. Instituciones y fases que participan en la transposición didáctica.

De acuerdo con Bosch et al. (2021, p. 142), «el proceso de selección, adaptación, organización y declaración de los saberes que se van a enseñar, empezando por el saber académico y terminando con los materiales didácticos propuestos para determinado curso es denominado transposición didáctica externa (TDE)». La TDE puede estar a cargo del profesor universitario, cuando este es sujeto de las instituciones académicas, de la noósfera² y del aula, lo que limita ciertas transposiciones y lleva a cuestionarse: ¿qué análisis praxeológicos permiten transponer una praxeología mixta que se ha identificado como relevante en una institución de ingeniería para ser enseñada?, y ¿qué rol puede jugar en dicha transposición un profesor universitario que no pertenece a las instituciones de investigación, pero sí a la noósfera –por ejemplo, academias que configuran los planes de estudio– y al aula?

Realizar una transposición didáctica de la institución de ingeniería al aula requiere considerar una unidad de análisis, que, de acuerdo con Barquero et al. (2019), incluye un análisis praxeológico de las matemáticas enseñadas en las carreras de ingenieros químicos y la reconstrucción de estructuras praxeológicas que, de acuerdo con esta teoría, podrían existir para que la modelización matemática del QSAR pueda ser integrada, lo que requiere a su vez elucidar la praxeología QSAR, los tipos de tareas que permite resolver, la técnica que constituye el proceso de modelización matemática y el logos asociado, que incorpora elementos matemáticos y de ingeniería. Es decir, un modelo epistemológico de modelización matemática en ingeniería reflejado a través de la praxeología mixta QSAR.

Los recorridos de estudio e investigación (REI)

Los REI constituyen dispositivos didácticos que permiten la integración de la modelización matemática en el aula, con un enfoque de indagación (Barquero et al., 2011). El sistema didáctico asociado está formado por el conjunto de estudiantes X , el conjunto de los guías o profesores Y , y una cuestión, cuyo estudio suele iniciarse por cuestiones derivadas Q_p , lo que permite identificar respuestas existentes R° en obras O (artículos de investigación, páginas web, consulta a expertos, etc.) y de nuevas cuestiones. Todos estos elementos y las relaciones entre ellos constituyen el medio didáctico que permite elaborar una respuesta R^\blacktriangledown , no final, pero «significativa» en relación con cierta institución I . Lo que se representa mediante el esquema herbartiano:

$$\left[S(X;Y;Q) \rightarrow \{R_1^\circ, R_2^\circ, R_3^\circ, \dots, R_n^\circ, Q_{n+1}, \dots, Q_m, O_{m+1}, \dots, O_p\} \right] \rightarrow R^\blacktriangledown$$

Los REI son abiertos cuando se desconoce completamente la forma en que Q puede ser estudiada y finalizados cuando se conoce *a priori* al menos una forma de responder Q . Su análisis se hace mediante dialécticas que evidencian el proceso de estudio de la cuestión Q . Estas dialécticas son, por ejemplo, la de las cuestiones y respuestas y la de los *media*-medios. La primera consiste en identificar las subcuestiones derivadas de Q y las respuestas R° encontradas que permiten producir R^\blacktriangledown . La segunda consiste en el saber construido al que se considera como producto de una conjetura y que, como tal, debe ponerse a prueba (Costa et al., 2015). Los *media* (del francés *médias*) se refiere a los medios de comunicación masiva: un programa de televisión, un libro o la clase de un profesor. Los medios son recursos o instrumentos desprovistos de intención didáctica (Chevallard, 2004), tomados de los medias, que posibilitan la elaboración de respuestas provisionales hasta construir la respuesta R^\blacktriangledown .

2. Instancia en la que se decide qué enseñar y se crean, por ejemplo, los planes de estudio, y puede estar conformada por profesores universitarios (como academias o departamentos universitarios), pero también por creadores de modelos educativos, educadores y pedagogos, entre otros.

METODOLOGÍA

La metodología de investigación se basa en la ingeniería didáctica, que ofrece una ruta sólida para el diseño e implementación de situaciones didácticas en el aula (Artigue, 2015), y que ha sido adaptada para el diseño de los REI (Barquero y Bosch; 2015; García et al., 2019). Sus cuatro fases son las siguientes: 1) análisis preliminares, 2) diseño del REI y análisis *a priori*, 3) experimentación y análisis *in vivo* y 4) análisis *a posteriori*. En esta investigación se consideraron únicamente las dos primeras fases, debido a que se enfocó en producir un proceso de transposición didáctica externa, para generar el marco para el diseño de los REI y asegurar su validez interna.

Análisis preliminares

De acuerdo con Artigue (2015), esta fase suele enfocarse en los antecedentes que permiten establecer el diseño didáctico, mediante la realización de análisis epistemológicos, institucionales y didácticos de los conocimientos que quieren ser enseñados. Así, en esta fase se analiza el lugar dado a la modelización matemática en la enseñanza universitaria y se ha identificado que los modelos suelen ser enseñados con poca o nula relación con la actividad de modelización matemática en ingeniería, y sin conexión con asignaturas posteriores de dicha especialidad, tanto en las carreras de naturales y de sociales (Barquero y Bosch, 2015) como en las carreras de ingeniería (Bartolomé et al., 2018; Florensa et al., 2018). Para modificar este rol dado a la modelización matemática, Vázquez et al. (2016) y Siero et al. (2022) proponen analizar praxeologías de modelización matemática desarrolladas en instituciones de ingeniería, académicas, escolares y usuarias, es decir, dar cuenta de su epistemología y realizar una transposición didáctica externa sobre ellas para que puedan ser enseñadas en los cursos universitarios, siguiendo tres criterios: que los modelos matemáticos utilizados en estas praxeologías pueden relacionarse con los del plan de estudios (por ejemplo, modelos matriciales, estadísticos, ecuaciones diferenciales); que su desarrollo no requiere conocimientos muy especializados de ingeniería ni una gran experiencia en la resolución de este tipo de tareas ni de maquinaria; y que su abordaje mediante programas de simulación es posible. Con base en lo anterior, en esta investigación los análisis epistemológico, institucional y didáctico se desarrollaron en cuatro pasos:

- a) Análisis de la praxeología mixta QSAR.
- b) Identificación de una cuestión generatriz en IQ.
- c) Análisis de instituciones formadoras de ingenieros químicos.
- d) Análisis didáctico desde las instituciones usuarias.

Así, en el paso *a*) se eligió estudiar la investigación química, analizando la modelización QSAR a partir de varias praxeologías mixtas y generando preguntas generatrices. Este análisis fue realizado junto con un experto en QSAR y un profesor de química e investigador en matemática educativa (ambos autores de este artículo), para identificar una cuestión generatriz, indicada en el paso *b*). Asimismo, en el paso *c*) se analizaron los planes de estudio de ingeniería química del Tecnológico Nacional de México (TecNM) y de la Universidad Juárez del Estado de Durango, Campus Gómez Palacio (UJED), para conocer la viabilidad de integrar en ellos dispositivos didácticos de modelización matemática basados en QSAR. Finalmente, en el paso *d*) se analizaron las rutas didácticas dictadas en la modelización QSAR generadas en la ingeniería química, que corresponden a propuestas para dar a conocer la modelización QSAR a estudiantes universitarios y de posgrado de ingeniería química.

Marco para el diseño de los REI y análisis *a priori*

Esta fase suele dedicarse al diseño y análisis *a priori* del REI. Sin embargo, en este caso se propone un marco para el diseño de diferentes REI-QSAR. Esto se debe a la naturaleza de la praxeología mixta QSAR que lo sustenta y que es analizada en la fase anterior. Así, se posibilitan diferentes organizaciones didácticas para el aula, que tomarán una forma específica dependiendo de la cuestión generatriz transpuesta considerada. Para ilustrarlo, se realiza el análisis *a priori* de la cuestión generatriz general, mostrando posibles cuestiones derivadas, *media* y medios que posibilitarían su estudio, así como las responsabilidades propuestas para los estudiantes y el profesor. Se precisa que un REI-QSAR abierto difícilmente puede tener lugar en las instituciones analizadas, debido a sus condiciones de enseñanza, cercanas al paradigma de la visita de las obras (Chevallard, 2015).

RESULTADOS

El análisis de la investigación química permitió identificar la modelización QSAR, fundamental en la investigación para la predicción de propiedades o de actividad biológica y cuyo estudio en el aula permitiría relacionar la formación con la investigación, implementar actividades de modelización y posibilitar el estudio de las relaciones estructura-actividad. La amplitud y complejidad de la metodología QSAR permite diversos abordajes didácticos basados en un mismo referente epistemológico de la ingeniería, explicitado, sucintamente en esta comunicación mediante la praxeología mixta QSAR y extensamente en Galindo (2019), la estructura de una cuestión generatriz amplia que permite construir dicha praxeología para diferentes propiedades y grupos de sustancias químicas. Para el análisis de las condiciones y restricciones que permiten la viabilidad institucional del estudio de la cuestión generatriz en la formación de ingenieros químicos se analizaron dos planes de estudios de instituciones mexicanas. Para el diseño del REI-QSAR se analizaron las propuestas de clasificación didáctica generadas en la investigación química para difundir la praxeología mixta QSAR entre investigadores, expertos y noveles, y estudiantes de doctorado en ingeniería química. Con base en ello, se generó un marco general del REI-QSAR, que posibilita producir varias cuestiones generatrices transpuestas y, a su vez, REI-QSAR enfocados en las necesidades de formación y en las condiciones específicas de cada institución educativa y de cada grupo de estudiantes, por lo que el diseño final está a cargo del profesor universitario. Finalmente, se genera un análisis *a priori* de este REI-QSAR en el que se detallan nueve apartados que permiten su implementación en el aula y constituyen una herramienta para el profesor universitario, que no necesariamente es experto en QSAR, interesado en integrar esta actividad de modelización en su aula (sección 4.6).

Análisis de la praxeología mixta QSAR

Se eligió la investigación química y se analizó la praxeología mixta de modelización QSAR, que consiste en la aplicación de métodos matemáticos y estadísticos para el desarrollo de modelos de predicción de actividad biológica o de propiedades de compuestos (Golbraikh et al., 2012). Estos modelos tienen la forma: $Actividad\ biológica = f(atributos\ químicos)$, donde los atributos químicos son conocidos como descriptores moleculares (Roy et al., 2015), que pueden ser calculados o determinados experimentalmente. Los modelos QSAR, dependiendo de la variable de respuesta, pueden ser continuos, categóricos o de clasificación (Golbraikh et al., 2012) y los compuestos involucrados pueden ser o no cogenéricos. En la tabla 1 se muestra la praxeología mixta QSAR, cuya tarea de modelización procede de la ingeniería química y cuya técnica de modelización incluye tres grandes pasos: la preparación de los datos, el desarrollo y la validación del modelo. Su logos comprende varios elementos matemáticos y de ingeniería química.

Tabla 1.
Praxeología mixta QSAR

| |
|--|
| Tipo de tarea T^q |
| Obtener un modelo de predicción de una propiedad/actividad/toxicidad en función de la estructura química |
| Técnica de modelización τ^{miq} |
| <p>a) Preparación de datos: búsqueda o compilación del conjunto de datos (propiedad/actividad del grupo de sustancias), cálculo de descriptores, selección de métodos de análisis de datos supervisado o no supervisado.</p> <p>b) Desarrollo del modelo: construcción del modelo mediante el conjunto de datos de entrenamiento, validación del modelo utilizando los conjuntos de prueba, selección de modelos con estadística aceptable y detección de sobreajuste del modelo.</p> <p>c) Validación del modelo: predicción sobre el conjunto de datos de evaluación externa.</p> |
| Tecnologías θ^m y θ^q |
| Grupos funcionales, isomería, confórmers, enlaces, estructura molecular, propiedad, actividad, toxicidad, índices topológicos, expresiones algebraicas, modelos matemáticos del álgebra matricial, regresión lineal simple o multivariada, análisis de componente principal, mínimos cuadrados parciales, máquinas de vectores de soporte, vecino k -ésimo, redes neuronales, métodos de análisis supervisados y no supervisados, elementos de <i>software</i> estadístico y matemático, expresiones algebraicas, criterios de validación (coeficiente de correlación, coeficiente de determinación, validación cruzada, pendientes de líneas de regresión, etc.), γ -aleatorización, expresiones algebraicas, error estándar y absoluto, desviación estándar, etc. |
| Teorías θ^m y θ^q |
| Álgebra, álgebra lineal, estadística, química orgánica, fisicoquímica, elementos que fundamentan el <i>software</i> estadístico y matemático, y topología, entre otras. |

Identificación de una cuestión generatriz en IQ

Se identificó que el tipo de tarea T^q de la praxeología mixta QSAR tiene su origen en una cuestión generatriz general Q_j : «¿Cuál es el modelo validado más adecuado para predecir la [*propiedad*] del [*grupo de sustancias*] a partir de su estructura?». Esta cuestión puede adaptarse a distintas propiedades/actividades y a diferentes grupos de sustancias (figura 2). El amplio espectro de propiedades que predecir mediante la praxeología mixta QSAR permite su transposición a diversas áreas de formación del ingeniero químico, por ejemplo, la contaminación ambiental, la fisicoquímica, la farmacéutica, los alimentos, etc.



Fig. 2. Cuestión generatriz general para la tarea T^q .

Con el objetivo de determinar si esta cuestión puede ser extrapolada a la enseñanza, se analizaron dos planes de estudio de ingeniería química de instituciones mexicanas.

Análisis de instituciones formadoras de ingenieros químicos

Se analizaron las retículas del plan de estudios de las carreras de ingeniería química del Tecnológico Nacional de México (TecNM) y de la Universidad Juárez del Estado de Durango (UJED).

La mayoría de las carreras de ingeniería tienen dos áreas formativas: la básica y la de especialidad (Macias y Romo, 2014). Las asignaturas del área básica proporcionan herramientas para la especialidad y la práctica profesional, motivo por el cual anteceden a las asignaturas de especialidad. La tabla 2 muestra las asignaturas del área básica del currículo del TecNM y UJED para el programa de ingeniería química (Tecnológico Nacional de México, 2016) e ingeniero químico con especialidad en alimentos (Universidad Juárez del Estado de Durango, 2023), agrupadas en seis áreas: Química, Matemática, Estadística, Físicoquímica, Computación y Otros (asignaturas cursadas en el semestre, pero con incidencia mínima para el desarrollo del REI).

Tabla 2.

Asignaturas, agrupadas por área, del TecNM y UJED, susceptibles de incidir en el estudio de Q_1 .
 C: computación, E: estadística, F: fisicoquímica, M: matemáticas, Q: química, O: otros

| <i>TecNM</i> | <i>UJED</i> |
|--|---|
| Primer semestre | |
| Q: Química inorgánica C: Programación O: Taller de ética, Fundamentos de Investigación, Cálculo diferencial, Dibujo asistido por computadora | M: Matemáticas I C: Computación Q: Química inorgánica I, Química orgánica I O: Física I, Metodología de la investigación, Lectura y redacción |
| Segundo semestre | |
| M: Álgebra lineal Q: Química orgánica I, Química analítica O: Mecánica clásica, Cálculo integral, Salud y seguridad en el trabajo | Q: Química inorgánica II, Química orgánica II O: Matemáticas II, Física II, Análisis y búsqueda de información, Habilidades del pensamiento, Educación ambiental |

| <i>TecNM</i> | <i>UJED</i> |
|--|---|
| Tercer semestre | |
| E: Análisis de datos experimentales F: Termodinámica Q: Química Orgánica II O: Gestión de la calidad, electricidad, magnetismo y óptica | M: Modelación matemática en ciencias químico-biológicas y de ingeniería E: Análisis estadístico de datos Q: Química analítica I F: Físicoquímica I O: Introducción a los procesos bioquímicos, Recursos Humanos, Liderazgo, Revisión de literatura para investigación |
| Cuarto semestre | |
| Q: Análisis instrumental M: Métodos numéricos O: Ecuaciones diferenciales, Mecanismos de transferencia, Ingeniería ambiental, Balance de materia y energía | F: Físicoquímica II Q: Química Analítica II O: Muestreo y diseño de experimentos, Microbiología general, Bioquímica, Planteamiento del problema de investigación |
| Quinto semestre | |
| F: Físicoquímica I O: Desarrollo sustentable, Ingeniería de costos, Procesos de separación I, Balance de momento, calor y masa | Q: Análisis instrumental F: Termodinámica química O: Toxicología de alimentos, microbiología de alimentos, Ingeniería de procesos alimentarios I, Balance de materia y energía, Bioquímica de alimentos I, Diseño de anteproyecto de Investigación |

En el segundo año, los alumnos han cursado o cursarán las materias de Estadística (tercer semestre de ambos programas), Álgebra Lineal (primer semestre de ambos programas), Química inorgánica y Química orgánica (con una alta presencia en el primer año para ambas instituciones), Química analítica y Físicoquímica. Las asignaturas correspondientes al área química proporcionan a los alumnos conocimiento sobre las estructuras moleculares, sus manifestaciones macroscópicas (propiedades), la simbología necesaria para representarlos, los métodos de análisis gravimétricos, volumétricos e instrumentales.

En Álgebra lineal y en Matemáticas I (TecNM y UJED, respectivamente), los alumnos aprenden a realizar operaciones con matrices. Las asignaturas de Físicoquímica y Termodinámica proporcionan, en sus primeras unidades, el manejo de sistemas de medida relativos a propiedades de la materia. Análisis de datos experimentales (TecNM) y Análisis estadístico de datos (UJED) abordan el estudio de variables continuas y discretas, parámetros estadísticos, error y análisis estadístico en general. Programación (TecNM) y Computación (UJED) se enfocan en el manejo de equipo informático y *software*. La asignatura de Modelación (UJED) permite a los alumnos adquirir modelos para representar diversos fenómenos.

El estudio de análisis no supervisado de datos y las herramientas para realizarlo (como máquinas de vectores de soporte, vecino k -ésimo, redes neuronales, etc.) no tienen presencia en el currículo de ambas instituciones. El uso de descriptores en tres dimensiones (3D) no sería posible en estas instituciones, por los recursos tecnológicos necesarios para su cálculo. Por otro lado, la regresión lineal simple tiene presencia en el currículo, pero no es el caso de la regresión lineal multivariada, el análisis de componente principal o los mínimos cuadrados parciales. Su uso en el estudio de Q_i estaría supeditado a la comunidad de estudio.

Se observa que en los primeros dos años de formación se estudia la mayor parte de los conocimientos involucrados en el modelo QSAR. Por lo tanto, se considera que la cuestión Q_i podría ser estudiada, al menos parcialmente, en un grupo de segundo año de Ingeniería química, en tercer o cuarto semestre, lo que permitiría generar nuevos conocimientos y relacionarlos con los estudiados en diversos cursos. Más específicamente, la cuestión Q_i podría ser estudiada en las asignaturas de Química orgánica II o Análisis de datos experimentales del plan reticular de ingeniería química del TecNM y en las asignaturas de Análisis estadístico de datos o de Modelación matemática en ciencias químico-biológicas y en Ingeniería de la UJED. Es decir, se han identificado los cursos donde la modelización y las técnicas estadísticas de validación de modelos son importantes.

Análisis didáctico de la praxeología mixta QSAR en la investigación química

En el análisis didáctico para el diseño del REI se consultó el libro sobre QSAR titulado *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*, publicado por Todeschini y Consonni en 2009. Este libro está dirigido a expertos y profesionales de la investigación, estudiantes de doctorado y jóvenes investigadores que entran al campo de los descriptores o a áreas relacionadas (Todeschini y Consonni, 2009). Para posibilitar el estudio de la modelización QSAR, los autores proponen una clasificación de los saberes de acuerdo con su complejidad dentro de «rutas didácticas», es decir, categorías que incluyen conceptos pertenecientes a tópicos específicos, organizados en niveles de prioridad, y que restringen su enseñanza en universidades o posgrados. Los tópicos son los siguientes: descriptores moleculares, teoría de grafos e índices topológicos, QSAR clásico, diseño de fármacos, construcción del modelo, propiedades experimentales y avances recientes en estrategias QSAR. Los conceptos pertenecientes a cada tópico se clasifican, por su complejidad, en niveles (primero, segundo y superior).

En la tabla 3 se presentan los conceptos, por nivel y tópico, que pueden ser utilizados para el diseño de los REI, debido a que pueden ser abordados y no entran en conflicto con los currículos de las instituciones educativas. Estos pertenecen principalmente al primer y segundo nivel de comprensión de acuerdo con las rutas didácticas de Todeschini y Consonni. Los tópicos de niveles avanzados, destinados a los expertos en modelización QSAR, así como los datos categóricos o de clasificación, análisis de datos no supervisados, descriptores cuánticos, entre otros, no tienen cabida en la formación del ingeniero químico. Esto lleva a no considerarlos para el diseño de los REI, debido a su complejidad y a que posibilitan un estudio mucho más especializado de las relaciones estructura-actividad.

Tabla 3.
Conceptos, por nivel y tópico, utilizados para el diseño de los REI

| Descriptores moleculares |
|---|
| Primer nivel: descriptores moleculares, descriptores constitucionales, descriptores de conteo, grafos invariantes, descriptores vectoriales. Segundo nivel: grafo molecular. |
| Teoría de grafos e índices topológicos |
| Primer nivel: descriptores moleculares, grafos, grafo molecular, operadores algebraicos, matriz de adyacencia, matriz de distancia, grafos invariantes. Segundo nivel: matrices de moléculas, invariantes locales, grado de vértice, índices de conectividad, conteo de caminos, conteo de vías, índice de Wiener, índice de conectividad de distancia de Balaban. |
| QSAR clásico |
| Primer nivel: correlaciones estructura-respuesta. |

| |
|---|
| Construcción del modelo |
| Primer nivel: correlaciones estructura-respuesta, conjunto de datos, índices estadísticos, validación, selección de variable. Segundo nivel: parámetros de regresión, dominio de aplicabilidad, análisis por consenso. |
| Propiedades experimentales |
| Primer nivel: medidas experimentales, propiedades fisicoquímicas. |
| Avances recientes en estrategias QSAR |
| Primer nivel: técnicas de validación, dominio de aplicabilidad, análisis por consenso. |

Marco para el diseño del REI-QSAR

Una vez identificada y analizada la praxeología mixta QSAR, el diseño de los REI-QSAR debe realizarse considerando las restricciones de las instituciones de formación del ingeniero químico. En los currículos de formación están presentes métodos de análisis supervisados de datos, aquellos donde se cuenta con las variables dependiente e independiente (actividad/propiedad y descriptores), por lo que quedan fuera los métodos no supervisados. Algunas de estas restricciones son las siguientes: *a)* el uso de variables de respuesta continuas, no categóricas ni de clasificación, *b)* obtención de un modelo lineal, por regresión simple o multivariable, y *c)* modelización de compuestos del mismo grupo o grupos semejantes.

La metodología para el diseño de una cuestión generatriz Q_i transpuesta, que permitirá el desarrollo del REI en el aula, se compone de cuatro pasos que involucran el trabajo multidisciplinario de profesores:

- Seleccionar la actividad/propiedad considerando el área de formación del ingeniero químico.
- Elegir el grupo de sustancias, teniendo en cuenta la estructura de los compuestos y el área de formación. En este paso se deben definir los compuestos que los profesores utilizarán para evaluar el modelo.
- Formular la tarea T^{iq} con la actividad y grupo de sustancias elegidos.
- Contextualizar la tarea T^{iq} de acuerdo con las necesidades de formación de los estudiantes para obtener la cuestión Q_i transpuesta.

En la figura 3 se resumen estos pasos, ilustrando la gran cantidad de combinaciones posibles entre sustancias y actividad/propiedad que modelizar. Para contextualizar la tarea T^{iq} se sugiere tener en cuenta el carácter didáctico del REI y la consulta de casos reales publicados en revistas científicas.



Fig. 3. Diagrama de flujo para el diseño de un REI contextualizado en la formación del ingeniero químico

En la figura 4 se ejemplifica una cuestión Q_i transpuesta en el contexto del área de alimentos en ingeniería química, basada en el trabajo de Duarte et al. (2017) sobre ácidos grasos y cromatografía de gases. En este caso, de acuerdo con la información obtenida en los medios disponibles (bases de datos y revistas científicas), se pueden tomar las siguientes consideraciones didácticas: *a*) emplear ácidos grasos de origen vegetal o animal; *b*) relacionar, ya sea la estructura de los ácidos grasos o su respectivo metil éster, con el tiempo de retención; y *c*) seleccionar un conjunto de ácidos grasos al azar para una evaluación externa del modelo en la predicción del tiempo de retención.

Cuestión Q_i : ¿Cuál es el modelo validado más adecuado para predecir el tiempo de retención de metil ésteres de ácidos grasos (MEAG) en cromatografía de gases a partir de su estructura?

Planteamiento contextualizado: Una planta de extracción de aceite pretende manejar distintas fuentes naturales de ácidos grasos. Para separar y comercializar a gran escala estos aceites es necesario identificar los ácidos grasos contenidos en cada fuente. Duarte et al. (2017) mencionan que en la identificación y cuantificación de los ácidos grasos en alimentos se utilizan métodos estandarizados (ISO, IUPAC), basados en la preparación de metil ésteres de ácidos grasos (MEAG) por esterificación del ácido graso y la posterior separación mediante cromatografía de gases. La identificación del ácido graso se lleva a cabo por comparación de los tiempos de retención de los MEAG de la muestra con los MEAG de una mezcla estándar, preparada en el laboratorio u obtenida comercialmente. Un MEAG no puede identificarse si un pico cromatográfico de una muestra dada no corresponde con alguna señal de los MEAG de la mezcla estándar, ya que los MEAG en la muestra están limitados por los MEAG presentes en la mezcla estándar. En este caso es necesario realizar un análisis por prueba y error, o predecir de algún modo los tiempos de retención de los posibles MEAG.

Antes de invertir en la compra de estándares y realizar experimentos de prueba y error, la administración decide solicitar la participación de las universidades para predecir el tiempo de retención de los MEAG, mismos que permitirán la identificación de los ácidos grasos presentes en muestras de aceites de diversas fuentes. Se requiere que la respuesta esté validada estadísticamente, indicando error y precisión de la misma. La empresa evaluará la respuesta para comprobar su efectividad. Los tiempos de retención obtenidos en el cromatógrafo de la empresa, bajo las mismas condiciones experimentales, se presentan en la tabla del anexo.

Fig. 4. Ejemplo de una cuestión generatriz Q_i transpuesta en el contexto de alimentos.

Análisis *a priori* del REI-QSAR

El análisis *a priori* permite proponer una ruta de nueve apartados para implementar los REI-QSAR, originados en cuestiones generatrices transpuestas de Q_i , mediante la identificación de cuestiones derivadas, de los *media* y medios y de las actividades propuestas para el profesor y para los estudiantes. Estos nueve apartados se explican a continuación.

1. Aplicación del cuestionario diagnóstico sobre relaciones estructura-actividad. Con el fin de conocer la información que los estudiantes creen posible obtener a partir de la estructura de un compuesto, se sugiere al profesor aplicar un cuestionario semejante al Implicit Information from Lewis Structures Instrument (Cooper et al., 2012), empleando propiedades/actividades propias del área de formación del ingeniero y sustituyendo el término *estructura de Lewis* por *fórmula esquelética*. Esta última se emplea en las asignaturas de Química orgánica para representar la estructura de moléculas, y es semejante a los grafos empleados en la modelización QSAR.
2. Presentación de la cuestión generatriz Q_i transpuesta. Los profesores presentan la cuestión Q_i a los estudiantes, los cuales se organizarán en equipos para elaborar una respuesta R^\forall . En la

figura 5 se presenta un esquema de las preguntas derivadas de Q_i . Una primera pregunta puede hacer referencia a las estructuras de las sustancias involucradas, el contexto de la cuestión generatriz, la propiedad/actividad que hay que predecir o los modelos para su predicción.

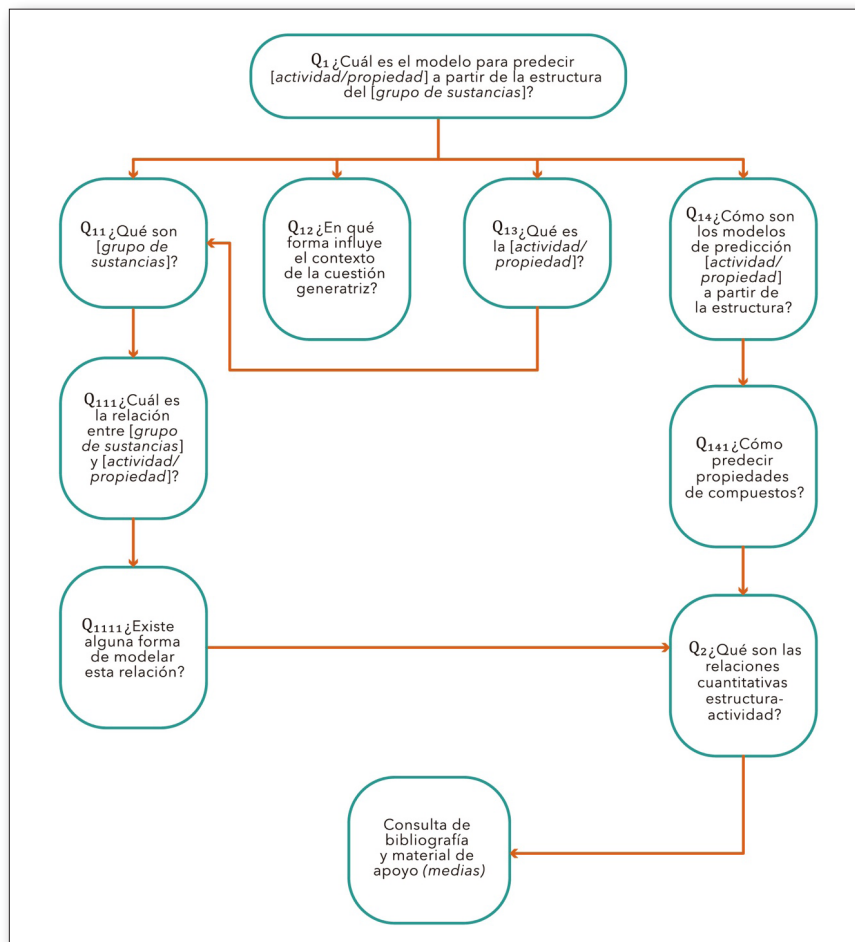


Fig. 5. Diagrama del posible REI a seguir por los estudiantes.

La cuestión Q_{11} sobre el grupo de sustancias involucradas generaría una búsqueda rápida de respuestas R^0 sobre sus fórmulas estructurales y el valor de las actividades reportadas para cada una. Con los datos tabulados surgiría la cuestión Q_{111} para tratar de visualizar la relación entre las estructuras y el valor de la actividad. El punto principal que deben notar los estudiantes es el aumento o disminución del valor de la actividad al incrementarse la longitud de cada compuesto, el número de insaturaciones, el número de átomos distintos al carbono, etc. Para tratar de responder a la cuestión Q_i , los alumnos podrían suponer la existencia de una forma de modelar esta relación (Q_{1111}).

Otra pregunta que los estudiantes pueden plantearse guarda relación con el contexto del REI (Q_{12}) o la actividad/propiedad (Q_{13}). Es de notar que Q_{12} conduce necesariamente a Q_{13} . Teniendo claro el contexto del REI, surgiría la cuestión Q_{111} , que aparecería al final de su análisis Q_i . Un camino más en el estudio de Q_i está representado por la cuestión Q_{14} : ¿Cómo son los modelos de predicción a partir de la estructura? En esta parte es posible que a partir de búsquedas en internet identifiquen la metodología de modelización QSAR.

3. Investigación de métodos de predicción de propiedades a partir de la estructura. En esta etapa, el profesor solicita a los estudiantes búsquedas, en distintos *media*-medios, de un problema semejante. Esto puede dejarles ver que están frente a un problema de predicción de propiedades (Q_{141}) o conducirlos directamente a la cuestión Q_2 . En el primer caso, se espera que también lleguen a la cuestión Q_2 . En una sesión, los estudiantes presentarían el resultado de sus investigaciones, y, de ser necesario, los profesores podrían sugerir la lectura de algún *media*, como el artículo de Raies y Bajic (2016). Estos *media* ofrecen un primer encuentro con los métodos de predicción de propiedades, identificándolos según se trate de un *endpoint* (variable dependiente del modelo) cualitativo o cuantitativo, de datos continuos o binarios o de la propiedad o actividad que modelar.

En esta sesión se puede plantear la manera en la que los profesores y los estudiantes trabajarán el REI y la forma de evaluación.

4. Análisis de la praxeología de modelización QSAR. El análisis de la praxeología QSAR requiere la lectura y análisis, por parte de los estudiantes, de documentos especializados, escritos principalmente en inglés. El papel de los profesores es importante para resolver las dudas de los estudiantes respecto a las distintas tecnologías θ estadísticas y matemáticas para la preparación de datos, el desarrollo y la validación del modelo. En este apartado se sugiere consultar los trabajos de Reinhard y Drefahl (1998), Roy et al. (2015), Golbraikh et al. (2012) y el documento *Guidance document on the validation of (quantitative) structure-activity relationships [(Q)SAR] models* (Organisation for Economic Cooperation and Development, 2007), que reúnen información relativa a los descriptores (variables independientes del modelo) y modelización QSAR. Estos *media* permitirán al alumno tener acceso a modelos existentes, analizar su deducción y su funcionamiento, las variables que hay que considerar en su construcción y las técnicas para validarlo, lo que es parte del trabajo de modelización matemática, como lo indica Pollak (2007):

Tienes que tomar algunos modelos que han sido creados y que se sabe son exitosos, y los estudiantes tienen que estudiar esos modelos, y comprender qué los hace funcionar, y pensar acerca de lo que decidió su creación, el modo en que fueron formulados y las razones de su éxito.

También, los estudiantes tienen que tomar la situación para sí mismos y comenzar a crear modelos de aquellas situaciones, tomar decisiones de lo que tienen que mantener y de lo que pueden permitirse ignorar y cómo van a probar si realmente tuvieron éxito. (Pollak, 2007, p. 114, traducción propia).

5. Preparación de datos, elección del *software*. Para la preparación de datos de los compuestos involucrados en la cuestión Q_1 , los estudiantes tomarán decisiones respecto a cuestiones que conducirán al cálculo y selección de descriptores, al número de compuestos del conjunto de modelización y de validación externa, así como a la elección del método de análisis de datos supervisado (figura 6).

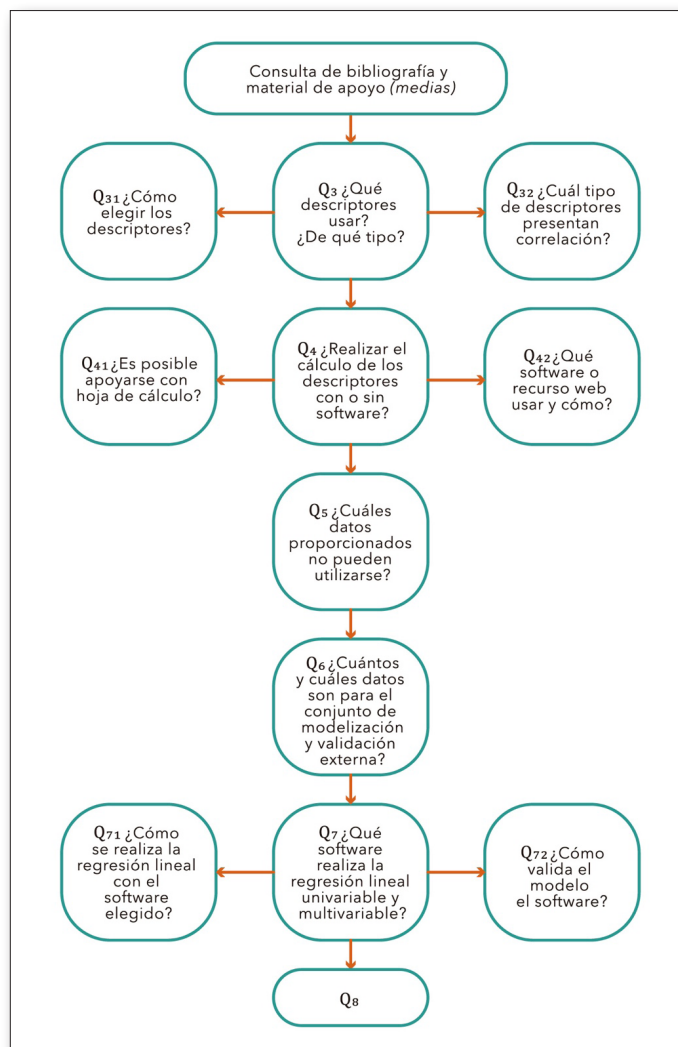


Fig. 6. Posibles cuestiones sobre preparación de datos.

Los estudiantes seleccionarán descriptores adecuados e identificarán la forma de calcularlos (Q_3). Algunas bases de datos químicos en línea tendrán la función de *media* al proporcionar información sobre estructuras en dos dimensiones (2D), notación SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System), propiedades físicas y químicas, e identificadores del compuesto, entre otros datos. Es posible que aparezcan cuestiones relativas a la forma de seleccionar los descriptores (Q_{31}) o a la correlación entre estos (Q_{32}). Entre los *media* revisados en el apartado anterior se encontraron recursos web para el cálculo de descriptores. Cada equipo decidirá qué medios utilizar, ya sean recursos web o *software* (Q_4 , Q_{41} , Q_{42}), para computar los descriptores. Existe la posibilidad de no localizar todos los compuestos en las bases de datos (Q_5), lo cual modificará el tamaño de los conjuntos de modelización y de validación externa (Q_6). Para la regresión lineal (Q_7) es necesario investigar sobre el *software* disponible, su manejo (Q_{71}) y la forma de interpretar los resultados (Q_{72}). Los profesores guiarán a los estudiantes en temas específicos, considerando las restricciones impuestas por la institución educativa.

6. Obtención del modelo. En esta etapa los alumnos dividirán los datos en conjunto de entrenamiento y conjunto de validación interna (figura 7). De nuevo, aparecerá la pregunta sobre el número de datos para cada conjunto (Q_8).

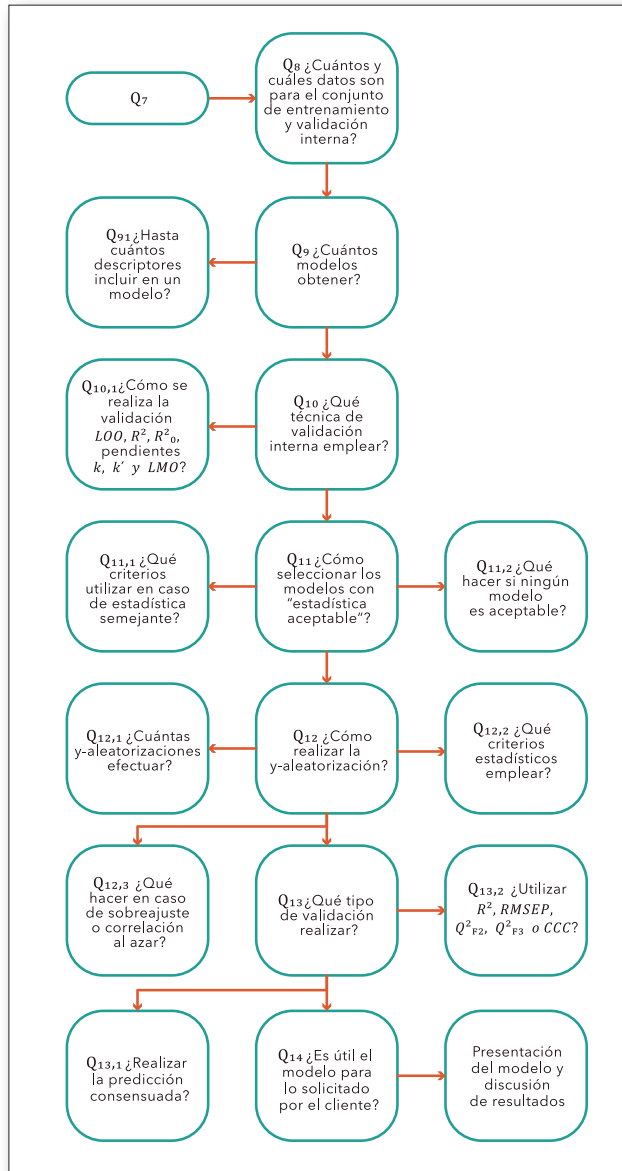


Fig. 7. Diagrama del REI sobre obtención y validación del modelo.

Posteriormente, se iniciará la modelización mediante las variables independientes (descriptores) y la variable dependiente (propiedad/actividad) con ayuda del *software* elegido. Otra cuestión a la que se enfrentarán los alumnos es la cantidad de modelos que obtener (Q_9). Es posible que se produzcan modelos de uno, dos, tres o más variables independientes (descriptores) ($Q_{9.1}$). El tipo de validación interna de los modelos (Q_{10} , $Q_{10.1}$) llevará a los estudiantes a elegir entre los distintos métodos disponibles. La elección de modelos con estadística aceptable generará

distintos tipos de preguntas, tales como a qué se refiere la estadística aceptable (Q_{11}), qué criterios utilizar en modelos con estadística semejante ($Q_{11,1}$) o qué hacer si ninguno cumple con esta característica ($Q_{11,2}$). Los profesores facilitarán el estudio de los métodos de validación y elección de modelos, considerando las restricciones curriculares y de la institución. Un ejemplo de restricción curricular es la ausencia de la y -aleatorización, útil para detectar sobreajuste o correlación al azar, pero cuyo estudio puede ser abordado por los estudiantes y profesores.

7. Validación del modelo. En esta etapa los alumnos realizarán la validación externa del modelo con el conjunto de datos seleccionados para tal fin. Los profesores guiarán a los estudiantes en la elección del tipo de validación que ellos consideren pertinente, teniendo en cuenta las restricciones de la institución y aquellas que puedan ser implementadas para su estudio.
8. Presentación y discusión de resultados. En una sesión en común, los equipos de estudiantes presentan los modelos obtenidos. Hestenes (2010) recomienda una «sesión de pizarrón», donde cada equipo presenta y compara su modelo en un pizarrón pequeño, centrando la clase en la comprensión de la representación simbólica visible del modelo. Los profesores alentarán la comparación del grado de predicción de los modelos con los compuestos seleccionados durante el diseño de la cuestión Q_7 , solicitarán la exposición de los criterios utilizados por cada equipo de estudiantes durante el desarrollo del modelo y la discusión de las ventajas de la modelización QSAR como herramienta previa a la experimentación (disminución de costos y tiempo por compra de reactivos, trabajo en el laboratorio, generación de desechos, etc.).
9. Aplicación del cuestionario final sobre relaciones estructura-actividad. Para tener una evaluación del efecto del REI-QSAR en los alumnos, se recomienda aplicar un cuestionario semejante al del apartado 1, pero sustituyendo el término *fórmula esquelética* por el de *grafo*. La comparación entre ambos cuestionarios permitirá a los profesores obtener el grado de avance en la comprensión de las relaciones estructura-actividad.

CONCLUSIÓN

Formar a los futuros ingenieros, para enfrentar los desafíos contemporáneos de la práctica profesional, implica innovar los currículos. Esta tarea resulta muy compleja debido a la conformación de las universidades, pero es posible iniciarla a partir de transposiciones didácticas externas específicas, basadas en la integración de ejemplos del mundo científico y laboral, a los cursos, incluso si los profesores no son expertos en el manejo de dichos ejemplos. Efectuar dichas transposiciones desde una perspectiva institucional, como la TAD, y utilizando la ingeniería didáctica como metodología de diseño de propuestas didácticas, implica el desarrollo de análisis epistemológicos y didácticos de instituciones académicas, escolares e industriales o usuarias (Romo y Artigue, 2023). Así, y para responder a la primera pregunta de investigación referida a la posibilidad de generar una transposición didáctica sobre la praxeología mixta QSAR, definida en la institución académica de la ingeniería química, se mostró la necesidad de considerar para su análisis documentos de diversa índole: artículos científicos y de divulgación, libros académicos, manuales y documentos guía que fueron propuestos por el experto en QSAR, miembro del equipo de investigación. Esto permitió identificar que para un solo tipo de tarea se tiene una técnica muy amplia, asociada a un gran número de tecnologías y teorías, matemáticas y de ingeniería química. Asimismo, se identificó que los conceptos básicos de la modelización QSAR pertenecen sobre todo al primer y segundo nivel, de acuerdo con las rutas didácticas establecidas por Todeschini y Consonni (2009). De hecho, caracterizar relaciones entre saberes matemáticos y químicos a diferente nivel (de la técnica o de las componentes tecnológica y teórica) es posible al considerar la naturaleza mixta de la praxeología QSAR y al identificar la pregunta generatriz que parece originarla, Q_7 : «¿Cuál es el modelo validado más adecuado para predecir la [*propiedad*] del [*grupo de sustancias*] a partir de su estructura?»

De la misma manera, y considerando la unidad de análisis propuesta en Barquero et al. (2019), se realizó el análisis de las instituciones de enseñanza dedicadas a la formación de ingenieros químicos a través de los planes de estudio, lo que permitió considerar la viabilidad de generar una transposición didáctica de la praxeología mixta QSAR, ya que evidenció un gran número de saberes escolares matemáticos y químicos susceptibles de aparecer en el proceso de investigación de una Q_i transpuesta. Por ejemplo, el cálculo de descriptores, la obtención de modelos predictivos y técnicas de validación estadística, así como el tipo de *software* matemático y estadístico, que ya suele ser empleado en estas instituciones.

Con base en estos análisis, el diseño del REI-QSAR permite proponer cuestiones generatrices transpuestas de Q_i para distintos contextos en la química según las necesidades de formación y las condiciones de cada institución educativa. El diseño de la cuestión generatriz y de los nueve apartados pretenden ser una herramienta para que el profesor, que no pertenece a la investigación y no es experto en QSAR, implemente esta propuesta didáctica de modelización matemática en el aula a través de la comprensión de las relaciones estructura-actividad. El futuro ingeniero, para dar respuesta a la cuestión generatriz, requiere el uso de representaciones gráficas de compuestos (representación simbólica), isomería y conectividad estructural entre átomos (representación micro), actividad y propiedades de sustancias (representación macro), además de elementos de álgebra lineal, expresiones algebraicas, regresión lineal simple y multivariable, desviación estándar, correlación entre variables, y -aleatorización y criterios de validación de modelos.

El análisis *a priori* resulta fundamental para garantizar la viabilidad del estudio de cada Q_i transpuesta en el aula, aquí ilustrado a partir de la cuestión general y teniendo como referente epistemológico la praxeología QSAR, fundamentada en el análisis de la ingeniería química e instituciones académicas. De la misma manera, se consideraron las condiciones y restricciones de instituciones de enseñanza, a partir principalmente del análisis de dos planes de estudio, mostrando las asignaturas, las relaciones entre ellas, así como los tópicos abordados, lo que permite reconocer ciertas condiciones y restricciones educativas, y, por tanto, la viabilidad del REI.

Ampliar el conocimiento de estas condiciones y restricciones, mediante el análisis de libros de texto, materiales didácticos y clases, entre otros, permitiría generar adaptaciones más específicas y adecuadas del REI, en relación con los contextos específicos de enseñanza. Es decir, establecer rutas óptimas para su implementación, teniendo como base el proceso de estudio aquí presentado, en el cual se elucida un repertorio de preguntas derivadas, *media* y medios, que establece un referente sobre su organización didáctica, que se supone puede ser de utilidad para los profesores. Esto constituye una respuesta a la segunda pregunta de investigación que condujo este trabajo, referida a la naturaleza del dispositivo didáctico requerida para permitir adaptaciones y su integración al aula por un profesor universitario, no especialista en QSAR. En contraparte, una limitación de esta investigación es que no cuenta con una validación experimental.

La implementación del REI-QSAR en un programa de formación de ingenieros químicos permitirá generar evidencia empírica de su funcionamiento y del grado de comprensión de las relaciones estructura-actividad, además de proporcionar una base para refinarlo. Finalmente, se considera que esta investigación contribuye con un marco general de diseño de los REI-QSAR, caso particular de la TDE, que visualiza a los profesores universitarios como actores protagónicos en el proceso de diseño de materiales de modelización matemática específicos, que pretenden formar a ingenieros químicos, cada vez más aptos para enfrentar y modificar la realidad del siglo XXI.

REFERENCIAS

- Amer, M. À., Luque-Corredera, C. y Bartolomé, E. (2022). Study and research path for learning general chemistry: analyzing the quality of drinking water. *Journal of Chemical Education*, 99(3), 1255-1265.
<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00971>
- Artigue, M. (2015). Perspectives on design research: the case of didactical engineering. En A. Bikner-Ahsbals, C. Knipping y N. Presmeg. (Eds.), *Approaches to qualitative research in mathematics education* (pp. 467-496). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-94-017-9181-6_17
- Barquero, B. y Bosch, M. (2015). Didactic engineering as a research methodology: from fundamental situations to study and research paths. En A. Watson y M. Ohtani (Eds.), *Task design in mathematics education, new ICMI study series* (pp. 249-272). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-09629-2_8
- Barquero, B., Bosch, M. y Gascón, J. (2011). Los recorridos de estudio e investigación y la modelización matemática en la enseñanza universitaria de las ciencias experimentales. *Enseñanza de las Ciencias*, 29(3), 339-352.
<https://doi.org/10.5565/rev/ec/v29n3.519>
- Barquero, B., Bosch, M. y Gascón, J. (2014). Incidencia del «aplicacionismo» en la integración de la modelización matemática en la enseñanza universitaria de las ciencias experimentales. *Enseñanza de las Ciencias*, 32(1), 83-100.
<https://doi.org/10.5565/rev/ensciencias.933>
- Barquero, B., Bosch, M. y Gascón, J. (2019). The unit of analysis in the formulation of research problems: The case of mathematical modelling at university level. *Research in Mathematics Education*, 21(3), 314-330.
<https://doi.org/10.1080/14794802.2019.1624602>
- Bartolomé, E., Florensa, I., Bosch, M. y Gascón, J. (2018). A «study and research path» enriching the learning of mechanical engineering. *European Journal of Engineering Education*, 44(3), 330-346.
<https://doi.org/10.1080/03043797.2018.1490699>
- Blum, W., Galbraith, P. L., Henn, H. W. y Niss, M. (Eds.) (2007). *Modelling and applications in mathematics education. The 14 ICMI study, new ICMI study series*. Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-0-387-29822-1>
- Bosch, M., Hausberger, T., Hochmuth, R., Kondratieva, M. y Winslow, C. (2021). External didactic transposition in undergraduate mathematics. *International Journal of Research in Undergraduate Mathematics Education*, 7, 140-162.
<https://doi.org/10.1007/s40753-020-00132-7>
- Chevallard, Y. (1999). L'analyse des pratiques enseignantes en théorie anthropologique du didactique. *Recherches en didactique des mathématiques*, 19(2), 221-266. <https://revue-rdm.com/1999/l-analyse-des-pratiques/>
- Chevallard, Y. (2004). Vers une didactique de la codisciplinarité. Notes de une épistémologie scolaire. http://yves.chevallard.free.fr/spip/spip/article.php3?id_article=45
- Chevallard, Y. (2015). Teaching mathematics in tomorrow's society: a case for an oncoming counter paradigm. En S. J. Cho (Ed.), *Proceedings of the 12th International Congress on Mathematical Education* (pp. 173-187). Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-3-319-12688-3>
- Chevallard, Y. (2019). Introducing the anthropological theory of the didactic: an attempt at a principled approach. *Hiroshima Journal of Mathematics Education*, 12, 71-114.

- Cooper, M., Corley, L. M. y Underwood, S. M. (2013). An investigation of college chemistry students' understanding of structure–property relationships. *Journal of Research in Science Teaching*, 50(6), 699-721.
<https://doi.org/10.1002/tea.21093>
- Cooper, M., Underwood, S. y Hilley, C. (2012). Development and validation of the implicit information from Lewis structures instrument (IILSI): do students connect structures with properties? *Chemistry Education Research and Practice*, 13, 195-200.
<https://doi.org/10.1039/C2RP00010E>
- Costa, V., Arlego, M. y Otero, R. (2015). Las dialécticas en un recorrido de estudio e investigación para la enseñanza del cálculo vectorial en la universidad. *Revista de Formación e Innovación Educativa Universitaria*, 8(3), 146-161.
- Dirección General de Educación Superior Tecnológica (2012). *Modelo educativo para el siglo XXI. Formación y desarrollo de competencias profesionales*. <http://www.dgest.gob.mx/director-general/modelo-educativo-para-el-siglo-xxi-formacion-y-desarrollo-de-competencias-profesionales-dp2>
- Duarte, M. H., Freitas, M. P. y Nunes, C. (2017). QSPR modeling is able to predict retention times of fatty acids using simple molecular descriptors. *International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships*, 2(1), 35-43.
<https://doi.org/10.4018/IJQSPR.2017010103>
- Elizalde, I. y Rosas, A. Miguel. (2016). *Modelación directa e inversa en la formación del ingeniero químico*. Lectorum.
- Erduran, S. y Duschl, R. A. (2004). Interdisciplinary characterizations of models and the nature of chemical knowledge in the classroom. *Studies in Science Education*, 40(1), 105-138.
<https://doi.org/10.1080/03057260408560204>
- Favre, E., Falk, V., Roizard, C. y Schaer, E. (2008). Trends in chemical engineering education: Process, product and sustainable chemical engineering challenges. *Education for Chemical Engineers*, 3, e22-e27.
<https://doi.org/10.1016/j.ece.2007.12.002>
- Florensa, I., Bosch, M., Gascón, J. y Winsløw, C. (2018). Study and research paths: a new tool for design and management of project based learning in engineering. *International Journal of Engineering Education*, 34(6), 1848-1862.
- Frejd, P. y Bergsten, C. (2016). Mathematical modelling as a professional task. *Educational Studies in Mathematics*, 91, 11-35.
<https://doi.org/10.1007/s10649-015-9654-7>
- Galindo, N. (2019). *Diseño de una unidad de aprendizaje sobre relaciones cuantitativas de estructura-actividad (QSAR) en la carrera de ingeniería química* [Tesis de maestría]. CICATA-IPN. https://www.cicata.ipn.mx/assets/files/cicata/ProME/docs/tesis/tesis_maestria/2019/galindo_2019.pdf
- García, F. J., Barquero, B., Florensa, I. y Bosch, M. (2019). Diseño de tareas en el marco de la teoría antropológica de lo didáctico. *Avances de Investigación en Educación Matemática*, 15, 75-94.
<https://doi.org/10.35763/aiem.v0i15.267>
- Gascón, J. y Nicolás, P. (2022). ATD on relationships between research and teaching. The case of a didactic problem concerning real numbers. En Y. Chevallard, B. Barquero, M. Bosch, I. Florensa, J. Gascón, P. Nicolás y N. Ruiz-Munzón (Eds.), *Advances in the Anthropological Theory of the Didactic* (pp. 125-138). Birkhäuser.
https://doi.org/10.1007/978-3-030-76791-4_2
- Gilbert, J. K. y Treagust, D. (eds). (2009). *Multiple representations in chemical education. Models and modelling in science education* (vol. 4). Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8872-8>

- Golbraikh, A., Wang, X., Zhu, H. y Tropsha, A. (2012). Predictive QSAR modeling: methods and applications in drug discovery and chemical risk assessment. En J. Leszczynski (Ed.), *Handbook of computational chemistry* (pp. 1311-1342). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-94-007-0711-5_37
- Hestenes, D. (2010). Modeling theory for math and science education. En R. Lesh, P. Galbraith, C. Haines y A. Hurford (Eds.), *Modeling students' mathematical modeling competencies* (pp. 13-41). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0561-1_3
- Lesh, R., Galbraith, P., Haines, C. y Hurford, A. (Eds.) (2010). *Modelling students' mathematical modelling competencies ICTMA 13*. Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0561-1>
- Macias, M. y Romo, A. (2014). Metodología para el diseño de actividades didácticas basadas en modelación matemática. *Acta Latinoamericana de Matemática Educativa*, 27, 461-469.
- Organisation for Economic Co-operation and Development (2007, marzo). *Guidance document on the validation of (Quantitative) Structure-Activity Relationships [(Q)SAR] models*. <https://www.oecd-ilibrary.org/docserver/9789264085442-en.pdf?expires=1679930840&id=id&accname=guest&checksum=E9E75CAAF5AD3D2C5828C1EF8506FEDB>
- Pollak, H. (2007). Mathematical modelling – a conversation with Henry Pollak. En W. Blum, L. P. Galbraith, W. H. Henn y M. Niss (Eds.), *Modelling and applications in mathematics education. The 14 ICMI study* (pp. 109-120). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-0-387-29822-1_9
- Raies, A. y Bajic, V. B. (2016). In silico toxicology: computational methods for the prediction of chemical toxicity. *Computational Molecular Science*, 6, 147-172.
<https://doi.org/10.1002/wcms.1240>
- Reinhard, M. y Drefahl, A. (1998). *Handbook for estimating physicochemical properties of organic compounds*. John Wiley & Sons.
- Romo, A. y Artigue, M. (2023). Challenges for research on tertiary mathematics education for non-specialists: Where are we and where are we to go? En R. Biehler, M. Liebendörfer, G. Gueudet, C. Rasmussen y C. Winsløw (Eds.), *Practice-oriented research in tertiary mathematics education* (pp. 535-557). Springer.
https://doi.org/10.1007/978-3-031-14175-1_26
- Roy, K., Kar, S. y Das R. N. (2015). *A primer on QSAR/QSPR modelling*. Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-3-319-17281-1>
- Siero González, L. R., Echavarría Cepeda, L. A., Romo Vázquez, A. y Navarro Torres, J. (2022). Design of a rehabilitation device for thrombosis: a mathematical modelling activity in the training of engineers. *Avances de investigación en educación matemática*, 21, 107-134.
<https://doi.org/10.35763/aiem21.4258>
- Talanquer, V. (2018). Progressions in reasoning about structure-property relationships. *Chemistry Education Research and Practice*, 19(4), 998-1009.
<https://doi.org/10.1039/C7RP00187H>
- Tecnológico Nacional de México (2016). *Reticula ingeniería química* [página web].
<https://www.tecnm.mx/pdf/reticula/Reticula%20Ingenieria%20Quimica.pdf>
- Todeschini, R. y Consonni, V. (2009). *Molecular descriptors for chemoinformatics volume II: appendices, references*. Wiley-Vch Verlag.
<https://doi.org/10.1002/9783527628766>

Universidad Juárez del Estado de Durango (2023). *Ingeniero químico en alimentos. Sede Gómez Palacio. Plan de estudios* [página web]. <https://www.ujed.mx/oferta-educativa/ingeniero-quimico-en-alimentos-gp/plan-de-estudios>

Vázquez, R., Romo, A., Romo-Vázquez, R. y Trigueros, M. (2016). La separación ciega de fuentes: un puente entre el álgebra lineal y el análisis de señales. *Educación Matemática*, 28(2), 31-57. <https://doi.org/10.24844/EM2802.02>

Design and Viability of Resources for Teaching QSAR Modeling in Chemical Engineering

Nahúm Galindo Vargas

Laboratorio de Biomacromoléculas, Instituto Politécnico Nacional, Santa Cruz Xoxocotlán, Oaxaca, México.

nahum.galindo@gmail.com

Avenilde Romo Vázquez

Departamento de Matemática Educativa, Cinvestav, México.

avenilderomo@cinvestav.mx

Joaquín Barroso Flores

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

jbarroso@unam.mx

In university education, teaching proposals for students to develop mathematical models close to real contexts, particularly the workplace, are scarce, even though modeling has been considered of fundamental importance in mathematics education in several forums. On the other hand, chemistry teaching recognizes that macro, micro and symbolic representations, as well as the relationships between them, should be improved. These representations refer to the properties, structure and representations of compounds and their interrelationships. In addition, it has been considered that structure-activity relationships of biomolecules should be included in the training of chemical engineers. Efforts have been made to include structure-activity relationships in teaching chemistry, but the task of integrating the modeling of these relationships into the curriculum is still pending. With the objective of helping to fill this gap, an investigation framed on both the anthropological theory of the didactic and didactic engineering was developed to design didactic resources to integrate the modeling of these relationships into chemical engineering education. The quantitative structure-activity relationship (QSAR) modeling praxeology used in the *in silico* investigation of new compounds was analyzed. It was identified that the task of QSAR praxeology originates from a general question that attempts to find the most suitable validated model to predict the activity/property/toxicity of a certain group of substances. A didactic transposition of the QSAR modeling task was performed by designing a framework to generate didactic devices: Study and Research Paths (SRP-QSAR). Two university curricula were studied. In these, the use of continuous data, linear regression techniques, structure, properties, and representation of compounds were identified. Regarding the institutions dedicated to research on chemical engineering, didactic routes on QSAR were distinguished, as well as a didactic classification of knowledge by topic and level of complexity that allow its study at the undergraduate or graduate level. Based on these, the viability of implementing the SRP-QSARs in training courses for chemical engineers was evidenced. It is proposed that the designed resource will be useful for teachers who are not experts in QSAR modeling to implement it in the classroom through the proposed media and steps. The modeling task that gives rise to the SRP constitutes an innovative didactic way for students to build, use and interpret mathematical models based on structure-activity relationships, i. e., macro, micro and symbolic representations, which are fundamental in chemistry education. Classroom experimentation is still needed to validate the functioning of the SRP-QSAR and to demonstrate the degree of understanding of structure-activity relationships among students.

