

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	1 de 7

FACULTAD: CIENCIAS BÁSICAS

PROGRAMA: MAESTRÍA EN QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

CURSO : TEORÍA DEL ORDEN

CÓDIGO:

560809 / 560812

ÁREA:

PROFUNDIZACIÓN

REQUISITOS:

CORREQUISITO:

CRÉDITOS:

4

TIPO DE CURSO:

Teórico-práctico

JUSTIFICACIÓN

Una de las fortalezas investigativas de la química teórica de la Universidad de Pamplona es la aplicación de la teoría del orden a la resolución de problemas químicos. Esta teoría y su uso resultan convenientes en química teórica debido al bajo costo computacional de sus procedimientos y al alcance interdisciplinario de sus metodologías. Los tres aspectos primordiales del curso son el del escalafonamiento, tema recurrente en cualquier actividad científica al tomar decisiones; el de la predicción de propiedades de sustancias químicas, que se encuentra en el núcleo mismo de la química; y el de la derivación de conocimiento a partir de la extracción de implicaciones de un tema de estudio, tema recurrente en todo proyecto de investigación.

OBJETIVO GENERAL

Hacer que el estudiante conozca los fundamentos de la teoría del orden y sus aplicaciones en el escalafonamiento, la predicción de sustancias y la derivación de conocimiento.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Lograr la apropiación de los fundamentos de la teoría del orden.
- Mostrar los fundamentos de la aplicación de la teoría del orden al escalafonamiento.
- Mostrar los fundamentos de la teoría del orden aplicada a la predicción de propiedades de sustancias.

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	2 de 7

- Mostrar los fundamentos del Análisis Formal de Conceptos, como metodología para derivar conocimiento.
- Incentivar el uso de la teoría del orden en las diferentes ramas del conocimiento.

COMPETENCIAS

<p><i>Interpretativas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Asimilación de los fundamentos matemáticos de la teoría del orden. • Habilidad para comprender textos matemáticos. • Habilidad para comprender: diagramas de Hasse, gráficas, matrices y tablas. <p><i>Argumentativas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Explicación de las diferentes propiedades matemáticas que tiene una relación de orden. • Presentación de ejemplos y contraejemplos en la comprobación de hipótesis. • Habilidad para relacionar conceptos químicos y de otras disciplinas con conceptos de la teoría del orden. • Generación de conclusiones en el contexto estudiado. <p><i>Propositivas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Habilidad para detectar preguntas científicas susceptibles de ser analizadas por aplicación de la teoría del orden. • Habilidad para sugerir cambios y mejoras en los procedimientos y algoritmos de la teoría del orden.
--

UNIDAD 1: Escalafonamiento.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Fundamentos de la teoría del orden	5	15
Representación matricial	5	15
Técnica de los diagramas de Hasse	11	15

UNIDAD 2: Predicción de propiedades.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Ordenamiento de sustancias	8	24
Métodos predictivos	12	21

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	3 de 7

UNIDAD 3: Análisis Formal de Conceptos.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Conceptos y su ordenamiento	8	24
Implicaciones y asociaciones	12	21

METODOLOGÍA

Se creará una página en internet donde el docente depositará información relevante para cada tema. Este sitio en internet estará vinculado a la página del laboratorio de química teórica de la Universidad de Pamplona. Algunas de las fuentes bibliográficas que se emplearán están en la biblioteca de la Universidad, el material adicional que se requiera se depositará con anterioridad a la clase en la página en cuestión.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

El estudiante presentará un trabajo escrito de cada unidad que equivaldrá al 33,33% de la nota final.

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Brüggemann, R.; Voigt, K.; Restrepo, G.; Simon, U. The concept of stability fields and hot spots in ranking of environmental chemicals. *Environ. Modell. Softw.* 2008, 23, 1000-1012.

Restrepo, G.; Brüggemann, R.; Klein, D. Partially ordered sets: ranking and prediction of substances' properties. *Curr. Comput-Aid Drug.* 2011, 7, 133-145.

Ganter, B.; Wille, R. *Formal concept analysis: Mathematical foundations*; Springer-Verlag: Berlin, 1998.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Restrepo, G.; Weckert, M.; Brüggemann, R.; Gerstmann, S.; Frank, H. Ranking of refrigerants, *Environ. Sci. Technol.* 2008, 42, 2925-2930.

Restrepo, G.; Brüggemann, R.; Weckert, M.; Gerstmann, S.; Frank, H. Ranking patterns, an application to refrigerants. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* 2008, 59, 555-584.

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	4 de 7

Restrepo, G.; Brüggemann, R. Dominance and separability in posets, their application to isoelectronic species with equal total nuclear charge. J. Math. Chem. 2008, 44, 577-602.

Restrepo, G.; Klein, D. J. Predicting densities of nitrocubanes using partial orders. J. Math. Chem. 2011, 49, 1311-1321.

Restrepo, G.; Basak, S. C.; Mills, D. Comparison of SAR and QSAR approaches to mutagenicity of aromatic and heteroaromatic amines. Curr. Comput-Aid Drug. 2011, 7, 109-121.

DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

<http://docs.pyhasse.org/>

http://www.google.com.co/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&cad=rja&ved=0CBoQFjAA&url=http%3A%2F%2Fconexp.sourceforge.net%2F&ei=KIWAUJ-yB4rg8AS384HICg&usg=AFQjCNH4janObvgC87e-rpjxwpo_8XI3xg

UNIDAD N 1

Escalafonamiento

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Fundamentos de la teoría del orden	Motivación con ejemplos cotidianos sobre el orden. Propiedades de la relación de orden. Conjuntos parcialmente ordenados.	5	Lectura	15	0	Discusión en clase



Contenidos Programáticos

Código

FGA-23 v.01

Página

5 de 7

	Datos sobre objetos escalafonables					
Representación matricial	Matrices donde las filas corresponden a los objetos a escalafonar y las columnas a sus atributos. Exploración de dichas matrices.	5	Ejercicios de representación matricial de problemas de escalafonamiento.	15	0	Discusión en clase
Técnica de los diagramas de Hasse	Descripción de la técnica, sus ventajas y desventajas. Introducción al software WHasse y PyHasse	5	Ejercicios de la técnica y uso del software	15	6	Realización de un trabajo escrito sobre escalafonamiento, el trabajo debe incluir un caso de aplicación. El uso del software será evaluado en clase.

UNIDAD N 2

Predicción de propiedades

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA
------------	----------------------------------	------------------------	----------------------------------	-----------------------------	---------------------------------	---------------------------------------

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	6 de 7

	PROFESOR		ESTUDIANTE		INDEPENDIENTE	LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Ordenamiento de sustancias	Introducción a la simetría estructural química. Ordenamiento de estructuras moleculares	8	Ejercicios de ordenamiento de sustancias	24	0	Discusión en clase
Métodos predictivos	Técnica de los promedios, de la expansión de los agrupamientos y del esplinoide	7	Ejercicios y uso de software	21	5	Realización de un trabajo escrito sobre predicción de sustancias, el trabajo debe incluir un caso de aplicación. El uso del software será evaluado en clase.

UNIDAD N 3

Análisis formal de conceptos

COMPETENCIAS A DESARROLLAR: Interpretativas, argumentativas y propositivas

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGIAS DE EVALUACION QUE INCLUYA LA EVALUACION DEL TRABAJO INDEPENDIENTE

	Contenidos Programáticos	Código	FGA-23 v.01
		Página	7 de 7

Conceptos y su ordenamiento	Definición de concepto y caracterización matemática. Ordenamiento de conceptos por inclusión	8	Ejercicios de generación de conceptos y su ordenamiento	24	0	Discusión en clase
Implicaciones y asociaciones	Matemática de las reglas de implicación y de las reglas de asociación. Soporte y confianza de las reglas. Uso de software	7	Ejercicios y uso de software	21	5	Realización de un trabajo escrito sobre generación de reglas, el trabajo debe incluir un caso de aplicación. El uso del software será evaluado en clase.